

ISSN 2413-452X

ПАЁМИ
ДОНИШГОҶИ МИЛЛИИ ТОҶИКИСТОН
Баҳши илмҳои табиӣ
2024. №2.

ВЕСТНИК
ТАДЖИКСКОГО НАЦИОНАЛЬНОГО УНИВЕРСИТЕТА
Серия естественных наук
2024. № 2.

BULLETIN
OF THE TAJIK NATIONAL UNIVERSITY
Series of natural sciences
2024. No.2.



МАРКАЗИ
ТАБЪУ НАШР, БАҶҒАРДОН ВА ТАРҶУМА
ДУШАНБЕ – 2024

ПАЁМИ ДОНИШГОҶИ МИЛЛИИ ТОҶИКИСТОН
БАҲШИ ИЛМҶОИ ТАБИЙ

Муассиси маҷалла:

Донишгоҳи миллии Тоҷикистон
Маҷалла соли 2012 таъсис дода шудааст.
Дар як сол 4 шумора нашр мегардад.

САРМУҶАРИИР:

Солиҳзода Давлат
Куват

Доктори илмҳои физикаю математика, профессор (Тоҷикистон)

МУОВИНИ САРМУҶАРИИР:

Сафармамадов
Сафармамад
Муборакшоевич

Доктори илмҳои химия, профессор (Тоҷикистон)

ҲАЙАТИ ТАҲРИРИЯ

Математика

Абдукаримов
Маҳмадсалим
Файзуллоевич
Комилиён
Файзали
Саъдулло
Раҷабов Нусрат
Раҷабова
Лутфия
Нусратовна
Солдатов
Александр
Павлович
Шабозов
Мирғанд
Шабозович

доктори илмҳои физикаю математика,
профессор (Тоҷикистон)

доктори илмҳои физикаю математика,
профессор (Тоҷикистон)

доктори илмҳои физикаю математика,
профессор, академик (Тоҷикистон)
доктори илмҳои физикаю математика,
профессор (Тоҷикистон)

доктори илмҳои физикаю математика,
(Россия)

доктори илмҳои физикаю математика,
академик (Тоҷикистон)

Физика

Двинин Сергей
Александрвич

доктори илмҳои физикаю математика,
дотсент (Россия)

Комилов Қосим

доктори илмҳои физикаю математика,
профессор, академик (Тоҷикистон)

Маҳсудов Барот
Исломович
Норматов Ином
Шерович
Чон-Генг Ма

доктори илмҳои физикаю математика,
профессор (Тоҷикистон)

доктори илмҳои физикаю математика,
профессор, узви вобаста (Тоҷикистон)

доктори илмҳои физикаю математика
(ҚМҚ)

Химия

Джон Ноблемен

доктори илмҳои химия, профессор
(Америка)

Золотский Семен
Соломонович
Конкета

доктори илмҳои химия, профессор
(Россия)

доктори илмҳои химия (Италия)

Гианкола
Раҷабов
Сирочиддин
Самихов
Шонаврӯз

доктори илмҳои химия, профессор
(Тоҷикистон)

доктори илмҳои химия, профессор
(Тоҷикистон)

Усачева Татьяна
Рудольфовна
Чураев Тухтасун
Чураевич

доктори илмҳои химия, профессор
(Россия)

доктори илмҳои химия, профессор
(Тоҷикистон)

Маҷалла ба Феҳристи нашрияҳои илми
тақризиавандаи Комиссияи олии аттестатсионии
Федератсияи Русия аз 03.06.2016, №1922 ворид
гардидааст.

Маҷалла мақолаҳои илми соҳаҳои зерини илмро
барои ҷоп қабул менамояд: **Математика; Физика;
Илмҳои кимиё.**

Маҷалла дар Индекси иқтибосҳои илми Русия
(РИИЦ) ворид карда шудааст ва пайваста дар системаи
индексатсионии мазкур дар бораи шумораҳои ҷошуда
маълумот ворид менамояд.

Маҷалла бо забонҳои тоҷикӣ, русӣ ва англисӣ нашр
мешавад.

Маҷалла сомонии расмӣ худро дорад, ки дар он
матни муқаммалӣ маводи ҷопӣ ҷойгир карда шудааст
(www.vestnik-tnu.com).

Паёми Донишгоҳи миллии Тоҷикистон.

Баҳши илмҳои табиӣ

– 2024. – №2.

ISSN 2413-452X

Маҷалла дар Вазорати фарҳанги Ҷумҳурии Тоҷикистон
№ 183/МҚ-97 аз 19.02.2021 ба қайд гирифта шудааст.

Маҷалла дар Маркази таъбу нашр, баргардон ва
тарҷумани ДМТ барои нашр таҳия мегардад. Нишонии
Марказ:

734025, Ҷумҳурии Тоҷикистон,
ш. Душанбе, хиёбони Рӯдакӣ, 17.

Сомонаи маҷалла: www.vestnik-tnu.com

E-mail: vestnik-tnu@mail.ru

Телефон: (+992 37) 227-74-41

© ДМТ, 2024

ВЕСТНИК ТАДЖИКСКОГО НАЦИОНАЛЬНОГО УНИВЕРСИТЕТА

СЕРИЯ ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК

Учредитель журнала:

Таджикский национальный университет
Журнал основан в 2012 г. Выходит 4 раз в год.

ГЛАВНЫЙ РЕДАКТОР ЖУРНАЛА:

Солихзода Давлат Куватов Доктор физико-математических наук, профессор (Таджикистан)

ЗАМЕСТИТЕЛЬ ГЛАВНОГО РЕДАКТОРА:

Сафармамадов Сафармамад Муборакшоевич Доктор химических наук, профессор (Таджикистан)

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ:

		Математика	
Абдукаримов Махмадсалим Файзуллоевич		доктор физико-математических наук (Таджикистан)	Журнал включен в Перечень рецензируемых научных изданий, рекомендованных ВАК Минобрнауки Российской Федерации от 03.06.2016, №1922. Журнал принимает научные статьи по следующим отраслям науки: Математика; Физика; Химические науки. Журнал включен в базу данных Российского индекса научного цитирования (РИНЦ), регулярно предоставляет в РИНЦ информацию в виде метаданных. Журнал издается на таджикском, русском и английском языках. Журнал имеет официальный сайт (www.vestnik-tnu.com), в котором размещаются полнотекстовые версии опубликованных материалов.
Комилиён Файзали Саъдулло Рачабов Нусрат		доктор физико-математических наук (Таджикистан) доктор физико-математических наук, профессор, академик (Таджикистан)	
Рачабова Лутфия Нусратовна		доктор физико-математических наук (Таджикистан)	
Солдатов Александр Павлович		доктор физико-математических наук (Россия)	
Шабозов Мирганд Шабозович		доктор физико-математических наук, профессор, академик (Таджикистан)	
		Физика	
Двинин Александрович	Сергей	доктор физико-математических наук, доцент (Россия)	
Комилов Қосим Махсудов Исломович	Барот	доктор физико-математических наук, профессор, академик (Таджикистан)	
Норматов Ином Шерович		доктор физико-математических наук, профессор	
Чон-Генг Ма		доктор химических наук, член-корреспондент (Таджикистан) доктор физико-математических наук (КНР)	
		Химия	
Джон Ноблемен		доктор химических наук, профессор (Америка)	
Золотский Семен Соломонович		доктор химических наук (Россия)	
Конкета Гианкола Самихов Шонавруз Раджабов Сироджиддин		доктор химических наук (Италия) доктор химических наук, профессор (Таджикистан)	
Усачева Татьяна Рудольфовна		доктор химических наук, профессор (Таджикистан)	
Джураев Тухтасун Джураевич		доктор химических наук (Россия) доктор химических наук, профессор (Таджикистан)	

Вестник Таджикского национального университета.
Серия естественных наук.
– 2024. – №2.
ISSN 2413-452X
Журнал зарегистрирован в Министерстве культуры Республики Таджикистан. Свидетельство №183/ЖР-97, от 19.02.2021
Журнал подготавливается к изданию в Издательском центре ТНУ.
Адрес Издательского центра:
734025, Республика Таджикистан, г. Душанбе, проспект Рудаки, 17.
Сайт журнала: www.vestnik-tnu.com
E-mail: vestnik-tnu@mail.ru
Телефон: (+992 37) 227-74-41

© ТНУ, 2024

BULLETIN OF THE TAJIK NATIONAL UNIVERSITY

Series of natural sciences

Founder of the journal:

TAJIK NATIONAL UNIVERSITY

The journal was established in 2012. Issued 4 times a year.

CHIEF EDITOR:

**Solihzoda
Davlat Kuvat**

Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor (Tajikistan)

DEPUTY CHIEF EDITOR:

**Safarmamadov Safarmamad
Muborakshoevich**

Doctor of Chemical Sciences, Professor (Tajikistan)

**Ismonov Karomatullo
Badridinovich**

Candidate of philology sciences, associate professor, director of the Publishing Center of the Tajik National University

MEMBERS OF THE EDITORIAL BOARD:

Mathematics

**Abdukarimov Mahmadsalim
Faizulloevich
Komiliyen
Faizali Sadulla
Rajabov
Nusrat**

Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor (Tajikistan)
Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor (Tajikistan)
Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Academician (Tajikistan)

**Rajabova
Lutfiy Rajabovna
Soldatov Alexander
Pavlovich
Shabozov Mirgand
Shabozovich**

Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor (Tajikistan)
Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor (Russia)
Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Academician (Tajikistan)

Physics

**Dvinin Sergei
Aleksandrovich
Komilov Kosim**

Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor (Russia)
Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor (Tajikistan)

**Makhsudov
Barot Islomovich
Normatov Inom
Sherovich
Chong-Geng Ma**

Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor (Tajikistan)
Doctor of Chemical Sciences, Professor, Academician (Tajikistan)
Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor (China)

Chemistry

**John Nobleman
Zolotsky Semyon
Solomonovich
Konketa Giankola**

Doctor of Chemical Sciences, Professor (America)
Doctor of Chemical Sciences, Professor (Russia)
Doctor of Chemical Sciences, Professor (Italy)

Samihov Shonavruz

Doctor of Chemical Sciences, Professor (Tajikistan)

Rajabov Sirojiddin

Doctor of Chemical Sciences, Professor (Tajikistan)

**Usacheva Tatyana
Rudolfovna
Juraev**

Doctor of Chemical Sciences, Professor (Russia)

Tukhtasun Juraevich

Doctor of Chemical Sciences, Professor (Tajikistan)

The journal is included in the List of peer-reviewed scientific journals of the Higher Attestation Commission of the Ministry of Education and Science of the Russian Federation from 03.06.2016, No. 1922.

*The journal accepts scientific articles on the following scientific specialties: **01.01.00 - Mathematics; 01.04.00 - Physics; 02.00.00 - Chemical sciences.***

The journal is included in the database of the Russian Scientific Citation Index (RSCI).

The journal is printed in Tajik, Russian and English languages.

Full-text versions of published materials are posted on the official website of the journal (www.vestnik-tnu.com).

**Bulletin of the Tajik National University.
Series of natural sciences**

– 2024. – №2.

ISSN 2413-452X

The journal is registered in the Ministry of Culture of the Republic of Tajikistan, No.183\М\Б-97, 19.02.2021.

The journal is being prepared for publication in the Publishing Center of TNU.

Address of the Publishing Center:
17, Rudaki Avenue, Dushanbe, 734025,
Republic of Tajikistan,

Web site of the journal: www.vestnik-tnu.com

E-mail: vestnik-tnu@mail.ru

Phone: (+992 37) 227-74-41

© TNU, 2024

УДК 517.977.5, 519.85

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ ЛИНЕЙНОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ОПТИМИЗАЦИИ РЕКЛАМНОГО БЮДЖЕТА БАНКА

Одинаев Р.Н.¹, Афзалшохи С.²

¹Таджикский национальный университет

²Бохтарский государственный университет имени Носири Хусрава

В условиях конкурентной банковской сферы эффективное использование рекламных ресурсов играет ключевую роль для достижения финансовых показателей. Оптимизация рекламного бюджета является одним из методов повышения эффективности инвестиций в рекламу. В данной работе рассмотрена оптимизация рекламного бюджета банка. С помощью математической модели и методов оптимизации будет осуществлен выбор наиболее эффективных вариантов распределения рекламного бюджета. Результаты исследования могут быть полезны для банковской сферы в целом и для отдельных банков в частности, так как позволяют повысить эффективность использования рекламных ресурсов и увеличить конкурентоспособность банка на рынке. В работе будут рассмотрены как теоретические аспекты использования задач линейного программирования, так и практические примеры их применения на основе реальных данных банковской сферы.

Рекламный бюджет является одним из ключевых элементов маркетинговой стратегии любого бизнеса, включая банковскую сферу. Оптимизация распределения рекламного бюджета позволяет увеличить приток новых клиентов и повысить прибыль, при этом не превышая заданных финансовых ограничений. Использование методов линейного программирования становится необходимым для решения задач оптимизации рекламного бюджета банка, так как это позволяет формализовать задачу и получить точный ответ на вопрос, как именно следует распределить бюджет, чтобы максимизировать прибыль [4-5]. В последние годы все большее внимание уделяется задаче оптимизации рекламного бюджета банков. Сегодня многие исследователи работают над тем, чтобы предложить эффективные методы решения этой задачи [6-8]. Некоторые из таких исследований более подробно рассмотрены ниже.

Одним из крупнейших исследований в данной области была работа [1]. Авторы описывают различные подходы к оптимизации рекламного бюджета банка и рассматривают их преимущества и недостатки. В результате исследования было выявлено, что наиболее эффективными методами являются методы линейного программирования и методы, основанные на алгоритмах машинного обучения. В работе проведен анализ использования линейного программирования для оптимизации рекламного бюджета банка [1]. В статье [2] приведена методика определения доли затрат на банковский маркетинг в выручке с применением корректирующих коэффициентов в зависимости от цели маркетинга и отрасли. В статье [3] рассматривается дискретная модель оптимизации рекламной политики фирмы. Задача решается методом динамического программирования. Полученное решение позволяет оптимизировать прибыль компании.

Методы расчёта рекламного бюджета. Для расчета рекламного бюджета можно применить следующие методы:

1. Метод процента от оборота – рассчитывается на основе процента от общей прибыли банка, который будет выделен на рекламу. Расчет проводится по формуле: $B_{\text{рекл}} = B * П$, где $B_{\text{рекл}}$ - бюджет; B - общая выручка; $П$ - процент.

2. Метод максимизации прибыли – основан на расчете объема продаж, который необходим для окупаемости затрат на рекламу. Рассчитывается на основе формулы: $S = \frac{Z+I}{F}$, где S - объем продаж; Z - затраты на рекламу; I - постоянные

издержки; F -прибыль на единицу продукции. С учетом объема продаж можно рассчитать бюджет на рекламу.

3. Метод статистического анализа – основан на анализе исторических данных компании и ее конкурентов. Рассчитывается на основе формулы: $V = \frac{V_k * \alpha}{L_k}$, где V -бюджет на рекламу; V_k -расходы конкурентов на рекламу; L_k -доля конкурентов на рынке; α - доля банка на рынке.

Таким образом, для нахождения оптимального решения критерия качества услуг банка, используя рекламу, необходимо использовать приведенные методы, определяя цель, переменные, ограничения, задачу оптимизации и решение задачи.

Согласно вышеприведенным исследованиям [1-5] каждый банк использует наиболее привычный метод. Основная цель для расчета рекламного бюджета банка заключается не только в том, чтобы предусмотреть затраты на рекламу, но и на её оптимизацию. Оптимизация достигается путём максимизации прибыли, которая поступает от рекламы.

Исходя из выше изложенного, оптимизационную модель можно сформулировать как задачу линейного программирования[9-12].

Математическая модель решения оптимизационной задачи рекламного бюджета банка может быть представлена следующим образом:

Дано: исходные данные о бюджете, рекламных каналах и их эффективности.

Искомые параметры: оптимальное распределение бюджета между рекламными каналами, максимизирующее число клиентов банка.

Ограничения:

- Бюджет на рекламу не должен превышать максимального значения.
- Общее число клиентов банка, привлеченных рекламой, не должно превышать максимально допустимое значение.
- Для каждого рекламного канала есть ограничение на доступный бюджет.

Математическая модель задачи представляется в виде:

$$\begin{aligned} F &= \sum_{i=1}^m c_i x_i \rightarrow \max \\ \sum_{i=1}^m a_i x_i &\leq b \\ d_i &\leq x_i \leq D_i \\ x_i &\geq 0 \\ d_i, x_i, D_i &\text{-целые,} \\ i &= 1, 2, \dots, m. \end{aligned}$$

Где F - прибыль банка от проведения всей рекламной кампании;

- c_i - прибыль от рекламы, привлеченных через i -ый канал;
- x_i - количество денег, выделенных на рекламный канал i ;
- a_i - количество клиентов, привлеченных через i -ый канал;
- D_i - максимальный бюджет, выделенный на рекламу;
- b - объём бюджета;
- d_i - доступный бюджет для i -го канала.

Таким образом, решая данную оптимизационную задачу, необходимо определить оптимальное распределение бюджета между рекламными каналами, максимизирующее число клиентов банка при соблюдении всех ограничений.

Для построения математической модели оптимизационной задачи рекламного бюджета банка на конкретном примере необходимо сформулировать цель и ограничения задачи, а также определить переменные и параметры.

Рассмотрим пример оптимизации рекламного бюджета с использованием приведенных выше моделей. Все финансовые показатели будем считать, в известном

смысле, условными. Рассчитаем оптимальное соотношение в использовании различных видов рекламы в деятельности банка.

Для примера оптимизации рекламного бюджета банка рассмотрим следующую ситуацию. Предположим, что банк хочет использовать рекламу в трех различных каналах: телевидение, радио и интернет-реклама. У него есть бюджет в размере 4 тыс. сомонов на месяц для размещения этих объявлений. Предположим, что стоимость каждого канала рекламы равна следующим значениям:

- Телевидение: 100 сомонов за рекламный блок
- Радио: 70 сомонов за рекламную серию
- Интернет-реклама: 40 сомонов за месяц

Цель данной задачи — максимизация общего эффекта рекламы от вложенных средств.

Пусть x_1, x_2 и x_3 — количество денежных средств, расходуемых на телевидение, радио и интернет-рекламу соответственно. Тогда задача оптимизации может быть записана в следующем виде:

Требуется найти максимум функции

$$F(X) = 130x_1 + 100x_2 + 80x_3 \rightarrow \max$$

при ограничениях:

$$100x_1 + 70x_2 + 40x_3 \leq 4000$$

$$x_1 \leq 16$$

$$x_2 \leq 20$$

$$x_3 \leq 25$$

$$x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, x_3 \geq 0$$

В качестве базисных переменных можно выбрать x_4, x_5, x_6, x_7 .

$$100x_1 + 70x_2 + 40x_3 + x_4 = 4000$$

$$x_1 + x_5 = 16$$

$$x_2 + x_6 = 20$$

$$x_3 + x_7 = 25$$

Решим задачу линейного программирования симплексным методом, с использованием симплексной таблицы, относительно базисных переменных: x_4, x_5, x_6, x_7

Полагая, что свободные переменные равны 0, получим первый опорный план:

$$X_0 = (0, 0, 0, 4000, 16, 20, 25)$$

Таблица 1.
Table 1.

№	Базис	Элем. св. столбца	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7
1	x_4	4000	100	70	40	1	0	0	0
2	x_5	16	1	0	0	0	1	0	0
3	x_6	20	0	1	0	0	0	1	0
4	x_7	25	0	0	1	0	0	0	1
5	F	0	-130	-100	-80	0	0	0	0

Переходим к основному алгоритму симплекс-метода.

Итерация №1.

В качестве ведущего выберем столбец, соответствующий переменной x_1 , так как это наибольший коэффициент по модулю.

Определим ведущую строку по строкам как частное от деления: b_i/a_{i1} и из них выберем наименьшее:

$$\min(4000 : 100, 16 : 1) = 16$$

Следовательно, 2-ая строка является ведущей.

Разрешающий элемент равен 1 и находится на пересечении ведущего столбца и ведущей строки.

Таблица 2.
Table 2.

↓

№	Базис	Элем. св. столбца	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7
1	x_4	4000	100	70	40	1	0	0	0
→ 2	x_5	16	1	0	0	0	1	0	0
3	x_6	20	0	1	0	0	0	1	0
4	x_7	25	0	0	1	0	0	0	1
5	F	0	-130	-100	-80	0	0	0	0

Формируем следующую часть симплексной таблицы. Вместо переменной x_5 в итерацию 1 войдет переменная x_1 .

Получаем новую симплекс-таблицу:

Таблица 3.
Table 3.

№	Базис	Элем. св. столбца	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7
1	x_4	2400	0	70	40	1	-100	0	0
2	x_1	16	1	0	0	0	1	0	0
3	x_6	20	0	1	0	0	0	1	0
4	x_7	25	0	0	1	0	0	0	1
5	F	2080	0	-100	-80	0	130	0	0

Текущий опорный план не оптимален, так как в индексной строке находятся отрицательные коэффициенты.

Итерация №2.

В качестве ведущего столбца выберем, соответствующий переменной x_2 , так как это наибольший коэффициент по модулю.

Определим ведущую строку по строкам как частное от деления: b_i/a_{i2} и из них выберем наименьшее:

$$\min(2400 : 70, 20 : 1) = 20$$

Следовательно, 3-ая строка является ведущей.

Разрешающий элемент равен 1 и находится на пересечении ведущего столбца и ведущей строки.

Таблица 4.
Table 4.

№	Базис	Элем. св. столбца	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7
1	x_4	2400	0	70	40	1	-100	0	0
2	x_1	16	1	0	0	0	1	0	0
3	x_6	20	0	1	0	0	0	1	0
4	x_7	25	0	0	1	0	0	0	1
5	F	2080	0	-100	-80	0	130	0	0

Формируем следующую часть симплексной таблицы. Вместо переменной x_6 во второй итерации войдет переменная x_2 .

Получаем новую симплекс-таблицу:

Таблица 5.

Table 5.

№	Базис	Элем. св. столбца	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7
1	x_4	1000	0	0	40	1	-100	-70	0
2	x_1	16	1	0	0	0	1	0	0
3	x_2	20	0	1	0	0	0	1	0
4	x_7	25	0	0	1	0	0	0	1
5	F	4080	0	0	-80	0	130	100	0

Итерация №3.

Текущий опорный план неоптимален, так как в индексной строке находятся отрицательные коэффициенты. В качестве ведущего столбца выберем, соответствующий переменной x_3 , так как это наибольший коэффициент по модулю. Определим ведущую строку по строкам как частное от деления: b_i/a_{i3} и из них выберем наименьшее:

$$\min(1000 : 40, 25 : 1) = 25$$

Следовательно, 1-ая строка является ведущей. Разрешающий элемент равен 40 и находится на пересечении ведущего столбца и ведущей строки.

Таблица 6.

Table 6.

№	Базис	Элем. св. столбца	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7
1	x_4	1000	0	0	1	-100	-70	0	25
2	x_1	16	1	0	0	0	1	0	0
3	x_2	20	0	1	0	0	0	1	0
4	x_7	25	0	0	1	0	0	0	1
5	F	4080	0	0	-80	0	130	100	0

Поскольку в последнем столбце присутствует несколько минимальных элементов 25, то номер строки выбираем по правилу Креко.

Метод Креко заключается в следующем. Элементы строк, имеющие одинаковые наименьшие значения $\min = 25$, делятся на предполагаемые разрешающие элементы, а результаты заносятся в дополнительные строки. За ведущую строку выбирается та, в которой раньше встретится наименьшее частное при чтении таблицы слева направо по столбцам.

Формируем следующую часть симплексной таблицы. Вместо переменной x_4 в итерацию 3 войдет переменная x_3 .
Получаем новую симплекс-таблицу:

Таблица 7.
Table 7.

№	Базис	Элем. св. столбца	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7
1	x_3	25	0	0	1	1/40	-5/2	-7/4	0
2	x_1	16	1	0	0	0	1	0	0
3	x_2	20	0	1	0	0	0	1	0
4	x_7	0	0	0	0	-1/40	5/2	7/4	1
5	F	6080	0	0	0	2	-70	-40	0

Итерация №4.

Текущий опорный план не оптимален, так как в индексной строке находятся отрицательные коэффициенты.

В качестве ведущего выберем столбец, соответствующий переменной x_5 , так как это наибольший коэффициент по модулю.

Определим ведущую строку по строкам как частное от деления: b_i / a_{i5} и из них выберем наименьшее:

$$\min(-, 16 : 1, 0 : 5/2) = 0$$

Следовательно, 4-ая строка является ведущей. Разрешающий элемент равен 21/2 и находится на пересечении ведущего столбца и ведущей строки.

Таблица 8.
Table 8.

№	Базис	Элем. св. столбца	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7
1	x_3	25	0	0	1	1/40	-5/2	-7/4	0
2	x_1	16	1	0	0	0	1	0	0
3	x_2	20	0	1	0	0	0	1	0
→ 4	x_7	0	0	0	0	-1/40	5/2	7/4	1
5	F	6080	0	0	0	2	-70	-40	0

Формируем следующую часть симплексной таблицы. Вместо переменной x_7 в итерацию 4 войдет переменная x_5 .

Получаем новую симплекс-таблицу:

Таблица 9.
Table 9.

№	Базис	Элем. св. столбца	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7
1	x_3	25	0	0	1	0	0	0	1
2	x_1	16	1	0	0	1/100	0	-7/10	-2/5
3	x_2	20	0	1	0	0	0	1	0
4	x_5	0	0	0	0	-1/100	1	7/10	2/5
5	F	6080	0	0	0	13/10	0	9	28

Так как в таблице 9 последняя строка не содержит отрицательных элементов, то найденный план является оптимальным.

Оптимальный план можно записать так:

$$x_1 = 16, x_2 = 20, x_3 = 25, x_4 = 0, x_5 = 0, x_6 = 0, x_7 = 0$$

$$F(X) = 130 * 16 + 100 * 20 + 80 * 25 = 6080$$

Значит, итоговый бюджет будет составлять 6080 сомонов, и распределение бюджета будет следующим: $x_1 = 16, x_2 = 20, x_3 = 25$.

Ожидаемая прибыль банка от вложения средств в рекламу составит $(6080 - 4000)/4000 * 100\% = 52\%$.

Полученные результаты подтверждают необходимость использования оптимизационных моделей в расчете рекламного бюджета банка с целью увеличения коммуникативного и экономического эффекта рекламы.

В заключении можно отметить, что оптимизация рекламного бюджета является актуальной задачей в условиях современной рыночной экономики. Разработанная математическая модель представляют собой инструмент, способный повысить эффективность привлечения и удержания клиентов, а также укрепить конкурентные позиции банка на рынке.

Таким образом, исследования в области оптимизации рекламного бюджета банков продолжают развиваться, предлагая новые эффективные методы решения этой задачи. Использование методов линейного программирования и машинного обучения является наиболее перспективным и позволяет добиться максимальных результатов при минимальных затратах. По результатам исследования можно прийти к выводу, что методы линейного программирования позволяют эффективно оптимизировать рекламный бюджет банка.

**Рецензент: Шабозов М.Ш.,
доктор физико-математических наук, академик**

ЛИТЕРАТУРА

1. Бобков С.П., Оптимизация расходов на рекламу в условиях ограниченности ресурсов / С.П. Бобков, О.А. Широкая, А.В. Филимонов //Современные наукоемкие технологии. Региональное приложение. - №4. – 2010. – С. 20-25.
2. Штезель А.Ю. Затраты на рекламу в структуре маркетингового бюджета коммерческого банка / А.Ю. Штезель // TERRA ECONOMICUS (Экономический вестник Ростовского государственного университета). – 2009. – Том 7. - №2. – С. 158-161.
3. Комаров Е.Г. Элементы банковского маркетинга / Е.Г. Комаров // Управление персоналом. — 2007. – № 10. – С. 24–26.
4. Мирошников Д. Маркетинг банковских продуктов с точки зрения разработки банковской системы /Д. Мирошников //Банковские технологии. — 2006. – № 8. – С. 46–48.
5. Матанцев А.Н. Эффективность рекламы / А.Н. Матанцев // –М.: Издательство «Финпресс». – 2002. – С. 416.
6. Шелобаев С.И. Математические методы и модели в экономике, финансах, бизнесе / С.И. Шелобаев // Учеб. Пособие для вузов. – М.: ЮНИТИ-ДАНА. – 2000. – С. 367.
7. Интрилигатор М. Математические методы оптимизации и экономическая теория / Г.И. Жуковой, Ф.Я. Кельмана // –М.: Айрис-пресс. – 2002. – С.576.

8. Odinaev R. N. Mathematical model of cargo transportation of the republic of Tajikistan at the Premier Rogunskaya HPP using linear programming methods / R. N. Odinaev, S. H. Mavlonzoda // 2020. – No. 4. – Pp. 5-15.
9. Одинаев Р. Н. Методы оптимизации / Р. Н. Одинаев // – Душанбе: ТНУ, 2021. – С. 246.
10. Одинаев Р. Н. Методы оптимизации в примерах и задачах / Р. Н. Одинаев, Ф. Раимзода, Ф. Раимзода, Н. Шерматов // Таджикского национального университета. – Душанбе: Эр-граф. – 2020. – С. 148.
11. Юнуси М. Методы оптимизации / М. Юнуси, Р.Н. Одинаев // Душанбе: Таджикского национального университета. – 2014. – С. 179.
12. Афзалшоҳи С., Амсилаҳои беҳтарини низоми бонкӣ бо як асос / С. Афзалшоҳ, М. Юнусӣ // Паёми Донишгоҳи миллии Тоҷикистон. Бахши илмҳои табиӣ. – 2021. – №3. – С. 28 – 38.
13. Афзалшоҳи Сафархон. Усули симплексии ҳалли масъалаи барномасозии ҳаттӣ / Афзалшоҳи Сафархон // Паёми ДДБ ба номи Носири Хусрав. Бахши илмҳои гуманитарӣ-иқтисодӣ. – №1-4. – 2020. – Том 2.
14. Афзалшоҳи Сафархон. Амсилаи математикӣ ва компютерини автоматикунонии воситаҳои қарзи дар бонк / Афзалшоҳи Сафархон // Паёми ДДБ ба номи Носири Хусрав. Бахши илмҳои гуманитарӣ-иқтисодӣ. – № 2 – 3. – 2022.

REFERENCES

1. Bobkov S.P., Optimization of advertising expenses in conditions of limited resources / S.P. Bobkov, O.A. Shirokaya, A.V. Filimonov // Modern high-tech technologies. Regional application. - No. 4. – 2010. – Pp. 20-25.
2. Shtezel A.Yu. Advertising costs in the structure of the marketing budget of a commercial bank / A.Yu. Shtezel // TERRA ECONOMICUS (Economic Bulletin of Rostov State University). – 2009. – Volume 7. - No. 2. – Pp. 158-161.
3. Komarov E.G. Elements of bank marketing / E.G. Komarov // Personnel management. - 2007. – No. 10. – Pp. 24-26.
4. Miroshnikov D. Marketing of banking products from the point of view of the development of the banking system / D. Miroshnikov // Banking technologies. - 2006. – No. 8. – Pp. 46-48.
5. Matantsev A.N. Effectiveness of advertising / A.N. Matantsev // - M.: Finpress Publishing House. – 2002. – 416 p.
6. Shelobaev S.I. Mathematical methods and models in economics, finance, business: Textbook. Handbook for universities / Shelobaev S.I. // M.: UNITY-DANA. – 2000. – P. 367.
7. Intrigator M. Mathematical methods of optimization and economic theory / G.I. Zhukova, F.Ya. Kelman // M.: Iris-press. – 2002. – P.576.
8. Odinaev R. N. Mathematical model of cargo transportation of the republic of Tajikistan at the Premier Rogunskaya HPP using linear programming methods / R. N. Odinaev, S. H. Mavlonzoda // – 2020. – No. 4. – P. 5-15.
9. Odinaev R. N. Optimization methods / R. N. Odinaev // – Dushanbe: TNU, 2021. – p. 246.
10. Odinaev R.N. Optimization methods in examples and problems / R. N. Odinaev, F. Raimzoda, F. Raimzoda, N. Shermatov // Tajik National University. – Dushanbe: Er-graf. – 2020. – P. 148.
11. Yunusi M. Optimization methods / M. Yunusi, R.N. Odinaev // - Dushanbe: TNU, – 2014. – From 179.
12. Afzalshohi S., The best models of the banking system with one basis / S. Afzalshohi, M. Yunusi // Bulletin of the Tajik National University. Series contains Sciences. – 2021. – No. 3. – P p. 28 – 38.
13. Afzalshohi Safarkhon. Simplex method for solving the problem of written programming / Afzalshohi Safarkhon // Bulletin of the Nosir Khusrav BNU. Series of Humanities and Economic Sciences. – No.1-4. – 2020. - Volume 2.
14. Afzalshohi Safarkhon. Mathematical and computer model of automation of debt instruments in a bank / Afzalshohi Safarkhon // Bulletin of the Nosir Khusrav BNU. Series of Humanities and Economic Sciences. – № 2-3. – 2022.

ИСТИФОДАИ УСУЛҲОИ БАРНОМАСОЗИИ ҲАТТӢ БАРОИ ҲАЛЛИ МАСЪАЛАҲОИ ОПТИМИЗАТСИЯИ БУЌЕТИ ТАБЛИҒОТИИ БОНК

Стратегияи таблиғотӣ яке аз ҷузъҳои муҳими оптимизатсияи равандҳои тиҷоратии бонк мебошад. Он бевосита ба сатҳи фоида, талабот ба хизматрасонӣ ва тақдими мавқеи ташкилоти молиявӣ таъсир мерасонад. Дар мақолаи мазкур истифодаи масъалаи барномасозии ҳаттӣ барои оптимизатсияи буҷети таблиғотии бонк баррасӣ карда мешавад. Барои ҳалли масъалаи оптимизатсияи буҷети таблиғотии бонк модели математикӣ пешниҳод карда шуд, ки тақсмоти оптималии буҷетро байни каналҳои таблиғотӣ муайян мекунад, ки шумораи мизочони бонкро бо риояи ҳама маҳдудиятҳо зиёд мекунад. Дар натиҷаи таҳлили таҷрибавӣ самаранокии ин усули оптимизатсияи буҷети таблиғотии бонк исбот карда шуд. Натиҷаи асосии мақола асоснок кардани зарурати оптимизатсияи буҷети таблиғотии бонк, инчунин таҳияи модели математикӣ барои татбиқи он мебошад. Натиҷаҳои бадастомада имкон медиҳанд, ки даромаднокии ташкилоти молиявӣ ва эътимоди муштарӣ ба бонк зиёд карда шавад.

Калидвожаҳо: модели математикӣ, бучети таблиғотӣ, оптимизатсияи бучети таблиғотӣ, фоида аз таблиғот, барномасозии хаттӣ, чадвали симплексӣ, тағирёбандаҳои асосӣ, нақшаи асосӣ, элементҳои ҳалқунанда.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ ЛИНЕЙНОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ОПТИМИЗАЦИИ РЕКЛАМНОГО БЮДЖЕТА БАНКА

Рекламная стратегия является одной из важнейших составляющих оптимизации бизнес-процессов банка. Она напрямую влияет на уровень профита, спроса на услуги и укрепление позиций финансовой организации на рынке. В данной работе рассматривается использование задач линейного программирования для оптимизации рекламного бюджета банка. Для решения задачи оптимизации рекламного бюджета банка была предложена математическая модель, которая определяет оптимальное распределение бюджета между рекламными каналами, максимизирующее число клиентов банка при соблюдении всех ограничений. В результате экспериментального анализа была доказана эффективность данной методики оптимизации рекламного бюджета банка. Основным результатом данной работы является обоснование необходимости оптимизации рекламного бюджета банка, а также разработка математической модели для ее реализации. Полученные результаты позволяют увеличить прибыльность финансовой организации, повысить узнаваемость и доверие к банку со стороны клиентов.

Ключевые слова: математическая модель, рекламный бюджет, оптимизация рекламного бюджета, прибыль от рекламы, линейное программирование, симплекс-таблица, базисные переменные, опорный план, решающий элемент.

USE OF LINEAR PROGRAMMING METHODS FOR SOLVING THE PROBLEMS OF OPTIMIZING THE ADVERTISING BUDGET OF A BANK

The advertising strategy is one of the most important components of optimizing the bank's business processes. It directly affects the level of profit, demand for services and strengthening the position of a financial organization in the market. This paper discusses the use of linear programming problems to optimize the advertising budget of the bank. To solve the problem of optimizing the bank's advertising budget, a mathematical model was proposed that determines the optimal distribution of the budget between advertising channels, maximizing the number of bank customers, subject to all restrictions. As a result of the experimental analysis, the effectiveness of this technique for optimizing the bank's advertising budget was proved. The main result of this work is the substantiation of the need to optimize the bank's advertising budget, as well as the development of a mathematical model for its implementation. The obtained results make it possible to increase the profitability of a financial institution, increase recognition and trust in the bank by customers.

Key words: mathematical model, advertising budget, advertising budget optimization, advertising profit, linear programming, simplex table, basic variables, basic plan, decisive element.

Маълумот дар бораи муаллифони: **Одинаев Раим Назарович** - Донишгоҳи миллии Тоҷикистон д.и.ф.-м., профессор, мудири кафедраи моделсозии математикӣ ва компютерӣ. **Суроға:** 734025, ш. Душанбе, Ҷумҳурии Тоҷикистон, проспекти Рӯдакӣ, 17. **E-mail:** raim_odinaev@mail.ru.

Афзалшоҳи Сафархон – Донишгоҳи давлатии Бохтар ба номи Носири Хусрав, ассистенти кафедраи технологияҳои иттилоотӣ ва методикаи таълими информатика. **Суроға:** 735140, ш. Бохтар, Ҷумҳурии Тоҷикистон, кӯчаи Айнӣ, 67. **E-mail:** sobirov.afzalsho@mail.ru.

Сведения об авторах: **Одинаев Раим Назарович** – Таджикский национальный университет, д.ф.-м.н, профессор, заведующий кафедры математическое и компьютерное моделирование. **Адрес:** 734025, г. Душанбе, Республика Таджикистан, проспект Рудаки, 17. **E-mail:** raim_odinaev@mail.ru.

Афзалшоҳи Сафархон - Бохтарский государственный университет имени Носири Хусрава, ассистент кафедры информационные технологии и методики обучения информатике. **Адрес:** 735140, г.Бохтар, Республика Таджикистан, ул.Айни, 67. **E-mail:** sobirov.afzalsho@mail.ru

Information about the authors: **Oдинаев Раим Назарович** – Tajik National University, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of the Department of Mathematical and Computer Modeling. **Address:** 734025, Dushanbe, Republic of Tajikistan, Rudaki Avenue 17. **E-mail:** raim_odinaev@mail.ru.

Afzalshokhi Safarkhon - Bokhtar State University named after Nosiri Khusrav, Assistant of the Department of Information Technologies and Methods of Teaching Computer Science. **Address:** 735140, Bokhtar, Republic of Tajikistan, Aini street, 67. **E-mail:** sobirov.afzalsho@mail.ru

Статья поступила в редакцию 19.09.2023
Одобрена после рецензирования 12.02.2024
Принята к публикации 25.03.202

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ НЕЧЕТКОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕМАТИКИ НАУЧНЫХ СТАТЕЙ С ПОМОЩЬЮ СИНТАКСИЧЕСКИ СВЯЗАННЫХ СЛОВ

Муродов П.С.¹, Пруцков А.В.²

¹Таджикский национальный университет,

²Рязанский государственный радиотехнический университет им. В.Ф. Уткина

Необходимость математического моделирования различных естественных языков привела к появлению сначала математической, а затем, с развитием вычислительной техники, компьютерной лингвистики. Математическое моделирование морфологического анализа и синтеза описано в [1–2]. Результатом моделирования стал метод генерации и определения форм слов, применимый к естественным языкам различных групп и семейств [3].

Следующим объектом математического моделирования стали научные статьи. Предметом моделирования стала тематика статей.

Задача определения тематики научной статьи может использоваться в следующих случаях:

- библиографическом деле;
- информационном поиске;
- поиске научных статей по одной и той же тематике или схожей с заданной;
- лингвистическом и статистическом анализе научных статей различных тематик.

Подходы к определению тематики научных статей

Для определения тематики научных статей предложено несколько подходов.

В [4] предложен цифровой портрет автореферата (ЦПА). В основе ЦПА лежит дискретная функция суммы частоты определенных букв в автореферате. Расстояние между двумя ЦПА пропорционально максимуму разности дискретных функций. Аналогичные исследования авторефератов по педагогике и экономике проведены в [5–6].

В [7] классифицируются отзывы о книгах. Проведены опыты разделения на 2 (положительный, отрицательный) и 3 (положительный, отрицательный и нейтральный) класса. Для классификации использован метод опорных векторов.

Описания научных исследований отдельных авторов или названия их научных публикаций классифицируются в [8] методом ближайших соседей. Используется векторное представление слов. В работе поставлена проблема отсутствия устоявшихся подходов к решению задачи классификации научных публикаций.

В [9] исследуются методы классификации: ближайших соседей, случайный лес, градиентный бустинг, логистическая регрессия, метод опорных векторов. Методы классификации применяются к статьям, относящимся к двум классам: «Интеллектуальный анализ текстовых данных» и другие тематики информатики. Наилучшие результаты классификации показал метод градиентного бустинга.

В [10] предложен метод классификации текстов с использованием алгоритмов машинного обучения. Приводятся результаты компьютерных экспериментов оценки качества алгоритмов для классификации диссертационных работ по специальностям.

Классификация авторефератов по тематике, предложенная в [11], состоит в следующем. Корпус авторефератов предварительно разбит на классы. Для каждого класса выделены ключевые слова. Решающее правило определяется методом оценки максимального правдоподобия.

Научные статьи по медицине, общественным и техническим наукам классифицируются в [12] «наивным» байесовским классификатором, методами случайного леса и опорных векторов. Аналогичный подход к классификации научных статей предложен в [13]. Здесь используется метод - ближайших соседей вместо метода случайного леса.

В [14] сделан вывод, что списки литературы позволяют классифицировать научные статьи лучше, чем методы машинного обучения.

В обзорах [15–16] перечислены следующие методы классификации текстов: «наивный» байесовский классификатор, ближайших соседей, деревьев решений, опорных векторов, распределения буквосочетаний (символьные -граммы), логистической регрессии, на основе искусственных нейронных сетей. В [15] выявлены их преимущества и недостатки, выполнен обзор результатов сравнения методов классификации.

Проведенный анализ показал большой интерес к определению тематики научных публикаций у ученых Таджикистана [4, 10].

Классификация текстов - быстроразвивающаяся сфера информатики. Убедиться в этом можно в многочисленных обзорах методов классификации текстов за последние годы (см., например, обзоры 2022 г. [17–18]).

Предложенные методы классификации текстов продолжают исследоваться и относятся к современной компьютерной лингвистике. Пока ни один из них не стал общепризнанным. Причинами этого являются сложность реализации и настройки.

Классическая и современная компьютерные лингвистики, и используемый ими математический аппарат

Предлагается разделить компьютерную лингвистику на классическую и современную. Принципиальное отличие между этими видами компьютерной лингвистики заключается в понимании, что такое текст, но решают они одну и ту же задачу автоматической обработки текста (АОТ).

Классическая компьютерная лингвистика рассматривает текст как носитель смысла (принцип «Смысл \Leftrightarrow Текст» [19]). Обработка текста делится на уровни обработки: морфологический, синтаксический, семантический и иногда прагматический [20].

Современная компьютерная лингвистика рассматривает текст как последовательность символов или слов, а также последовательность слов, состоящих из символов.

Классическая и современная компьютерные лингвистики используют различные понятия (табл. 1) и математический аппарат (табл. 2).

Таблица 1. Понятия классической и современной компьютерных лингвистик
Table 1. Concepts of classical and modern computer linguistics

Классическая лингвистика	компьютерная	Современная лингвистика	компьютерная
Морфологический анализ и синтез		Символьные -граммы	
Синтаксический анализ и синтез		Словесные -граммы (шинглы)	
Семантический анализ и синтез		Векторное представление слова	
Смысл		Токен	
		Стоп-слова	

Таблица 2. Используемый математический аппарат классической и современной компьютерных лингвистик

Table 2. Used mathematical apparatus of classical and modern computer linguistics

Классическая лингвистика	компьютерная	Современная лингвистика	компьютерная
Теория формальных языков		Нейронные сети	
Логическая модель представления знаний		Векторное расстояние	
Семантическая модель представления знаний (семантические сети)		Метод опорных векторов	
		Память переводчика (Translation Memory)	

Прочитайте [15, 21] и вы без труда определите, к какому виду компьютерной лингвистики они относятся. Классическая компьютерная лингвистика не смогла

предоставить решение актуальных задач, что привело к появлению современной компьютерной лингвистики. Однако научный потенциал классической компьютерной лингвистики не исчерпан.

Цель работы. Формализовать определение тематики научных статей с помощью синтаксически связанных слов математической моделью. Будем использовать подходы классической компьютерной лингвистики, а также математический аппарат теории множеств, логик высказываний и предикатов, нечеткой логики.

Абстрактная математическая модель нечеткой классификации по общим объектам

Предлагается абстрактная математическая модель нечеткой классификации по общим объектам.

Пусть имеются объекты:

$$V = \{b_1, b_2, \dots, b_{NB}\}.$$

Несколько объектов составляют экземпляр класса:

$$E \subset V.$$

Объекты могут принадлежать одному из классов D_1, D_2, \dots, D_{ND} . При этом

$$D_j \subset V; j = 1, 2, \dots, ND.$$

Каждый объект принадлежит не менее одному классу:

$$\forall b_i \exists D_j (b_i \in D_j); i = 1, 2, \dots, NB.$$

Введем предикат, истинный если $b \in V$ принадлежит только одному классу:

$$C(b, D_i, D_1, D_2, \dots, D_{ND}) = \left((b \in D_i) \wedge \left(\bigwedge_{j=1}^{ND} \left((b \notin D_j) \vee (i = j) \right) \right) \right), i = 1, 2, \dots, ND.$$

Объекты, которые принадлежат только одному классу, назовем идентификаторами класса.

Введем функцию $h(D_i)$, возвращающее множество объектов H такое, что $H = h(D_i) = \{b: C(b, D_i, D_1, D_2, \dots, D_{ND})\}$, $H \subset D_i$, $H \subset V$.

Степенью принадлежности множества $E^* \subset V$ классу D_i будем называть функцию:

$$\mu(E^*, D_i) = \frac{|E^* \cap h(D_i)|}{|h(D_i)|}, 0 \leq \mu(E^*, D_i) \leq 1.$$

Задача нечеткой классификации заключается в следующем. Пусть дан экземпляр класса E^* . К какому классу D_1, D_2, \dots, D_{ND} экземпляр E^* принадлежит в наибольшей степени?

Опишем функцию классификации, решающую эту задачу, как:

$$MD = g(E^*, D_1, D_2, \dots, D_{ND}),$$

где MD – множество множеств D_1, D_2, \dots, D_{ND} .

Функция $g(E^*, D_1, D_2, \dots, D_{ND})$ может быть определена несколькими способами. Например, результат классификации может быть одним классом с максимальной степенью принадлежности:

$$g(E^*, D_1, D_2, \dots, D_{ND}) = \left\{ D: \max_{j=1,2,\dots,ND} \left(\mu(E^*, D_j) \right) \right\},$$

или множеством классов со степенью принадлежности, большей некоторого значения k : $g(E^*, D_1, D_2, \dots, D_{ND}) = \{D: \mu(E^*, D) > k\}$, $k = const$, $0 < k < 1$.

Результат классификации будет нечетким и будет определяться степенью принадлежности.

Конкретизация абстрактной математической модели нечеткой классификации с синтаксически связанными словами текста научной статьи в качестве общих объектов

Предлагается следующая конкретизация абстрактной математической модели нечеткой классификации с синтаксически связанными словами текста научной статьи в качестве общих объектов.

Пусть имеются слова:

$$W = \{w_1, w_2, \dots, w_{NW}\}.$$

Слова используются в тексте. Текст T разбит на предложения S :

$$T = \bigcup_{i=1}^{NT} S_i, T \subset W.$$

Между словами в предложении существуют различные связи. Определим наличие связи нумерованными предикатами:

$$r_k(w_i, w_j), i = 1, 2, \dots, NW, j = 1, 2, \dots, NW, k = 1, 2, \dots$$

Одной из связей между словами является порядок слов в предложении. Определим его в виде следующего предиката:

$$r_1(w_i, w_j) = \begin{cases} 1, & \text{если } w_j \text{ следует за } w_i, \\ 0, & \text{в ином случае.} \end{cases}$$

Предикат $r_1(w_i, w_j)$ может использоваться для определения, является ли пара слов словесной биграммой.

Еще одной связью является синтаксическая связь между словами. Например, между подлежащим и сказуемым. Определим ее предикатом $r_2(w_i, w_j)$:

$$r_2(w_i, w_j) = \begin{cases} 1, & \text{если } w_i \text{ и } w_j \text{ связаны синтаксически,} \\ 0, & \text{в ином случае.} \end{cases}$$

Не все соседние слова связаны синтаксически:

$$\exists w_i \exists w_j (r_1(w_i, w_j) \wedge \overline{r_2(w_i, w_j)}).$$

Синтаксическая связь несет больше информации о словах, чем соседство слов, перспективней в исследовании (табл. 3). Однако синтаксическая связь сложнее в выделении.

Будем использовать синтаксически связанные слова как общие объекты в абстрактной математической модели нечеткой классификации:

$$b = \langle w_i, w_j \rangle, r_2(w_i, w_j) = 1.$$

Таблица 3. Сравнение синтаксически связанных слов и словесных биграмм
Table 3. Comparison of syntactically related words and word bigrams

Категории	Синтаксически связанные слова	Словесные биграммы
Получение	Сложно, необходимо провести синтаксический анализ	Просто, необходимо поделить текст на пары
Пример предложения "Компьютерная лингвистика делится на классическую и современную"	лингвистика делится компьютерная лингвистика делится на классическую делится на современную	компьютерная лингвистика лингвистика делится делится классическую классическую современную (без незначащих слов)
Качество результата	Высокое, пары слов связаны синтаксически	Низкое, пары слов связаны порядком в предложении
Пригодность для многоязычности	Да, пары слов можно перевести на другой язык с сохранением синтаксической связи	Нет, порядок слов в предложения в разных языков может быть разным

ОБСУЖДЕНИЕ

Предложенная абстрактная математическая модель нечеткой классификации по общим объектам абстрактна. Под общими объектами могут пониматься объекты из различных предметных областей.

Для решения задачи нечеткой классификации выбраны синтаксические связанные пары слов предложений текста научной статьи. Синтаксические связи между слова несут больше информации, чем словесные биграммы, определяемые только порядком слов в предложении.

Предложенные абстрактная математическая модель нечеткой классификации по общим объектам и ее конкретизация используются в международном исследовании. Исследование происходит по следующему плану:

1. Формирование корпуса научных статей по различным тематикам.
2. Выделение синтаксически связанных слов в тексте.
3. Определение синтаксически связанных слов, специфичных для тематики.
4. Тестирование функции классификации и при необходимости ее доработка.

В дальнейшем планируется разработать метод классификации многоязычных текстов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В статье изложены следующие научные результаты:

1. Проведен анализ методов классификации научных публикаций. Основными методами являются «наивный» байесовский классификатор, -ближайших соседей, опорных векторов. Некоторые исследования выполнены учеными из Таджикистана. Сделан вывод, что ни один метод классификации текстов не стал общепризнанным.

2. Предложено разделить компьютерную лингвистику на два вида: классическую и современную. В отличие от современной компьютерной лингвистики классическая компьютерная лингвистика рассматривает текст как носитель смысла. Для выделенных видов компьютерной лингвистики определены используемые понятия и математический аппарат.

3. Разработана абстрактная математическая модель нечеткой классификации по общим объектам. Модель предполагает определение степени принадлежности классам

по отношению числа общих объектов экземпляров к числу объектов, принадлежащих классу. Для формализации модели использованы теории множеств, логик высказываний и предикатов, нечеткой логики.

4. Разработана конкретизация абстрактной математической модели нечеткой классификации по общим объектам. Предложено в качестве общих объектов использовать синтаксически связанные пары слов. Сделан вывод, что синтаксически связанные слова перспективней в исследовании, чем словесные биграммы, определяемые порядком слов в предложении.

Формализация абстрактной математической модели нечеткой классификации по общим объектам и ее конкретизация выполнены в международном исследовании. В дальнейшем модель и ее конкретизация будут применены практически для классификации научных статей.

**Рецензент: Комилийн Ф.С.,
доктор физико-математических наук,
профессор**

ЛИТЕРАТУРА

1. Пруцков, А.В. Задачи автоматической обработки текста на естественных языках и возможные математические подходы к их решениям / А.В. Пруцков // Вестник Рязанского государственного радиотехнического университета. – 2016. – № 1 (55). – С. 81-86.
2. Пруцков, А.В. Математико-алгоритмическая формализация моделей морфологического анализа и синтеза словоформ естественных языков / А.В. Пруцков // Cloud of Science. – 2018. – Т. 5. – № 4. – С. 729-748.
3. Пруцков, А.В. Определение и генерация сложных форм слов естественных языков при морфологическом анализе и синтезе / А.В. Пруцков // Известия Таганрогского государственного радиотехнического университета. – 2006. – Т. 70. – № 15. – С. 10-14.
4. Косимов, А.А. Определение шифра специальности с помощью символьных униграмм / А.А. Косимов // Информационный обмен в междисциплинарных исследованиях: сб. тр. Всерос. науч.-практ. конф. с междунар. участием. – Рязань: РГРТУ, 2022. – С. 163.
5. Курбонов, Н.М. Об автоматическом распознавании на основе униграмм шифров авторефератов по педагогике / Н.М. Курбонов // Политехнический вестник. Серия Интеллект. Инновации. Инвестиции. – 2021. – № 3 (55). – С. 47-51.
6. Каримов А.А. Об автоматическом распознавании на основе словоформ шифров авторефератов по экономике / А.А. Каримов // Политехнический вестник. Серия Интеллект. Инновации. Инвестиции. – 2021. – № 4 (55). – С. 54-58.
7. Поляков, П.Ю. Исследование применимости методов тематической классификации в задаче классификации отзывов о книгах / П.Ю. Поляков, М.В. Калинина, В.В. Плешко // Компьютерная лингвистика и интеллектуальные технологии: по материалам ежегод. междунар. конф. Диалог. – М.: ИПИ РАН, 2012. – Т. 2. – С. 51-59.
8. Мусидзе, В.Т. Применение методов классификации текстовых данных в соответствии с заданной тематикой при контекстной обработке общенаучной информации / В.Т. Мусидзе, И.М. Лазарева // Проблемы Арктического региона: тр. XVI Междунар. науч. конф. – Мурманск: Полиграфист, 2017. – С. 78-82.
9. Козлов, П.А. Сравнительный анализ бинарных классификаторов на массиве научных публикаций / П.А. Козлов, А.С. Мохов, Н.А. Назаров, Ш.И. Сафин, В.О. Толчеев // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. – 2022. – Т. 88. – № 7. – С. 79-87.
10. Максудов, Х. Т. Сравнительный анализ методов "дерево решений" и "случайный лес" - при определении специальности научных текстов / Х. Т. Максудов, Б. Б. Иномов, Н. М. Муллоджанов // Вестник Таджикского национального университета. Серия естественных наук. – 2019. – № 3. – С. 23-29.
11. Леонова, Ю.В. О подходе к решению задачи тематической классификации авторефератов / Ю.В. Леонова, А.М. Федотов // Вестник Новосибирского государственного университета. Серия: Информационные технологии. – 2017. – Т. 15. – № 1. – С. 47-58.
12. Gürbüz, T. Research Article Classification with Text Mining Method // T. Gürbüz, Ç. Uluyol // Concurrency Computat Pract Exper. – 2023. – Vol. 35. – No 1. – e7437. DOI: 10.1002/cpe.7437.
13. Dien, T.T. et al. Article Classification Using Natural Language Processing and Machine Learning / T.T. Dien et al. // 2019 International Conference on Advanced Computing and Applications (ACOMP). – 2019. – Pp. 78–84.

14. Rivest, M. Article-Level Classification of Scientific Publications: A Comparison of Deep Learning, Direct Citation and Bibliographic Coupling / M. Rivest, E. Vignola-Gagne, E. Archambault // *PLoS ONE*. – 2021. – Vol. 16. – № 5. – e0251493. DOI: 10.1371/journal.pone.0251493.
15. Батура, Т.В. Методы автоматической классификации текстов / Т.В. Батура // Программные продукты и системы. – 2017. – Т. 30. – № 1. – С. 85-99.
16. Данилов, Г.В. Сравнительный анализ статистических методов классификации научных публикаций в области медицины / Г.В. Данилов, В.В. Жуков, А.С. Куликов, Е.С. Макашова, Н.А. Митин, Ю.Н. Орлов // Компьютерные исследования и моделирование. – 2020. – Т. 12. – Вып. 4. – С. 921-933. DOI: 10.20537/2076-7633-2020-12-4-921-933.
17. Li, Q. A Survey on Text Classification: From Traditional to Deep Learning / Q. Li, H. Peng, J. Li, C. Xia, R. Yang, L. Sun, P. Yu, L. He // *ACM Trans. Intell. Syst. Technol.* – 2022. – Vol. 13. – No. 2. – Art. 31 (April 2022), 41 pp. DOI: 10.1145/3495162.
18. Gasparetto, A. A Survey on Text Classification Algorithms: From Text to Predictions / A. Gasparetto, M. Marcuzzo, A. Zangari, A. Albarelli // *Information*. – 2022. – Vol. 13. – No. 83. – 39 p. DOI: 10.3390/info13020083.
19. Мельчук, И.А. Русский язык в модели «Смысл-Текст». Семантика, синтаксис / И.А. Мельчук. – М.: Шк. «Языки русской культуры», 2005. – С. 682.
20. Искусственный интеллект. В 3 кн. Кн. 1. Системы общения и экспертные системы: справочник / под ред. Э.В. Попова. – М.: Радио и связь, 1990. – С. 464.
21. Гладкий, А.В. Элементы математической лингвистики / А.В. Гладкий, И.А. Мельчук. – М.: Наука, 1969. – С.193.

REFERENCES

1. Prutzkow, A.V. Problems of automatic text processing in natural languages and possible mathematical approaches to their solutions / A.V. Prutzkow // *Bulletin of the Ryazan State Radio Engineering University*. – 2016. – No. 1 (55). – Pp. 81-86.
2. Prutzkow, A.V. Mathematical and algorithmic formalization of models of morphological analysis and synthesis of word forms in natural languages / A.V. Prutzkow // *Cloud of Science*. – 2018. – Vol. 5. – No. 4. – Pp. 729-748.
3. Prutzkow, A.V. Determination and generation of complex forms of words in natural languages in morphological analysis and synthesis / A.V. Prutzkow // *News of the Taganrog State Radio Engineering University*. – 2006. – Vol. 70. – No. 15. – Pp. 10-14.
4. Kosimov, A.A. Determining a specialty code using symbolic unigrams / A.A. Kosimov // *Information exchange in interdisciplinary research: collection. tr. All-Russian scientific-practical conf. with international participation*. – Ryazan: RGRTU, 2022. – 163 p.
5. Kurbonov, N.M. On automatic recognition based on unigrams of ciphers of abstracts on pedagogy / N.M. Kurbonov // *Polytechnic Bulletin. Intelligence Series. Innovation. Investments*. – 2021. – No. 3 (55). – Pp. 47-51.
6. Karimov A.A. On automatic recognition based on word forms of ciphers of abstracts in economics / A.A. Karimov // *Polytechnic Bulletin. Intelligence Series. Innovation. Investments*. – 2021. – No. 4 (55). – Pp. 54-58.
7. Polyakov, P.Yu. Study of the applicability of thematic classification methods in the problem of classifying book reviews / P.Yu. Polyakov, M.V. Kalinina, V.V. Pleshko // *Computer linguistics and intellectual technologies: based on annual materials. international conf. Dialogue*. – М.: IPI RAS, 2012. – Vol. 2. – Pp. 51-59.
8. Musidze, V.T. Application of methods for classifying text data in accordance with a given topic in contextual processing of general scientific information / V.T. Musidze, I.M. Lazareva // *Problems of the Arctic region: tr. XVI International scientific conf.* – Murmansk: Polygraphist, 2017. – Pp. 78-82.
9. Kozlov, P.A. Comparative analysis of binary classifiers on an array of scientific publications / P.A. Kozlov, A.S. Mokhov, N.A. Nazarov, Sh.I. Safin, V.O. Tolcheev // *Factory laboratory. Diagnostics of materials*. – 2022. – Vol. 88. – No. 7. – Pp. 79-87.
10. Maksudov, Kh. T. Comparative analysis of the “decision tree” and “random forest” methods - in determining the specialty of scientific texts / Kh. T. Maksudov, B. B. Inomov, N. M. Mullojanov // *Bulletin of the Tajik National University. Natural Sciences Series*. – 2019. – No. 3. – Pp. 23-29.
11. Leonova, Yu.V. On the approach to solving the problem of thematic classification of abstracts / Yu.V. Leonova, A.M. Fedotov // *Bulletin of Novosibirsk State University. Series: Information technologies*. – 2017. – Vol. 15. – No. 1. – Pp. 47-58.
12. Gürbüz, T. Research Article Classification with Text Mining Method // T. Gürbüz, Ç. Uluyol // *Concurrency Computat Pract Exper*. – 2023. – Vol. 35. – No. 1. – e7437. DOI: 10.1002/cpe.7437.
13. Dien, T.T. et al. Article Classification Using Natural Language Processing and Machine Learning / T.T. Dien et al. // *2019 International Conference on Advanced Computing and Applications (ACOMP)*. – 2019. – Pp. 78–84.

14. Rivest, M. Article-Level Classification of Scientific Publications: A Comparison of Deep Learning, Direct Citation and Bibliographic Coupling / M. Rivest, E. Vignola-Gagne, E. Archambault // PLoS ONE. – 2021. – Vol. 16. – No. 5. – e0251493. DOI: 10.1371/journal.pone.0251493.
15. Batura, T.V. Methods for automatic text classification / T.V. Batura // Software products and systems. – 2017. – Vol. 30. – No. 1. – Pp. 85-99.
16. Danilov, G.V. Comparative analysis of statistical methods for classifying scientific publications in the field of medicine / G.V. Danilov, V.V. Zhukov, A.S. Kulikov, E.S. Makashova, N.A. Mitin, Yu.N. Orlov // Computer research and modeling. – 2020. – Vol. 12. – Issue. 4. – Pp. 921-933. DOI: 10.20537/2076-7633-2020-12-4-921-933.
17. Li, Q. A Survey on Text Classification: From Traditional to Deep Learning / Q. Li, H. Peng, J. Li, C. Xia, R. Yang, L. Sun, P. Yu, L. He // ACM Trans. Intel. Syst. Technol. – 2022. – Vol. 13. – No. 2. – Art. 31 (April 2022), 41 pp. DOI: 10.1145/3495162.
18. Gasparetto, A. A Survey on Text Classification Algorithms: From Text to Predictions / A. Gasparetto, M. Marcuzzo, A. Zangari, A. Albarelli // Information. – 2022. – Vol. 13. – No. 83. – 39 p. DOI: 10.3390/info13020083.
19. Melchuk, I.A. Russian language in the “Meaning-Text” model. Semantics, syntax / I.A. Melchuk. – M.: Sch. “Languages of Russian culture”, 2005. – 682 pp.
20. Artificial intelligence. In 3 books. Book 1. Communication systems and expert systems: a reference book / ed. E.V. Popova. – M.: Radio and Communications, 1990. – 464 pp.
21. Gladky, A.V. Elements of mathematical linguistics / A.V. Gladky, I.A. Melchuk. – M.: Nauka, 1969. – Pp. 193.

АМСИЛАИ МАТЕМАТИКИИ ТАЪРИФИ НОРАВШАНИ МАВЗУОТИ МАҚОЛОТИ ИЛМӢ БО ИСТИФОДА АЗ КАЛИМОТИ АЗ ЧИХАТИ НАҲВӢ АЛОҚАМАНД

Усулҳои математикӣ ба таври васеъ барои ба расмият даровардани ҳалли масоили коркарди худкори матнҳо, аз ҷумла таснифоти матнҳо истифода мешаванд. Барои таснифи матнҳо аз усулҳои таснифгари «сода»-и Байес, ҳамсоҳҳои наздиктарин, дарахтони тасмимгиранда, векторҳои тақягоҳӣ, тақсимоти хуруф-чузӯҳо (n -граммаҳои рамзӣ), регрессияи логистикӣ ва равишҳои мувофиқ бо шабакаҳои нейронии сунӣ истифода мешавад. Ин усулҳо мавриди истифодаи забоншиносии муосири компютерӣ қарор доранд. Забоншиносии классикӣ компютерӣ матнро ҳамчун интиқолдиҳандаи маъно меонад. Ҳадафи кори мазкур расмикунонии таърифи мавзӯоти мақолати илмӣ бо истифода аз калимоти аз ҷиҳати наҳвӣ алоқаманд тавассути амсилаи математикӣ ба шумор меравад, ки ин мутааллиқ ба забоншиносии классикӣ компютерӣ аст. Амсилаи математикӣ абстрактӣ барои таснифоти норавшан дар асоси унсурҳои муштарак пешниҳод карда мешавад. Амсила тахмин менамояд, ки бархе аз унсурҳо танҳо ба як синф шомиланд ва мушаххасоти синф ба ҳисоб мераванд. Натиҷаи таснифоти норавшан метавонад як ё якчанд синф бошад. Барои ҳар як синф дараҷаи мутааллиқият муайян карда мешавад. Дақиқосозии амсила пешниҳод гаштааст, ки дар он ба сифати унсурҳои муштарак ҷуфти калимаҳои аз лиҳози наҳвӣ алоқаманд оварда шудааст. Натиҷагирӣ карда мешавад, ки калимоти аз ҷиҳати наҳвӣ алоқаманд зимни таҳқиқот дар муқоиса бо биграммаҳои шифоҳӣ, ки аз рӯи тартиби ҷумла муайян гаштаанд, умедбахштар ба ҳисоб мераванд. Амсилаи мазкур дар як таҳқиқоти байналмилалӣ пешниҳод гаштааст, ки фарогири таҳияи маҷмуаи мақолати илмӣ ва тақсимоти онҳо вобаста аз рӯи мавзӯ мебошад. Маҷмуа барои гуруҳбандии мақолати илмӣ вобаста ба мавзӯҳои мухталиф мавриди истифода қарор мегирад.

Калидвожаҳо: коркарди худкори матн, таснифоти матн, таҳлили наҳвӣ, амсилаи математикӣ, таснифоти норавшан, мақолаи илмӣ, маҷмуаи матн.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ НЕЧЕТКОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕМАТИКИ НАУЧНЫХ СТАТЕЙ С ПОМОЩЬЮ СИНТАКСИЧЕСКИ СВЯЗАННЫХ СЛОВ

Математические методы широко применяются для формализации решения задач автоматической обработки текста, в том числе и классификации текстов. Для классификации текстов применяются «наивный» байесовский классификатор, методы «ближайших соседей», деревьев решений, опорных векторов, распределения буквосочетаний (символьные n -граммы), логистической регрессии, подходы на основе искусственных нейронных сетей. Эти методы используются современной компьютерной лингвистикой. Классическая компьютерная лингвистика рассматривает текст как носитель смысла. Целью работы является формализация определения тематики научных статей с помощью синтаксически связанных слов математической моделью, а значит классической компьютерной лингвистики. Предлагается абстрактная математическая модель нечеткой классификации по общим объектам. Модель предполагает, что некоторые объекты принадлежат только одному классу и являются идентификаторами класса. Результатом нечеткой классификации может быть один или несколько классов. Для каждого класса определена степень принадлежности. Предлагается конкретизация модели, в которой общими объектами являются синтаксически связанные пары слов. Сделан вывод, что синтаксически связанные слова перспективней в исследовании, чем словесные биграммы, определяемые порядком предложения. Модель предложена в международном исследовании, предполагающем создание корпуса научных статей и

распределение их по тематикам. Корпус будет использован для классификации научных статей по тематикам.

Ключевые слова: автоматическая обработка текста, классификация текстов, синтаксический анализ, математическая модель, нечеткая классификация, научная статья, корпус текстов.

MATHEMATICAL MODEL OF FUZZY RECOGNIZING OF THE TOPICS OF SCIENTIFIC ARTICLES USING SYNTACTICALLY RELATED WORDS

Mathematical methods are widely used to formalize the solution of problems of automatic text processing, including text classification. To classify texts, a “naive” Bayes classifier, methods of k -nearest neighbors, decision trees, support vector machines, distribution of letter combinations (character n -grams), logistic regression, and approaches based on artificial neural networks are used. These methods are used by modern computational linguistics. Classical computational linguistics considers text as a carrier of meaning. The purpose of the study is to formalize the definition of the topics of scientific articles using syntactically related words by a mathematical model, and therefore classical computer linguistics. We propose an abstract mathematical model of fuzzy classification based on common objects. The model assumes that some objects belong to only one class and are class identifiers. The result of a fuzzy classification can be one or more classes. For each class a degree of membership is determined. We propose a specification of the model with in which the common objects are syntactically related pairs of words. We conclude syntactically related words are more promising in research than verbal bigrams determined by sentence order. We propose the model in our international study. The study involve the creation of a corpus of scientific articles and their distribution by topic. The corpus will be used to classify scientific articles by topic.

Key words: natural text processing, text classification, syntactic analysis, mathematical model, fuzzy classification, scientific article, text corpus.

Маълумот дар бораи муаллифон: Муродов Парвиз Сайчафарович – Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, докторанти Ph.D соли 3–юми ихтисоси 6D060200 кафедраи информатикаи факултети механикаю математика. **Суроға:** 734025, ш. Душанбе, Ҷумҳурии Тоҷикистон, хиёбони Рӯдакӣ, 17. **Телефон:** (+992) 904-49-77-11. **E-mail:** mr.murodov93@mail.ru.

Прутков Александр Викторович – Донишгоҳи давлатии радиотехникии Рязан ба номи В.Ф. Уткина, доктори илмҳои техникӣ, профессори кафедраи математикаи амалӣ ва ҳисоббарорӣ. **Суроға:** 390005, ш.Рязан, Россия, ул. Гагарина, д. 59/1. **Телефон:** +7 (4912) 72-03-64. **E-mail:** mail@prutzkow.com.

Сведения об авторах: Муродов Парвиз Сайжафарович – Таджикский национальный университет, докторант Ph.D 3 курса специальности 6D060200 кафедры информатики механико-математического факультета. **Адрес:** 734025, г. Душанбе, Республика Таджикистан, пр. Рудаки, 17. **Телефон:** (+992) 904-49-77-11. **E-mail:** mr.murodov93@mail.ru.

Прутков Александр Викторович – Рязанский государственный радиотехнический университет имени В.Ф. Уткина, доктор технических наук, профессор кафедры вычислительной и прикладной математики. **Адрес:** 390005, г. Рязань, Российская Федерация, ул. Гагарина, д. 59/1. **Телефон:** +7 (4912) 72-03-64. **E-mail:** mail@prutzkow.com.

Information about the authors: - Murodov Parviz Saizhafarovich – Tajik National University, Ph.D student of the third year of the specialty 6D060200 of the Department of Informatics of the Faculty of Mechanics and Mathematics. **Address:** 734025, Dushanbe, Republic of Tajikistan, Rudaki Avenue, 17. **Phone:** (+992) 904-49-77-11. **E-mail:** mr.murodov93@mail.ru.

Prutzkow Alexander Viktorovich – Ryazan State Radio Engineering University named after V.F. Utkin, Doctor of Engineering, professor of the department of computational and applied mathematics. **Address:** 390005, Ryazan, Russian Federation, Gagarina str., 59/1. **Phone:** +7 (4912) 72-03-64. **E-mail:** mail@prutzkow.com.

Статья поступила в редакцию 19.12.2023
Одобрена после рецензирования 26.02.2024
Принята к публикации 29.03.2024

О ПРИБЛИЖЕНИИ РАВНОМЕРНЫХ ПОЧТИ-ПЕРИОДИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ НЕКОТОРЫМИ СУММАМИ И ИНТЕГРАЛАМИ

Талбаков Ф. М.

Таджикский государственный педагогический университет им. С. Айни

Пусть L_p ($1 \leq p < \infty$) пространство измеримых периода 2π по каждой из переменных функций $f(x, y)$, с нормой

$$\|f\|_{L_p} = \left\{ \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} |f(x, y)|^p dx dy \right\}^{\frac{1}{p}} < \infty,$$

а при $p = \infty$

$$\|f\|_{L_p} = \text{vraisup}_{x,y} |f(x, y)| < \infty.$$

Ряд Фурье этой функции имеет вид

$$f(x, y) \sim \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} A_{k,l}(x, y),$$

где коэффициенты этого ряда определены по формулам

$$A_{k,l}(x, y) = a_{k,l} \cos kx \cos ly + b_{k,l} \sin kx \cos ly + c_{k,m} \cos kx \sin ly + d_{k,m} \sin kx \sin ly \quad (k, l \leq 1),$$

$$A_{k,0}(x, y) = \frac{1}{2} (a_{k,0} \cos kx + b_{k,0} \sin kx),$$

$$A_{0,l}(x, y) = \frac{1}{2} (a_{0,l} \cos ly + c_{0,l} \sin ly),$$

$$A_{0,0} = \frac{1}{4} a_{0,0}.$$

В 1964 г. И. Марцинкевич [4, с. 530] исследовал вопрос об отклонении сумм вида

$$\sigma_n(f; x, y) = (n+1)^{-1} \sum_{k=0}^m S_{k,k}(f; x, y),$$

где $S_{k,k}(f; x, y)$ – частные суммы порядка k по каждой из переменных ряда Фурье функции $f(x, y) \in L_p$ ($1 \leq p \leq \infty$). В частности, он указал, что если $f(x, y)$ непрерывна по совокупности переменных x, y , то справедлива оценка

$$R_n(f)_{L_\infty} = \|f(x, y) - \sigma_n(f; x, y)\|_{L_\infty} \rightarrow 0 \quad (n \rightarrow \infty).$$

В работе Л.В. Жижиашвили [5, с. 527] были получены некоторые оценки о скорости стремления к нулю величины

$$R_n(f)_{L_p} = \|f(x, y) - \sigma_n(f; x, y)\|_{L_p} \quad (1 < p \leq \infty).$$

Поведение отклонения функции двух переменных $f(x, y) \in L_p$ ($1 \leq p \leq \infty$) от сумм вида

$$W_r(f; x, y) = (1-r) \sum_{k=0}^{\infty} r^k S_{k,k}(f; x, y)$$

при $0 < r < 1$ и $r \rightarrow \infty$, и исследованы в работе Р. Таберского [6, с. 310]. Некоторые уточняющие оценки результатов Л.В. Жижиашвили и Р. Таберского приведены в работе М.Ф. Тимана и Г. Гаймназарова [7] в 1972 г.

М.Ф. Тиман и В.Г. Пономаренко [8, с. 61-63] исследовали вопрос о поведении величины

$$R_n(f; v)_{L_p} = \left\| f(x, y) - \sum_{k=0}^n v_{k,k}(f; x, y) \right\|_{L_p} \quad (1)$$

для классических треугольных матриц $\{\mu_{k,n}\}$

$$\{\mu_{k,n}\} = \begin{cases} \frac{A_{n-k}^{\alpha-1}}{A_k^\alpha}, & k \leq n; \\ 0, & k > n. \end{cases}$$

Для величины (1) оценка сверху приведена в работе [5], а оценка снизу для этой величины установлена в работе [7]. В [8] также уточнены некоторые оценки из работ Л.В. Жижиашвили [5] и Р. Таберски [6]. А также при любом натуральном r в [3, с. 562] получены точные порядковые равенства для треугольной матрицы

$$\{\mu_{k,n}\} = \begin{cases} \frac{(k+1)^r - r^k}{(n+1)^r}, & k \leq n; \\ 0, & k > n. \end{cases} \quad (2)$$

Установлено, что если $f(x, y) \in L_p$ и $\{\mu_{k,n}\}$ определены в виде треугольной матрицы (2), то справедливо неравенство

$$R_n(f; \nu)_{L_p} \leq c_r (n+1)^{-r} \sum_{\nu=0}^n (\nu+1)^{r-1} E_{\nu,\nu}(f)_{L_p},$$

где

$$E_{\nu,\nu}(f)_{L_p} = \inf_{T_{k,k}} \|f(x, y) - T_{\nu,\nu}(x, y)\|_{L_p},$$

$T_{\nu,\nu}$ - тригонометрические полиномы порядка не выше n по каждой из переменных, а константа c_r зависит только от r .

Если $f(x, y) \in L_p$ ($1 < p \leq \infty$) и $\{\mu_{k,n}\}$ определены соотношением (2), то в [5, с. 549-550] получены оценки посредством модулей непрерывности, то есть

$$R_n(f; \nu)_{L_p} \leq c_{p,k} \left(\omega_k^{(1)}\left(f; \frac{1}{n}\right)_{L_p} + \omega_k^{(2)}\left(f; \frac{1}{n}\right)_{L_p} \right),$$

где

$$\omega_k^{(1)}(f; u)_{L_p} = \sup_{|h| \leq u} \|\Delta_{x,h}^k f\|_{L_p}, \quad \omega_k^{(2)}(f; u)_{L_p} = \sup_{|h| \leq u} \|\Delta_{h,y}^k f\|_{L_p},$$

$$\Delta_{x,h}^k f = \sum_{\nu=0}^k (-1)^{k-\nu} \binom{k}{\nu} f(x + \nu h, y),$$

$$\Delta_{h,y}^k f = \sum_{\nu=0}^k (-1)^{k-\nu} \binom{k}{\nu} f(x, y + \nu h) \quad (u > 0, k \in \mathbb{N}),$$

$c_{p,k}$ - константа, зависящая от p и k .

При $1 < p < \infty$ в [8, с. 60] также получены следующие результаты:

$$\text{а) } \omega_k^{(1)} \leq M_{p,k} R_n(f; \mu)_{L_p}, \quad \omega_k^{(2)} \leq M_{p,k} R_n(f; \mu)_{L_p},$$

где $M_{p,k}$ - константа, зависящая от p и k ;

$$\text{б) } R_n(f; \mu)_{L_p} \leq \omega_k^{(1)}\left(f; \frac{1}{n}\right)_{L_p} + \omega_k^{(2)}\left(f; \frac{1}{n}\right)_{L_p};$$

$$\text{в) } \|f(x, y) - W_r(f; x, y)\|_{L_p} \leq c_p \left(\omega_1^{(1)}(f; 1-r)_{L_p} + \omega_1^{(2)}(f; 1-r)_{L_p} \right);$$

$$\text{г) } \omega_1^{(1)}(f; 1-r)_{L_p} \leq M_p \|f(x, y) - W_k(f; x, y)\|_{L_p};$$

$$\text{д) } \omega_1^{(2)}(f; 1-r)_{L_p} \leq M_p \|f(x, y) - W_k(f; x, y)\|_{L_p}.$$

В работе Ю.Х. Хасанова [11, с. 83] получены аналоги вышеприведенных результатов о поведении отклонений функций двух переменных $f(x, y)$, заданных на плоскости от интегральных средних их преобразований Фурье в метрике пространства $L_p(R^2)$ ($1 \leq p < \infty$).

Пусть $f(x, y) \in L_p(R^2)$ - пространство измеримых функций $f(x, y)$, для которых

$$\|f\|_{L_p} = \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |f(x, y)|^p dx dy \right\}^{\frac{1}{p}} < \infty$$

и почти всюду существует преобразование Фурье

$$F(t, z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(u, v) \exp(-i(tu + zv)) dudv,$$

где $F(t, z) \in l_q(R^2)$ ($\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$).

При $\sigma > 0$ рассмотрим частные суммы

$$\begin{aligned} S_{\sigma, \sigma}(f; x, y) &= \int_{-\sigma}^{\sigma} \int_{-\sigma}^{\sigma} F(t, z) e^{i(tx+zy)} dt dz = \\ &= \int_{-\sigma}^{\sigma} \left[\int_{-u}^u A(t, u) dt + \int_{-u}^u A(t, -u) dt + \int_{-u}^u A(u, z) dz + \int_{-u}^u A(-u, z) dz \right] = \\ &= \int_0^{\sigma} S_{u, u}^*(f; x, y) du, \end{aligned} \quad (3)$$

где

$$\begin{aligned} A(t, z) &= F(t, z) e^{i(tx+zy)}, \\ S_{u, u}^*(f; x, y) &= \int_{-u}^u A(t, u) dt + \int_{-u}^u A(t, -u) dt + \int_{-u}^u A(u, z) dz + \int_{-u}^u A(-u, z) dz. \end{aligned}$$

Исследуем порядок поведения величины отклонения

$$R_{\sigma, r}(f)_{L_p} = \|f(x, y) - U_{\sigma, r}(f; x, y)\|_{L_p}, \quad (4)$$

где

$$U_{\sigma, r} f(x, y) = \int_0^{\sigma} \left(1 - \frac{u^r}{\sigma^r}\right) S_{u, u}^*(f; x, y) du.$$

Имеют места следующие утверждения [11]:

Теорема А. Если $f \in L_p(R^2)$ ($1 < p \leq 2$), то справедлива оценка

$$R_{\sigma, k}(f;)_{L_p} \leq c_{p, k} \left(\omega_k^{(1)}(f; \frac{1}{\sigma})_{L_p} + \omega_k^{(2)}(f; \frac{1}{\sigma})_{L_p} \right),$$

где $c_{p, k}$ – константа, зависящая лишь от p и k .

Теорема Б. Пусть $f(x, y) \in L_p(R^2)$ ($0 < p \leq 2$). Тогда имеет место

$$\omega_k^{(v)}(f; \frac{1}{\sigma})_{L_p} \leq M_{p, k} R_{\sigma, k}(f)_{L_p} \quad (v = 1, 2),$$

$M_{p, k}$ – константа, зависящая лишь от p и k .

Из теорем А и Б вытекает, что если имеют место условия теоремы Б, то при любом натуральном k , выполняется оценка

$$R_{\sigma, k}(f;)_{L_p} \leq c_{p, k} \left(\omega_k^{(1)}(f; \frac{1}{\sigma})_{L_p} + \omega_k^{(2)}(f; \frac{1}{\sigma})_{L_p} \right).$$

При $p = \infty$ и $k = 1$ аналогичные результаты получены в работе [9], а для случая периодических функций, в работе [5].

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Теперь приводим результаты данного параграфа оценки сверху отклонения функций $f(x) \in \mathbf{B}$ от сумм типа Марцинкевича, когда показатели Фурье имеют единственную предельную точку в бесконечности.

Пусть $B(R)$ – пространство всех ограниченных функций $f(x) \in \mathbf{B}$ с нормой (см., например, [1], [2])

$$\|f\|_B = \sup_{x \in R} |f(x)|$$

и функция $f(x) \in \mathbf{B}$ имеет ряд Фурье вида

$$f(x) \sim \sum_{k=-\infty}^{\infty} A_k \exp(i\lambda_k x), \quad (8)$$

с коэффициентами

$$A_k = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T f(x) \exp(-i\lambda_k x) dx,$$

где числа $\{\lambda_k\}$ – показатели Фурье, которые имеют единственную предельную точку в бесконечности, то есть (см., например, [14, с. 814] и [15, с. 55])

$$\lambda_0 = 0, \quad \lambda_{-n} = -\lambda_n, \quad |\lambda_n| < |\lambda_{n+1}|, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \lambda_n = \infty.$$

Введем в рассмотрение

$$S_\sigma(f; x)_B = \sum_{|\lambda_n| \leq \sigma} A_n \Phi_\sigma(\lambda_n) e^{i\lambda_n x},$$

где $\Phi_\sigma(t) \in R$ непрерывная и четная функция, такая, что $\Phi_\sigma(0) = 1$, $\Phi_\sigma(t) = 0$ при $|t| \leq \sigma$;

$$\psi_\sigma(t) \in L(-\infty, \infty), \quad (9)$$

где

$$\psi_\sigma(u) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_\sigma(t) e^{-iut} dt.$$

В начале докажем следующее вспомогательное утверждение, имеющее самостоятельный характер.

Лемма 1. Если функция $f(x) \in \mathbf{B}$, то

$$S_\sigma(f; x) = U_\sigma(f; \varphi; x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x+t) \Phi_\sigma(t) dt.$$

Доказательство. Пусть

$$f_\sigma(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x+t) \Phi_\sigma(t) dt$$

Тогда, в силу (9), получим, что

$$\begin{aligned} |f_\sigma(x+\tau) - f_\sigma(x)| &\leq \int_{-\infty}^{\infty} |f(x+t+\tau) - f(x+t)| |\psi_\sigma(t)| dt \leq \\ &\leq \sup_x |f(x+\tau) - f(x)| \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_\sigma(t)| dt. \end{aligned}$$

Интеграл в правой части последнего неравенства сходится и

$$|f(x+t+\tau) - f(x+t)| < \varepsilon.$$

Поэтому из последнего неравенства следует, что функция $f(x) \in \mathbf{B}$.

Через $D(\lambda_n)$ обозначим коэффициенты Фурье функций $f_\sigma(x) \in \mathbf{B}$, которые соответствуют показателям λ_n . Тогда имеем

$$\frac{1}{2T} \int_{-T}^T f_\sigma(x) e^{-i\lambda_n x} dx = \frac{1}{2T} \int_{-T}^T \int_{-\infty}^{\infty} f(x+t) \psi_\sigma(t) e^{-i\lambda_n x} dt dx =$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{\sigma}(t) dt \frac{1}{2T} \int_{-T}^T f(x+t) e^{-i\lambda_n x} dx = \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{\sigma}(t) \left(\frac{1}{2T} \int_{-T}^T f(x+t) e^{-i\lambda_n x} dx \right) dt = \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{\sigma}(t) \left(\frac{1}{2T} \int_{-T+t}^{T+t} f(x) e^{-i\lambda_n(x+t)} dx \right) dt = \\
&+ \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{\sigma}(t) \left(\frac{1}{2T} \int_{-T+t}^{T+t} f(x) e^{-i\lambda_n x} e^{-i\lambda_n t} dx \right) dt = \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{\sigma}(t) e^{-i\lambda_n t} \left(\frac{1}{2T} \int_{-T+t}^{T+t} f(x) e^{-i\lambda_n x} dx \right) dt.
\end{aligned}$$

Внутренний интеграл в последнем суть допредельное выражение коэффициентов Фурье функции $f(x)$. Значит, по формуле обращения Фурье

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{\sigma}(t) e^{-i\lambda_n t} dt = \Phi_{\sigma}(\lambda_n).$$

Поэтому $D(\lambda_n) = A_n \Phi_{\sigma}(\lambda_n)$ и

$$f_{\sigma}(x) = \sum_{|\lambda_n| \leq \sigma} A_n \Phi_{\sigma}(\lambda_n) e^{i\lambda_n x}.$$

Так как $f(x) \in \mathbf{B}$, то из последнего вытекает утверждение леммы.

Пусть $B(R)$ – пространство всех ограниченных функций $f(x) \in \mathbf{B}$ с нормой (см., например, [1], [2])

$$\|f\|_{\mathbf{B}} = \sup_{x \in R} |f(x)|.$$

Рассмотрим величину

$$R(f; x) = \|U_{\sigma}(f; \varphi; x) - f(x)\|_{\mathbf{B}}, \quad (10)$$

в которой

$$U_{\sigma}(f; \varphi; x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x+t) \Phi_{\sigma}(t) dt, \quad \Phi_{\sigma}(t) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} \varphi_{\sigma}(u) K_m(t) du, \quad (11)$$

где $K_m(t) = \frac{4 \sin(ut)}{t}$, $\varphi_{\sigma}(u)$ – некоторая, абсолютно интегрируемая на интервале $(0, \infty)$ функция при каждом фиксированном $\sigma > 0$, и такая, что

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Phi_{\sigma}(t)| dt = 1. \quad (12)$$

В зависимости от скорости стремления к нулю $E_{\sigma}(f)$ ($\sigma \rightarrow \infty$) для случаев, когда

$$\varphi_{\sigma}(u) = \varphi_{\sigma,a}(u) = \begin{cases} 1, & |u| \leq a \quad (0 < a < \sigma); \\ \frac{\sigma - |u|}{\sigma - a}, & a < |u| < \sigma; \\ 0, & |u| \geq \sigma, \end{cases} \quad (13)$$

исследуем поведение величины (10).

Известно, что [8] (см. [8, с. 60], теорема 1)

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Phi_{\sigma,a}(t)| dt \leq C \frac{\sigma + a}{\sigma - a}, \quad (14)$$

где C – константа.

Теорема 1. Пусть $f(x) \in B(R)$ и функция $\varphi_\sigma(u) = \varphi_{\sigma,a}(u)$ определена соотношением (13). Тогда при любом Λ ($0 < \Lambda < a < \sigma$) имеет места оценка

$$R(f; \varphi_\sigma) \leq C \frac{\sigma + a}{\sigma - a} E_\Lambda(f)_B, \quad (15)$$

где C – абсолютная константа.

Доказательство. Соотношение (12) запишем в виде

$$\int_0^{\infty} \Phi_\sigma(t) dt = \frac{1}{2}.$$

Умножим обе части последнего на $f(x)$ и вычтем полученное равенство из (11) при $\Phi_\sigma(t) = \Phi_{\sigma,a}(t)$, будем иметь

$$\begin{aligned} \Delta_{\sigma,a}(f; x) &= U_\sigma(f; \varphi; x) - f(x) = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (f(x+t)\Phi_{\sigma,a}(t) - f(x)\Phi_{\sigma,a}(t)) dt = \\ &= \int_0^{\infty} [f(x+t) - f(x-t)]\Phi_{\sigma,a}(t) dt - 2 \int_0^{\infty} f(x)\Phi_{\sigma,a}(t) dt = \\ &= \int_0^{\infty} [f(x+t) - f(x-t) - 2f(x)]\Phi_{\sigma,a}(t) dt = \\ &= \int_0^{\infty} \Omega_x(f; t)\Phi_{\sigma,a}(t) dt, \end{aligned}$$

где $\Omega_x(f; t) = f(x+t) + f(x-t) - 2f(x)$.

Пусть

$$T_r = \sum_{|\lambda_m| \leq r} A_m e^{i\lambda_m x}$$

произвольный тригонометрический полином и $0 < \Lambda < a < \sigma$. Тогда (см. [14, с. 14], теорема 3)

$$T_\Lambda(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{|\lambda_m| \leq r} T_\Lambda f(x+t)\Phi_{\sigma,a}(t).$$

Нетрудно показать, что для полинома $T_\Lambda(x)$

$$\int_0^{\infty} \Omega_x(T_\Lambda; f; t)\Phi_{\sigma,a} dt = 0.$$

Действительно, в силу оценки (12), получим

$$\begin{aligned} &\int_0^{\infty} \Omega_x(T_\Lambda; f; t)\Phi_{\sigma,a}(t) dt = \\ &= \int_0^{\infty} [T_\Lambda(x+t) + T_\Lambda(x-t) - 2T_\Lambda(x)]\Phi_{\sigma,a}(t) dt = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} T_{\Lambda}(x+t)\Phi_{\sigma,a}(t) dt - \int_{-\infty}^{\infty} T_{\Lambda}(x)\Phi_{\sigma,a}(t) dt = \\ & = T_{\Lambda}(x) - T_{\Lambda}(x) \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_{\sigma,a}(t) dt = 0 \end{aligned}$$

Значит,

$$\Delta_{\sigma,a}(f; x) = \int_0^{\infty} \Omega_x[(f - T_{\Lambda}); t] \Phi_{\sigma,a}(t) dt. \quad (16)$$

Пусть

$$\|f(x) - T_{\Lambda}(x)\| = E_{\Lambda}(f)_{\mathbf{B}},$$

где $T_r(x)$ – тригонометрический полином, осуществляющий наилучшее приближение порядка Λ , тогда

$$\|\Omega_x[(f - T_{\Lambda}); t]\|_{\mathbf{B}} = 4E_r(f)_{\mathbf{B}}. \quad (17)$$

Из (14), (17) и (16) следует оценка (15). Теорема 1 доказана.

Теорема 2. Если $f(x) \in \mathbf{B}$, показатели Фурье которой имеют единственную предельную точку в бесконечности, то есть $\lambda_m \rightarrow \infty$. Тогда справедлива оценка

$$\left\| f(x) - (n+1)^{-1} \sum_{k=0}^n S_k(f; x) \right\|_{\mathbf{B}} \leq M(n+1)^{-1} \sum_{k=0}^n E_{\Lambda}(f)_{\mathbf{B}}, \quad (\text{Б})$$

где M – константа и

$$E_{\Lambda}(f; x)_{\mathbf{B}} = \inf_{A(\lambda_n)} \left\| f(x) - \sum_{|\lambda_n| \leq k} A_n e^{i\lambda_n x} \right\|_{\mathbf{B}}$$

- величина наилучшего приближения функции $f(x)$ тригонометрическими полиномами степени не выше Λ .

Доказательство. Пусть $n \in [2^m; 2^{m+1}]$. Тогда

$$\begin{aligned} R_n(f)_{\mathbf{B}} &= \left\| f(x) - (n+1)^{-1} \sum_{k=0}^n S_k(f; x) \right\|_{\mathbf{B}} = \\ &= \left\| (n+1)^{-1} \sum_{k=0}^n (f(x) - S_k(f; x)) \right\|_{\mathbf{B}} = \\ &= (n+1)^{-1} \left\| \sum_{k=0}^{m-1} \sum_{k=2^v}^{2^{v+1}-1} (f(x) - S_k(f; x)) + f(x) - S_0(f; x) + \sum_{r=2^m}^n (f(x) - S_k(f; x)) \right\|_{\mathbf{B}} \\ &\leq (n+1)^{-1} \left\| \sum_{v=0}^{m-1} 2^v \cdot \frac{1}{2^v} \sum_{k=2^v}^{2^{v+1}-1} (f(x) - S_k(f; x)) \right\|_{\mathbf{B}} + \\ &\quad + (n+1)^{-1} \|f(x) - S_0(f; x)\|_{\mathbf{B}} + \\ &\quad + (n+1)^{-1} \left\| \sum_{k=2^m}^n (f(x) - S_k(f; x)) \right\|_{\mathbf{B}}. \quad (18) \end{aligned}$$

В силу теоремы 1 имеем

$$\left\| 2^{-v} \sum_{k=2^v}^{2^{v+1}-1} (f(x) - S_k(f; x)) \right\|_{\mathbf{B}} \leq M E_{2^{v+1}-1}(f)_{\mathbf{B}}, \quad (19)$$

$$\left\| \sum_{k=2^v}^m (f(x) - S_k(f; x)) \right\|_B \leq M(n - 2^m) E_{2^{m-1}}(f)_B. \quad (20)$$

Подставляя (19), (20) в (18), получаем

$$\begin{aligned} R_n(f)_B &\leq M(n+1)^{-1} \sum_{v=0}^{m-1} 2^v E_{2^{n-1}}(f)_B + (n+1)^{-1} E_0(f)_B + \\ &\quad + M(n+1)^{-1} (n-2^m) E_{2^{m-1}}(f)_B \leq \\ &\leq M(n+1)^{-1} \sum_{v=0}^{m-1} 2^v E_{2^{v-1}}(f)_B + (n+1)^{-1} E_0(f)_B + \\ &\quad + M(n+1)^{-1} E_{2^{m-1}}(f)_B \leq \\ &\leq M_1(n+1)^{-1} \sum_{k=0}^{2^m} E_k(f)_B \leq M_1(n+1)^{-1} \sum_{k=0}^n E_k(f)_B. \end{aligned}$$

Отсюда и вытекает неравенство (Б), чем и завершаем доказательство теоремы 2.

Аналог теоремы 2 для периодических функций установлен в работе М.Ф. Тимана и В.Г. Пономаренко [8], а для класса почти-периодических в смысле Бора и Безиковича функций в [11]-[16].

**Рецензент: Абдукаримов М.Ф.,
доктор физико-математических наук,
доцент**

ЛИТЕРАТУРА

1. Besicovitch A.S. Almost periodic functions / A.S Besicovitch. – Cambridge. – 1932. – 180 p.
2. Бор Г. Почти-периодические функции / Г. Бор. М.: ЛИБРОКОМ. - 2009. – С. 128.
3. Бернштейн С. Н. Собрание сочинений / С.Н. Бернштейн // М.: Изд. АН СССР. – 1954. –Т. 2. – С. 627.
4. Marcinkewisz I. Sur une metode remarquable de sommation des series doubles de Fourier / I. Marcinkewisz // Collected papers, Warszawa. – 1964. – Pp. 527-538.
5. Жижиашвили Л.В. О суммировании двойных рядов Фурье / Л.В. Жижиашвили // Сиб. Мат. журнал. - Т. VIII. – No. 3. – 1967. – С. 548-564.
6. Taberski R. Abel summability of double Fourier series / R. Taberski // Bull. Acad. Polon. Sci. Ser. Sci. Msth. Astron. Et phys., Vol. 18. – No. 6. – 1970. – Pp.307-314.
7. Тиман М.Ф., Уклонение периодических функций двух переменных от некоторых полиномов / М.Ф. Тиман, Г. Гаймазаров // Доклады АН Тадж. ССР. - 1972. – Т.15. - № 5. – С. 6-8.
8. Тиман М.Ф., О приближении функций двух переменных суммами типа Марцинкевича / М.Ф. Тиман, В.Г. Пономаренко // Известия вузов. Математика. - 1975. - № 9. – С. 59–67.
9. Тиман М.Ф., Об абсолютной сходимости рядов Фурье почти-периодических функций [Текст] / М.Ф. Тиман, Ю.Х. Хасанов // Ряды Фурье: теория и приложения. Киев, Институт Математики АН Украины. - 1992. – С.142-146.
10. Титчмарш Е. Теория функций [Текст] / Е. Титчмарш // М.: Наука, - 1980, – С.464.
11. Хасанов Ю.Х. О приближении почти-периодических функций двух переменных / Ю.Х. Хасанов // Известия вузов. Математика. - 2010. - №12. – С.82-86.
12. Хасанов, Ю.Х. Об абсолютной сходимости рядов Фурье почти-периодических функций / Ю.Х. Хасанов // Матем. заметки. – 2013. –Т.94. – №5. – С.745-756.
13. Талбаков Ф.М. Аналог теоремы С.Н. Бернштейна о наилучшем приближении почти-периодических функций / Ю.Х. Хасанов, Ф.М. Талбаков // ДАН РТ. - 2016. - Т.59. - № 1-2. – С.11-18.
14. Талбаков, Ф.М. Об абсолютной сходимости рядов Фурье почти- периодических функций Безиковича / Ф.М. Талбаков, Ю.Х Хасанов // ДАН РТ. – 2018. - Т.61. – № 1-2. – С.813-821.
15. Талбаков, Ф.М. Об абсолютной сходимости рядов Фурье равномерных почти-периодических функций и некоторые вопросы их аппроксимации / Ф.М. Талбаков. Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук НАНТ Институт математики им. А. Джурраева. – 2020. – С. 84.
16. Талбаков, Ф.М. Об абсолютной сходимости двойных рядов Фурье почти- периодических функций в равномерной метрике / Ф.М. Талбаков // Известия высших учебных заведений. Математика. - 2023. – № 4. – С. 65-75.

REFERENCES

17. Besicovitch A.S. Almost periodic functions / A.S. Besicovitch. – Cambridge. – 1932. – 180 p.
18. Bohr G. Almost periodic functions / G. Bohr. – M.: LIBROKOM, 2009. – Pp. 128.
19. Bernshtein S.N. Collected Works / S.N. Bernstein // M.: Publishing house. USSR Academy of Sciences. – 1954. – Т. 2. – P. 627.
20. Marcinkewisz I. Sur une metode remarquable de sommation des series doubles de Fourier / I. Marcinkewisz // Collected papers, Warszawa. – 1964. – Pp. 527-538.
21. Zhizhiashvili L.V. On the summation of double Fourier series / L.V. Zhizhiashvili // Sib. Mat. magazine. - T. VIII. – No. 3. – 1967. – Pp. 548-564.
22. Taberski R. Abel summability of double Fourier series / R. Taberski // Bull. Acad. Polon. Sci. Ser. Sci. Msth. Astron. Et phys., Vol. 18. – No. 6. – 1970. – Pp.307-314.
23. Timan M.F., Deviation of periodic functions of two variables from some polynomials / M.F. Timan, G. Gaimnazarov // Reports of the Taj Academy of Sciences. SSR. - 1972. – Т.15. - No. 5. – Pp. 6-8.
24. Timan M.F., On the approximation of functions of two variables by sums of Martsinkevich type / M.F. Timan, V.G. Ponomarenko // News of universities. Mathematics. - 1975. - No. 9. – Pp. 59–67.
25. Timan M.F., On the absolute convergence of Fourier series of almost periodic functions [Text] / M.F. Timan, Yu.H. Khasanov // Fourier series: theory and applications. Kyiv, Institute of Mathematics of the Academy of Sciences of Ukraine. - 1992. – Pp. 142-146.
26. Titchmarsh E. Theory of functions [Text] / E. Titchmarsh // - M.: Nauka, - 1980. – P. 464.
27. Khasanov Yu.Kh. On the approximation of almost periodic functions of two variables / Yu.Kh. Khasanov // News of universities. Mathematics. - 2010. - No. 12. – Pp. 82-86.
28. Khasanov, Yu.Kh. On the absolute convergence of Fourier series of almost periodic functions / Yu.Kh. Khasanov // Matem. notes. – 2013. –Т.94. – No. 5. – Pp. 745-756.
29. Talbakov F.M. An analogue of the theorem of S.N. Bernstein on the best approximation of almost periodic functions / Yu.Kh. Khasanov, F.M. Talbakov // DAN RT. - 2016. - Т.59. - No. 1-2. – Pp. 11-18.
30. Talbakov, F.M. On the absolute convergence of Fourier series of almost periodic Besicovitch functions / F.M. Talbakov, Yu.Kh. Khasanov // DAN RT. – 2018. - Т.61. – No. 1-2. – Pp. 813-821.
31. Talbakov, F.M. On the absolute convergence of Fourier series of uniform almost periodic functions and some questions of their approximation / F.M. Talbakov. Dissertation for the degree of candidate of physical and mathematical sciences NAST Institute of Mathematics named after. A. Juraeva. – 2020. – P. 84.
32. Talbakov, F.M. On the absolute convergence of double Fourier series of almost periodic functions in the uniform metric / F.M. Talbakov // News of higher educational institutions. Mathematics. - 2023. – № 4. – Pp. 65-75.

ДАР БОРАИ НАЗДИКШАВИИ ФУНКЦИЯҲОИ ЯКХЕЛАИ ҚАРИБ ДАВРӢ БО МИҚДОРИ МУАЙЯНИ ИНТЕГРАЛҲО

Дар мақола баъзе масъалаҳои наздикшавии функцияҳои даврии Бора аз чамъҳои хусусии силсилаи Фурье ва миёнаи Марсинкевич, вақте ки нишондиҳандаҳои Фурье (спектри функция) ва функцияҳои баррасишаванда нуктаи маҳдудкунандаи беохир доранд, баррасӣ карда шудааст. Масъалаи дур шудани функцияи додашудаи $f(x)$ аз бахшҳои хоси силсилаи Фурье вобаста ба суръати майли ба сифр расидани арзиши наздикшавии беҳтарин бо полиномияи тригонометрии дараҷаи маҳдуд тахкиқ карда мешавад. Дар ин ҷо хангоми муайян кардани коэффицентҳои Фурье ба ҷои функцияи баррасишаванда баъзе функцияи худсарона, ҳақиқӣ, муттасил $\Phi_\sigma(t)$ ($\sigma > 0$) гирифта мешавад, ки дар фосилаи додашуда ба як баробар ва дар дигар маврид ба сифр баробар аст. Минбаъд баҳодиҳии аз боло ба андозаи инхирофи функцияи қариб даврӣ ба маънои Бор аз ҷониби миёнаи Марсинкевич ҳамин тавр муқаррар карда мешавад.

Калидвожаҳо: функцияҳои якхелаи қариб даврӣ, силсилаи Фурье, спектри функция, коэффицентҳои Фурье, нуктаи маҳдуд дар беохир, миёнаи Марсинкевич, полиномияи тригонометрӣ, наздикшавии беҳтарин.

О ПРИБЛИЖЕНИИ РАВНОМЕРНЫХ ПОЧТИ-ПЕРИОДИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ НЕКОТОРЫМИ СУММАМИ И ИНТЕГРАЛАМИ

В работе исследуются некоторые вопросы приближения почти-периодических функций Бора от частных сумм ряда Фурье и средними Марцинкевича, когда показатели Фурье (спектр функции) рассматриваемых функций имеют предельную точку в бесконечности. Исследуется вопрос об отклонении заданной функции $f(x)$ от ее частных сумм ряда Фурье, в зависимости от скорости стремления к нулю величины наилучшего приближения тригонометрическим полиномом ограниченной степени. Здесь, при определении коэффициентов Фурье вместо рассматриваемой функции принимается некоторая произвольная, вещественная, непрерывная функция $\Phi_\sigma(t)$ ($\sigma > 0$), которая в заданном интервале равна единице, а в остальных случаях равна нулю. Далее аналогично устанавливаются оценка сверху величины отклонения почти-периодической в смысле Бора функции средними Марцинкевича.

Ключевые слова: равномерные почти-периодические функции, ряд Фурье, спектр функции, коэффициенты Фурье, предельную точку в бесконечности, средние Марцинкевича, тригонометрический полином, наилучшее приближение

ON THE APPROXIMATION OF UNIFORM ALMOST-PERIODIC FUNCTIONS BY SOME SUMS AND INTEGRALS

The paper investigates some issues of approximation of almost-periodic Bohr functions from partial sums of the Fourier series and the Marcinkевич averages, when the Fourier exponents (the spectrum of the function) of the functions under consideration have a limit point at infinity. The question of the deviation of a given function $f(x)$ from its partial sums of the Fourier series is investigated, depending on the rate of tendency to zero of the magnitude of the best approximation by a trigonometric polynomial of bounded degree. Here, when determining the Fourier coefficients, instead of the function under consideration, some arbitrary, real, continuous function $\Phi_\sigma(t)$ ($\sigma > 0$), is taken, which in a given interval is equal to one, and in other cases is zero. Then, similarly, the upper estimate of the deviation of the almost-periodic in the sense of the Bohr function by the Marcinkевич averages is established.

Keywords: uniform almost-periodic functions, Fourier series, function spectrum, Fourier coefficients, limit point at infinity, Marcinkевич averages, trigonometric polynomial, best approximation.

Маълумот дар бораи муаллиф: Талбаков Фарходҷон Маҳмадшоевич – Донишгоҳи давлатии омӯзгории Тоҷикистон ба номи С.Айни, номзоди илмҳои физикаю математика, дотсент, мудири кафедраи геометрия ва математикаи олии. Суроға: 734003, ш.Душанбе, Ҷумҳурии Тоҷикистон, хиббони Рудаки, 17. E-mail: talbakov_90@mail.ru.

Сведения об авторе: Талбаков Фарходҷон Маҳмадшоевич – Таджикский государственный педагогический университет им. С. Айни, кандидат физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой геометрии и высшей математики. Адрес: 734003, г. Душанбе, Республика Таджикистан, Рудаки, 121. E-mail: talbakov_90@mail.ru.

Information about the author: – Talbakov Farkhodjon Makhmadshoevich - Tajik State Pedagogical University named after. S. Aini, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Head of the Department of Geometry and Higher Mathematics. Address: 734003, Dushanbe, Republic of Tajikistan, Rudaki, 121. E-mail: talbakov_90@mail.ru.

Статья поступила в редакцию 25.12.2023
Одобрена после рецензирования 13.01.2024
Принята к публикации 07.03.2024

INTRODUCTION. In today's economy, understanding and measuring poverty is crucial for policymakers, researchers, and organizations working to address economic disparities and improve the well-being of individuals and communities. One common method used to calculate poverty thresholds is the Slack Base method, which helps determine the upper and lower limits of poverty and forecast future trends. By using this method, stakeholders can gain valuable insights into the extent of poverty and make informed decisions on resource allocation and intervention strategies.

The Slack Base method is a widely recognized approach for calculating poverty thresholds, which are income levels below which individuals or households are considered to be living in poverty [1]. The method involves setting a base poverty line, known as the slack base, and adjusting it based on various factors such as inflation, cost of living, and changes in household composition. By applying these adjustments, researchers can estimate the upper and lower limits of poverty for different demographic groups and geographic areas.

To determine the upper limit of poverty using the Slack Base method, researchers start with the base poverty line and make adjustments to account for factors that may increase the cost of living or income requirements [2]. This allows for a more comprehensive understanding of the income levels at which individuals or households may be at risk of falling into poverty. On the other hand, calculating the lower limit of poverty involves identifying the minimum income needed to meet basic needs and avoid deprivation. By considering both the upper and lower limits, policymakers can develop targeted interventions to support those most in need [3].

In addition to calculating current poverty thresholds, the Slack Base method can also be used for forecasting future trends in poverty rates [4]. By analyzing historical data, economic indicators, and demographic changes, researchers can project how poverty levels may evolve over time and anticipate potential challenges or opportunities for intervention. This proactive approach enables stakeholders to plan ahead and implement policies that address emerging issues before they escalate [5].

In today's economy, accurate and up-to-date information on poverty is essential for guiding decision-making and promoting social justice. By using methods like the Slack Base approach to calculate poverty thresholds, policymakers can better understand the root causes of poverty, identify vulnerable populations, and tailor interventions to meet specific needs. This data-driven approach helps ensure that resources are allocated efficiently and effectively, leading to more targeted and impactful anti-poverty initiatives [6].

Furthermore, in the wake of global economic challenges such as the COVID-19 pandemic, the importance of poverty threshold calculation has become even more pronounced. As unemployment rates rise and income inequality widens, it is crucial to have reliable data on poverty levels to inform recovery efforts and support those most affected by economic downturns. By using robust methods like the Slack Base approach, policymakers can assess the impact of external shocks on poverty rates, prioritize assistance programs, and monitor progress towards reducing disparities.

In conclusion, the Slack Base method offers a systematic and comprehensive approach to calculating poverty thresholds, finding upper and lower limits, forecasting future trends, and informing policy decisions in today's economy. By leveraging this method effectively, stakeholders can gain valuable insights into the dynamics of poverty, target resources where they are most needed, and work towards creating a more equitable and inclusive society. As we navigate complex economic challenges and strive for

sustainable development, understanding and addressing poverty remains a critical priority for building a more resilient and prosperous future [7].

POVERTY THRESHOLD CALCULATION THROUGH SBM METHOD

There are two types of models in DEA: radial and non-radial. Radial models are represented by the CCR (Charnes–Cooper–Rhodes) model. Basically, they deal with proportional changes of inputs or outputs. On the other hand, non-radial models, e.g., the slacks-based measure of efficiency (SBM) model, handle input or output slacks directly, and do not assume proportional changes of inputs or outputs. In this chapter, we introduce the SBM model and its extensions.

To calculate the poverty line through fuzzy linear programming using the SBM (Slacks-Based Measure) method, we need to follow these steps;

Step 1: Normalize the data (Dimensionless)

Step 2: Determine the input and output variables

Step 3: Formulate the fuzzy linear programming model

Step 4: Solve the model using the SBM method

These are data entries for poverty line calculation for 3 years respectively.

Table1. Data entry

Years	Income	Education	Healthy care	Basic needs
2020	2300	65	234000	540
2021	2350	72	241000	620
2022	2500	83	249000	745

Step 1: Normalize (Dimensionless) the data to a common scale through $n_{ij} = r_{ij} / \sqrt{\sum_{1-m} r^2_{ij}}$. Normalized data shown as follow [8];

Table 2. Normalized data

Years	Income	Education	Healthy care	Basic needs
2020	0.557	0.509	0.560	0.487
2021	0.569	0.564	0.576	0.559
2022	0.605	0.650	0.595	0.671

Step 2: Determine the input and output variables

Input Variables (X): Income – Education – Healthcare – Basic Needs

Output Variable (Y): Poverty Line

Step 3: For the fuzzy Super SBM model, we aim to minimize the output variable (Poverty Line) by considering the input variables (Income, Education, Healthcare, and Basic Needs) and their corresponding slacks. The objective is to find the optimal weights (λ) for each input variable that maximize the output variable [9]. The fuzzy linear programming model can be formulated as follows;

$$\delta^* = \min_{\bar{x}, \bar{y}, \lambda} \frac{(1/m) \sum_{i=1}^m (\bar{x}_i / x_{io})}{(1/s) \sum_{r=1}^s (\bar{y}_r / y_{ro})}$$

St.

$$\bar{x}_i \geq \sum_{j=1, j \neq o}^n x_{ij} \lambda_j \quad (i = 1, \dots, m),$$

$$\bar{y}_r \leq \sum_{j=1, j \neq o}^n y_{rj} \lambda_j \quad (r = 1, \dots, s),$$

$$\bar{x} \geq x_o, \quad \bar{y} \leq y_o, \quad \bar{y} \geq 0, \quad \lambda \geq 0.$$

Where;

m = input coefficient factor

- s = output coefficient factor
- \bar{x}_j = Normalized value of input variable j
- \bar{y}_r = Output variable (Poverty Line)
- λ_j = Weight for input variable i
- X_j^- = Lower bound of input variable j
- X_j^+ = Upper bound of input variable j

For simplicity, let's assume the lower bounds are all set to zero and the upper bounds are all set to one. Substitute the values into the formula;

$$\text{Maximize } Y_{2020} = \lambda_{\text{Income}} * (0.557 - 0) / 1 + \lambda_{\text{Education}} * (0.509 - 0) / 1 + \lambda_{\text{Healthcare}} * (0.560 - 0) / 1 + \lambda_{\text{Basic Needs}} * (0.487 - 0) / 1$$

St.

$$\lambda_{\text{Income}} + \lambda_{\text{Education}} + \lambda_{\text{Healthcare}} + \lambda_{\text{Basic Needs}} = 1$$

$$\lambda_{\text{Income}} + \lambda_{\text{Education}} + \lambda_{\text{Healthcare}} + \lambda_{\text{Basic Needs}} = Y$$

This formulation represents the fuzzy linear programming model that aims to find the optimal weights for each input variable to maximize the output variable (Poverty Line) while considering the slacks and normalized values of the input variables. The actual solution involves solving this model iteratively using the SBM method to determine the optimal weights that define the poverty line based on the given data and constraints.

Step 4: Solve the model using the SBM method. At the first, we need to calculate the slacks for each input variable and then determine the (λ) for each variable through **1-normalize data**.

4-1. Calculate the slacks for each input variable. The slack for each input variable can be calculated using the normalized values provided earlier (2020) as follows;

- Normalized Income = 0.557 → Slack = 1 - 0.557 = 0.443
- Normalized Education = 0.509 → Slack = 1 - 0.509 = 0.491
- Normalized Healthcare = 0.560 → Slack = 1 - 0.560 = 0.440
- Normalized Basic Needs = 0.487 → Slack = 1 - 0.487 = 0.513

Table 3. Slacks Years	Income	Education	Healthy care	Basic needs
2020	0.443	0.491	0.440	0.513
2021	0.431	0.436	0.424	0.441
2022	0.395	0.350	0.405	0.329

4-2. Calculate the weights for each input variable. Let's assume we have calculated the weights for each input variable as follows;

$$\lambda_{\text{Income}} = \text{Slack-2020}_{\text{Income}} / \Sigma \text{Slacks} = 0.443 / (0.443 + 0.491 + 0.440 + 0.513) = 0.235$$

$$\lambda_{\text{Income}} = \text{Slack-2021}_{\text{Income}} / \Sigma \text{Slacks} = 0.431 / (0.431 + 0.436 + 0.424 + 0.441) = 0.249$$

$$\lambda_{\text{Income}} = \text{Slack-2022}_{\text{Income}} / \Sigma \text{Slacks} = 0.395 / (0.395 + 0.350 + 0.405 + 0.329) = 0.267,$$

⋮

$$\lambda_{\text{Education}} = \text{Slacks}_{\text{Education}} / \Sigma \text{Slacks} = \dots (2020-2022)$$

$$\lambda_{\text{Healthcare}} = \text{Slacks}_{\text{Healthcare}} / \Sigma \text{Slacks} = \dots (2020-2022)$$

⋮

$$\lambda_{\text{Basic Needs}} = \text{Slacks-2022}_{\text{Basic Needs}} / \Sigma \text{Slacks} = 0.329 / (0.395 + 0.350 + 0.405 + 0.329) = 0.222,$$

Table 4. Weights

Years	Income	Education	Healthy care	Basic needs
2020	0.235	0.260	0.233	0.272
2021	0.249	0.252	0.245	0.255

2022	0.267	0.237	0.274	0.222
-------------	-------	-------	-------	-------

After calculating the weights for each input variable, we can determine the poverty line (Y) based on these weights and normalized values of the input variables. To determine the poverty line (Y) based on the above calculation, we need to follow;

4-3. Substitute the weights and normalized values of the input variables into the formula;

$$Y = \lambda_{\text{Income}} * (\text{Norm. Income}) + \lambda_{\text{Education}} * (\text{Norm. Education}) + \lambda_{\text{Healthcare}} * (\text{Norm. Healthcare}) + \lambda_{\text{Basic Needs}} * (\text{Norm. Basic Needs}),$$

$$Y_{2020} = (0.235 * 0.557) + (0.260 * 0.509) + (0.233 * 0.560) + (0.272 * 0.487)$$

$$Y_{2020} = 0.131 + 0.132 + 0.131 + 0.133$$

$$Y_{2020} = \mathbf{0.527}$$

$$Y_{2021} = (0.249 * 0.569) + (0.252 * 0.564) + (0.245 * 0.576) + (0.255 * 0.559)$$

$$Y_{2021} = 0.142 + 0.142 + 0.141 + 0.143$$

$$Y_{2021} = \mathbf{0.568}$$

$$Y_{2022} = (0.267 * 0.605) + (0.237 * 0.650) + (0.274 * 0.595) + (0.222 * 0.671)$$

$$Y_{2022} = 0.162 + 0.154 + 0.163 + 0.149$$

$$Y_{2022} = \mathbf{0.628}$$

Therefore, based on the calculated weights for each input variable and the normalized values of the input variables, the poverty line (Y) is determined to be 0.527, 0.568, and 0.628 from 2020 up to 2022 respectively.

Poverty threshold calculations have numerous applications in poverty alleviation efforts and policy-making. By establishing clear and objective poverty thresholds, policymakers can accurately identify individuals and households living below the poverty line, enabling targeted interventions to reach those most in need. These thresholds also serve as a benchmark for measuring progress towards poverty reduction goals, evaluating the impact of social programs, and monitoring changes in poverty levels over time. Additionally, poverty threshold calculations help in the allocation of resources and prioritization of interventions, ensuring that limited resources are directed towards areas with the highest levels of need. Overall, poverty threshold calculations play a crucial role in guiding evidence-based decision-making and shaping effective strategies for combating poverty and promoting inclusive development.

POVERTY LIMITS CALCULATION

Because transfer of poverty line to poverty threshold, we must calculate the upper limit and lower limit to make a bound. To calculate the upper and lower limits for the poverty line using the SBM (Slack-Based Method) approach, we need to use the weights (λ) for each input variable that we calculated earlier. The upper and lower limits will help in defining a range within which the poverty line can vary based on the sensitivity of the input variables. Here's how you can calculate the upper and lower limits in detail [10];

1. Define the formula for calculating the upper and lower limits:

The upper limit (UL) and lower limit (LL) for the poverty line can be calculated using the following formulas;

$$- \text{UL} = \text{Poverty Line} + (\lambda_{\text{max}} * \text{Sum of Slacks})$$

$$- \text{LL} = \text{Poverty Line} - (\lambda_{\text{min}} * \text{Sum of Slacks})$$

2. Determine the maximum and minimum weights (λ) among all input variables;

$$- \text{Maximum weight } (\lambda_{\text{max}}) = \max (\lambda_{\text{Income}}, \lambda_{\text{Education}}, \lambda_{\text{Healthcare}}, \lambda_{\text{Basic Needs}})$$

$$- \text{Minimum weight } (\lambda_{\text{min}}) = \min (\lambda_{\text{Income}}, \lambda_{\text{Education}}, \lambda_{\text{Healthcare}}, \lambda_{\text{Basic Needs}})$$

3. Calculate the upper and lower limits for the poverty line;

- UL 2020 = 0.527 + (0.272 * 1.888) ≈ 0.527 + 0.514 ≈ **1.041**

- LL 2020 = 0.527 - (0.233 * 1.888) ≈ 0.527 - 0.440 ≈ **0.087**

Bound width: **0.954**

- UL 2021 = 0.568 + (0.255 * 1.732) ≈ 0.568 + 0.442 ≈ **1.010**

- LL 2021 = 0.568 - (0.245 * 1.732) ≈ 0.568 - 0.424 ≈ **0.144**

Bound width: **0.866**

- UL 2022 = 0.628 + (0.274 * 1.478) ≈ 0.628 + 0.405 ≈ **1.033**

- LL 2022 = 0.628 - (0.222 * 1.478) ≈ 0.628 - 0.328 ≈ **0.300**

Bound width: **0.733**

Bandwidth is considered an indicator of the intensity of poverty development or its slowness. In addition to the increase in the amount of poverty, which indicates the penetration of poverty into the upper classes of society, the intensity of poverty shows the speed and depth of the development of poverty. The poverty bandwidth will be a professional and practical indicator for those responsible for fighting poverty in any society.

Author proposed a new heuristic bound width date group as follow formula;

$$UL = \left(\sum_{i=1}^n x_i / n \right) + \sqrt[3]{Max(x_i) - Min(x_i)}$$

$$LL = \left(\sum_{i=1}^n x_i / n \right) - \sqrt[3]{Max(x_i) - Min(x_i)}$$

Poverty threshold with above formula from 2020 up to 2022 calculated as follow;

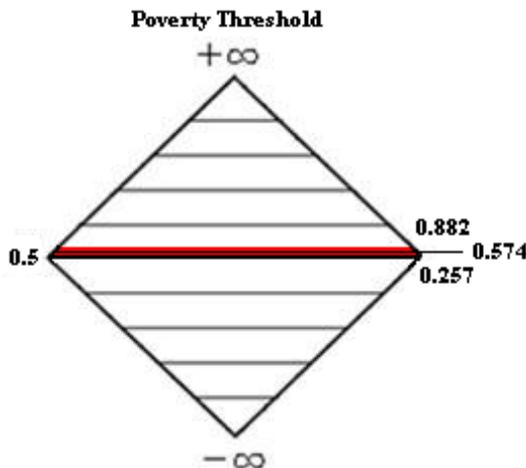
Where;

$\Sigma x_i/n = 0.574$, $Max x_i - Min x_i = 0.101$ and $\sqrt[3]{(Max x_i - Min x_i)} \approx 0.318$

So, UL = 0.574 + 0.318 = 0.882 and LL = 0.574 - 0.318 = 0.257

Also, Author proposed a new heuristic Poverty Threshold shape as follow;

Fig.1: Poverty Threshold



Poverty limits calculation and poverty bound width are important tools used in poverty forecasting to estimate the range of potential poverty levels within a given population. These calculations are crucial for setting realistic targets, monitoring progress, and evaluating the effectiveness of poverty alleviation efforts. By determining poverty limits, policymakers can establish thresholds for measuring poverty reduction goals and identifying areas where interventions are most needed. Additionally, understanding the poverty bound width helps policymakers assess the uncertainty in poverty forecasts and make informed decisions on resource allocation and program implementation. These tools

provide valuable insights into the dynamics of poverty and enable stakeholders to develop evidence-based strategies for addressing the root causes of poverty and promoting sustainable development.

POVERTY THRESHOLD FORECASTING

To forecast the poverty line for the fourth, fifth, and sixth years based on the given data for the first three years (0.527, 0.568, and 0.628), we can use various methods such as simple linear regression, exponential smoothing, or time series analysis. In this case, I will demonstrate how to use a simple linear regression model to forecast the poverty line for the next three years [11].

Step 1: Calculate the Average Annual Growth Rate

First, we need to calculate the average annual growth rate based on the data for the first three years. Average Annual Growth Rate (AAGR) = [(Ending Value / Beginning Value) ^ (1 / Number of Years)] – 1

- Beginning Value (Year 1): 0.527
- Ending Value (Year 3): 0.628
- Number of Years: 3

$AAGR = [(0.628 / 0.527) ^ (1 / 3)] - 1 = [(1.1917) ^ (0.3333)] - 1 = 0.09$ or 9%

Step 2: Forecasting Poverty Line for Years 4, 5, and 6 using Linear Regression

Now that we have the average annual growth rate, we can use a simple linear regression model to forecast the poverty line for the next three years. The formula for forecasting the poverty line using linear regression is;

Forecasted Value = Previous Value + (Previous Value * AAGR)

For Year 4- 6 respectively;

Forecasted Value (Year 4) = 0.628 + (0.628 * 0.09) = 0.628 + 0.05652 ≈ **0.685**

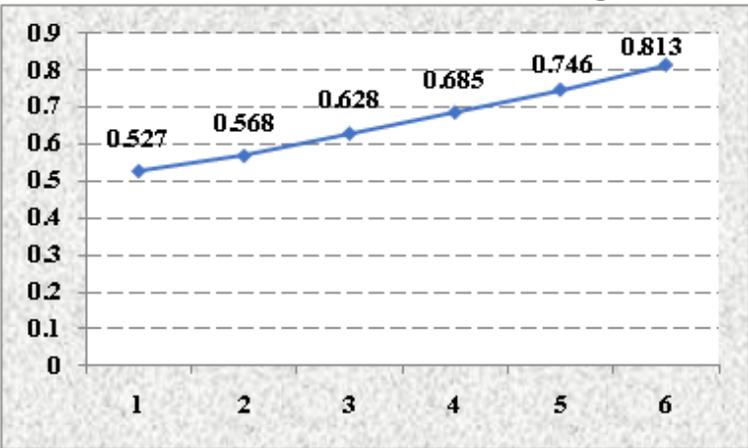
Forecasted Value (Year 5) = 0.68452 + (0.68452 * 0.09) = 0.68452 + 0.06161 ≈ **0.746**

Forecasted Value (Year 6) = 0.74613 + (0.74613 * 0.09) = 0.74613 + 0.06715 = ≈

0.813

These values are based on the assumption of a linear growth pattern determined by the calculated average annual growth rate of 9%.

Diagram 1. Poverty line forecasting



Last result of this paper is diagnostic of poverty as progressive because average annual growth rate of 9% and poverty rate from 2020 up to 2022.

Poverty forecasting plays a crucial role in informing policy decisions and designing targeted interventions to address the needs of vulnerable populations. By accurately predicting changes in poverty levels over time, policymakers can proactively allocate

resources, implement effective social programs, and monitor the impact of interventions. For example, governments can use poverty forecasts to adjust social welfare programs, such as cash transfer schemes or food assistance programs, to reach those most in need. Additionally, businesses and non-profit organizations can leverage poverty forecasts to tailor their services and products to cater to low-income populations. By incorporating poverty forecasting into decision-making processes, stakeholders can work towards reducing poverty, promoting economic development, and fostering social inclusion.

CONCLUSION

In this article, we have explored the intricate process of calculating the poverty line using the Slack Base method for the years 2020-2022, which resulted in values of 0.527, 0.568, and 0.628 respectively. The poverty line serves as a crucial benchmark for identifying individuals or households living below the poverty threshold, enabling policymakers to target interventions effectively.

Furthermore, we have delved into the forecasting of poverty levels through the Annual Average Growth Rate (AAGR) method for the same period, yielding values of 1.041-0.087, 1.010-0.144, and 1.033-0.300. By analyzing historical trends and projecting future growth rates, policymakers can anticipate changes in poverty levels and plan sustainable interventions accordingly.

Additionally, we have discussed the concept of progressive poverty, with values of 0.685, 0.746, and 0.813 projected for the years 2023-2025. Progressive poverty takes into account the dynamic nature of poverty and provides a nuanced understanding of poverty dynamics over time, enabling policymakers to tailor interventions to address specific challenges faced by vulnerable populations.

One of the key innovations presented in this article is the construction of the poverty intensity index based on changes in the poverty bandwidth, with values of 0.954, 0.866, and 0.733 observed. This index offers a comprehensive view of poverty dynamics by capturing variations in the depth and severity of poverty as it increases, resulting in a decrease in the bound width.

In conclusion, based on the data and quantities presented in this article, we propose three key recommendations for policymakers:

1. Utilize the Slack Base method and AAGR forecasting to continuously monitor and update poverty lines and thresholds to ensure accurate targeting of interventions.
2. Incorporate the concept of progressive poverty in policy planning to address the evolving needs of vulnerable populations and implement targeted strategies to alleviate poverty sustainably.
3. Leverage the poverty intensity index to gain deeper insights into the changing nature of poverty, adjust intervention strategies to effectively combat poverty, and promote inclusive development.

By following these recommendations and leveraging data-driven approaches, policymakers can make informed decisions and design effective interventions to combat poverty and create a more equitable society for all individuals and communities.

**REVIEWER: Saidzoda I.M.,
Candidate of Technical Sciences**

REFERENCES

1. Tone, K. A slacks-based measure of efficiency in data envelopment analysis/European Journal of Operational Research, 2001. 130(3). – Pp.498-509.
2. Cooper, W.W., ET. Al. Data envelopment analysis: History, models, and interpretations/ Handbook on data envelopment analysis, Springer, 2007. – Pp. 1-39.
3. Cancian, M., W. W., ET. Al. Changing poverty, changing policies, Russell Sage Foundation, (2009).
4. Emrouznejad, A., W. W., ET. Al. A survey and analysis of the first-order SBM-DEA models. Omega, 2018, 80. – Pp. 274-284.

5. Ravallion, M. The economics of poverty: History, measurement, and policy/ Oxford University Press. 2016.
6. Brady, D., W. W., ET. Al. The Oxford Handbook of the Social Science of Poverty/Oxford University Press, 2018
7. Deaton, A. The analysis of household surveys: A micro-econometric approach to development policy/ World Bank Publications, 1997.
8. Asgharpour, M. J. Multiple Criteria Decision Making. - Tehran University Publication, 1998. ISBN 96-4-03-9320-7. – P.194.
9. Fodor, J. Fuzzy preference modeling and multi-criteria Decision-Support. - Kluwer Academic publication, 1995
10. Chen, S. J., ET. Al. Fuzzy Multiple Attribute decision-making/ Springer- verlag, 1992.
11. Lai Hwang, Ching, ET. Al. Multi Objective Decision-making-methods and Applications/Springer- verlag. – Berlin Heidelberg, 1979
12. Goedhart, Th., ET. Al, the Poverty Line: Concept and Measurement, *Journal of Human Resources*, | Th., ET. AL Goedhart II Vol. 12, (1977) . – Pp.503-520.
13. Kapteyn, A., ET. Al, Family Composition and Family Welfare, in: Simon, J. and J. DaVanzo (eds), Research in Population Economics, 11, JAI-Press, Greenwich, \ A., ET. Al \ (1980). – Pp.77-97.
14. Jasso, G., Et Al, Distributive Justice and Earned Income, American Sociological Review \ G. Jasso \ 1977. Vol.42. – Pp.639-651.
15. Wu, D. D., ET. All..A comparison of three methods for selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code/Journal of Statistical Computer Simulation, 2002. 72 (2). – Pp.119–139

ХАТТИ КАМБИЗОАТӢ, ҲАДДИ КАМБИЗОАТӢ, ПЕШГУӢИИ КАМБИЗОАТӢ, УСУЛҶО

Муаллиф дар ин мақола ба камбизоатӣ ва оқибатҳои он таваҷҷӯҳ кардааст. Усули SBM барои ҳисоб кардани ҳадди ниҳии камбизоатӣ истифода шуд, ки барои муайян кардани ҳадди болоӣ ва поёнии камбизоатӣ ва пешгуӣи сатҳи камбизоатӣ барои се соли оянда кумак кард. Сабтҳо дар маҷмуаи маълумот даромад, маориф, тандурустӣ ва эҳтиёҷоти асосиро аз соли 2020 то 2022 дар бар мегиранд. Ин маълумотҳои воридотӣ барои ҳисоб кардани ҳадди ниҳии камбизоатӣ истифода шуданд. Қадамҳои халли мушкилот иборатанд аз тақсими маҷмуи маълумот, дарёфти камбудихо, ҳисоб кардани вазноҳои тағйирёбанда ва сипас ҳисоб кардани камбизоатӣ бо истифода аз $Y = \lambda$ Даромад * (Даромади муқаррарӣ) + ... + λ Эҳтиёҷоти асосӣ (Эҳтиёҷоти муқаррарӣ асосӣ). Ҳатти камбизоатӣ (Y) аз соли 2020 то 2022 мутаносибан 0,527, 0,568 ва 0,628 муқаррар шудааст. Қисми навбатӣ ба ҳисоб кардани меъёрҳои камбизоатӣ бахшида шуд. Меъёрҳои болоӣ (UL) ҳамчун "Ҳатти камбизоатӣ + (λ макс * Маблағи захираҳо)" ва Лимитҳои поёнӣ (LL) ҳамчун "Ҳатти камбизоатӣ - (λ min * Маблағи захираҳо)" ҳисоб карда шуданд. Натиҷаҳо аз соли 2020 то 2022 мутаносибан 1,041, 0,087, 1,010, 0,144 ва 1,033, 0,300 буданд. Навоварӣ дар ин марҳила дарёфти иқтисодии интиқол ҳамчун нишондиҳандаи шиддатнокии камбизоатӣ буд. Ниҳоят, марҳилаи охири ба пешгуӣи ҳадди ақалли камбизоатӣ бахшида шуд. Суръати миёнаи солони афзоиш (AAGR) барои ҳисоб кардани коэффисиенти афзоишдаи хати регрессионӣ бо формулаи $[(\text{Арзиши ниҳой} / \text{Арзиши ибтидоӣ})^{(1 / \text{Шумораи солҳо})} - 1]$ истифода шуда, 0,09 ё 9% муайян карда шуд. Дар ин марҳила сатҳи камбизоатӣ барои солҳои 2023-2025 дар сатҳи 0,685, 0,746 ва 0,813 пешбинӣ шуда буд. Камбизоатие, ки дар ин марҳила таҳис шудааст, прогрессивӣ буд.

Калидвожаҳо: усули дар асоси камбудихо, пахноӣ маълумот, меъёри миёнаи солони афзоиш (AAGR)

ЧЕРТА БЕДНОСТИ, ПОРОГ БЕДНОСТИ, ПРОГНОЗИРОВАНИЕ БЕДНОСТИ, МЕТОДЫ

В данной статье автор акцентирует внимание на бедности и ее последствиях. Метод SBM использовался для расчета порога бедности, который помог определить верхнюю и нижнюю границы бедности и спрогнозировать уровень бедности на ближайшие три года. Записи набора данных включали доходы, образование, здравоохранение и основные потребности с 2020 по 2022 год. Эти входные данные использовались для расчета порога бедности. Шаги по решению проблемы включали в себя обезразмеренные набора данных, поиск слабых мест, расчет переменных весов, а затем расчет бедности через $Y = \lambda$ Доход * (Норм. Доход) + ... + λ Основные потребности (Норм. Базовые потребности). Черта бедности (Y) была определена на уровне 0,527, 0,568 и 0,628 с 2020 по 2022 год соответственно. Следующая часть была посвящена расчету пределов бедности. Верхние пределы (UL) рассчитывались как «Черта бедности + (λ max * Сумма резервов)», а нижние пределы (LL) рассчитывались как «Черта бедности - (λ min * Сумма резервов)». Результаты с 2020 по 2022 год составили 1,041, 0,087, 1,010, 0,144 и 1,033, 0,300 соответственно. Нововведение на этом этапе заключалось в том, чтобы найти пропускную способность как индикатор интенсивности бедности. Наконец, последний этап был посвящен прогнозированию порога бедности. Среднегодовой темп роста (AAGR) использовался для расчета повышающего коэффициента линии регрессии по формуле $[(\text{Конечное значение} / \text{Начальное значение})^{(1 / \text{Количество лет})} - 1]$ и оказался равным 0,09 или

9%. На этом этапе прогнозировались уровни бедности на 2023-2025 годы на уровне 0,685, 0,746 и 0,813. Бедность, диагностированная на этом этапе, носила прогрессирующий характер.

Ключевые слова: метод на основе Slack, привязка к данным, среднегодовой темп роста (AAGR)

POVERTY LINE, POVERTY THRESHOLD, POVERTY FORECASTING, METHODS

In this article, the author focuses on poverty and its consequences. The SBM method was used to calculate the poverty threshold, which helped to determine the upper and lower limits of poverty and forecast the poverty rate for the next three years. The data set entries included income, education, healthcare, and basic needs from 2020 to 2022. These inputs were used to calculate the poverty threshold. The problem-solving steps included making the dataset dimensionless, finding slacks, calculating variable weights, and then calculating poverty through $Y = \lambda_{Income} * (Norm. Income) + \dots + \lambda_{Basic Needs} (Norm. Basic Needs)$. The poverty lines (Y) were determined to be 0.527, 0.568, and 0.628 from 2020 to 2022, respectively. The next part focused on calculating the poverty limits. The upper limits (UL) were calculated as “Poverty Line + ($\lambda_{max} * \text{Sum of Slacks}$)” and the lower limits (LL) were calculated as “Poverty Line - ($\lambda_{min} * \text{Sum of Slacks}$).” The results from 2020 to 2022 were 1.041, 0.087, 1.010, 0.144, and 1.033, 0.300, respectively. The innovation at this stage was to find bandwidth as an indicator of the intensity of poverty. Finally, the last stage focused on forecasting the Poverty threshold. The average annual growth rate (AAGR) was used to calculate the increasing coefficient of the regression line through $[(Ending Value / Beginning Value)^{(1 / Number of Years)} - 1]$ formula and found to be 0.09 or 9%. By this stage, 0.685, 0.746, and 0.813 were forecasted as the poverty rates for the years 2023-2025. The kind of poverty diagnosed at this stage was progressive.

Key words: Slack Based Method, Data bound, Average Annual Growth Rate (AAGR)

Маълумот дар бораи муаллиф: Пежмон Джафари - Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, докторант. Сурога: 734025, ш. Душанбе, Тоҷикистон, хиёбони Рӯдакӣ, 17. **Телефон:** (+992)001016655. **E-mail:** jafaripejman3@gmail.com.

Сведения об авторе: Пежман Джафари-Таджикский национальный университет, докторант. **Адрес:** 734025, г. Душанбе, Таджикистан, проспект Рудаки, 17. **Телефон:** (+992)001016655. **E-mail:** jafaripejman3@gmail.com.

Information about the author: Pejman Jafari – Tajik National University, post-doctoral. **Address:** 734025, Dushanbe, Tajikistan, Rudaki Ave., 17. **Phone:** (+992)001016655. **E-mail:** jafaripejman3@gmail.com.

Article received 12.10.2023

Approved after review 24.12.2023

Accepted for publication 15.04.2024

UDC: 531.42

CAUSAL PHYSICS: CROSS-SECTIONAL AREA INSTEAD OF MASS

Rajabov T.M.

Tajik National University

The issue under consideration requires some philosophical digression. From a philosophical point of view, establishing the cause in the origin of phenomena and processes is an important part of logical thinking in establishing scientific and other truth. However, it should be recognized that at present the principle of causation, as a universal principle in the logical connection of things and phenomena and the most important mechanism of cognition, has lost its relevance within the causal field of thought itself - in physical science, within which all processes and phenomena should be considered in close interrelation. We are talking about the methodological basis of modern physics. Modern physics, using the example of special and general relativity, quantum physics and other approaches, has become predominantly mathematical, with abstract propositions and a postulative character. The methodological basis of modern physics is devoid of visual representations. This is how it differs from traditional classical physics, which has been developing for more than three centuries with visual representations that meet the conditions of the principle of causation.

Modern physics has created concepts that do not fit within the framework of human perception. There are difficulties in interpreting quantum physics [1-4]. The abstractness of representations within its framework is a consequence of its probabilistic nature, which a priori implies problems in its interpretation. It is another matter when it comes to representations within the framework of relativity theories [5-8]. Within their framework, unusual concepts were introduced, such as space-time relationship, relativity of mass, time, size of objects and much more. Clarity has been lost in determining one of the important physical quantities - mass.

Meanwhile, the lack of clarity regarding the fundamental issues of physical theory – the mechanism of physical interaction, the question of gravitational shielding, the unified field theory, the question of the luminiferous ether, the nature of the force of inertia and other issues related to them, again and again creates the need to return to the initial positions in order to try to create an acceptable physical picture of the phenomena. This work is devoted to demonstrating the presence of unrealized arguments and possibilities within the framework of traditional causal physics to obtain results, including new ones. Taking into account previously unaccounted-for circumstances, an acceptable physical picture is proposed regarding fundamental questions of physics that are somehow related to mass.

In the classical view, the gravitational interaction is associated with mass, in the framework of Newton's theory [9], and with size, in the framework of the kinetic theory of Le Sage [10]. The size factor is an important characteristic of objects in their physical existence and manifestation of properties. However, within the framework of the new physics, this factor is not considered as such, which causes inevitable problems. It can be shown that in the description of physical phenomena, the size factor, as a quantitative characteristic of an object, is a more fundamental quantity compared to mass, and mass is only a special case of its manifestation.

2. The evolution of the concept of mass. For thousands of years, mass has been a quantity characterizing the amount of matter. From the early stages of the development of scientific ideas, it entered science as such. The discovery of the laws of mechanics by Newton revealed the property of inertia of mass. Mass is included in the equations of accelerated motion and gravitational interaction

$$F_a = ma \quad (1)$$

$$F_g = G \frac{m_1 m_2}{r^2}. \quad (2)$$

In expressions (1) and (2), F_a is the force acting on the body, m is the mass of the body, a is acceleration, F_g is the force of gravitational interaction, m_1 and m_2 are the masses of interacting bodies, r is the distance between them, G is the gravitational constant.

The mass began to differ into gravitational and inert. Experiments have shown that they have almost identical values.

The study of the properties of the atomic nucleus has discovered a new phenomenon related to mass - a mass defect, which is described by the expression

$$\Delta M = M_p + M_n - M, \quad (3)$$

where M is the mass of the atomic nucleus, M_p and M_n are the mass of protons and the mass of neutrons in the atomic nucleus, respectively.

With the advent of new concepts since the beginning of the 20th century, within the framework of the special theory of relativity (SRT), two more properties have been added to mass - the relativity of mass and the equivalence of mass and energy. The relativity of mass is represented by the dependence of the mass of a body on its kinematic state: mass can grow when the speed of the body approaches the value of the speed of light in a vacuum, and there is no limit to growth. The concepts of rest mass and relativistic mass appeared. For the relativistic mass, a dependence is proposed in the form

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \quad (4)$$

where m_0 is the mass of a body in its own coordinate system, which is called the rest mass, v is the velocity of a body relative to a stationary coordinate system, c is the speed of light in a vacuum.

For the equivalence of mass and energy, the expression is proposed

$$E = mc^2. \quad (5)$$

Thus, the properties of inertia of mass, the phenomenon of mass defect and relativistic properties of mass were added to the primary idea of mass as a quantity of matter. If the properties of mass inertia and mass defect are considered by specialists within the framework of reality, then the idea of mass within the SRT causes their ambiguous opinion. Many works are devoted to the criticism of the SRT. The mathematical and logical inconsistency of the foundations of SRT is shown in one of the latest works [11]. It is shown that the principle of interval invariance, accepted as the basic position of SRT, is incorrect and has nothing to do with the reality of physical phenomena and states. It is shown that expression (5) can be obtained in an alternative way within the framework of the classical approach.

With the discovery of new properties, mass has ceased to be considered as a measure of the amount of matter. There is a need to find out what the mass is and how it is related to the amount of matter? The fact that in certain cases mass can be considered as a measure of the amount of matter is true and indicates that mass is a special case of another physical quantity that needs to be determined.

3. Mass, as the area of impact on an object. A new idea of mass was proposed in [12]. In this work, within the framework of traditional causal physics, mass-area equivalence is proposed in the form

$$m = kS, \quad (6)$$

where S is the cross-sectional area of a physical object (elementary mass-forming particles - nucleons and systems consisting of them are considered in this work by physical objects), k is the proportionality coefficient.

The rationale and method of obtaining expression (6) can be considered in the concepts of the effect of ether particles on physical bodies. Suppose that as a result of the external action of force F , the body receives acceleration a (Fig.1). The relative velocity of ether particles relative to the body varies from opposite sides along the direction of motion. The body experiences additional pressure against movement from the particles of segment Δl_2 , and a decrease in pressure from behind by the same amount. A resistance force arises, the magnitude of which determines the acceleration of the body.

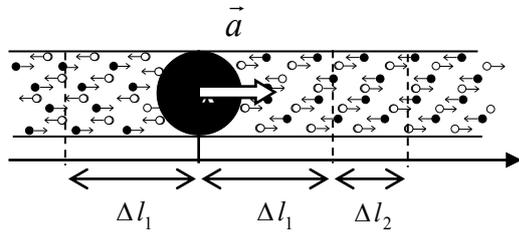


Fig.1. The picture of the accelerated movement of the physical body and the increase in pressure on it from the ether particles against the direction of movement

replaced by a physical quantity proportional to its cross-sectional area. This substitution represents a transition from one quantitative characteristic of an object to another – from mass to size. This transition is dictated by the mechanism of interaction in accordance with the kinetic theory of gravity of Le Sage, where the main argument for interaction is the size of interacting objects. It is shown in [12-15] that this transition makes it possible to describe many physical phenomena more broadly and on a causal basis.

In expression (6), S represents the effective area of interaction of a physical object. If there is a system of two objects with cross-sectional areas S_1 and S_2 and an area of mutual overlap ΔS (Fig.2), then the effective area of interaction of such a system is determined by the ratio

$$S = S_1 + S_2 - \Delta S. \quad (8)$$

For the effective area of interaction of a system of N identical spherical elements located at a certain distance from each other, a mathematical expression is proposed in the form:

$$S = S_b \left[1 - \left(1 - \frac{S_l}{S_b} \right)^N \right]. \quad (9)$$

In this expression, S_l is the cross-sectional area of one element, S_b is the area of the base of the cube, in the center of which there is one interaction element.

The nature of the dependence of S on the number of interaction elements N in expression (9) is shown in Fig.3.

The acceleration of a body is recorded as a consequence of the action of force F according to Newton's second law $a = \frac{F}{m}$, on the one hand, and as a consequence of the pressure difference on the object from opposite sides $a \sim \Delta p$, according to Le Sage's representation, on the other. the other hand. Expressing Δp by definition $\Delta p = \frac{F}{S}$, where S is the cross-sectional area of the object, we can write

$$\frac{F}{S} = k \frac{F}{m} \quad (7)$$

where k is the proportionality coefficient.

From this expression we get $m = kS$.

In expression (6), the mass of an object is

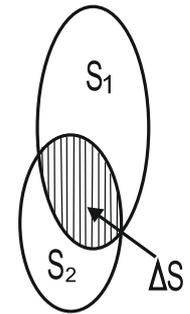


Fig. 2. Mutual spatial overlap of two bodies

It is known that mass, as an argument, appears both in the description of the gravitational and in the description of the nuclear interaction, which indirectly indicates the presence of a commonality between these interactions. It is shown in [15] that gravitational and nuclear interactions have a single mechanism and a common nature. It is shown that expression (9) is applicable both to describe the macrocosm and to describe the microcosm. In the representations of mutual shielding of interaction elements, the gravitational and nuclear interactions differ in the values of the mutual shielding parameter $\delta = \frac{S_l}{S_b}$ in expression (9). At $\delta \geq 1$, expression (9) describes the close mutual shielding, which is typical for the mutual shielding of nucleons in the atomic nucleus. At $\delta \ll 1$, it describes far shielding, which is the mutual shielding of atomic nuclei in ordinary substances.

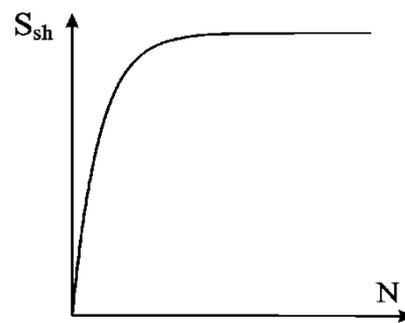


Fig. 3. A general view of the area of mutual shielding of interacting elements, depending on the number of shielding elements

4. Mass in the gravitational interaction. Newton's law of universal gravitation in terms of mass-area equivalence is written as:

$$F = G' \frac{S_1 S_2}{r^2}. \quad (10)$$

The areas S_1 and S_2 in expression (10) represent the effective areas of interaction of celestial bodies. G' is the areal constant of the gravitational interaction. In general, the areas S_1 and S_2 are defined by the expression

$$S = S_a \left[1 - \left(1 - \frac{S_n}{S_a} \right)^N \right], \quad (11)$$

where $S_a = r_a^2$, in which r is the radius of the atom, S_n is the cross-sectional area of the atomic nucleus, N is the value associated with the number of atomic nuclei in the object.

The work [12] was carried out in the development of the kinetic theory of Le Sage, taking into account the size and relative position of elementary mass-forming elements for ordinary substances - atomic nuclei. The gravitational interaction is presented as a result of mutual shielding of atomic nuclei in the path of ether particles.

The mutual shielding of atomic nuclei in the path of ether particles leads to the phenomenon of gravitational shielding. Gravitational shielding is a mass defect for the macrocosm. In [12-15], based on the mechanism of mutual shielding of objects, the results are presented that justify the presence of gravitational shielding for massive celestial bodies.

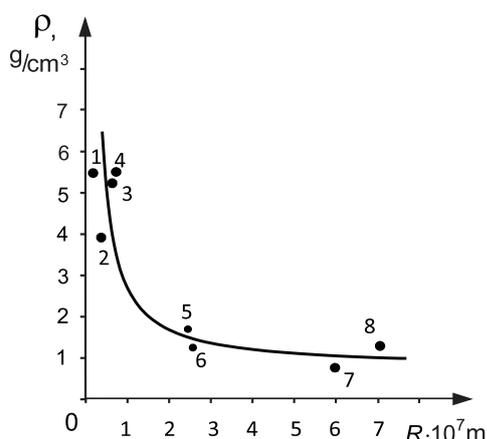


Fig.4. The density of the planets of the Solar system depending on their size: 1 -Mercury, 2 - Mars, 3 - Venus, 4 - Earth, 5 - Uranus, 6 - Neptune, 7 - Saturn, 8 - Jupiter.

The use of expression (10) made it possible to establish the manifestation of gravitational shielding depending on the size of celestial bodies. Due to the small size of the shielding elements - atomic nuclei and the large distance between them in comparison with their size, gravitational shielding is manifested for celestial bodies with a sufficiently large size. Ordinary bodies are quite transparent to the passage of tiny particles through them. This explains the passage of neutrinos through massive celestial objects. It has been established that the Moon is not capable of gravitational shielding due to its insufficient size, the Earth, as a planet, shields gravitational effects, depending on its thickness up to 50%. Giant planets shield from gravitational influence by 100%.

The presence of gravitational shielding leads to the conclusion that there is a hidden mass in massive celestial bodies: due to the shielding of one part of their remaining parts, not all the substance of the object participates in gravitational interaction. As a result, calculations to determine the mass and density of massive celestial bodies by gravitational interaction result in underestimated values. It turns out a dependence where a smaller density value will correspond to the larger sizes of celestial bodies, which is confirmed for the planets of the Solar system (Fig.4). The values obtained in this way for mass and density are not true. In the matter of determining the true values of the mass and density of giant planets, the impossibility of determining their solid surface creates difficulty. For these reasons, the statement that the giant planets are gaseous is not correct.

The presence of gravitational shielding provides an acceptable interpretation of a number of physical phenomena, such as the diurnal variation of gravity, precession of the perihelion of Mercury and features of tidal processes.

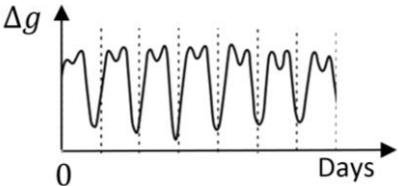


Fig. 5. A fragment of the curve of the daily variation of gravity with minima in the upper part of the maxima [16]

It is shown that the manifestation of semi-daily effects, which are reflected by small minima at the top of the maxima of the curve of the daily variation of gravity (Fig.5), is due to the manifestation of gravitational shielding from the Earth. These minima are manifested as a result of the weakening of the influence of the luminaries – the Sun and the Moon – by the factor of shielding the Earth in its equatorial part due to its greater thickness (Fig.6).

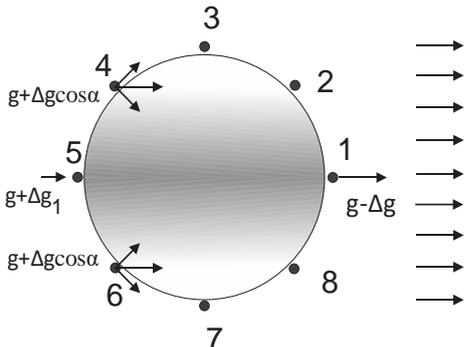


Fig. 6. The daily variation of vertical gravity depending on the gravitational structure of the Earth in the gravitational field of the star located on the right.

Regarding the peculiarities of the manifestation of tidal processes, it has been established that tidal forces are more peripheral in nature than volumetric. Due to the small thickness of the peripheral regions of the planet, the shielding factor in these areas is not significant (Fig.7). Consequently, the influence of the luminaries on the peripheral waters is greater than on the waters of the equatorial part. This factor provides a justification for the interpretation of the two-time manifestation of tides per day, as well as the factor of the six-hour delay of tidal processes.

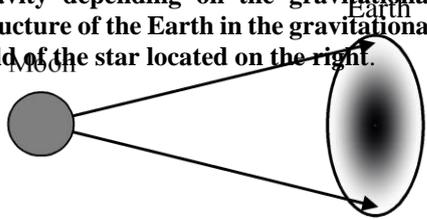


Fig. 7. Diagram of the gravitational effect of the Moon on the Earth's zones in the form of a cross-section of the Earth. The degree of gravitational shielding from the Earth is expressed by the degree of darkness in the figure

The presence of gravitational shielding indicates the cause of Mercury's perihelion precession. Mercury, as the smallest planet and located close to the Sun, when rotating around the Sun, regularly falls into the field of mutual shielding of large planets. Since the planets are located on the opposite side of the Sun, the effect of mutual shielding of large planets leads to a decrease in their impact on Mercury. As a result, the resulting force from the Sun becomes greater. This leads to precession of the perihelion of Mercury.

5. Mass in nuclear physics.

Mass defect. Nuclear interaction is also considered in the form of mutual shielding of mass-forming elements - nucleons in the path of motion of cosmic particles. The results are obtained using the dependence (1) in the form $M = kS_{nc}$, where M is the mass of the atomic nucleus, S_{nc} is the cross-sectional area of the nucleus, k is the proportionality coefficient.

In the representations of mass-area equivalence, the mutual spatial overlap of nucleons in the path of the movement of ether particles is a mass defect in the atomic nucleus. The mass defect is defined as a value proportional to the difference between the cross-sectional area of the atomic nucleus and the sum of the cross-sectional areas of the nucleons of the atomic nucleus

$$\Delta S = \sum S_p + \sum S_n - S_{nc}, \quad (12)$$

Using expression (1) allows to obtain an expression for the mass defect:

$$\Delta M = M_p + M_n - M. \quad (13)$$

In (13) M_p is the mass of all protons, M_n is the mass of all neutrons, M is the mass of the atomic nucleus.

The energy of communication. The expression for the binding energy is obtained from (2) using the expression for the mass-area equivalence (1).

$$E = mc^2[1 - (1 - \delta)^N]. \quad (14)$$

In this expression, the mutual shielding parameter $\delta \geq 1$. Roughly, we can assume that the parameter δ is the ratio of the square of the radius of the nucleon to the square of the distance between the nucleons.

The repulsive Coulomb force between protons increases with the number of protons, which increases the distance between the nucleons. The change in distance can be seen as a correction of μ multiplied by δ . At $\mu = e^{-0,02N}$ the theoretical curve will be coordinated with experimental.

$$E = mc^2[1 - (1 - \delta e^{-0,02N})^N]. \quad (15)$$

6. On gravitational and inert masses. As noted above, the acceleration of a body can be written as a result of the effect of force on the one hand, and as a result of the pressure difference on the body from opposite sides.

Within the framework of the above presentation, we can talk about the equality of gravitational and inert masses. Since mass is determined by the effective area of interaction - the size of a physical object, it remains unchanged, both in gravitational interaction and in accelerated motion. When moving with acceleration, the pressure on a physical object increases due to an increase in the velocity of the body to meet ether particles, but the size remains unchanged. Hence, the gravitational and inert masses are identical.

7. Additivity in determining mass.

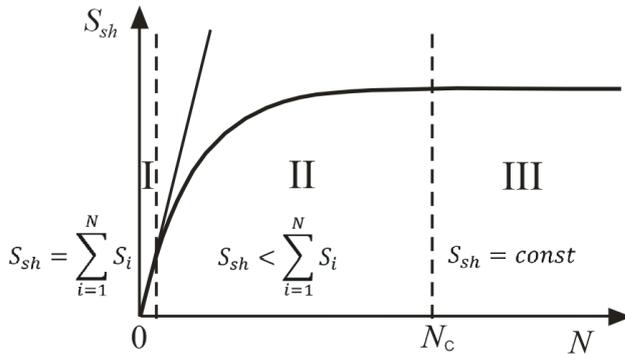


Fig.8. Areas of mutual shielding depending on the number of interaction elements

The mass of the system, considered in the form of expression (1) as a value depending on the mutual shielding of its elements, satisfies the principle of additivity only in the special case. The mutual shielding curve can be divided into three areas: I, II, III (Fig.8). In the initial region I, the curve has a linear character in a narrow range. There is no mutual shielding of elements in this area, the total area of interaction of the system is equal to the sum of the areas of interaction of individual elements $S =$

$\sum S_i$ and in accordance with expression (6) $M = \sum m_i$. The presence of mutual shielding of interaction elements corresponds to area II. In this area, the sum of the mass of the individual elements will be greater than the mass of the system: $M < \sum m_i$. In this case, there is a mass defect. The complete mutual overlap of the elements takes place in area III. In this area, $S = const$ and accordingly, $M = const$. This result leads to the conclusion that as the size of the

object increases, the amount of matter above the critical thickness remains hidden. In mass representations, the mass no longer increases with increasing thickness.

Based on this approach, it is possible to explain the difference in the calculated density of the planets of the Earth group and the giant planets by an average of 5 times. If all the elements of interaction – atomic nuclei at a critical thickness of the object would be in one layer and would not overlap each other, then the total area of interaction would exceed the area of interaction in the presence of mutual shielding by 5 times (Fig.9).

A violation of additivity occurs for the mass of the atomic nucleus, which is associated with the mutual spatial overlap of nucleons. For ordinary substances, mutual shielding of mass-forming elements – atomic nuclei occurs with a sufficiently large size of objects - massive celestial bodies. According to experimental data, the Moon does not exhibit gravitational shielding, the Earth in the equatorial part shields by about 50% [14]. The diameter of the Moon is 3 475 m, the diameter of the Earth is 12 742 m. From Figure 10, it is possible to estimate the maximum thickness of the object, up to which the principle of mass additivity is maintained. This is the linear part of the curve, which takes place up to a thickness of the order of $5 \cdot 10^6$ m. Up to these thicknesses, there is practically no mutual shielding of the interaction elements – atomic nuclei. In the field of chemical transformations, the condition of mass additivity is always fulfilled and mass remains a measure of the amount of matter.

In the case of ordinary substances, the mutual shielding parameter $\delta \sim 10^{-10}$

8. Mass and energy. In the framework of modern physics, the relationship between mass and energy is expressed by the relations

$$E = mc^2. \quad (16)$$

Taking into account the mass-area equivalence, expression (5) can be written as

$$E = kSc^2.$$

According to the principles of causal physics, the energy of the universe is in the motion of ether particles. Since the mass-forming elements are nucleons and systems consisting of them - atomic nuclei, changing their sizes upsets the equilibrium: the amount of particle influx differs from the amount of outflow. This is manifested during the fission of atomic nuclei, when the cross-sectional area of the system changes.

Consider the division of nuclei into two equal parts. Let its volume be equal to V_1 , radius R , and cross-sectional area S_1 before division.

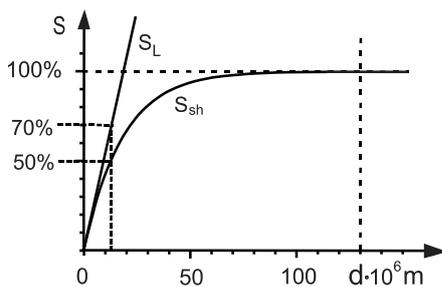


Fig.10. On the definition of the hidden mass of the Earth.

Then $V_1 = \frac{4}{3}\pi R^3$, $S_1 = \pi R^2$. After dividing into two equal parts, the volume of each part will be V_2 , radius r , cross-sectional area S_2 . Accordingly, we have $V_2 = \frac{4}{3}\pi r^3$ and $S_2 = \pi r^2$. From the condition $2V_2 = V_1$ we find

$$\frac{2S_2}{S_1} = 1,26.$$

Thus, when the atomic nucleus is divided, the cross-sectional area of the system increases by 1.26. This is a significant amount of energy when it comes to strong interaction. The release energy is 26% of the total energy.

9. Determination of mass. The described interaction scheme allows to determine which physical quantity is taken as mass. Mass is a quantity proportional to the area of a physical

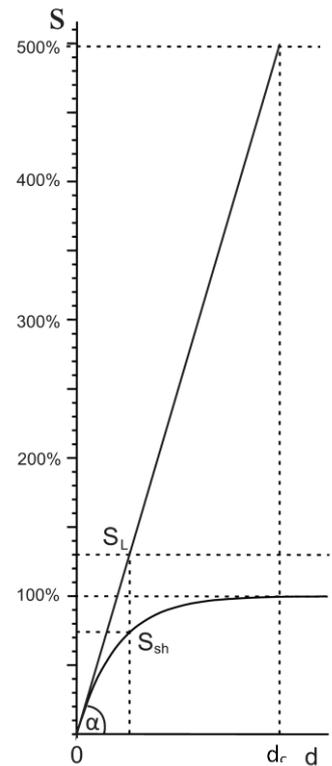


Fig. 9. To the calculation of the hidden mass of objects with dimensions where there is mutual shielding of elements.

object or system that is under pressure from falling cosmic particles. According to Le Sage, these particles are particles of ether. Although in a particular case they can be mistaken for ether particles, however, in the general case, the picture concerning ether is somewhat unusual. This is described in detail in [17-18]. At the same time, this does not change the concept of mass under consideration.

10. Conclusion

Considering the cross-sectional area of the object and the system instead of the mass allows to:

- create a clear and causal picture of the mechanism of physical interaction.
- to justify the presence of gravitational shielding;
- to determine the presence of hidden mass (matter) in massive celestial bodies and in the entire universe as a whole.
- to propose a causal picture of the mass defect;
- describe and interpret the abnormal manifestation in the diurnal change in gravity;
- to substantiate the cause of the precession of the perihelion of Mercury and artificial Earth satellites;
- describe the features of tidal processes.

It should be noted that each of the above issues is fundamental. In matters of physical interaction, the representation of mass as an area of interaction involves the participation of an intermediate material substance that physically connects objects with each other. We are talking about a classic broadcast. Regarding the ether, a work was published [18]], where an analogue of the classical ether, based on the ideas of P. Dirac, is presented as a classical ether [19]. The substantiation of the existence of an analogue of the classical ether, coupled with the stated idea of mass, ensures the integrity of the causal doctrine of the mechanism of physical interaction.

REFERENCE

1. Bell. J. S., On the Problem of Hidden Variables in Quantum Mechanics / J. S. Bell // *Rev. Mod. Phys.* - 1966. - T. 38. - Pp. 447–452.
2. Ballentine L. E. The Statistical Interpretation of Quantum Mechanics / L. E. Ballentine. // *Rev. Mod. Phys.* - 1970. -T. 42. - Pp. 358–381.
3. Cramer J. G., The transactional interpretation of quantum mechanics / J. G. Cramer // *Rev. Mod. Phys.* - 1986.- T. 58. - Pp. 647–687.
4. Omnès R., Consistent interpretations of quantum mechanics / R. Omnès. // *Rev. Mod. Phys.* - 1992. - T. 64. - Pp. 339–382.
5. Einstein A. Relativity: The Special and General Theory (Translation 1920). - New York: / A. Einstein. // H. Holt and Company
6. Einstein A. Time, Space, and Gravitation / A. Einstein // *The Times.* - 28 November 1919.
7. Greene B. The Theory of Relativity, Then and Now / B. Greene // Retrieved 26 September 2015.
8. Taylor E.F. Space-time physics: Introduction to Special Relativity (2nd ed.) / E. F. Taylor, John Archibald Wheeler //New York: W.H. Freeman, 1992. - Pp. 84–88. ISBN 978-0-7167-2327-1.
9. Newton I. The Principia: Mathematical Principles of Natural Philosophy / I. Newton // University of California Press, 1999.
10. Evans J. C. Gravity in the century of light: sources, construction and reception of Le Sage's theory of gravitation", in Edwards, M.R. (ed.), Pushing Gravity: / J. C. Evans. // *New Perspectives on Le Sage's Theory of Gravitation*, Montreal: C. Roy Keys Inc, 2002. – Pp. 9–40
11. T.M. Radzhabov. On the distinction between corpuscular and wave processes and the arbitrariness in the basis of special relativity theory / T.M. Radzhabov. // *Physics Essays*. 2023. V. 36-4.– Pp. 405-410,
12. Radzhabov T.M., Mass-area equivalence in classical physics and aspects of mutual shielding of objects. / Radzhabov T.M., // *Physics Essays*, 2022, V.35. 2. – Pp.175-180. DOI.org/10.4006/0836-1398-35.2.175.
13. Radzhabov T.M., Consideration of the daily variation of gravity on the manifestation of gravitational shielding. / T.M. Radzhabov // *Journal of Geoscience and Environment Protection*. Vol.10 No.7. – Pp. 31-47. July 11, 2022. DOI: 10.4236/gep.2022.107003.
14. Radzhabov T.M., On the gravitational shielding, gravitational permeability and hidden matter / T.M. Radzhabov//*International Journal of Geosciences*. Vol.13. – Pp.531-546. Jul.18, 2022. DOI: 10.4236/ijg.2022.137028.
15. Radzhabov T.M., On the Common Nature and Unified Mechanism of Gravitational and Nuclear Interactions / T.M. Radzhabov // *Mathematical Statistician and Engineering Applications*. ISSN: 2094-0343 2326-9865 Vol. 71 No. 4 (2022). – Pp.10784-10794. <http://philstat.org.ph>

16. Melchior P. (1966). The Earth tides. / P. Melchior // Pergamon press Oxford-London-Edinburgh-New-York-Paris-Frankfurt. – 483 p.
17. Radzhabov T.M., On the missed opportunities of classical physics. Physics Essays, 2021, V. 34. – Pp. 475-479. [http://dx.DOI.org/10.4006/0836-1398-34.4.475]
18. Radzhabov T.M. On The Analogue of The Classical Ether And Its Physico-Philosophical Interpretation. / T.M. Radzhabov. // JJR. 2023. DOI: 10.33425/2690-8077.1076.
19. Dirac P.A. (1963). The Evolution of the Physicist's Picture of Nature / Dirac P.A. // Scientific American. Vol. 208. No. 5. – Pp. 45–53.

ФИЗИКАИ САБАБҲО: МАЙДОНИ ТРАНСВЕРС-СЕКЦИЯҲО БА ҶОИ МАССА

Баррасӣ ва таҳлили мавзуи таъсири мутақобилаи масса ва физика дар доираи физикаи сабабҳо пешниҳод карда мешавад. Масса ҳамчун як ҳолати махсуси микдоре ҳисобида мешавад, ки ба майдони буриши объектҳои ҷисмонӣ мутаносиб аст. Иваз кардани масса бо ин қимат ба мо имкон медиҳад, ки инкишофи назарияи кинетикии вазнинии Ле Саж давом дода шуда, ҳаракати заррачаҳои эфири кайҳонӣ нишон дода шавад. Ин равиши татбиқшаванда имкон медиҳад, ки манзараи визуалӣ-сабаби таъсири мутақобилаи физикӣ ҳам дар ҷаҳони микро ва ҳам дар макро ба вучуд оварда, ба натиҷаҳои комилан нав оварда расонад. Мавҷудияти сипари гравитационӣ асоснок карда шуда, тасвири визуалии нуксонҳои масса ба вучуд оварда мешавад, мавҷудияти массаи пинҳонӣ дар ҷисмҳои азими осмонӣ ошкор карда мешавад, сабаби пеш рафтани перигелиони Меркурий ва ҳамроҳони сунъии Замин нишон дода шуда, раванди қувваи гравитасия тавсиф гардида, хусусиятҳои зухуроти мавҷҳо тавсиф мешаванд. Муносибати истифодашаванда ба мо имкон медиҳад, ки масъалаҳои ҳамкорӣ дар ҷаҳони микро ва макро аз нуқтаи назари механизми ягона баррасӣ карда шаванд.

Калидвожаҳо: масса, массаи нӣҳонӣ, муҳофизати ҷозибӣ, назарияи дефектҳои массаи Ле Сэйҷ, тағирёбии шабонарӯзии ҷозибӣ, равандҳои мавҷ

ПРИЧИННАЯ ФИЗИКА: ПЛОЩАДЬ ПОПЕРЕЧНОГО СЕЧЕНИЯ ВМЕСТО МАССЫ

Представлен обзор и анализ на тему массы и физического взаимодействия в рамках причинной физики. Масса рассматривается как частный случай величины, пропорциональной площади поперечного сечения физических объектов. Замена массы этой величиной позволяет продолжить развитие кинетической теории гравитации Ле Сэйж. Физическое взаимодействие рассматривается как результат взаимного экранирования элементарных массообразующих элементов - нуклонов и состоящих из них систем - атомных ядер на пути движения частиц космического эфира. Показано, что примененный подход позволяет создать наглядно-причинную картину физического взаимодействия как в микромире, так и в макромире, приводя к совершенно новым результатам. Обосновано существование гравитационного экранирования, создана визуальная картина дефекта массы, выявлено наличие скрытой массы у массивных небесных тел, указана причина прецессии перигелия Меркурия и искусственных спутников Земли, полусуточно описано и интерпретировано поведение в суточном ходе силы тяжести, описаны особенности проявления приливных процессов. Применяемый подход позволяет рассматривать вопросы взаимодействия в микро и макромире с точки зрения единого механизма.

Ключевые слова: масса, скрытая масса, гравитационное экранирование, теория Ле Сэйж, дефект массы, суточные вариации гравитации, приливные процессы

CAUSAL PHYSICS: CROSS-SECTIONAL AREA INSTEAD OF MASS

A review and analysis on the topic of mass and physical interaction within the framework of causal physics is presented. Mass is considered as a special case of a quantity that is proportional to the cross-sectional area of physical objects. Replacing the mass with this quantity allows further development of the kinetic theory of gravity by Le Sage. Physical interaction is considered as a result of mutual shielding of elementary mass-forming elements - nucleons and systems consisting of them - atomic nuclei in the path of movement of cosmic ether particles. It is shown that the applied approach makes it possible to create a visual and causal picture of physical interaction, both in the microcosm and in the macrocosm, leading to completely new results. The existence of gravitational shielding is substantiated, a visual picture of the mass defect is created, the presence of hidden mass in massive celestial bodies is revealed, the reason for the precession of the perihelion of Mercury and artificial Earth satellites is indicated, semi-daily behavior in the diurnal variation of gravity is described and interpreted, features in the manifestation of tidal processes are described. The applied approach allows to consider the issues of interaction in the micro and macrocosm from a single mechanism.

Keywords: mass, hidden mass, gravitational shielding, Le Sage theory, mass defect, diurnal variation of gravity, tidal processes.

Маълумот дар бораи муаллиф: Раҷабов Тоир Махсудович – Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, номзади илмҳои физикаю математика, дотсент. **Суроға:** 734025, ш. Душанбе, Ҷумҳурии Тоҷикистон, хиёбони Рӯдакӣ, 17. **Телефон:** + 992 93 9995602. **E-mail:** buny_r@mail.ru,

Сведения об авторе: – Раҷабов Тоир Махсудович –Таджикский национальный университет, кандидат физико-математических наук, доцент. Адрес. 734025 г. Душанбе, Республика Таджикистан, пр. Рудаки, 17. **Телефон:** + 992 93 9995602. **E-mail:** buny_r@mail.ru

Information about the author: – Rajabov Toir Makhsudovich - Tajik National University, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor. **Address.**734025, Dushanbe, Republic of Tajikistan, Rudaki ave., 17. **Phone:** + 992 93 9995602. **E-mail:** buny_r@mail.ru

Article received 07.12.2023

Approved after review 15.01.2024

Accepted for publication 11.04.2024

ВЛИЯНИЕ БАРЬЕРНОГО РАЗРЯДА НА ЭНЕРГИЮ ПРОРАСТАНИЯ И ВСХОЖЕСТЬ СЕМЯН ПШЕНИЦЫ СОРТА «НАВРУЗ» НА ОТКРЫТОМ ГРУНТЕ

¹Солихова М.И., ¹Курзина И.А., ²Ходжазода Т.А., ¹Ходжаев А.Т., ^{1,3}Дайбова Е.Б.

¹Национальный Исследовательский Томский государственный университет,

²Таджикский национальный университет,

³Сибирский научно-исследовательский институт сельского хозяйства и торфа - филиал
СФНЦА РАН

Пшеница причисляется к жизненно необходимым продуктам питания в государствах Центральной Азии и является одной из стратегически значимых аграрных культур – она обеспечивает наивеличайшее число калорий и питательных веществ в рационе жителя региона. Посевная площадь в Центральной Азии под культивирование пшеницей растет с 1991 года на территориях Узбекистана, Туркменистана и Таджикистана [1].

Тенденция к использованию более экологически чистых методов в сельском хозяйстве подчеркивает важность учета окружающей среды при разработке и внедрении новых технологий. Это включает в себя использование методов, которые минимизируют отрицательное воздействие на почву, воду и воздух, а также уменьшают использование химических удобрений и пестицидов. Экологически чистая продукция, выращенная с применением устойчивых методов, способствует обеспечению пищевой безопасности и благополучия потребителей. Обработка семян различными методами может улучшать их свойства, такие как всхожесть, устойчивость к болезням и стрессам, что в конечном итоге влияет на качество и количество урожая. Экологически безопасные методы обработки семян могут способствовать снижению риска заболеваний и уменьшению необходимости использования химических средств защиты. Такие подходы содействуют устойчивому развитию сельского хозяйства, что является ключевым аспектом обеспечения продовольственной безопасности и сохранения окружающей среды [2].

Физическая обработка является одним из наиболее эффективных методов определения потенциальной урожайности и качества продукции. В последние годы все чаще изучаются факторы физического воздействия на семена различных культур для ускорения прорастания и повышения полевой всхожести, а основным критерием оценки всех видов продуктивности считается урожайность аграрных культур [3].

Принцип обработки семян перед посевом физическими факторами для стимулирования развития семян и повышения урожайности имеет значительную историю. По данным литературных источников, этим вопросом занимались А.В. Сиротина, М.Ф. Трифонова, И.Ф. Бородин. Известно более 40 физических методов воздействия на семена, приводящих к повышению всхожести, усилению рассеивания света и увеличению энергии прорастания. Эти методы могут действовать на различные физические и биохимические процессы в растениях, что в конечном итоге приводит к улучшению их роста, развития и производительности. Повышение урожайности на 15-30%, ускорение созревания и улучшение качества продукции являются значительными показателями, особенно в контексте повышения эффективности сельского хозяйства и обеспечения продовольственной безопасности [4].

Согласно исследованиям, предпосевное облучение семян пшеницы коротковолновым ультрафиолетом приводило к подавлению процесса роста и снижению интенсивности транспирации в то время как средневолновое облучение наоборот стимулировало рост и увеличивало интенсивность транспирации листьев растений пшеницы [5].

Воздействие радиации, лазеров ультрафиолетового излучения вызывает различные изменения в обмене веществ и энергии. Эффекты физические методы воздействия на растения могут приводить к различным изменениям в их физиологии и

биохимии. Нарушение целостности мембран, изменение содержания соединений, накопление свободных радикалов, генетические повреждения, изменения в синтезе белков и регуляции геномной экспрессии могут быть следствием такого воздействия. Эти изменения могут оказать как положительное, так и отрицательное воздействие на рост и развитие растений. В том числе некоторые физические методы могут стимулировать рост и улучшать качество продукции как упомянули ранее. В то время как другие методы могут вызвать стресс и повреждения растений, что может негативно сказаться на их выживаемости и продуктивности [6].

С целью повышения полевой всхожести, качества и урожайности сельскохозяйственных культур сегодня применяются различные предпосевные обработки семян включая облучение электромагнитными полями в радиодиапазоне от дециметров до миллиметров [7-8-9].

Некоторые исследователи предполагают, что миллиметровые волны могут оказывать влияние на клеточное строение и метаболизм через воздействие на биохимические процессы в тканях [10].

Одним из важнейших направлений ученых является изучение воздействия низкоинтенсивных миллиметровых волн на растения и их жизнедеятельность. С учетом экологической безопасности данные волны могут оказывать положительное воздействие на рост и развитие растений, что может приносить немаловажную пользу сельскому хозяйству. Однако важно учитывать, что любые технологии, даже если они направлены на улучшение роста растений, должны быть оценены с точки зрения их полного воздействия на окружающую среду. Чтобы считать методы экологически безопасными, необходимо учитывать не только воздействие на растения, но и потенциальные воздействия на почву, воду и другие элементы экосистемы [11-12].

Электромагнитное излучение охватывает широкий спектр различных частот и длин волн. От чрезвычайно низких частот, таких как радиоволны до гамма-лучей и рентгеновского излучения, которые являются ионизирующими и способны вызывать ионизацию атомов и молекул.

Воздействие излучения на биологические объекты, такие как семена, зависит от дозы излучения. Низкие дозы излучения могут оказывать стимулирующее воздействие на ферментативные реакции и другие биологические процессы. С другой стороны, высокие дозы, особенно ионизирующего излучения, могут вызывать повреждения ДНК и других клеточных структур, что может привести к ингибирующему эффекту или даже гибели клеток. [8-13].

Стимулирующие дозы способствуют росту и изменяют физико-химическое состояние клетки, проницаемость оболочки и другие метаболические реакции. Влияние дозы вызывает нарушения внутриклеточных структур, восстановление которых требует больших затрат [8-10].

Исследования показали, что определенные параметры электромагнитного поля могут положительно влиять на рост и урожайность растений, улучшать фотосинтез и метаболические процессы. Однако эффекты могут быть чувствительны к конкретным условиям выращивания и требовать определенных оптимальных значений параметров [14-15].

Согласно наблюдениям исследователей, практические научные эксперименты позволили увеличить целостность, плотность и всхожесть семян [16], а озонирование оказывает положительное влияние на прогресс семенных свойств семян в частности, энергии прорастания и лабораторной всхожести.

Озон стимулирует прорастание семян и, как следствие, происходит рост растений и улучшение ферментативных свойств семян, участвующих в разложении запасов эндосперма и обеспечении энергией для прорастания. Воздействие озона на семена может ускорить метаболизм, активизировать ферменты, ответственные за гидролиз углеводов, таких как глюкоза и крахмал. Это в свою очередь, способствует более

эффективному прорастанию и развитию растений. Однако, стоит отметить, что воздействие озона может также быть двойственным и зависеть от концентрации. Высокие концентрации озона могут вызывать стресс у растений и привести к негативным последствиям, таким как повреждение клеточных структур и снижение фотосинтеза.

Цель многих исследований - определение подходящих параметров предпосевной обработки семян пшеницы физическими воздействиями, для увеличения энергии прорастания, всхожести, продуктивности, урожайности и улучшения качества зерна [2]. Как показывает обзор литературы в ходе большинства экспериментов было установлено положительное воздействие физических методов на семена технических культур: улучшается качество посева семян, биоиндикаторы растений, снижается количество их заболеваний, увеличивается энергия прорастания, повышается урожайность и качество продукции. Доказано, что влияние физических методов повышает растворимость солей и кислот, что приводит к изменению рН и биоэлектрического потенциала растительных клеток.

Таким образом, увеличивается проницаемость клеточных мембран, что облегчает диффузию молекул и ионов через клеточную мембрану. В результате семена больше поглощают воды. Кроме того, усиливается скорость диффузии молекул кислорода через клеточную мембрану, тормозятся процессы спорообразования фитопатогенных грибов, усиливается транспорт ионов, что вызывает увеличение концентрации минеральных элементов, поступающих в клетку, [17] ускоряется процесс увеличения объема цитоплазмы, повышается интенсивность окислительных и фотосинтетических реакций [18].

Одним из важнейших элементов исследований технических культур представлена предпосевная обработка семян, которая позволяет пользоваться потенциальными возможностями. В практическом растениеводстве обработка семян обладает эффективной значимостью для нахождения путей увеличения продуктивности растений и их устойчивости к многообразным негативным условиям среды. Одним из успешных способов повышения урожайности и качества продукции растениеводства является применение физических факторов для предпосевной обработки семян [19-20]. Данная обработка направлена на улучшение биологических свойств семян, стимулирование и повышение их развития, защиту от болезней и вредителей, устойчивости к стрессовым условиям. Повышение качества свойств семян может быть достигнуто различными физическими способами [21].

Вред, наносимый окружающей среде физическими факторами при обработке семян значительно меньше. К таким способам причисляются ультразвук, ионизирующее излучение, электромагнитные поля, а также термическое, фотоэнергетическое или оптическое влияние, в том числе когерентными излучениями барьерными разрядами, гама и рентгеновскими излучениями.

Действительно, исследования в области воздействия электрических разрядов и электромагнитных полей на семена растений привлекают внимание ученых и агрономов.

Эти методы часто рассматриваются как альтернативные способы улучшения прорастания семян, роста растений и как следствие повышения урожайности. Применение электрических и магнитных полей может воздействовать на различные биологические процессы, такие как активация ферментных систем, изменение физико-химического состояния клеток, стимулирование обмена веществ и другие метаболические реакции.

Интерес к этим методам связан не только с повышением урожайности, но и с их потенциальным воздействием на экологическую устойчивость и качество продукции. Однако, несмотря на некоторые положительные результаты, эффективность и применимость этих методов могут зависеть от различных факторов включая тип растений, условия выращивания, параметры электрических и магнитных полей и другие.

Чтобы уменьшить влияние неблагоприятных факторов, действующих на производство сельскохозяйственной продукции, необходимо искать методы, повышающие ее качественные и количественные показатели в разных климатических условиях, независимо от состояния посевного материала. Одним из широко используемых приемов в этой области является допосевная обработка семян [22]. В связи с тем, что под влиянием предпосевной обработки семян с физическим методом лучше протекают физиолого-биохимические процессы, возрастает высокая урожайность, улучшается качество продукции.

Различные факторы, такие как электрические разряды и электромагнитные поля, могут выступать в качестве катализаторов ростовых процессов и направленности метаболизма, соответствуют современным исследованиям в области агрофизики и биологии растений. Эффекты физического воздействия на рост и развитие растений изучаются с целью повышения урожайности, улучшения качества продукции и создания более эффективных методов сельского хозяйства. Физические факторы, такие как электрические поля и магнитные поля, могут влиять на различные аспекты физиологии растений: прорастание, рост корней и стеблей, цветение и плодоношение. Однако, стоит отметить, что эффекты могут зависеть от конкретных параметров этих полей, таких как частота, интенсивность и продолжительность воздействия.

Настоящее исследование показывает, что для повышения урожайности с минимальными экономическими и энергетическими затратами при сохранении высококачественных признаков крайне важно подбирать общие растительно-стимулирующие взаимодействующие факторы, вызывающие положительные изменения физиолого-биохимических процессов в растениях. Согласно литературным данным, высокая интенсивность физиолого-биохимических процессов, связанных с повышением продуктивности растений, может приводить к дефициту микроэлементов. Повышение энергии прорастания семян при лабораторном проращивании под воздействием барьерных разрядов приводит к лучшему укоренению и развитию листового аппарата проростков, что, в свою очередь, приводит к увеличению массы и продуктивности растений [19-20].

Научно-исследовательские работы проводились путем постановки полевых экспериментов в соответствии с установленными методиками проведения подобных опытов с влиянием барьерного разряда. Данный полевой опыт проводился с целью улучшения энергии прорастания и всхожести семян пшеницы после обработки электрическим барьерным разрядам.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Объектом эксперимента были семена пшеницы сорта "Навруз". Вид обработки источника плазмы-барьерный разряд при атмосферном давлении. До посевной обработки семян пшеницы барьерным разрядом провели 01.04.2023 года в лаборатории Института сильноточной электроники СО РАН. Время обработки составило 4 и 6 минуты. Главным аргументом источника составила стеклянная кювета объемом 10 мл, стенки которой являлись диэлектрическим барьером, делящим электроды разрядной системы.

Частота следования импульсов составляла 71 кГц. Продолжительность импульсов тока составляла предположительно 1 мкс, при амплитуде почти 12 мА, и при амплитуде напряжения приблизительно 290В. Следовательно, можно поставить среднюю мощность, вкладываемую в разряд, за период импульса: $2 \times 950 \text{ В} \times 0.012 \text{ А} \times 1 \cdot 10^{-6} \text{ с} \times 71 \cdot 10^3 \text{ Гц} \approx 1.6 \text{ Вт}$.

Таблица 1. Параметры плазменной обработки семян пшеницы
Table 1. Parameters of plasma treatment of wheat seeds

Ном ер реж има	Частота импульсов, кГц	Длительность импульса тока, мкс	Амплитуда напряжения, В	Амплитуда тока, мА	Время экспозиции, мин.
1	71	1	950	12	4
2	71	1	950	12	6

Коаксиальная система электродов образована многоострийным центральным электродом, погруженным в полость кюветы, и цилиндрическим электродом, охватывающим внешнюю поверхность кюветы. В ходе экспериментов были выявлены оптимальные условия обработки. При плазменной обработке семян пшеницы образцы загружались в кюветы. Применялись два режима обработки, параметры которых приведены в таблице 1 [23].

РЕЗУЛЬТАТЫ

Анализ исследуемых данных показывает, что обработка семян до посева с разными физическими способами приводит к получению хороших и стабильных урожаев сельскохозяйственных культур. При определенном воздействии внешних факторов, в частности электрического барьерного разряда, происходит положительное воздействие на их посевные качества. Эффективность обработки семян и посадочного объекта до посева во многом зависит от влажности семян и атмосферных условий. Физические воздействия представляются результативным методом обработки семян до посева. При правильном подборе обработки все виды физического влияния приводят к увеличению урожая каждого исследуемого объекта [24].

В качестве объекта исследования были использованы семена пшеницы сорта «Навруз». Исследовательские работы полевого опыта влияния предпосевной обработки семян с барьерным разрядом на ростовые процессы растений пшеницы сорта «Навруз» проводились в Республике Таджикистан (район Рудаки Дехканский участок «Мураджан»). Для достоверного объяснения результатов всех проводимых экспериментов тщательно наблюдались процессы энергии прорастания и общая всхожесть пшеницы в открытом грунте.

Таблица 2. Результаты полевого эксперимента до и после обработки
Table 2. Results of the field experiment before and after treatment

№	Барьерный разряд 48ч и 72ч	Да та об ра бо тк и	Д а т а п о с е в а	Зак лад ные сем ена	Появление всходов после закладки семян (дни)				Вс хо же ст ь	% - Энер . прор ос. к конт рол ю	% - Об щ. вс хо ж. к конт ро лю	
					3	4	5	6				7
			01 .0 4.	0 3 .0 4	С остыванием на 48 часов после обработки							
1	Контрольный 4- мин				920	41	153	302	332	828		

2	Обработанный 4-мин	20 23	. 2 0 2 3	920	77	196	325	285	883	63.4	6.4
3	Контрольный 6-мин			920	51	155	304	324	834	16.3	1.07
4	Обработанный 6-мин			920	61	188	311	285	843		
		01 .0 4. 20 23	0 4 .0 4 .2 0 2 3	С остыванием на 72 часов после обработки							
5	Контрольный 4-мин			920	42	149	298	321	810	47.6	4.07
6	Обработанный 4-мин			920	62	185	314	282	843		
7	Контрольный 6-мин			920	48	148	295	319	810	4.1	1.9
8	Обработанный 6-мин			920	50	173	306	297	826		

Из полученных экспериментальных данных можно сказать, что обработка семян пшеницы с помощью барьерного разряда на энергию прорастания и общую всхожесть растений дает показательные результаты. Как видно из табл.2. предпосевная обработка семян пшеницы электрическим барьерным разрядом со временем 4 и 6 минут стимулирует энергию прорастания и общую всхожесть. Согласно полученным данным энергия прорастания у обработанных образцов в 4 мин. с остыванием 48ч после обработки по сравнению с контролем повышалось на 63,4 %, общая всхожесть на 6,4 %, а энергия прорастания и всхожесть пшеницы в 6 мин с остыванием 48 ч составило 16,3 %, а общая всхожесть 1,07% по сравнению с контролем. Обработанный вариант 4 мин с остыванием 72ч по сравнению с контролем показали следующие результаты: 47.6% энергии прорастания, 4.07% общей всхожести, а энергия прорастания и общая всхожесть, обработанной пшеницы с временем 6 мин с остыванием 72 ч по сравнению с контрольным вариантом составили 4,1 % и 1,9%.

Как видно из рис.1 положительные результаты энергии прорастания и общей всхожести дало обработанный вариант с временем обработки 4 мин с остыванием 48 ч, а 6 мин с остыванием 48 ч почти была одинаковк с контролем.

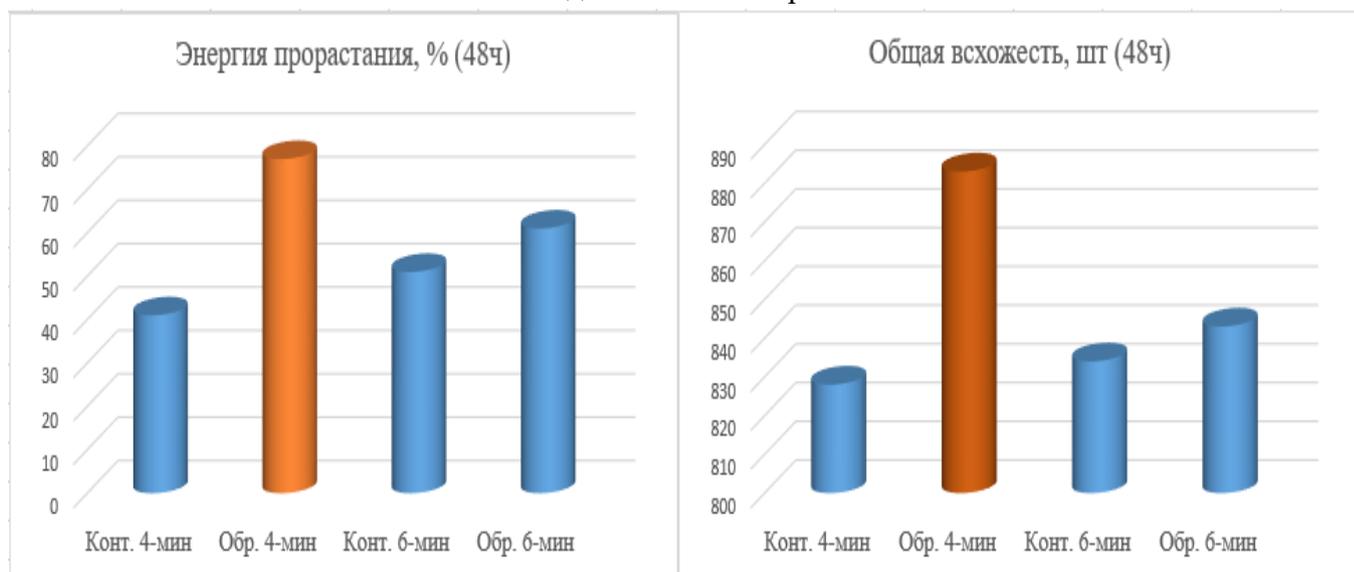


Рис.1. Появление первых всходов и общая всхожесть, контрольные и обработанные барьерным разрядом семян пшеницы сорта «Наврзуз» с остыванием 48ч

Fig.1. The appearance of the first shoots and overall germination, control and barrier-discharge treated wheat seeds of the “Navruz” variety with cooling for 48 hours

На рис.2. приведены результаты исследования энергии прорастания и общей всхожести, которые были обработаны со временем в 4 мин и 6 мин, с остыванием 72 ч. Результаты немного колеблются от контрольного варианта.

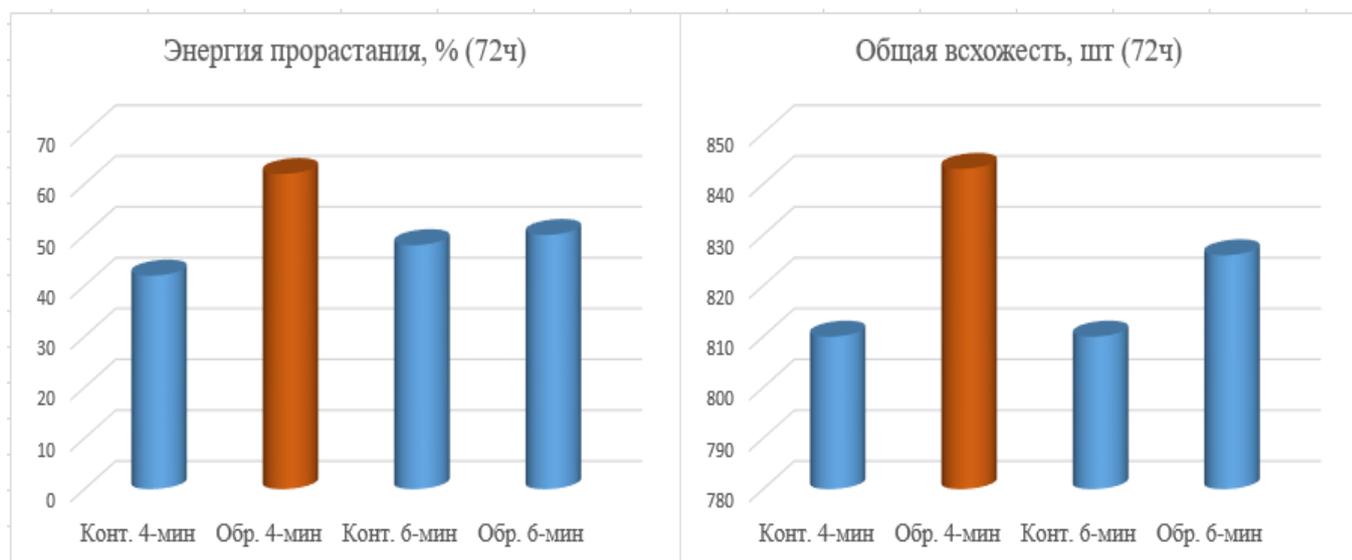


Рис.2. Появление первых всходов и общая всхожесть, контрольные и обработанные барьерным разрядом семян пшеницы сорта «Наврзуз» с остыванием 72 ч

Figure 2. Appearance of first sprouts and total germination, control and barrier discharge treated seeds of wheat variety "Navruz" with cooling 72h

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Целью эксперимента являлось исследование воздействия электрического разряда на ускорение энергии прорастания и общую всхожесть пшеницы сорта «Наврзуз». Полученные экспериментальные данные показывают, что более высокая обработка со временем 6-и мин, остыванием на 48ч уменьшает полевую энергию прорастания на 47,1%, а общая всхожесть семян относительно контроля снизилась на 5,33 %.

Результаты исследований позволяют сделать вывод о том, что низкая обработка семенного материала до посевного оказала положительное действие на полевую энергию прорастания и всхожести технических культур. Одним из основных показателей, характеризующих, биологические свойства семян, является их способность к прорастанию и укоренению проростков, что воздействует на увеличение ряда физиолого-биохимических процессов: улучшаются семенные качества, повышается энергия прорастания и общая всхожесть.

Наилучший результат настоящего полевого исследования под воздействием электрического барьерного разряда на семена пшеницы показала группа семян, обработанная барьерным разрядом, работающим в 4-х минутном режиме с остыванием 48часов. При росте биомассы длина ростков и корней, появившихся из семян пшеницы, обработанных в данном режиме, составила более 60%. Обработка семян с электрическим барьерным разрядом, в режиме 6 мин с остыванием 72 часа, дала отрицательные результаты и показала аналогичные с контрольные результаты.

Рецензент: Кудряшов Сергей Владимирович,

ЛИТЕРАТУРА

1. <https://cabar.asia/ru/diversifikatsiya-rynka-pshenitsy-vopros-prodovolstvennoj-bezopasnosti-kyrgyzstana>
2. Создание и изучение исходного материала яровой мягкой пшеницы в условиях Амурской области для получения высокоурожайных сортов продовольственного назначения сорта яровой пшеницы. <https://apknet.ru/sozdanie-i-izuchenie-isходного-materi/>
3. Красильников В.В. Влияние предпосевной обработки семян лазером на урожайность яровой пшеницы. / В.В. Красильников., О.Г. Долговых, А.Б. Спиридонов // 2019. <file:///C:/Users/admin/Documents/Downloads/vliyanie-predposevnoy-obrabotki-semyan-lazerom-na-urozhaynost-yarovoy-pshenitsy.pdf>
4. Клочков А.В. Проращивание семян в магнитном поле / А.В. Клочков., О.С. Клочкова., О.Б. Соломко // Беларусь, 2020. – С. 163-168. <https://elib.baa.by/xmlui/bitstream/handle/123456789/2542/%D0%9A%D0%BB%D0%BE%D1%87%D0%BA%D0%BE%D0%B2%20163-168.pdf?Sequence=1&isallowed=y>
5. Сафаралихонов А.Б. Влияние предпосевого УФ-облучения семян растений пшеницы на их последующий рост и интенсивность транспирации листьев / А.Б. Сафаралихонов., Ф.Н. Худоёрбеков., О.А. Акназаров. // Физиология растений. 2016. Т. 59, №7-8. – С. 344-349.
6. Лаханова К.М. Действие различных доз рентгеновских и гамма-лучей на солодку уральскую / К.М. Лаханова, М.У. Сарсембаева // Успехи современного естествознания. 2015. № 6. – С.119-122.
7. Шейн А.Г. Экспериментальное исследование воздействия СВЧ излучения низкой интенсивности на всхожесть / А.Г. Шейн., Р.Н. Никулин., И.А. Ковалев., Д.Г. Артемова., Л.Х. Чанг., М.П. Никулина // Биомедицинская радиоэлектроника, №4. - 2009. - С. 77-121.
8. Савельев В.А. Лазер улучшает семена / В.А. Савельев, В. Куликов // Уральские нивы. – 1984. – №12. – С. 28-29.
9. Raha L. Effects of low-power microwave fields on seed germination and growth rate / L. Raha., S. Mishra., V. Ramachandran M. S. Bhatia. // Journal of Electromagnetic Analysis and Applications, – 2011. –Vol. 3. – Pp. 165-171.
10. Девятков Н.Д. Особенности взаимодействия миллиметрового излучения низкой интенсивности с биологическими объектами / Н.Д. Девятков., О.В. Бецкий // Сборник докладов: Применение миллиметрового излучения низкой интенсивности в биологии и медицине / - М.: 1985. - С. 6-20.
11. Сидорцов И. Г. Повышение эффективности воздействия постоянного магнитного поля на семена зерновых культур при их предпосевной обработке /И.Г.Сидорцов // Зерноград, 2008.–С. 19.
12. Дресвянникова Е.В. Возможности регулирования процессов тепловлажностной обработки в массообменных аппаратах при воздействии электрического поля / Е.В. Дресвянникова., П.Л. Лекомцев., А.В. Савушкин. // Инженерный вестник Дона. 2014. №1. URL: <ivdon.ru/ru/magazine/archive/n1y2014/2235>.
13. Долговых О.Г. Экологически безопасная предпосевная обработка семян яровой пшеницы / О.Г. Долговых., В.Н. Огнев. // Инженерный вестник Дона, 2014, № 4 URL: <ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2014/2565>.
14. Evaluating J.C. scientific literature on biological effects of microwave radiation / J. C. Evaluating, J. C. Lin // IEEE Microwave Magazine, – 2004. – Vol. 5. – № 1. – Pp. 34-37
15. Karpovich V. A. Application of microwave energy in modern biotechnologies / V. A. Karpovich., V. N. Rodionova., G. Ya. Lepyan // Symposium Proceedings, Kharkov, 2001. – Pp. 909-910.
16. Ивановна А.С. Применение физического метода в защите яровой пшеницы от болезней в Среднем Поволжье / А.С. Ивановна// Саратов, 2013.<https://earthpapers.net/prominence-fizicheskogo-method-v-zaschite-yarovoy-pshenitsy-ot-bolezney-v-srednem-povolzhie>
17. Жильцов А.В. Предпосевная обработка семян в магнитном / А.В. Жильцов, В.В. Савченко., А.Ю. Синявский // Киев, 2019. – С.243-245. <https://core.ac.uk/download/pdf/212954909.pdf>
18. Горелов М.В. Установка для предпосевной обработки и сушки семян СВЧ-энергией / М.В. Горелов., Т.Н. Бастрон // Красноярский. 2020. – С.195-198. <file:///C:/Users/admin/Documents/Downloads/ispolzovanie-svch-energii-dlya-predposevnoy-obrabotki-semyan.pdf>
19. Решетникова С.Н. Урожайность и качество яровой пшеницы в зависимости от ионизирующей радиации и микроэлементов в лесостепи Поволжья. 2002, / С.Н. Решетникова // Ульяновск. – С. 150.
20. Ходжазода Т.А. Влияние барьерного разряда на энергию прорастания и всхожесть семян хлопчатника / Т.А. Ходжазода., И.А. Курзина., С. В. Кудряшов., А.Ю. Рябов., Д. Н. Лыткина., М. И. Солихова., А.Т. Ходжаев // Томск, – 2022. – № 28. – С. 65–75.
21. Исупов А. Н. Лазерная обработка семян — результаты полевых испытаний в Удмуртии. 2020. <https://agbz.ru/articles/lazernaya-obrabotka-semyan/>

22. Крылов О. Н., Лазерная обработка семян / О. Н. Крылов., М. М. Киселев., А. Н. Исупов. // <https://agbz.ru/articles/lazernaya-obrabotka-semyan-rezultaty-polevykh-isyntaniy-v-udmurtii/>
23. Ходжаев А.Т. Обработка семян пшеницы сорта «Навруз» плазмой барьерного разряда при атмосферном давлении / А.Т. Ходжаев., М.И. Солихова., К.П. Савкин // – С.70. https://conf-prfn.org/Files/2023/program_2023.pdf
24. Ходжазода Т.А. Влияние предпосевной обработки барьерный разряд на энергии прорастания и всхожесть семян кукурузы / Т.А. Ходжазода., И.А. Курзина., Р.С. Махмадбегов., А.Т. Ходжаев., М.И. Солихова., Д.Н. Лыткина. // Кишоварз. – 2023. – №1. – С.22-26.

REFERENCES

1. <https://cabar.asia/ru/diversifikatsiya-rynka-pshenitsy-vopros-prodovolstvennoj-bezopasnosti-kyrgyzstana>
2. Creation and study of spring soft wheat source material in the conditions of Amur region for obtaining high-yielding food purpose varieties of spring wheat. <https://apknet.ru/sozdanie-i-izuchenie-isxodnogo-materi/>
3. Krasilnikov V.V. Effect of pre-sowing seed laser treatment on spring wheat yield. 2019. / V.V. Krasilnikov., O.G. Dolgovykh., A.B. Spiridonov. // <file:///C:/C:/Users/admin/Documents/Downloads/vliyanie-predposevnoy-obrabotki-semyan-lazerom-na-urozhaynost-yarovoy-pshenitsy.pdf>
4. Klochkov A.V. Seed germination in a magnetic field. / A.V. Klochkov., O. S. Klochkova., O. B. Solomko // Belarus, 2020. – Pp.163-168. <https://elib.baa.by/xmlui/bitstream/handle/123456789/2542/%D0%9A%D0%BB%D0%BE%D1%87%D0%BA%D0%BE%D0%B2%20163-168.pdf?Sequence=1&isallowed=y>
5. Safaralikhonov A.B. Effect of pre-sowing UV-irradiation of wheat plant seeds on their subsequent growth and intensity of leaf transpiration / A.B. Safaralikhonov., F.N. Khudoyorbekov., O.A. Aknazarov // Plant Physiology. 2016, T. 59, №7-8. – Pp.344-349.
6. Lakhanova K.M. The effect of different doses of X-rays and gamma rays on Ural licorice / K.M. Lakhanova., M.U. Sarsembaeva. // Uspekhi sovremennoi naukhnoostroiznaniya. 2015. № 6. – Pp.119-122.
7. Shein A.G. Experimental study of the effect of low-intensity microwave radiation on germination / A.G. Shein., R.N. Nikulin., I.A. Kovalev., D.G. Artemova., L.H. Chang., M.P. Nikulina // Biomedical Radioelectronics, No. 4. - 2009. – Pp. 77-121.
8. Savelyev V.A. Laser improves seeds / V.A. Savelyev., Kulikov V. // Uralskie niv. - 1984. - №12. – Pp.28-29.
9. Ragha L. Effects of low power microwave fields on seed germination and growth rate / L. Ragha., S. Mishra., V. Ramachandran M. S. Bhatia. // Journal of Electromagnetic Analysis and Applications, – 2011. –Vol. 3. – Pp. 165-171.
10. Devyatkov N.D. Features of interaction of low intensity millimeter radiation with biological objects / N.D. Devyatkov, O.B. Betsky // Collection of reports: Application of low intensity millimeter radiation in biology and medicine / M.: 1985. – Pp.6-20.
11. Sidortsov I.G. Increasing the efficiency of the effect of a permanent magnetic field on the seeds of grain crops during their pre-sowing treatment / I.G. Sidortsov // Zernograd, 2008. – P. 19.
12. Dresvyannikova E.V. Possibilities of regulation of heat and moisture treatment processes in mass-exchange apparatuses under the influence of electric field / E.V. Dresvyannikova., P.L. Lekomtsev., A.V. Savushkin. // Engineering bulletin of Don. 2014. №1. URL: ivdon.ru/en/magazine/archive/n1y2014/2235.
13. Dolgovykh O.G. Ecologically safe pre-sowing seed treatment of spring wheat / O.G. Dolgovykh., V.N. Ognev. // Engineering Bulletin of Don, 2014, No. 4 URL: ivdon.ru/en/magazine/archive/n4y2014/2565.
14. J. C. Evaluating scientific literature on biological effects of microwave radiation / J. C. Evaluating, J. C. Lin // IEEE Microwave Magazine, - 2004. - Vol. 5. - № 1. – Pp.34-37
15. Karpovich V. A. Application of microwave energy in modern biotechnologies / V. A. Karpovich., V. N. Rodionova., G. Ya. Lepyan // Symposium Proceedings, Kharkov, 2001. – Pp. 909-910.
16. Ivanovna A.S. Application of physical method in protection of spring wheat from diseases in the Middle Volga region / A.S. Ivanovna // Saratov, 2013. <https://earth.papers.net/prominence-fizicheskogo-metod-v-zaschite-yarovoy-pshenitsy-ot-bolezney-v-srednem-povolzhie>
17. Zhiltsov A.V. Presowing treatment of seeds in magnetic / A.V. Zhiltsov., V. V. Savchenko., A. Y. Sinyavskiy. // Kyiv, 2019. – Pp.243-245. <https://core.ac.uk/download/pdf/212954909.pdf>
18. Gorelov M.V. Installation for pre-sowing treatment and drying of seeds by microwave energy / M.V. Gorelov., T.N. Bastron. // Krasnoyarsk. 2020, – Pp.195-198. <file:///C:/C:/Users/admin/Documents/Downloads/ispolzovanie-svch-energii-dlya-predposevnoy-obrabotki-semyan.pdf>
19. Reshetnikova S.N. Yield and quality of spring wheat depending on ionizing radiation and microelements in the forest-steppe of the Volga region. 2002, / S.N. Reshetnikova // Ulyanovsk. – P.150.

20. Khodzhazoda T.A., Influence of barrier discharge on germination energy and germination of cotton seeds / T.A. Hodzhazoda., I.A. Kurzina., S.V. Kudryashov., A.Yu. Ryabov., D. N. Lytkina., M. I. Solikhova., A. T. Hodjaev // Tomsk, - 2022. - № 28. – Pp. 65-75.
21. Isupov A.N. Laser treatment of seeds-results of field trials in Udmurtia. 2020. / A.N. Isupov., O. N. Krylov., M. M. Kiselev., A. E. Reshetnikov. // <https://agbz.ru/articles/lazernaya-obrabotka-semyan/>.
22. Krylov O. N. Laser treatment of seeds. / O. N. Krylov., M. M. Kiselev., A. N. Isupov // <https://agbz.ru/articles/lazernaya-obrabotka-semyan-rezultaty-polevykh-ispytaniy-v-udmurtii/>
23. Khodjaev A.T., Treatment of wheat seeds of "Navruz" variety by barrier discharge plasma at atmospheric pressure / A.T. Khodjaev., M.I. Solikhova., K.P. Savkin // – P.70. https://conf-prfn.org/Files/2023/program_2023.pdf
24. Khodjazoda T.A. Effect of pre-sowing barrier discharge treatment on germination energies and germination of maize seeds / T.A. Khodjazoda., I.A. Kurzina., R.S. Makhmadbegov., A.T. Khodjaev., M.I. Solikhova., D.N. Lytkina // Kishovarz. – 2023. - №1. – Pp. 22-26.

ТАЪСИРИ РАЗРЯДИ МОНЕА БА ЭНЕРГИЯИ САБЗИШИ ГАНДУМИ НАВЪИ “НАВРЎЗ” ДАР ТАЪРИБАҶОИ САҶРОЙ

Дар мақола коркарди тухмии гандум бо разряди монета барои 4 ва 6 дақиқа оварда шудааст. Гузоштани тухмии коркардшуда дар майдони тадқиқотӣ бо гузоштани 48 соат ва 72 соат пас аз коркард бо разряди монета анҷом дода шуд. Коркарди растаниҳо бо разряди монета ба ҳавасмандгардонии энергияи сабзиш, нашъунамо, дар натиҷа ба баланд шудани ҳосили гандум ва сифати тухмӣ таъсир мерасонад. Хусусиятҳои таъсири разрядҳои энергия ба энергияи нашъунамо ва сабзиши гандум аз нав дида барнома шудаанд. Солҳои охир дар амалия самаранок истифода бурдани замин усулҳои ҳавасмандгардонии (тезонидани нашъунамо, баланд бардоштани ҳосил, беҳтар намудани сифати зироат) таъсири электрофизикӣ ба растаниҳо ва тухмии зироатҳои ғалладона торафт бештар қарор карда мешаванд. Дар байни усулҳои гуногуни электрофизикӣ, ки дар зироаткорӣ истифода мешаванд, коркарди разряд қойи махсусро ишғол мекунад. Бисёр олимони самаранок баланд ва ба таври истисно ва экологӣ тоза будани коркарди пеш аз киштро ба тухмии зироат, аз ҷумла тухмии зироатҳои техникӣ тасдиқ кардаанд. Мақсади гузошташуда коркарди тухмии гандум бо омилҳои физикӣ мебошад. Аз муҳимтарин параметрҳои плазма вақти табobati бофтаҳои зеризаминиро дар бар мегиранд, ки барои беҳтар кардани самаранокӣ бояд бодикқат интихоб карда шаванд. Таъриба дар шароити саҳроӣ гузаронда шуд. Аз рӯи натиҷаҳои таърибаҳои саҳроӣ маълум гардид, ки бо разряди монета кор кардан ба суръати нашъунамо ва ба сабзиши тухмии гандум дар таърибаи саҳроӣ таъсири мусбат мерасонад.

Калидвожаҳо: разряди монетагӣ, гандум, тухмӣ, энергияи нашъунамо, сабзиш, таърибаи саҳроӣ

ВЛИЯНИЕ БАРЬЕРНОГО РАЗРЯДА НА ЭНЕРГИЮ ПРОРАСТАНИЯ И ВСХОЖЕСТЬ СЕМЯН ПШЕНИЦЫ СОРТА «НАВРУЗ» НА ОТКРЫТОМ ГРУНТЕ

В данной работе описана обработка семян пшеницы 4- и 6-минутными барьерными разрядами. Обработанные семена закладывались на исследовательские делянки при остывании через каждые 48 и 72 часа после обработки барьерным разрядом, который, как показала практика, оказала влияние на стимуляцию роста, энергию прорастания и всхожесть, что привело к повышению урожайности пшеницы и качества семян. В последние годы в практику эффективного хозяйствования на земле все чаще внедряются методы, направленные на стимулирование (ускорение роста, повышение урожайности, улучшение качества урожая) электрофизических воздействий на растения и семена зерновых культур. Среди различных электрофизических методов, применяемых в растениеводстве, особое место занимает разрядная обработка. Основной задачей данного исследования является анализ новых способов обработки семян с физическими факторами, изложены особенности влияния энергетических разрядов на энергию прорастания пшеницы и эффективность проращивания. К числу наиболее важных параметров плазмы относится время обработки подстиляющей ткани, которую необходимо тщательно подбирать для оптимизации эффективности. Настоящее исследование проводилось на открытом грунте. По итогам проведенного эксперимента было выявлено, что до посевной обработки семян пшеницы с барьерным разрядом увеличиваются скорость прорастания и положительный эффект на всхожесть семян пшеницы. В этой статье представлены результаты полевого эксперимента влияния барьерных электрических разрядов на энергию прорастания семян и общую всхожесть.

Ключевые слова: пшеница, семена, физическое воздействие, барьерный разряд, предпосевная обработка, открытый грунт, энергия прорастания, всхожесть.

EFFECT OF BARRIER DISCHARGE ON GERMINATION ENERGY AND GERMINATION OF "NAVRUZ" WHEAT SEEDS IN THE OPEN FIELD

The paper presents the treatment of wheat seeds with barrier discharge for 4 and 6 minutes. Laying of treated seeds on research field was carried out with chilling at 48h and 72h after barrier discharge treatment. Treatment of plants with barrier discharge affects growth stimulation, germination energy, germination and, as a consequence, the increase in wheat yield and seed quality. In recent years, methods aimed at stimulating

(accelerating growth, increasing yield, improving crop quality) electrophysical effects on plants and seeds of grain crops have been increasingly introduced into the practice of effective land management. Among various electrophysical methods used in crop production, a special place is occupied by discharge treatment. Many scientists have confirmed high efficiency and exceptional environmental friendliness of pre-sowing treatment of agricultural seeds, including seeds of technical crops. The present task is to investigate new ways of seed treatment, for example, by physical factors. Characterization of the effects of energy discharges on germination vigor and germination of wheat is reviewed. Some of the most important plasma parameters include the treatment time of the main tissues, which should be carefully chosen, to optimize the efficiency. This experiment was conducted under field condition. Results of field experiments showed that the barrier discharge treatment affected germination rate and had a positive effect on germination of wheat seeds. This paper presents the results of field experiment on the effect of barrier electric discharge on seed germination energy and total germination rate.

Key words: wheat, seeds, physical effects, barrier discharge, pre-sowing treatment, open ground, germination energy, germination.

Маълумот дар бораи муаллифони: Солихова Махина Имомалиевна – Донишқадаи биологии Донишгоҳи Тадқиқотии давлатии Томск, аспирант. **Суроға:** 634050, Томск, Русия. **Телефон:** +79234231995, +992988701187. **E-mail:** solihovamahina@gmail.com

Курзина Ирина Александровна — Донишгоҳи Тадқиқотии давлатии Томск, доктори илмҳои физикаю математика, мудири кафедраи пайвастагиҳои табиӣ, химияи фармасевтӣ ва тиббӣ. **Суроға:** 634050, Томск, Русия. **Телефон:** +79138821028. **E-mail:** kurzina99@mail.ru

Хочазода Тоҳир Абдулло – Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, доктори илмҳои физикаю математика, профессори кафедраи электроникаи физикии факултети физика. **Суроға:** 734025 Душанбе, Тоҷикистон, хиёбони Рӯдакӣ, 17. **Телефон:** +992900526352. **E-mail:** toir.khodzhaiev.62@mail.ru

Хочаев Абдулло Тоирович – Донишқадаи биологии Донишгоҳи Тадқиқотии давлатии Томск, аспирант. **Суроға:** 634050, Томск, Русия. **Телефон:** +79234336452, +992009770532. **E-mail:** abdullo1997asa@gmail.com

Дайбова Елена Борисовна — Институти тадқиқоти илмии зироат ва торфи Сибир — филиали РАСС РФГ, номзади илмҳои химия, мудири лаборатория. **Суроға:** 634050, Томск, Русия. **Телефон:** +79234203876 **E-mail:** edaibova@eandex.ru

Сведения об авторах: Солихова Махина Имомалиевна – аспирантка. **Адрес:** 634050, г. Томск, Россия. **Телефон:** +79234231995, +992988701187. **E-mail:** solihovamahina@gmail.com

Курзина Ирина Александровна – Национальный исследовательский Томский государственный университет, д-р физ.-мат. наук, зав. каф. природных соединений, фармацевтической и медицинской химии. **Адрес:** 634050, г. Томск, Россия. **Телефон:** +79138821028. **E-mail:** kurzina99@mail.ru

Ходжазода Тоҳир Абдулло – Таджикский национальный университет, д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры физической электроники Физического факультета. **Адрес:** 734025, г. Душанбе, Таджикистан, проспект Рудаки, 17. **Телефон:** +992900526352. **E-mail:** toir.khodzhaiev.62@mail.ru

Ходжаев Абдулло Тоирович – Биологический институт Национального Исследовательского Томского государственного университета, аспирант. **Адрес:** 634050, г. Томск, Россия. **Телефон:** +79234336452, +992009770532. **E-mail:** abdullo1997asa@gmail.com

Дайбова Елена Борисовна – НИИ растениеводства и торфа Сибири – филиал РАНС РФ, кандидат химических наук, заведующая лабораторией. **Адрес:** 634050, г. Томск, Россия. **Телефон:** +79234203876. **E-mail:** edaibova@eandex.ru

Information about the authors: Solihova Mahina Imomalievna - Institute of Biology, Tomsk State Research University, graduate student. **Address:** 634050, Tomsk, Russia. **Phone:** +79234231995, +992988701187. **E-mail:** solihovamahina@gmail.com

Kurzina Irina Aleksandrovna - Tomsk State Research University, doctor of physics and mathematics, head of the department of natural compounds, pharmaceutical and medical chemistry. **Address:** 634050, Tomsk, Russia. **Phone:** +79138821028. **E-mail:** kurzina99@mail.ru

Khojazoda Tohir Abdullo – Tajik National University, Doctor of Physics and Mathematics, Professor of the Department of Physical Electronics, Faculty of Physics. **Address:** 734025 Dushanbe, Tajikistan, 17 Rudaki Ave. **Phone:** +992900526352. **E-mail:** toir.khodzhaiev.62@mail.ru

Khojaev Abdullo Toirovich - Institute of Biology, Tomsk State Research University, graduate student. **Address:** 634050, Tomsk, Russia. **Phone:** +79234336452, +992009770532. **E-mail:** abdullo1997asa@gmail.com

Daybova Elena Borisovna - Scientific Research Institute of Crops and Peat of Siberia - branch of RASS of the Russian Federation, candidate of chemical sciences, head of the laboratory. **Address:** 634050, Tomsk, Russia. **Phone:** +79234203876. **E-mail:** edaibova@eandex.ru

Статья поступила в редакцию 18.12.2023
Одобрена после рецензирования 20.01.2024
Принята к публикации 28.03.2024

ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ ПАВ НА ИЗМЕНЕНИЯ ПЛОСКОСТИ ПОЛЯРИЗАЦИИ СВЕТА ПРИ ПРОХОЖДЕНИИ ЧЕРЕЗ ЖК-СРЕДУ

¹Махсудов Б.И., ²Эгамов М.Х., ³Рахимова У. Дж.

¹Таджикский национальный университет

²Худжандский научный центр Национальной Академии наук Таджикистана,

³Таджикский государственный университет права, бизнеса и политики

Хотя за последние полувек достигнуты ощутимые успехи в исследовании структуры и свойства жидких кристаллов, относящиеся к оптической электроники, голографии и информационной безопасности [1-3], некоторые вопросы в этом аспекте все еще остаются до конца не решенными. К таким проблемам можно отнести взаимосвязи ориентационного порядка в нематиках в присутствии катионных поверхностно активных веществ (ПАВ). В сущности, данная задача довольно многогранна и ее решения во многом определяется разновидностью введенных в объем нематика микрочастицы в качестве примеси, их природой, а также ряда внешних дестабилизирующих факторов [4]. В нематиках наблюдается явления анизотропии двулучепреломления, которая контролируется внешними полями (электрическим, магнитным, световым, звуковым или механическим). Такой эффект позволяет моделировать светового излучения оптического диапазона по важным физическим параметрам, как фазе, амплитуде и поляризации. При исследовании нематических жидких кристаллах (НЖК) в отсутствие внешних сил, за счет анизотропии показателя преломления (Δn) можно изменять ориентацию плоскости поляризации светового излучения, проходящего через ячейку. Соответственно, они могут применяться в качестве сред для пассивных оптических фазовращателей и служить как альтернативный вариант для водных растворов на основе красителей [5,6].

Существует аналогичный способ разработки ЖК элементов, предназначенные для поляризации светового излучения под действием электрического поля (активный режим), либо при их отсутствии (пассивный режим). Для этого с целью улучшения яркости, контраста и быстродействия, применяются специальные ориентирующие поверхности с заранее выбранной морфологии [7], а объем ячейки ЖК заполняется поверхностно-активными веществами (ПАВ). При введении ПАВ в ЖК среде, анизотропия показателя преломления (Δn) сильно меняется. Следовательно, последний аргумент влияет на величину изменения плоскости поляризации между падающим и прямо прошедшим через ЖК ячейку лучами

$$\Delta \varphi = \frac{2\pi d}{\lambda} \cdot \Delta n = \frac{2\pi d}{\lambda} \cdot (n_e - n_o) \quad (1)$$

где d – толщина ЖК слоя; n_o – показатель преломления для обыкновенного луча; n_e – показатель преломления для необыкновенного луча. В уравнении (1) величина n_o является постоянной величиной для исследуемого ЖК-материала, а n_e строго зависит от степени ориентации директора (преимущественная направления ориентации молекул вдоль главной оптической оси) ЖК. Изменения плоскости поляризации $\Delta \varphi$ в уравнении (1) отрицательно влияет на работу ЖК-устройств как в пассивном, так и в активном режиме. Поэтому с целью снижения нежелательных потерь интенсивности моделируемого светового пучка, необходимо решать задачу согласования ЖК элементов с оптической схемой устройства по положению плоскости поляризации. Данная работа посвящена решению именно такого рода проблему.

Для решения указанной задачи нами исследовались влияния концентрации поверхностно-активных сред (ПАВ) в виде наночастиц из катионного сурфактанта – цетилтриметиламмоний бромида (ЦТАБ) на величину изменения плоскости поляризации света в нематическом жидком кристалле (НЖК) 4-пентил-4-цианофениле

(5СВ). Это позволяет согласовывать по степени ориентации плоскости поляризации жидкокристаллическую ячейку и поляризатор не только за счет толщины слоя, но и за счет концентрации ЦТАБ.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Жидкокристаллическая ячейка была создана в конфигурации твист-нематика, состоящая из двух параллельно расположенных стеклянных пластин, с одной стороны которых были нанесены проводящие металлические покрытия на основе оксидов индия-олова (ITO). Последние имели толщину ~200 мкм с тройным содержанием 74% (In), 18% (O₂) и 8% (Sn) по весу [8,9]. В тонких слоях покрытия ITO становится прозрачным и бесцветным, поэтому в ИК области спектра действует, как металлическое стекло. Тонкие пленки ITO осаждали на поверхности стеклянных подложек посредством физического осаждения из паровой фазы. Для подготовки и перемешивания ЖК смеси использовали магнитную мешалку со скоростью вращения 3500 об/мин. Толщина ЖК слоя регулировали тефлоновыми прокладками. Для определения вращения плоскости поляризации использовался Ge-Ne лазер с длиной волны $\lambda=0,633$ нм при комнатной температуре. Первоначальное положение поляризатора и анализатора выбирали таким способом, чтобы при размещении двух противоположно расположенных стеклянных пластинок с толщиной ЖК ячейки 8 – 10 мкм выполнялся максимальное пропускание света [10]. Прошедший сигнал через ячейку регистрировались на фотоприемнике ФД-10-ГБ.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Поверхностно-активное вещество (ПАВ) в виде ионного сурфактанта цетилтриметиламмоний бромида (ЦТАБ), растворяясь в смеси нематического жидкого кристалла (НЖК), диссоциирует на положительный поверхностно-активный ион СТА⁺ и отрицательные ионы Br⁻. Ионы СТА⁺ адсорбируются на подложках субстрата и определяют гомеотропное сцепление нематика [11-13]. Как упоминалось выше, формирование гомеотропной или скрученной конфигурации директора при жестком перпендикулярном сцеплении зависит от коэффициента сцепления ρ . Критическое значение ρ_c , соответствующее переходу между этими структурами, определяется отношением модуля упругости жидкого кристалла и составляет около единицы для полимерной матрицы ПВС.

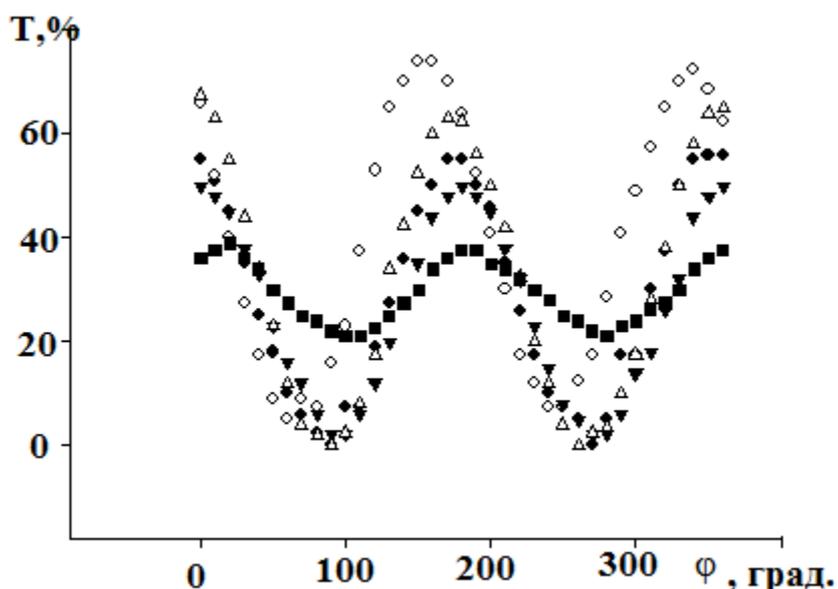


Рис. 1 Зависимость светопропускания НЖК 5СВ ячеек от угла вращения поляризатора (■) – исходный; (◆) – 0,05 вес.%; (◇) – 0,1 вес.%; (▼) – 0,3 вес.%; (△) – 0,5 вес.%

Fig. 1 Dependence of the light transmission of NLC 5SV cells on the angle of rotation of the polarizer (■) – initial; (◆) – 0.05 wt.%; (◇) – 0.1 wt.%; (▼) – 0.3 wt.%; (Δ) – 0.5 weight. %

Результаты наблюдений показали, что конфигурации исследуемых нами ячеек при введении ПАВ, состоит из совокупности двух составляющих: за счет концентрации ПАВ и изменения плоскости поляризации в боковых ограничивающих плоскостях. Последнее почти не вносит вклад на исследуемый нами эффект, поэтому их можно не учитывать. На рис.1 иллюстрированы зависимости коэффициента светопропускания ЖК ячеек 5СВ с различными концентрациями ПАВ от угла поворота образцов по отношению к анализатору и поляризатору.

Экспериментальная установка для определения зависимости коэффициента светопропускания ЖК ячеек с разными концентрациями от взаимного расположения между анализатором и поляризатором собирали таким способом, чтобы максимальная пропускания наблюдалась между 0 и 180°, а минимальная пропускания наблюдали при 90 и 270°. Тогда можно выявить положение максимумов коэффициентов пропускания на основе закона Малюса. Эти сдвиги хорошо прослеживаются при анализе значений, приведенные в таблице 1.

Таблица 1. Изменения плоскости поляризации в ЖК ячейки
Table 1. Changes in the plane of polarization in an LC cell

Положение экстремума коэффициента пропускания	Концентрация ЦТАБ в составе НЖК 5 СВ, вес. %				
	0	0,05	0,1	0,3	0,5
90°	86,1	85,7	66,4	94,8	101,5
180°	173,8	174,3	155,0	181,9	186,6
270°	266,1	266,0	245,4	172,1	279,8
360°	255,5	353,4	338,1	361,8	375,5

Как видно, с ростом концентрации ПАВ ЦТАБ наблюдается сдвиг всех максимумов, кроме образцов, содержащие 0,1% ЦТАБ, по отношению к максимуму коэффициента светопропускания для исходного НЖК 5СВ. Причем, среднее отклонение положения экстремумов по отношению к исходному НЖК 5СВ для концентрации 0,05 и 0,1 % отрицательно (соответственно на -0,5° и -19,2°), а для концентраций 0,3% и 0,5% положительно (соответственно на 7,3° и 15,5°). В [14] показано, что концентрация 0,1% соответствует концентрационному условию, при котором выполняется переход из нематического состояния к смектическому. В нашем же случае такой переход проявляется в изменении поляризационных свойств исследуемых пленок.

Из рис. 1 мы можем определить отношение амплитуд интенсивности излучения, прошедшие через жидкокристаллической ячейки относительно оси ox и oy . Основным условием для определения амплитуды интенсивности излучения по оси ox коэффициент пропускания должен быть максимальным, а по оси oy - наоборот, минимальным. Тогда, используя сдвиг экстремумов $\Delta\varphi$ и отношения I_{ox}/I_{oy} можно определить азимутальный угол α и эллиптический угол ε , которые объясняют излучение при эллиптической поляризации [8];

$$tg(2\alpha) = \frac{2\sqrt{\frac{I_{ox}}{I_{oy}}}}{1 - \left(\frac{I_{ox}}{I_{oy}}\right)} \cdot \cos(\Delta\varphi) \quad (2)$$

$$\sin(2\varepsilon) = \frac{2\sqrt{\frac{I_{ox}}{I_{oy}}}}{1 + \left(\frac{I_{ox}}{I_{oy}}\right)} \cdot \sin(\Delta\varphi) \quad (3)$$

Оказалось, что для исходного НЖК 5СВ и ячейки с концентрацией 0,05% ЦТАБ-а световые излучения, прошедшие через ячейки, можно воспринимать как поляризованным, так как отношение I_{ox}/I_{oy} больше 100; в ячейках, содержащие НЖК 5СВ и концентрации 0,1 и 0,3 вес.% ЦТАБ-а, световые излучения можно считать линейно поляризованным, ибо выполняется условия $10 < I_{ox}/I_{oy} < 100$; а ячейка с содержанием 0,5 вес.% ПАВ-а служит средством для получения эллиптической поляризации света. В последнем случае имеет место условия I_{ox}/I_{oy} меньше 100. Для интерпретации полученных результатов мы учитывали влияние ПАВ ЦТАБ-а на директор НЖК 5СВ. Для этого выбирали оси z так, чтобы выполнялась условия перпендикулярности к плоскости стеклянной подложки [15,16]. В таком случае зависимость показателя преломления (n_e) от угла смещения θ экстремумов записывается выражением

$$n_e(\theta) = \frac{n_{\perp} n_{\parallel}}{\sqrt{n_{\perp}^2 (\cos \theta(z))^2 + n_{\parallel}^2 (\sin \theta(z))^2}} \quad (4)$$

Здесь при пассивном режиме (при отсутствии внешнего поля) ячейки $n_e = n_{\parallel}$, где $\Delta n = n_{\parallel} - n_0$, а при активном режиме (т.е. при присутствии внешнего электрического поля) - $n_e = n_{\perp}$, где $\Delta n = n_{\perp} - n_0$. Это означает, что под действием внешнего электрического поля наблюдается переориентация директора НЖК 5СВ и локальные флуктуации диполей в объеме капли жидкого кристалла относительно вводимых ПАВ ЦТАБ. Полученные результаты также можно объяснить с изменением анизотропии показателя преломления (n_e) и находятся в хорошем согласии с результатами работ [17], где были исследованы аналогичные параметры по быстродействию ЖК ячеек. Проанализировав экспериментальные данные по изменению состояния плоскости поляризации в ячейках из НЖК 5СВ и концентрацией ПАВ ЦТАБ, выдвигаются следующие выводы.

При концентрациях ПАВ ЦТАБ 0,3 и 0,5 вес. % можно изменять положение плоскости поляризации по отношению к исходному ячейку НЖК 5СВ соответственно на 7,3 и 15,5°. Аналогичные результаты можно получать при концентрациях 0,1 вес. % на величину 19,2°, а для 0,05 вес. % всего лишь на 0,5°, которое мы связываем с погрешностью измерительных аппаратур и незначительным флуктуациям оптических свойств, концентрированных НЖК по отношению к исходным ячейкам.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Изменения концентрации ЦТАБ способствует не переставать толщины ЖК ячеек и не прибегать к применению дополнительных механизмов и устройств типа вращателей плоскости поляризации для согласования НДК элементов с внешними оптическими схемами. Данный факт имеет ценный практический интерес для дисплейных технологий, так как можно интегрировать композит НЖК с добавкой ПАВ ЦТАБ, с улучшенными спектральными и динамическими характеристиками, установить в корпус устройства фиксации толщины. Исследуемые ЖК-композиты могут использоваться как пассивные вращатели плоскости поляризации, величина вращения которых перестраивается за счет изменения концентрации ПАВ ЦТАБ и толщины слоя ячейки. Для лазерной техники данная взаимосвязь выгодно в тех условиях, когда не имеется возможности изменять толщину слоя или же невозможно изменения положения поляризатора.

Работа выполнена в рамках проекта «Исследование структуры, механические и оптические свойства новых оптоэлектронных элементов на основе полимерно-

Конфликт интересов. Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

**Рецензент: Абдуллоев Х.М.,
доктор физико-математических наук,
профессор**

ЛИТЕРАТУРА

1. P.G. de Gennes, The Physics of Liquid Crystals / P.G. de Gennes, J. Prost. // Clarendon Press, Oxford, - 1993. – 597 p.
2. Вальков А.Ю. Флуктуации и рассеяния света в жидких кристаллах / А.Ю.Вальков, В.П.Романов, А.Н. Шалагинов // - УФН, 1994. – Т. 164. Вып.2. – С.149-193
3. Egamov M.Kh. The structural transformation of polymer dispersed liquid crystalline films in external deformation field -Journal of Physics: / M.Kh. Egamov // Conference Series, - 2018. – P.012013
4. Попов В.А. Влияние слабого сцепления на магнитный переход Фредерикса в ферронематическом жидком кристалле / В.А. Попов, В.Г. Гилев, А.Н. Захлевных // Физика твердого тела. – 2018. – Т.60. Вып. 7. – С. 1445-1450
5. Krizhanovskii D.N., / D.N. Krizhanovskii, D. Sanvitto, I.A. Shelykh, M.M. Glazov, G. Malpucchi, D.D. Solnyshkov, A. Kavokin, S. Ceccarelli, M.S. Skolnick, J.S. Roberts // Phys. Rev. B. 2006. V. 93. No 7. – P.073303
6. Warsi S.S. / S.S.A. Warsi, R. Manohar // Ind. J. Sci. Technol., 2022, Vol. 15, No.21. – P. 1052-1059
7. Chausov D.N., / D.N. Chausov, A.D. Kurilov, R.N. Kucherov, A.V. Simakin, S.V. Gudkov // J. Phys.: Condens. Matter. 2020, Vol. 32, NO. 39. – P. 395102
8. Эгамов М.Х. Поляризующее свойства вытянутой пленки капсулированного полимером жидкий кристалл с примесью сурфактанта / М.Х. Эгамов, В.П. Герасимов, М.Н. Крахалев, О.О. Прищепа, В.А. Лойко, В.Я. Зырянов // Оптический журнал - 2014. - Т. - 81, №7. – С. 67-71
9. Эгамов М.Х., Поляризаторы света на основе композитных «полимер-ЖК-сурфактант» пленок в качестве анизотропно-рассеивающих сред / М.Х. Эгамов, О.О. Прищепа, В.П. Герасимов, М.Н. Крахалев, В.А. Лойко // Известия ВУЗов. Серия Физики. – 2013. – Т. 56. - № 2-2. – С. 258-263
10. Эгамов М.Х. Эффект светорассеяния полимерно-жидкокристаллических композитов со спонтанной самоорганизацией структуры / М.Х. Эгамов, У. Дж. Рахимова // Известия НАН Таджикистана. - 2022, - № 3 (188). - С.78-84
11. Махсудов Б.И. Влияние мощности излучения инжекционного лазера на оптические свойства композитов на основе «полимер-жидкий кристалл» / Б.И. Махсудов, М.Х. Эгамов, И.Х. Файзуллоев // Вестник Таджикского национального университета. Серия естественных наук. - 2019. - №3. – С. 83-89
12. Эгамов М.Х., Конформационные переходы в капсулированных полимером жидкокристаллических пленках / М.Х. Эгамов, С.К. Каримов, А. Абдуманонов // Доклады НАНТ, - 2022. - Т.- 65, №1-2. – С.75-80
13. Махсудов Б.И., Температурная зависимость оптических свойств в композитах на основе полимер-нематического жидкого кристалла при одноосной деформации / Б.И. Махсудов, И.Х. Файзуллоев, М.Х. Эгамов // Доклады НАНТ, - 2021. - Т.64, № 9-10. – С.536-541
14. Калитаевский Н.И. Волновая оптика / Н.И. Калитаевский // Учеб. пособие для университетов. Изд. 2-е, испр. и доп. – М.: Высшая школа, - 1978. – С.383.
15. Эгамов М.Х. Видоизменения структуры полимерно-жидкокристаллических пленок для получения поляризаторов / М.Х. Эгамов, У. Дж. Рахимова // Доклады НАНТ, - 2021, - Т. 64. № 11-12. – С. 682-686
16. Махсудов Б.И. Нелинейные оптические явления при взаимодействии лазерного излучения с композитами на основе полимер-нематического жидкого кристалла при одноосной деформации / Б.И.Махсудов, М.Х.Эгамов, И.Х. Файзуллоев // Вестник Таджикского национального университета. Серия естественных наук. - 2022. №1. – С. 104-115
17. Махсудов Б.И. Оптический гистерезис в композитах на основе полимер-нематический жидкий кристалл при одноосной деформации / Б.И. Махсудов, И.Х. Файзуллоев, М.Х. Эгамов // Известия ВУЗов. Серия физики. – 2022. – Т. 65, № 3 (772). – С.88-91. DOI: 10.17223/00213411/65/3/88

REFERENCES

1. P.G. de Gennes, The Physics of Liquid Crystals. / P.G. de Gennes, J. Prost. // Clarendon Press, Oxford, - 1993. – 597 p.
2. Valkov A.Yu. Fluctuations and light scattering in liquid crystals / Valkov A.Yu., Romanov V.P., Shalaginov A.N. // UFN -1994.- Volume 164. No. 2. – Pp.149-193
3. Egamov M.Kh. The structural transformation of polymer dispersed liquid crystalline films in external deformation field -Journal of Physics: / M.Kh. Egamov // Conference Series, - 2018. – P.012013

4. Popov V.A., Gilev V.G., Zakhlevnykh A.N. The influence of weak adhesion on the magnetic Fredericks transition in a ferroelectric liquid crystal / V.A. Popov, V.G. Gilev, A.N. Zakhlevnykh // *Solid State Physics*. – 2018. – Volume 60. ISSUE. 7. – Pp.1445-1450
5. Krizhanovskii D.N./ D.N. Krizhanovskii, D. Sanvitto, I.A. Shelykh, M.M. Glazov, G. Malpucchi, D.D. Solnyshkov, A. Kavokin, S. Ceccarelli, M.S. Skolnick, J.S. Roberts // *Phys. Rev. B*. 2006, V. 93, No 7. – P.073303
6. Warsi S.S. / S.S.A. Warsi, R. Manohar // *Ind. J. Sci. Technol.*, 2022, Vol. 15, No.21. – Pp.1052-1059
7. Chausov D.N. / D.N. Chausov, A.D. Kurilov, R.N. Kucherov, A.V. Simakin, S.V. Gudkov // *J. Phys.: Condens. Matter*. 2020. – Vol.32. No. 39. – P. 395102
8. Egamov M.Kh. Polarizing properties of an elongated film of polymer-encapsulated liquid crystal with an admixture of surfactant / M.Kh. Egamov, V.P. Gerasimov, M.N. Krakhalev, O.O. Prishchepa, V.A. Loiko, V.Ya. Zyryanov // *Optical Journal* - 2014. - Т. - 81, №7. – Pp.67-71
9. Egamov M.Kh. Light polarizers based on composite “polymer-LC-surfactant” films as anisotropic scattering media / M.Kh. Egamov, O.O. Prishchepa, V.P. Gerasimov, M.N. Krakhalev, V.A. Loiko // *News of Universities. Physics Series*. – 2013. – Vol.56, - No. 2-2. – Pp. 258-263
10. Egamov M.Kh., Light scattering effect of polymer-liquid crystal composites with spontaneous self-organization of structure / M.Kh. Egamov, U. J. Rakhimova // *News of the National Academy of Sciences of Tajikistan*. – 2022. - No. 3 (188). – Pp.78-84
11. Makhsudov B.I., Influence of injection laser radiation power on the optical properties of composites based on “polymer-liquid crystal” / B.I. Makhsudov, M.Kh. Egamov, I.Kh. Faizulloev // *Bulletin of the Tajik National University. Natural Sciences Series*. - 2019. - No. 3. – Pp. 83-89
12. Egamov M.Kh., Conformational transitions in polymer-encapsulated liquid crystal films / M.Kh. Egamov, S.K. Karimov, A. Abdumanovov // *Reports of NAST*, - 2022. – Т. - 65, No. 1-2. – Pp.75-80
13. Makhsudov B.I., Temperature dependence of optical properties in composites based on a polymer-nematic liquid crystal under uniaxial deformation / B.I. Makhsudov, I.Kh. Faizulloev, M.Kh. Egamov // *Reports of NAST*, - 2021. - Volume 64, No. 9-10. – Pp.536-541
14. Kalitaevsky N.I. Wave optics / N.I. Kalitaevsky // *Textbook. Manual for universities*. Ed. 2nd, rev. and additional. – M.: Higher School, - 1978. – P.383.
15. Egamov M.Kh. Modifications of the structure of polymer-liquid-crystal films for the production of polarizers / M.Kh. Egamov, U. J. Rakhimova // *Reports of the National Academy of Sciences of Tajikistan*, - 2021. - Volume 64. No. 11-12. – Pp.682-686
16. Makhsudov B.I. Nonlinear optical phenomena in the interaction of laser radiation with composites based on polymer-nematic liquid crystal under uniaxial deformation / B.I. Makhsudov, M.Kh. Egamov, I.Kh. Faizulloev // *Bulletin of the Tajik National University. Natural Sciences Series*. - 2022. No. 1. – Pp. 104-115
17. Makhsudov B.I. Optical hysteresis in composites based on a polymer-nematic liquid crystal under uniaxial deformation / B.I. Makhsudov, I.Kh. Faizulloev, M.Kh. Egamov // *News of Universities. Physics series*. – 2022. –Т.65, № 3 (772). – Pp.88-91. DOI: 10.17223/00213411/65/3/88

ТАЪСИРИ КОНЦЕНТРАТСИЯИ ПАВ БА ТАҒИРЁБИИ ҲАМВОРИИ ПОЛЯРИЗАТСИЯИ НУР ҲАНГОМИ ГУЗАШТАН АЗ МУҲИТ

Таъсири маводи сатҳии фаъл дар мисоли сепилтриметил аммоний бромид (СТАВ) ба ячйкаи кристалли моеи нематикӣ навъи 4-пентил-4-сианофенил (5СВ) омӯхта шудааст. Алоқамандии мутақобилаи байни концентратсияи маводи сатҳии фаъл ва кунҷи гардиши ҳамвории поляризацсия муқаррар карда шудааст. Сарҳади саҳеҳи поляризацсияи хаттӣ ва эллипсоидалии рӯшноии аз ячйка гузашта дар алоқамандӣ ба концентратсияи маводи сатҳии фаёли СТАВ нишон дода шудааст. Вариантҳои имконпазири татбиқи чун маводҳо дар техникаи лазерии нимқоқилӣ ва технологияҳои дисплей пешниҳод гардидааст.

Калидвожаҳо: маводи сатҳии фаъл, кристалли моё, рӯшноигузaronӣ, самтноқшавӣ, анизотропияи оптикӣ, ҳамвории поляризацсия

ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ ПАВ НА ИЗМЕНЕНИЯ ПЛОСКОСТИ ПОЛЯРИЗАЦИИ СВЕТА ПРИ ПРОХОЖДЕНИИ ЧЕРЕЗ ЖК-СРЕДУ

Поляризационно-оптическим методом исследовано влияние поверхностно-активных веществ (ПАВ) в виде сепилтриметил аммоний бромида (СТАВ) в нематических жидкокристаллических ячейках типа 5СВ. Установлена взаимосвязь между концентрациями вводимого ПАВ и углом поворота плоскости поляризации. Указаны четкие границы линейной и эллиптической поляризации прошедшего через ячейку света в зависимости от концентрации ПАВ СТАВ. Предложены возможные применения таких материалов в полупроводниковой и твердотельной лазерной технике, и дисплейных технологиях.

Ключевые слова: поверхностно-активное вещество, жидкий кристалл, светопропускания, ориентация, оптическая анизотропия, плоскость поляризации.

THE EFFECT OF SURFACTANT CONCENTRATION ON CHANGES IN THE PLANE OF POLARIZATION OF LIGHT PASSING THROUGH THE LCD MEDIUM

The effect of surfactants in the form of cetyltrimethyl ammonium bromide (CTAB) in nematic liquid crystal cells of type 5CB have been studied by the polarization-optical method. The relationship between the concentrations of the introduced surfactant and the angle of rotation of the polarization plane is established. The clear boundaries of the linear and elliptical polarization of the light transmitted through the cell are indicated, depending on the concentration of surface-active substances (surfactants). Possible applications of such materials in semiconductor and solid-state laser technology and display technologies are proposed.

Keywords: surface-active substance (surfactant), liquid crystal, light transmission, orientation, optical anisotropy, polarization plane.

Маълумот дар бораи муаллиф: –Махсудов Барот Исломович - Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, доктори илмҳои физика ва математика, профессори кафедраи физикаи ҳастай. **Суроға:** 734025, ш. Душанбе, Ҷумҳурии Тоҷикистон, хиёбони Рӯдакӣ, 17. **Телефон:** +992-907-74-33-83. **E-mail:** maksudov_barot@mail.ru

Эгамов Мухтор Хасанович – Маркази илмии Хучанди АМИТ, номзади илмҳои физика ва математика. **Суроға:** 735730, Хучанд, Тоҷикистон, кӯчаи Кайҳоннавардон, 2-42. **Телефон:** (+992) 939-83-93-53. **E-mail:** egamov62@mail.ru.

Раҳимова Умедахон Ҷӯрабоевна – Донишгоҳи давлатии ҳуқуқ, бизнес ва сиёсати Тоҷикистон, ассистенти кафедраи иттилоотӣ-коммуникатсионӣ ва барномасозӣ. **Суроға:** 735700, ш. Хучанд, Тоҷикистон, микроноҳияи 19. **Телефон:** (+992) 925-55-55-20. **E-mail:** rakhimova0508@mail.ru

Сведения об авторах: –Махсудов Барот Исломович – Таджикский национальный университет, доктор физико-математических наук, профессор кафедры ядерной физики. **Адрес:** 734025, г. Душанбе, Республика Таджикистан, пр. Рудаки, 17. **Телефон:** +992-907-74-33-83. **E-mail:** maksudov_barot@mail.ru

Эгамов Мухтор Хасанович – Худжандский научный центр НАНТ, кандидат физико-математических наук. **Адрес:** 735730, г.Худжанд, Республика Таджикистан, ул. Космонавтов, 2-42. **Телефон:** (+992) 939-83-93-53. **E-mail:** egamov62@mail.ru.

Раҳимова Умедахон Ҷӯрабоевна – Таджикский государственный университет права, бизнеса и политики, ассистент кафедры информационно-коммуникационных технологий и программирования. **Адрес:** 735700, г. Худжанд, Таджикистан, 19 мкр-р. **Телефон:** (+992) 925-55-55-20. **E-mail:** rakhimova0508@mail.ru

Information about the authors: Makhsudov Barot Isломovich – Tajik National University, doctor of Physical and Mathematical Sciences head of the nuclear physics, professor. **Address:** 734025, Dushanbe, Republic of Tajikistan, ,Rudaki Avenue, 17. **Phone:** +992-907-74-33-83. **E-mail:** maksudov_barot@mail.ru

Egamov Mukhtor Khasanovich – Khujand Scientific Center of the National Academy of Sciences of the Republic of Tajikistan, Candidate of Physical and Mathematical Sciences. **Address:** 735730, Khujand, Republic of Tajikistan, Kosmonavtov st., 2-42. **Phone:** (+992) 939-83-93-53. **E-mail:** egamov62@mail.ru.

Rahimova Umedakhon Juraboevna - Tajik state university of Law, Business and Policy, assistant of the information and communication technologies and programming department. **Address:** 735700, Khujand, Tajikistan, 19 micro district. **Phone:** (+992) 925-55-55-20. **E-mail:** rakhimova0508@mail.ru.

Статья поступила в редакцию 29.09.2023
Одобрена после рецензирования 04.12.2024
Принята к публикации 02.03.2024

**ИССЛЕДОВАНИЕ СТАЦИОНАРНОЕ ЯВЛЕНИЕ ТЕПЛООБМЕНА В
СФЕРИЧЕСКОЙ КОНДЕНСИРОВАННОЙ СРЕДЕ**¹Джураев Х.Ш., ²Джураева Г.Х.¹Таджикский национальный университет²Таджикский государственный педагогический университет им. С. Айни

1. ВВЕДЕНИЕ. Тепловые процессы распространены в различных цилиндрической конденсированной средах, в частном случае производствах: металлов, термическая их обработка, машиностроение, нефтепереработка, химическая, пищевая промышленность, производство строительных материалов. В любом хозяйстве промышленность или науки и техники обязательно есть множество теплообменных аппаратов. Например, на машиностроительных заводах тепловая энергия применяется для обеспечения целого ряда технологических процессов: нагрев воды в ваннах, сушка форм в сушилах. Кроме того, теплообменные аппараты часто являются вспомогательными устройствами в котельных, компрессорных станциях. На машиностроительных заводах есть бойлерные установки, в которых приготавливается горячая вода для производственных и бытовых нужд. На выходе из термических или нагревательных печей устанавливаются рекуперативные теплообменники для нагрева дутьевого воздуха отходящими дымовыми газами. На предприятиях химической промышленности также много теплового оборудования: реакторы, выпарные и ректификационные установки, испарители. На предприятиях пищевой промышленности много варочных аппаратов, холодильных установок, вакуумных и сушильных установок. В производстве стройматериалов используются сушильные установки, барабанные сушилки для сушки песка, гравия, холодильные установки. Теплообменный аппарат – устройство для передачи тепла от одной среды к другой или от одной к нескольким, или от нескольких к одной. Все эти процессы инженерно-технические объекты, которые постоянно находятся под непосредственным воздействием климатических факторов, одним из которых являются термодинамические условия. В связи с этим процессы теплообмена и массообменная приобретают все большее значение.

Как известно [1-6], любая конденсированная среда служит материальной структурной конструкции; по своему физико-химическому составу они образуют набор взаимосвязанных и взаимозависимых фаз. В них по отдельности и совместно протекают различные процессы, энергия и направление которых зависят от термодинамических условий окружающей среды. При циклических изменениях температуры воздуха изменяется температура слоев конденсированного вещества. Это приводит к циклическим изменениям содержания влаги, структуры и стабильности конденсированной среды. Надежность и экономичность перспективных энергетических объектов во многом, а иногда и в значительной степени, зависит от того, насколько грамотно организована система конструкционных энергетических материалов, что в конечном итоге определяет надежность инженерно-технических методов расчета теплопередачи. Для правильного и обоснованного проектирования мероприятий, направленных на регулирование тепловых процессов в различных задачах с целью исключения их влияния на долговечность, надежность и экономичность конструкционных материалов в естественных условиях и при использовании различных теплоизоляционных материалов. В этом случае расчетные модели также используются для определения толщины теплоизоляционных устройств и облицовочных конструкций. Процесс теплопередачи и массообменные цилиндрической конденсированной среды носит пространственный характер, для получения полной картины необходимо исходить из решения задачи пространственной термодинамики. Разработан ряд математических моделей и методов их применения для инженерных расчетов традиционных задач. Однако с развитием технологического уклада, который постоянно ставит новые и

разнообразные задачи перед специалистами в этой области и требует их изучения, был задан приближенный метод рассмотрения одномерного теплового потока, основанный на определении температурного слоя.

В общем случае, когда математическое моделирование имеет тип сингулярно-возмущенных дифференциальных уравнений второго порядка, то количество особых точек изменятся и фазовую плоскость можно разделить на области с различным поведением стабильных и нестабильных решений системы уравнений. Для задачи о тепловом потоке и температуре, рассмотренной [7-9], это происходит, когда небольшим параметром, описывающим поведение температуры и теплового потока (нелинейная функция переменных координат), изменит свою структуру по сравнению с некоторыми параметрами, включенными в уравнение или систему уравнений.

Во многих физических задачах представляет интерес модельное исследование стационарных (установившихся) решений [6, 7, 10-14]. В этом случае сингулярные возмущенные обыкновенные дифференциальные уравнения второго порядка, то есть стационарные уравнения теплопроводности с одной пространственной переменной, превращаются в краевую задачу для системы обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка с неизвестными функциями температуры и теплового потока (см. [10-15]). Поскольку краевая задача порождается преобразованием стационарного уравнения теплопроводности, то важным аспектом ее изучения является анализ и оценка поведения решений краевой задачи в виде некоторых фазовых структур.

Метод модельного представления аналитического решения для анализа задачи можно рассматривать как разновидность геометрической формы (графики), которая используется на таких этапах технологии вычислительного эксперимента, как построение модели и ее верификация [15-20]. Данная работа посвящена развитию этих методов, его применению к модельному представлению, изучаются задачи стационарных процессов теплообмена в цилиндрических конденсированных средах. Численно определено возмущенного и невозмущенного близости решения при действии начального приближения с допустимой точностью.

2. ВЫСКАЗЫВАНИЕ ВОПРОС. В работах [6-8] исследуются процесс диффузионно-реактивного переноса в среде с объемным и плоским источником тепла и коэффициентом теплопроводности, зависящим от малого параметра. Распределение температуры $T(r, \varepsilon)$ в рамках задач модельное представление стационарное теплообмена в цилиндрической среде осуществляется с помощью следующей уравнения:

$$\varepsilon^2 \frac{d^2 T(r, \varepsilon)}{dr^2} + \frac{2\varepsilon^2}{r} \cdot \frac{dT(r, \varepsilon)}{dr} - g(r)T(r, \varepsilon) = f(r), \quad (1)$$

где ε -малый параметр; r -радиус сфера; функции $g(r)$ и $f(r)$ заданы, множитель и источник тепло соответственно, и по крайней мере, непрерывны на отрезке $[0, a]$, причем $g(r) \geq 0$.

Предположим, что $g(r)$, $f(r)$ функции известны, мы рассмотрим нахождение решения уравнения (1) в соответствии с выполнением граничных условий:

$$\left(\gamma_1 \frac{dT(r, \varepsilon)}{dr} + \gamma_2 T(r, \varepsilon) \right) \Big|_{\Gamma} = \begin{cases} |T(0, \varepsilon)| < \infty & \text{при } r = 0, \\ \psi & \text{при } r = a. \end{cases} \quad (2)$$

Здесь γ_1 , γ_2 - числа, а ψ - заданное число.

Чтобы уточнить решение, полученное на основе модели, для уточнения ошибок этого решения используется разновидность метода возмущений, и им посвящена обширная литература [21-24]. Эффективный выбор модели для неповрежденного и возмущенного решения должен осуществлять во многих ситуациях, даже при действии

начального приближения, чтобы получить решение с удовлетворительной погрешностью при относительно незначительных затратах на исследования.

Пусть мы заинтересованными в возмущения, описываемые математическим моделям как выражения вида (1), при заданных граничных условиях (2). Если мы поместим $\varepsilon = 0$, то есть отбросим возмущение в формулу (1), то в этом случае мы имеем:

$$g(r)v(r) + f(r) = 0. \quad (3)$$

В этом случае, могут быть произвольно известно предельной условий (2) не отвечать уравнению (3) в границах $r = 0$ или $r = a$ среду. Если невозмущенная формула (3) в границах $r = 0$ или $r = a$ не удовлетворяет реализации условия (2), то в этом случае возможность силы инерции в данный момент времени отличается от нуля, то есть на так называемой стадии релаксации движения, первый член в уравнении (1) нельзя пренебрегать.

Это означает, что любое дифференциальное уравнение является приближительным, не полностью адекватным процессу, который оно описывает. Поэтому некоторые факторы, влияние которых на исследуемый процесс предполагается "малым", сводятся к изучению зависимости решений дифференциальных уравнений от малых параметров. При математической постановке прикладных задач возникает вопрос о поведении решений задачи (1)-(2) при значениях коэффициентов, характеризуемых "малыми" параметрами. Решения задачи с малым параметром из-за ее прикладной важности (применение теории этих уравнений в гидродинамике, нелинейной механике, химической и биологической кинетике, экологии, теории оболочек и многих других областях), стало одним из основных направлений в области дифференциальных уравнений и математической физики (см. [6, 7, 15, 22-25]).

В [7-9, 25] рассматривается задача нахождения приближенных решений краевой задачи для дифференциальных уравнений с малым параметром при более высоких производных, которые близки к решению краевой задачи для побочного (невозмущенного) уравнения. В связи с этим представляет интерес найти приближенное решение задачи (1)-(2), которое близко к решению задачи (3)-(4).

3. Модельное представление стационарного явления теплообмена в сферической конденсированной среде. Прежде всего, отметим, что в большинстве случаев удастся составить хорошую математическую модель, содержащую всего лишь два или три уравнения первого порядка. В наших изложениях, согласно [7, 25], изменения температуры и плотности теплового потока по радиусной координаты оси описывается системой уравнений:

$$\begin{cases} \frac{dT(r, \varepsilon)}{dr} = q(r, \varepsilon) - \mathcal{G}_1 T(r, \varepsilon), \\ \varepsilon^2 \frac{dq(r, \varepsilon)}{dr} = f(r) - \mathcal{G}_2 q(r, \varepsilon), \end{cases} \quad (4)$$

где $T(r, \varepsilon)$ - температура в радиусе r ; $q(r, \varepsilon)$ - плотность теплового потока в радиусе r ; λ - коэффициент теплопроводности;

$$\mathcal{G}_1 = -\frac{1}{2r} \left(1 + \sqrt{1 + \left(\frac{r}{\varepsilon}\right)^2 g(r)} \right) \left(\mathcal{G}_1 = -\frac{1}{2r} \left(1 - \sqrt{1 + \left(\frac{r}{\varepsilon}\right)^2 g(r)} \right) \right)$$

и

$$\mathcal{G}_2 = \frac{\varepsilon^2}{2r} \left(3 - \sqrt{1 + \left(\frac{r}{\varepsilon}\right)^2 g(r)} \right) \left(\mathcal{G}_2 = \frac{\varepsilon^2}{2r} \left(3 + \sqrt{1 + \left(\frac{r}{\varepsilon}\right)^2 g(r)} \right) \right)$$

-число компонентов, характеризующих коэффициенты уравнения (1).

Как известно из [7-9, 25] в окрестности точки равновесия, то есть особой точки $(q(r, \varepsilon), T(r, \varepsilon))$, происходят фазовые превращения, либо в среде происходит явление, либо не происходит. Возникает необходимость в управлении процессом явления конденсированной среды в окрестности данной точки.

В связи с этим рассмотрим процесс распространения тепла в положительном направлении системы координат $(q(r, \varepsilon), T(r, \varepsilon))$. В таком случае, граничные условия (2) для температуры и плотности теплового потока можно записать в виде:

$$\begin{aligned} T(r, \varepsilon) \Big|_{r=0} &= T(0, \varepsilon), & q(r, \varepsilon) \Big|_{r=0} &= T(0, \varepsilon); \\ T(r, \varepsilon) \Big|_{r=a} &= \psi, & q(r, \varepsilon) \Big|_{r=a} &= \psi. \end{aligned} \quad (5)$$

Для определения зависимости теплового потока $q(r, \varepsilon)$ от температуры $T(r, \varepsilon)$ сферических конденсированных средах разделим второе уравнение системы (1) на первое. В результате получим:

$$\varepsilon^2 \frac{dq(r, \varepsilon)}{dT(r, \varepsilon)} = \frac{f(r) - \mathcal{G}_2 q(r, \varepsilon)}{q(r, \varepsilon) - \mathcal{G}_1 T(r, \varepsilon)}. \quad (6)$$

Для упрощения дальнейших расчетов обозначим:

$$A(T) = \frac{f(r) - \mathcal{G}_2 q(r, \varepsilon)}{\varepsilon^2 (q(r, \varepsilon) - \mathcal{G}_1 T(r, \varepsilon))}. \quad (7)$$

Тогда уравнение (6) принимает вид:

$$\frac{dq(r, \varepsilon)}{dT(r, \varepsilon)} = A(T). \quad (8)$$

Решение уравнение (8) имеет следующий вид:

$$q(r, \varepsilon) = \frac{A(T) \varepsilon^2 \mathcal{G}_1}{A(T) \varepsilon^2 + \mathcal{G}_2} T(r, \varepsilon) + \frac{f(r)}{A(T) \varepsilon^2 + \mathcal{G}_2}. \quad (9)$$

Как видно из выражения (9) зависимость $q(T)$ имеет сложный характер: а) согласно первому слагаемому по мере возрастания температуры, плотность потока тепла линейно растет; б) согласно второму слагаемому с увеличением температуры плотность потока тепла линейно уменьшается. Поэтому для уточнения характера зависимости $q(T)$ проведем вычислительные эксперимент на основе выражения (9).

Особый интерес представляют определения координаты стационарной точки, то есть главные изоклины $\frac{dq(r, \varepsilon)}{dT(r, \varepsilon)} = 0$ -горизонтальный изоклины и $\frac{dq(r, \varepsilon)}{dT(r, \varepsilon)} = \infty$ - вертикальный изоклины. Согласно (7) уравнение горизонтальных изоклин ($A(T) = 0$) имеет вид:

$$f(r) - \mathcal{G}_2 q(r, \varepsilon) = 0, \quad (10)$$

а уравнение вертикальных изоклин ($A(T) = \infty$)

$$q(r, \varepsilon) - \mathcal{G}_1 T(r, \varepsilon) = 0. \quad (11)$$

В точке, где одновременно обращаются в нуль и числитель, и знаменатель (7), или в точке пересечения главных изоклин (10) и (11), направление касательной становится неопределенным. Так как при этом становятся неопределенным значение производной

$$\frac{dq(r, \varepsilon)}{dT(r, \varepsilon)} = \frac{f(r) - \mathcal{G}_2 q^*(r, \varepsilon)}{\varepsilon^2 (q^*(r, \varepsilon) - \mathcal{G}_1 T^*(r, \varepsilon))}. \quad (12)$$

Точка пересечения главных изоклин, или особая точка, обладает тем важнейшим свойством, что в ней одновременно обращаются в нуль производные от теплового потока $q(r, \varepsilon)$ и от температуры $T(r, \varepsilon)$ по r :

$$\frac{dq(r, \varepsilon)}{dr} = 0, \quad \frac{dT(r, \varepsilon)}{dr} = 0. \quad (13)$$

Очевидно, особая точка $M(q^*(r, \varepsilon), T^*(r, \varepsilon))$ соответствует стационарному состоянию в системе, а ее координаты $(q^*(r, \varepsilon), T^*(r, \varepsilon))$ суть стационарные значения переменных $q(r, \varepsilon)$ и $T(r, \varepsilon)$. Следует подчеркнуть, что система может, конечно, обладать и несколькими стационарными состояниями, поскольку главные изоклины могут пересекаться в нескольких точках.

Посмотрим теперь, каким образом можно определить характер устойчивости особых точек на фазовой плоскости по свойствам правых частей уравнений (4).

Будем исходить из тех же представлений о свойствах устойчивых состояний, что и в [14, 15] при изучении устойчивости стационарных точек в случае уравнения с одним переменным. Пусть $(q^*(r, \varepsilon), T^*(r, \varepsilon))$ – координаты особой точки системы (4) на фазовой плоскости, и пусть наша система претерпевает небольшое отклонение от стационарного положения. Величина этого смещения от точки $(q^*(r, \varepsilon), T^*(r, \varepsilon))$ задается следующим образом:

$$T(r, \varepsilon) - T^*(r, \varepsilon) = \mu_1; \quad q(r, \varepsilon) - q^*(r, \varepsilon) = \mu_2. \quad (14)$$

где $\|\mu_1\| \ll \|T^*\|$, $\|\mu_2\| \ll \|q^*\|$.

Подставляя (14) в уравнения (4) и, пользуясь малостью величин μ_1 , μ_2 , разложим функции $\Theta_1(T, q) = \varepsilon^2 (q(r, \varepsilon) - \mathcal{G}_1 T(r, \varepsilon))$ и $\Theta_2(T, q) = f(r) - \mathcal{G}_2 q(r, \varepsilon)$ в ряд Тейлора вблизи стационарной точки $(q^*(r, \varepsilon), T^*(r, \varepsilon))$, ограничиваясь первыми членами разложения:

$$\begin{aligned} \Theta_1(T, q) = & \varepsilon^2 (q^*(r, \varepsilon) - \mathcal{G}_1 T^*(r, \varepsilon)) + \mu_1 \cdot \left(\frac{\partial \Theta_1}{\partial T} \right)_{T=T^*, q=q^*} + \\ & + \mu_2 \cdot \left(\frac{\partial \Theta_1}{\partial q} \right)_{T=T^*, q=q^*} + \dots, \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \Theta_2(T, q) = & f(r) - \mathcal{G}_2 q^*(r, \varepsilon) + \mu_1 \cdot \left(\frac{\partial \Theta_2}{\partial T} \right)_{T=T^*, q=q^*} + \\ & + \mu_2 \cdot \left(\frac{\partial \Theta_2}{\partial q} \right)_{T=T^*, q=q^*} + \dots. \end{aligned} \quad (16)$$

Обозначая значения частных производных в точке $(q^*(r, \varepsilon), T^*(r, \varepsilon))$:

$$\left. \frac{\partial \Theta_1}{\partial T} \right|_{T=T^*, q=q^*} = \varepsilon^2 \vartheta_1; \quad \left. \frac{\partial \Theta_1}{\partial q} \right|_{T=T^*, q=q^*} = \varepsilon^2;$$

$$\left. \frac{\partial \Theta_2}{\partial T} \right|_{T=T^*, q=q^*} = 0; \quad \left. \frac{\partial \Theta_2}{\partial q} \right|_{T=T^*, q=q^*} = \vartheta_2;$$

и используя выражения (15) и (16), перепишем ряд Тейлора в виде:

$$\Theta_1(T, q) = \varepsilon^2 \vartheta_1 \mu_1 + \varepsilon^2 \mu_2, \quad (17)$$

$$\Theta_2(T, q) = \vartheta_2 \mu_2.$$

Подставляя (15), (16) и (17) в исходные уравнения (4), получим систему дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} \frac{d\mu_1}{dx} = \varepsilon^2 \vartheta_1 \mu_1 + \varepsilon^2 \mu_2, \\ \frac{d\mu_2}{dx} = 0 \cdot \mu_1 + \vartheta_2 \mu_2. \end{cases} \quad (18)$$

Следовательно, уравнения (18) описывают характер изменения величин μ_1 , μ_2 от координаты x или поведение исходной системы (4) вблизи особой точки $(q^*(r, \varepsilon), T^*(r, \varepsilon))$.

Для определения характера устойчивости особой точки необходимо выяснить, как ведет себя величины μ_1 , μ_2 в зависимости от значений параметров $\varepsilon^2 \lambda \vartheta_1$, $\varepsilon^2 \vartheta_2$, $\lambda \vartheta_2$ в правых частях уравнения (4). Для решения системы (18) применяем процедуры нахождения собственных значений с применением матричного метода (см. [9,17]). Будем искать решение в виде:

$$\mu_1 = C \exp(\omega x), \quad \mu_2 = D \exp(\omega x). \quad (19)$$

где C, D – величины первоначальных отклонений μ_1 , μ_2 при $x=0$.

Подставляя выражения (19) в (18) и сокращая полученные выражения на множитель $\exp(\omega x)$, получим систему алгебраических уравнений относительно неизвестных C, D :

$$\begin{cases} \omega C = \varepsilon^2 \vartheta_1 C + \varepsilon^2 D, \\ \omega D = \vartheta_2 D. \end{cases} \quad (20)$$

Далее запишем систему (20) в матричном виде:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon^2 \vartheta_1 - \omega & \varepsilon^2 \\ 0 & \vartheta_2 - \omega \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = 0. \quad (21)$$

Если ввести вектор-столбец

$$\delta_k = \begin{pmatrix} C_k \\ D_k \end{pmatrix}, \quad \text{где } -\infty < k < \infty$$

и матрицу коэффициентов

$$F = \begin{pmatrix} \varepsilon^2 \vartheta_1 - \omega & \varepsilon^2 \\ 0 & \vartheta_2 - \omega \end{pmatrix},$$

тогда (21) можно записать в виде

$$\delta_k = F \cdot \delta_{k-1} = F^2 \cdot \delta_{k-2} = \dots = F^k \cdot \delta_0. \quad (22)$$

Положим, что ω_1, ω_2 есть характеристические числа матрицы системы (21), то есть корни характеристического уравнения

$$\omega^2 - (\varepsilon^2 g_1 + g_2)\omega + \varepsilon^2 g_1 g_2 = 0. \quad (23)$$

Решая уравнения (23) определим корни характеристического уравнения:

$$\omega_1 = \varepsilon^2 g_1, \quad \omega_2 = g_2. \quad (24)$$

Используя выражения (24) проанализируем зависимость ω_1 и ω_2 от параметров системы:

а) если

$$\varepsilon^2 > -r^2 g(r),$$

тогда корни ω_1, ω_2 действительны, их произведение равно

$$\omega_1 \cdot \omega_2 = \frac{\varepsilon^4}{r^2} (1 - \varepsilon^2 - r^2 g(r)).$$

Отсюда, если

$$|\omega_1| > \frac{\varepsilon^2}{r} \left(1 + \sqrt{\varepsilon^2 + r^2 g(r)} \right),$$

тогда

$$|\omega_2| < \frac{\varepsilon^2}{r} \left(1 - \sqrt{\varepsilon^2 + r^2 g(r)} \right)$$

и наоборот. Тогда $F^k \cdot \delta_0$ при $k \rightarrow \infty$ или $k \rightarrow -\infty$ неограниченно возрастает, то соответствующее значение ω не является собственными значениями;

б) если

$$\varepsilon^2 < -r^2 g(r),$$

то корни ω_1, ω_2 являются комплексно сопряженными:

$$|\omega_1| = |\omega_2|.$$

В этом случае, матрица коэффициентов $F^k \cdot \delta_0$ при любом δ_0 остается ограниченным. Причем, каждое решение системы уравнения (21) является собственной функцией, и соответствующие значения ω является двукратно вырожденными собственными значениями;

в) если $\varepsilon^2 = -r^2 g(r)$, тогда

$$\omega_1 = \omega_2 = \frac{\varepsilon^2}{r}.$$

В этом случае, по меньшей мере, существует один вектор δ_0 , удовлетворяющий равенству $F \cdot \delta_0 = \pm \delta_0$. В этом случае ω_1, ω_2 от T не зависят.

Следовательно, решение системы (18) можно представить в виде

$$\begin{aligned} \mu_1(x) &= C_1 \exp(\omega_1 x) + D_1 \exp(\omega_2 x), \\ \mu_2(x) &= C_2 \exp(\omega_1 x) + D_2 \exp(\omega_2 x). \end{aligned} \quad (25)$$

Здесь C_i, D_i ($i = 1, 2$) - интегральные константы зависят от краевых условий (5) и от коэффициентов системы уравнения (18) (или (4)). Таким образом, характер поведения μ_1, μ_2 вблизи особой точки $(q^*(r, \varepsilon), T^*(r, \varepsilon))$, определенным образом зависит от значения ω_1, ω_2 .

4. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ. Для изучения модельного представленного решений задачи (4)-(5) были взяты параметры конкретной среды из работ [7, 8, 10, 15]. В зависимости от начального распределения стационарной температуры и типа граничных условий наблюдается различная эволюция температурного сигнала.

Давайте создадим структуры в фазовой плоскости, которые определяют поведение при решении граничных задач. Задавая значения A и приведём численный расчет используя выражением (9) относительно теплового потока ω , мы получаем координаты ветвей в зависимости от температуры u .

На рисунке 1 изоклины созданы для значений $\frac{d\omega}{du} = A$, при равных 0.0; 0.5; 1.5;

2 и интегральные кривые получаются путем соединения соответствующие точки изоклины.

Из рисунка 1 следует, что зависимость теплового потока $q(r, \varepsilon)$ от температуры $T(r, \varepsilon)$ представляют собой семейства изоклин. Изоклин дифференциального уравнения первого порядка (6) (или (8)) является кривая на плоскости $(q(r, \varepsilon), T(r, \varepsilon))$, вдоль которой цилиндрической поле, задаваемое дифференциальным уравнением (цилиндрический поля температуры), имеет один и тот же наклон. Обычно изоклины являются горизонтальной и вертикальной касательной, можно определить координаты стационарной точки. Семейство изоклин представляет собой ряд прямых линий, общее решение уравнение которых находится в фазовой плоскости.

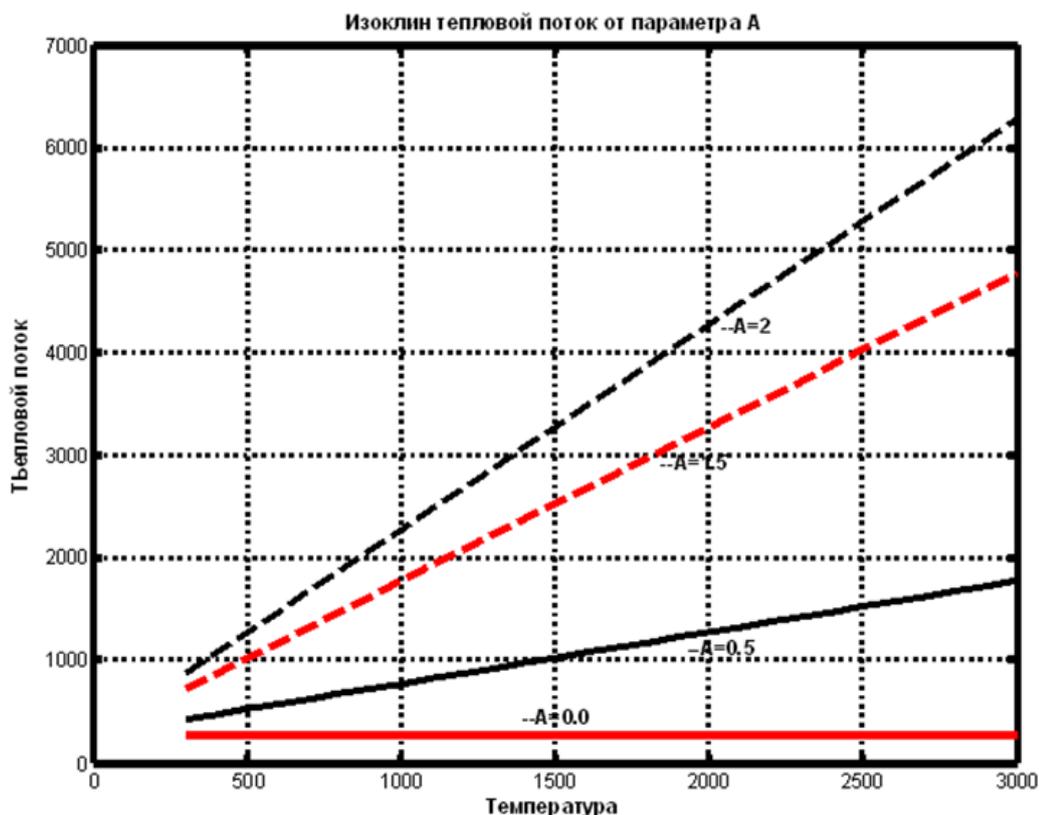


Рис.1. Семейство изоклин для уравнения (6)

Fig. 1. The isocline family for equation (6)

На рисунке 2 показана структура фазового портрета стационарной системы (4) в зависимости от малых параметров ε .

Figure 2 shows the structure of the phase portrait of a stationary system (4) depending on the small parameters ε .

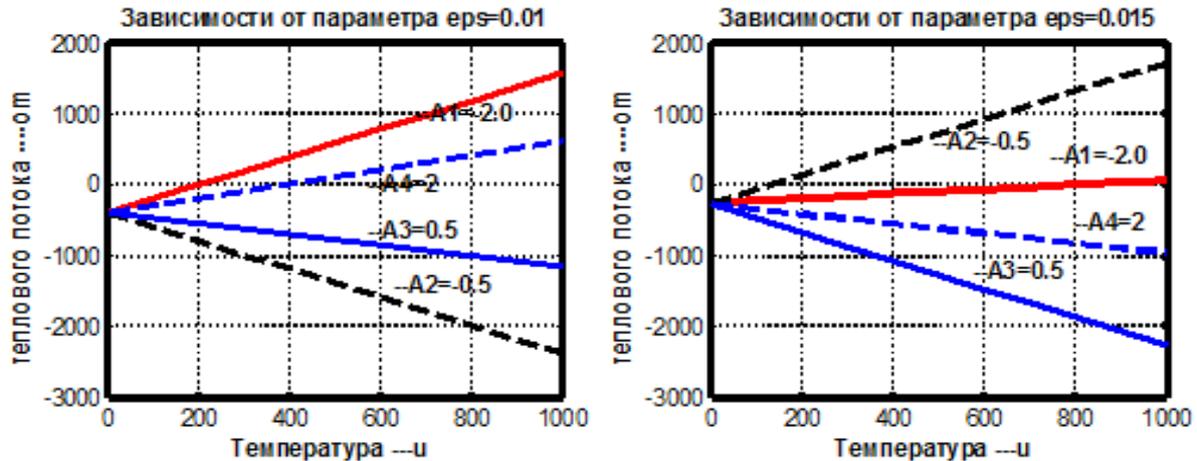


Рис.2. Температурная зависимость теплового потока при разных значениях параметра ε

Fig. 2. Temperature dependence of heat flow at different parameter values ε

Из рисунка 2 следует, что диапазон возможных решений стационарной задачи (4)-(5) он ограничен отрезками прямой линии, начальным распределением переменных с параметрическими выражениями (9) и (10) относительно ε и A , и соответствующие сегменты u - температурных ветвей.

На рисунке 3 и 4 представлено модельное решение вида (19) (25) в зависимости от координаты x при заданных разных значениях малых параметров ε .

На рисунке 3 построены изменение стационарное температуры при известных малых параметрах ε , а интегральные кривые получаются путем соединения соответствующих точек координаты x .

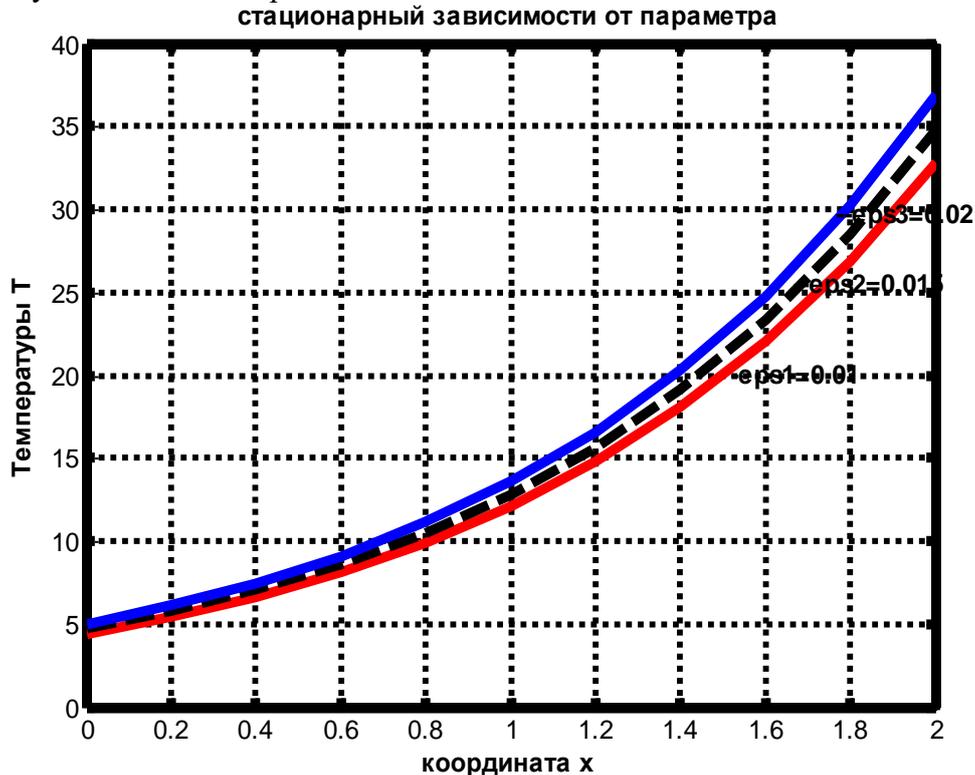


Рис. 3. Изменение стационарной температуры при разных значениях параметра ϵ : $\epsilon_1=0.01$; $\epsilon_2=0.015$; $\epsilon_3=0.02$

Figure 3. Change in steady-state temperature at different parameter values ϵ : $\epsilon_1=0.01$; $\epsilon_2=0.015$; $\epsilon_3=0.02$

Из рисунка 3 следует, что стационарной температуры (решение вида (19)) в зависимости от параметра ϵ нелинейно возрастает при увеличении координатной длине x . Класс таких решений представляет собой ряд нелинейных линий, общее уравнение которых находится на фазовой цилиндрических геометрия.

На рисунке 4 представлено изменение теплового потока в зависимости от координаты x при заданных разных значениях малых параметров ϵ .

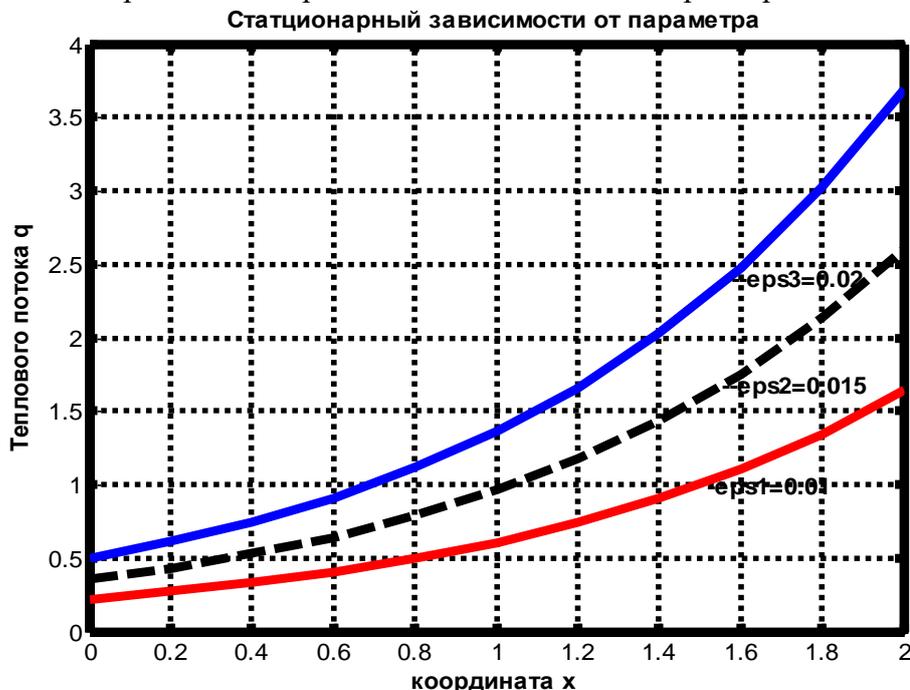


Рис.4. Зависимости теплового потока от значения координат x и числа малых параметров ϵ : $\epsilon_1=0.01$; $\epsilon_2=0.015$; $\epsilon_3=0.02$.

Figure 4. Dependences of heat flow on the value of coordinates x and the number of small parameters ϵ : $\epsilon_1=0.01$; $\epsilon_2=0.015$; $\epsilon_3=0.02$.

Из рисунка 4 видно, что плотность тепловой поток формировать от начального распространения, непрерывно заполняя указанную область, пока полностью не совпадут с решением пограничного слоя задачи.

Из решений (25) и графиков следует, что определенное приближенное решение задачи (1) - (2) в виде (25), близко к решению задачи (3)-(4).

5.ЗАКЛЮЧЕНИЕ. В общем случае, когда тип сингулярно-возмущенных дифференциальных уравнений второго порядка изменяется в типе системе уравнений, количество особых точек изменятся. Следовательно, в общем случае фазовую плоскость можно разделить на области с различным поведением стабильных и нестабильных решений системы уравнений. Для задачи о тепловом потоке и температуре, рассмотренной выше, это происходит, когда небольшой параметр, описывающий поведение температуры и теплового потока (нелинейная функция переменных координат), изменит свою структуру по сравнению с некоторыми параметрами, включенными в уравнение или систему уравнений.

Во многих физических задачах представляет интерес модельное исследование стационарных (установившихся) решений. В этом случае сингулярное возмущенные обыкновенные дифференциальные уравнения второго порядка, то есть стационарные уравнения теплопроводности с одной пространственной переменной, превращаются в

краевую задачу для системы обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка с неизвестными функциями температуры и теплового потока. Поскольку краевая задача порождается преобразованием стационарного уравнения теплопроводности, то важным аспектом ее изучения является анализ поведения решений краевой задачи в виде некоторых фазовых структур, а не фазовых точек.

Метод модельного представления аналитического решения для анализа задачи можно рассматривать как разновидность когнитивной графики, которая используется на таких этапах технологии вычислительного эксперимента, как построение модели и ее верификация.

**Рецензент: Хамрокулов Р.,
кандидат физико-математических
наук,
доцент**

ЛИТЕРАТУРА

1. Лыков А.В. Теория теплопроводности / А.В. Лыков // -М.: Высшая школа. -1967. – С. 600.
2. Luikov A.V. Thermal conductivity of porous systems / A.V Luikov, A.G. Shashkov, L.L. Vasiliev, Yu.E. Fraiman // International Journal of Heat and Mass Transfer. -1968. -Vol.11. -Issue 2. – Pp. 117–140.
3. Алексеев В.П. Системное проектирование термоустойчивых радиотехнических устройств и систем /В.П. Алексеев // -Томск: Изд-во Института оптики атмосферы СО РАН. -2004. – С. 316.
4. Петухов Б.С. Теплообмен в ядерных энергетических установках. /Б.С. Петухов, Л.Г. Генин, С.А. Ковалёв // -М: Изд-во МЭИ. -2003. – С. 470.
5. Ачилов Б.М. Гармонический анализ суточных колебаний температуры наружного воздуха и интенсивности солнечной радиации / Б.М.Ачилов. В.В. Чигунков // -Ташкент: Гелиотехника. -1981. -№2. – С.54-59.
6. Скляр С.Н. Проекционный метод построения разностных схем для задач с пограничными слоями / С.Н. Скляр, Ж.Ж. Бакиров // Известия НАН Киргизской Республики. Эхо науки. -1997. -№2-3. –С. 36-47.
7. Джураев Х.Ш. О приближенно-аналитическом решении краевых задач для сингулярно-возмущенного уравнения стационарной теплопроводности. / Х.Ш. Джураев, Г.Х. Джураева // Проблемы автоматизации и управления. -2021. №1 (40). –С.31-38.
8. Джураева Г.Х. О аналитическом решении краевых задач для сингулярно-возмущенного уравнение стационарной теплопроводности / Г.Х. Джураева // Материалы Международной конференции на тему «Роль физики в развитии науки, просвещении и инновации», посвященной «Двадцатилетию изучения и развития естественных, точных и математических наук в сфере науки и образования (2020-2040 годы)» и 80-летию памяти Заслуженного деятеля науки и техники Таджикистана, член-корреспондента Национальной академии наук Таджикистана, доктора физико-математических наук, профессора Бобоева Тошбоя Бобоевича (27октября 2022 года). -Душанбе: Изд-во ТНУ. –С. 225. - С. 107-109.
9. Джураева Г.Х. Модельное исследование сингулярно-возмущенного стационарного процесса теплообмена в конденсированной сред / Г.Х. Джураева // Материалы Республиканской научно-практической конференции на тему «Математические и компьютерные моделирование физических процессов» посвященной 20-летию изучения и развития естественных, точных и математических дисциплин в сфере науки и образования (9 февраля 2023 года). –Душанбе: ТНУ. -2023. –С. 320. -С.55-64.
10. Джураев Х.Ш. Стационарное распределение тепла в бесконечной полосе / Х.Ш. Джураев // Вестник Таджикский национальный университет. Серия естественных наук. -2017. -№1/5. –С.83-87.
11. Джураев Х.Ш. Стационарное распределение тепла с помощью математической модели процесса теплопроводности. / Х.Ш. Джураев // Проблемы автоматизации и управления. -2017. -№2 (33). –С.10-20.
12. Джураев Х.Ш. Исследование распределения теплового потока в неограниченной среде при наличии внешнего источника /Х.Ш.Джураев, К. Комилов, З.С. Норматов // Научно-технический вестник Поволжья. -2015. -№6. –С.10-13.
13. Джураев Х.Ш. Исследование теплопроводности в ограниченной среде методом искусственной гиперболизации /Х.Ш. Джураев, К. Комилов, З.С. Норматов // Вестник Таджикский национальный университет. Серия естественных наук. -2015. -№1/5 (188). – С. 53-61.
14. Джураев Х.Ш. Исследование зависимости стационарного распределение теплового потока от температуры в конденсированных средах /Х.Ш. Джураев, К. Комилов, А.М. Наджмиддинов // Вестник Таджикский национальный университет. Серия естественных наук. -2016. -№1/1 (192). –С.114-120.
15. Джураев Х.Ш. Явление переноса энергии и массы в конденсированных средах: математическое моделирование, оптимизация, практические приложения / Х.Ш. Джураев // -Душанбе: ЭР- граф. - 2021. - С. 236.
16. Якубов Б. Модельное исследование зависимости концентрации веществ от параметров системы / Б.Якубов, Х.Ш. Джураев, К.Комилов // Материалы Тринадцатой Международной теплофизической школы

«Теплофизика и информационные технологии» посвящённой 60-летию д.т.н., профессор, член.корр. НАНТ Кабулиева Зайналобуддина Валиевича (Кобули Зайналобуддини Вали) и 70-летию Заслуженного деятеля науки и техники Таджикистана, д.т.н., профессора, академика ИА РТ, академика МИА, академика МАХ Сафарова Махмадали Махмадиевича (17-20 октября 2022 г. Душанбе) – Душанбе-Тамбов: - С. 218-221.

17. Комилов К. Модельное исследование процессов стационарного теплообмена в конденсированных средах / К. Комилов, Б. Якубов, Х.Ш. Джураев, З.С. Норматов // Материалы Республиканской научно-практической конференции на тему «Математические и компьютерные моделирование физических процессов» посвященной 20-летию изучения и развития естественных, точных и математических дисциплин в сфере науки и образования (9 февраля 2023 года). – Душанбе: ТНУ. -2023. -320 С. - С.4-12.

18. Джураев Х.Ш. Модельное представление аналитического решения зависимости стационарного состояния нелинейного распределения теплового потока от температуры в конденсированных средах / Х.Ш. Джураев, А.М. Наджмиддиниён, Д.К. Солихов // Вестник Таджикского национального университета. Серия естественных наук. -2023. -№1. – С. 28.

19. Джураев Х.Ш. Модельное представление аналитического решения зависимости стационарного состояния нелинейного распределения теплового потока от температуры в конденсированных средах / Х.Ш. Джураев, А.М. Наджмиддиниён, Д.К. Солихов // Материалы Республиканской научно-практической конференции на тему «Математические и компьютерные моделирование физических процессов» посвященной 20-летию изучения и развития естественных, точных и математических дисциплин в сфере науки и образования (9 февраля 2023 года). – Душанбе: ТНУ. -2023. - С.20-30.

20. Juraeva H.Sh. Investigation of Conductivity of Nanostructures Using A Mathematical Model / H.Sh. Juraeva, G. H. Juraeva // Journal of Physics: Conf. Ser. -2022. –Volume 2270. –С. 012015

21. Васильева А.Б. Сингулярно-возмущенные уравнения в критических случаях. / А.Б. Васильева, В.Ф. Бутузов // –М.: Изд-во МГУ. -1987. –С. 108.

22. Боголюбов Н.Н. Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний. / Н.Н. Боголюбов, Ю.Ф. Митропольский // М.: Наука. -1974. – С.410.

23. Мищенко Е.Ф. Дифференциальные уравнения с малым параметром и релаксационные колебания. / Е.Ф. Мищенко, Н.Х. Розов // –М.: Наука. -1975. – С. 227.

24. Бутузов В.Ф. Сингулярные возмущения. / В.Ф. Бутузов // Математика, кибернетика. -1988. -№1. – С. 50.

25. Скляр С.Н. Разностные схемы для решения задач теплопереноса в различных системах координат / С.Н. Скляр, О.С. Хлыбов // AUCA Academic Review. Section IV. Natural Science sanding formational Ethnology. -2006. – С.219-229.

26. Крутов, Ю.М. Моделирование горения пылевидной коксовой частицы в присутствии водяного пара / Ю.М. Крутов, Д.В. Решетняк, И.И. Токарев // Энергосбережение. Энергетика. Энерго аудит. 2013. - №5 (111). –С.47-57.

27. Шепаккина Е.А. Критические условия самовоспламенения в пористой среде. / Е.А. Шепаккина // Химическая физика. -2001. №7. –С.3-9.

28. Джураева Г.Х. Исследование математических моделей и соответствующих краевых задач с сингулярными коэффициентами. Монография. / Г.Х. Джураева // - Душанбе: ЭР-граф. -2021. – 100 с.

REFERENSEC

1. Luikov A.V. Theory of thermal conductivity / A.V. Lykov // - М.: Higher School. - 1967. – P. 600.
2. Luikov A.V. Thermal conductivity of porous systems / A.V Luikov, A.G. Shashkov, L.L. Vasiliev, Yu.E. Fraiman // International Journal of Heat and Mass Transfer. - 1968. - Vol.11. - Issue 2. – Pp. 117-140.
3. Alekseev V.P. System design of heat-resistant radio devices and systems / V.P. Alekseev // - Tomsk: Publishing House of the Institute of Atmospheric Optics SB RAS. - 2004. – P. 316.
4. Petukhov B.S. Heat exchange in nuclear power plants. /B.S. Petukhov, L.G. Genin, S.A. Kovalev // -M: Publishing house MPEI. -2003. – P. 470.
5. Achilov B.M. Harmonic analysis of daily fluctuations in outside air temperature and solar radiation intensity / B.M. Achilov. V.V. Chigunkov // - Tashkent: Solar engineering. - 1981. - No. 2. - P.54-59.
6. Sklyar S.N. Projection method for constructing difference schemes for problems with boundary layers / S.N. Sklyar, Zh.Zh. Bakirov // News of the National Academy of Sciences of the Kyrgyz Republic. Echo of Science. - 1997. - No. 2-3. – Pp. 36-47.
7. Juraev H.Sh. On the approximate analytical solution of boundary value problems for the singularly perturbed equation of stationary heat conduction. / Kh.Sh. Juraev, G.Kh. Juraeva // Problems of automation and control. -2021. No. 1 (40). – Pp..31-38.
8. Juraeva G.Kh. On the analytical solution of boundary value problems for a singularly perturbed stationary heat equation / G.Kh. Juraeva // Materials of the International conference on the topic “The role of physics in the development of science, education and innovation”, dedicated to the “Twentieth anniversary of the study and development of natural, exact and mathematical sciences in the field of science and education (2020-2040)” and the 80th anniversary of the memory of the Honored worker of science and technology of Tajikistan, corresponding member of the National Academy of Sciences of Tajikistan, Doctor of Physical and Mathematical

Sciences, Professor Boboev Toshboy Boboevich (October 27, 2022). - Dushanbe: TNU Publishing House.– Pp. 107-109.

9. Juraeva G.Kh., Model study of a singularly perturbed stationary heat transfer process in condensed media / G.Kh. Juraeva // Materials of the Republican scientific and practical conference on the topic “Mathematical and computer modeling of physical processes” dedicated to the 20th anniversary of the study and development of natural, exact and mathematical disciplines in the field of science and education (February 9, 2023). – Dushanbe: TNU. - 2023. – Pp.55-64.

10. Juraev Kh.Sh. Stationary heat distribution in an infinite strip / Kh.Sh. Juraev // Bulletin of the Tajik National University. Natural Sciences Series. - 2017. - No. 1/5. – Pp. 83-87.

11. Juraev Kh.Sh. Stationary heat distribution using a mathematical model of the thermal conduction process. / Kh.Sh. Juraev // Problems of automation and control. -2017. -No. 2 (33). – Pp. 10-20.

12. Juraev Kh. Sh. Study of heat flow distribution in an unbounded environment in the presence of an external source / Kh.Sh. Juraev, K. Komilov, Z.S. Normatov // Scientific and technical bulletin of the Volga region. - 2015. - No. 6. – Pp. 10-13.

13. Juraev Kh.Sh. Study of thermal conductivity in a limited environment by the method of artificial hyperbolization / Kh.Sh. Juraev, K. Komilov, Z.S. Normatov // Bulletin of the Tajik National University. Natural Sciences Series. -2015. -No. 1/5 (188). – Pp. 53-61.

14. Juraev Kh.Sh. Study of the dependence of the stationary distribution of heat flow on temperature in condensed media / Kh.Sh. Juraev, K. Komilov, A.M. Najmiddinov // Bulletin of the Tajik National University. Natural Sciences Series. -2016. -No. 1/1 (192). – Pp. 114-120.

15. Juraev Kh.Sh. The phenomenon of energy and mass transfer in condensed matter: mathematical modeling, optimization, practical applications / Kh.Sh. Juraev // - Dushanbe: ER-graph. – 2021. – P. 236.

16. Yakubov B. Model study of the dependence of the concentration of substances on system parameters / B. Yakubov, Kh. Sh. Juraev, K. Komilov // Materials of the Thirteenth International Thermophysical School “Thermophysics and Information Technologies” dedicated to the 60th anniversary Doctor of Technical Sciences, Professor, Corresponding Member. NAST Kabuliev Zainalobuddin Valievich (Kobuli Zainalobuddini Vali) and the 70th anniversary of the Honored Worker of Science and Technology of Tajikistan, Doctor of Technical Sciences, Professor, Academician of the Institute of Arts of the Republic of Tajikistan, Academician of the MIA, Academician of the Academy of Arts Safarov Mahmatali Mahmadiyevich (October 17-20, 2022 Dushanbe) – Dushanbe-Tambov. – Pp. 218-221.

17. Komilov, K. Model study of stationary heat transfer processes in condensed media / K. Komilov, B. Yakubov, Kh.Sh. Juraev, Z.S. Normatov // Materials of the Republican scientific and practical conference on the topic “Mathematical and computer modeling of physical processes” dedicated to the 20th anniversary of the study and development of natural, exact and mathematical disciplines in the field of science and education (February 9, 2023). – Dushanbe: TNU. – 2023. – Pp.4-12.

18. Juraev Kh. Sh. Model representation of the analytical solution of the dependence of the stationary state of the nonlinear distribution of heat flow on temperature in condensed media / Kh.Sh. Juraev, A.M. Najmiddiniyov, D.K. Solikhov // Bulletin of the Tajik National University. Natural Sciences Series. -2023. -No. 1. – P. 28.

19. Juraev Kh.. Sh. Model representation of the analytical solution of the dependence of the stationary state of the nonlinear distribution of heat flow on temperature in condensed media / Kh.Sh. Juraev, A.M. Najmiddiniyov, D.K. Solikhov // Materials of the Republican scientific and practical conference on the topic “Mathematical and computer modeling of physical processes” dedicated to the 20th anniversary of the study and development of natural, exact and mathematical disciplines in the field of science and education (February 9, 2023). –Dushanbe: TNU. -2023. – Pp. 20-30.

20. Juraev H. Sh. Investigation of Conductivity of Nanostructures Using A Mathematical Model / H.Sh. Juraev, G. Kh. Juraeva // Journal of Physics: Conf. Ser. -2022. –Volume 2270. –012015

21. Vasilyeva, A.B. Singularly perturbed equations in critical cases. / A.B. Vasilyeva, V.F. Butuzov // – M.: Moscow State University Publishing House. -1987. – P. 108.

22. Bogolyubov N.N. Asymptotic methods in the theory of nonlinear oscillations. / N.N. Bogolyubov, Yu.F. Mitropolsky // M.: Nauk. -1974. – P.410.

23. Mishchenko, E.F. Differential equations with a small parameter and relaxation oscillations. / E.F. Mishchenko, N.Kh. Rozov // M.: Science. -1975. – P.227.

24. Butuzov V.F. Singular disturbances/ V.F. Butuzov // Mathematics, cybernetics. -1988. No. 1. – P. 50.

25. Sklyar S.N. Difference schemes for solving heat transfer problems in different coordinate systems / S.N. Sklyar, O.S. Khlybov // AUCA Academic Review. Section IV. Natural Science sanding formational Ethnology. -2006. J219-229.

26. Krutov, Yu.M. Modeling the combustion of dusty coke particles in the presence of water vapor / Yu.M. Krutov, D.V. Reshetnyak, I.I. Tokarev // Energy saving. Energy. Energy audit. 2013. - No. 5 (111). – Pp. 47-57.

27. Shepakina E.A. Critical conditions for self-ignition in porous media. / E.A. Shepakina // Chemical physics. -2001. No. 7. – Pp. 3-9.

28. Juraeva G. Kh. Study of mathematical models and corresponding boundary value problems with singular coefficients. Monograph. / G. Kh. Juraeva // - Dushanbe: ER-graph. -2021. – 100 p.

ТАДҶИҚИ ПАДИДАИ СТАТСИОНАРИИ ИНТИҚОЛИ ГАРМӢ ДАР МУҲИТИ КОНДЕНСАТСИИ СФЕРАВИ

Усули таҳқиқи ҳалли тақрибии таҳлилии масъалаҳои марзӣ аз муодилаҳои сингулярии равандҳои статсионари интиқоли гармӣ дар муҳити конденсатсии сферавӣ, ки ба ҳалли масъалаи канорӣ барои муодилаи бетаъсир наздик аст, пешниҳод карда шудааст. Вазифаи асосӣ, ки дар доираи он сохтори мақола муайян карда шудааст, таҳияи моделҳои математикӣ ва компютерии падидаи статсионари интиқоли гармӣ дар муҳити ҳамвори конденсатсӣ ва модели интиқоли энергияи диффузионӣ-реактивӣ вобаста ба интиқоли гармии мавод мебошад.

Калидвожаҳо: худуд, ошубӣ сингулярӣ, параметри хурд, қабатҳои сарҳадӣ ва гузариш, сели гармӣ, ҳарорат.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТАЦИОНАРНОЕ ЯВЛЕНИЕ ТЕПЛООБМЕНА В СФЕРИЧЕСКОЙ КОНДЕНСИРОВАННОЙ СРЕДЕ

Представлен метод исследования приближенных аналитических решений краевых задач сингулярно-возмущенных уравнений стационарных процессов теплообмена в сферической конденсированной среде, близких к решению краевой задачи для невозмущенного уравнения. Основной задачей, в которой определена структура статьи, является разработка математической и компьютерной моделей стационарного явления теплообмена в плоских конденсированных средах и модели диффузионно-реактивного переноса энергии в зависимости от теплопроводности материалов.

Ключевые слова: предел, сингулярной возмущенный, малый параметр, пограничные и переходные слои, поток тепла, температуры.

INVESTIGATION OF THE STATIONARY PHENOMENON OF HEAT TRANSFER IN A CYLINDRICAL CONDENSED MEDIUM

A method for investigating approximate analytical solutions of boundary value problems of singularly perturbed equations of stationary heat transfer processes in a spherical condensed medium, close to solving the boundary value problem for an undisturbed equation, is presented. The main task in which the structure of the article is defined is the development of mathematical and computer models of the stationary phenomenon of heat transfer in flat condensed media and a model of diffusion-reactive energy transfer depending on the thermal conductivity of materials.

Key words: aisle, singular perturbed, small parameter, boundary and transition layers, heat flux, temperature.

Маълумот дар бораи муаллифон: **Ҷӯраев Хайрулло Шарофович** - Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, доктори илмҳои физика ва математика, профессори кафедраи мошинҳои ҳисоббарор, системаҳо ва шабакаҳо. **Суроға:** 734025, ш. Душанбе, Тоҷикистон, хиёбони Рӯдакӣ, 17. **Телефон:** (+992) 917-30-70-60. **E-mail:** hayrullo_58@mail.ru

Ҷӯраева Гулшан Хайруллоевна – Донишгоҳи давлатии омӯзгории Тоҷикистон ба номи С. Айни, номзади илмҳои физика ва математика, дотсенти кафедраи математикаи олии ва геометрия. **Суроға:** 734025, ш. Душанбе, Тоҷикистон, хиёбони Рӯдакӣ, 121. **Телефон:** (+992) 911-11-04-31. **E-mail:** hayrullo_58@mail.ru

Сведения об авторах: **Джӯраев Хайрулло Шарофович** – Таджикский национальный университет, доктор физико-математических наук, профессор кафедры вычислительных машин, систем и сетей. **Адрес:** 734025, г. Душанбе, Таджикистан, пр. Рудаки, 17. **Телефон:** 917-30-70-60. **E-mail:** hayrullo_58@mail.ru.

Джӯраева Гулшан Хайруллоевна – Таджикский государственный педагогический университет им. С. Айни, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры высшей математики и геометрии. **Адрес:** 734025, г. Душанбе, Таджикистан, пр. Рудаки, 121. **Телефон:** (+992) 911-11-04-31. **E-mail:** hayrullo_58@mail.ru

Information about the authors: **Juraev Khayrullo Sharofovich**– Tajik National University, Doctor of physical and mathematical sciences, Head of the Department of Computing Machines, Systems and Networks. **Address:** 734025, Dushanbe, Republic of Tajikistan, Rudaki Avenue, 17. **Phone:** (+992) 917-30-70-60. **E-mail:** hayrullo_58@mail.ru.

Juraeva Gulshan Khairulloevna – Tajik State Pedagogical University named after S. Aini, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of the Department of Higher Mathematics and Geometric. **Address:** 734025, Dushanbe, Republic of Tajikistan, Rudaki Avenue, 121. **Phone:** (+992) 911-11-04-31. **E-mail:** hayrullo_58@mail.ru.

Статья поступила в редакцию 31.10.2023
Одобрена после рецензирования 11.01.2024
Принята к публикации 01.03.2024

ИССЛЕДОВАНИЕ СЦИНТИЛЛЯЦИОННЫХ ОТКЛИКОВ НЕЙТРОНОВ И ГАММА-КВАНТОВ МЕТОДОМ УДАЛЕНИЯ НАЛОЖЕННЫХ ИМПУЛЬСОВ

¹Имом М.Ш., ³Ромоданов В.Л., ²Рахими Ф., ¹Одинаев С.Ф.

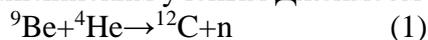
¹Физико-технический институт имени С.У. Умарова НАНТ

²Президиум Национальной академии наук Таджикистана

³Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ

Главными характеристиками частицы стоит понимать заряд, стабильность во времени, массу, спин и магнитный момент. Однако заряд нейтрона как правило допускается равной нулю. Подобная гипотеза о величине заряда доказывается большинством исследований по взаимодействиям нейтронов с различными ядрами. Нейтрон как протон и электрон имеет определенный спин и магнитный момент. Нейтрон как источник излучения может использоваться во всех ядерных реакциях, которые используют реакции испускания нейтрона.

Впервые нейтрон был получен посредством результата реакции облучения бериллия альфа-частицами английским ученым Джеймсом Чедвиком 1932 году [1-5]:



Нахождения и регулирования ядерных делящихся материалов (ЯДМ) возможно при использовании их собственного излучения нейтронов и гамма-квантов. К ЯДМ чаще всего относятся, такие материалы в которых существуют один или более типов нуклидов, способных к делению на тепловых нейтронах. Производство ЯДМ в промышленности день за днем увеличивается, что вызвано крупными энергетическими потребностями народного хозяйства. В сегодняшней ядерной энергетике в качестве топливного элемента применяются в основном нуклиды ${}^{235}\text{U}$ и ${}^{239}\text{Pu}$. В связи с этим в правительственных и международных стандартах по учету и контролю их состава уделяется особое внимание.

Учет и контроль ЯДМ состоят из сбора, регистрации и анализ данных о количестве, качестве и транспортировке делящихся материалов и реализуются посредством сплошного документального учета всех процессов с ЯДМ. Основные задачи учета и контроля ЯДМ являются реализация контроля к делящимся материалам, сохранность, определение и устранение нарушений в учете и контроле ядерных материалов, незаконное применения и хищение ЯДМ [6-11].

Практические задачи нахождения массы и состава ЯДМ фокусированы в первую очередь на их переработке и производство материалов. Подобными объектами контроля являются различные технологические установки, транспортные контейнеры, тепловыделяющие элементы и облученные тепловыделяющие сборки. Существенная радиоактивность, способность образования цепной реакции, относительно высокая стоимость требует точного описного учета ЯДМ и материалов, следования установленных технологических и устойчивых норм, физической защиты от неразрешенных действий персонала. Соответственно этому определяются наблюдаемые величины и параметры, диапазон погрешностей, подходящие методы и средства [12-14].

На сегодняшний день ядерные материалы образуются и анализируются с помощью ядерных реакторов, детекторов излучения, радиометров, спектрометров и т.д. В большинстве случаев для анализа ядерных материалов используются детекторы ионизирующих излучений с определенным методом исследования. Детекторами излучений считаются установки, предназначенные для преобразования поглощенной энергии ядерных излучений в сигнал, то есть восстановление свойств излучения по откликам на выходе детектора. По классификациям детекторы ионизирующих излучений разделяются на пропорциональные (газовые), полупроводниковые, сцинтилляционные, трековые детекторы и т.д., которые имеют свои преимущества и недостатки [15].

Для определения импульсов нейтронов применяются пропорциональные гелиевые счетчики, которые считаются золотым стандартом в сфере детектирования. Однако, значительное использование пропорциональных детекторов на основе ^3He привели к уменьшению их запасов и потребность в затратных технологиях их производства в мире [16-18]. Отсюда возникает задача искать альтернативных методов замены указанных детекторов на модернизированных и по цене, и по анализу новых детекторов излучения.

Сцинтилляторы являются устройства, которые испускают вспышку света при поглощении делящихся излучений. То есть в них возникают процессы сцинтилляций частицы делящихся веществ с высокой энергией в диапазоне от нескольких КэВ до десятков МэВ во множество гамма-квантов, имеющих значительно меньшими энергиями. Сцинтилляционный метод был предложен Вильямом Круксом совместно с Эрнестом Резерфордом. Позднее со стороны Вильгельмом Рентгеном был применен кристаллический сцинтиллятор для определения лучей, названных впоследствии его именем. Последние столетия широко были использованы сцинтилляционные детекторы.

Главными характеристиками, демонстрирующими положительные свойства сцинтилляторов считаются их световой выход, который определяет число испускаемых сцинтиллятором гамма-квантов при поглощении частиц с энергией 1 МэВ и время высвечивания сцинтиллятора, в которых оно меньше.

Сцинтилляционные детекторы разделяются на: органические, неорганические, жидкие, пластмассовые и комбинированные [19-21].

Описание цифрового метода удаления наложенных импульсов нейтронов и гамма-квантов сцинтилляционными детекторами

На сегодняшний день существуют различные цифровые методики обнаружения и контроль ЯДМ. Большинство из цифровых методов базируются на распознавание формы импульса и его применение. В предлагаемой работе рассматривается один из таких методов является цифровой метод удаления наложенных отдельных сцинтилляционных импульсов нейтронов и гамма-квантов [22-24].

Моделирующий отклик с выхода фотоэлектронного умножителя (ФЭУ) попадает на вход аналого-цифрового преобразователя (АЦП), который с установленной частотой преобразует его в числовую очередность. Эта очередность зафиксирована на память персонального компьютера для дальнейшей обработки. Длина очередности устанавливается временем измерения и частотой оцифровки. Обработка импульсов не нуждается в дополнительных электронных модулях и блоков. Потребуется всего лишь наличие АЦП. Также в представленном методе не требуется сдвиговых регистров и особых программных обеспечений, что демонстрируют преимущества технологии цифровых разделений [25-26].

Метод удаления наложенных импульсов нейтронов включает в себя программное обеспечение для обработки полученных данных. Практические данные записываются в отдельный файл. Она предназначена для повторных обработок оцифрованных амплитудно-временных распределений импульсов совмещенного радиационного излучения и распознавании импульсов по форме. При использовании отличия в форме импульсов различных заряженных частиц, например протонов отдачи (нейтронов) и электронов (гамма-квантов) можно получить их распределения по параметрам разделения в виде кривой, которых можно увидеть на Рис.1.

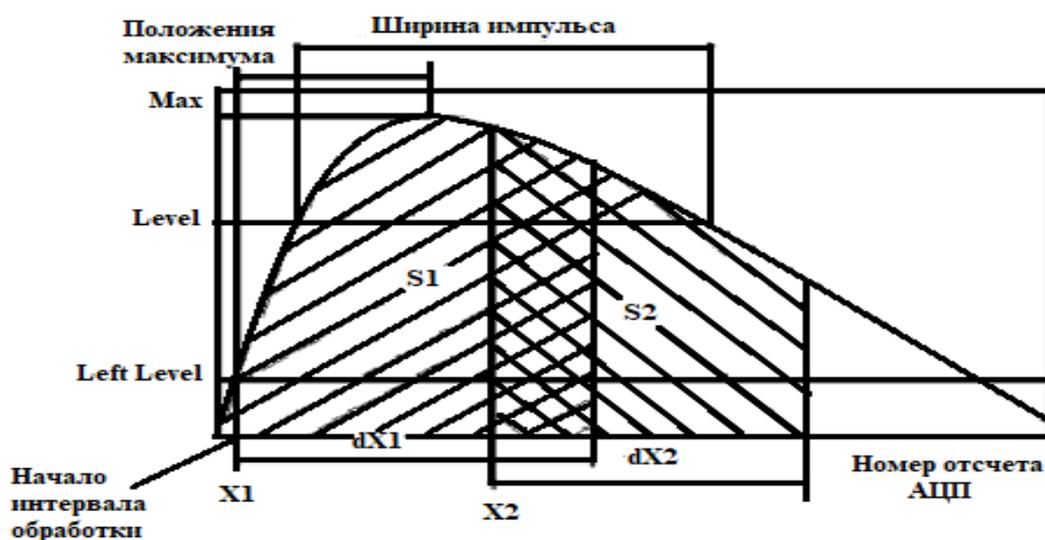
Рис. 1. Разделение частиц различного типа по форме их сцинтилляционных импульсов

Fig. 1. Separation of particles of different types according to the shape of their scintillation pulses



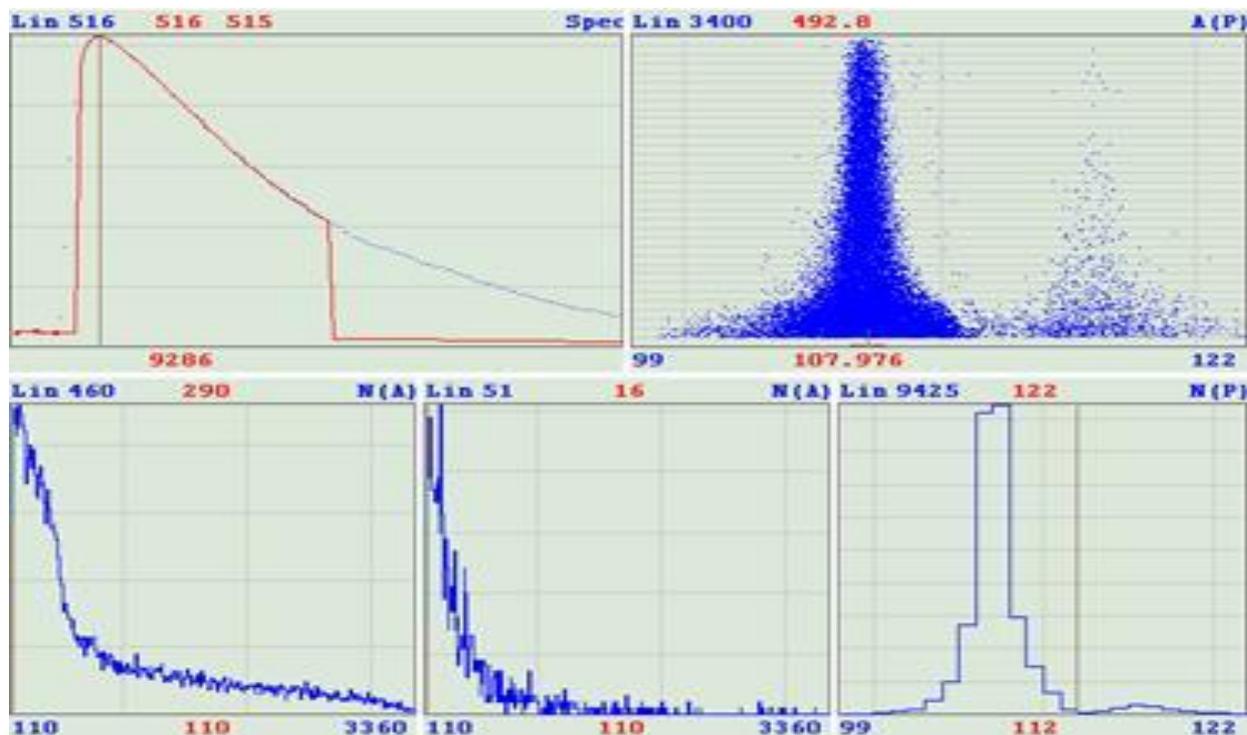
Для распознавания обнаруженных частиц для каждого импульса с помощью программы считался параметр разделения, который определяется отношением двух площадей конкретного участка импульса к его амплитуде (S_1 , S_2).

Рис. 2. Описание счета параметра формы импульса
Fig. 2. Description of the pulse shape parameter count



В целях исследования полученных экспериментальных результатов с помощью программного обеспечения предоставляются возможности графического и числового описания результатов обработки. В завершении обработки результатов программа даёт амплитудное распределение импульсов нейтронов и гамма-квантов в отдельном графическом окне, временное распределение импульсов нейтронов и гамма-квантов, уровень загрузки амплитуды, количество зафиксированных импульсов гамма-квантов и нейтронов и величину параметра разделения [27].

Рис. 3. Амплитудное распределение импульсов нейтронов и гамма-квантов, удаление наложенных импульсов и коррекция откликов
Fig. 3. Amplitude distribution of neutron and gamma-ray pulses, removal of superimposed pulses and correction of responses



При измерении нейтронов и гамма-квантов программным образом производятся в условиях высоких нагрузок измерительного тракта, имеется возможность наложение импульсов друг на друга. Также с помощью программы можно уточнить долю сомнительных импульсов между пиками и выбрасывает их из общего числа. Результаты проведенных работ сохраняются на память компьютера для их повторной обработки.

Метод удаления наложенных импульсов состоит из следующих принципов анализа и обработки импульсов излучения:

- проведение линии границ разделения пиков нейтронов и гамма-квантов;
- удаление сомнительных импульсов между пиками;
 - коррекция импульсов нейтронов и гамма-квантов.

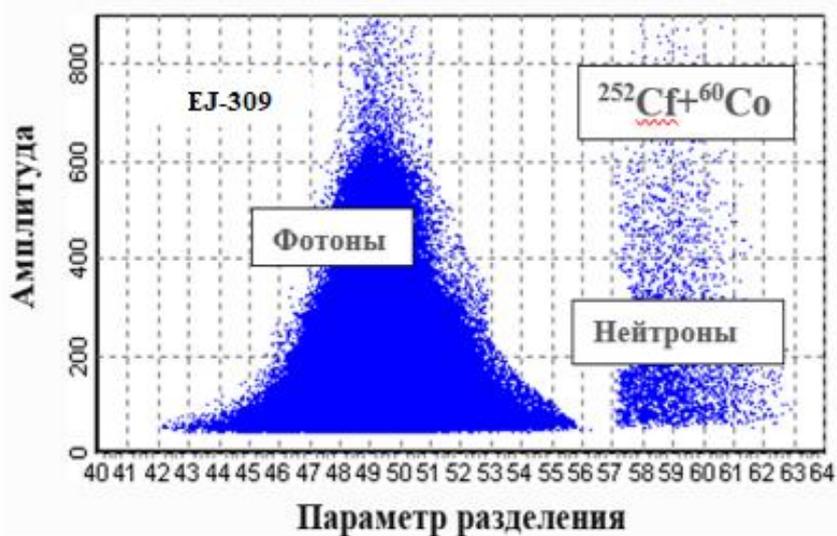
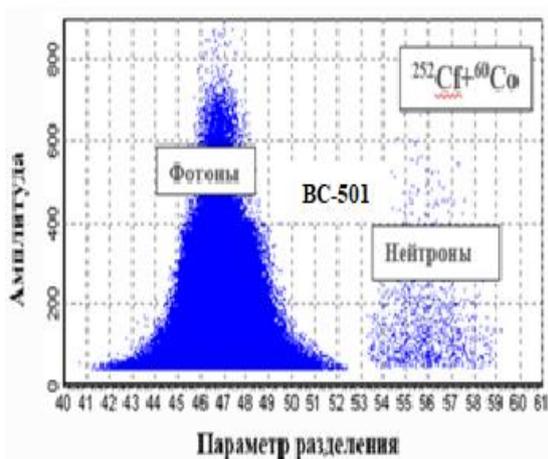
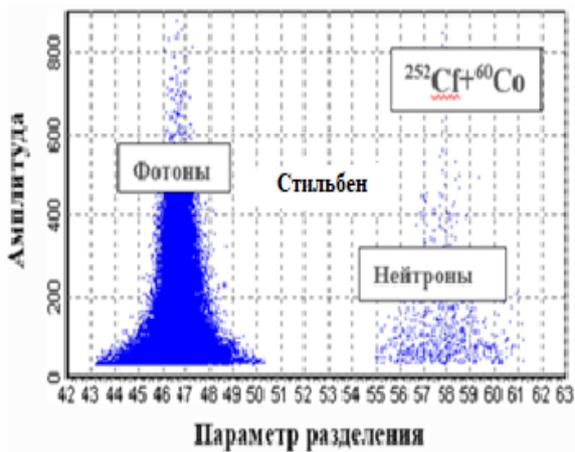
Экспериментальные работы и полученные результаты

В целях определения применимости предлагаемой методики использовались специальный алгоритм, жидкие сцинтилляторы (BC-501 и EJ-309) и кристаллический сцинтиллятор (стильбен), с помощью которых проводились определенные задачи в представленной работе.

Загрузки нейтронного канала для жидких и кристаллических сцинтилляционных детекторов

Работа проводилась для определения загрузки нейтронного канала различных видов сцинтилляторов. Задача состояла на размещение калифорниевого источника на определенном расстоянии от установки, вместе с тем использовался источник кобальт (источник гамма-квантов). Проведенные эксперименты являются аналогичными для всех сцинтилляторов, посредством которых был установлен выход откликов нейтронов и гамма-квантов [28].

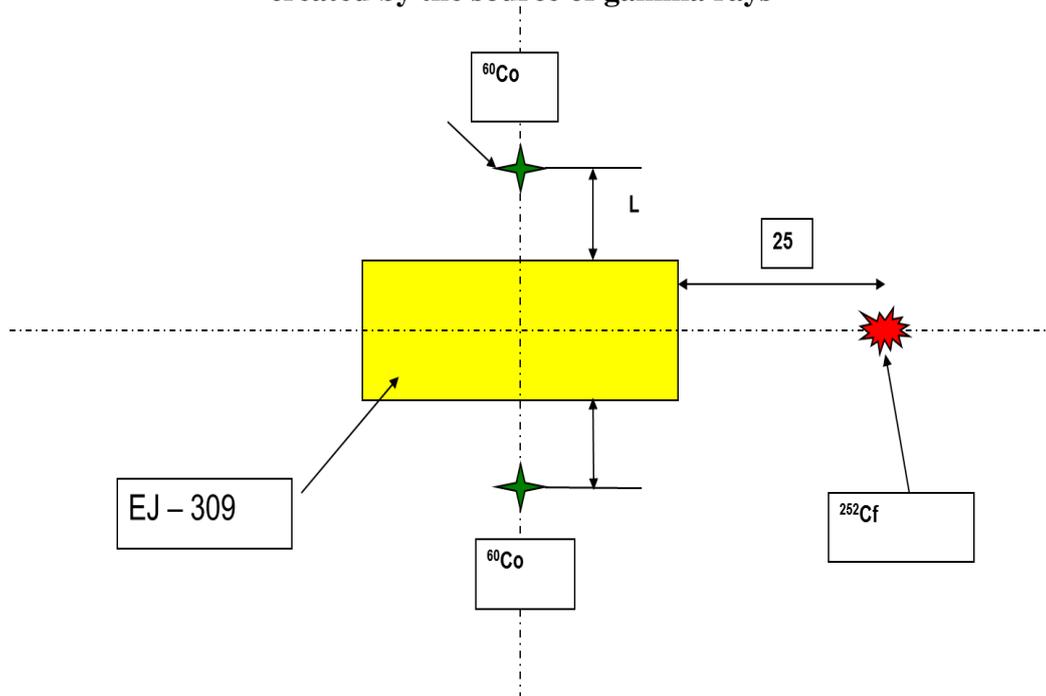
Рис. 4. Результаты загрузки нейтронного канала жидких сцинтилляторов BC-501 и EJ-309 и кристаллического сцинтиллятора стильбен
Fig. 4. Neutron channel loading results for BC-501 and EJ-309 liquid scintillators and stilbene crystal scintillator



Отношение число нейтронов в отклике при изменении расстояния источников гамма-квантов

Задача проведения эксперимента в представленной работе состояла в измерениях загрузок сцинтиллятора, при которых число импульсов нейтронов остается непрерывной в зависимости от изменения расстояния источников гамма-квантов от сцинтиллятора. Кристаллический сцинтиллятор стильбен показал наилучшие качества загрузки по параметрам разделения пиков импульсов гамма-квантов и нейтронов.

Рис. 5. Отношения число импульсов нейтронов от загрузки сцинтиллятора, создаваемой источником гамма-квантов
Fig. 5. Ratios between the number of neutron pulses from the scintillator load created by the source of gamma rays



В данном эксперименте также были использованы жидкие сцинтилляторы ВС-501 и EJ-309 и кристаллический сцинтиллятор стильбен. Результаты проведенных работ приводятся в таблицах и рисунках ниже:

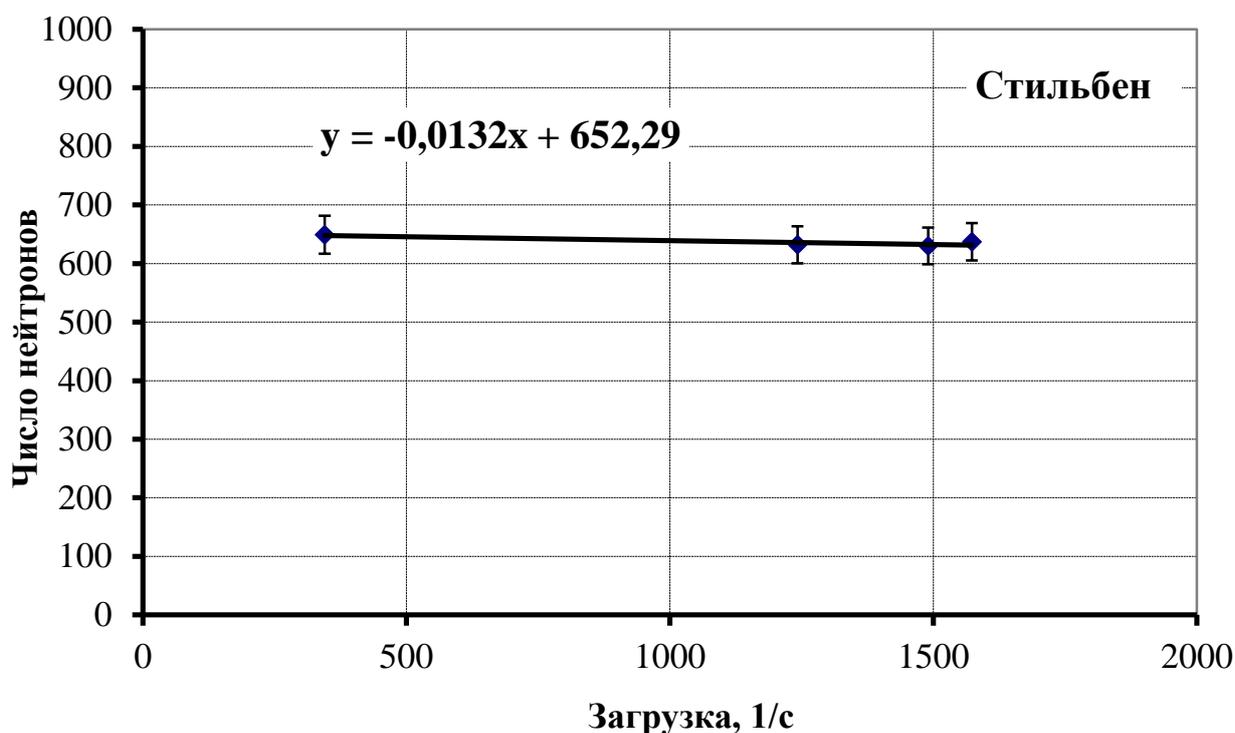
Кристаллический сцинтиллятор стильбен

Таблица 1. Отношение количество импульсов нейтронов в сигнале от загрузки кристаллического сцинтиллятора стильбен, создаваемой источником гамма-квантов

Table 1. The ratio of the number of neutron pulses in the signal from the loading of the stilbene crystal scintillator, created by the source of gamma quanta

№	Тип источника	Загрузка, имп/с	Расстояние, см	Количество гамма-квантов	Количество нейтронов
	^{252}Cf	345	-	9258 ($\pm 96,21$)	649 ($\pm 25,47$)
1	$^{252}\text{Cf} + ^{60}\text{Co}$	1490	1	52340 ($\pm 228,77$)	630 ($\pm 25,09$)
2	$^{252}\text{Cf} + ^{60}\text{Co}$	1573	2	45715 ($\pm 213,81$)	637 ($\pm 25,23$)
3	$^{252}\text{Cf} + ^{60}\text{Co}$	1242	3	23254 ($\pm 152,49$)	632 ($\pm 25,13$)

Рис. 6. Отношение количество импульсов нейтронов в сигнале кристаллического сцинтиллятора стильбен от загрузки
Fig. 6. The ratio of the number of neutron pulses in the stilbene crystal scintillator signal from loading



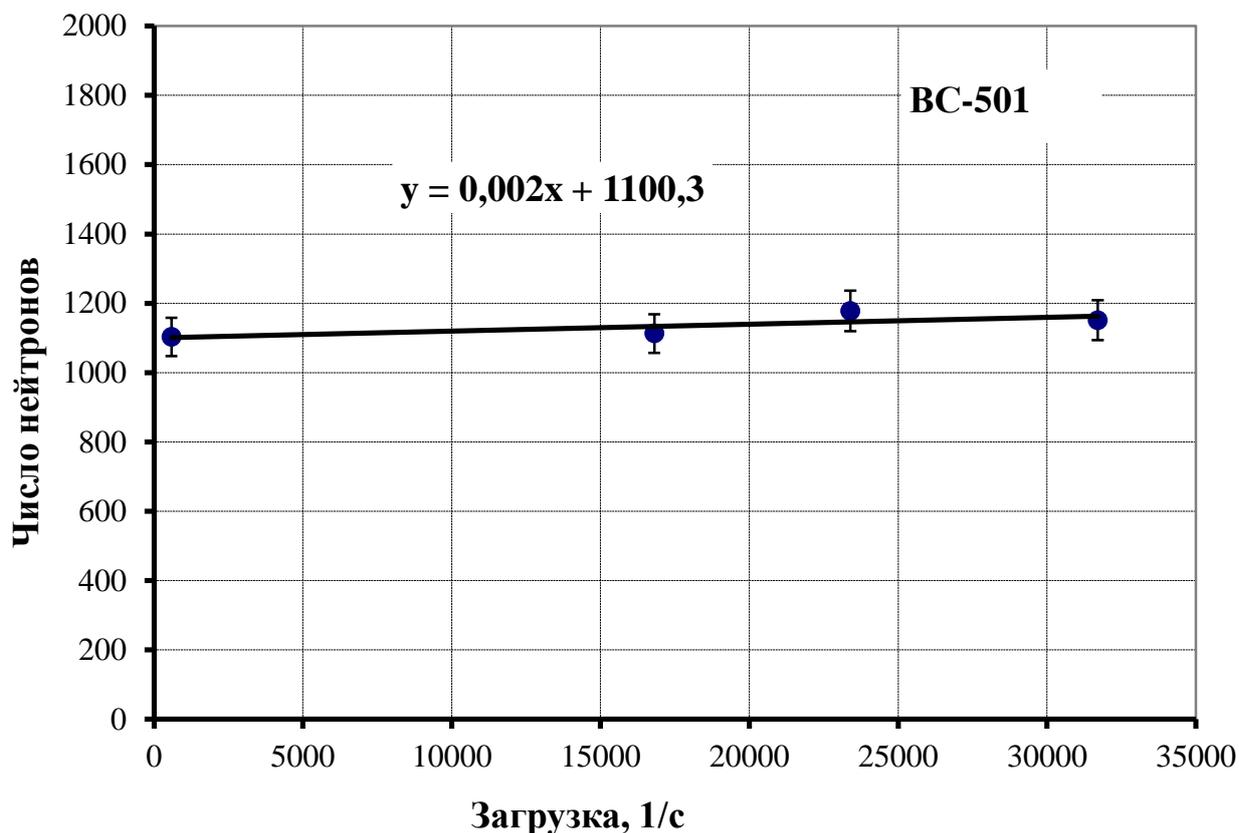
Жидкий сцинтиллятор ВС-501

Таблица 2. Отношение количество импульсов нейтронов в сигнале от загрузки жидкого сцинтиллятора ВС-501, создаваемой источником гамма-квантов
Table 2. The ratio of the number of neutron pulses in the signal from the load of the liquid scintillator BC-501, created by the source of gamma rays

№	Тип источника	Загрузка, имп/с	Расстояние, см	Количество гамма-квантов	Количество нейтронов
	^{252}Cf	584	-	14704 ($\pm 121,26$)	1103 ($\pm 33,21$)
1	$^{252}\text{Cf} + ^{60}\text{Co}$	31707	0,5	904817 ($\pm 951,21$)	1151 ($\pm 33,92$)
2	$^{252}\text{Cf} + ^{60}\text{Co}$	23394	3,5	668472 ($\pm 817,60$)	1178 ($\pm 34,32$)
3	$^{252}\text{Cf} + ^{60}\text{Co}$	16808	6	481883 ($\pm 694,17$)	1113 ($\pm 33,36$)

Ри. 7. Отношение количество импульсов нейтронов в сигнале жидкого сцинтиллятора ВС-501 от загрузки

Fig. 7. The ratio of the number of neutron pulses in the signal of the liquid scintillator BC-501 from loading



Жидкий сцинтиллятор EJ-309

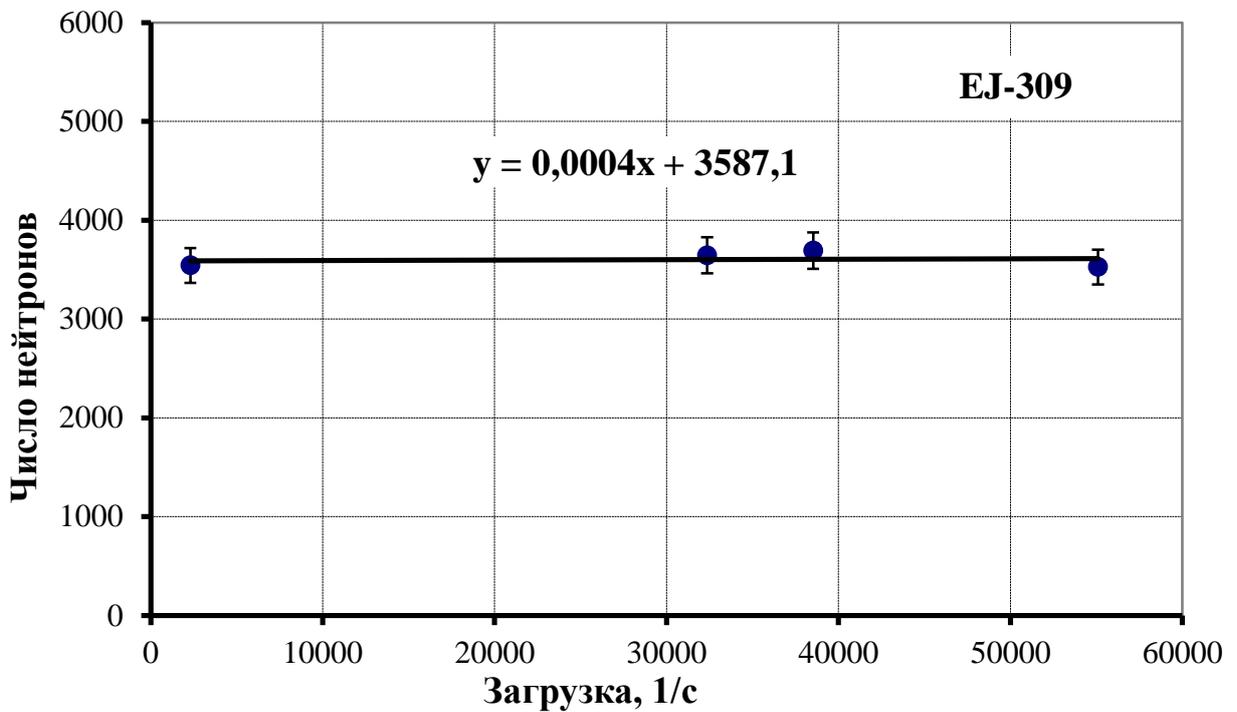
Таблица 2. Отношение количество импульсов нейтронов в сигнале от загрузки жидкого сцинтиллятора, создаваемой источником гамма-квантов

Table 2. The ratio of the number of neutron pulses in the signal from the liquid scintillator load created by the source of gamma rays

№	Тип источника	Загрузка, имп/с	Расстояние, см	Количество гамма-квантов	Количество нейтронов
	^{252}Cf	2303	-	49259 ($\pm 221,94$)	3542 ($\pm 59,51$)
1	$^{252}\text{Cf} + ^{60}\text{Co}$	55093	0	1486490 ($\pm 1219,21$)	3527 ($\pm 59,38$)
2	$^{252}\text{Cf} + ^{60}\text{Co}$	38526	3	1100009 ($\pm 1048,81$)	3692 ($\pm 60,76$)
3	$^{252}\text{Cf} + ^{60}\text{Co}$	32361	5	925519 ($\pm 962,03$)	3645 ($\pm 60,37$)

Рис. 8. Отношение количество импульсов нейтронов в сигнале жидкого сцинтиллятора EJ-309 от загрузки

Fig. 8. The ratio of the number of neutron pulses in the signal of the liquid scintillator EJ-309 from loading



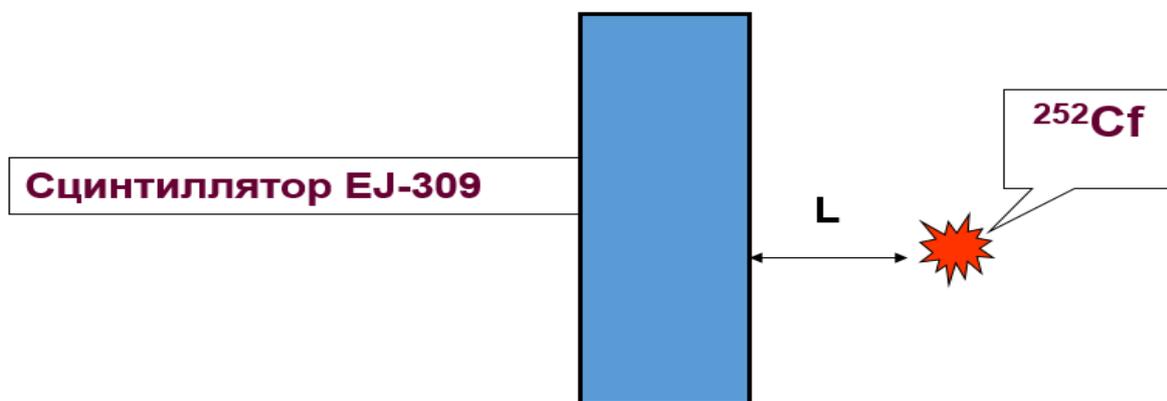
Результаты проведенных экспериментальных работ всех сцинтилляторов демонстрируют, что при изменении загрузки канала сцинтиллятора источниками гамма-квантов количество импульсов гамма-квантов увеличиваются, но количество импульсов нейтронов остается неизменным, что и требовалось уточнить при проведении практических работ. Отсюда возникает задача в изменении расстояния источника нейтронов от используемого сцинтиллятора [29].

Отношения импульсов нейтронов и гамма-квантов для различных загрузок сцинтиллятора

В данном эксперименте проводился анализ сцинтилляционных импульсов нейтронов и гамма-квантов спонтанного распада источника калифорния. Задача состояла в проведении цифрового анализа импульсов нейтронов и гамма-квантов с изменением расстояния источника нейтронов с высоким выходом нейтронов от сцинтиллятора EJ-309.

Рис. 9. Отношение импульсов нейтронов и гамма-квантов для различных загрузок сцинтиллятора

Fig. 9. The ratio of neutron and gamma quanta pulses for various scintillator loads



Расстояние источника нейтронов в представленном эксперименте был изменен от 4 см до 20 см и соответственно нагрузка изменилось от этого. Энергетических порог был выбран 300 КэВ и 400 КэВ.

Таблица 3. Отношение сцинтилляционных импульсов нейтронов и гамма-квантов при различных нагрузках сцинтилляционного тракта
Table 3. Ratio of scintillation pulses of neutrons and gamma quanta at different loadings of the scintillation tract

Расстояние, см	Загрузка, 1/с	Время измерения, с	Порог, 300 КэВ			Порог, 400 КэВ		
			Нейтроны	Гамма	Нейтроны / Гамма	Нейтроны	Гамма	Нейтроны / Гамма
0	$2.28 \cdot 10^4$	10	28840 (169)	179251 (423)	0.161 (0,0010)	27866 (166)	16480 (128)	0.169 (0,0166)
4	$6.18 \cdot 10^3$	15	12595 (112)	73265 (270)	0.172 (0,0016)	12170 (110)	67131 (259)	0.181 (0,0017)
8	$2.20 \cdot 10^3$	20	6192 (78)	34578 (185)	0.175 (0,0024)	5979 (77)	31707 (178)	0.189 (0,0026)
12	$1.13 \cdot 10^4$	30	5006 (70)	26443 (162)	0.189 (0,0029)	4811 (69)	24185 (155)	0.198 (0,0031)
20	476	0	2118 (46)	11076 (105)	0.191 (0,0045)	2046 (45)	10200 (100)	0.201 (0,0048)

Рис. 10. Определение погрешности отношения количества импульсов нейтронов к импульсам гамма-квантов от расстояния источника нейтронов до сцинтиллятора

Fig. 10. Determination of the error in the ratio of the number of neutron pulses to the pulses of gamma rays from the distance of the neutron source to the scintillator

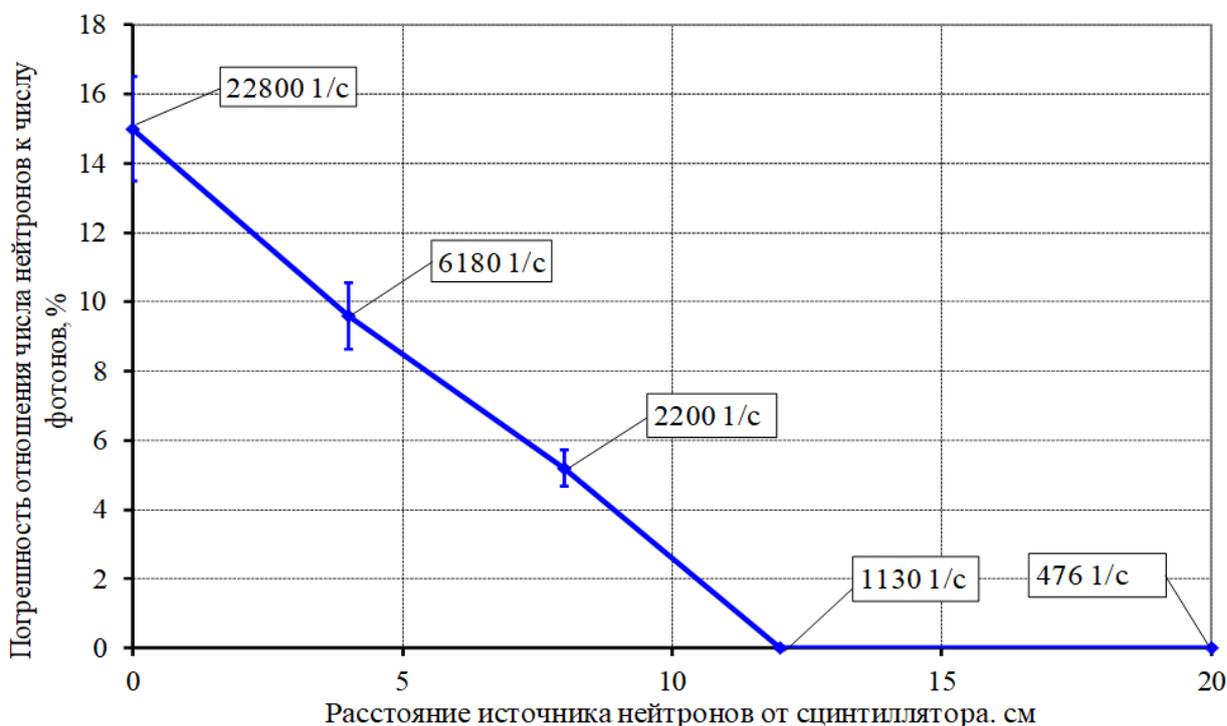
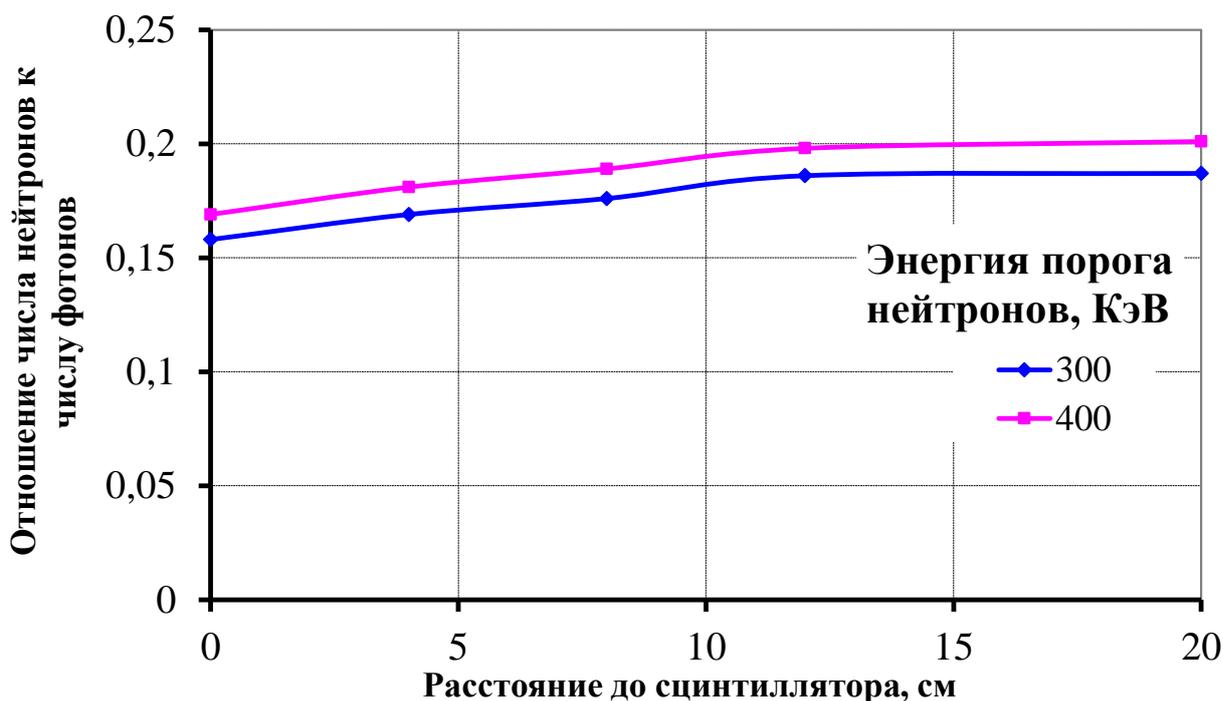


Рис. 11. Зависимость количества импульсов нейтронов к количеству гамма-квантов от расстояния до сцинтиллятора для различных порогов энергий

Fig. 11. Dependence of the number of neutron pulses on the number of gamma quanta on the distance to the scintillator for different energy thresholds



Результаты исследовательских работ демонстрируют, что при использовании источника калифорний количество импульсов нейтронов увеличивается, но количество гамма-квантов остается неизменным. Также были определены, что при изменении расстояния до 12 см количество импульсов нейтронов увеличивается, однако от расстояния 12 см до 20 см количество импульсов нейтронов остается постоянным, что подлежит дальнейшему изучению (Таблица 3, Рисунок 10 и Рисунок 11) [30].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В этой работе были исследованы различные типы детекторов ионизирующих излучений, основные свойства и недостатки изученных детекторов. Представляется цифровой метод удаления наложенных (сомнительных) импульсов для определения количества импульсов нейтронов и гамма-квантов.

Проводились некоторые экспериментальные работы по определению качества сцинтилляционных детекторов, отношения импульсов нейтронов к импульсам гамма-квантам, также проводились измерения с изменением расстояния источника нейтронов от сцинтиллятора для определения зависимости количества нейтронов от гамма-квантов.

При проведении экспериментов по определению качества сцинтилляторов был определен, что кристаллический сцинтиллятор стибен по сравнению с жидкими сцинтилляторами EJ-309 и BC-501 показал наилучшую характеристику разделения импульсов.

В эксперименте по отношению зависимости количества нейтронов от загрузки различных сцинтилляторов, создаваемых источниками гамма-квантов был определен, что при изменении расстояния источников гамма-квантов загрузка гамма-квантов вплоть до $3 \cdot 10^4$ имп/с не влияет на эффективность регистрации нейтронов, что показывает достоверности непопадания импульсов нейтронов и их разделения.

В работе по определению отношений количества нейтронов к гамма-квантам загрузки сцинтиллятора, создаваемой источником гамма-квантов определялось, что изменение расстояния источника гамма-квантов увеличивает количество гамма-квантов, но количество нейтронов при этом остается неизменным. Поэтому можно

считать, что загрузка сцинтилляционного тракта до уровня $5 \cdot 10^4$ н/с не дает погрешности измерений числа нейтронов более нескольких процентов.

Благодарность

Автор выражает глубокую благодарность профессору Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ» А.Г. Белевитину, доктору физико-математических наук В.Л. Ромоданову за помощь в цифровой обработке данных эксперимента, а также покойному академику НАНТ Х.Х. Муминову за плодотворное обсуждение полученных результатов.

**Рецензент: Махсудов Б.И.,
доктор физико-математических наук,
профессор**

ЛИТЕРАТУРА

1. Бак, М. Нейтрон / М. Бак, Ю.Ф. Романов // М.: Атомиздат 1960. - С. 12-21.
2. Болоздыня, А.И., - Экспериментальная ядерная физика. / А.И. Болоздыня //– М.: НИЯУ МИФИ. - 2018. - С.26-30.
3. Вяльцев, А.Н. – Нейтрон предыстория открытие последствия. / А.Н. Вяльцев // –М.: Наука. - 1975. - С. 69-109.
4. Фролов, В.В. Ядерно - физические методы контроля делящихся веществ / В.В. Фролов // –М.: Энергоатомиздат. - 1989. – С.7-15.
5. Франк, А.И., - Фундаментальные свойства нейтрона. / А.И. Франк // –М.: Успехи физических наук. Том 137. Вып.1, -1982. - С.5-18.
6. Ракобольская И.В. Ядерная физика. / И.В. Ракобольская // –М.: Издательство Московского университета. - 1971. – С.190-198.
7. Кадилин, В.В. Прикладная нейтронная физика / Кадилин, В.В. Рябева, Е.В., Самосадный В.Т. // –М.: НИЯУ МИФИ, 2011. – С.24-26.
8. Гончарова, Н.Г. Частицы и атомные ядра / Ишханов, Б.С., Капитонов, И.М. // –М.: Физматлит, 2013. – С.370-386.
9. Нозик, Ю.З. Нейтроны и твердое тело. Структурная нейтронография / Р.П. Озеров, К. Хенниг // –М.: Атомиздат, Том 1, -1979. – С. 12-14.
10. Стогов, Ю.В. Основы нейтронной физики / Ю.В. Стогов // –М.: НИЯУ МИФИ, 2008. – С. 5-40.
11. Федеральные нормы и правила в области использования атомной энергии «Основные правила учета и контроля ядерных материалов» (НП-030-19). –М.: Ростехнадзор, 10 апреля 2020г. – С. 2-7.
12. Долгополов, С.В. Определение нейтронно-физических свойств замедляющих сред / С.В. Долгополов, В.Н. Нестеров, Ю.Б. Чертков // –Томск: Издательство Томского политехнического университета, 2008. – С. 6-15.
13. DOE Fundamental handbook Instrumentation and Control. / U.S. Department of Energy, Washington D.C. 20585, FSC-6910, Volume 2 of 2, June 1982. – Pp. 8-19.
14. Doug Reilly. Passive Nondestructive Assay of Nuclear Materials / Doug Reilly, Norbert Ensslin, and Hastings Smith, Jr. // The Superintendent of Documents U.S. Government Printing Office, Washington, D.C. 20013-7082. March 1991. – Pp.379-404.
15. Группен, К. Particle Detectors / К. Группен, А. Борер, Л. Смолик // –НИЦ «Сибирский хронограф». 1999. - Pp. 56-81.
16. Richard T. Kouzes. Neutron detection alternatives to ^3He for national security applications / Richard T. Kouzes. James H. Ely, Luke E. Erikson, Warnick J. Kernan, Azaree T. Lintereur, Edward R. Siciliano, Daniel L. Stephens, David C. Stromswold, Renee M. Van Ginhoven, Mitchell L. Woodring // Science Direct. Elsevier. <https://doi.org/10.1016/j.nima.2010.08.021>. Volume 623. Pp. 1035-1045.
17. Пикарь, В.А. Портативные приборы для поиска и идентификации радиоактивных материалов / В.А. Пикарь, А.В. Родигин // Молодежь в науке: сборник докладов 11-й научно-технической конференции. 2013. № 11. - С. 342-246.
18. Марунин, П.В. Модернизация электронного блока нейтронного детектора для портативной аппаратуры радиационного контроля / П.В. Марунин, А.В. Родигин // ФГУП «РЯФЦ-ВНИИЭФ», Саров, 2015. - С. 224-228.
19. Акимов, Ю.К. Детекторы ядерных излучений на основе пластических сцинтилляторов / Ю.К. Акимов // Физика элементарных частиц и атомного ядра. - 1994. Том 25, Вып. 2. – С. 496-500.
20. Шендрик, Р.Ю. Методы экспериментальной физики конденсированного состояния. Часть 3. Введение в физику сцинтилляторов. Учебное пособие / Р.Ю. Шендрик // – Иркутск: Издательство Иркутского государственного университета, - 2013. – С. 9-15.

21. Свэнк, Р.К. Характеристики сцинтилляторов / Р.К. Свэнк // Успехи физических наук, 1956. Том 58, Вып. 3. – С. 519-530.
22. Деменков, В.Г. Начала электронных методов ядерной физики. Учебное пособие / В.Г. Деменков // СПб.: Издательство «Лань», - 2016. – С. 26-39.
23. Ромоданов, В.Л. Физические методы и установки активного контроля делящихся материалов: учебное пособие для студентов высших учебных заведений / В.Л. Ромоданов // – М.: НИЯУ МИФИ, - 2007. – С.66-77.
24. Ромоданов, В.Л. Метод снижения загрузки сцинтилляционных трактов в установках с импульсными нейтронными источниками / В.Л. Ромоданов, Сахаров В.К., Черникова Д.Н. // М.: 2010. Приборы и техника эксперимента. № 3. – С.38-49.
25. Ромоданов, В.Л. Лабораторные работы по активным методам неразрушающего контроля делящихся материалов: учебное пособие для студентов высших учебных заведений / В.Л. Ромоданов // – М.: НИЯУ МИФИ, - 2007. – С. 4-9.
26. Черникова, Д.Н. Расчетно-экспериментальные исследования установки обнаружения делящихся материалов в аэропортах / Д.Н. Черникова, В.Л. Ромоданов, В.К. Сахаров, И.В. Мухамадьяров, В.В. Афанасьев, А.Г. Белевитин // –М.: Атомная энергия, 2008. № 105. – С.102-118.
27. Ромоданов, В.Л. Комплекс цифровой обработки данных в установках обнаружения радиоактивных и делящихся материалов / В.Л. Ромоданов, В.В. Афанасьев, А.Г. Белевитин, Р.Ю. Рябов // –М.: 2005. Препринт МИФИ. – С.32-43
28. Имом, М.Ш. Разработка качественного цифрового анализа откликов нейтронов и гамма-квантов с различными сцинтилляционными счетчиками / М.Ш. Имом, Х.Х. Муминов, В.Л. Ромоданов, Ф. Рахими, С.Ф. Одинаев // Известия НАНТ. №1 (174), - 2019. – С. 125,
29. Имом, М.Ш. Исследование эффективности цифрового метода анализа загрузки нейтронного канала для различных сцинтилляционных счетчиков / М.Ш. Имом, Х.Х. Муминов, В.Л. Ромоданов, Ф. Рахими, С.Ф. Одинаев // Известия НАНТ. №1 (178), 2020. – С. 44.
30. Имом, М.Ш. Цифровой метод определения отношения импульсов нейтронов к импульсам гамма-квантов для различных загрузок сцинтиллятора / М.Ш. Имом, Х.Х. Муминов, В.Л. Ромоданов, Ф. Рахими, С.Ф. Одинаев // – Известия НАНТ, 2020. № 4. – С.84.

REFERENCES

1. Bak, M. Neutron / M. Bak, Y.F. Romanov // М.: Atomizdat 1960. - Pp. 12-21.
2. Bolozdinya, A.I., - Experimental nuclear physics. / A.I. Bolozdinya // –М.: NRNU MEPHI, 2018. – Pp. 26-30.
3. Vyaltsev, A.N. – Neutron background discovery consequences. / A.N. Vyaltsev // –М.: Nauka. - 1975. – Pp. 69-109.
4. Frolov, V.V. Nuclear-physical methods of control of fissile substances / V.V. Frolov // –М.: Energoatomizdat, 1989. – Pp. 7-15.
5. Frank, AI, - Fundamental properties of the neutron. / AI. Frank // М.: Uspekhi fizicheskikh nauk. Volume 137. Issue 1, 1982. – Pp.5-18.
6. Rakobolskaya I.V. Nuclear physics. / I.V. Rakobolskaya // М.: Publishing House of Moscow University, 1971. – Pp. 190-198.
7. Kadilin, V.V. Applied neutron physics / V.V. Kadilin, E.V. Ryabeva, V.T. Samosadny // –М.: NRNU MEPHI, 2011. – Pp.24-26.
8. Goncharova, N.G. Particles and atomic nuclei / N.G. Goncharova, B.S. Ishkhanov, I.M. Kapitonov // –М.: Fizmatlit, 2013. – Pp.370-386.
9. Nozik, Y.Z. Neutrons and solids. Structural neutronography / Nozik, Y.Z. Ozerov R.P., Hennig K. // –М.: Atomizdat, Volume 1, 1979. – Pp.12-14.
10. Stogov Y.V. Fundamentals of neutron physics / Y.V. Stogov // М.: NRNU MEPHI, 2008. - Pp. 5-40.
11. Federal norms and rules in the field of the use of atomic energy "Basic rules for accounting and control of nuclear materials" (NP-030-19), Moscow: Rostekhnadzor, April 10, 2020. – Pp. 2-7.
12. Dolgoplov, S.V. Determination of the neutron-physical properties of moderating media / Dolgoplov, S.V. Nesterov, V.N., Chertkov, Y.B. // - Tomsk: Publishing House of the Tomsk Polytechnic University, 2008. – Pp. 6-15.
13. DOE Fundamental handbook Instrumentation and Control. / U.S. Department of Energy, Washington D.C. 20585, FSC-6910, Volume 2 of 2, June 1982. – Pp. 8-19.
14. Doug Reilly. Passive Nondestructive Assay of Nuclear Materials / Norbert Ensslin, and Hastings Smith, Jr. / Doug Reilly // The Superintendent of Documents U.S. Government Printing Office, Washington, D.C. 20013-7082. March 1991. – Pp. 379-404.
15. Groupen, K. Particle Detectors / K. Groupen, Borer, A., Smolik L. // Research Center "Siberian Chronograph". 1999. – Pp. 56-81.
16. Richard T. Kouzes. Neutron detection alternatives to ³He for national security applications / Richard T. James H. Ely, Luke E. Erikson, Warnick J. Kernan, Azaree T. Linteur, Edward

R. Siciliano, Daniel L. Stephens, David C. Stromswold, Renee M. Van Ginhoven, Mitchell L. Woodring // Science Direct. Elsevier. <https://doi.org/10.1016/j.nima.2010.08.021>. Volume 623. Pp. 1035-1045.

17. Pikar, V.A. Portable devices for the search and identification of radioactive materials / V.A. Pikar, A.V. Rodigin // Youth in science: collection of reports of the 11th scientific and technical conference. 2013. No. 11. – Pp. 342-246.

18. Marunin, P.V. Modernization of the electronic unit of the neutron detector for portable equipment for radiation monitoring / Rodigin A.V. // Federal State Unitary Enterprise "RYaFTs-VNIIEF", Sarov.: 2015. – Pp. 224-228.

19. Akimov, Y.K. Nuclear radiation detectors based on plastic scintillators / Y. K. Akimov // Physics of elementary particles and the atomic nucleus, 1994. Volume 25, Issue. 2. – Pp.496-500.

20. Shendrik, R.Yu. Methods of experimental physics of condensed matter. Part 3. Introduction to the physics of scintillators. Textbook / R. Yu. Shendrik // Irkutsk: Irkutsk State University Publishing House, 2013. – Pp. 9-15.

21. Swank, R.K. Characteristics of scintillators / R.K. Swank // Uspekhi fizicheskikh nauk, 1956. Volume 58, Issue. 3, – Pp. 519-530.

22. Demenkov, V. G. Beginnings of electronic methods of nuclear physics. Textbook / V.G. Demenkov // St. Petersburg: Publishing house "Lan", 2016. – Pp. 26-39.

23. Romodanov, V. L. Physical methods and installations for active control of fissile materials: a textbook for students of higher educational institutions / V. L. Romodanov // –M.: NRNU MEPhI, 2007. P. 66-77.

24. Romodanov, V. L. Method for reducing the loading of scintillation tracts in installations with pulsed neutron sources / V. L. Romodanov, V.K. Sakharov, D.N. Chernikova // –M.: 2010. Devices and experimental technique. No. 3. – Pp. 38-49.

25. Romodanov, V. L. Laboratory work on active methods of non-destructive testing of fissile materials: a textbook for students of higher educational institutions / V. L. Romodanov // –M.: NRNU MEPhI, 2007. – Pp. 4-9.

26. Chernikova, D. N. Computational and experimental studies of the installation for detecting fissile materials at airports / D. N. Chernikova, V.L. Romodanov, V.K. Sakharov, I.V. Mukhamadyarov, V.V. Afanasiev, A.G. Belevitin // –M.: Atomic energy, 2008, No. 105. – Pp. 102-118.

27. Romodanov, V. L. Complex for digital data processing in installations for the detection of radioactive and fissile materials / V.L. Romodanov, V.V. Afanasyev, A.G. Belevitin, R. Yu. Ryabov // –M.: MEPhI preprint, 2005. – Pp. 32-43.

28. Imom, M. Sh. Development of qualitative digital analysis of neutron and gamma-ray responses with different scintillation counters / M.Sh. Imom, V.L. Romodanov, Kh.Kh. Muminov, F. Rakhimi, S.F. Odinaev // Izvestiya of NANT.: 2019. No. 1 (174). – P.125.

29. Imom, M. Sh. Investigation of the effectiveness of the digital method for analyzing the loading of a neutron channel for various scintillation counters / M. Sh. Imom, V.L. Romodanov, Kh.Kh. Muminov, F. Rakhimi, S. F. Odinaev // Izvestiya of NANT, 2020. No. 1 (178). – P. 44.

30. M. Sh. Imom, Digital method for determining the ratio of neutron pulses to gamma-quantum pulses for various scintillator loads / M. Sh. Imom, V.L. Romodanov, Kh.Kh. Muminov, F. Rakhimi, S.F. Odinaev // Izvestiya of the NAST, 2020 No. 4. – P. 84.

ОМУЗИШИ АКСИ САДОИ СИНТИЛЛЯТСИОНИИ НЕЙТРОНҲО ВА ГАММА-КВАНТҲО БО УСУЛИ БАРТАРАФКУНИИ ИМПУЛСҲОИ ГУЗОШТАШУДА

Кори тадқиқотӣ ба масъалаҳои омузиши усули ададии таҳлили импульси нейтронҳо ва гамма-квантҳо бо роҳи бартарафсозии акси садоҳои гузошташуда бахшида шудааст. Усули мазкур аз детекторҳои синтиллятсионӣ, афзояндаҳои фото-электронӣ, тағйирдиҳандаи аналогӣ-ададӣ ва алгоритми мувофиқ иборат мебошад. Тариқи усули пешниҳодгардида таҳлили боргирии каналии нейтронӣ барои детекторҳои синтиллятсияи моеъ ва кристаллӣ, таносуби адади нейтронҳо дар акси садо ҳангоми тағйирёбии масофаи манбаи гамма-квантҳо ва таносуби импульси нейтронҳо ва гамма-квантҳо барои боргирии гуногуни синтиллятор гузаронида шуд. Ба сифати дастгоҳҳои таҳлили синтилляторҳои моеъӣ ва кристаллӣ истифода гардид.

Калидвожаҳо: усули ададӣ, синтиллятор, нейтрон, гамма-квант, детектор, параметри ҷудокунанда, бартарафсозии импульси гузошташуда, ҳисобкунак, пайдо намудан ва назорат

ИССЛЕДОВАНИЕ СЦИНТИЛЛЯЦИОННЫХ ОТКЛИКОВ НЕЙТРОНОВ И ГАММА-КВАНТОВ МЕТОДОМ УДАЛЕНИЯ НАЛОЖЕННЫХ ИМПУЛЬСОВ

Представленная исследовательская работа посвящена проблемам исследования цифрового метода анализа импульсов нейтронов и гамма-квантов посредством устранения наложенных откликов. Этот метод состоит из синтилляционных детекторов, фотоэлектронных умножителей, аналого-цифрового преобразователя и соответствующего алгоритма. С помощью метода проведен анализ загрузки нейтронных каналов жидких и кристаллических синтилляционных детекторов, отношения числа нейтронов в отклике при изменении расстояния источника гамма-квантов, а также

отношения импульсов нейтронов и гамма-квантов для различных загрузок сцинтиллятора. В качестве аналитических приборов использовались жидкостные и кристаллические сцинтилляторы.

Ключевые слова: цифровой метод, сцинтиллятор, нейтрон, гамма-квант, детектор, параметр разделения, удаления наложенных импульсов, счетчик, обнаружения и контроль.

INVESTIGATION OF THE SCINTILLATION RESPONSE OF NEUTRONS AND GAMMA-QUANTS BY THE METHOD OF REMOVING SUPERIMPOSED PULSES

The presented research work is devoted to the problems of studying the digital method for analyzing neutron and gamma ray pulses by eliminating superimposed responses. This method consists of scintillation detectors, photomultiplier tubes, an analog-to-digital converter and an appropriate algorithm. The method was used to analyze the loading of neutron channels in liquid and crystalline scintillation detectors, the ratio of the number of neutrons in the response with a change in the distance of the gamma-ray source, as well as the ratio of neutron and gamma ray pulses for various scintillator loads. Liquid and crystal scintillators were used as analytical instruments.

Keywords: digital method, scintillator, neutron, gamma-quantum, detector, separation parameter, removal of superimposed pulses, counter, detection and control.

Маълумот дар бораи муаллифон: **Имом Мираҳмади Шарофиддин** - Институти физикаю техникаи ба номи С.У.Умарови Академияи миллии илмҳои Тоҷикистон, ходими калони илмӣ. **Суроға:** 734063, ш. Душанбе, Ҷумҳурии Тоҷикистон, хиёбони Айни, 299/1. **Телефон:** (+992) 933-77-22-11. **E-mail:** emmirshar@gmail.com.

Ромоданов Вадим Леонидович – Донишгоҳи миллии тадқиқоти ядрои Институти муҳандисии физикии Москва, профессор, доктори илмҳои физикаю математика. **Суроға:** 115409, ш. Москва, Русия, шохроҳи Кашир, 31. **Телефон:** +7 (495) 788-56-99. **E-mail:** vlromodanov@mephi.ru.

Фарҳод Раҳимӣ–Академияи миллии илмҳои Тоҷикистон, доктори илмҳои физикаю математика, профессор, узви вобаста. **Суроға:** 734025, ш. Душанбе, Ҷумҳурии Тоҷикистон, хиёбони Рудаки, 33. **Телефон:** (+992) 900-00-44-99. **E-mail:** frahami-2002@mail.ru.

Одинаев Субҳонҷон Фатхуллоевич - Институти физикаю техникаи ба номи С.У.Умарови Академияи миллии илмҳои Тоҷикистон, ходими калони илмӣ. **Суроға:** 734063, ш. Душанбе, Ҷумҳурии Тоҷикистон, хиёбони Айни, 299/1. **Телефон:** (+992) 938-01-32-01. **E-mail:** subhon93@mail.ru.

Сведения об авторах: **Имом Мираҳмади Шарофиддин** – Физико-технический институт имени С.У.Умарова Национальной академии наук Таджикистан, старший научный сотрудник. **Адрес:** 734063, г. Душанбе, Республика Таджикистан, проспект Айни, 299/1. **Телефон:** (+992) 933-77-22-11. **E-mail:** emmirshar@gmail.com.

Ромоданов Вадим Леонидович – Национальный исследовательский ядерный университет Московский инженерно-физический институт, профессор, доктор физико-математических наук. **Адрес:** 115409, г. Москва, Россия, Каширское шоссе, 31. **Телефон:** +7 (495) 788-56-99. **E-mail:** vlromodanov@mephi.ru.

Фарҳод Раҳимӣ –Национальная академия наук Таджикистана, доктор физико-математических наук, профессор, член – корреспондент. **Адрес:** 734025. Республика Таджикистан, г. Душанбе, проспект Рудаки, 33. **Телефон:** (+992) 900-00-44-99. **E-mail:** frahami-2002@mail.ru.

Одинаев Субҳонҷон Фатхуллоевич – Физико-технический институт имени С.У.Умарова Национальной академии наук Таджикистан, старший научный сотрудник. **Адрес:** 734063, г. Душанбе, Республика Таджикистан, проспект Айни, 299/1. **Телефон:** (+992) 938-01-32-01. **E-mail:** emmirshar@gmail.com.

Information about the authors: **Imom Mirahmadi Sharofiddin** - S.U.Umarov Physical and Technical Institute of the National Academy of Sciences of Tajikistan, senior researcher. **Address:** 734063, Dushanbe, Republic of Tajikistan, Aini Avenue, 299/1. **Phone:** (+992) 933-77-22-11. **E-mail:** emmirshar@gmail.com.

Romodanov Vadim Leonidovich – National Research Nuclear University Moscow Engineering Physics Institute, Professor, Doctor of Physical and Mathematical Sciences. **Address:** 115409, Moscow, Russia, Kashirskoe highway, 31. **Phone:** +7 (495) 788-56-99. **E-mail:** vlromodanov@mephi.ru.

Farhod Rahimi - National Academy of Sciences of Tajikistan, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Corresponding Member. **Address:** 734025, Dushanbe, Republic of Tajikistan, Rudaki Avenue, 33. **Phone:** (+992) 900-00-44-99. **E-mail:** frahami-2002@mail.ru.

Odinaev Subkhonjon Fatkhulloevich - S.U.Umarov Physical and Technical Institute of the National Academy of Sciences of Tajikistan, senior researcher. **Address:** 734063, Dushanbe, Republic of Tajikistan, Aini Avenue, 299/1. **Phone:** (+992) 938-01-32-01. **E-mail:** emmirshar@gmail.com.

Статья поступила в редакцию 11.12.2023
Одобрена после рецензирования 25.01.2024
Принята к публикации 13.03.2024

СТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ В МОНОКРИСТАЛЛАХ CdTe ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ТЯЖЕЛЫМИ ИОНАМИ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ

Султонов Н., Акобиров А.Т., Наимов У.Р., Рахматов Б.А., Хамрокулов Р.Б.

Таджикский национальный университет

Поликристаллические пленки соединений A^2B^6 , главным образом, теллурида кадмия, все шире используются в основных областях электронной техники, микроэлектронике, оптоэлектронике, солнечной энергетике [1-3].

Теллурид кадмия вследствие больших атомных номеров компонентов, а также большой ширины запрещенной зоны ($\Delta E=1,5$ эВ) в настоящее время представляет собой один из наиболее перспективных материалов для создания дозиметров и счетчиков γ -квантов [4-6].

Возможность создания приборов и устройств на основе поликристаллических пленок CdTe определяется уровнем технологии синтеза пленок с воспроизводимыми и контролируруемыми свойствами.

Исходя из этого повышение воспроизводимости в технологии пленочных поликристаллических структур является важнейшей задачей микроэлектроники и оптоэлектроники. Ее решение определяется возможностью прогнозирования влияния технологических факторов на структуру и электрические свойства пленок, для чего необходимо моделирование технологических процессов и межоперационный контроль [3,7].

Возрастающая потребность в поликристаллических пленках вызвана и тем, что в монокристаллах, ввиду особенностей механизмов роста, невозможно получить тот спектр структур, который присущ поликристаллическому беспорядку.

В данной работе приведены результаты по получению поликристаллических пленок облучением монокристаллического теллурида кадмия ионами инертных газов разных радиусов.

Прогресс в микро- и оптоэлектронике, оптике и в других областях техники, преобразивший информационный мир за короткий период, непосредственно связан с развитием тонкопленочных технологий. При выращивании пленок экспериментаторы и технологи вынуждены контролировать целый ряд параметров, таких, как материал и структура подложки, ее температура, состав пара, интенсивность его поступления [8-11]. Обычно эти параметры подбирают эмпирически для получения нужных структур и состава пленки [12, 13].

Интенсивно идут фундаментальные исследования кинетики фазовых переходов первого рода. Было показано, что кинетика фазовых переходов первого рода — сложный многостадийный процесс, который сопровождают различные нелинейные явления [14, 15]. К таким стадиям обычно относят стадии зародышеобразования, сепаратного роста зародышей новой фазы, коалесценцию и позднюю стадию, то есть оствальдовское созревание, на которой рост более крупных островков осуществляется за счет растворения более мелких.

Главная цель тонкопленочных технологий — получение сплошных пленочных структур заданного состава, толщины и структуры. В зависимости от сферы применения пленки могут быть аморфными, поликристаллическими или эпитаксиальными (монокристаллическими). Поликристаллические пленки, как правило, образуются на неориентирующих подложках или на ориентирующих, но в условиях, далеких от равновесия. Для получения аморфных, то есть замороженных, метастабильных структур необходимо использовать специальные методики создания высоких насыщений или переохладений. Вопрос о том, что является главным ориентирующим фактором роста, остается на сегодня открытым. Считается, что необходимое условие для роста ориентированных структур — близость параметров решетки подложки и пленки

(обычно достаточно, чтобы это различие между ними не превышало 15 %). Однако, это далеко не достаточное условие, так как островки новой фазы участвуют в различных эволюционных процессах. Определить, который из них оказывает основное влияние на ориентацию, достаточно сложно. В работах [12, 13] рассмотрены некоторые модели ориентированного роста.

Существенной особенностью зарождения новой фазы на поверхности подложек по сравнению с гомогенным образованием в объеме является то, что подложка содержит различные дефекты. Дефекты обычно подразделяются на точечные и линейные, к которым относятся ступени, выходы дислокаций и царапины. Даже идеальная подложка содержит такие дефекты, как уровни Тамма, образованные незавершенностью кристаллических плоскостей. Строгая теория гетерогенного зарождения новой фазы на поверхности до сих пор не разработана.

Режимы роста тонких пленок обычно разделяются на послойный, островковый и промежуточный [12].

Послойный режим, или режим Франка-ван дер Мерве, реализуется в том случае, если атомы осаждаемого вещества связаны с подложкой более сильно, чем друг с другом. Моноатомные слои заполняются в этом режиме по очереди, то есть двумерные зародыши (толщиной в один атом) следующего слоя образуются на верхней части зародышей предыдущего слоя после его заполнения.

Островковый режим, или режим Фольмера-Вебера, реализуется в противоположном случае, когда атомы осаждаемого вещества связаны между собой сильнее, чем с подложкой.

В промежуточном режиме, или режиме Странского-Крастанова, вначале реализуется послойный рост, затем, после заполнения одного-двух слоев, начинается островковый режим роста. Причины смены механизмов роста может быть несколько. Основная из них — параметр решетки не может оставаться неизменным при заполнении очередного слоя. Его изменение приводит к сильному увеличению энергии поверхности раздела адсорбат - промежуточный слой, которое обеспечивает выполнение критерия островкового режима.

На поверхности, согласно современным представлениям [16], различают следующие основные способы миграции атомов и распространения энергии, в частности, тепла: трехмерная или объемная диффузия атомов и трехмерный отвод тепла; двумерная диффузия атомов по поверхности подложки и двумерный отвод тепла; одномерная диффузия атомов вдоль ступеней подложки, выходов дислокаций и других линейных дефектов. Островки могут расти также и за счет непосредственного поступления атомов из пара на их поверхность.

Среди всего многообразия процессов, сопровождающих рост тонких пленок, главным, безусловно, является процесс зарождения островков новой фазы, то есть собственно фазовый переход первого рода. Именно на этой, начальной, стадии конденсации и определяется, сколько всего возникнет островков новой фазы, и закладываются основы формирования структуры тонкой пленки.

Хорошо известно, что свойства пленок, в основном, зависят от их состава. Именно состав определяет большинство электрофизических, оптических, прочностных и других свойств. Понять, как протекает эволюция состава пленок, чтобы иметь возможность управлять ею в процессе роста пленок, — одна из важнейших задач физики тонких пленок. В работах [17, 18] показано, что на определенной стадии между радиусом островков твердых растворов и их составом устанавливается взаимоднозначная связь.

Управлять параметрами роста пленки проще всего на стадии ОС, когда зарождения новых островков не происходит, а сплошная пленка еще не образовалась. Возможность управления основана на том, что на этой стадии ансамбль островков новой фазы вступает в своеобразное взаимодействие с обобщенными диффузионно-тепловыми полями, образующимися на поверхности подложки, и потоками атомов, падающих на

нее. При этом асимптотическое распределение островков по размерам и их состав не зависят от начального распределения, а зависят от механизма массо- и теплопереноса, реализующегося в процессе роста островков, и от интенсивности поступления вещества и тепла к подложке.

В [19] предложена оригинальная методика получения высокоориентированных пленок. Как правило, такие пленки получают при повышенных температурах (для обеспечения нужной подвижности адатомов) в условиях, близких к равновесию. Например, пленки CdTe обычно выращивают при температурах подложки порядка 500-650 К [19]. В данной же работе описана методика получения эпитаксиальных пленок при температуре 228 К. Причем изменение температуры подложки как в большую сторону, так и в меньшую приводило к ухудшению структуры пленок. Это связано с двумерным слоем жидкости на поверхности подложки, образующимся или сразу, или за счет возникновения жидких капель CdTe непосредственно у поверхности подложки. Повышение температуры подложки приводит к разрушению этого двумерного слоя, а ее понижение — к созданию большого переохлаждения и нарушению стадии ОС. При дальнейшем понижении температуры начинают расти аморфные пленки.

Внутри сплошных пленок под воздействием внешних факторов возможно протекание разнообразных процессов. Это связано с тем, что система подложка-пленка является существенно неравновесной. Такая неравновесность есть следствие напряжений, имеющихся в пленке и подложке. При наличии надлежащего механизма переноса массы эти напряжения релаксируют, что приводит к потере сплошности пленки. Кроме того, в поликристаллических пленках, зерна которых напряжены различным образом, могут происходить процессы рекристаллизации. Строгая теория таких процессов в настоящее время не построена, однако все эти процессы в той или иной степени можно отнести к фазовым переходам первого рода.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

В данной работе изучено влияние радиуса иона на удельное сопротивление и интенсивность наиболее сильного рентгеновского рефлекса (111). Рентгенографические исследования проводились на установке ДРОН-2. Для измерения сопротивления пленок использовался мост постоянного тока Р4053. Образцы подвергались облучению ионами неона, аргона и ксенона одинаковой дозы (250 мрад) с радиусами 38, 71 и 108 пикометр (10^{-12} м) соответственно [11, 12]. Как следует из рис. 1 с ростом радиуса иона интенсивность рефлекса (111) падает и рентгенограммы во всех случаях принимают форму, характерную для поликристаллических тел. Отличие полуширины рефлексов, которые определяют размеры кристаллитов для всех трех видов облучаемых ионов, не превышает 10%. Полуширина рефлекса для облученного образца по наиболее сильному рефлексу (III), составляет $\sim 42^\circ$, что соответствует размером кристаллитов (зерен) $\sim 130 \text{ \AA}$. Полуширина другого рефлекса (220) облученного монокристалла также характерна для поликристаллических веществ.

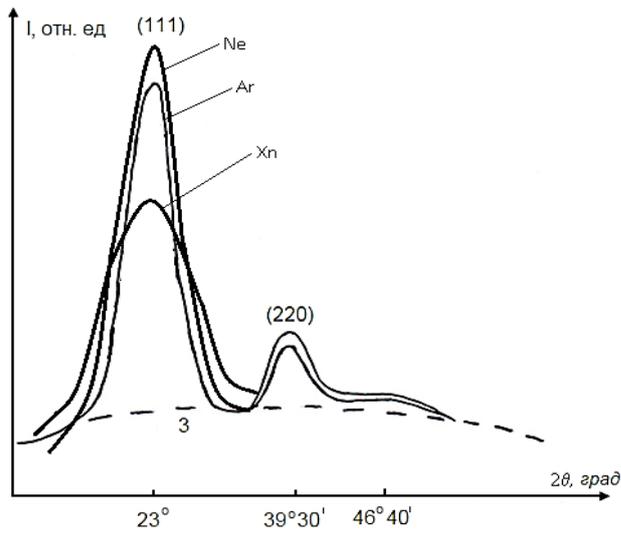


Рис. 1. Влияние радиуса иона аргона на интенсивности рентгеновского рефлекса (111)

Fig. 1. Effect of the radius of the argon ion on the intensity of the X-ray reflection (111)

Зависимость удельного сопротивления от радиуса облучаемых ионов приведена на рис. 2. Показано, что в соответствии с рентгеновскими данными по мере роста радиуса иона удельное сопротивление растет, причем чем больше радиуса иона, тем больше скорость роста ρ . Облучение переводит монокристалл в поликристаллическое состояние с образованием большого количества дефектов, которые являются очагами захвата носителей тока, что и приводит к росту ρ .

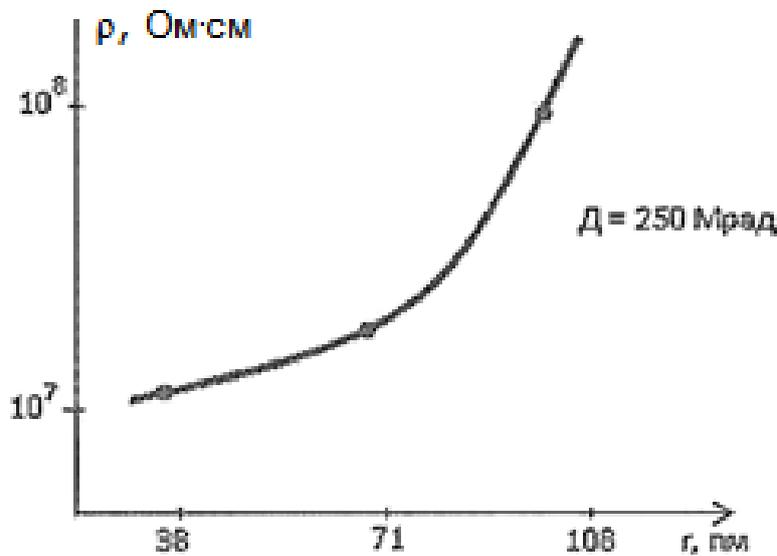


Рис. 2. Зависимость удельного сопротивления пленок CdTe от радиуса иона аргона

Fig.2. Dependence of the resistivity of CdTe films on the radius of the argon ion

Очевидно, что облучение приводит к изменению кристаллической структуры образца и их частичной аморфизации. Возрастающее падение ростом радиуса иона, по-видимому, связано с тем, что ионы с большим радиусом имеют значительно большее эффективное сечение взаимодействия с кристаллом, и вдоль их трека образуется гораздо больше дефектов (по сравнению с ионами с меньшим радиусом) - вакансий, дислокаций,

уход атомов в междоузелье, которые в дальнейшем становятся очагами аморфной области.

С целью выяснения механизма аморфизации монокристаллов проведены исследования структурно-электрического изменения в монокристаллах CdTe при дозах меньших или больших уже рассмотренной дозы 250 МэВ.

В качестве объекта исследования для этих опытов были выбраны монокристаллические пленки теллурида кадмия толщиной 80 мкм. На рис. 3 показано изменение дифрактограммы пленки по мере роста дозы облучения ионами аргона. Как видно для исходной необлученной пленки наблюдается четыре дифракционных максимума с постепенным уменьшением интенсивности. При дозе 150 мрад рефлекс 400 исчезает и на дифрактограмме наблюдается три четких рефлекса с уширением полуширины по сравнению исходным; при дозе 250 МэВ рефлекс 311 превращается в плато и на рентгенограмме наблюдается два рефлекса - (111) и (220); при дозе 400 МэВ все рефлексы исчезают и на дифрактограмме наблюдается два размытых максимума, характерных для аморфных тел (рис. 2, кривая 4).

Из анализа рис. 3 вытекает, что в процессе облучения монокристалл сначала превращается в поликристалл, о чем свидетельствует расширение полуширины рефлексов, далее при $D > 350$ МэВ. происходит разрушение кристаллитов и переход поликристаллической пленки в аморфную.

Из анализа интенсивностей рефлексов следует, что наиболее устойчивыми являются плоскости, соответствующие большим значениям d (межплоскостное расстояние) т.е. малым значениям углового положения максимума ($\theta = 23^\circ$ и $30^\circ 30'$), в то время как кристаллические плоскости, соответствующие большим значениям θ ($\theta = 23^\circ$ и $30^\circ 30'$) разрушаются. Таким образом, атомные плоскости с малым значением d разрушаясь, образуют очаги аморфных областей.

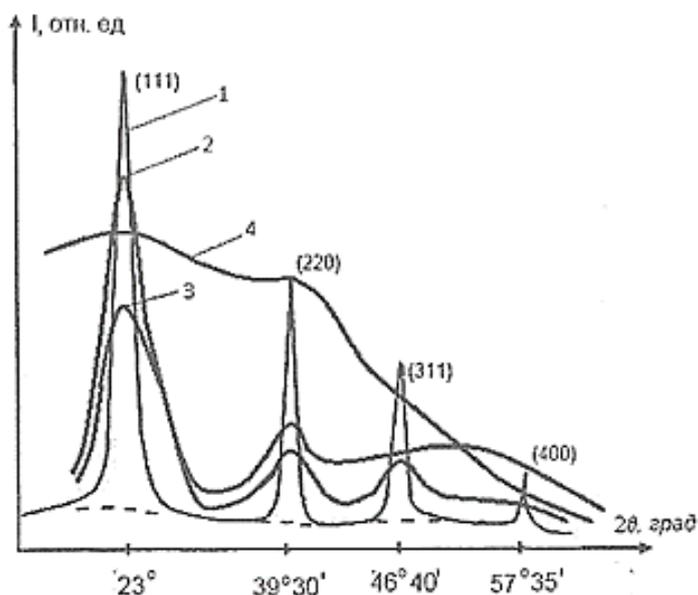


Рис. 3. Влияние дозы облучения монокристаллической пленки CdTe ионами аргона на картины дифракции рентгеновских лучей: 1 - исходный, 2 - 150, 3 - 250, 4 - 400 МэВ

Fig. 3. Effect of irradiation dose of a single-crystal CdTe film with argon ions on X-ray diffraction patterns: 1 - initial, 2 - 150, 3 - 250, 4 - 400 МэВ

Из рис. 3 видно, что падение интенсивности кристаллических рефлексов с ростом дозы сопровождается исчезновением дальних рефлексов, сначала исчезает самый дальний рефлекс (400) далее (011) и затем (220) и (111).

На рис. 4 показана зависимость удельного сопротивления пленки (ρ) от дозы облучения D где видно, что сначала с ростом дозы ρ линейно возрастает (участок АВ, рис. 4) что связано с переходом монокристалла в поликристаллическое состояние, а на участке ВС (рис. 4) имеет место более резкое возрастание ρ , которое связано с постепенным переходом поликристаллического состояния в аморфное. Участок СД, где наблюдается постоянство ρ с ростом D , относится к переходу поликристаллического состояния в полностью аморфизированное.

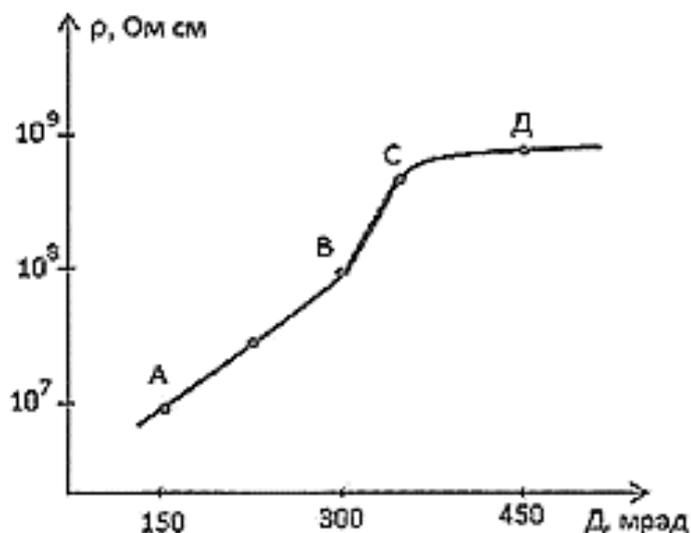


Рис. 4. Зависимость удельного сопротивления от дозы облучения ионами аргона пленок теллурида кадмия

Fig. 4. Dependence of resistivity on the dose of irradiation with argon ions of cadmium telluride films

Переходя к обсуждению результатов, необходимо отметить, что бомбардировка кристаллов ионами сопровождается накоплением вакансионных комплексов (обогащёнными вакансиями) и образованием междоузельного атома.

Пространственное разделение дефектов, а именно пространственное разделение первичных дефектов и междоузельных атомов, позволяет накопить дефекты до большой концентрации. Каждая отдельная разупорядоченная область (РО) представляет собой в начальный момент времени участок с обогащенными вакансиями в центре, окруженный облаком междоузельных атомов. Далее радиационная область проходит ряд стадий, обусловленных протеканием вторичных процессов: а) уход дефектов из РО вследствие диффузии; б) взаимодействие дефектов между собой с образованием устойчивых дефектов, которые неподвижны при данной температуре. Названные процессы действуют навстречу друг другу, эффективность того или другого процесса зависит от массы бомбардируемой частицы и температуры подложки.

Увеличение массы иона способствует более эффективному протеканию комплексообразования. Поскольку с ростом массы иона увеличивается концентрация смещений в РО и растет размер РО в плоскости, перпендикулярной направлению пучка, то это увеличивает вероятность взаимодействия дефектов между собой с образованием неподвижных при данной температуре комплексов. И наоборот, уменьшение массы способствует протеканию первого процесса, т.е. уходу дефектов из РО.

При облучении полупроводника даже малыми дозами тяжелых ионов, наблюдались VV- центры. Концентрация первичных смещений в этом случае, по-видимому, была достаточной для перевода поликристалла в аморфное состояние в области трека частиц, по крайней мере внутренняя часть разупорядоченной области является аморфной.

При больших энергиях аморфный слой образуется в объеме полупроводника, а переход в аморфное состояние приповерхностного слоя наступает лишь при дальнейшем увеличении дозы. Облучение полупроводников легкими ионами приводит к образованию двух аморфных слоев: приповерхностного и объемного.

Внедрение иона в кристалл, дает достаточную концентрацию дефектов для образования отдельной аморфной зоны. Считалось также, что для формирования такой зоны необходимо некоторое характеристическое время τ , в течение которого дефекты диффундируют из разупорядоченной области (РО). Чем больше дефектов уйдет в результате диффузии из РО, тем меньше размер аморфной зоны (РО - скопление точечных дефектов, образующихся при облучении кристаллов ионами, быстрыми нейтронами и электронами высоких энергий ($>10\text{МэВ}$)).

Дефекты (вакансии, междоузельные атомы), ушедшие вглубь кристалла, образуют там комплексы с примесью или захватываются на дислокации. Другая часть дефектов, движущаяся к поверхности, накапливается при поверхностном слое, образуя комплексы, устойчивые при выбранной температуре облучения объектов.

В процессе бомбардировки ионами происходит наложение РО, что дает обогащенный вакансиями слой в области максимума других упругих соударений.

Вакансионный слой окружен областью с повышенной концентрацией междоузельных комплексов. Сток дефектов к поверхности способствует образованию приповерхностной области нарушений. В зависимости от условий на поверхности эта область содержит дефекты либо вакансионного, либо междоузельного типа.

Масса налетающего иона оказывает сильное влияние на вторичные процессы в бомбардируемом слое. Особенно ярко это проявляется в зависимости дозы аморфизации облучаемого слоя, а также в распределении по глубине дефектов, введенных тяжелыми ионами при повышенных температурах.

Даже при внедрении в полупроводник тяжелых ионов, аморфная фаза образуется в результате вторичных процессов - взаимодействия дефектов между собой во время облучения.

Мы предполагаем что аморфные зоны образуются в результате первичных процессов при выполнении следующих условий: 1) облучение проводится при температурах, когда тепловое движение компонентов пар Френкеля заторможено; 2) время термореализации РО много меньше характерных времен взаимодействия дефектов между собой; 3) Между аморфизированным ионной бомбардировкой слоем и монокристаллической подложкой есть переходная область, насыщенная дефектами. Особенно интенсивно разрушается монокристалл при бомбардировке тяжелыми частицами. Предельный случай накопления дефектов при ионной бомбардировке - полное разрушение кристаллической структуры с образованием сплошного аморфного слоя. Восстановление происходит после отжига при достаточно высокой температуре.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Изучено влияние радиуса иона на удельное сопротивление и структуру слоя (111) монокристалла теллурида кадмия. Образцы подвергались облучению ионами неона, аргона и ксенона с радиусами 38, 71 и 108 пикометр (10^{-12}м) соответственно. Доза облучения для всех ионов составляла 250 Мрад.

Показано, что наиболее сильное влияние на структурные преобразования оказывают ионы с большим радиусом; при одинаковой дозе (250 Мрад) падение интенсивности рефлекса (111) под воздействием ионов ксенона два раза превышает ионы неона. В соответствии с рентгеновскими данными по мере роста радиуса иона удельное сопротивление растет, причем чем больше радиус иона, тем больше скорость возрастания ρ . Облучение переводит монокристалл в поликристаллическое состояние с образованием большого количества дефектов, которые являются очагами захвата

носителей тока, что и приводит к росту ρ . Возрастающий рост ρ с увеличением радиуса иона, по-видимому, связано с тем, что ионы с большим радиусом имеют значительно большее эффективное сечение взаимодействия с кристаллом.

**Рецензент: Махсудов Б.И.,
доктор физико-математических наук,
профессор.**

ЛИТЕРАТУРА

1. Акобиров А.Т. Морфология поверхности пленок теллурида кадмия, полученных методом вакуумного напыления на подложках из кремния и теллурида кадмия / А.Т. Акобиров, В. И. Головчук, М.Г. Лукашевич, Н. Султонов, Р.Б. Хамрокулов // Журнал Белорусского государственного университета. Физика. Минск. - 2017. - № 2. – С.69–75.
2. Султонов Н. Разработка технологии получения поликристаллических пленок теллурида кадмия и исследование их структуры и электрических свойств / Н. Султонов, А.Т. Акобиров, Р.Б. Хамрокулов // Вестник Таджикского национального университета, серия естественных наук. – Душанбе, 2020. - №4. – С.130-146.
3. Чопра К.Л. Тонкопленочные солнечные элементы / К.Л. Чопра, Р.Д. Сухит // Издательство «Мир». – М.: - 1986. – С. 80-89.
4. Schieber M. Theoretical and experimental sensitivity to X-rays of single and polycrystalline HgI₂ compared with different single-crystal detectors. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research / M. Schieber, H. Hermon, A. Zuck, L. Melekhov, R. Shatunovsky, E. Meerson, H. Saado // 2001. – Pp. 41-46. [https://doi.org/10.1016/S0168-9002\(00\)00849-4](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(00)00849-4)
5. Stephane R. CdTe end CdZnTe detector in X ray computed tomography conditions / R. Stephane, G. Francis, G. Michel // Nuclear instruments and Mechods Research. 2000. – Pp. 45-52. [https://doi.org/10.1016/S0168-9002\(99\)01198-5](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(99)01198-5)
6. Заверюхин Ш.А. Мирсагитов Н.Н. Володарский В.В. Плёночные детекторы ядерных излучений из теллурида кадмия. Письмо в ЖТФ. 2003. – Т.29, №22. – Pp. 80-85.
7. Чопра К.Л. Электрические явления в тонких пленках / К.Л. Чопра // Издательство «Мир». – М.: - 1982. – С. 260-264.
8. Султонов Н. Получение поликристаллических пленок CdTe и исследование их электрических характеристик / Н.Султонов, А.Т. Акобиров, К.Д. Азизов // Материалы международной конференции по современным проблемам физико-математических свойств конденсированных сред. – Худжанд, 2002. – С. 60-65.
9. Султонов Н. Рентгенографическое определение плоскостей скольжения аморфно-кристаллических полимеров / Н.Султонов, Б.М. Гинзбург, Р.Б. Хамрокулов // Журнал «Доклады Академии наук Республики Таджикистан». - Душанбе, 2003. -Т. 46. – №9. – С.71-80. ISSN 0002-3469.
10. Султонов Н.С., Структурные изменения в монокристаллах теллурида кадмия при облучении ионами аргона / Н.С. Султонов, А.Т. Акобиров, Р.Б. Хамрокулов // Вестник национального университета (научный журнал). – Душанбе: «СИНО», 2006, – № 2. – С.55-58.
11. Султонов Н. Изучение структуры пленок теллурида кадмия, полученных на монокристаллических подложках / Н.Султонов, А.Т. Акобиров, Р.Б. Хамрокулов // Вестник национального университета (научный журнал). – Душанбе: «СИНО», 2006, – № 2. – С.96-102.
12. Султонов Н. Влияние толщины пленок теллурида кадмия на их надмолекулярную структур / Н. Султонов, А.Т. Акобиров, К. Азизов // Материалы международной конференции «Современные проблемы физики конденсированных сред и астрофизики», посвященной 70-летию профессора Султонова Н. – Душанбе, 2010. – С.10-14.
13. Султонов Н. Исследование проводимости и фоточувствительности пленок CdTe на сапфире / Н. Султонов, А.Т. Акобиров, К. Азизов // Материалы международной конференции «Современные проблемы физики конденсированный сред и астрофизики» посвященной 70-летию профессора Султонова Н. – Душанбе, 2010. – С.15-17.
14. Султонов Н. Структура и электрические свойства пленок CdTe / Н.Султонов, А.Т. Акобиров, К. Азизов // Вестник Таджикского национального университета (научный журнал) (Спец выпуск посвящен 20-летию Независимости Республики Таджикистан), – Душанбе: «СИНО», - 2011, – №6(70). – С. 26-31.
15. Султонов Н. Влияние структуры пленок на механизм их проводимости / Н.Султонов, А.Т. Акобиров, К. Азизов, У.Наимов, Р.Б. Хамрокулов // Материалы международной конференции «Современные вопросы молекулярной спектроскопии конденсированных сред» посвященной 50-летию кафедры оптики и спектроскопии. – Душанбе, 2011. – С. 39-41.
16. Султонов Н. О механизме токопереноса в поликристаллических пленках теллурида кадмия / Н. Султонов, А.Т. Акобиров, К. Азизов, Р.Б. Хамрокулов // Известия академии наук Республики Таджикистан. – Душанбе, 2011. – №3(144). – С.72-77.

17. Султонов Н. Структура морфология и электрические свойства пленок теллурида кадмия / Н. Султонов, А.Т. Акобирова, М.Г. Лукашевич, В.И. Головчук // Материалы международной конференции «Современные проблемы физики конденсированного состояния», посвященной 90-летию Заслуженного деятеля науки и техники РТ, д.физ.мат. наук, профессор Нарзуллоев Б.Н. – Душанбе, 2019. – С. 29-36.

18. Наимов У.Р. Исследование структуры пленок CdTe, полученных вакуумным напылением в квазизамкнутом объеме / У.Р. Наимов, Н. Султонов, А.Т. Акобирова Р.Б. Хамрокулов // Вестник Тамбовский Государственный Технический Университет. – Тамбов, 2019. – №4. - Т. 25. – С. 500-506.

19. Султонов Н. Синтез поликристаллических пленок теллурида кадмия на монокристаллических подложках. / Н. Султонов, А.Т. Акобирова, Б.А. Рахматов, Р.Б. Хамрокулов // Вестник Таджикского национального университета. Серия естественных наук. – Душанбе, 2020, – №3. - С. 113-119.

REFERENCES

1. Akobirova A.T. Surface morphology of cadmium telluride films obtained by vacuum deposition on silicon and cadmium telluride substrates / A.T.Akobirova, V.I. Golovchuk, M.G.Lukashevich, N. Sulstonov, R.B. Khamrokulov // Journal of the Belarusian State University. Physics. – Minsk, 2017. No. 2. – Pp. 69–75.

2. Sulstonov N. Development of technology for producing polycrystalline cadmium telluride films and study of their structure and electrical properties / N.Sulstonov, A.T. Akobirova, R.B. Khamrokulov // Bulletin of the Tajik National University. Series of natural sciences. – Dushanbe, 2020. No. 4. – Pp. 130-146.

3. Chopra K.L. Thin film solar cells / K.L. Chopra, R.D. Suchit // - M.: Publishing house "Mir", 1986. – Pp. 80-89.

4. Schieber M. Theoretical and experimental sensitivity to X-rays of single and polycrystalline HgI₂ compared with different single-crystal detectors / M. Schieber, H. Hermon, A. Zuck, L. Melekhov, R. Shatunovsky, E. Meerson, H. Saado // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. 2001. – Pp. 41-46. [https://doi.org/10.1016/S0168-9002\(00\)00849-4](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(00)00849-4).

5. Stephane R. CdTe and CdZnTe detector in X ray computed tomography conditions / R.Stephane, G. Francis, G. Michel // Nuclear instruments and Methods Research. 2000.– Pp. 45-52. [https://doi.org/10.1016/S0168-9002\(99\)01198-5](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(99)01198-5).

6. Zaveryukhin Sh.A. Mirsagitov N.N. Volodarsky V.V. Film detectors of nuclear radiation from cadmium telluride / Zaveryukhin Sh.A. Mirsagitov N.N. Volodarsky V.V. // Letter to the ZhTF, 2003. - T.29, No. 22. – Pp. 80-85.

7. Chopra K.L. Electrical phenomena in thin films / K.L. Chopra // – M.: Publishing house "Mir", 1982. – Pp. 260-264.

8. Sulstonov N. Preparation of polycrystalline CdTe films and study of their electrical characteristics / N.Sulstonov, A.T.Akobirova, K.D. Azizov // Proceedings of the international conference on modern problems of physical and mathematical properties of condensed matter. – Khujand, 2002. – Pp. 60-65.

9. Sulstonov N. X-ray determination of sliding planes of amorphous-crystalline polymers / N.Sulstonov, B.M. Ginzburg, R.B. Khamrokulov // Journal "Reports of the Academy of Sciences of the Republic of Tajikistan". – Dushanbe, 2003. – Т.46. – No. 9. – Pp. 71-80

10. Sulstonov N. Structural changes in cadmium telluride single crystals upon irradiation with argon ions / N.S.Sulstonov, A.T. Akobirova, R.B. Khamrokulov // Bulletin of the National University– Dushanbe, "SINO", 2006, – No. 2. . – Pp. 55-58.

11. Sulstonov N., Akobirova A.T., Khamrokulov R.B. Study of the structure of cadmium telluride films obtained on single-crystal substrates. Bulletin of the National University (scientific journal). - Dushanbe: "SINO", 2006. – No. 2. – Pp. 96-102.

12. Sulstonov N. Effect of the thickness of cadmium telluride films on their supramolecular structure / N. Sulstonov, A.T. Akobirova, K. Azizov // Proceedings of the international conference "Modern problems of condensed matter physics and astrophysics", dedicated to the 70th anniversary of Professor Sulstonov N. - Dushanbe, 2010. – Pp.10-14.

13. Sulstonov N. Study of conductivity and photosensitivity of CdTe films on sapphire / N. Sulstonov, A.T. Akobirova, K.Azizov // Proceedings of the international conference "Modern problems of condensed matter physics and astrophysics" dedicated to the 70th anniversary of Professor Sulstonov N. - Dushanbe, 2010. – Pp.15-17.

14. Sulstonov N. Structure and electrical properties of CdTe films. / N. Sulstonov, A.T. Akobirova, K. Azizov // Bulletin of the Tajik National University (scientific journal) (Special issue dedicated to the 20th anniversary of Independence of the Republic of Tajikistan), - Dushanbe: "SINO", 2011, - No. 6 (70). pp. 26-31. ISSN 2074-1847.

15. Sulstonov N. Influence of film structure on the mechanism of their conductivity / N. Sulstonov, A.T. Akobirova, K. Azizov, U. Naimov, R.B. Khamrokulov // Proceedings of the international conference "Modern issues of molecular spectroscopy of condensed matter" dedicated to the 50th anniversary of the Department of Optics and Spectroscopy. – Dushanbe, 2011. – Pp. 39-41.

16. Sulstonov N. On the mechanism of current transfer in polycrystalline films of cadmium telluride / N. Sulstonov, A.T. Akobirova, K. Azizov, R.B. Khamrokulov // News of the Academy of Sciences of the Republic of Tajikistan. – Dushanbe, 2011. – No. 3 (144). – Pp. 72-77.

17. Sultonov N. Structure, morphology and electrical properties of cadmium telluride films / N. Sultonov, A.T. Akobirova, M.G. Lukashevich, V.I. Golovchuk // Proceedings of the international conference "Modern problems of condensed matter physics", dedicated to the 90th anniversary of the Honored Worker of Science and Technology of the Republic of Tatarstan, Doctor of Physics and Mathematics. Sciences, Professor Narzulloev B.N. – Dushanbe, 2019. – Pp. 29-36.

18. Naimov U.R. Study of the structure of CdTe films obtained by vacuum deposition in a quasi-closed volume / U.R. Naimov, N. Sultonov, A.T. Akobirova, R.B. Khamrokulov // Bulletin of Tambov State Technical University. – Tambov, 2019. – No. 4. – T.25. – Pp. 500-506

19. Sultonov N. Synthesis of polycrystalline cadmium telluride films on single-crystal substrates / N. Sultonov, A.T. Akobirova, B.A. Rakhmatov, R.B. Khamrokulov // Bulletin of the Tajik National University. Series of natural sciences. – Dushanbe, 2020, – No. 3. – Pp. 113-119.

ТАҒЙИРОТИ СОҲТОРӢ ДАР МОНОКРИСТАЛЛӢ ҶОИ CdTe ҶАНГОМИ НУРБОРОНКУНӢ БО ИОНӢОИ ВАЗНИНИ ГАЗӢОИ ИНЕРТӢ

Дар мақола натиҷаҳои тадқиқот оид ба ҳосил намудани қабати поликристаллӣ ё аморфӣ бо роҳи нурборон кардани теллуриди кадмий монокристаллӣ бо ионҳои вазнини газҳои инертӣ, ки радиусашон фарқ мекунад, оварда шудааст. Таъсири радиуси ион ба муқовимат ва сохтори қабати (111) монокристаллии теллуриди кадмий омӯхта шудааст. Намунаҳо бо ионҳои неон, аргон ва ксенони радиусашон мутаносибан 38, 71 ва 108 пикометр (10-12 м) омӯхта шуд. Миқдори радиатсия барои ҳамаи ионҳо 250 Мрад буд. Исбот шудааст, ки ионҳои радиусашон калон ба тағйирёбии сохтор таъсири калон мерасонанд. Дар вояи яхела (250 Мрад) афтиши интенсивнокии рефлексӣ (111) дар зери таъсири ионҳои ксенон нисбат ба ионҳои неон ду баробар зиёд аст. Мувофиқи маълумотҳои рентгенӣ баробари зиёд шудани радиуси ион муқовимат хос зиёд мешавад ва радиуси ион ҳар қадар калон бошад, суръати афзоиши ρ ҳамон қадар зиёд мешавад. Радиатсия монокристаллро бо пайдоиши миқдори зиёди нуксонҳо ба ҳолати поликристаллӣ табдил медиҳад, ки манбаи гирифтани интиқолдиҳандаи ҷорӣ мебошанд ва боиси зиёд шудани ρ мегардад. Афзоиши ρ бо афзоиши радиуси ионҳо бо он алоқаманд аст, ки ионҳои дорои радиуси калон самаранокӣ хеле калонтар доранд.

Калидвожаҳо: сохтор, нурборонкунӣ, радиуси ионҳо, гузаронандагӣ, муқовимати хос, монокристалл, поликристалл, нуксон, барандагони заряд

СТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ В МОНОКРИСТАЛЛАХ CdTe ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ТЯЖЕЛЫМИ ИОНАМИ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ

В работе представлены результаты исследований по получению поликристаллического или аморфного слоя облучением монокристаллического теллурида кадмия ионами инертных газов, отличающихся радиусами. Изучено влияние радиуса иона на удельное сопротивление и структуру слоя (111) монокристалла теллурида кадмия. Образцы подвергались облучению ионами неона, аргона и ксенона с радиусами 38, 71 и 108 пикометр (10^{-12} м) соответственно. Доза облучения для всех ионов составляла 250 Мрад. Показано, что наиболее сильное влияние на структурные преобразования оказывают ионы с большим радиусом; при одинаковой дозе (250 Мрад) падение интенсивности рефлекса (111) под воздействием ионов ксенона два раза превышает ионы неона. В соответствии с рентгеновскими данными по мере роста радиуса иона удельное сопротивление растёт, причём чем больше радиус иона, тем больше скорость возрастания ρ . Облучение переводит монокристалл в поликристаллическое состояние с образованием большого количества дефектов, которые являются очагами захвата носителей тока, что и приводит к росту ρ . Возрастающий рост ρ с увеличением радиуса иона, по-видимому, связано с тем, что ионы с большим радиусом имеют значительно большее эффективное сечение взаимодействия с кристаллом.

Ключевые слова: структура, облучение, радиус иона, проводимость, удельное сопротивление, монокристалл, поликристалл, дефект, носители заряда.

STRUCTURAL CHANGES IN CdTe SINGLE CRYSTALS UPON IRRADIATION WITH HEAVY IONS OF INERT GASES

The paper presents the results of studies on the production of a polycrystalline or amorphous layer by irradiation of single-crystalline cadmium telluride with ions of inert gases differing in radii. The influence of the ion radius on the resistivity and structure of the (111) layer of a single crystal of cadmium telluride has been studied. The samples were irradiated with neon, argon and xenon ions with radii of 38, 71 and 108 picometers (10-12 m), respectively. The radiation dose for all ions was 250 Mrad. It has been shown that ions with a large radius have the strongest influence on structural transformations; at the same dose (250 Mrad), the drop in intensity of the (111) reflection under the influence of xenon ions is twice as high as that of neon ions. In accordance with X-ray data, as the radius of the ion increases, the resistivity increases, and the larger the radius of the ion, the greater the rate of increase ρ . Irradiation transforms a single crystal into a polycrystalline state with the formation of a large number of defects, which are sources of current carrier capture, which leads to an increase in ρ . The

increasing growth of ρ with increasing ion radius is apparently due to the fact that ions with a larger radius have a significantly larger effective cross section for interaction with the crystal.

Key words: structure, irradiation, ion radius, conductivity, resistivity, single crystal, polycrystal, defect, charge carriers

Маълумот дар бораи муаллифон: Султонов Низом – Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, д.и.ф.-м., профессори кафедраи электроникаи физикӣ. Суроға: 734025, ш. Душанбе, Ҷумҳурии Тоҷикистон, хиёбони Рӯдакӣ, 17. **Телефон:** 988003588. **E-mail:** sultonov_nizom@mail.ru.

Акобирова Азиза Тошпулатовна – Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, н.и.ф.-м., дотсенти кафедраи электроникаи физикӣ. Суроға: 734025, ш. Душанбе, Ҷумҳурии Тоҷикистон, хиёбони Рӯдакӣ, 17. **Телефон:** (+992) 907917626. **E-mail:** aziza.akobirova@mail.ru.

Наимов Умедҷон Розибекович – Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, н.и.т., муал. калони кафедраи электроникаи физикӣ. Суроға: 734025, ш. Душанбе, Ҷумҳурии Тоҷикистон, хиёбони Рӯдакӣ, 17. **Телефон:** (+992) 918697984. **E-mail:** umed87-88@mail.ru,

Раҳматов Бадурдин Амируллоевич – Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, н.и.ф.-м., муал. калони кафедраи электроникаи физикӣ. Суроға: 734025, ш. Душанбе, Ҷумҳурии Тоҷикистон, хиёбони Рӯдакӣ, 17. **Телефон:** (+992) 981006951. **E-mail:** badriddin.rakhmatov.91@mail.ru

Ҳамрокулов Раҷабмурод Бадриддинович – Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, н.и.ф.-м., дотсенти кафедраи электроникаи физикӣ. Суроға: 734025, ш. Душанбе, Ҷумҳурии Тоҷикистон, хиёбони Рӯдакӣ, 17. **Телефон:** (+992)904160775. **E-mail:** h.rajabmurod@mail.ru.

Сведения об авторах: Султонов Низом – Таджикский национальный университет, д.ф.-м.н., профессор кафедры физической электроники. Адрес: 734025, г. Душанбе, Республика Таджикистан, проспект Рудаки, 17. **Телефон:** 988003588. **E-mail:** sultonov_nizom@mail.ru.

Акобирова Азиза Тошпулатовна – Таджикский национальный университет, к.ф.-м.н., доцент кафедры физической электроники. Адрес: 734025, г. Душанбе, Республика Таджикистан, проспект Рудаки, 17. **Телефон:** (+992) 907917626. **E-mail:** aziza.akobirova@mail.ru.

Наимов Умедҷон Розибекович – Таджикский национальный университет, к.т.н., ст. препод. кафедры физической электроники. Адрес: 734025, г. Душанбе, Республика Таджикистан, проспект Рудаки, 17. **Телефон:** (+992) 918697984. **E-mail:** umed87-88@mail.ru

Раҳматов Бадурдин Амируллоевич – Таджикский национальный университет, к.ф.-м.н., ст. препод. кафедры физической электроники. Адрес: 734025, г. Душанбе, Республика Таджикистан, проспект Рудаки, 17. **Телефон:** (+992) 981006951. **E-mail:** badriddin.rakhmatov.91@mail.ru

Ҳамрокулов Раҷабмурод Бадриддинович – Таджикский национальный университет, к.ф.-м.н., доцент кафедры физической электроники. Адрес: 734025, г. Душанбе, Республика Таджикистан, проспект Рудаки, 17. **Телефон:** (+992)904160775. **E-mail:** h.rajabmurod@mail.ru.

Information about the authors: – **Sultonov Nizom** – Tajik National University, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor of the Department of Physical Electronics. **Address:** 734025, Dushanbe, Republic of Tajikistan, Rudaki Avenue, 17. **Phone:** 988003588. **E-mail:** sultonov_nizom@mail.ru

Akobirova Aziza Toshpulatovna – Tajik National University, Ph.D., Associate Professor, Department of Physical Electronics, Tajik National University. **Address:** 734025, Dushanbe, Republic of Tajikistan, Rudaki Avenue, 17. **Phone:** (+992) 907917626. **E-mail:** aziza.akobirova@mail.ru

Naimov Umedjon Rozibekovich – Tajik National University, Ph.D., Art. teacher Department of Physical Electronics. **Address:** 734025, Dushanbe, Republic of Tajikistan, Rudaki Avenue, 17. **Phone:** (+992) 918697984. **E-mail:** umed87-88@mail.ru

Rahmatov Badurdin Amirulloevich – Tajik National University, Ph.D., Art. teacher Department of Physical Electronics. **Address:** 734025, Dushanbe, Republic of Tajikistan, Rudaki Avenue, 17. **Phone:** (+992) 981006951. **E-mail:** badriddin.rakhmatov.91@mail.ru

Hamrokulov Rajabmurod Badriddinovich – Tajik National University, Ph.D., Associate Professor of the Department of Physical Electronics. **Address:** 734025, Dushanbe, Republic of Tajikistan, Rudaki Avenue, 17. **Phone:** (+992)904160775. **E-mail:** h.rajabmurod@mail.ru.

Статья поступила в редакцию 20.09.2023
Одобрена после рецензирования 16.12.2023
Принята к публикации 29.02.2024

УДК: 661.48:66.011.014.06.08:54.03.05.06.08.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИИ ПОЛУЧЕНИЯ СМЕСИ
КРЕМНЕФТОРИДА И ФТОРИДА НАТРИЯ ИЗ ПОБОЧНОГО ПРОДУКТА
ПРОИЗВОДСТВА ПЛАВИКОВОЙ КИСЛОТЫ**

¹Шокаримов С.М., ¹Наимов Н.А., ¹Рузиев Д.Р., ¹Рафиев Р.С., ¹Аслонов А.А.,
²Сафиев Х.

¹Таджикский национальный университет

²ГУ «Научно-исследовательский институт металлургии» ОАО «Таджикская
Алюминиевая Компания»

С учетом важности сферы промышленного производства в подъеме социально-экономического состояния населения и создания дополнительных рабочих мест, в Республике Таджикистан приоритетным стратегическим направлением объявлена ускоренная индустриализация страны [1].

Известно, что плавиковую кислоту получают, в основном, при сернокислотном разложении флюорита в реакционной печи, при этом в результате абсорбции тетрафторида кремния, выделяющегося при разложении серной кислотой флюоритового концентрата, содержащего небольшое количество остаточного кремнезёма [2], образуется побочный продукт – кремнефтористоводородная кислота (КФВК) [3].

Кроме того, с растущим спросом на удобрения и как следствие, с запуском все большего и большего количества производственных мощностей по выпуску фосфорной кислоты, необходимость утилизации побочных продуктов (КФВК) возрастает [4-8]. В настоящее время КФВК используется либо для фторирования питьевой воды, либо для производства фторида алюминия с низкой насыпной плотностью, криолита, тетрафторида кремния, фторида натрия и фторсиликатов [9-15]. Учитывая, что производство фосфорной кислоты превышает 64 млн. т в год [16], необходимо утилизировать более 2,2 млн. т КФВК.

В настоящее время на территории Республики Таджикистан функционирует предприятие по производству плавиковой и серной кислоты, а также фтористых солей (ООО «Талко Кемикал») [17]. При максимальной производительности в качестве побочного продукта в год образуется приблизительно 4 тыс. т смеси КФВК и плавиковой кислоты, хранение которой требует больших объемов ёмкостей и негативно влияет на экологическую обстановку.

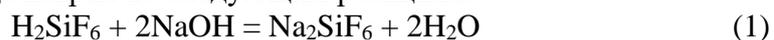
Таким образом, переработка отходов производства химической промышленности, и в частности, производства фтористых солей, с использованием местных ресурсов, с точки зрения экономики и экологии является актуальной задачей.

Самым простым способом переработки смеси КФВК и плавиковой кислоты является нейтрализация с применением каустической и кальцинированной соды, вследствие чего образуются кремнефторид натрия (КФН) и фторид натрия [18-22].

Целью настоящей работы является утилизация побочного продукта производства плавиковой кислоты – смеси КФВК и плавиковой кислоты с использованием гидроксида натрия и хлорида натрия (местного минерального сырья) с получением фторсодержащих солей – КФН и фторида натрия.

Специалистами Государственного учреждения «Научно-исследовательский институт металлургии» ОАО «Таджикская алюминиевая компания» (ГУ «НИИМ» ОАО «ТалКо») проведены лабораторные исследования по утилизации смеси кислот с целью извлечения фторсодержащих компонентов. Процесс утилизации исследован в двух вариантах – с использованием гидроксида и хлорида натрия, в зависимости от температуры и продолжительности процесса, а также концентрации гидроксида и хлорида натрия [23].

При взаимодействии смеси КФВК и плавиковой кислоты с гидроксидом натрия образуется смесь КФН и фторида натрия по следующим реакциям:



Результаты проведенных исследований по определению зависимости выхода КФН и фторида натрия от температуры, продолжительности процесса и концентрации гидроксида натрия представлены в табл. 1.

Таблица. 1. Зависимость выхода КФН и фторида натрия от температуры, продолжительности процесса и концентрации гидроксида натрия
Table 1. The dependence of the yield of SSF and sodium fluoride on temperature, process duration and sodium hydroxide concentration

№	Параметры процесса			Выход компонентов, %
	Температура, °С	Продолжительность, мин.	Концентрация NaOH, %	Смеси Na ₂ SiF ₆ и NaF
1	2	3	4	5
1	25	15	25	91,2
2	65	15	25	89,8
3	75	15	25	88,1
4	85	15	25	87,7
5	95	15	25	87,5
6	25	5	25	85,6
7	25	10	25	86,3
8	25	20	25	89,1
9	25	25	25	88,6
1	2	3	4	5
10	25	30	25	87,3
11	25	15	15	76,1
12	25	15	20	85,2
13	25	15	30	93,3
14	25	15	35	95,1
15	25	15	40	96,3

16	25	15	45	97,5
----	----	----	----	------

Как видно из табл. 1, при повышении температуры выше 65 °С выход КФН и фторида натрия снижается, что связано с увеличением растворимости указанных компонентов, а также с испарением смеси кислот. Исходя из того, что взаимодействие смеси КФВК и плавиковой кислоты с гидроксидом натрия является экзотермической реакцией с повышением температуры до 65-75 °С, процесс начинают осуществлять при 25 °С. Установлено, что при увеличении продолжительности обработки свыше 20 мин. увеличивается растворимость фтористых солей, при этом выход смеси КФН фторида натрия снижается до 87,3%. Исследовано влияние концентрации гидроксида натрия на выход смеси указанных фтористых солей. Определено, что с повышением концентрации гидроксида натрия более 25% наблюдается увеличение выхода фтористых солей до 97,5%, однако из-за образования густой и липкой пульпы затрудняются процессы перекачивания и фильтрования. Таким образом оптимальные параметры процесса являются следующие: температура 25 °С, продолжительность процесса до 20 мин., концентрация гидроксида натрия 25%. При этом степень извлечения смеси фтористых солей составляет 91,2%. Следует отметить, что растворенные смеси фтористых солей не теряются, так как фильтрат обратно используется при приготовлении раствора гидроксида натрия.

Химический анализ исследуемого образца полученной при переработке смеси КФВК и плавиковой кислоты гидроксидом натрия показал, что в составе смеси фтористых солей содержится 67,8% КФН (Na_2SiF_6) и 31,5% фторида натрия (NaF).

Для подтверждения результатов исследований, химического анализа, а также определения минералогического состава смеси фтористых солей, полученных в ходе обработки смеси кислот гидроксидом натрия, был проведен рентгенофазовый анализ (РФА) (рис.1).

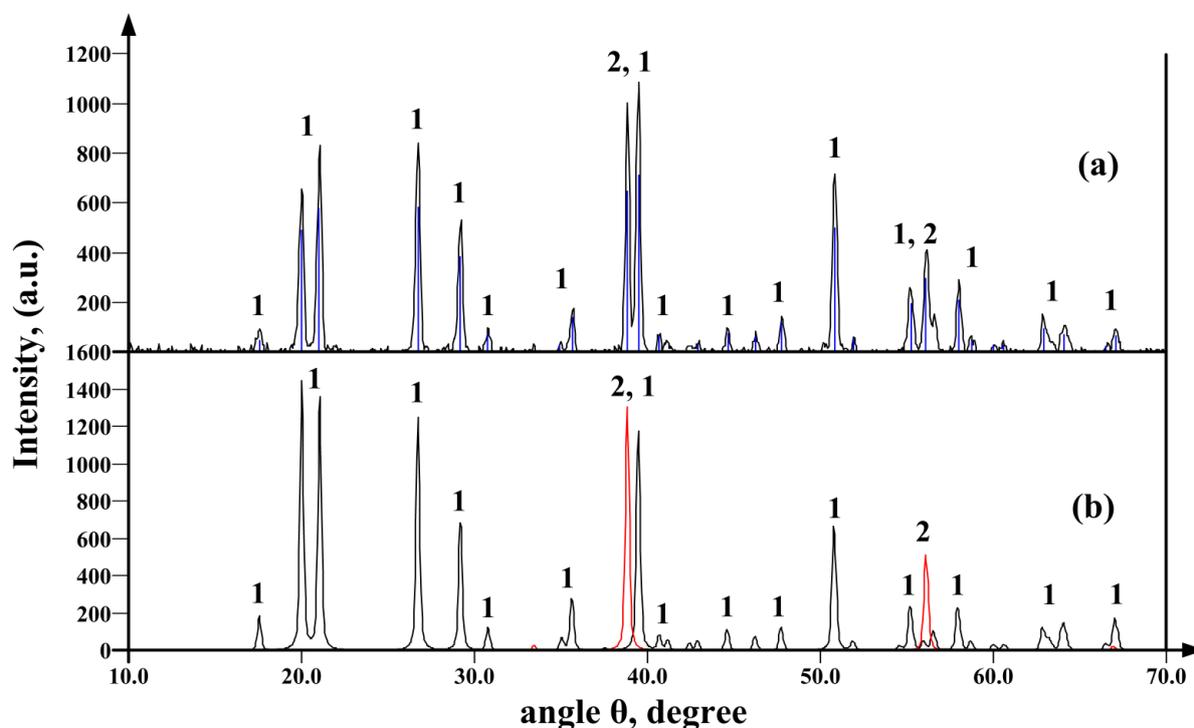


Рис. 1. Рентгенограмма смеси фтористых солей (а) и стандартного образца (б): 1-малладрит (Na_2SiF_6), 2-виллиомит (NaF)

Fig. 1. X-ray of a mixture of fluoride salts (a) and a standard sample (b): 1-malladrite (Na_2SiF_6), 2-villiaumite (NaF)

В табл. 2 приведены данные РФА исследуемого образца фтористых солей, по которым определяется какому минералу соответствуют пики рентгенограммы (рис. 1).

Табл.2. Показатели рентгенографического исследования смеси фтористых солей (А-малладрит, В-виллиомит)

Table 2. Indicators of X-ray examination of a mixture of fluoride salts (A-malladrite, B-villiomite)

<i>2-Тема</i>	<i>D-Расстояние</i>	<i>Интенсивность</i>	<i>Ширина</i>	<i>Точность</i>	<i>Matches</i>
17.584	5.0396	51	0.188	99.9%	A
20.034	4.4285	492	0.192	100%	A
21.077	4.2116	580	0.189	100%	A
26.770	3.3275	585	0.184	100%	A
29.225	3.0532	383	0.190	100%	A
30.823	2.8985	73	0.195	100%	A
34.977	2.5632	28	0.183	98.3%	A
35.699	2.5130	140	0.198	100%	A
38.871	2.3149	649	0.172	100%	B
39.506	2.2792	713	0.180	100%	A
40.707	2.2147	68	0.170	100%	A
42.967	2.1032	32	0.170	99.5%	A
44.668	2.0270	75	0.193	100%	A
46.301	1.9593	61	0.195	100%	A
47.821	1.9005	117	0.193	100%	A
50.868	1.7936	502	0.189	100%	A
51.978	1.7578	51	0.176	100%	A
55.264	1.6608	198	0.221	100%	A
56.156	1.6366	299	0.195	100%	B
58.048	1.5876	208	0.188	100%	A
58.782	1.5695	42	0.218	100%	A
60.064	1.5391	32	0.177	99.8%	A
60.612	1.5265	28	0.173	99.5%	A
62.936	1.4756	95	0.195	100%	A

64.086	1.4518	70	0.254	100%	A
66.561	1.4037	27	0.158	99.3%	A
67.108	1.3936	67	0.195	100%	A

Как видно из рентгенограммы (рис. 1) и табл. 2 пики полученной смеси фтористых солей (верхний график), совпадают с пиками рентгенограммы образца-эталоны (нижний график), что свидетельствует о наличии в исследуемом образце минералов малладрит и виллиомит.

Исследование по переработке смеси кислот с использованием хлорида натрия проведено аналогично применению гидроксида натрия:



Из уравнений реакций (3 и 4) видно, что при переработке смеси кислот с применением хлорида натрия, образуется смеси КФН, фторида натрия и соляной кислоты. Результаты проведенных исследований приведены в табл. 3.

Таблица 3. Зависимость выхода смеси КФН и фторида натрия от температуры, продолжительности процесса и концентрации NaCl
Table 3. Dependence of the yield of SSF and sodium fluoride on temperature, duration of the process and concentration of sodium chloride

№	Параметры процесса			Выход компонентов, %
	Температура, °С	Продолжительность, мин.	Концентрация NaCl, %	Смеси Na ₂ SiF ₆ и NaF
1	2	3	4	5
1	25	5	25	78,58
2	35	5	25	72,77
3	50	5	25	73,81
4	65	5	25	73,52
5	80	5	25	73,66
6	25	10	25	76,79
7	25	15	25	73,06
8	25	20	25	71,22
1	2	3	4	5
9	25	25	25	71,37
10	25	30	25	71,42
11	25	5	5	67,58
12	25	5	10	68,72
13	25	5	15	70,86

14	25	5	20	73,10
15	25	5	25	78,58

Из табл. 3 видно, что при повышении температуры свыше 25 °С и продолжительности процесса более 5 мин., степень извлечения фтористых солей уменьшается, что по всей видимости связано с ростом их растворимости в соляной кислоте. Важно отметить, что по мере снижения концентрации хлорида натрия и образования разбавленной соляной кислоты увеличивается растворимость фтористых солей, что способствует снижению степени их извлечения – исходя из этого, целесообразно использование концентрированного раствора поваренной соли.

Таким образом, оптимальными параметрами процесса переработки смеси кислот с использованием хлорида натрия являются: температура 20-25 °С, продолжительность 5-10 мин, концентрация хлорида натрия 20-25%. При этом максимальная степень извлечения смеси фтористых солей составляет 78,58%.

Однако химический анализ исследуемого образца, полученного при переработке смеси КФВК и плавиковой кислоты хлоридом натрия, показал, что в составе смеси фтористых солей содержится 95,8% КФН (Na_2SiF_6) и 3,5% фторида натрия (NaF). По всей видимости данная ситуация связана с хорошей растворимостью фторида натрия в образовавшейся соляной кислоте, что обуславливает низкое содержание фторида натрия в смеси фтористых солей. Для подтверждения приведенных химических анализов, проведен РФА фтористых солей (рис. 2.).

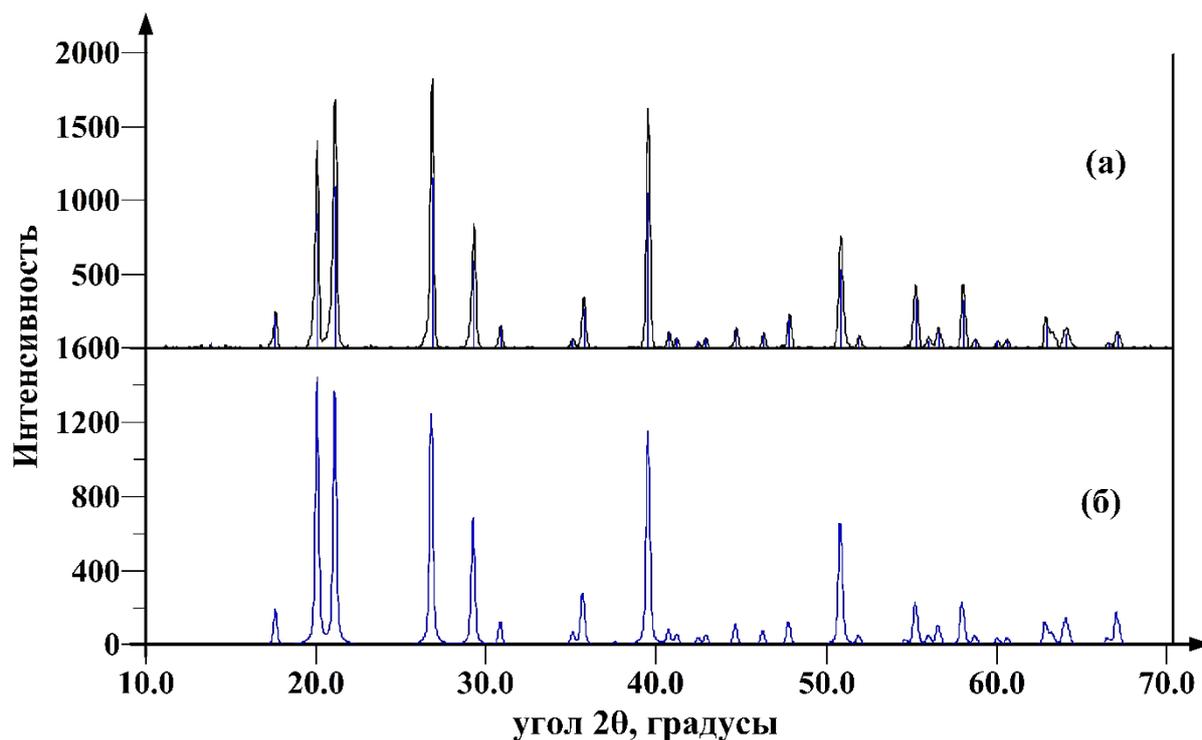


Рис. 2. Рентгенограмма смеси фтористых солей (а) и стандартного образца минерала малладрита (б)

Fig. 2. X-ray diffraction of a mixture of fluoride salts (a) and a standard sample of the mineral maladrite (b)

В табл. 4 приведены данные РФА исследуемого образца фтористых солей, по которым определяется какому минералу соответствуют пики рентгенограммы (рис. 2).

Табл. 4. Показатели РФА смеси фтористых солей (А-малладрит)
Table 4. Indicators of XRD of a mixture of fluoride salts (A-malladrite)

2-Theta	D-Spacing	Intensity	Width	Confidence	Matches
1	2	3	4	5	6
17.607	5.0330	213	0.169	100%	A
20.046	4.4257	911	0.159	100%	A
21.101	4.2068	1096	0.162	100%	A
1	2	3	4	5	6
26.819	3.3215	1153	0.155	100%	A
29.268	3.0489	590	0.165	100%	A
30.842	2.8968	133	0.171	100%	A
35.092	2.5551	56	0.179	100%	A
35.741	2.5101	262	0.171	100%	A
39.518	2.2785	1054	0.159	100%	A
40.751	2.2124	103	0.168	100%	A
41.235	2.1875	74	0.160	100%	A
42.924	2.1052	64	0.167	100%	A
44.703	2.0255	123	0.177	100%	A
46.321	1.9585	98	0.171	100%	A
47.834	1.9000	199	0.178	100%	A
50.862	1.7938	536	0.174	100%	A
51.937	1.7591	74	0.168	100%	A
55.254	1.6611	334	0.184	100%	A
56.027	1.6400	47	0.242	100%	A
56.595	1.6249	107	0.192	100%	A
58.053	1.5875	325	0.176	100%	A
58.774	1.5697	58	0.206	100%	A
60.059	1.5392	47	0.174	100%	A
60.629	1.5261	46	0.182	100%	A

62.925	1.4758	154	0.171	100%	A
64.101	1.4515	93	0.212	100%	A
66.580	1.4034	36	0.170	99.9%	A
67.132	1.3932	86	0.193	100%	A

Как видно из рентгенограммы (рис. 2) и табл. 4 пики полученного смеси фтористых солей (верхний график), совпадают с пиками рентгенограммы образца-эталоны (нижний график), что свидетельствует о наличии в исследуемом образце в основном минерала малладрит, так как содержание виллиомита в составе анализируемой пробы составляет менее 5%.

С целью разделения оставшегося в растворенном виде фторида натрия из соляной кислоты, смесь была выпарена в естественных условиях (на открытом воздухе), так как при температуре более 60 °С фторид натрия взаимодействует с соляной кислоты с выделением газообразного фтористого водорода и получением в остатке хлорида натрия. Полученная соль после естественного упаривания также подвергалась РФА (рис. 3.).

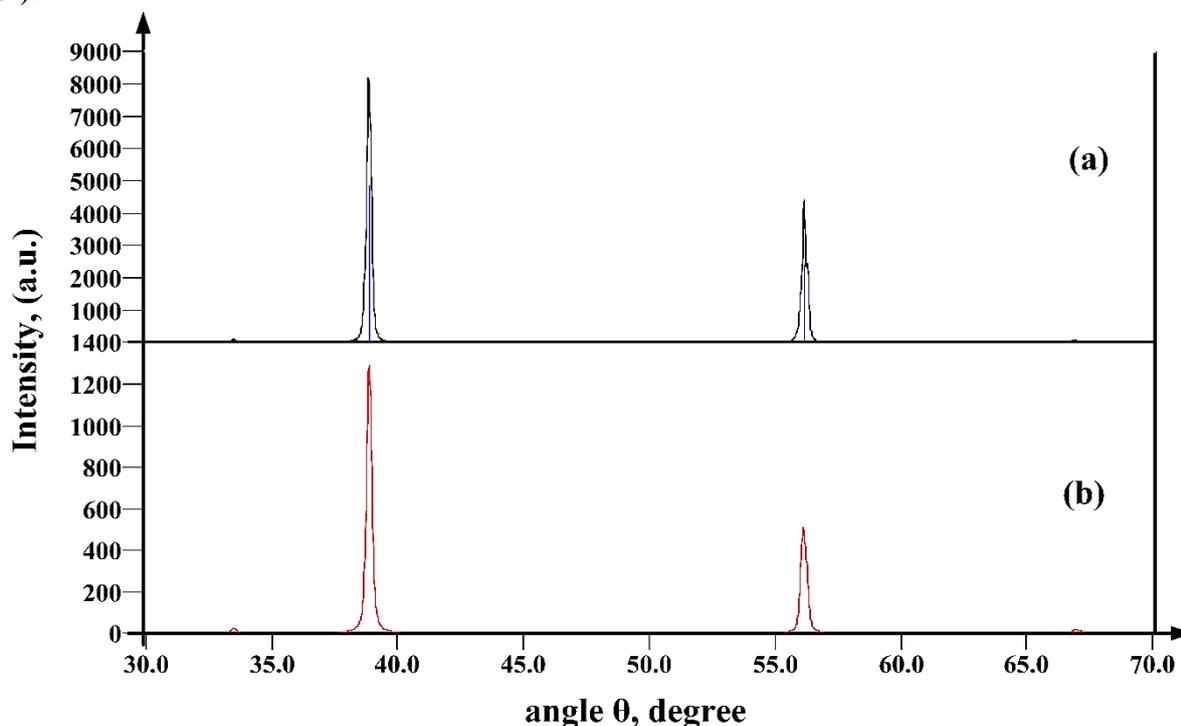


Рис. 3. Рентгенограмма упаренного раствора смеси соляной кислоты и фторид натрия (а) и стандартного образца минерала виллиомита (б)

Fig. 3. X-ray diffraction of the evaporated solution of hydrochloric acid and sodium fluoride mixture (a) and a standard sample of villiaumite mineral (b)

Также в табл. 5 приведены данные РФА исследуемого образца, по которым определяются каким минералам соответствуют пики рентгенограммы (рис. 3).

Табл. 5. Показатели рентгенографического исследования упаренный соль смеси соляной кислоты и фторида натрия (А-виллиомит)

Table 5. Indices of radiographic study of the evaporated salt of a mixture of hydrochloric acid and sodium fluoride (A-villiaumite)

2-Theta	D-Spacing	Intensity	Width	Confidence	Matches
33.491	2.6735	89	0.169	100%	A
38.864	2.3153	4857	0.155	100%	A
56.172	1.6361	2408	0.164	100%	A
66.940	1.3967	51	0.190	100%	A

Согласно проведенному РФА (рис. 3.) а также табл. 5, пики анализируемой соли соответствуют только минералу виллиомит, что подтверждает растворение фторида натрия в соляной кислоте.

Необходимо отметить, что смеси соляной кислоты и фторида натрия можно непосредственно применять в качестве кислотной композиции для обработки призабойной зоны коллекторов горячей воды или же можно обратно использовать при переработке смеси КФВК и плавиковой кислоты с получением КФН.

На основании лабораторных исследований, была разработана принципиальная технологическая схема получения смеси КФН и фторида натрия из смеси КФВК и плавиковой кислот двумя вариантами (рис. 2).

Согласно принципиальной технологической схеме, к приготовленному 20%-ному раствору гидроксида натрия или 25%-ному раствору хлорида натрия добавляют по стехиометрическому расчету смесь КФВК и плавиковой кислоты. Образовавшуюся пульпу фильтруют с однократной промывкой. Воду можно повторно использовать при приготовлении растворов хлорида или гидроксида натрия. Далее отфильтрованную смесь солей подвергают сушке – полученный продукт можно непосредственно использовать в электролизном производстве для получения алюмокремниевого сплава (силумин) и расплава электролита, а также для фторирования питьевой воды и в производстве кислотостойких цементов.

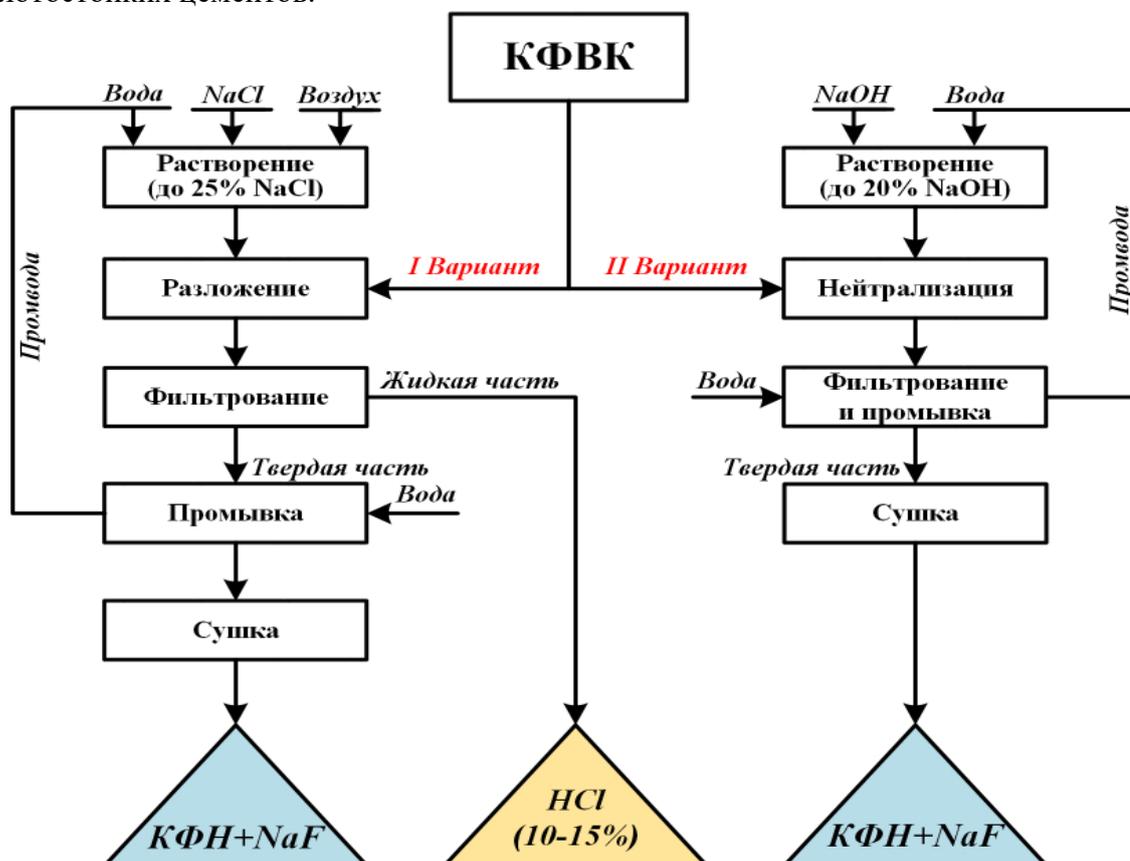


Рис.2 – Принципиальная технологическая схема производства смеси КФН и фторида натрия из смеси КФВК и плавиковой кислоты с применением хлорида, и гидроксида натрия

Fig. 2 – Basic technological scheme for the production of a mixture of SSF and sodium fluoride from a mixture of FSA and hydrofluoric acid using chloride and sodium hydroxide

Как было отмечено, при применении хлорида натрия образуется раствор 10-15% соляной кислоты, которую можно использовать в качестве композиции для обработки призабойной зоны разных коллекторов или упаривать в естественных условиях с получением в осадке фторида натрия, а также повторно применять при переработке смеси КФВК и плавиковой кислоты с получением КФН.

В процессе проведения лабораторных исследований и соответствующих стехиометрических расчетов установлено, что при обработке 100 кг смеси кислот, состоящей из 33,36% КФВК и 21,44% плавиковой кислоты, гидроксидом натрия расходуются следующие компоненты: гидроксид натрия – 42,99 кг (в том числе 14,27 кг или 33,19% для образования КФН; 28,72 кг или 66,80% для образования фторида натрия), расход воды – 171,96 кг (или 214,95 кг 20%-го раствора NaOH). При этом происходит образование 33,53 кг (52,64%) Na_2SiF_6 и 30,16 кг (47,35%) NaF (в сумме 63,69 кг смеси указанных солей) и 200 кг воды. Необходимо учесть, что в этих условиях до 4% фторида натрия и до 1,65% КФН остаются растворенными в воде.

В результате проведенных исследований установлено, что технология нейтрализации смеси КФВК и плавиковой кислоты с целью получения смеси фтористых солей по обоим вариантам проста в осуществлении и экологически безопасна, а также экономически эффективна за счет использования местного минерального сырья и малой энергозатратности производства.

**Рецензент: Шеров К.,
кандидат химических наук,
доцент**

ЛИТЕРАТУРА

1. Эшонкулова Л. Четвертая цель – индустриализация. [http:// www.narodnaya. tj/ index. php? option=com_content&view=article&id=12647:2020-12-24-05-19-35&catid=53: ekonomika&Itemid=58](http://www.narodnaya.tj/index.php?option=com_content&view=article&id=12647:2020-12-24-05-19-35&catid=53:ekonomika&Itemid=58). 24.12.2020.
2. Позин М.Е. Технология минеральных солей (удобрений, пестицидов, промышленных солей, окислов и кислот) / М.Е. Позин // ч. 2 - Изд. 4-е, испр. - Л.:Изд. «Химия», 1974. – 768 с.
3. Production of HF from H_2SiF_6 / Thomas Dahlke, Olivier Ruffiner, Roderick Cant // *Procedia Engineering*, Volume 138, 2016. – Pp.231-239. <https://doi.org/10.1016/j.proeng.2016.02.080>.
4. Technical Report No. 26, Mineral Fertilizer Production and the environment: Part 1: The fertilizer Industry's Manufacturing processes and environmental issues, United Nations Publication.
5. Зайцев В.А., Производство фтористых соединений при переработке фосфатного сырья / В.А.Зайцев, А.А. Новиков, В.И. Родин // - М, Химия, 1972. – 246 с.
6. Se-Won Kim., Production of Fluorosilicic Acid from Phosphoric Acid Slurry of a Fertilizer Manufacturing Plant / Se-Won Kim, Woo-Kyun Moon, Hung-Suck Park // *Journal of the Korea Academia-Industrial cooperation Society* 13(2). February 2012. DOI:10.5762/KAIS.2012.13.2.926.
7. Юлдашев Х. Методы получения гексафторсиликата натрия из отходящих газов производства фосфорных удобрений (обзор) // *Universum* / Х.Юлдашев, А.Жураев, О.Рахмонов // *Технические науки: электрон. научн. журн.* 2020. № 8(77). URL: <https://7universum.com/ru/tech/archive/item/10648>
8. Шарипов, Т. В. Переработка фосфоритов Каратау в гексафторосиликат натрия / Т. В. Шарипов // дис. канд. тех. наук: 05.17.01 / Башкирский государственный университет. – Уфа, 2014. – 178 с.
9. Ткачев К. В. Исследование и разработка малоотходных производств минеральных солей [Текст]. Вып. 57 / УНИХИМ; отв. ред. К. В. Ткачев. - Свердловск: УНИ хим, 1984. – 144 с.
10. Dreveton, A., Manufacture of Aluminum Fluoride of High Density and Anhydrous Hydrofluoric Acid from Fluosilicic Acid / A. Dreveton// *Procedia Engineering* 46 (2012). – Pp.255-265.
11. Sarawade P.B. et al, Recovery of a high surface area mesoporous silica from waste hexafluorosilicic acid (H_2SiF_6) from fertilizer industry / P.B Sarawade // *Journal of hazardous materials* 173 (2010). – Pp.576 – 580.
12. Туманов В.В., Проблема переработки кремнефтористоводородной кислоты на базовые фторсодержащие продукты / В.В. Туманов, С.В. Островский, А.Г. Старостин // *Вестник Пермского*

национального исследовательского политехнического университета. Химическая технология и биотехнология. - 2017. - № 1. - С. 138-148.

13. Мызовская Т.И., Повышение качества фторсиликата натрия / Т.И. Мызовская, С.Р. Масакбаева // Наука и техника Казахстана. № 4. 2020. <https://doi.org/10.48081/UGRM6297>

14. Шаяхметов Д.И., Переработка фторокремниевой кислоты с получением фторида натрия / Д.И. Шаяхметов, А.Г. Мустафин, Т.В. Шарипов // Башкирский химический журнал, 2013. Т.20.- № 2.

15. Мамченков Е.А., Получение силиката натрия из модифицированного силикагеля, побочного продукта фторида алюминия/ Е.А. Мамченков, В.Ю. Прокофьев // Изв. вузов. Химия и хим. технология. 2019. Т. 62. Вып. 3. – С. 89-93.

16. International Fertilizer Industry Association, Production and International Trade figures for phosphoric acid and phosphate rock, 2020.

17. Игорь Сагтаров. Национальное достояние Таджикистана. К 45-летию Таджикской алюминиевой компании. 31 марта, 2020 / Игорь Сагтаров // <https://asiaplustj.info/ru/news/tajikistan/society/20200331/natsionalnoe-dostoyanie-tadzhikistana-k-45-letiyu-tadzhikskoi-alyuminievoi-kompanii>.

18. Arianpour F. Characterization and Properties of Sodium Hexa-Fluorosilicate and its Potential Application in the Production of Sodium Fluoride. Silicon (2020)/ F.Arianpour, A.Ç. Arianpour, B. Aali// <https://doi.org/10.1007/s12633-020-00755-0>

19. Marwan M., The effect of reaction conditions on the precipitation of sodium hexafluorosilicate produced from waste hexafluorosilicic acid / M. Marwan, Batiha, Mohammad Al-Harabsheh // Polish Journal of Chemical Technology, , 2011, 13, 2. – С.

20. Лю Хай. Патент CN (Китай) №102923713А, С 01В 33/10. Method for sanitary production of sodium fluosilicate / ЛюХай // – №201210446052.2; заяв. 09.11.2012; опубл. 13.02.2013. – 4 с.

21. Шарипов Т.В. Патент РФ №2604236С1, С01В 33/10. Способ получения кремнефторида натрия / Т.В. Шарипов, А.Г. Мустафин, Г.С. Кинзябулатова, Э.Р. Сафарьянова // № 2015136833/05; заяв.28.08.2015; опубл.10.12.2016, Бюл. №34. –С. 7.

22. Takeshi Fujiwara., Патент JP (Япония) № 2015224162А, С 01В 33/10, С 02F 1/58, С 02F 1/60. Production method of sodium silicofluoride, and waste liquid treatment system / Takeshi Fujiwara, Yuto Shimizu, Такао Nakaseko, Masato Morita, Kenichi Sakurai, Masaru Yamazaki // –№2014110234 (P2014-110234) заяв. 28.05.2014; опубл. 14.12.2015. – 8 с. URL:<https://patents.google.com/patent/JP2015224162A/en?q=sodium+silicofluoride&oq=sodium+silicofluoride>

23. Раджабзода Н.Х., Малый патент Республики Таджикистан №ТJ 1319. Способ получения смеси кремнефторида и фторида натрия / Н.Х. Раджабзода, Х. Сафиев, Х.А. Мирпочоев, А. Муродиён, Н.А. Наимов, Дж.Р. Рузиев, С.М. Шокаримов, И.Ш. Ахмадшоев, Р.С. Махкамбаев, Н.П. Мухамедиев // МПК С01В33/10. №2201672; заявл. 28.04.2022; зарегистрировано 21.11.2022, Бюл.189, 2022. – С. 3.

REFERENCES

1. Eshonkulova L. The fourth goal–industrialization.http://www.narodnaya.tj/index.php?option=com_content&view=article&id=12647:2020-12-24-05-19-35&catid=53:ekonomika&Itemid=58. 24.12.2020.
2. Pozin M. E. Technology of mineral salts (fertilizers, pesticides, industrial salts, oxides and acids): monograph / M. E. Pozin // Part 2; 4th ed. - Leningrad: Chemistry, 1974. – 768 p.
3. Production of HF from H₂SiF₆ / Thomas Dahlke, Olivier Ruffiner, Roderick Cant // Procedia Engineering, Volume 138, 2016. – Pp.231-239 <https://doi.org/10.1016/j.proeng.2016.02.080>.
4. Technical Report No. 26, Mineral Fertilizer Production and the environment: Part 1: The fertilizer Industry's Manufacturing processes and environmental issues, United Nations Publication.
5. Zaitsev V.A., Production of fluoride compounds in the processing of phosphate raw materials / V.A. Zaitsev., A.A. Novikov, V.I. Rodin // M. Chemistry, 1972. – 246 p.
6. Production of Fluorosilicic Acid from Phosphoric Acid Slurry of a Fertilizer Manufacturing Plant / Se-Won Kim, Woo-Kyun Moon, Hung-Suck Park // Journal of the Korea Academia-Industrial cooperation Society 13(2). February 2012. DOI:10.5762/KAIS.2012.13.2.926
7. Yuldashev Kh., Zhuraev A., Rakhmonov O. Methods of obtaining sodium hexafluorosilicate from waste gases of phosphorus fertilizers production (review) / Kh. Yuldashev, A. Zhuraev, O. Rakhmonov // Universum: technical sciences: electronic scientific journal. 2020. No. 8(77). URL:<https://7universum.com/ru/tech/archive/item/10648>
8. Sharipov T.V. Processing of Karatau phosphorites into sodium hexafluorosilicate: / T.V. Sharipov // dis. candidate of technical sciences: 05.17.01 / Bashkir State University. - Ufa, 2014. – 178 p.
9. Research and development of low-waste production of mineral salts [Text]. Issue 57 / UNICHIM; resp. ed. K. V. Tkachev - Sverdlovsk: UNIKhim, 1984. – 144 p.
10. Dreveton, A., Manufacture of Aluminum Fluoride of High Density and Anhydrous Hydrofluoric Acid from Fluosilicic Acid/A. Dreveton//Procedia Engineering 46 (2012). – Pp. 255-265.
11. Sarawade P.B. et al, Recovery of a high surface area mesoporous silica from waste hexafluorosilicic acid (H₂SiF₆) from fertilizer industry / P.B. Sarawade // Journal of hazardous materials 173 (2010). – Pp.576-580.

12. Tumanov V.V. The problem of processing fluorosilicic acid into basic fluorine-containing products / V.V. Tumanov, S.V. Ostrovsky, A.G. Starostin // Bulletin of the Perm National Research Polytechnic University. Chemical technology and biotechnology. - 2017. - No. 1. – Pp.138-148.
13. Improving the quality of sodium fluorosilicate / T.I. Myzovskaya, S.R. Masakbaeva // Science and Technology of Kazakhstan. No. 4, 2020. <https://doi.org/10.48081/UGRM6297>
14. Shayakhmetov D.I. Processing of fluorosilicic acid with obtaining sodium fluoride / D.I. Shayakhmetov, A.G. Mustafin, T.V. Sharipov // Bashkir Chemical Journal 2013. Vol. 20. No. 2.
15. Mamchenkov E.A., Prokofiev V.Yu. Obtaining sodium silicate from modified silica gel, a by-product of aluminum fluoride. Proceedings of universities / E.A. Mamchenkov, V.Yu Prokofiev//Chemistry and chemical technology. 2019. Vol. 62. 3. – Pp.89-93.
16. International Fertilizer Industry Association, Production and International Trade figures for phosphoric acid and phosphate rock, 2020
17. Igor Sattarov. National treasure of Tajikistan. To the 45th anniversary of the Tajik Aluminum Company / Igor Sattarov // March 31, 2020. <https://asiaplustj.info/ru/news/tajikistan/society/20200331/natsionalnoe-dostoyanie-tadzhikistana-k-45-letiyu-tadzhikskoi-alyuminievoi-kompanii>.
18. Arianpour, F. Characterization and Properties of Sodium Hexa-Fluorosilicate and its Potential Application in the Production of Sodium Fluoride / F.Arianpour, A.Ç. Arianpour, B. Aali// *Silicon* (2020). <https://doi.org/10.1007/s12633-020-00755-0>
19. Marwan M. Batiha, Mohammad Al-Harabsheh. The effect of reaction conditions on the precipitation of sodium hexafluorosilicate produced from waste hexafluorosilicic acid / M. Marwan, Batiha, Mohammad Al-Harabsheh. // Polish Journal of Chemical Technology, 2011, 13, 2. – Pp.23-28.
20. Patent CN (China) No. 102923713A, C 01B 33/10. Method for sanitary production of sodium fluosilicate / Liu Hai; - No. 201210446052.2; application 09.11.2012; publ. 13.02.2013. - 4 p.
21. Sharipov T.V., RF patent No. 2604236C1, C01B 33/10. Method of obtaining sodium silicofluoride / T.V. Sharipov, A.G. Mustafin, G.S. Kinzyabulatov and E.R. Safaryanov // No. 2015136833/05; application 08/28/2015; publ. 10.12.2016, Bul. No. 34. – 7 p.
22. Takeshi Fujiwara., JP patent (Japan) No. 2015224162A, C 01B 33/10, C 02F 1/58, C 02F 1/60. Production method of sodium silicofluoride, and waste liquid treatment system / Takeshi Fujiwara, Yuto Shimizu, Takao Nakaseko, Masato Morita, Kenichi Sakurai, Masaru Yamazaki // –No. 2014110234 (P2014-110234) application. 05/28/2014; publ.12/14/2015.-8 p. URL: <https://patents.google.com/patent/JP2015224162A/en?q=sodium+silicofluoride&dq=sodium+silicofluoride>
23. Rajabzoda N.H., Small patent of the Republic of Tajikistan No. TJ 1319. Method for obtaining a mixture of silicofluoride and sodium fluoride / N.H. Rajabzoda, H. Safiev, A. MirpochoevKh, A. Murodiyov, N.A. Naimov, J.R. Ruziev, S.M. Shokarimov, Sh. AhmadshoevI, R.S. Makhkambaev N.P. Mukhamediev // IPC C01B33/10. No. 2201672; declaration 28.04.2022; registered 21.11.2022, Bul.189, 2022. – 3 p.

ТАҲҚИҚИ ТЕХНОЛОГИЯИ ҲОСИЛ НАМУДАНИ ОМЕХТАИ СИЛИТСИЙФТОРИД ВА ФТОРИДИ НАТРИЙ АЗ МАҲСУЛОТИ ИЛОВАГИИ ИСТЕҲСОЛИ КИСЛОТАИ ФТОРИД

Дар мақола натиҷаи таҳқиқоти технологияи коркард ва безаргардонии маҳсулоти иловагии истеҳсоли кислотаи фторид-омехтаи кислотаҳои гидрогенсилитсийфторид ва фторид бо истифода аз гидроксиди натрий ва хлориди натрий (ашёи хоми маҳаллӣ) барои ҳосил намудани намакҳои фтордор – омехтаи силитсийфторид ва фториди натрий оварда шудааст. Дар натиҷаи таҳқиқотҳои лабораторӣ, параметрҳои оптималии раванди коркарди омехтаи кислотаҳо бо истифода аз гидроксид ва хлориди натрий муайян карда шуд: ҳарорат – 20-25 °С, двомнокии раванд – 10-20 дақиқа, консентратсияи гидроксид ва хлориди натрий – 20-25%. Дар чунин шароит дараҷаи максималии ҷудошавии омехтаи СФН ва фториди натрий фароҳам мегардад. Зимни гузаронидани таҳлили химиявӣ маълум гардид, ки маҳсулоти дар шароити оптималӣ бо истифода аз гидроксиди натрий ҳосилшуда аз 67,8% Na₂SiF₆ ва 31,5% NaF иборат аст. Дар ҳолати истифодаи хлориди натрий, омехтаи ҳосилшуда дорои 95,8% Na₂SiF₆ ва 3,5% NaF мебошад. Барои тасдиқ намудани дурустии натиҷаҳои таҳлили химиявӣ ва параметрҳои оптималии ёфтшуда, инчунин муайян намудани таркиби минералогии намакҳои ҳосилшуда таҳқиқи рентгенофазаӣ бо истифода аз дастгоҳи замонавшудаи Дрон-2 гузаронида шуд. Маҳсулоти ҳосилшударо метавонанд барои ҳосил намудани хӯлаи алюминию силитсий (силумин) ва ғудохтаи электролит, инчунин барои фторонии оби нӯшоқӣ ва истеҳсоли сементҳои ба кислота тобовар истифода баранд. Дар асоси таҳқиқоти лабораторӣ схемаи принципиалию технологияи коркарди омехтаи КГСФ ва кислотаи фторид таҳия карда шуд.

Калидвожаҳо: кислотаи гидрогенсилитсийфторид, кислотаи фторид, гидроксиди натрий, хлориди натрий, намакҳои фтордор, силитсийфториди натрий, фториди натрий, безаргардонӣ

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИИ ПОЛУЧЕНИЯ СМЕСИ КРЕМНЕФТОРИДА И ФТОРИДА НАТРИЯ ИЗ ПОБОЧНОГО ПРОДУКТА ПРОИЗВОДСТВА ПЛАВИКОВОЙ КИСЛОТЫ

В статье приведены результаты исследований технологии переработки и утилизации побочного продукта производства плавиковой кислоты – смеси кремнефтористоводородной и плавиковой кислот с использованием гидроксида натрия и хлорида натрия (местного минерального сырья) с получением фторсодержащих солей – смеси кремнефторида и фторида натрия. В результате лабораторных исследований определены оптимальные параметры процесса переработки смеси кислот с использованием гидроксида и хлорида натрия с получением смеси КФН и фторида натрия: температура – 20-25 °С, продолжительность – 10-20 мин, концентрация гидроксида и хлорида натрия – 20-25%; при этом достигается максимальная степень извлечения КФН и фторида натрия. Полученный продукт при использовании гидроксида натрия в указанных оптимальных условиях подвергся химическому анализу и выявлено, что он состоит из 67,8% Na_2SiF_6 и 31,5% из NaF . В случае применения хлорида натрия образовавшая смесь содержит 95,8% Na_2SiF_6 и 3,5% NaF . Для подтверждения достоверности результатов химического анализа и найденных оптимальных параметров, а также определения минералогического состава полученных фтористых солей был проведён рентгенофазовый анализ с применением модернизированной установки Дрон-2. Полученный продукт можно использовать в электролизном производстве для получения алюмокремниевых сплавов (силумин) и расплава электролита, а также для фторирования питьевой воды и в производстве кислотостойких цементов. На основе проведенных лабораторных исследований, разработана принципиальная технологическая схема переработки смеси КФВК и плавиковой кислоты с применением гидроксида и хлорида натрия.

Ключевые слова: кремнефтористоводородная кислота, плавиковая кислота, гидроксид натрия, хлорид натрия, фтористые соли, кремнефторид натрия, фторид натрия, утилизация

STUDY OF THE TECHNOLOGY FOR OBTAINING A MIXTURE OF SILICOFLUORIDE AND SODIUM FLUORIDE FROM A BY-PRODUCT OF HYDROFLUORIC ACID PRODUCTION

The article presents the results of research on the technology of processing and utilization of by-product of hydrofluoric acid production – a mixture of fluorosilicic and hydrofluoric acids using sodium hydroxide and sodium chloride (local mineral raw materials) to obtain fluoride salts – a mixture of silicofluoride and sodium fluoride. As a result of laboratory studies, the optimal parameters of the process of acid mixture processing using sodium hydroxide and sodium chloride to obtain a mixture of SSF and sodium fluoride were determined: temperature – 20-25 °C, duration – 10-20 min, concentration of sodium hydroxide and sodium chloride – 20-25%; in this case the maximum degree of extraction of SSF and sodium fluoride is achieved. The product obtained when sodium hydroxide was used under these optimum conditions was chemically analyzed and found to consist of 67.8% Na_2SiF_6 and 31.5% NaF . In the case of sodium chloride, the resulting mixture contains 95.8% of Na_2SiF_6 and 3.5% of NaF . To confirm the reliability of the results of chemical analysis and the found optimal parameters, as well as to determine the mineralogical composition of the obtained fluoride salts, X-ray phase analysis was carried out using an upgraded Dron-2 unit. The obtained product can be used in electrolysis production for obtaining aluminosilicon alloy (silumin) and electrolyte melt, as well as for fluoridation of drinking water and in the production of acid-resistant cements. On the basis of the conducted laboratory studies, the basic technological scheme of processing of the mixture of FSA and hydrofluoric acid with the use of sodium hydroxide and sodium chloride was developed.

Keywords: fluorosilicic acid, hydrofluoric acid, sodium hydroxide, sodium chloride, fluoride salts, sodium silicofluoride, sodium fluoride, utilization.

Маълумот дар бораи муаллифони: – Шокаримов Сирочиддин Мирзоевич – Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, докторанти Ph.D -и кафедраи химияи татбиқӣ. **Суроға:** 734025, ш. Душанбе, Ҷумҳурии Тоҷикистон, хиёбони Рӯдакӣ, 17. **Телефон:** (+992) 901-10-16-63. **E-mail:** sirojshokarimov@mail.ru.

Наимов Носир Абдурахмонович – Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, номзади илмҳои техника, докторанти кафедраи химияи татбиқӣ. **Суроға:** 734025, ш. Душанбе, Ҷумҳурии Тоҷикистон, хиёбони Рӯдакӣ, 17. **Телефон:** (+992) 901-11-65-12. **E-mail:** nosser2016@outlook.com.

Рузиев Ҷура Раҳимназарович – Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, доктори илмҳои техника, профессори кафедраи химияи татбиқӣ. **Суроға:** 734025, ш. Душанбе, Ҷумҳурии Тоҷикистон, хиёбони Рӯдакӣ, 17. **Телефон:** (+992) 917-36-15-13. **E-mail:** gyra71@mail.ru.

Рафиев Рустам Сафаралиевич – Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, номзади илмҳои химия, дотсент, мудири кафедраи химияи татбиқӣ. **Суроға:** 734025, ш. Душанбе, Ҷумҳурии Тоҷикистон, хиёбони Рӯдакӣ, 17. **Телефон:** (+992) 939-06-69-59. **E-mail:** rustam.rafiev@mail.ru.

Аслонов Азим Абдулхусайнович – Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, докторанти Ph.D-и кафедраи химияи татбиқӣ. **Суроға:** 734025, ш. Душанбе, Ҷумҳурии Тоҷикистон, хиёбони Рӯдакӣ, 17. **Телефон:** (+992) 935-32-97-97. **E-mail:** aslonov04061997@mail.ru.

Сафиев Хайдар – МД «Пажухишгоҳи илмию таҳқиқоти металлургия»-и ҶСК «Ширкати Алуминийи Тоҷик», д.и.х., профессор, академики АМИТ.

Сведения об авторах: – **Шокаримов Сироджиддин Мирзоевич** – Таджикский национальный университет, докторант Ph.D, кафедра прикладной химии. **Адрес:** 734025, г. Душанбе, Республика Таджикистан, проспект Рудаки, 17. **Телефон:** (+992) 901-10-16-63. **E-mail:** sirojshokarimov@mail.ru.

Наимов Носир Абдурахмонович – Таджикский национальный университет, кандидат технических наук, докторант кафедры прикладной химии. **Адрес:** 734025, г. Душанбе, Республика Таджикистан, проспект Рудаки, 17. **Телефон:** (+992) 901-11-65-12. **E-mail:** nosser2016@outlook.com.

Рузиев Джура Рахимназарович – Таджикский национальный университет, доктор технических наук, профессор кафедры прикладной химии. **Адрес:** 734025, г. Душанбе, Республика Таджикистан, проспект Рудаки, 17. **Телефон:** (+992) 917-36-15-13. **E-mail:** gyra71@mail.ru.

Рафиев Рустам Сафаралиевич – Таджикский национальный университет, кандидат химических наук, заведующий кафедрой прикладной химии. **Адрес:** 734025, г. Душанбе, Республика Таджикистан, проспект Рудаки, 17. **Телефон:** (+992) 939-06-69-59. **E-mail:** rustam.rafiiev@mail.ru.

Аслонов Азим Абдулхусайнович – Таджикский национальный университет, докторант Ph.D кафедры прикладной химии. **Адрес:** 734025, г. Душанбе, Республика Таджикистан, проспект Рудаки, 17. **Телефон:** (+992) 935-32-97-97. **E-mail:** aslonov04061997@mail.ru

Сафиев Хайдар – ГУ «Научно-исследовательский институт металлургии» ОАО «Таджикская Аллюминиевая Компания», д.х.н., профессор, академик НАН Таджикистана.

Information about the authors: – **Shokarimov Sirojiddin Mirzoevich** – Tajik National University, Ph.D, Department of Applied Chemistry. **Address:** 734025, Dushanbe, Republic of Tajikistan, Rudaki Avenue, 17. **Phone:** (+992) 901-10-16-63. **E-mail:** sirojshokarimov@mail.ru.

Naimov Nosir Abdurahmonovich – Tajik National University, candidate of technical sciences, doctoral student of the Department of Applied Chemistry. **Address:** 734025, Dushanbe, Republic of Tajikistan, Rudaki Avenue, 17. **Phone:** (+992) 901-11-65-12. **E-mail:** nosser2016@outlook.com.

Ruziev Jura Rahimnazarovich – Tajik National University, Doctor of Technical Sciences, Professor of Applied Chemistry Department. **Address:** 734025, Dushanbe, Republic of Tajikistan, Rudaki Avenue, 17. **Phone:** (+992) 917-36-15-13. **E-mail:** gyra71@mail.ru.

Rafiev Rustam Safaralievich – Tajik National University, Candidate of Chemical Sciences, Head of the Department of Applied Chemistry. **Address:** 734025, Dushanbe, Republic of Tajikistan, Rudaki Avenue, 17. **Phone:** (+992) 939-06-69-59. **E-mail:** rustam.rafiiev@mail.ru.

Aslonov Azim Abdulhusaynovich – Tajik National University, Ph.D student of inorganic substances. **Address:** 734025, Republic of Tajikistan, Dushanbe, Rudaki Avenue, 17. **Telephone:** (+992) 935-32-97-97. **E-mail:** aslonov04061997@mail.ru.

Safiev Haidar – State Institution «Research Institute of Metallurgy» JSC «Tajik Aluminum Company», Doctor of Chemical Sciences, Professor, Academician of the National Academy of Sciences of Tajikistan.

Статья поступила в редакцию 16.11.2023
Одобрена после рецензирования 19.03.2024
Принята к публикации 11.04.2024

УДК 541.4:(4546.74.2+548.736)

КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ СЕРЕБРА(I) С 2-ЭТИЛИМИДАЗОЛОМ

¹Содатдинова А.С., ²Акимбекова Х.А., ³Усачева Т.Р., ¹Сафармамадзода С.М.

¹Таджикский национальный университет

²Хорогский государственный университет им. Назаршоева

³Ивановский государственный химико-технологический университет

Введение. Пятичленный цикл имидазола является составной частью гистидина, структурным фрагментом гистамина, пуриновых оснований, ряда лекарственных средств [1,2]. На основе производных имидазола готовят препараты, применимые для лечения заболеваний желудочно-кишечного тракта и мочевого пузыря, проходимости периферических сосудов, миокардиальной ишемии, сердечной недостаточности, глаукомы, болезни щитовидной железы [3,4,2]. 2 - метилимидазол широко применяется в производстве ионных жидкостей [5,6]. Производные бензимидазола известны как ингибиторы селективной коррозии латуни в водных растворах [7].

Кислотно-основные характеристики органических соединений являются очень важными физико-химическими параметрами и широко применяются при расчётах констант равновесия реакций комплексообразования [8]. В работе [9] приведены данные по константам ионизации (pK_a) некоторых производных имидазола в водных растворах: имидазол 7,05; 2-фенилимидазол 6,48; 2-аминобензимидазол 6,11; бензимидазол 5,53; 2-фенилбензимидазол 5,23. Авторы [10,11] показали, что введение в молекулу имидазола меркаптогруппы приводит к резкому ослаблению его основных свойств (pK_a для 2-меркаптоимидазола равно 2,97, а 1-метил-2-меркаптоимидазола 2,11).

Имидазол и его производные обладают выраженными комплексообразующими свойствами и образуют координационные соединения с мягкими, промежуточными и реже – с жёсткими кислотами [12-14]. В [15] на основе синтезированных малатов кобальта(II), меди(II) и цинка $M\text{Malat} \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ при pH 6,5-8,7 получены имидазолмалаты состава $M\text{Im}_x\text{Malat} \cdot n\text{H}_2\text{O}$ ($x = 1, 3; n = 0-3$). Проведен химический анализ, ИК - спектров солей в сравнении со спектрами лигандов, а также анализ процесса термического разложения солей, что подтверждает образование смешанолигандных солей. Фото- и спектрофотометрически в водном растворе при pH 6,5–7,3 для Co^{2+} , Cu^{2+} установлены составы монолигандных комплексов $[M\text{Im}_2]^{2+}$, $[M\text{Malat}]$, определена устойчивость билигандных имидазолмалатных комплексов $[M\text{ImMalat}]$, $[M\text{Im}_2\text{Malat}]$, получены электронные спектры поглощения растворов, содержащие комплексообразователь и лиганды. В [16,17] приведены данные о комплексообразовании серебра (I) с производными имидазола в воде и водно-органических растворителях. В работе [18] потенциометрическим методом изучено комплексообразование $\text{H}[\text{AuCl}_4]$ с 2-метилимидазолом при 288-318К. Показано, что при избытке 2-метилимидазола в растворе происходит замещение трёх хлоридных ионов из состава $\text{H}[\text{AuCl}_4]$. Рассчитаны значения общих констант устойчивости при разных температурах. Установлено, что с увеличением температуры значения общих констант устойчивости увеличиваются.

В работе [19] исследован процесс комплексообразования серебра(I) с гетероциклическими аминами. В частности, показано, что серебро(I) с имидазолом реагирует ступенчато. Определена устойчивость насыщенной комплексной формы AgL_2^+ , которая составила $\lg\beta_2=6,93$. Авторами [11, 20, 21] исследован процесс комплексообразования серебра(I) с 2-меркаптоимидазолом в воде, водно-спиртовых и водно-ДМСО растворителях. Доказана ступенчатость процесса комплексообразования и определены константы устойчивости последовательно образующихся комплексных форм: $\lg\beta_1=6,84\pm 0,03$; $\lg\beta_2=10,56\pm 0,03$; $\lg\beta_3=12,27\pm 0,04$. Показано, что введение меркаптогруппы в молекулу имидазола приводит к возрастанию устойчивости его координационных соединений с серебром (I).

Цель настоящей работы состояла в исследовании протолитических равновесий 2-этилимидазола 2-эм, комплексообразования $\text{Ag}(\text{I})$ с 2-эм, этилимидазолом и установление

влияния этильной группы на кислотно-основные и комплексообразующие характеристики имидазола.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Для исследования комплексообразования серебра (I) с 2-этилимидазолом использовали гальванический элемент с переносом, где в качестве индикаторного электрода использовали пластинку из чистого серебра, электродом сравнения служил хлорсеребряный электрод. Процесс комплексообразования исследовали в водном растворе с ионной силой 0,1 моль/л. Начальная концентрация AgNO_3 составила $1 \cdot 10^{-4}$ моль/л, а начальная концентрация 2-этилимидазола $1 \cdot 10^{-2}$ моль/л. Потенциал гальванической системы измеряли с помощью рН-метра марки PHS-25. Равновесное значение потенциала на индикаторном электроде устанавливалось в течение 5-10 мин. Температуру в ячейке поддерживали постоянной при помощи водяного термостата $298,1 \pm 0,1 \text{ К}$. Равновесные концентрации серебра(I) и 2-этилимидазола образующихся комплексных форм и константы устойчивости определяли по программе KEV [22]. Кислотно-основное титрование 2-этилимидазола проводили по методике, аналогичной описанной в работе [21].

РЕЗУЛЬТАТЫ

Известно, что атомы азота в составе гетероциклических соединений оказывают большое влияние на их кислотно-основные и комплексообразующие свойства. Способность присоединения протона зависит также от строения и природы функциональных групп, входящих в состав гетероциклических соединений. Анализ данных литературы показал, что введение заместителей в молекулу имидазола оказывает значительное влияние на кислотно-основные свойства имидазолов, что, —как следствие, сказывается на комплексообразующих свойствах этих соединений [18, 21, 23]. В связи с этим, в данной работе были изучены кислотно-основные равновесия 2-этилимидазола (рис.1, табл.1).

На рисунке 1 приведена зависимость рН от V_{HCl} для 2-этилимидазола, построенная по данным потенциометрического титрования.

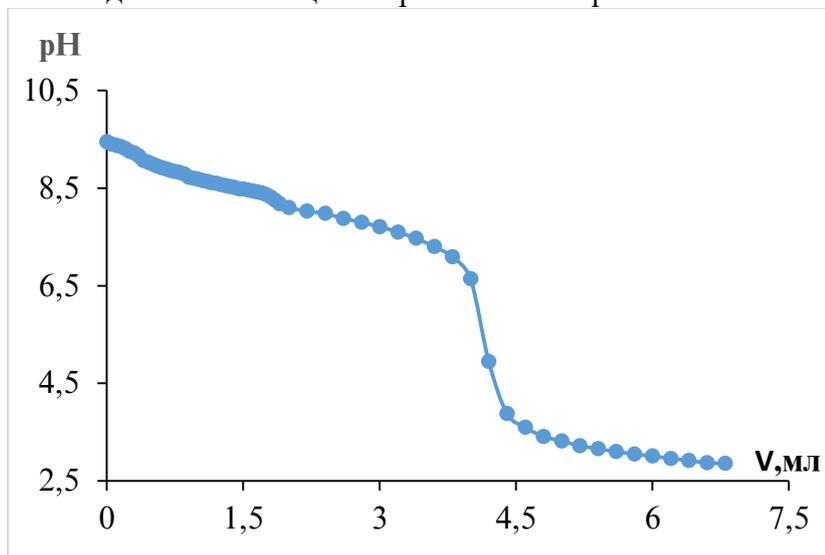


Рис. 1. Зависимость рН от V_{HCl} для водного раствора 2-этилимидазола при 298,1К.

Fig. 1. pH of V_{HCl} for aqueous solution of 2-ethylimidazole at 298.1K.

Как видно из рисунка 1, на кривых титрования ЭМ имеется один скачок, характерный для слабых оснований. Одним из надёжных методов расчёта констант протонирования по данным потенциометрического титрования является онлайн - компьютерная программа KEV. Для расчёта констант протонирования ЭМ в программу KEV вводились данные потенциометрического титрования (Е, мВ), концентрация титранта и ЭМ в каждой точке титрования, а также реакции протонирования ЭМ в виде матрицы:



В таблице 1 приведен пример экспериментальных результатов рН-метрического титрования раствора ЭМ раствором HCl.

Таблица 1. Результаты рН-метрического титрования 2-этилимидазола при 298,1К, $C_{HCl}=0,1N$, $C_{ЭМ}=0,01$ моль/л

Table 1. Results of pH-metric titration of 2-ethylimidazole at 298.1K, $C_{HCl}=0.1N$, $EM=0.01mol/L$

Е,мВ	рН	[ЭМ],моль/л	[HЭМ ⁺],моль/л
62	9,48	0,01	0
64	9,45	0,009895	0,0001050
66	9,4	0,009824	0,0001660
68	9,38	0,009736	0,0002440
70	9,35	0,009639	0,0003320
71	9,31	0,009537	0,0004240
74	9,25	0,009432	0,0005180
76	9,22	0,009327	0,0006130
79	9,16	0,009221	0,0007100
84	9,07	0,009114	0,0008060
86	9,03	0,009008	0,0009030
88	8,99	0,008901	0,0010000
91	8,95	0,008794	0,0010970
93	8,92	0,008688	0,0011940
94	8,89	0,008581	0,0012910
96	8,86	0,008474	0,0013870
98	8,84	0,008368	0,0014840
99	8,82	0,008262	0,0015810
101	8,79	0,008156	0,0016770
102	8,72	0,008050	0,0017730
104	8,7	0,007944	0,0018690
106	8,68	0,007839	0,0019650
107	8,66	0,007733	0,0020610
~	~	~	~
446	2,87	0,00000003690	0,0088340
448	2,86	0,00000003280	0,0088030

Необходимо отметить, что обработка данных потенциометрического титрования программой KEV даёт удовлетворительные результаты, когда в системе образуется протонированная форма имидазола по реакции (1). Константа присоединения протона ЭМ оказалась равной $7,93 \pm 0,06$ лог.ед.

На рисунке 2 приведены диаграммы распределения различных форм ЭМ в зависимости от рН раствора. Установлено, что максимальная доля накопления молекулярной формы приходится на область рН = $9,0 \div 10,0$.

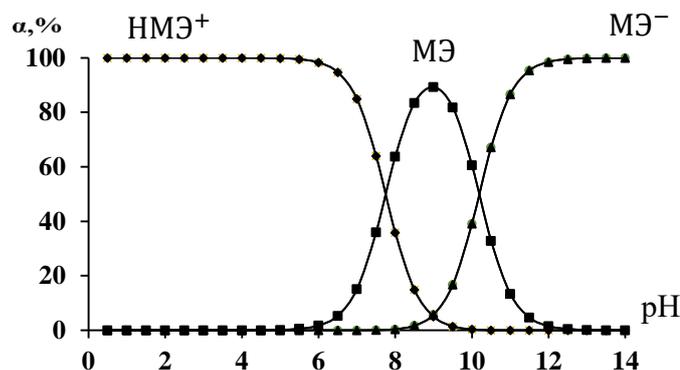


Рисунок 2. Долевое распределение протонированной, молекулярной и депротонированной форм ЭМ при 298,1К

Drawing. 2. Fractional distribution of protonated, molecular, and deprotonated forms of EM at 298.1K

Проведённые нами исследования показали, что Ag^+ с 2-этилимидазолом вступает в ступенчатое комплексообразование (рис.3).

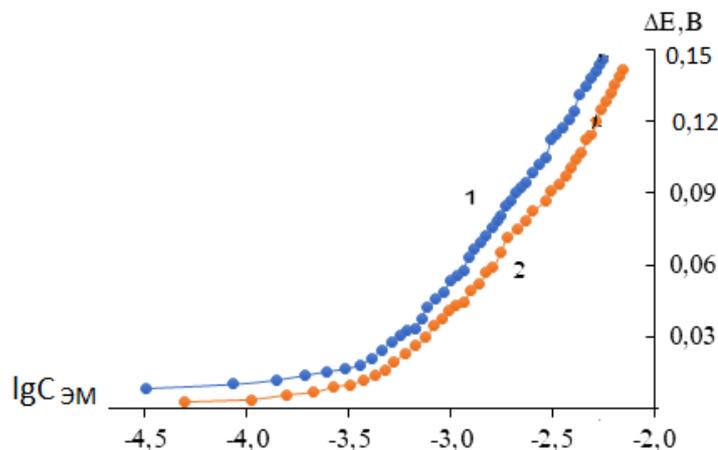


Рис.3. Зависимость ΔЕ от lgCЭМ для 2-этилимидазольных комплексов серебра(I): 1-298,15;1; 2-308,15К

Fig.3. EM dependence ΔE on lgC for silver(I) 2-ethylimidazole complexes: 1-298.15; 1;2-308,15K.

Обработка результатов потенциометрического титрования по программе KEV [22] даёт удовлетворительные результаты для образования моно - и двухзамещённого комплексов по реакциям:



В таблице 2 в качестве иллюстрации приведены результаты потенциометрического титрования раствора $AgNO_3$ раствором ЭМ при 298,1К и рассчитанные по программе KEV равновесные концентрации исходных веществ и продуктов реакции в каждой точке титрования.

Таблица 2. Результаты потенциометрического титрования раствора $AgNO_3$ раствором ЭМ при $T=298.1K$, $I = 0.1$ моль/л $NaClO_4$

Table 2. Results of potentiometric titration of $AgNO_3$ solution with EM solution at $T = 298.1 K$, $I = 0.1 mol/l NaClO_4$

Е, мВ	$C_{ЭМ} \cdot 10^3$, моль/л	$C_{Ag^+} \cdot 10^5$, моль/л	$[C_{Ag^+}] \cdot 10^5$, моль/л	$[C_{ЭМ}] \cdot 10^3$, моль/л	$[Ag_{ЭМ}] \cdot 10^5$, моль/л	$[Ag_{ЭМ_2}] \cdot 10^5$, моль/л
-------	------------------------------	--------------------------------	----------------------------------	--------------------------------	---------------------------------	-----------------------------------

565,3	10,00					
556,6	0,0598	9,960	9,321	0,520	0,5018	0,1371
554,8	0,119	9,921	8,557	0,101	0,8915	0,4714
553,0	0,178	9,881	7,773	0,148	1,187	0,9198
551,0	0,236	9,843	7,009	0,194	1,404	1,427
549,5	0,294	9,804	6,286	0,239	1,557	1,957
548,4	0,352	9,766	5,624	0,285	1,660	2,486
546,8	0,409	9,728	5,016	0,331	1,720	2,994
543,9	0,465	9,690	4,469	0,378	1,749	3,472
540,4	0,521	9,653	3,983	0,425	1,753	3,915
537,1	0,577	9,615	3,557	0,473	1,740	4,323
534,5	0,632	9,579	3,177	0,521	1,713	4,689
532,2	0,687	9,542	2,845	0,570	1,677	5,018
531,7	0,741	9,506	2,557	0,619	1,636	5,317
527,1	0,795	9,470	2,302	0,668	1,590	5,578
522,5	0,849	9,434	2,078	0,717	1,542	5,810
519,4	0,929	9,381	1,796	0,792	1,471	6,114
516,3	1,007	9,328	1,563	0,866	1,400	6,367
511,3	1,085	9,276	1,369	0,940	1,332	6,578
509,1	1,162	9,225	1,208	10,15	1,268	6,754
507,4	1,239	9,174	1,071	10,89	1,206	6,893
501,6	1,314	9,124	0,9562	11,62	1,150	7,014
498,1	1,388	9,074	0,8586	12,35	1,097	7,114
495,8	1,486	9,009	0,7503	13,32	1,033	7,226
492,8	1,583	8,945	0,6601	14,27	0,9747	7,305
489,3	1,679	8,881	0,5860	15,22	0,9225	7,372
486,2	1,772	8,818	0,5236	16,15	0,8750	7,421
484,3	1,865	8,757	0,4708	17,08	0,8317	7,457
480,4	1,957	8,696	0,4257	17,99	0,7921	7,482
478,3	2,069	8,621	0,3776	19,12	0,7468	7,496
475	2,179	8,547	0,3379	20,22	0,7068	7,505
472,3	2,288	8,475	0,3038	21,32	0,6698	7,496
470,4	2,416	8,389	0,2699	22,60	0,6311	7,489
466,3	2,624	8,251	0,2250	24,69	0,5747	7,450
462,8	2,825	8,117	0,1909	26,71	0,5277	7,401
460,5	3,019	7,987	0,1643	28,68	0,4874	7,338
452,8	3,208	7,862	0,1430	30,58	0,4525	7,264
450,5	3,339	7,740	0,1260	32,42	0,4225	7,192
447,6	3,654	7,564	0,01058	35,08	0,3838	7,070
444,5	3,905	7,396	0,09047	37,63	0,3522	6,957
440,6	4,146	7,236	0,07842	40,06	0,3250	6,837
433,5	4,377	7,082	0,06873	42,40	0,3014	6,710
430,5	4,669	6,887	0,05867	45,36	0,2753	6,556
426,6	4,946	6,702	0,05077	48,16	0,2529	6,396
424,3	5,209	6,527	0,04457	50,82	0,2343	6,251
421,2	5,458	6,361	0,03949	53,34	0,2179	6,103
419,0	5,695	6,203	0,03533	55,74	0,2037	5,961

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

При сопоставлении констант протонирования имидазола и 2-этилимидазола установлено, что введение этильного радикала в молекулу имидазола приводит к возрастанию его основных свойств, что связано, скорее всего, с возрастанием электронной плотности на пиридиновом атоме азота молекулы имидазола. С использованием данных литературы и собственных результатов нами установлен ряд в изменении кислотно-основных свойств (рКа) имидазолов: этилимидазол (7,93) > имидазол (7,05) > 2-фенилимидазол (6,48); > 2-аминобензимидазол (6,11); бензимидазол (5,53); > 2-фенилбензимидазол (5,23); > 2-меркаптоимидазол (2,97); > 1-метил-2-меркаптоимидазол (2,11).

Ранее в работе [20] методом потенциометрического титрования была определена константа устойчивости насыщенной комплексной формы серебра(I) с имидазолом (AgL_2^+), которая составила 6,96 лог.ед.. Устойчивость монокомплекса серебра(I) с имидазолом авторам работы [20] определить не удалось. Кроме этого, комплексообразование изучено при температуре 298К и нет сведений о влиянии энтальпийного и энтропийного факторов на самопроизвольное протекание реакции комплексообразования.

В табл. 3 приведены значения общих констант устойчивости комплексных соединений серебра (I) с 2-этилимидазолом, рассчитанные по программе KEV в интервале температур 273,1-318,1К.

Таблица 3. Значения общих констант устойчивости комплексов серебра (I) с 2-этилимидазолом при 273,1-318,1К. $J I = 0,1$ моль/л
Table 3. Values of the Total Stability Constants of Silver (I) Complexes with 2-ethylimidazole at 273.1-318.1K. $J I = 0.1$ mol/l

Т, К	lg β_1	lg β_2
273	3,22±0,01	7,56±0,03
288	3,10±0,08	7,28±0,02
298	3,01±0,05	6,73±0,03
308	2,55±0,01	6,21±0,01
318	2,49±0,01	5,78±0,01

Данные таблицы 3 показывают необычные соотношения ступенчатых констант устойчивости ($K_{i+1} > K_i$) комплексов серебра с 2-этилимидазолом. Как правило, с возрастанием координированных молекул лиганда во внутренней координационной сфере устойчивость последовательно образующихся комплексов уменьшается. Аналогичные данные получены нами при исследовании комплексообразования золота(I) с 2-метилимидазолом [18].

Из данных таблицы видно, что повышение температуры не влияет на стехиометрический состав комплексных частиц, образующихся в системе Ag-ЭМ-Н₂O. С увеличением температуры константы устойчивости всех комплексных форм уменьшаются. Этот экспериментальный факт связан с экзотермичностью процесса комплексообразования.

Сравнение константы устойчивости бис замещённого комплекса серебра (I) содержащего в качестве лиганда имидазол [20], с 2-метилимидазольным комплексом серебра (I) показало, что введение этильного радикала в молекулу имидазола приводит к уменьшению устойчивости комплекса. Можно предположить, что это связано с возрастанием основности молекулы 2-этилимидазола и конкуренцией между ионами серебра (I) и протоном за пиридиновый атом азота молекулы имидазола.

Константы устойчивости были использованы для расчёта концентрации образующихся комплексных частиц и построения кривых распределения всех комплексных форм, образующихся в системе $Ag^+ - ЭМ - H_2O$. На рисунке 4 в качестве примера приведены диаграммы распределения 2-этилимидазольных комплексов серебра(I) в зависимости от концентрации ЭИ при 298,1 К.

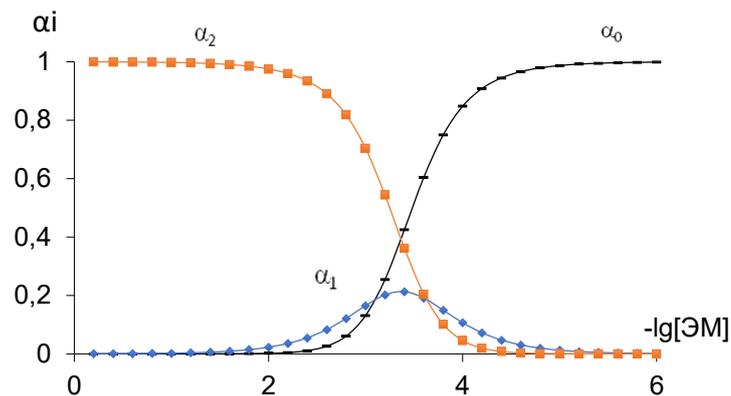


Рис. 4. Кривые распределения 2-этилимидазольных комплексов серебра(I) при 298,1К: α_0 -AgNO₃; α_1 -[Ag(ЭМ)]⁺; α_2 -[Ag(ЭМ)₂]⁺.

Fig. 4. Distribution curves of 2-ethylimidazole silver(I) complexes at 298.1K: α_0 -AgNO₃; α_1 -[Ag(EM)]⁺; α_2 -[Ag(EM)₂]⁺.

Как видно из рисунка 4, монозамещённый комплекс доминирует в узком интервале концентрации лиганда с небольшим выходом. В системе Ag-ЭМ-Н₂O в основном доминирует бис замещённый комплекс, выход которого при концентрации ЭМ выше $1 \cdot 10^{-2}$ моль/л составляет 100%.

Расчет величин ΔH и ΔS реакции комплексообразования проводили методом температурного коэффициента. Методика определения термодинамических функций этим методом подробно описана в работе [24]. В таблице 4 представлены значения термодинамических функций реакций образования комплексов серебра (I) с ЭМ.

Таблица 4. Значения термодинамических функций процесса образования комплексов серебра (I) с 2-этилимидазолом

Table 4. Values of thermodynamic functions of the process of formation of silver(I) complexes with 2-ethylimidazole

Уравнение реакции	ΔG кДж/моль	ΔH кДж/моль	ΔS Дж/(моль·К)
$Ag^+ + ЭМ = [Ag(ЭМ)]^+$	-16,22	-29,38	-44,18
$Ag^+ + 2ЭМ = [Ag(ЭМ)_2]^+$	-37,89	-68,22	-101,9

Из данных таблицы 4 видно, что реакции комплексообразования являются экзотермическими. В ходе реакций комплексообразования на всех стадиях число свободных частиц в системе уменьшается, о чем свидетельствуют отрицательные значения ΔS . Необходимо отметить, что самопроизвольному протеканию реакций комплексообразования в системе Ag-ЭМ-Н₂O способствует отрицательное изменение энтальпии и не способствует энтропийный вклад в изменение энергии Гиббса.

ВЫВОДЫ

В результате проведённых исследований установлено, что введение этильного радикала в молекулу имидазола приводит к увеличению её основных свойств, что связано с возрастанием электронной плотности на пиридиновом атоме азота гетероцикла. Серебро(I) с 2-этилимидазолом реагирует ступенчато с образованием двух комплексных частиц, устойчивость которых с возрастанием температуры уменьшается. Показано, что образование 2-этилимидазольных комплексов серебра энтальпийно стабилизировано.

Работа выполнена в НИИ Таджикского национального университета в рамках государственного задания РТ, проект № ГР0119ТJ00981. Обсуждение результатов проведено совместно при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект FZZW-2023-0008)

**Рецензент: Давлатшоева Дж.А.,
кандидат химических наук**

ЛИТЕРАТУРА

1. Машковский М.Д. Лекарственные средства / М.Д. Машковский // – М.: - 2002. –Т. 2. – № 14. – С. 608.
2. Машковский М.Д. Лекарственные средства / М.Д. Машковский // М.: - 2005. –Т. 2. –№ 15. – С. 1200.
3. Тран Тхан Тун. Синтез и физико-химические исследования комплексных соединений бромиды меди (II) с азотсодержащими гетероциклическими основаниями / Тран Тхан Тун Синтез // Автореф... дисс. к.х.н. Москва - 2007. – С. 17.
4. Зайцева С.В., Макрогетероциклы / С.В. Зайцева, С.А. Зданович, О.И. Койфман // – 2012. –Т. 5. –№ 1. – С. 81.
5. Olivier-Bourbigou H., Ionic liquids and catalysis: Recent progress from knowledge to applications / H. Olivier-Bourbigou, L.Magna, D. Morvan // Journal homepage: www.elsevier.com/locate/apcata Applied Catalysis A: General. –2010. General 373. – Pp. 1-56.
6. Jarosik A., Conductivity of ionic liquids in mixtures / A. Jarosik, S.R. Krajewski, A. Lewandowski, P. Radzinski // Journ. of Molec. Liquids. – 2006. – Pp.43-50.
7. Assouli B., Effect of 2-Mercaptobenzimidazole and Its Polymeric Film on the Corrosion Inhibition of Brass (60/40) in ammonia solution / B. Assouli, A. Srhiri. // Corrosion Science. – 2004. – V. 60. – P.399.
8. Хартли Ф., Равновесия в растворах / Ф. Хартли, К. Бергес, Р. Оллок // М.: – 1983. – С. 365.
9. Альберт А., Константы ионизации кислот и оснований / А. Альберт, Е. Сергент // Москва: Издательство ХИМИЯ. - 1964. Ленинград – С. 180.
10. Сурайё С.Б., Устойчивость комплексов серебра с 2-меркаптоимидазолом. / С.Б. Сурайё, А.С. Содатдинова, С.М. Сафармамадзода // Журн. Док. НАН РТ. Душанбе, – 2022. –Т.46. –№ 11-12. – С. 687-693.
11. Содатдинова А.С., Кислотно-основные свойства 1-метил-2-меркаптоимидазола. / А.С. Содатдинова, С.М. Сафармамадзода // Вестник ТНУ. – 2021. –№1. – С. 145-157.
12. Сафармамадзода С. М., Влияние температуры на устойчивость 2-этилимидазольных комплексов Au (III) / С.М. Сафармамадзода, Д.С. Курбонбеков, Д.А. Курбонбеков // От химии к технологии шаг за шагом. – 2022, – Т. 3. – Вып. 3. – С. 58-64.
13. Мирзохонов Д.Ч., Комплексообразование кадмия(II) с 1-метил-2-меркаптоимидазолом в интервале 283-323К / Д.Ч. Мирзохонов, К.С. Мабаткадамзода, С.М. Сафармамадзода // Вестник Таджикского национального университета. –2016, – №1-3 (200). – С.138-143.
14. Аминджанов А.О., Комплексообразование меди(II) с 1-метил-2-меркаптоимидазолом в среде 7 моль/л HCl / А.О. Аминджанов, К.А. Манонов, Гамал Абделаазиз Хусайн Абделрахман // Журнал физической химии. –2016. –Т. 61. – №1. –С. 86-91.
15. Скорик Н.А., Соединения кобальта (II), цинка и меди (II) с яблочной кислотой и имидазолом / Н.А. Скорик, Е.И. Бухольцева, М.М. Филипова // Вестник Томского государственного университета. Химия. –2015. – №2. – С. 87-100.
16. Содатдинова А.С., Термодинамика комплексообразования Ag(I) с 1-метил-2-меркаптоимидазолом / А.С. Содатдинова // Вестник Таджикского национального университета. Серия естественных наук. –2020. – №4. – С. 301-310.
17. Содатдинова, А.С., комплексообразование серебра (I) с 1- метил-2-меркаптоимидазолом в растворителе вода-этанол / А.С. Содатдинова, Т.Р. Усачёва, С.М.Сафармамадзода // Изв. вузов. Химия и хим. технология. - 2022. - Т. 65. Вып. 8. С. 22–31. DOI: 10.6060/ivkkt.20226508.6645.
18. Бахроми Д., Комплексообразование золота(I) с 2-метилимидазолом / Д.Бахром, С.М.Сафармамадзода, Д.А. Мубораккадамов // Изв. вузов. Химия и хим. технология. - 2023. Т. - 66. Вып. 4. – С.27–34. DOI: 10.6060/ivkkt.20236603.6713.
19. Буду Г.В., Комплексообразование серебра с некоторыми гетероциклическими аминами в водно-этанольных растворах / Г.В. Буду, А.П. Тхорьяк // Журнал неорганической химии. – 1980. –Т. 25. –Вып.4. – С. 1006-1008.
20. Bobosaidzoda S., Thermodynamics of Ag(I) Complex Formations with 2-Mercaptoimidazole in Water-Dimethyl Sulfoxide Solvents / S. Bobosaidzoda, Kh. Akimbekova, E. Molchanov, T.R. Usacheva, S.M. Safarmamadzoda // Inorganics. –2023. –11 p. (199) <https://doi.org/10.3390/inorganics11050199>
21. Сурайё, С.Б., Влияние состава растворителя на кислотно-основные и комплексообразующие свойства 2-меркаптоимидазола / С.Б. Сурайё, А.С. Содатдинова, С.М. Сафармамадзода // Вестник Таджикского национального университета. – 2022. – №3. – С. 327-339.
22. Mehkov A.N., a free software for calculating the equilibrium composition and determining the equilibrium constant using UV-Vis and potentiometric data / A.N Mehkov, G.A. KEV Gamov // Talanta, –2019. – V. 198. - p. 200

23. Мирзохонов Д.Ч., Комплексообразование кадмия (II) с 2-метилимидазолом в водных и водно-спиртовых растворах / Д.Ч. Мирзохонов, К.С. Мабаткадамзода, С.М. Сафармамдзода // Изв. вузов. Химия и хим. технология. - 2023. - Т. 63. №10. - С. 36–45. DOI: 10.6060/ivkkt.20206310.6201
24. Мабаткадамзода К.С., Комплексообразование серебра(I) с тиопирином при 278-317К. / К.С. Мабаткадамзода, Ё.К. Кудратуллоев, А.С. Содатдинова // Журнал доклад академии наук РТ. – 2018. – Т.61. – №4. – С. 382-384.

REFERENCES

- Mashkovskiy, M.D. Medicinal Means / M.D. Mashkovsky // -M.: 2002. –Т. 2. – № 14. – 608 p.
- Mashkovskiy M.D. Medicinal Means / M.D. Mashkovsky // - M.:, 2005. –Т. 2. –№ 15. – 1200 p.
- Tran Than Tun Synthesis and Physicochemical Studies of Complex Copper(II) Bromide Compounds with Nitrogen-Containing Heterocyclic Bases: Autoref... Diss. Ph.D. –M., 2007. - 17 p.
- Zaitseva S.V., Macroheterocycles / S.V. Zaitseva, S.A. Zdanovich, O.I. Koifman // – 2012. –Т. 5. –№ 1. – 81 p.
- Olivier-Bourbigou H., Ionic liquids and catalysis: Recent progress from knowledge to applications / H. Olivier-Bourbigou, L.Magna, D. Morvan // Journal homepage: www.elsevier.com/locate/apcata Applied Catalysis A: General. –2010. General 373. – Pp. 1-56.
- Jarosik A., Conductivity of ionic liquids in mixtures / A. Jarosik, S.R. Krajewski, A. Lewandowski, P. Radzimski // Journ. of Molec. Liquids. – 2006. – Pp. 43-50.
- Assouli B., Effect of 2-Mercaptobenzimidazole and Its Polymeric Film on the Corrosion Inhibition of Brass (60/40) in ammonia solution / B. Assouli, A. Srhiri. // Corrosion Science. – 2004. – V. 60. – P.399.
- Hartley, F., Equilibrium in solutions / F. Hartley, K. Berges, R. Alcock // - M., 1983. – 365 p.
- Albert, A., Konstanty ionizatsii acidov i obaseniy [Ionization constants of acids and bases]/ A. Albert., E. Sergent // Izdatelstvo «KHIMIYA». – M., 1964. – 180 p.
- Surayo, S.B., Stability of silver complexes with 2-mercaptoimidazole. / S.B. Surayo, A.S. Sodatdinova, S.M. Safarmamadzoda // National Academy of Sciences of the Republic of Tatarstan. Dushanbe, 2022. –Т.46. –№ 11-12. –Pp. 687-693.
- Sodatdinova, A.S., Acid-basic properties of 1-methyl-2-mercaptoimidazole. / A.S. Sodatdinova, S.M. Safarmamadzoda // Vestnik TNU. – 2021. –№1. – С. 145-157.
- Safarmamadzoda, S.M. Influence of temperature on the stability of 2-ethylimidazole complexes Au (III) / S.M. Safarmamadzoda, D.S. Kurbonbekov, D.A. Kurbonbekov // From chemistry to technology step by step. – 2022. – Т. 3. –Vol. 3. –Pp.58-64.
- Mirzokhonov, D.Ch., Complexation of cadmium (II) with 1-methyl-2-mercaptoimidazole in the interval 283-323K / D.CH. Mirzokhonov, K.S. Mabatkadamzoda, S.M. Safarmamadzoda // Bulletin of the Tajik National University. –2016, – No 1-3 (200). –Pp.138-143.
- Aminjanov, A.O. Complexation of copper(II) with 1-methyl-2-mercaptoimidazole in a medium of 7 mol/l HCl / A.O. Amindzhanov, K.A. Manonov, Gamal Abdelaziz Husain Abdelrahman // Journal of Physical Chemistry. – 2016. –Т. 61. – №1. –Pp.86-91.
- Skorik, N.A., Compounds of cobalt (II), zinc and copper (II) with malic acid and imidazole / N.A. Skorik, E.I. Buholtseva, M.M. Flipova // Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo Universiteta. Chemistry. –2015. – №2. – Pp.87-100.
- Sodatdinova, A.S. Thermodynamics of Ag (I) complexation with 1-methyl-2-mercaptoimidazole / A.S. Sodatdinova // Vestnik Tadzhikskogo natsional'nogo universiteta. Natural Sciences Series. –2020. – №4. –Pp. 301-310.
- Sodatdinova, A.S., complexation of silver (I) with 1-methyl-2-mercaptoimidazole in the water-ethanol solvent / A.S. Sodatdinova, T.R. Usacheva, S.M. Safarmamadzoda // Izv. Higher Educational Institutions. Chemistry and Chemistry. Technology. 2022. – Т. 65. Vol. 8. –Pp.22-31. DOI: 10.6060/ivkkt.20226508.6645.
- Bakhromi, D. Complexoformation of gold (I) with 2-methylimidazole) / D. Bakhrom, S.M. Safarmadzoda, D.A. Muborakkadamov // Izv. Higher Educational Institutions. Chemistry and Chemistry. technology. 2023. T. 66. Vol. 4. –Pp. 27-34. DOI: 10.6060/ivkkt.20236603.6713.
- Budu G.V., Complexoformation of silver with some heterocyclic amines in water-ethanol solutions / G.V. Budu, A.P. Thoryak // Journal of Inorganic Chemistry. – 1980. –Т.25. –Issue 4. –Pp.1006-1008.
- Bobosaidzoda, S. Thermodynamics of Ag(I) Complex Formations with 2-Mercaptoimidazole in Water–Dimethyl Sulfoxide Solvents / S. Bobosaidzoda, Kh. Akimbekova, E. Molchanov, T.R. Usacheva, S.M. Safarmamadzoda. // Inorganics. –2023. –11 (199) <https://doi.org/10.3390/inorganics11050199>
- Surayo, S.B. Influence of solvent composition on acid-basic and complex-forming properties of 2-mercaptoimidazole/S.B. Surayo, A.S. Sodatdinova, S.M. Safarmamadzoda // Bulletin of the Tajik National University. Series of natural sciences, 2022. – №3. –Pp.327-339.
- Mehkov A.N., KEV: a free software for calculating the equilibrium composition and determining the equilibrium constant using UV-Vis and potentiometric data / A.N Mehkov, G.A. Gamov // Talanta, –2019. – V. 198. – 200 p.

23. Mirzokhonov D.Ch., Complexation of cadmium (II) with 2-methylimidazole in aqueous and hydroalcoholic solutions / D.Ch. Mirzokhonov, K.S. Mabatkadamzoda, S.M. Safarmamdzoda // Izv. Higher Educational Institutions. Chemistry and Chemistry. Technology. 2023. Т. 63. №10. –Рр.36-45. DOI: [10.6060/ivkkt.20206310.6201](https://doi.org/10.6060/ivkkt.20206310.6201)
24. Mabatkadamzoda K.S., Complexation of silver (I) with thiopirin at 278-317K. / K.S. Mabatkadamzoda, Y.K. Kudratulloev, A.S. Sodatinova // – 2018. – Т.61. – No4. –Рр.382-384.

КОМПЛЕКСХОСИЛШВИИ НУКРА(I) БО 2-ЭТИЛИМИДАЗОЛ

Бо усули титронидани рН-метрӣ ҳосияти кислотагӣ-асосии 2-этилимидазол (ЭМ) омӯхта шуд. Бо истифода аз натиҷаҳои адабиёт ва натиҷаҳои бадастовардашуда қатори ҳосияти кислотагӣ-асосии имидазолҳо оварда шуд: этилимидазол (7,93) > имидазол (7,05) > 2-фенилимидазол (6,48) > 2-аминобензиимидазол (6,11) > бензиимидазол (5,53) > 2-фенилбензиимидазол (5,23) > 2-меркаптоимидазол (2,97) > 1-метил-2-меркаптоимидазол (2,11). Бо усули титронии потенциометрӣ бо ёрии электроди нукрагӣ раванди комплексҳосилкунии нукра (I) бо 2-этилимидазол дар ҳудуди ҳароратҳои 273-318К мавриди омӯзиш қарор гирифт. Муқаррар карда шуд, ки баландшавии ҳарорат ба таркиби стехиометрии зарраҳои комплексие, ки дар системаи Ag-ЭМ-Н₂O ҳосил мешаванд, таъсир намерасонад. Натиҷаҳои ба даст овардашуда нишон медиҳанд, ки бо зиёдшавии ҳарорат собитҳои устуворӣ кам мешаванд. Аз диаграммаи тақсимшавии зарраҳои комплексӣ вобаста аз консентратсияи лиганд дар системаи Ag-ЭМ-Н₂O маълум мегардад, ки дар маҳлул зарраи комплексии дуҷум дар консентратсияи 1·10⁻² ЭМ ҳосил шуда, ҳиссаи он 100%-ро ташкил медиҳад. Функсияҳои термодинамикии пайвастиҳои комплексии нукра бо 2-этилимидазол ҳисоб карда шуд. Муайян гардид, ки дар худ ба худ гузариши реаксияи комплексҳосилшавӣ дар системаи Ag-ЭМ-Н₂O қимати маъфии энталпия мусоидат мекунад.

Калидвожаҳо: нукра(I), 2-этилимидазол, мувозинати протолитӣ, комплексҳосилшавӣ, собитҳои устуворӣ, функсияҳои термодинамикӣ, диаграммаи тақсимшавӣ

КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ СЕРЕБРА(I) С 2-ЭТИЛИМИДАЗОЛОМ

Методом рН-метрического титрования изучены кислотно-основные свойства 2-этилимидазола (ЭМ). С использованием данных литературы и собственных результатов установлен ряд в изменении кислотно-основных свойств (рКа) имидазолов: этилимидазол (7,93) > имидазол (7,05) > 2-фенилимидазол (6,48) > 2-аминобензиимидазол (6,11) > бензиимидазол (5,53) > 2-фенилбензиимидазол (5,23) > 2-меркаптоимидазол (2,97) > 1-метил-2-меркаптоимидазол (2,11). Методом потенциометрического титрования с использованием серебряного электрода исследован процесс комплексообразования серебра(I) с 2-этилимидазолом в интервале температур 273-318К. Установлено, что повышение температуры не влияет на стехиометрический состав комплексных частиц, образующихся в системе Ag-ЭМ-Н₂O. Полученные результаты показывают, что с увеличением температуры константы устойчивости уменьшаются. На основе диаграмм распределение комплексных частиц в зависимости от концентрации лиганда показано, что в системе Ag-ЭМ-Н₂O, в основном, доминирует бис-замещенный комплекс, выход которого при концентрации ЭМ выше 1·10⁻² моль/л составляет 100%. Рассчитаны термодинамические функции образования 2-этилимидазольных комплексов серебра. Установлено, что реакции комплексообразования являются экзотермическими. Самопроизвольному протеканию реакций комплексообразования в системе Ag-ЭМ-Н₂O способствует отрицательное изменение энthalпии.

Ключевые слова: Серебро (I), 2-этилимидазол, протолитические равновесия, комплексообразование, константы устойчивости, термодинамические функции, диаграмма распределения

COMPLEXATION OF SILVER (I) С 2-ETHYLIMIDAZOLE

The acid-base properties of 2-ethylimidazole were studied by pH-metric titration (EM). Using the literature data and our own results, a number of changes in the acid-base properties (pKa) of imidazoles have been established: ethylimidazole (7,93) > imidazole (7,05) > 2-phenylimidazole (6,48) > 2-aminobenzimidazole (6,11) > benzimidazole (5,53) > 2-phenylbenzimidazole (5,23) > 2-mercaptoimidazole (2,97) > 1-methyl-2-mercaptoimidazole (2,11). Method The process of complexation of silver(I) with 2-ethylimidazole in the temperature range of 273-318K was investigated using potentiometric titration using a silver electrode. It has been established that the increase in temperature does not affect the stoichiometric composition of complex particles formed in the Ag-EM-H₂O system. The results obtained show that as the temperature increases, the stability constants decrease. On the basis of diagrams, the distribution of complex particles depending on the ligand concentration is shown that in System Ag-EM-H₂O is mainly dominated by the bis-substituted complex, the yield of which at EM concentrations above 1·10⁻² mol/l is 100%. The thermodynamic functions of the formation of 2-ethylimidazole silver complexes have been calculated. It has been established that complexation reactions are exothermic. Spontaneous occurrence of complexation reactions in the system Ag-EM-H₂O contributes to a negative change in enthalpy.

Keywords: Silver(I), 2-ethylimidazole, protolytic equilibrium, complexation, stability constants, thermodynamic functions, distribution diagram .

Маълумот дар бораи муаллифон: Содатдинова Анҷуман Садридиновна - Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, ассистенти кафедраи химияи таҳлилӣ. Суроға: 734025, ш. Душанбе, Чумхурии Тоҷикистон, хиёбони Рӯдакӣ, 17. **Телефон:** (+992) 938-13-66-56. **E-mail:** anjuman87@mail.ru.

Акимбекова Ҳазон Азизмадовна - Донишгоҳи давлатии Хоруғ ба номи М.Назаршоев, ассистенти кафедраи химияи умумии факултети табиатшиносии Суроға: М41, ш. Хоруғ, Чумхурии Тоҷикистон, хиёбони Шириншоҳ Шоҳтемур, 28. **Телефон:** (+992) 935-42-74-77. **E-mail:** hazon22@mail.ru.

Сафармамадзода Сафармамад Муборакшо - Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, муовини ректор оид ба илм ва инноватсия д.и.х., профессор. Суроға: 734025, ш. Душанбе, Чумхурии Тоҷикистон, хиёбони Рӯдакӣ, 17. **Телефон:** (+992) 938-27-04-04. **E-mail:** sash65@mail.ru.

Усачева Татьяна Рудольфовна - Донишгоҳи давлатии химико-технологии Иванова, мудири кафедраи технологияи умумии химиявии доктори илмҳои химия, дотсент. Суроға: 153000 Иваново, Россия, проспект Шереметевский, 7. **Телефон:** +7-910 -87 -11 -25. **E-mail:** oxt@isuct.ru.

Сведения об авторах: Содатдинова Анҷуман Садридиновна –Таджикский национальный университет, докторант кафедры аналитической химии. Адрес: 734025, г. Душанбе, Республика Таджикистан, проспект Рудаки, 17. **Телефон:** (+992) 938-13-66-56. **E-mail:** anjuman87@mail.ru.

Акимбекова Ҳазон Азизмамадовна - Хорогский государственный университет им. Назаршоева. ассистент кафедры общей химии факультета естественных наук, Адрес: М41, город Хорог, Республика Таджикистан, проспект Шириншах Шахтемур, 28. **Телефон:** (+992) 935-42-74-77. **E-mail:** hazon22@mail.ru.

Усачева Татьяна Рудольфовна - Ивановский государственный химико-технологический университет, заведующий кафедрой общей химический технологии, д.х.н., доцент. Адрес: 153000, Иваново, Россия, Шереметевский проспект, 7. **Телефон:** +7-910 -87 -11 -25. **E-mail:** oxt@isuct.ru.

Сафармамадзода Сафармамад Муборакшо - Таджикский национальный университет, проректор по науке и инновациям, д.х.н., профессор. Адрес: 734025, г. Душанбе, Республика Таджикистан, проспект Рудаки, 17. **Телефон:** (+992) 938-27-04-04. **E-mail:** sash65@mail.ru.

Information about the authors: Sodatdinova Anjuman Sadridinovna – Tajik National University, Doctoral students of the department analytical chemistry Address: 734025, , Dushanbe, Republic of Tajikistan Rudaki Avenue, 17. **Phone:** (+992) 938-13-66-56. **E-mail:** anjuman87@mail.ru.

Akimbekova Khazon Azizamadovna - Khorog State University named after I.I. Nazarshoev. Faculty of Natural Sciences, Assistant of the Department of General Chemistry. Address: M41, Khorog city, Republic of Tajikistan, Shirinshah Shakhtemur Avenue, 28. **Phone:** (+992) 935-42-74-77. **E-mail:** hazon22@mail.ru.

Usacheva Tatyana Rudolfovna - , Ivanovo State University of Chemistry and Technology, Doctor of Chemical Sciences, Head of the Department of General Chemical Technology, Associate Professor. Address: 153000, Ivanovo, Russia, Sheremetevsky Avenue, 7. **Phone:** +7-910 -87 -11 -25- **E-mail:** oxt@isuct.ru.

Safarmamadzoda Safarmamad Muboraksho – Tajik National University, Vice-rector for science and innovation of doctor of chemical sciences, professor. Address: 734025, Dushanbe, Republic of Tajikistan, Rudaki Avenue, 17. **Phone:** (+992) 938-27-04-04. **E-mail:** sash65@mail.ru.

Статья поступила в редакцию 02.01.2024
Одобрена после рецензирования 26.02.2024
Принята к публикации 15.04.2024

УДК. 542.91.547.466.

МОДИФИКАЦИЯ И α,β,γ -АМИНОМАСЛЯНЫХ КИСЛОТ ФУЛЛЕРЕНОМ C₆₀ И ИХ ИССЛЕДОВАНИЕ

Кодиров М.З., Бобизода Г.М., Зафаров С.З.

Таджикский национальный университет

В природе существуют такие аминокислоты, которые отсутствуют в белковых гидролизатах или содержатся в них лишь в очень малых количествах [1, с. 373]. К числу таких аминокислот относятся α,β,γ -аминомасляные кислоты. Аминомасляные кислоты — промежуточные продукты обмена некоторых аминокислот. Среди аминомасляных кислот практический интерес представляют: α -аминомасляная кислота ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CHNH}_2\text{COOH}$); β -аминомасляная кислота ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NH}_2\text{CHCOOH}$); β -аминоизомасляная кислота [$\text{NH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\cdot\text{COOH}$]; γ -аминомасляная кислота ($\text{NH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{COOH}$); β -окси- α -аминомасляная кислота или L-треонин ($\text{CH}_3\text{CHONHCHNH}_2\text{COOH}$).

α -Аминомасляная кислота является продуктом метаболизма белков в живом организме. Однако она не была обнаружена в естественных пептидах. В биохимии рассматривается как гомоаланин и является непротеиногенной альфа-аминокислотой. Непротеиногенные аминокислоты, это аминокислоты, которые не участвуют в биосинтезе белка, так как многие из них являются токсинами и ингибиторами ферментов в разнообразных метаболических реакциях [2, с.102]. В организме человека α -аминомасляная кислота участвует, например, в биосинтезе офтальмовой кислоты. Как и другие аминокислоты, может существовать в виде двух стереоизомеров: D-бутирина и L-бутирина [3, с. 84]. Свободная α -аминомасляная кислота найдена в составе крови и моче человека; повышение её содержания наблюдается при патологической аминоацидурии, например, при так называемом синдроме Фанкони. α -Аминомасляная кислота (L-изомер) образуется в организме животных в процессе реакции переаминирования из α -кетомасляной кислоты — продукта распада L-метионина. В тканях животных и в клеточных суспензиях микробов из DL- α -аминомасляной кислоты, в свою очередь, образуется α -кетомасляная кислота в результате реакций окислительного дезаминирования и переаминирования. Переход метионина в α -аминомасляную кислоту является необратимым процессом. Предсказания о частичной замене метионина в питании животных на α -аминомасляную кислоту не подтвердились [4, с. 234]

β -Аминомасляная кислота представляет собой изомер α -аминомасляной кислоты, который также содержится в растениях, где он может играть определённую роль в передаче импульсных сигналов. Она способна индуцировать устойчивость растений к болезням, а также повышенную устойчивость к кабиотическим стрессам, при обработке растений [5, с. 322]. β -Аминомасляная кислота повышает устойчивость растений к различным болезням и оказывает прямое влияние на возбудителей болезней растений, активизируя иммунную систему растений, и способствует эффективно противостоять вирусным инфекциям. β -Аминомасляная кислота вызывает защитные реакции в растениях как физическими, так и биохимическими методами. Точный механизм зависит от вида растений и патогенов.

γ -Аминомасляная кислота (ГАМК) образуется при декарбоксилировании L-глутаминовой кислоты декарбоксилазами некоторых бактерий растений и животных тканей. У животных декарбоксилирование глутаминовой кислоты протекает интенсивно в ткани мозга, содержащей в норме около 50 мг % γ -аминомасляной кислоты. γ -Аминомасляная кислота в нервной системе играет важнейшую роль в передаче электрического заряда в процессе нервного возбуждения, в соответствии с чем γ -аминомасляная кислота и ее производные, а также глутаминовая кислота применяются в клинике для лечения ряда нервных и психических заболеваний [6, с.123]. Одним из главных компонентов пула свободных аминокислот головного мозга различных животных

является γ -аминомасляная кислота, продукт декарбоксилирования глутаминовой кислоты. Цикл превращений γ -аминомасляной кислоты в мозге включает три сопряженные энзиматические реакции, получившие название ГАМК-шунта.

ГАМК является наиболее широко распространенным медиатором торможения в нервной системе. У млекопитающих она локализована в нервных окончаниях тормозных нейронов ЦНС. ГАМК тормозит биоэлектрическую активность не только головного мозга позвоночных, но и нервных цепочек и ганглиев беспозвоночных животных. Соответственно ГАМК и ферменты её обмена также локализованы в нервных структурах беспозвоночных, совпадающих с расположением тормозных синапсов. Физиологическое действие ГАМК обусловлено взаимодействием со специальными рецепторами. В обычных условиях и при обычных способах введения ГАМК практически не проникает через гематоэнцефалический барьер.

С целью сохранения устойчивости, подавления токсичности и повышения действия изомеров аминномасляной кислоты на живые организмы и растения мы решили присоединить фуллерен C_{60} к NH_2 – группе аминномасляной кислоты и получить N-фуллеро C_{60} - аминномасляную кислоту по механизму нуклеофильного присоединения и изучения некоторых физико-химических свойств и конформационных особенностей.

Результаты

Синтезированы фуллеро- C_{60} - α -аминобутанат, фуллеро- C_{60} - β -аминобутанат и фуллеро- C_{60} - γ -аминобутанат с выходом 52, 64 и 83%.

Основные физические константы полученных соединений приведены в таблице 1.

Таблица 1. Основные физические константы полученных соединений
Table 1. The main physical constants of the compounds obtained

№ п/п	Наименований соединений	Выход, %	$T_{пл.}, ^\circ C$	R_f^* А	R_f Б	R_f В
1	фуллеро- C_{60} - α -аминобутанат	52	322-325	0,93	0,56	0,59
2	Фуллеро- β -амино-бутанат	64	>360	0,84	0,77	0,71
3	Фуллеро- γ -амино-бутанат	83	>360	0,73	0,61	0,63

R_f^*) А- $(C_2H_5)_3N : NH_4OH : CH_3OH : H_2O$ (10:10:200:400);

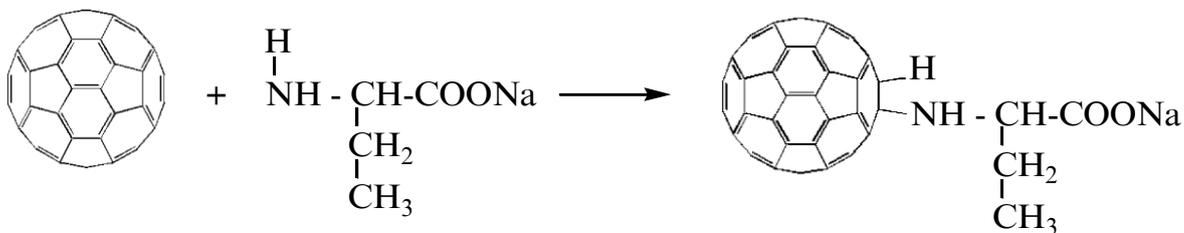
Б- ДМСО : $CH_3OH : H_2O : NH_4OH$ (15:20:10:5);

В- $CH_3OH : ДМФА : NH_4OH$ (1:2:2). Проявитель пары йода.

ОБСУЖДЕНИЕ

Одним из подходов к синтезу аминокислотных производных фуллерена C_{60} является термический метод связывания аминокислот с фуллереном C_{60} , который мы впервые использовали в лабораторных условиях [7, с.51]. Из литературных данных известно, что большинство аминносоединений а также аминокислот [8, с. 211] в реакции с фуллереном C_{60} по механизму нуклеофильного присоединения стремится присоединиться в положение 1,2 гексогенного кольца бензольного строения фуллерена- C_{60} между углеродными атомами, имеющими двойную связь, поскольку в интермидиате RC_{60}^- наибольший отрицательный заряд локализован в положении 2 [9, с. 397]. Пространственно объёмные молекулы могут присоединиться в положении 1,4 «бензольного кольца».

Учитывая полиеновые свойства фуллерена C_{60} и его электроакцепторные свойства, наиболее важным для нас методом [10, с.142; 11, с. 182] было введение α -аминомасляной кислоты в фуллерен- C_{60} по механизму нуклеофильного присоединения:



Этот метод синтеза позволяет синтезировать основной продукт N-фуллеро C₆₀- α -аминобутаната с хорошим выходом и идеальной чистотой.

Начальная стадия данного синтеза (1) заключается в получении щелочного диметилформамидного раствора аминокислоты путём растворения кристаллической аминокислоты в щелочном диметилформамиде при pH 9-9,5. Затем прибавляли к данному раствору соответствующее количество раствора фуллерена C₆₀ в бромбензоле [12, с. 13 авторе] и перемешивали реакционную среду на магнитной мешалке в течение 9-10 часов при температуре 70-80°C. При этом наблюдается изменение окраски реакционной среды из фиолетового цвета в темно-коричневый [13, с. 103].

При протекании реакции окраска реакционной смеси и pH среды постепенно изменяются. По завершении реакции реакционную среду нейтрализуют добавлением бн. хлористоводородной кислоты. Реакционную смесь упаривают на роторном испарителе и получают коричневый кристаллический продукт [14, с. 76; 15, с. 105]. Полученный осадок промывают сначала толуолом для избавления от непрореагировавшего фуллерена, а затем щелочным метанолом для очистки продукта от не вступившей в реакцию аминокислоты, затем несколько раз метанолом. Получают хроматографически чистый фуллеро C₆₀- α -аминобутанат с выходом 52%. Полученный продукт хорошо растворяется в смеси вода-диметилсульфоксид. Идентичность и чистоту полученного вещества проверяли методом тонкослойной хроматографии и ИК-спектроскопии. Хроматографические данные и температура плавления полученного вещества подтверждают образование фуллеро-C₆₀- α -аминобутаната.

Ряд изменений наблюдался в ИК-спектрах фуллерена-C₆₀, α -аминобутаната (рис. 1) и продукта реакции фуллеро-C₆₀- α -аминобутаната (рис. 2). В ИК-спектре фуллерена-C₆₀ в областях 3200-3600 см⁻¹, 2800-3200 см⁻¹, 1000-1200 см⁻¹ и 400-600 см⁻¹ появляются характеристические спектры, подтверждающие образование намеченных соединений. В области 3300-3450 см⁻¹ наблюдаются полосы характерные для C₆₀- NH-, в области 1725-1700 см⁻¹ наблюдаются полосы характерные для COOH. В ИК-спектре самого α -аминобутаната исчезают спектры, относящиеся к 400-600 см⁻¹ и 2800-3000 см⁻¹ соответствующие NH⁺. Спектры валентных колебаний в области 2800-3000 см⁻¹ обладают минимальной интенсивностью и превращаются в спектры с малой амплитудой.

Рис 1. ИК- спектр α -аминобутанат

Fig.1. IR- spectrum of α -aminobutanat

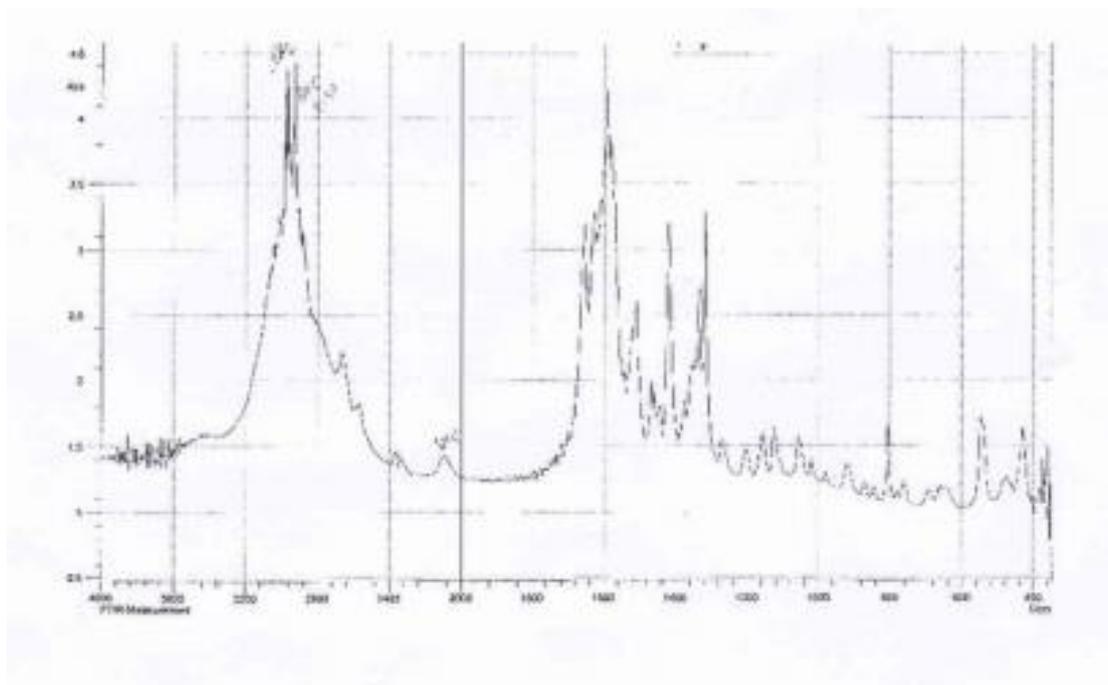
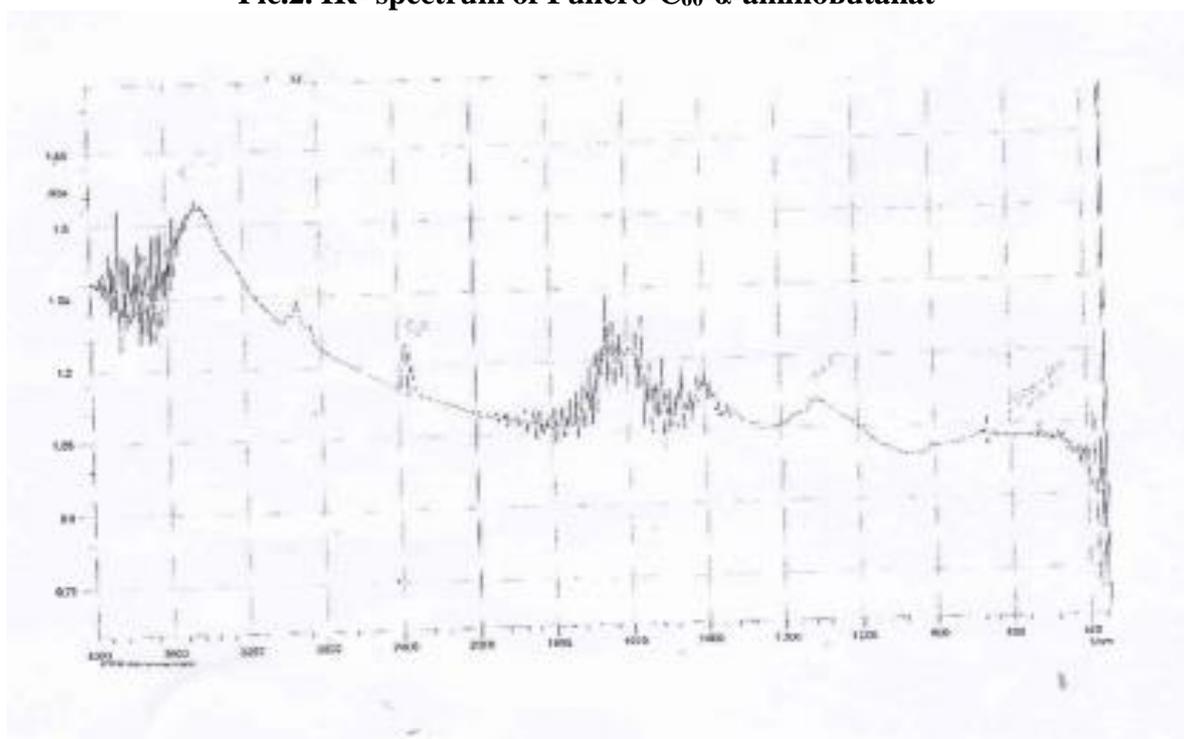
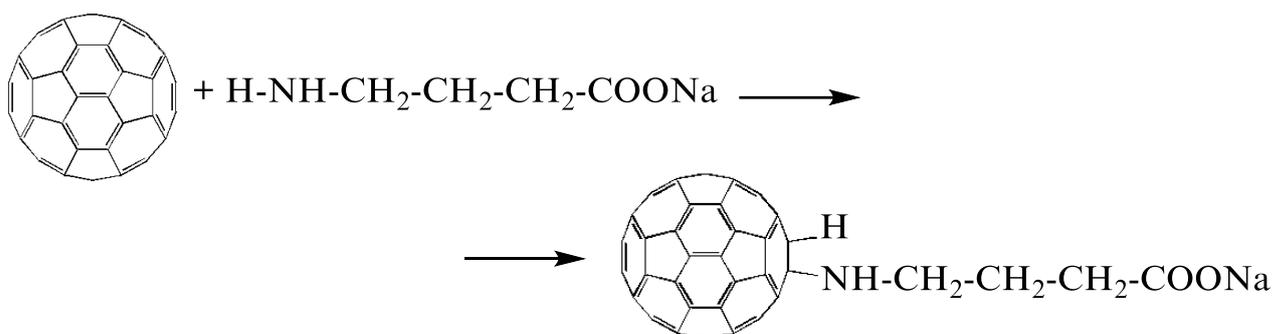


Рис 2. ИК- спектр фуллера- C_{60} - α -аминобутанат
Pic.2. IR- spectrum of Fullerene- C_{60} - α -aminobutanoate



Из таблицы 1 следует, что по выходу три (1,2,3) изомера отличаются друг от друга, основной причиной и фактором которого может быть расположение NH_2 группы по цепи молекул от $-COOH$ группы аминокислоты, изменяющей степень нуклеофильности аминогруппы своим электроноакцепторным свойством, влияющим непосредственно на ход реакции.

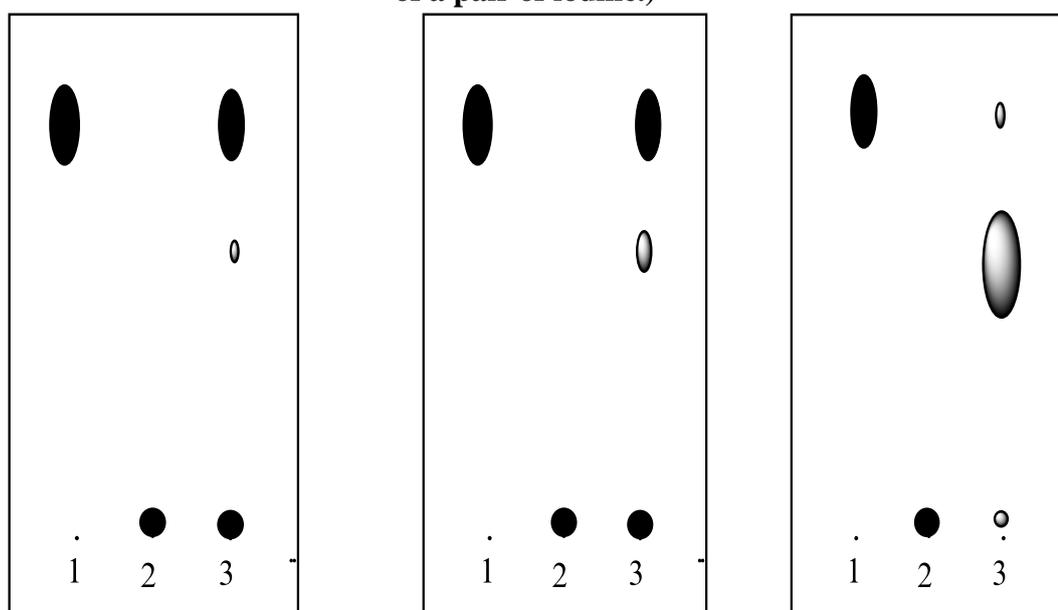
Для синтеза фуллера C_{60} - β -аминобутанат и фуллера C_{60} - γ -аминобутанат также использовали схему синтеза (1) с некоторым изменением в последовательности прибавления раствора мономеров при синтезе, который заключается в следующем:



Натриевые соли β -аминобутаната и γ -аминобутаната добавляют к раствору фуллерен- C_{60} в бромбензоле в отдельности. Реакцию проводят при температуре 80°C . Ход реакции контролируют с помощью тонкослойной хроматографии. Хроматографические данные подтверждают, что реакция прошла успешно (рис.3).

Рис. 3. На хроматограмме: 1-аминокислота, 2-фуллерен- C_{60} , 3-продукт реакции. В хроматографической системе: $(\text{C}_2\text{H}_5)_3\text{N} : \text{NH}_4\text{OH} : \text{CH}_3\text{OH} : \text{H}_2\text{O}$ (10:10:200:400); проявитель пары йода.

Fig.3. In the chromatogram: 1- aminoacids, 2-Fulleren- C_{60} , 3-stufige reaktion. In the chromatographic system: $(\text{C}_2\text{H}_5)_3\text{N} : \text{NH}_4\text{OH} : \text{CH}_3\text{OH} : \text{H}_2\text{O}$ (10 + 10 + 200 + 400; developer of a pair of iodine.)



По завершении реакции реакцию среду нейтрализуют бн. HCl . Обработку и очистку полученных веществ проводят как в случае получения фуллера- C_{60} - α -аминобутаната. После очистки и высушивания выход фуллера- C_{60} - β -аминобутаната составлял 64% а фуллера- C_{60} - γ -аминобутаната 83%. Основные физические константы полученных соединений приведены в таблице 1.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

ИК-спектры сняты на приборе SHIMADRUFTIR Measurement.

Температуры плавления синтезированных веществ определяли на нагревательном столике «Воетийс» (Германия) со скоростью нагрева $4^\circ\text{C}/\text{мин}$.

Чистоту, индивидуальность синтезированных соединений и ход реакции контролировали методом тонкослойной хроматографии на пластинках «Силуфол UV-254» («Chemapol», Чехия) в следующих системах растворителей:

А- $(\text{C}_2\text{H}_5)_3\text{N} : \text{NH}_4\text{OH} : \text{CH}_3\text{OH} : \text{H}_2\text{O}$ (10:10:200:400);

Б- ДМСО : СН₃ОН : Н₂О : NH₄ОН (15:20:10:5);

В- СН₃ОН : ДМФА : NH₄ОН (1:2:2).

Синтез фуллеро-С₆₀-α-аминобутаната (1). 0,080 г (0,11 ммоль) фуллерена растворяют в 2 мл бромбензола и нагревают до 60°C до полного растворения. Одновременно приготавливают диметилформамидный раствор натриевой соли α-аминомасляной кислоты исходя из 0,014 г (0,11 ммоль), который прибавляют к ранее приготовленному раствору фуллерена в бромбензоле. Затем перемешивают реакцию смесь на магнитной мешалке при температуре 80°C в течение 9-10 часов с помощью обратного холодильника. Реакционная среда из фиолетового цвета переходит в коричневую. При этом из раствора начинается выпадение небольшого количества осадка, который в конце реакции отделяют фильтрованием. Раствор нейтрализуют 6 н. HCl до pH 4,5-5 и упаривают на роторном испарителе. Полученный осадок промывают толуолом для отделения не прореагировавшего фуллерена С₆₀, щелочным метанолом для избавления от оставшегося α-аминобутаната, а затем метанолом. Полученный кристаллический продукт (1) высушивают на воздухе. Выход основного продукта составляет 0,048 г (52%). Т_{пл.}= 322-325°C.

R_f =0,93 (А); R_f =0,56 (Б); R_f =0,59 (В); проявитель пары йода.

Элементный анализ: (M_r: C₆₄H₉O₂N), вычислено% С-93,31; Н-1,09; N-1,70;
найденно% С-94,57; Н-1,15; N-1,55.

Синтез фуллеро-С₆₀-β-аминобутаната (2). 0,250 г (0,35 ммоль) фуллерена растворяют в 20 мл бромбензола. Для полного растворения фуллерена раствор нагревают 20 минут при температуре 60-70°C. Раствор приобретает фиолетовый цвет. К полученному раствору фуллерена прибавляют заранее приготовленный раствор 0,045 г (0,35 ммоль) натриевой соли β-аминомасляной кислоты в диметилформамиде. Реакционную смесь перемешивают на магнитной мешалке при температуре 80°C в течение 20 часов с помощью обратного холодильника. При этом реакционная среда из фиолетового цвета переходит в коричневую. pH реакционной среды не меняется. Ход реакции контролируют тонкослойной хроматографией. Реакционную смесь нейтрализуют 6 н. HCl до pH 4,5-5 и упаривают на роторном испарителе. Остаток в кристаллическом виде промывают сначала несколько раз толуолом, а затем щелочным метанолом. Оставшуюся массу сушат на воздухе. Выход основного продукта составляет 0,18 г (64%). Т_{пл.}= >360°C.

R_f =0,84 (А); R_f =0,77 (Б); R_f =0,71 (В); проявитель пары йода.

Элементный анализ: (M_r: C₆₄H₉O₂N), вычислено% С-93,31; Н-1,09; N-1,70;
найденно% С-94,12; Н-1,27; N-1,30.

3. Синтез фуллеро-С₆₀-γ-аминобутаната. Получают аналогично (2), исходя из 0,100 г (0,14 ммоль) фуллерена и 0,018 г (0,14 ммоль) натриевой соли γ-аминомасляной кислоты. Выход основного продукта составляет 0,095 г (83%). Т_{пл.}= >360°C.

R_f =0,73 (А); R_f =0,61 (Б); R_f =0,63 (В); проявитель пары йода.

Элементный анализ: (M_r: C₆₄H₉O₂N), вычислено% С-93,31; Н-1,09; N-1,70;
найденно% С-92,74; Н-1,02; N-1,95.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основании экспериментальных фактов и изучения хода реакции нуклеофильного присоединения α,β,γ-аминомасляных кислот к молекуле фуллерен-С₆₀ установлено, что присоединение NH₂- группы аминокислот к молекуле фуллерен-С₆₀ зависит от нуклеофильности NH₂- группы, а не от степени кислотности и пространственного экранирования облаками электронов NH₂- группы.

**Рецензент: Раджабов Сироджиддин,
доктор химических наук,
профессор**

ЛИТЕРАТУРА

1. Каррер П. Курс органической химии / П. Каррер // Перевод с немецкого. Второе издание. -Л.: Химическая литература, 1962. – 1216 с.
2. Шугалей И.В. Химия белка. Учебное пособие СПб / И.В.Шугалей, А.В. Гарабаджиу // –М.: Проспект Науки, 2010. – 200 с.
3. Яковишин Л.А. Избранные главы биоорганической химии / Л.А. Яковишин // – Севастополь: Стрижак-пресс, 2006. – 196 с.
4. Браунштейн А. Е. Биохимия аминокислотного обмена / А. Е.Браунштейн // – М., 1949. – 426 с.
5. Большая медицинская энциклопедия. – Т.1 /Главный редактор академик Б. В. Петровский // –М.: «Советская энциклопедия», 1974. – 576 с.
6. Сытинский И.А. Гамма-аминомасляная кислота в деятельности нервной системы / И.А.Сытинский // - Л., 1972. – 200 с.
7. Khalikov Sh. Connections to fullerene of C₆₀ of alkyldiamino-, amino-and iminoacids with different molecular structures and the nucleophilicity / Sh. Khalikov, D. A. Sharipova, M. Umarchon, S.Z. Zafarov, M.Z. Kodirov // International Journal of Modern Chemistry.USA. - 2016. - 8 (1). – Pp.50-60.
8. Bianco A. Fullerene-based amino acids and peptides / A.Bianco, T.Da Ros, M.Prato, C.Toniolo // J. Pept. Sci. –2011. –Vol. 7. – Pp.208–219.
9. Фуллерены: учеб. пособие для студ. вузов /Л. Н. Сидоров, М. А. Юровская, А. Я. Борщевский и др // –М.: Экзамен, 2005. – 688 с.
10. Шарипова Д.А. Синтез и исследование фуллерен C₆₀-аминокислот/ Д.А. Шарипова, З. Сорбон, С.В.Алиева, М.З. Кодиров, Ш.Х. Халиков //Материалы республиканской конференции «Перспективы исследований в области химии глицерина: Синтез новых производных биологически активных веществ на основе аминокислот». – Душанбе, 2015. – С.141-143.
11. Кодиров М.З. Синтез и исследование фуллера C₆₀-циклосерин и фуллера C₆₀-серин / М.З.Кодиров, Д.А.Шарипова, Ш.Х.Халиков // Вестник Таджикский национальный университета. – Душанбе, 2018. - №4. – С.181-188.
12. Исламова Н.И. Атореферат "Термодинамика растворения фуллерена C₆₀ в индивидуальных и смешанных (CCl₄-C₆H₅CH₃ и CCl₄-1,2-C₆H₄Cl₂) органических растворителях" Иваново – 2005.
13. Халиков Ш.Х. Синтез и идентификация фуллера C₆₀ α-аминокислот с антивирусными свойствами / Ш.Х. Халиков, Д.А. Шарипова, С.З. Зафаров, М. Умархон, С.В. Алиева // Химия природных соединений. 2017 №1, - С.102-108.
14. Халиков Ш.Х., Синтез и исследование фуллерен C₆₀ аминокислот / Ш.Х. Халиков, Д.А. Шарипова, С.З. Зафаров //MaterialyXmezinarodnivedeckopraktikakonference. Dilmatematika, Fisika. Chemilachemickatechnologie. Praha. - 27.12.2013 - 05.01.2014. – С.75-77.
15. Халиков Ш.Х., Синтез и идентификация фуллера C₆₀α-аминокислот с антивирусными свойствами / Ш.Х.Халиков, Д.А.Шарипова, С.З. Зафаров, М. Умархон, С.В. Алиева // Химия природных соединений. – Узбекистан, 2017. -№1. - С. 102-108.

REFERENCES

1. Karrer P. Course in organic chemistry/ P.Karrer// Translation from German. Second edition. - L.: Chemical literature, 1962. – 1216 p.
2. Shugaley I.V. Protein chemistry. Textbook St. Petersburg / I.V. Shugaley, A.V. Garabadzhiu // – M.: Prospekt Nauki, 2010. – 200 p.
3. Yakovishin L.A. Selected chapters of bioorganic chemistry / L.A. Yakovishin // – Sevastopol: Strizhak-press, 2006. – 196 p.
4. Braunstein A. E. Biochemistry of amino acid metabolism / A. E. Braunstein // – M., 1949. - 426 p.
5. Great medical encyclopedia. Volume 1 / Editor-in-Chief Academician B.V. Petrovsky // – M.: “Soviet Encyclopedia”, 1974. – 576 p.
6. Sytinsky I.A. Gamma-aminobutyric acid in the activity of the nervous system / I.A. Sytinsky // - L.1972. - 200 p.
7. Khalikov Sh. Connections to fullerene of C₆₀ of alkyldiamino-, amino- and iminoacids with different molecular structures and the nucleophilicity / Sh. Khalikov, D. A. Sharipova, M. Umarchon, S.Z. Zafarov, M.Z. Kodirov // International Journal of Modern Chemistry. USA. - 2016. - 8 (1). – Pp.50-60.
8. Bianco, A. Fullerene-based amino acids and peptides / A. Bianco, T. Da Ros, M. Prato, S. Toniolo // J. Pept. Sci. – 2011. – Vol. 7. – Pp.208–219.
9. Fullerenes: textbook. aid for students universities / L. N. Sidorov, M. A. Yurovskaya, A. Ya. Borshchevsky and others // – M.: Exam, 2005. – 688 p.
10. Sharipova D.A. Synthesis and study of fullerene C₆₀ amino acids. / YES. Sharipova, Z. Sorbon, S.V. Alieva, M.Z. Kodirov, Sh.Kh. Khalikov // Materials of the republican conference “Prospects for research in the field of

- glycerol chemistry: Synthesis of new derivatives of biologically active substances based on amino acids. – Dushanbe, 2015. – Pp.141-143.
11. Kodirov M.Z. Synthesis and study of fullerene C₆₀-cycloserine and fullerene C₆₀-serine / M.Z. Kodirov, D.A. Sharipova, Sh.H. Khalikov // Bulletin of the Tajik National University. –Dushanbe, 2018. - No. 4, - pp. 181-188.
 12. Islamova N.I. Abstract "Thermodynamics of dissolution of fullerene C₆₀ in individual and mixed (CCl₄-C₆H₅CH₃ and CCl₄-1,2-C₆H₄Cl₂) organic solvents". – Ivanovo, 2005.
 13. Khalikov Sh.Kh., Synthesis and identification of fullerene C₆₀ α-amino acids with antiviral properties / [Sh.Kh. Khalikov, D.A. Sharipova, S.Z. Zafarov, M. Umarkhon, S.V. Aliyeva] // Chemistry of natural compounds. 2017 No.1. – Pp.102-108.
 14. Khalikov Sh.Kh., Synthesis and study of fullerene C₆₀ amino acids / Sh.Kh. Khalikov, D.A. Sharipova, S.Z. Zafarov // Materials of the international conference. Mathematics. Physics. Chemistry. Technology . Prague. - 12/27/2013 - 01/05/2014. - R. 75-77. - 12/27/2013 - 01/05/2014. – Pp.75-77.
 15. Khalikov Sh.Kh., Synthesis and identification of fullerene C₆₀ α-amino acids with antiviral properties / Sh.Kh. Khalikov, D.A. Sharipova, S.Z. Zafarov, M. Umarkhon, S.V. Aliyeva // Chemistry of natural compounds. - Uzbekistan. - 2017. - No. 1. – Pp.102-108.

МОДИФИКАЦИЯ ВА ТАҲҚИҚИ КИСЛОТАҲОИ α, β, γ-АМИНОРАВҒАНӢ БО ФУЛЛЕРЕН C₆₀

Дар табиат аминокислотаҳо мавҷуданд, ки дар гидролизатҳои сафеда мавҷуд нестанд. Ба ин аминокислотаҳо кислотаҳои α, β, γ-аминоравғанӣ дохил мешаванд. Кислотаи α-аминоравғанӣ, ки дар организмҳои зинда ҳангоми мубодилаи сафедаҳо ба вучуд меояд, алфа-аминокислотаи –гайрисафедагӣ мебошад. Дар бадани инсон, масалан, дар биосинтези кислотаи офталмӣ иштирок мекунад. Кислотаи β-аминоравғанӣ изомери кислотаи аминоравғанӣ буда, дар растаниҳо мавҷуд аст, ки дар он метавонад дар интиқоли сигнал нақши муайян бозад. Кислотаи β-аминоравғанӣ метавонад устувории растаниро ба бемориҳо афзоиш диҳад ва ба барангезандагони бемориҳои растанӣ таъсири мустақим расонида, системаи иммунии растаниро фаъол созад. Кислотаи γ-аминоравғанӣ дар интиқоли ҳаҷҷони асаб нақши муҳим мебошад. Бо мақсади нигоҳ доштани устуворӣ ва зиёд кардани таъсири изомерҳои кислотаи аминоравғанӣ ба организмҳои зинда ва растаниҳо, мо тасмим гирифтём, ки фуллерен C₆₀-ро ба гурӯҳи NH₂ кислотаи аминоравғанӣ пайваст карда, кислотаи N-фуллеро C₆₀-аминоравғаниро барои омӯзиши минбаъдаи хосиятҳои биологӣ ҳосил намоем. Кислотаи N-фуллеро C₆₀-аминоравғанӣ бо истифодаи усули бо гармкунӣ пайваст кардани аминокислотаҳо ба фуллерен C₆₀ синтез карда шуд. Тавре маълум аст, аксари аминопайвастаҳо дар реаксия бо фуллерен C₆₀ метавонанд бо механизми муовизаи нуклеофилӣ дар мавқеи 1,2 ҳалқаи бензоли фуллерен-C₆₀ пайваст шаванд. Бо истифода аз ин механизм 3 пайвастаи нав синтез карда шуд: фуллеро C₆₀-α-аминобутанат, фуллеро C₆₀-β-аминобутанат, фуллеро C₆₀-γ-аминобутанат. Фардият ва тозагии моддаҳои ба даст овардашуда тавассути хроматографияи тунукқабати ва спектроскопияи ИС тасдиқ карда шуд. Натиҷаҳои хроматографӣ ва ҳарорати гудозиши моддаҳои ба даст омада ҳосил шудани фуллеро-C₆₀-α-аминобутанат, фуллеро-C₆₀-β-аминобутанат ва фуллеро-C₆₀-γ-аминобутанатро тасдиқ мекунад.

Калидвожаҳо: фуллерен-C₆₀, реаксия, кислотаи аминоравғанӣ, усули гармкунӣ, бромобензол, диметилформамид, спектр, хроматографияи тунукқабати.

МОДИФИКАЦИЯ И ИССЛЕДОВАНИЕ α,β,γ-АМИНОМАСЛЯНЫХ КИСЛОТ ФУЛЛЕРЕНОМ C₆₀

В природе существуют аминокислоты, которые отсутствуют в белковых гидролизатах. В число таких аминокислот входят α,β,γ-аминомасляные кислоты. α-Аминомасляная кислота, образующаяся в живых организмах в процессе метаболизма белков, и является непротеиногенной альфа-аминокислотой. В организме человека она участвует, например, в биосинтезе офтальмовой кислоты. β-Аминомасляная кислота представляет собой изомер аминомасляной кислоты, который содержится в растениях, где он может играть определенную роль в передаче сигналов. β-Аминомасляная кислота способна увеличить устойчивость растений к болезням и иметь прямое влияние на возбудителей болезней растений, активизирует иммунную систему растений. γ-Аминомасляная кислота играет важнейшую роль в передаче нервного возбуждения. С целью сохранения устойчивости и повышения действия изомеров аминомасляной кислоты на живые организмы и растения мы решили присоединить фуллерен C₆₀ к NH₂ – группе аминомасляной кислоты и получить N-фуллеро C₆₀-аминомасляной кислоты для дальнейшего изучения биологических свойств. N-Фуллеро C₆₀-аминомасляной кислоты синтезировали, используя термический метод связывания аминокислот с фуллереном C₆₀. Как известно, большинство аминосоединений в реакции с фуллереном C₆₀ по механизму нуклеофильного присоединения могут присоединиться в положение 1,2 бензольного кольца фуллерена-C₆₀. По данному механизму синтезированы 3 новых соединения: фуллеро C₆₀-α-аминобутанат, фуллеро C₆₀-β-аминобутанат, фуллеро C₆₀-γ-аминобутанат. Идентичность и чистоту полученных веществ проверяли методом тонкослойной хроматографии и ИК-спектроскопии. Хроматографические данные и температуры плавления полученных веществ подтверждают образование фуллеро-C₆₀-α-аминобутаната, фуллеро-C₆₀-β-аминобутаната и фуллеро-C₆₀-γ-аминобутаната.

Ключевые слова: фуллерен- C_{60} , реакция, аминокислотная кислота, термический метод, бромбензол, диметилформамид, спектр, тонкослойная хроматография.

MODIFICATION AND RESEARCH OF α , β , γ -AMINOIL ACIDS WITH FULLERENE C_{60}

In nature, there are amino acids that are not found in protein hydrolysates. These amino acids include α , β , γ -aminobutyric acids. α -Aminobutyric acid, which is formed in living organisms during the metabolism of proteins, is a non-proteinogenic alpha amino acid. In the human body, it is involved, for example, in the biosynthesis of ophthalmic acid. β -Aminobutyric acid is an isomer of aminobutyric acid, which is found in plants, where it can play a role in signaling. β -Aminobutyric acid is able to increase the resistance of plants to diseases and have a direct effect on pathogens of plant diseases, activates the immune system of plants. γ -Aminobutyric acid plays a crucial role in the transmission of nerve excitation. In order to maintain stability and increase the effect of aminobutyric acid isomers on living organisms and plants, we decided to attach C_{60} fullerene to the NH_2 - aminobutyric acid group and obtain N-fullero C_{60} -aminobutyric acid for further study of biological properties. N-Fullero C_{60} -aminobutyric acid was synthesized using the thermal method of binding amino acids to C_{60} fullerene. As is known, most amino compounds in the reaction with fullerene C_{60} by the nucleophilic attachment mechanism can join at position 1.2 of the benzene ring of fullerene- C_{60} . Using this mechanism, 3 new compounds were synthesized: fullero C_{60} - α -aminobutanate, fullero C_{60} - β -aminobutanate, fullero C_{60} - γ -aminobutanate. The identity and purity of the obtained substances was checked by thin-layer chromatography and IR spectroscopy. Chromatographic data and melting points of the obtained substances confirm the formation of fullero- C_{60} - α -aminobutanate, fullero- C_{60} - β -aminobutanate and fullero- C_{60} - γ -aminobutanate.

Key words: fullerene- C_{60} , reaction, aminobutyric acid, thermal method, bromobenzene, dimethylformamide, spectrum, thin-layer chromatography.

Маълумот дар бораи муаллиф: – Қодиров Мурод Зокирович - Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, номзади илмҳои химия, дотсенти кафедраи химияи органикӣ. **Суроға:** 734025, ш. Душанбе, Ҷумҳурии Тоҷикистон, хиёбони Рӯдакӣ, 17. **Телефон:** 935983847. **E-mail:** kaf.org.chem@mail.ru.

Бобизода Гуломқодир Муккамал – Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, доктори илмҳои биологӣ, доктори илмҳои фарматсевтӣ, профессори кафедраи химияи органикӣ. **Суроға:** 734025, ш. Душанбе, Ҷумҳурии Тоҷикистон, хиёбони Рӯдакӣ, 17. **Телефон:** +992-(918)-17-03-60. **E-mail:** bobievgm@mail.ru.

Зафаров Сорбон Зафарович - Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, номзади илмҳои химия, муаллими калони кафедраи химияи органикӣ. **Суроға:** 734025, ш. Душанбе, Ҷумҳурии Тоҷикистон, хиёбони Рӯдакӣ, 17. **Телефон:** +992-(937)-70-03-95 **E-mail:** Szafarov91@mail.ru.

Сведения об авторах: Коди́ров Му́род Зоки́рович- Таджикский национальный университет, кандидат химических наук, доцент кафедры органической химии. **Адрес:** 734025, г. Душанбе, Республика Таджикистан, пр. Рудаки, 17. **Телефон:** 935983847. **E-mail:** kaf.org.chem@mail.ru.

Бобизода Гуломқодир Муккамал – Таджикский национальный университет, доктор биологических наук, доктор фармацевтических наук, профессор кафедры органической химии. **Адрес:** 734025, г. Душанбе, Республика Таджикистан, пр. Рудаки, 17. **Телефон:** +992-(918)-17-03-60. **E-mail:** bobievgm@mail.ru.

Зафаров Сорбон Зафарович – Таджикский национальный университет, кандидат химических наук, ассистент кафедры органической химии. **Адрес:** 734025, г. Душанбе, Республика Таджикистан, пр. Рудаки, 17. **Телефон:** +992-(937)-70-03-95. **E-mail:** Szafarov91@mail.ru.

Information about the authors: Kodirov Murod Zokirovich - Tajik National University, candidate of chemical sciences, associate professor organic chemistry department. **Address:** 734025, Dushanbe, Republic of Tajikistan, Rudaki Avenue 17. **Phone:** 935983847. **E-mail:** kaf.org.chem@mail.ru.

Bobizoda Gulomkodir Mukkamal - Tajik National University, Doctor of biological sciences, Doctor of pharmaceutical sciences, Professor of the department of organic chemistry. **Address:** 734025, Dushanbe, Republic of Tajikistan, Rudaki Ave., 17. **Phone:** +992-(918)-17-03-60. **E-mail:** bobievgm@mail.ru.

Zafarov Sorbon Zafarovich - Tajik National University, candidate of chemical sciences, senior lecturer of the department of organic chemistry. **Address:** 734025, Dushanbe, Republic of Tajikistan, Rudaki Ave., 17. **Phone:** +992-(937)-70-03-95. **E-mail:** Szafarov91@mail.ru.

Статья поступила в редакцию 20.11.2023
Одобрена после рецензирования 24.02.2024
Принята к публикации 10.04.2024

УДК: 543.632.53; 546.72

ОБРАЗОВАНИЕ ГИДРОКСИЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ Fe(II) В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ

Эшова Г.Б., Рахимова М., Давлатшоева Дж.А., Мираминзода Ф.

Таджикский национальный университет

Введение. Исследование процессов комплексообразования металлов с различными карбоновыми кислотами и нейтральными органическими лигандами показало образование стабильных координационных соединений различного состава, нередко смешаннолигандных гидроксокомплексов, проявляющих биологическую активность. При определении устойчивости таких комплексов и осуществлении термодинамических расчетов химических равновесий необходимо знание состава, констант устойчивости гидроксокомплексов.

Гидроксильное комплексообразование исследовано различными методами [1]. Методами спектрофотометрии, pH-метрического титрования, сорбции и диализом исследован процесс гидролиза в системах $\text{Fe}^{3+}\text{-Hg}^{2+}\text{-NO}_3\text{-H}_2\text{O}$ и $\text{Fe}^{3+}\text{-Co}^{2+}\text{-NO}_3\text{-H}_2\text{O}$ [2,3]. Установлено взаимное влияние катионов на гидролитическое и сорбционное поведение с позиций гетероядерного комплексообразования и рассчитано распределение различных аква- и гидроксокомплексов Fe(III) и Co(II) в зависимости от значения pH раствора в области предшествующей выпадению гидроксидных осадков. Установлено, что ионы Fe(III) образуют гомополиядерные гидроксокомплексы [3].

Методика экспериментального определения состава полиядерных гидроксокомплексов, их степени ядерности и заряда при различных концентрационных условиях, при которых железо переходит из ионного в неионное состояние с использованием методов диализа, ионного обмена и спектрофотометрии. В случае Fe(III) делается вывод, что при определенных условиях в растворе образуются димеры состава $\text{Fe}_2(\text{OH})_2^{4+}$ с соответствующими константами их образования [4].

В работе [5] методом окислительного потенциала изучены процессы гидроксильного комплексообразования железа (III) в растворах различного состава: $[\text{Fe}(\text{OH})(\text{H}_2\text{O})_5]^{2+}$; $[\text{Fe}_2(\text{OH})_2(\text{H}_2\text{O})_{10}]^{4+}$; $[\text{Fe}(\text{OH})_2(\text{H}_2\text{O})_4]^+$; $[\text{Fe}(\text{OH})_3(\text{H}_2\text{O})_3]^0$ и определены константы образования этих координационных соединений. Этим методом были изучены процессы комплексообразования Fe(II) и Fe(III) с органическими лигандами [6, 7] при различных ионных силах раствора.

Настоящая работа выполнена с целью исследования процесса образования гидроксокомплексов и смешаногидроксокомплексов в системе $\text{Fe(0)-Fe(II)-глицин-вода}$ при ионной силе 0.5 моль/л (NaClO_4) и температуре 298.15 К.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Исходными веществами при исследовании реакции комплексообразования железа были перхлорат железа (II). Соль перхлората двухвалентного железа была получена по методике, описанной в работе [8]. Концентрация ионов Fe(II) определялась титрованием 0.1 н раствором фиксонала $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ в присутствии индикатора дифениламин сульфоната натрия [9]. Аминоуксусная кислота марки «ч.д.а.» применялась без дополнительной очистки. Перхлорат натрия (NaClO_4) очищали фильтрацией, концентрацию определяли весовым методом [9]. Хлорная кислота HClO_4 марки «х.ч.» использовалась без предварительной очистки. Концентрация гидроксида натрия определялась методом прямого титрования 0.1 М раствором соляной кислоты в присутствии индикатора фенолфталеина. Титр раствора NaOH устанавливался янтарной кислотой [10].

Для заполнения хлорсеребряного электрода как электрода сравнения, приготовления электролитического ключа и буферного сосуда для наблюдения постоянства диффузионного потенциала были использованы агар-агар, хлорид калия KCl.

Значения рН исследуемой системы контролировались стеклянным электродом, который предварительно калибровался по стандартным буферным растворам. Значения ЭДС определены с помощью рН-метра марки 150 МИ. В качестве металлического электрода использовалась нержавеющая сталь, которая устойчива к коррозии на воздухе, в воде, а также в некоторых агрессивных средах. Опыты проводили в специальной ячейке, где раствор перемешивался с очищенным газообразным азотом. Очистительная система состояла из трёх склянок, две из которых содержали ванадат аммония, растворённый в 25 % серной кислоте и в качестве восстановителя амальгамированный металлический цинк, а третья склянка для дополнительной очистки и промывания очищенного газа содержала дистиллированную воду.

Основным методом исследования была оксидметрия, где измеряемой величиной была электродвижущая сила гальванических элементов, составленных сочетанием нержавеющей стали и хлорсеребряного для определения окислительного потенциала и стеклянного – хлорсеребряного электродов для определения рН растворов. Численные значения ЭДС системы металлического электрода использовались для снятия зависимостей E от pC_{ox} – показателя концентрации ионов железа(II) и рН раствора.

Для получения количественной информации о процессах, протекающих в системе Fe(0)-Fe(II)-глицин-вода и установления точного состава наиболее вероятных различных форм гидросокомплексов Fe(II), вычисления константы устойчивости и определения областей их доминирования нами использован метод окислительного потенциала Кларка – Никольского [1, 11-14].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 1 приведена экспериментальная зависимость E -рН при $C_{Fe(II)}=1 \cdot 10^{-4}$; $C_{Gly}=3 \cdot 10^{-3}$ и ионной силе $I=0.5$ моль/л, где на кривой зависимости E -рН, согласно теории метода оксидметрии, последовательное формирование линейных участков с тангенсами углов наклона, равными: 0, $-v/2$, $-v$, $-2v$ и $-v$, свидетельствует о ступенчатом комплексообразовании Fe(II). Эти линейные участки указывают на последовательное присоединение одного или более чисел гидроксильных групп к иону железа.

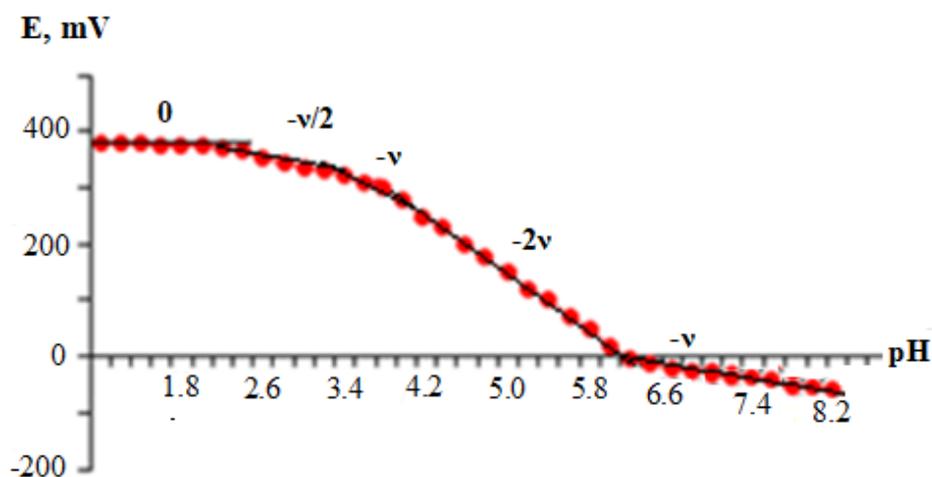


Рис. 1. Зависимость ЭДС (E , mV) системы Fe(0)-Fe(II)-глицин-вода от рН при температуре 298.15 К; $I=0.5$; $C_{Fe(II)}=1 \cdot 10^{-4}$ и $C_{Gly}=3 \cdot 10^{-3}$ моль/л.

Fig.1. Dependence of ЭДС (E , mV) of the Fe(0)-Fe(II)-glycine-water system on рН at a temperature of 298.15 К; $I=0.5$; $C_{Fe(II)}=1 \cdot 10^{-4}$ и $C_{Gly}=3 \cdot 10^{-3}$ mol/l.

Для определения числа ядер гидросокомплексов были сняты экспериментальные зависимости E от $pC_{Fe^{2+}}=pC_{ox}$, которые представлены на рис. 2. Угловым коэффициентом данных линейных зависимостей равен $-v/2$. Согласно теории оксидметрии и уравнения частной производной:

$$\left(\frac{\partial E}{\partial pC_{ox}} \right)_{pC_{L,pH}} = - \frac{v}{2q} \quad (1)$$

$q=1$, следовательно, можно сделать вывод об образовании при всех значениях pH исследуемых растворов одноядерных комплексов железа (II).

Значения угловых коэффициентов и предполагаемый состав гидроксокомплексов приведены в табл. 1, где $v=RT/F \cdot 2.303=59$ mV. Поскольку в реакции переноса участвуют два электрона, то вклад одного лиганда на уменьшение ЭДС (E , mV) равен 30 mV.

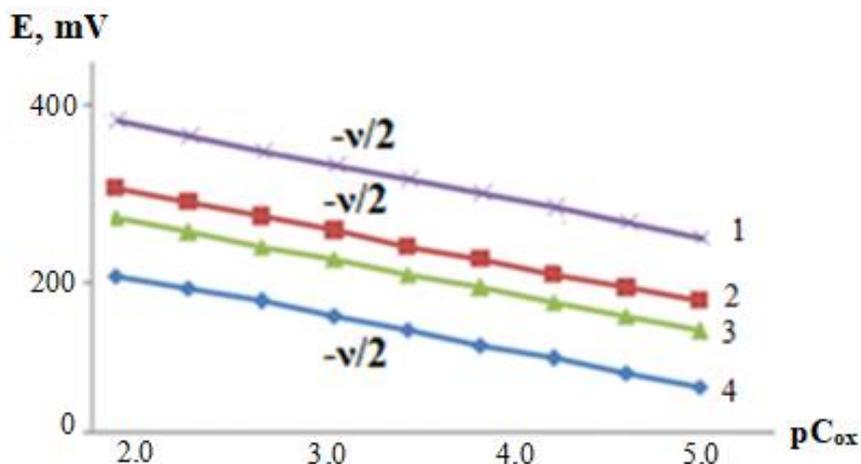


Рис. 2. Зависимость ЭДС системы Fe(0)-Fe(II)-глицин-вода от pC_{ox} при температуре 298.15 К; $I=0.5$; $C_{Fe(II)}=1 \cdot 10^{-4}$ и $C_{Gly}=3 \cdot 10^{-3}$ моль/л.

Кривые относятся к pH: 1- 3.0; 2 – 4.0; 3 – 5.0; 4 – 6.0

Fig. 2. Dependence of the EMF of the Fe(0)-Fe(II)-glycine-water system on pC_{ox} at a temperature of 298.15 K; $I=0.5$; $C_{Fe(II)}=1 \cdot 10^{-4}$ and $C_{Gly}=3 \cdot 10^{-3}$ mol/l. The curves refer to pH: 1- 3.0; 2 – 4.0; 3 – 5.0; 4 – 6.0.

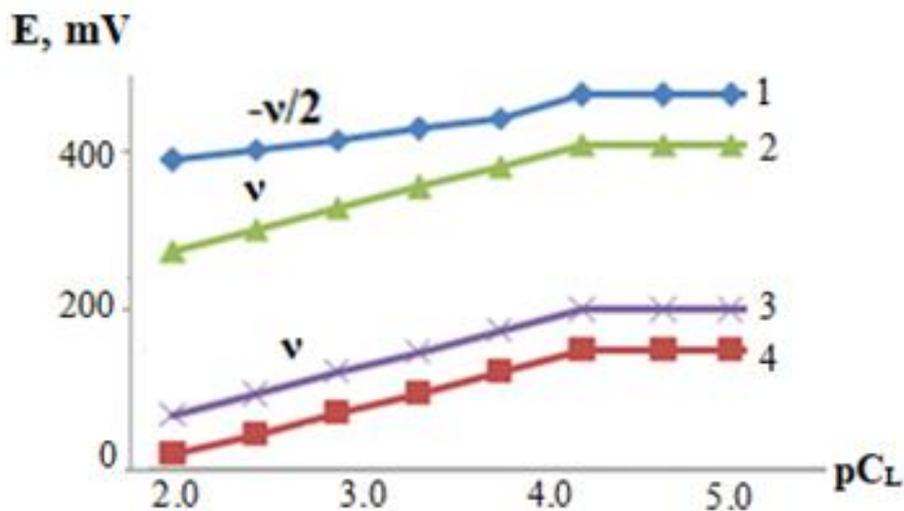


Рис. 3. Зависимость ЭДС системы Fe(0)-Fe(II)-глицин-вода от pC_L при температуре 298.15 К; $I=0.5$; $C_{Fe(II)}=1 \cdot 10^{-4}$ и $C_{Gly}=3 \cdot 10^{-3}$ моль/л.

Кривые относятся к pH: 1- 3.0; 2- 4.0; 3 - 5.0; 4 - 6.0

Fig. 3. Dependence of the EMF of the Fe(0)-Fe(II)-glycine-water system on pC_L at a temperature of 298.15 K; $I=0.5$; $C_{Fe(II)}=1 \cdot 10^{-4}$ and $C_{Gly}=3 \cdot 10^{-3}$ mol/l.

The curves refer to pH: 1- 3.0; 2- 4.0; 3 - 5.0; 4 - 6.0.

Анализ частных производных зависимости ЭДС гальванического элемента от показателя концентрации глицина pC_L ($pC_L = -\lg C_{Gly}$):

$$\left(\frac{\partial E}{\partial pC_L}\right)_{pC_{ox}, pH} = \frac{vsI}{2q} \quad (2)$$

позволил установить число протонированных лигандов (sl), входящих в состав комплексов железа(II). В интервале $pC_L=4.3 \div 5.0$ на экспериментальных кривых зависимости $E - pC_L$, которые представлены на рисунке 3, формируется линейный участок с тангенсом угла наклона 0. Это свидетельствует об отсутствии комплексообразования с глицином в данных концентрационных условиях.

Из рис. 1 и табл. 1 видно, что в системе Fe(0)-Fe(II)-глицин-вода образуется не менее четырёх комплексных форм: гидроксо - $[Fe(OH)(H_2O)_5]^+$, $[Fe(OH)_2(H_2O)_4]^0$ и смешанногидроксокомплексы- $[Fe(HL)(OH)(H_2O)_4]^+$, $[Fe_2(HL)_2(OH)_2(H_2O)_8]^{2+}$.

Таблица 1. Экспериментальные значения угловых коэффициентов зависимостей ЭДС от концентрационных переменных системы Fe(0)-Fe(II)-глицин-вода при температуре 298.15 К; I=0.5; $C_{Fe(II)}=1 \cdot 10^{-4}$ и $C_{Gly}=3 \cdot 10^{-3}$ моль/л.

Table 1. Experimental values of the angular coefficients of the dependences of EMF on concentration variables of the Fe(0)-Fe(II)-glycine-water system at a temperature of 298.15 K; I=0.5; $C_{Fe(II)}=1 \cdot 10^{-4}$ and $C_{Gly}=3 \cdot 10^{-3}$ mol/l.

№ п/п	Зависимость ЭДС от концентрационных параметров			Состав комплексов
	pH	pC _{ox}	pC _L	
1	0	-	-	$[Fe(H_2O)_6]^{2+}$
2	-v/2	-v/2	-	$[Fe(OH)(H_2O)_5]^+$
3	-v/2	-v/2	v/2	$[FeHL(H_2O)_5]^{2+}$
4	-v	-v/2	-	$[Fe(OH)_2(H_2O)_4]^0$
5	-v	-v/2	v	$[Fe(HL)(OH)(H_2O)_4]^+$
6	-2v	-v/2	v	$[Fe_2(HL)_2(OH)_2(H_2O)_8]^{2+}$

Расчет равновесия гидроксильного комплексообразования с помощью окислительной функции предусматривает учет всех возможных равновесий и составление стехиометрической матрицы, образующихся форм. Общее уравнение теоретической окислительной функции имеет следующий вид:

$$f_T^o = \frac{C_r}{C_o} \cdot 1 / \left\{ \sum_1^q \sum_0^s \sum_0^l \sum_0^k q \beta_{qslk}^q G_{qslk}^q [H_s L^{n-}]^{\frac{1}{q}} h^{\frac{-k}{q}} [M^{(z-e)+}]^{\frac{1}{q}} \right\} \quad (3)$$

Для вывода общего уравнения окислительной функции изученной системы на основании образующихся комплексных форм (табл. 1) была составлена стехиометрическая матрица которая приведена в табл. 2.

Таблица 2. Химическая модель равновесий системы Fe(0)-Fe(II)-глицин-вода при температуре 298.15 К; I=0.5; $C_{Fe(II)}=1 \cdot 10^{-4}$ и $C_{Gly}=3 \cdot 10^{-3}$ моль/л.

Table 2. Chemical equilibrium model of the Fe(0)-Fe(II)-glycine-water system at a temperature of 298.15 K; I=0.5; $C_{Fe(II)}=1 \cdot 10^{-4}$ and $C_{Gly}=3 \cdot 10^{-3}$ mol/l.

Fe ²⁺ q	H ⁺ s	L ⁻ l	OH ⁻ k	Состав комплексов	β_{qslk}	Фрагменты урав. окисл. потенциала системы
1	0	0	1	$[Fe(OH)(H_2O)_5]^+$	β_{1001}	$v \lg(h^3 + \beta_{1001} h^2)$
1	1	1	0	$[FeHL(H_2O)_5]^{2+}$	β_{1110}	$v \lg(h^3 + \beta_{1110} K_1 C_{a1} h^2)$
1	1	1	1	$[Fe(HL)(OH)(H_2O)_4]^+$	β_{1111}	$v \lg(h^3 + \beta_{1111} K_1 C_{a1} h)$
2	2	2	2	$[Fe_2(HL)_2(OH)_2(H_2O)_8]^{2+}$	β_{2222}	$v \lg(h^3 + 2\beta_{2222}^{1/2})$

						$G_{2222}^{1/2} K_1 C_{a1h}$
1	0	0	2	$[\text{Fe}(\text{OH})_2(\text{H}_2\text{O})_4]^0$	β_{1002}	$v \lg(h^3 + \beta_{1002}h)$

Таким образом, подставляя в уравнении (3) вместо q , s , l и k их численные значения из таблицы 2, получим соответствующее выражение в виде общего уравнения окислительной функции, которая приведена ниже в виде расчетной функции по программе Excel:

$$=10000/(\text{СУММПРОИЗВ}(D9+\$H\$847*\$K\$837*C9+\$S\$847*\$K\$837*B9+2*\text{КОРЕНЬ}(\$Y\$847)*\text{КОРЕНЬ}(H879)*\$K\$837*B9+\$O\$847*B9+\$L\$847*C9)/D9) \quad (4)$$

Уравнение (4) является основным выражением для теоретического расчета констант образования и областей доминирования гидролизных форм. Истинные значения констант вычисляются методом итерации приближения теоретической окислительной функции к экспериментальной кривой. Экспериментальная окислительная функция вычисляется из значений окислительного потенциала измеренных на оксрелметрической установке согласно следующему выражению:

$$f_3^0 = C_r / C_o \exp(E - E^0) n / \nu \quad (5)$$

В уравнении (5) приняты следующие обозначения: f_3^0 – экспериментальная окислительная функция; E – экспериментально измеренное значение ЭДС, E^0 – значение стандартного ЭДС, n – число электронов, участвующих в окислительно-восстановительной реакции, а $\nu = 2.303 RT/F$. Остальные обозначения те же, что и в уравнении (3).

Значения экспериментальной окислительной функции, вычисленные согласно уравнению (5), позволили построить графики зависимости окислительной функции f_3^0 от pH, а по выражению (4) были построены графики зависимости теоретической окислительной функции от pH, которые приведены на рис 4. Так как значения f_3^0 и f_T^0 имеют число с десятичным основанием, поэтому эти зависимости представлены в виде логарифмической зависимости.

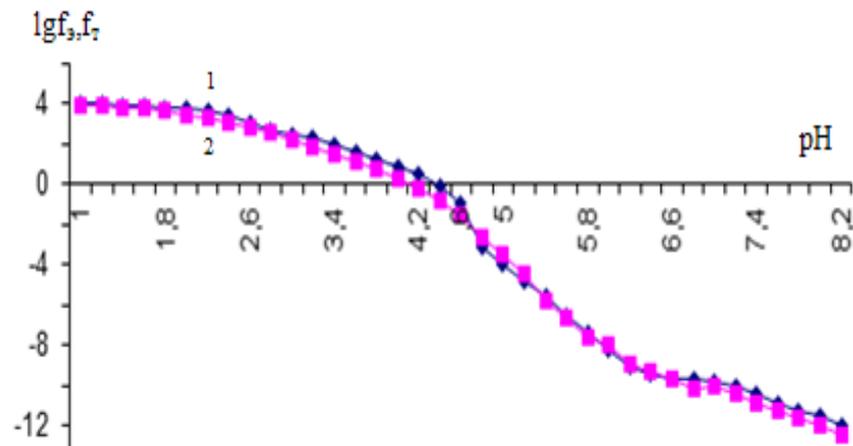


Рис. 4. Зависимости логарифмических значений экспериментальной - f_3 (1) и теоретической - f_T (2) окислительной функций от pH в системе Fe(0)-Fe(II)-глицин-вода при температуре 298.15 К; $I=0.5$; $C_{\text{Fe(II)}}=1 \cdot 10^{-4}$ и $C_{\text{Gly}}=3 \cdot 10^{-3}$ моль/л.

Fig.4. Dependences of the logarithmic values of the experimental - f_e (1) and theoretical - f_m (2) oxidation functions on pH in the Fe(0)-Fe(II)-glycine-water system at a temperature of 298.15 K; $I=0.5$; $C_{\text{Fe(II)}}=1 \cdot 10^{-4}$ and $C_{\text{Gly}}=3 \cdot 10^{-3}$ mol/l.

При максимальном приближении кривых зависимости f_3^0 и f_T^0 от pH, находятся истинные значения констант образования, которые представлены в таблицах модельных параметров (табл. 3 и 4). Все расчеты и статистическая обработка данных проводились на компьютере по программе Excel [15].

Таблица 3. Модельные параметры координационных соединений системы Fe(0)-Fe(II)-глицин-вода от pH при температуре 298.15 К; $I=0.5$; $C_{\text{Fe(II)}}=1 \cdot 10^{-4}$ и $C_{\text{Gly}}=3 \cdot 10^{-3}$ моль/л.

Table 3. Model parameters of coordination compounds of the Fe(0)-Fe(II)-glycine-water system as a function of pH at temperature: 298.15 K; I=0.5; $C_{\text{Fe(II)}}=1 \cdot 10^{-4}$ and $C_{\text{Gly}}=3 \cdot 10^{-3}$ mol/L.

№ п/п	Обл. существ. компл. по шкале pH	Состав комплексов	Максим. степень накопл., α , %	pH	lg констан. образ. ($\lg \beta_{qstк}$)
1	1.0-3.6	$[\text{Fe}(\text{OH})(\text{H}_2\text{O})_5]^+$	7.48	2.0	-2.46±0.05
2	1.0-4.2	$[\text{FeHL}(\text{H}_2\text{O})_5]^{2+}$	54.3	2.0	3.32±0.04
3	1.2-4.6	$[\text{Fe}(\text{HL})(\text{OH})(\text{H}_2\text{O})_4]^+$	85.1	3.6	0.78±0.08
4	2.2-4.4	$[\text{Fe}(\text{OH})_2(\text{H}_2\text{O})_4]^0$	4.95	3.6	-5.37±0.07
5	3.8-8.2	$[\text{Fe}_2(\text{HL})_2(\text{OH})_2(\text{H}_2\text{O})_8]^{2+}$	100.0	5.6	10.99±0.06

Вычисления заканчиваются определением конечного варианта мольных долей (степеней накопления) комплексных форм и построением кривой их распределения (рис. 5).

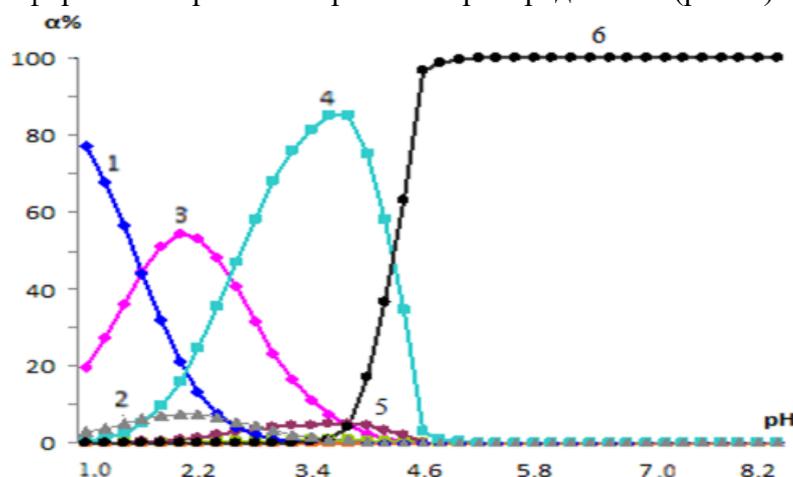


Рис. 5. Массовая доля свободных ионов Fe(II) и его гидроксоформ в системе Fe(0)-Fe(II)-глицин-вода при 298.15 K; I=0.5 моль/л.

Кривые относятся к: 1 - $[\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$; 2 - $[\text{Fe}(\text{OH})(\text{H}_2\text{O})_5]^+$; 3 - $[\text{FeHL}(\text{H}_2\text{O})_5]^{2+}$; 4 - $[\text{Fe}(\text{HL})(\text{OH})(\text{H}_2\text{O})_4]^+$; 5 - $[\text{Fe}(\text{OH})_2(\text{H}_2\text{O})_4]^0$; 6 - $[\text{Fe}_2(\text{HL})_2(\text{OH})_2(\text{H}_2\text{O})_8]^{2+}$

Fig. 5. Mass fraction of free Fe(II) ions and its hydroxoforms in the Fe(0)-Fe(II)-glycine-water system at 298.15 K; I=0.5 mol/L. Curves refer to: 1 - $[\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$; 2 - $[\text{Fe}(\text{OH})(\text{H}_2\text{O})_5]^+$; 3 - $[\text{FeHL}(\text{H}_2\text{O})_5]^{2+}$; 4 - $[\text{Fe}(\text{HL})(\text{OH})(\text{H}_2\text{O})_4]^+$; 5 - $[\text{Fe}(\text{OH})_2(\text{H}_2\text{O})_4]^0$; 6 - $[\text{Fe}_2(\text{HL})_2(\text{OH})_2(\text{H}_2\text{O})_8]^{2+}$

Вычисленные равновесные концентрации свободных и связанных гидроксокомплексов ионов железа(II) представлены на рис. 5 в виде зависимости α от pH. Из приведенной диаграммы видно, что по мере увеличения pH ионы железа постепенно связываются в более сложные по составу и устойчивости соединения.

Точность расчетов можно проследить из практического совпадения зависимостей экспериментальной и теоретической окислительных функций в выбранном интервале pH (рис. 4). Совпадение теоретической и экспериментальной окислительных функций считается удовлетворительным, если они находятся в пределах погрешности оксидометрических измерений, т.е. не превышающих $\pm 1-3$ mV. Удовлетворительное совпадение экспериментальной и теоретической кривой свидетельствует о том, что состав гидроксокомплексов в изученной системе установлен достаточно точно.

Наибольший научный интерес представляют исследования поведения и механизмов образования гидроксокомплексов. В нашей работе установлены зависимости содержания различных гидроксокомплексов в определенной среде. Так, определено, что в изученном интервале pH максимальное содержание гидроксокомплексов различно.

ВЫВОДЫ

Полученные экспериментальные результаты показывают, что в изученной системе при указанных температуре, ионной силе раствора и концентрационных параметрах на перхлоратном фоне образуются координационные соединения следующего состава: $[\text{Fe}(\text{OH})(\text{H}_2\text{O})_5]^+$; $[\text{FeHL}(\text{H}_2\text{O})_5]^{2+}$; $[\text{Fe}(\text{HL})(\text{OH})(\text{H}_2\text{O})_4]^+$; $[\text{Fe}(\text{OH})_2(\text{H}_2\text{O})_4]^0$ и $[\text{Fe}_2(\text{HL})_2(\text{OH})_2(\text{H}_2\text{O})_8]^{2+}$.

Первый комплекс двухвалентного железа $[\text{Fe}(\text{OH})(\text{H}_2\text{O})_5]^+$ начинает формироваться в кислой области и существует в интервале рН от 1.0 до 3.6.

Комплекс $[\text{Fe}(\text{OH})_2(\text{H}_2\text{O})_4]^0$ существует в интервале рН от 2.2 до 4.4. Из всех образующихся координационных соединений её константа образования минимальная ($\lg\beta_{1002} = -5.37 \pm 0.07$), а максимальная степень накопления составляет всего 4.95 %, поэтому при выделении этого комплекса из раствора в твердом виде выход продукта будет незначительным.

Комплекс состав $[\text{Fe}(\text{HL})(\text{OH})(\text{H}_2\text{O})_4]^+$, к центральному иону комплексообразователю присоединяется один лиганд. Область существования от рН 1.2-4.6 (3.4 единиц рН), константа его образования $\lg\beta_{1111} = 0.78 \pm 0.08$, максимальная его степень накопления составляет 85.1 % при рН 3.6. При таких параметрах вести направленный синтез такого комплекса неэффективно, так как практический выход будет также незначительным.

Последний комплекс имеет состав $[\text{Fe}_2(\text{HL})_2(\text{OH})_2(\text{H}_2\text{O})_8]^{2+}$, к центральному иону комплексообразователю присоединяется два лиганда. Он также имеет очень продолжительную область существования от рН 3.8-8.2 (4.6 единиц рН), константа его образования $\lg\beta_{2222} = 10.99 \pm 0.06$, он относительно более прочен, чем другие комплексы, так как при присоединении двух лигандов вероятность образования прочных координационных соединений хелатного типа возрастает. Максимальная его степень накопления незначительная и составляет 100 % при рН 5.6. Это соединение удастся выделить в твердом состоянии.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

**Рецензент: Суяриён К.Дж.,
кандидат химических наук,
доцент**

ЛИТЕРАТУРА

1. Рахимова М. Процессы образования гидроксокомплексов железа в различных средах / М. Рахимова, Э.Ф. Файзуллоев, М.У. Бобоев, М.А. Исмаилова // Монография. - Германия. «LAPLAMBERT», 2017. – 145 с.
2. Соколовский А.Е., Гидроксо комплексо образование в системе $\text{Fe}^{3+}\text{-Hg}^{2+}\text{-NO}_3^-\text{-H}_2\text{O}$ / А.Е. Соколовский, Е.В. Радион, Н.В. Назаренко // Журнал прикладной химии. 2002. Т. 75. № 11. - С. 1780-1783.
3. Соколовский А.Е. Гидроксокомплексообразование в системе $\text{Fe}^{3+}\text{-Co}^{2+}\text{-NO}_3^-\text{-H}_2\text{O}$. Труды БГТУ. Сер. 2, Химия и технология неорганических веществ. 2021. № 1 (241). – С.35-39. <https://doi.org/10.52065/2520-2669-2021-241-1-35-39>
4. Давыдов Ю.П. Формы нахождения металл – ионов (радионуклидов) в растворе / Ю.П.Давыдов, Д. Ю. Давыдов // Монография. Минск: Беларуская навука, 2011. – С.302.
5. Файзуллоев Э.Ф. Гидроксильное комплексообразование Fe(III) в растворах различного состава. / Э.Ф. Файзуллоев М.М. Рахимова, М.А. Исмаилова, Х.Ч. Камилов // Вестник ТНУ. Серия естественных наук. 1/4(153). – Душанбе: Сино, 2014. – С.76 - 81.
6. Davlatshoeva J.A. / J.A. Davlatshoeva, G.B. Eshova, M. Rahimova, M.O. Guriev, L.V. Kvyatkovskaya // American Journal of Chemistry. 2017.7(2). – С.58 - 65.
7. Rakhimova M. Formation of glycinate complexes of iron(II) in solutions of different ionic strengths / M. Rakhimova, G.B. Eshova, D.A. Davlatshoeva, L.V. Kvyatkovskaya, F. Miraminzoda // Russ. J. Phys. Chem. 2020, 94. – С. 1560-1564.
8. Корякин Ю.В. Чистые химические реактивы / Ю.В. Корякин // - М.: Химия, 1974. – 406 с.
9. Сусленникова В.М. Руководство по приготовлению титрованных растворов / В.М. Сусленникова, Е.К. Киселева // - Л.: Химия, 1968. – С.144.
10. Шарло Г. Методы аналитической химии. Количественный анализ неорганических соединений / Г. Шарло // - М.: Химия, 1965. – 930 с.

11. Якубов Х.М. Применение окредметрии к изучению комплексообразования / Х.М. Якубов // - Душанбе, 1966. –121 с.
12. Пат. ТЈ 626 (Заявка № 1300789 от 19.06.2013). Бюл. № 97. 27.07. 2014.
13. Захарьевский М.С. / М.С. Захарьевский, Л. Окредметрия // Химия,- 1968. – 118 с..
14. Никольский Б.П. / Б.П. Никольский, Л. Окредметрия // Химия, -1975. –304 с.
15. Уокенбах Д. Формулы в Excel 2013 / Д. Уокенбах // - М.: Диалектика, 2019 – 720 с.

REFERENCES

1. Rakhimova M. Processes of formation of iron hydroxo complexes in various media / M. Rakhimova, E.F. Faizulloev, M.U. Boboev, M.A. Ismailova // Monograph. – Germany: “LAPLAMBERT”, 2017. – 145 p.
2. Sokolovsky A.E. Hydroxo complex formation in the Fe³⁺-Hg²⁺-NO₃--H₂O system / A.E. Sokolovsky, E.V. Radion, N.V. Nazarenko // Journal of Applied Chemistry. 2002. - T. 75. No. 11. – Pp.1780-1783.
3. Sokolovsky A.E. Hydroxocomplexation in the Fe³⁺-Co²⁺-NO₃--H₂O system. Proceedings of BSTU. Ser. 2, Chemistry and technology of inorganic substances. 2021. No. 1 (241). – Pp.35-39 <https://doi.org/10.52065/2520-2669-2021-241-1-35-39>
4. Davydov Yu.P. Forms of presence of metal ions (radionuclides) in solution / Yu.P. Davydov, D. Yu. Davydov // Monograph. Minsk: Belaruskaya Nauka, 2011. – P.302.
5. Faizulloev E.F., Hydroxyl complexation of Fe (III) in solutions of various compositions. / E.F. Faizulloev, M.M. Rakhimova, M.A. Ismoilova, Kh.Ch. Kamilov // Bulletin of TNU. Series Natural Sciences. 1/4(153). – Dushanbe: Sino, 2014. – Pp.76 - 81.
6. Davlatshoeva J.A. /J.A. Davlatshoeva, G.B. Eshova, M. Rahimova, M.O. Guriev, L.V. Kvyatkovskaya // American Journal of Chemistry. 2017.7(2). – Pp.58- 65.
7. Rakhimova M. Formation of glycinate complexes of iron(II) in solutions of different ionic strengths / M. Rakhimova, G.B. Eshova, D.A. Davlatshoeva, L.V. Kvyatkovskaya, F. Miraminzoda // Russ. J. Phys. Chem. 2020, 94. – Pp. 1560-1564.
8. Koryakin Yu.V. Pure chemical reagents / Yu.V. Koryakin //M.: Chemistry, 1974. –406 p.
9. Suslennikova V.M., Kiseleva E.K. Guide to the preparation of titrated solutions / V.M. Suslennikova, E.K. Kiseleva // - L.: Chemistry, 1968. –144 p.
10. Charlot G. Methods of analytical chemistry. Quantitative analysis of inorganic compounds / G. Charlot // - M.: Chemistry, 1965. – 930 p.
11. Yakubov Kh.M. Application of oxometry to the study of complex formation / Kh.M. Yakubov // - Dushanbe, 1966. –121 p.
12. Пат. ТЈ 626 (Application No. 1300789 dated June 19, 2013). Bull. No. 97. 27.07. 2014.
13. Zakharyevsky M.S. / M.S. Zakharyevsky, L. Oxedometer measurements // - Chemistry, 1968. –118 p.
14. Nikolsky B.P. / B.P. Nikolsky, L. Oxredmetry // Chemistry, 1975. – 304 p.
15. Walkenbach D. Formulas in Excel 2013 / D. Walkenbach // - M.: Dialectics, 2019. – 720 p.

ҲОСИЛШАВИИ ГИДРОКСОКОМПЛЕКСҲОИ Fe(II) ДАР МАҲЛУЛҲОИ ОБӢ

Ҳосилшавии гидроксокомплексҳо дар системаи Fe(0)-Fe(II)-глицин-об аз pH дар I=0.5 молл/л, дар ҳарорати 298,15 К, $C_{Fe(II)}=1 \cdot 10^{-4}$ ва $C_{Gly}=3 \cdot 10^{-3}$ бо усули потенциали оксидонии Кларк-Николский омӯхта шуд. Качхаттаҳои таҷрибавии вобастагии ҚЭХ-и система аз консентратсияи ионҳои гидроген, оҳани (II) ва глицин: pH, pC_{Ox} , pC_L ба даст оварда шуданд. Онҳо имкон доданд, ки равандҳои комплексҳои ҳосилшавӣ дар системаи омӯхташуда дар ҳудуди васеи pH аз 1.0 то 8.2 зинагӣ гузаранд. Намуд ва шумораи лигандҳои координатсияшуда, таркиби умумии пайвастаҳои комплекси ҳосилшуда муайян карда шуданд. Моделҳои химиявии реаксияҳои ҳосилшавии комплексҳо ва параметрҳои модели пайвастаҳои координатсионӣ тартиб дода шудаанд. Қиматҳои коэффисиентҳои кунҷӣ, ҳудуди афзалият ва константаи ҳосилшавии комплексҳо муайян карда шуданд. Ҳосилшавии пайвастаҳои координатсионии $[Fe(OH)(H_2O)_5]^+$; $[FeHL(H_2O)_5]^{2+}$; $[Fe(HL)(OH)(H_2O)_4]^+$; $[Fe(OH)_2(H_2O)_4]^0$ ва $[Fe_2(HL)_2(OH)_2(H_2O)_8]^{2+}$ нишон дода шудааст.

Калидвожаҳо: ҚЭХ, комплекс, оҳани (II), глицин, модел, кувваи ионӣ, функцияи оксидонӣ, итератсия.

ОБРАЗОВАНИЕ ГИДРОКСИЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ Fe(II) В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ

Образование гидроксильных комплексов в системе Fe(0)-Fe(II)-глицин-вода от pH при I=0.5 моль/л, температуре 298.15 К, $C_{Fe(II)}=1 \cdot 10^{-4}$ и $C_{Gly}=3 \cdot 10^{-3}$ моль/л изучено методом окислительного потенциала Кларка – Никольского. Получены экспериментальные кривые зависимостей ЭДС системы от показателей концентраций ионов водорода, железа(II) и глицин: pH, pC_{Ox} , pC_L , соответственно. Они позволили установить, что процессы комплексообразования в изученной системе протекают ступенчато в широком интервале pH от 1.0 до 8.2. Определены вид и число координированных лигандов, общий состав образующихся комплексных соединений. Составлены химические модели реакций образования комплексов и модельные параметры координационных соединений. Определены значения угловых коэффициентов, области доминирования и константы образования комплексов. Показано образование следующих координационных соединений $[Fe(OH)(H_2O)_5]^+$; $[FeHL(H_2O)_5]^{2+}$; $[Fe(HL)(OH)(H_2O)_4]^+$; $[Fe(OH)_2(H_2O)_4]^0$ и $[Fe_2(HL)_2(OH)_2(H_2O)_8]^{2+}$.

Ключевые слова: ЭДС, комплекс, железо(II), глицин, модель, ионная сила, окислительная функция, итерация.

FORMATION OF Fe(II) HYDROXYL COMPLEXES IN AQUEOUS SOLUTIONS

Formation of hydroxyl complexes in the Fe(0)-Fe(II)-glycine-water system from pH at $I=0.5$ mol/l, temperature 298.15 K, $C_{\text{Fe(II)}}=1 \cdot 10^{-4}$ and $C_{\text{Gly}}=3 \cdot 10^{-3}$ mol/l were studied by the Clark–Nikolsky oxidative potential method. Experimental curves of the dependence of the EMF of the system on the concentrations of hydrogen, iron(II) and glycine ions: pH, pC_{ox} , pC_{L} , respectively, are obtained. They allowed us to establish that the processes of complexation in the studied system proceed stepwise in a wide pH range from 1.0 to 8.2. The type and number of coordinated ligands and the total composition of the complex compounds formed were determined. Chemical models of complex formation reactions and model parameters of coordination compounds have been compiled. The values of the angular coefficients, the domain of dominance and the constants of the formation of complexes are determined. The formation of the following coordination compounds is shown: $[\text{Fe}(\text{OH})(\text{H}_2\text{O})_5]^+$; $[\text{FeHL}(\text{H}_2\text{O})_5]^{2+}$; $[\text{Fe}(\text{HL})(\text{OH})(\text{H}_2\text{O})_4]^+$; $[\text{Fe}(\text{OH})_2(\text{H}_2\text{O})_4]^0$ and $[\text{Fe}_2(\text{HL})_2(\text{OH})_2(\text{H}_2\text{O})_8]^{2+}$.

Keywords: EMF, complex, iron (II), glycine, model, ionic strength, oxidative function, iteration.

Маълумот дар бораи муаллифони: Эшова Гулрухсор Бобоназаровна – Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, номзади илмҳои химия, ходими калони илмӣ. **Суроға:** 734025, ш. Душанбе, Ҷумҳурии Тоҷикистон, хиёбони Рудаки, 17. **Телефон:** (+992)918-23-01-82. **E-mail:** eshova81@mail.ru.

Давлатшоева Чахонгул Асанхоновна - Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, номзади илмҳои химия, дотсенти кафедраи химияи физикӣ ва коллоидӣ. **Суроға:** 734025, ш. Душанбе, Ҷумҳурии Тоҷикистон, хиёбони Рудаки, 17. **Телефон:** (+992) 938-98-96-62. **E-mail:** kfk@mail.ru.

Раҳимова Мубаширхон – Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, доктори илмҳои химия, профессор, **Суроға:** 734025, ш. Душанбе, Ҷумҳурии Тоҷикистон, хиёбони Рудаки, 17. **E-mail:** muboshira09@mail.ru. **Тел:** (+992) 918-76-90-70.

Мираминзода Фарида – Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, ходими илмӣ. **Суроға:** 734025, ш. Душанбе, Ҷумҳурии Тоҷикистон, хиёбони Рудаки, 17. **Телефон:** (+992) 987-27-18-93. **E-mail:** miraminzoda@mail.ru

Сведение об авторах: Эшова Гулрухсор Бобоназаровна – Таджикский национальный университет, кандидат химических наук, старший научный сотрудник. **Адрес:** 734025, г. Душанбе, Республика Таджикистан, проспект Рудаки, 17. **Телефон:** (+992) 918-23-01-82. **E-mail:** eshova81@mail.ru

Давлатшоева Джахонгул Асанхоновна - Таджикский национальный университет, кандидат химических наук, доцент кафедры физической и коллоидной химии. **Адрес:** 734025, г. Душанбе, Республика Таджикистан, проспект Рудаки, 17. **Телефон:** (+992) 938-98-96-62. **E-mail:** kfk@mail.ru.

Раҳимова Мубаширхон - Таджикский национальный университет, доктор химических наук, профессор. **Адрес:** 734025, г. Душанбе, Республика Таджикистан, проспект Рудаки, 17. **Телефон:** (+992) 918-76-90-70. **E-mail:** muboshira09@mail.ru

Мираминзода Фарида - Таджикский национальный университет, научный сотрудник. **Адрес:** 734025, г. Душанбе, Республика Таджикистан, проспект Рудаки, 17. **Телефон:** (+992) 987-27-18-93. **E-mail:** miraminzoda@mail.ru

Information about the authors: Eshova Chaykhana Bobonazarovna - Tajik National University, Candidate of Chemical Sciences, senior researcher. **Address:** 734025, Dushanbe Republic of Tajikistan, Rudaki Avenue, 17. **Phone:** (+992) 918-23-01-82. **E-mail:** eshova81@mail.ru.

Davlatshoeva Jahonul Asankhonovna - Tajik National University, Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor of the Department of Physical and Colloidal Chemistry. **Address:** 734025, Dushanbe Republic of Tajikistan, Rudaki Avenue, 17. **Phone:** (+992) 938-98-96-62. **E-mail:** kfk@mail.ru

Rakhimova Mubashirkhan -Tajik National University, Doctor of Chemical Sciences, Professor. **Address:** 734025, Dushanbe Republic of Tajikistan, Rudaki Avenue, 17. **Phone:** (+992) 918-76-90-70. **E-mail:** muboshira09@mail.ru

Miraminzoda Farida - Tajik National University, scientific Centurion. **Address:** 734025, Dushanbe Republic of Tajikistan, Rudaki Avenue, 17. **Phone:** (+992) 987-27-18-93. **E-mail:** miraminzoda@mail.ru

Статья поступила в редакцию 11.10.2023
Одобрена после рецензирования 06.01.024
Принята к публикации 8.03.2024

ИСТИФОДАИ ПАРТОВҲОИ БСК-И БАЪДИ ТАҶЗИЯИ КИСЛОТАГӢ БАРОИ ПАЙДОШАВИИ ҲОСИЯТИ ВАСЕЪШАВАНДАГИИ СЕМЕНТ

Раҷабов Ш.Х.

Донишгоҳи миллии Тоҷикистон

Муқаддима. Семент маводи табиӣ ба шумор намеравад. Ҳосил кардани он раванди серхарочот ва энергияталаб бошадҳам, вале аз натиҷааш як маводи маъмули сохтмонӣ ба даст меоранд, ки ҳам дар алоҳидагӣ ва ҳам ба сифати як компоненти таркибии дигар масолах сохтмонӣ (масалан, андовагарӣ, бетонрезӣ ва оҳанубетонӣ) истифода бурда мешавад. [1, с. 102].

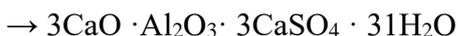
Истеҳсоли семент ду зиннаи асосиро дар бар мегирад: якум – ҳосилкунии клинкер, дуюм – мубаддалкунии клинкер то ҳолати гардшакл ва бо илова кардани гач ё дигар иловаҳо ба он мебошад. Барои ҳосилкунии клинкери семент зарур аст, ки ҳисобҳои назариявии таркиби омехтаи ашёвӣ гузаронида шаванд. Яъне маҳз зиннаи якум истеҳсолот серхарочот ба шумор рафта, ба он тахминан то 70% -и арзиши аслии маҳсулот рост меояд [2, с. 52].

Дар замони муосир масъалаи ҳосилкунии семент аз партовҳои техногенӣ, маҳсулотҳои ҳамроҳии саноати истеҳсолӣ ва ё манбаъҳои дуҷумдараҷаи минералӣ, ки дар мақолаи мазкур мавриди таҳқиқу омӯзиш қарор дода шудааст, актуалӣ ба шумор меравад [3, с. 28].

Мақсади таҳқиқоти гузаронидаи мо пасткардани арзиши аслии клинкери сементи омодагашта аз ҳисоби кам кардани миқдори иловаҳои қимматарзиш, инчунин афзоиши ҳосияти фаъолнокии клинкер ва ҳосилкунии сементи ҳосияти васеъшавидошта мебошад [4, с. 101].

Мавод ва усули таҳқиқот. Ҳангоми татбиқи технологияи нави таҷзияи кислотагии партовҳои саҳти истеҳсоли алюминий бо мақсади ҳосилсозии гилхок ва дигар намакҳои фтордор аз он ҳаҷми калони боқимондаи саҳти сулфати калсийдошта (БСК – боқимондаи сулфати калтсийдор) ҳамчун партов боқӣ мемонад. Истифодабарии ин гуна боқимонда партовӣ дар истеҳсоли семент на танҳо аз ҷиҳати иқтисодӣ технологияи оқилона ба шумор рафта, балки як роҳи ҳалли проблемаи экологии зимни ҷамшавии партовҳои истеҳсоли алюминий баамаломада мебошад [5, с. 11].

Бисёре аз маводҳои часпанда зимни саҳтшавӣ сатҳи фурӯҳамидагӣ пайдо мекунанд. Ин ҳолати бавучудомадаро бо роҳи истифодабарии сементҳои васеъшаванда, ки шумораашон тахминан 48 намудро ташкил медиҳад, бо хубӣ баромадан мумкин аст. Дар аксарияти ҳолатҳо васеъшавӣ зимни саҳтшавии санги сементи бо ташкилҳои гидросулфоалюминати калтсий (ГСАК) фаҳмонида мешавад, ки ҳаҷмаш хело аз ҳаҷми маводҳои аввалаи маҳсулоти реаксия зиёд аст [6, с. 97]. Ҳосилшавии ГСАК дар системае, ки алюминати калтсий дорад (пайваста бо формулаи умумии $n\text{CaO} \cdot m\text{Al}_2\text{O}_3$) ва CaSO_4 дар иштироки об ба амал меояд. Чунин моддаҳо алалхусус дар таркиби портландсемент низ вомехӯранд [7, с. 3]. Ҳангоми гидрататсияи портландсемент ГСАК бо гузариши реаксияи зерин ба амал меояд:



Миқдори ГСАК дар таркиби сементи оддӣ барои васеъшавӣ нокифоя мебошад. Барои он ки онро ҳосил кунем бояд ба таркиби семент иловаи васеъкунанда дар худ компонентҳои миқдорашон нокифояи (калсий – CaO , алюминати – Al_2O_3 ва сулфатӣ – CaSO_4) бо миқдори зарурӣ ва таносуби муайян илова карда шавад. Иловаи васеъкунандаро бо роҳҳои гуногун ҳосил мекунанд. Ба сифати компоненти таркибии сулфати калтсий CaSO_4 , оддатан гачсанги табиӣ, ягон намуди ангидрит ва ё маҳсулотҳои дуҷумдараҷаи баъзе аз истеҳсолотҳоро мегиранд [8, с. 845].

Бо роҳи пухтани омехтаи аз се ашё иборат ёфта (гил, оҳаксанг ва гачсанг) маҳсулоте ба даст меоранд, ки аз сулфоалюминати калтсий ($3\text{CaO} \cdot 3\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{CaSO}_4$) иборат мебошад.

Дар асоси он метавон ҳамчунон иловаи васеъшаванда ва ҳам сементи васеъшаванда ҳосил кунанд. Аксар вақт иловаро ба омехтаи ашёвӣ бо мақсади ҳосилкунии клинкери сементи васеъшаванда истифода мебаранд. Дар вобастагӣ аз дараҷаи васеъшавӣ, сементҳоро ба навъи *бефурӯҳамидагӣ*, *васеъшаванда* ва *сахт* (шиддатнок) тақсим мекунанд. Навъи охиринаш аз ҳама энергияи калони васеъшавӣ дошта, метавонад арматурро ба худ кашида ба бетон шиддати иловагӣ бахшад [9, с. 45].

Нагичаҳо ва муҳокима. Мақсади таҳқиқоти пешниҳодгашта – усули ҳосилкунии клинкери семент бо истифодабарии БСК – партов аз он иборат аст, ки сараввал ҳисобҳои компонентҳои ашёвино гузаронида, омехтаро бо роҳи дар осеб якҷоякунии компонентҳои ашёвӣ омода карда, пухтанро дар кураи даврзананда, хунуккунии клинкер, гардсозӣ ва иловаи гачи фаълкунанда то миқдори 3% мебошад [10, с. 203].

Вазифаи гузошташуда он вақт муяссар мегардад, ки аввал ҳисоби омехтаи ашёвӣ мегузаронанд, ки яке аз шароитҳои муҳим барои ҳосилкунии клинкер бо хусусиятҳои додашуда ба шумор меравад. Ҳисоби омехтаи ашёвӣ дар муайянсозии таносуби байни компонентҳо, таркиби химиявӣ маводҳои ашёвӣ ва хусусиятҳои додашудаи клинкер асоснок карда шудааст [11, с. 47].

Таркиб ва хосияти клинкери портландсемент аз рӯи нишондодҳои зерин муайян карда мешавад:

- таркиби химиявии клинкер;
- нишондоди коэффисенти сершавӣ ва модуло;

Мутобиқи ГОСТ коэффисенти сершавӣ КС (коэффициент насыщения КН) дар фосилаҳои 0,8 – 0,95, модули силикатӣ $n = 1,7 – 3,5$ ва модули гилҳои $p=1,0-3,0$ меҳобанд.

Зимни омодакунии портландсемент (ПС) аз рӯи таҳқиқоти пешниҳодшуда омехтаи ашёвӣ аз се 3 компонент таркиб ёфтааст [12, с. 58]. Ба сифати ашёҳои асосӣ аз оҳаксанг, гили каолинӣ ва БСК – партов истифода намуда, барои танзими суръати сахтшавии он гач илова мекунанд [13, с. 43].

Таркиби химиявии маводҳои ашёвии масрафӣ дар ҷадвали 1., оварда шудааст.

Маводҳои масрафӣ	Таркиби химиявӣ бо, %								Σ
	SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	CaO	MgO	SO ₃	Изофа	Т.з.т	
Оҳаксанг	1,21	0,67	0,49	53,8	1,20	0,22	0,16	42,18	100
Гил	73,6	13,9	4,31	2,65	1,41	0,19	1,28	2,66	100
Партови БСК	0,25	1,26	13,5	32,3	0,55	41,8	1,12	9,19	100

Ҷадвали 1. Таркиби химиявии компонентҳои маводи ашёвии тафсондашуда ва ба 100% расондашуда

Table 1. Chemical composition of the components of the heated material and brought to 100%

Барои иҷрои ҳисоби омехтаи ашёвии секомпонента бояд таркиби химиявии компонентҳои ашёвино донем ва бузургии КС-ро муайян кунем. Ба сифати компонентҳои ашёвии масрафӣ оҳаксанг, гил ва БСК – партовро қабул мекунем [14, с. 101]. Дода шуда аст: КН = 0,92.

$$\begin{aligned}
 a_1 &= C_1 - 2,8 \cdot S_1 \cdot KH - 1,65 \cdot A_1 - 0,35 F_1 \\
 b_1 &= C_2 - 2,8 \cdot S_2 \cdot KH - 1,65 \cdot A_2 - 0,35 F_2 \\
 c_1 &= 2,8 \cdot S_3 \cdot KH + 1,65 \cdot A_3 + 0,35 \cdot F_3 - C_3
 \end{aligned}
 \tag{1}$$

$$\begin{aligned}
 a_1 &= 53,8 - 2,8 \cdot 1,21 \cdot 0,92 - 1,65 \cdot 0,67 - 0,35 \cdot 0,49 = 49,42; \\
 b_1 &= 2,65 - 2,8 \cdot 73,6 \cdot 0,92 - 1,65 \cdot 13,9 - 0,35 \cdot 4,31 = -211,4; \\
 c_1 &= 2,8 \cdot 0,25 \cdot 0,92 + 1,65 \cdot 1,26 + 0,35 \cdot 13,5 - 32,3 = -24,83.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 a_2 &= n (A_1 + F_1) - S_1 \\
 b_2 &= n (A_2 + F_2) - S_2 \\
 c_2 &= S_3 - n (A_3 + F_3).
 \end{aligned}
 \tag{2}$$

$$a_2 = 2,2(0,67+0,49) - 1,21 = 1,34;$$

$$b_2 = 2,2(13,9 + 4,31) - 73,6 = - 33,5;$$

$$c_2 = 0,25 - 2,2 (1,26+13,5) = - 32,2.$$

Таносуби байни компонентҳоро муайян мекунем:

$$x = \frac{c_1 b_2 - c_2 b_1}{a_1 b_2 - a_2 b_1} = \frac{(-24,8) \cdot (-33,5) - (-32,2) \cdot (-211,4)}{49,4 \cdot (-33,5) - 1,34 \cdot (-211,4)} = 4,36$$

$$y = \frac{a_1 c_2 - a_2 c_1}{a_1 b_2 - a_2 b_1} = \frac{49,4 \cdot (-32,2) - 1,34 \cdot (-24,8)}{49,4 \cdot (-33,5) - 1,34 \cdot (-211,4)} = 1,14$$

Аз ин бар меояд, ки дар омехтаи ашёвӣ барои 1 ҳисса боқимондаи сулфат калтсийдор 4,36 ҳисса оҳаксанг ва 1,14 ҳисса гили каолинӣ рост меояд. Бо миқдори фоизӣ ташкил медиҳад:

$$\text{Известняк} = \frac{x \cdot 100}{x + y + 1} = \frac{4,36 \cdot 100}{4,36 + 1,14 + 1} = 67,1\%$$

$$\text{Глина} = \frac{y \cdot 100}{x + y + 1} = \frac{1,14 \cdot 100}{4,36 + 1,14 + 1} = 17,5\%$$

$$\text{Отходы СКО} = \frac{1 \cdot 100}{x + y + 1} = \frac{1 \cdot 100}{4,36 + 1,14 + 1} = 15,4\%$$

Бо ҳамин намуна монанд таркиби химиявии клинкерро ҳисоб намуда, зимни ҳисоби омехтаи ашёвӣ онро пешакӣ ба ҳолати тафсондаи модда меоранд [15, с. 126]. Натиҷаи ҳисоби назариявии таркиби химиявии омехтаи ашёвӣ ва клинкер дар ҷадвали 2., пешниҳод гаштааст.

Ҷадвали 2. Натиҷаи ҳисоби назариявии таркиби химиявии омехтаи ашёвӣ ва клинкер

Table 2. The result of the theoretical calculation of the chemical composition of the mixture of materials and clinker

Маводҳои масрафӣ	Таркиби химиявӣ, %								
	SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	CaO	MgO	SO ₃	Изофа	Т.з.т	Чамъ
Оҳаксанг	0,81	0,45	0,33	36,1	0,81	0,15	0,11	28,3	67,1
Гил	12,9	2,43	0,75	0,46	0,25	0,03	0,22	0,47	17,5
Партови БСК	0,04	0,19	2,08	4,97	0,08	6,44	0,17	1,41	15,4
Омехтаи ашёвӣ	13,8	3,07	3,16	41,5	1,14	6,62	0,5	30,18	100
Клинкер $K = \frac{100}{100 - 30,2} = 1,43$	19,7	4,39	4,52	59,3	1,63	9,47	0,72	-	100

Ҳисоби таркиби химиявии клинкер ҳангоми маълум будани таркиби химиявии омехтаи ашёро ба назардошти нишондоди талафот зимни тафсонидан ТФТ, мегузaronанд ва барои ин бузургии зеринро муайян мекунанд:

$$K = \frac{100}{100 - \text{ПФТ}} = \frac{100}{100 - 30,2} = 1,43,$$

Баъдан онро ба ҳиссаи ҳар як оксидҳои таркиби омехтаи ашё зарб зада меёбем. Пас миқдори ин оксидҳо дар таркиби клинкер бо фоиз чунин аст:

$$\text{CaO} = 1,43 \cdot 41,5 = 59,3\%;$$

$$\text{SiO}_2 = 1,43 \cdot 13,8 = 19,7\%;$$

$$Al_2O_3 = 1,43 \cdot 3,07 = 4,39\%$$

Ба ҳамин монанд таркиби химиявии боқимондари ҳисоб намуда ва таркиби химиявии клинкерро пайдо мекунем бо (%):

SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	CaO	MgO	SO ₃	Изофаҳо
19,7	4,39	4,52	59,3	1,63	9,47	0,72

Модули таркиби клинкерро муайян мекунем:

$$KH = \frac{CaO - (1,65Al_2O_3 + 0,35Fe_2O_3)}{2,8SiO_2}$$

$$KH = \frac{59,1 \cdot (1,65 \cdot 4,39 + 0,35 \cdot 4,52)}{2,8 \cdot 19,7} = 0,92 \quad (6)$$

$$n = \frac{SiO_2}{Al_2O_3 + Fe_2O_3}$$

$$n = \frac{19,7}{4,39 + 4,52} = 2,2 \quad (7)$$

$$p = \frac{Al_2O_3}{Fe_2O_3}$$

$$p = \frac{4,39}{4,52} = 0,97 \quad (8)$$

Мутобиқати бузургии КС (KH), модули силикати n ва модули гилҳои p бо каматҳои додасуда, дурустии ҳисобҳои гузаронидашударо тасдиқ мекунад [16, с. 155].

Дар асоси ҳисобҳои гузаронидашуда таносуби фоизии омехтаи ашёвӣ муайян карда шуданд: оҳаксанг - 67,1%; гил - 17,7%, БСК - партов - 15,4%.

Омехтаи ашёвӣ омодакардашуда бо миқдори 20-30 грамро ба дохили тигели корундии ба оташтобовар ҷойгир намудем. Тигел намунадорро бо сарпӯши аз маводи ба оташтобовар пӯшонда, баъдан ба кураи озмоишгоҳии муфелӣ гузошта зимни ҳарорати 1120-1180⁰С, ба муддати 60 дақиқа нигоҳ доштем. Ҳароратро дар кура ба воситаи термопарай платинагӣ чен мекардем. Баъди нигоҳдории изотермикӣ тигел бо намунаро аз кура бароварда дар шароити озмоишгоҳ хунук менамоем [17, с. 235].

Баъди хунукшавӣ намунаи клинкерро дучори майда ва гардсозӣ намуда, ба маҳсулоти майдашуда то 3% гач илова намуда, нағз омехта сохта баъд сементи васеъшаванда ҳосил мегардад. Аз сементи васеъшавандаи ҳосилкарда кубикҳои намунавӣ бо андозаҳои 50X50X50мм сохта, барои муайянкунии фосилаи мустаҳкамӣ зимни фишурдан ва андозаҳои 40X40X120мм барои муайян кардани мустаҳкамӣ зимни қатъшавӣ санҷиш гузаронида шуд. Таҳлили санҷишии портландсементи ҳосилкардаро дар исқанҷаи гидравликии тамғаи ПСУ-10 гузаронидем. Ҳангоми муайянкунии фосилаи мустаҳкамӣ зимни фишурданро аз нишондоди манометр дар нуқтаи вайроншавӣ намуна P қайд намуда гирифта, ба масоҳати сатҳи поршен S тақсим мекунамд мувофиқи формулаи мазкур:

$$R_{сж} = \frac{P}{S} \text{ кгс/см}^2; \quad (9)$$

Фосилаи мустаҳкамӣ зимни қатъсозии намунаро низ амалан ба намуди муайянкуни зимни фишурдан амалӣ намудем. Фосилаи мустаҳкамӣ зимни қатъсозӣ аз рӯи формулаи зерин ҳисоб мекунам:

$$R_{изг} = \frac{Pl}{bh^2} \text{ кгс/см}^2; \quad (10)$$

ки ин ҷо P – вазнинии вайронкунанда, кгс; l – масофаи байни сутунчаҳо, см; b – паҳноҳии намуна, см; h – ғафсии намуна, см [18, с. 11].

Натиҷаҳои бадастомада тасдиқ месозад, ки иловакунии то 15,4% аз партовҳои БСК хосияти майдашавандагии клинкер ва нишондодҳои мустаҳкамии сементро беҳтар гардонида, зимнан хосияти васеъшавандагии онро дар дараҷаи лозима нигоҳ медорад чадвали 3., [19, с. 263].

Чадвали 3. Натиҷаи санҷиши намунаҳои семент барои мустаҳкамӣ зимни фишурдан ва қатъсозӣ дар исканҷаи гидравликии тамғаи ПСУ-10

Table 3. The result of testing cement samples for strength during compression and termination in a PSU-10 hydraulic clamp.

Номгӯи нишондодҳо	1 ш/р	3 ш/р	7 ш/р	25 ш/р	30 ш/р
Мустаҳкамӣ зимни фишурдан, МПа	27,3	30,1	31,7	47,1	47,4
Мустаҳкамӣ зимни қатъсозӣ, МПа	4,5	5,2	6,3	7,5	7,6

Дар асоси натиҷаи таҳқиқот нақшаи принципалию технологияи истифодабарии партови боқимондаи сульфати калтсийдор ба сифати компоненти ашёвӣ дар истеҳсоли семент дар расми 7 нишон дода шудааст.



Расми 1. Нақшаи принципалию технологияи истифодабарии партови боқимондаи сульфати калтсийдор ба сифати компоненти ашёвӣ дар истеҳсоли семент

Fig. 1. The principle and technological scheme of the use of residual waste containing calcium sulfate as a raw material in the production of cement

Хулоса. Ҳангоми пухтани омехтаи аз 3 ашё таркибёфта (гил, оҳаксанг ва БСК - партов) маҳсулоти сементи васеъшаванда ҳосил мекунад. Истифодабарии БСК – партов дар истеҳсоли семент на танҳо аз ҷиҳати иқтисодӣ технологияи оқилона аст, балки яке аз роҳҳои ҳалли масоили экологии зимни нигоҳдории партовҳо дар истеҳсолоти алюминий низ ба шумор меравад. [20, с. 406].

Барои ин сараввал ҳисоби компонентҳои ашёвиرو гузаронида, бо роҳи майдакунӣ дар осёб омехта омода карда дар кураи даврзананда мепазанд, баъд гард сохта, ба сифати иловаи ғаёлкунада гач бо микдори то 3% илова мекунад.

**Муқарриз: Самиҳов Ш.Р.,
доктори илмҳои техникӣ,
профессор**

АДАБИЁТ

1. Бут Ю. М. Химическая технология вяжущих материалов. – М. / Ю.М. Бут, М.М. Сычев, В.В. Тимашев // Высшая школа, 1980. – С. 472.
2. Волженский А.В. Минеральные вяжущие вещества / А.В. Волженский // – М.: Стройиздат, 1986. – С.463.
3. Лотов В.А. Состав, свойства цементных сырьевых материалов, получение и свойства порландцементного клинкера / В.А. Лотов // Методические указания к лабораторному практикуму и самостоятельной работе по курсу «Технология цемента». – Томск: Изд. ТПУ, 2006. – 32 с.
4. Пальгунов П.П. Утилизация промышленных отходов / П.П. Пальгунов, М.В. Сумароков // -М.: Стройиздат, 1990. – С. 346.
5. Кикава О.Ш. Строительные материалы из отходов производства - «Экология и промышленность России». / Кикава О.Ш. // - 12 - 1997. – С. 23-28.
6. Галевский Г.В. Экология и утилизация отходов в производстве алюминия. / Г.В. Галевский, Н.М. Кулагин, М.Я. Минцис // - М.: Наука, 2005. – С. 272.
7. Кабиров Ш.О. Способ комплексной переработки твердых фторсодержащих отходов производства алюминия. Малый патент на изобретение №515 / Ш.О. Кабиров, Х.С. Сафиев, Н.М. Сирочов, Б.С. Азизов, Х.А. Мирпочаев, Д.Р. Рузиев, Н.П. Мухамедиев, Х.Э. Бобоев, Ш.Х. Раджабов // – Душанбе, 2012.
8. Сафиев Х. Технология получения криолита и фторида алюминия из глинозем-, фторсодержащих отходов производства алюминия / Ш.О. Кабиров, Х.С. Сафиев, Н.М. Сирочов, Б.С. Азизов, Х.А. Мирпочаев, Д.Р. Рузиев, Н.П. Мухамедиев, Х.Э. Бобоев, Ш.Х. Раджабов// ДАН Республики Таджикистан. – Душанбе, 2011. - Т.54. - №10. - С. 845-850.
9. Истомин, С.П. Новые направления в технологии переработки высокодисперсных фторсодержащих отходов производства алюминия. / С.П. Истомин, Б.П. Куриков, С.Г. Мясникова // Цветные металлы. - 1999.- №3. – С.45-47.
10. Сулименко, Л.М. Технология минеральных вяжущих материалов и изделий на их основе: учеб. для вузов. – 4-е изд., перераб. и доп/ Л.М. Сулименко // – М.: Высш. шк. 2005. – С. 334.
11. Яковец Ю.С., Утилизация отходов алюминия / Ю.С. Яковец, А.В. Нифантьева // Юный ученый, 2020. - №11 (41). – С.46-49.
12. Истомин С.П. Исследование флотационного способа получения криолита. / С.П. Истомин, С.Г. Мясникова // Цветные металлы. - 1999.- №3. – С. 56-58.
13. Раков Э.Г. Химия и технология неорганических фторидов/ Раков Э.Г // -М.: Изд-во МХТИ им. Д.И. Менделеева, 1990. – С. 162.
14. Сулименко Л.М. Технологии минеральных вяжущих материалов и изделий на их основе / Л.М. Сулименко // Учеб. для вузов. – 3-е изд., перераб. и доп. – М.: Высш. шк., 2000. – С. 302.
15. Куликов Б.П. Переработка отходов алюминиевого производства. / Б.П. Куликов // Истомин 2-е изд. – Красноярск, 2004. – С. 480.
16. Азизов Б.С., Технология переработки твёрдого остатка, образующегося при сернокислотном разложении глинозём-, фторсодержащих отходов производства алюминия. / Б.С. Азизов, Ш.О. Кабиров, Д. Р.Рузиев, А. Х. Сафиев, Ш.Х. Раджабов // ДАН Республики Таджикистан. – Душанбе, - 2015, т.58, №2. - С.153-160.
17. Раджабов Ш.Х., Применение вторичных твердых отходов после кислотного разложения как активной минеральной добавки. / Ш.Х. Раджабов, А.С. Файзуллоев. // Материалы II Международной научно-практической конференция ТНУ. Современные проблемы химии, применение и их перспективы: Душанбе-14-15 мая 2021 г. - С. 234-242.
18. Раджабов Ш.Х. Применение вторичных твердых отходов после кислотного разложения как активной минеральной добавки. / Ш.Х. Раджабов // Вестник Дангаринского государственного университета. Серия №4 (18) 2022. - С. 6-14.

19. Раджабов Ш.Х. Изучения процесса совместного кислотного разложения флюоритового концентрата и фторсодержащих отходов производства алюминия. // *Материалы международной научно-практической конференции «Использование современных методов обучения в образовательных учреждениях: Проблемы и перспективы», посвященной «2020-2040 годы двадцатилетия изучения естественных, точных и математических наук в сфере науки и образования», «65-летию химического факультета ТНУ» и «55-летию кафедры методики преподавания химии химического факультета ТНУ»*. / Ш.Х. Раджабов // Душанбе 19-20 октября 2023г. - С. 262-269.

20. Раджабов Ш.Х. Применение сульфаткальций содержащих отходов производства алюминия как активной минеральной добавки к портландцементу. // *Материалы международной научно-практической конференции на тему «Развитие естественных, точных и математических наук в настоящее время: проблемы и перспективы.* / Ш.Х. Раджабов // Дангаринский государственный университет 28 – 29 апреля 2023 года: - «Мулквар». - С. 405-410.

REFERENCES

1. But Yu. M. Chemical technology of binders. – M. / Yu.M. Booth, M.M. Sychev, V.V. Timashev // Higher school, 1980. – P. 472.
2. Volzhensky A.V. Mineral binders / A.V. Volzhensky // – M.: Stroyizdat, 1986. – P.463.
3. Lotov V.A. Composition, properties of cement raw materials, production and properties of Portland cement clinker / V.A. Lotov // Guidelines for laboratory workshops and independent work on the course “Cement Technology”. – Tomsk: Publishing house. TPU, 2006. – 32 p.
4. Palgunov P.P. Recycling of industrial waste / P.P. Palgunov, M.V. Sumarokov // -M.: Stroyizdat, 1990. – P. 346.
5. Kikava O.Sh. Construction materials from industrial waste - “Ecology and Industry of Russia”. / Kikava O.Sh. // - 12 - 1997. – Pp.23-28.
6. Galevsky G.V. Ecology and waste disposal in aluminum production. / G.V. Galevsky, N.M. Kulagin, M.Ya. Mintsis // - M.: Nauka, 2005. – P. 272.
7. Kabirov Sh.O. A method for complex processing of solid fluorine-containing waste from aluminum production. Small patent for invention No. 515 / Sh.O. Kabirov, Kh.S. Safiev, N.M. Sirochov, B.S. Azizov, Kh.A. Mirpochaev, D.R. Ruziev, N.P. Mukhamediev, Kh.E. Boboev, Sh.Kh. Radjabov // – Dushanbe, 2012.
8. Safiev Kh. Technology for producing cryolite and aluminum fluoride from alumina- and fluorine-containing waste from aluminum production / Sh.O. Kabirov, Kh.S. Safiev, N.M. Sirochov, B.S. Azizov, Kh.A. Mirpochaev, D.R. Ruziev, N.P. Mukhamediev, Kh.E. Boboev, Sh.Kh. Radzhabov // DAN of the Republic of Tajikistan. – Dushanbe, 2011. - T.54. - No. 10. – Pp.845-850.
9. Istomin, S.P. New directions in the technology of processing highly dispersed fluorine-containing waste from aluminum production. / S.P. Istomin, B.P. Kurikov, S.G. Myasnikova // Non-ferrous metals. - 1999.- No. 3. – Pp.45-47.
10. Sulimenko, L.M. Technology of mineral binding materials and products based on them: textbook. for universities. – 4th ed., revised. and additional / L.M. Sulimenko // – M.: Higher. school 2005. – P. 334.
11. Yakovets Yu.S., Recycling of aluminum waste / Yu.S. Yakovets, A.V. Nifantieva // Young scientist, 2020. - No. 11 (41). – P.46-49.
12. Istomin S.P. Study of the flotation method for producing cryolite. / S.P. Istomin, S.G. Myasnikova // Non-ferrous metals. - 1999.- No. 3. – Pp.56-58.
13. Rakov E.G. Chemistry and technology of inorganic fluorides / Rakov E.G. // -M.: Publishing house MHTI im. DI. Mendeleeva, 1990. – P. 162.
14. Sulimenko L.M. Technologies of mineral binders and products based on them / L.M. Sulimenko // Textbook. for universities. – 3rd ed., revised. and additional – M.: Higher. School, 2000. – P. 302.
15. Kulikov B.P. Recycling of aluminum production waste. / B.P. Kulikov // Istomin 2nd ed. – Krasnoyarsk, 2004. – P. 480.
16. Azizov B.S., Technology for processing the solid residue formed during the sulfuric acid decomposition of alumina- and fluorine-containing waste from aluminum production. / B.S. Azizov, Sh.O. Kabirov, D. R. Ruziev, A. Kh. Safiev, Sh. Kh. Radzhabov // DAN of the Republic of Tajikistan. – Dushanbe, - 2015, vol. 58, No. 2. – Pp.153-160.
17. Rajabov Sh.Kh., Application of secondary solid waste after acid decomposition as an active mineral additive. / Sh.H. Rajabov, A.S. Faizulloev. // Materials of the II International Scientific and Practical Conference of TNU. Modern problems of chemistry, application and their prospects: Dushanbe - May 14-15, 2021. – Pp.234-242.
18. Rajabov Sh.Kh. Application of secondary solid waste after acid decomposition as an active mineral additive. / Sh.H. Rajabov // Bulletin of Dangara State University. Series No. 4 (18) 2022.– Pp.6-14
19. Rajabov Sh.Kh. Studying the process of joint acid decomposition of fluorite concentrate and fluorine-containing waste from aluminum production. // Materials of the international scientific and practical conference “The use of modern teaching methods in educational institutions: Problems and prospects”, dedicated to the “2020-2040 years of the twentieth anniversary of the study of natural, exact and mathematical sciences in the field of science and education”, “65th anniversary of the Faculty of Chemistry of TNU ” and “55th anniversary of the Department of

20. Rajabov Sh.Kh. The use of calcium sulfate containing aluminum production waste as an active mineral additive to Portland cement. // Materials of the international scientific and practical conference on the topic "Development of natural, exact and mathematical sciences in the present time: problems and prospects. / Sh.H. Rajabov // Dangara State University April 28 – 29, 2023: - "Mulkvar". – Pp. 405-410.

ИСТИФОДАИ ПАРТОВҲОИ БСК-И БАЪДИ ТАҶЗИЯИ КИСЛОТАГӢ БАРОИ ПАЙДОШАВИИ ХОСИЯТИ ВАСЕЪШАВАНДАГИИ СЕМЕНТ

Дар замони муосир ҳосилкунии семент аз маҳсулотҳои техногенӣ, ҳамроҳи саноати истеҳсоли ва ё манбаъҳои ашёвӣ дуумдараҷа масъалаи мубрам гардидааст. Ҳангоми таъбиқи технологияи нави таҷзияи кислотагии партовҳои саҳти истеҳсоли алюминий бо мақсади ҳосилкунии гилҳои дуома ва намакҳои фтордор ҳаҷми калони боқимондаи саҳти сулфати калсийдор (БСК) ҳамчун партов ҳосил мегардад. Истифодаи ин боқимондаи партовӣ дар истеҳсоли семент на танҳо аз ҷиҳати иқтисодӣ оқилонаро ғойданок ба шумор рафта, балки як роҳи ҳалли проблемаи экологӣ зимни ҷамъшавии партовҳои истеҳсоли алюминий низ ҳисобида мешаванд. Мақсади асосии таҳқиқот ин пастсозии арзиши аслии клинкери семент аз ҳисоби камсозии микдори иловаҳои қимат ва истифодабарии БСК, ғайр аз он афзудани ғайлоҳои клинкер ва ҳосилсозии сементи васеъшаванда мебошад. Таркиби клинкери пешниҳодшуда ва усули ҳосилкунии семент дар асоси он аз усулҳои маъмулӣ бо он фарқ мекунад, ки омехтаи ашёвӣ 3 компонентро ташкил дода, ба сифати минерализатори ғайлоқунанда аз БСК – партов истифода мебаранд. Муқаррар карда шудааст, ки зимни санҷиши физикавӣ механикӣ портландсементи ҳосилшуда бо хусусияти мустақамии баланди худ ба монанди зимни фишурдан ва ҳам қатъсозӣ баъди 30 шабонарӯзи хушкшавӣ фарқ мекунад.

Калидвожаъо: семент, клинкер, таҳқиқот, ҳосилкунӣ, истеҳсолот, партовҳо, БСК – партов, омехтаи ашёвӣ, сементи васеъшаванда, фишурдан, қатъсозӣ.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ОТХОДОВ БСК ПОСЛЕ КИСЛОТНОГО РАЗЛОЖЕНИЯ ДЛЯ РАЗВИТИЯ РАСШИРИТЕЛЬНЫХ СВОЙСТВ ЦЕМЕНТА

В настоящее время стал актуальным вопрос получения цемента из техногенных, попутных продуктов промышленного производства или вторичных минеральных ресурсов. При внедрении новой технологии сернокислотного разложения твердых отходов производства алюминия с целью получения вторичного глинозема и фторослей образуется большое количество (СКО - сульфат кальцийсодержащий остаток) сульфат кальцийсодержащего остатка такого как хвосты. Использование этих остатков в производстве цемента является не только экономически целесообразной технологией, но и методом решения экологических проблем, возникающих при складировании отходов производства алюминия. Основной целью исследования является снижение себестоимости изготовления цементного клинкера за счет уменьшения количества дорогих добавок и применения СКО, а также повышения активности клинкера и получения расширяющего цемента. Предлагаемый состав клинкера и способ получения цемента на его основе отличаются от известного тем, что сырьевая смесь составляется из 3 компонентов и в качестве активного минерализатора используют отходы СКО. Установлено, что при физико-механическом испытании получаемый портландцемент характеризуется достаточно высокими прочностными характеристиками как при сжатии, так и при изгибе после 30 суток.

Ключевые слова: цемент, клинкер, исследования, производство, производство, отходы, СКО - отходы, сырьевая смесь, расширяющийся цемент, сжатие, изгиб.

USE OF BSC AFTER ACID SOLUTION TO DEVELOP THE EXPANSION PROPERTIES OF CEMENT

Currently, the issue of obtaining cement from technogenic, by-products of industrial production or secondary mineral resources has become relevant. When introducing a new technology for sulfuric acid decomposition of solid waste from aluminum production in order to obtain secondary alumina and fluorine salts, a large amount of calcium sulfate-containing residue as tailings is formed. The use of these residues in cement production is not only an economically viable technology, but also a method for solving environmental problems that arise when storing aluminum production waste. The main goal of the study is to reduce the cost of producing cement clinker by reducing the amount of expensive additives and the use of SKO, as well as increasing the activity of clinker and obtaining expansive cement. The proposed composition of clinker and the method of producing cement based on it differ from the known one in that the raw material mixture is made up of 3 components and SKO waste is used as an active mineralizer. It has been established that during physical and mechanical testing, the resulting Portland cement is characterized by fairly high strength characteristics both in compression and in bending after 30 days.

Key words: cement, clinker, research, production, production, waste, SKO - waste, raw material mixture, expanding cement, compression, bending.

Маълумот дар бораи муаллиф: Рачабов Шухрат Холмуродович – Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, номзади илмҳои техникӣ, дотсенти кафедраи технологияи истеҳсоли химиявӣ. **Суроға:** 734025, ш. Душанбе, Ҷумҳурии Тоҷикистон, хиёбони Рӯдакӣ, 17. **Телефон:** (+992) 555-22-11-85. **E-mail:** R.Shuhrat.Kh@mail.ru.

Сведения об авторе: Раджабов Шухрат Холмуродович – Таджикский национальный университет, кандидат технических наук, доцент кафедры технология химического производства. **Адрес:** 734025, г. Душанбе, Республика Таджикистан, проспект Рудакӣ, 17. **Телефон:** (+992) 555-22-11-85. **E-mail:** R.Shuhrat.Kh@mail.ru.

Information about the author: Rajabov Shukhrat Kholmurodovich – Tajik National University, candidate of technical sciences, associate professor of the department of chemical production technology. **Address:** 734025, Dushanbe, Republic of Tajikistan, Rudaki Avenue, 17. **Phone:** (+992) 555-22-11-85. **E-mail:** R.Shuhrat.Kh@mail.ru.

Мақола ба редакция ворид шуд 26.11.2023
Аз тақриз баргашт 30.01.2024
Ба чоп тавсия шуд 08.04.2024

КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ ЖЕЛЕЗА(III) С TSC И FTSC В РАСТВОРАХ H₂SO₄ ПЕРЕМЕННОГО СОСТАВА¹Бобокалонов Т.Б., ²Хакимов Ф.Х., ¹Сафармамадзода С.М., ¹Мамадгаминова З.Р.¹Таджикский национальный университет,²Самаркандский государственный университет имени Шарофа Рашидова

Введения. Среди биоэлементов, важных для жизнедеятельности, железо играет доминирующую роль, так как является активатором многих каталитических процессов в организме и участвует в транспортировке газов в крови. Молекула гемоглобина состоит из белковой части глобина и гема – комплекса Fe(II) с одним из порфиринов, так называемым протопорфирином -IX. В этом соединении атом железа образует с атомами азота две ковалентные и две координационные связи. Перспективность комплексообразования с ионами железа(III), как способа расширения спектра действия известных лекарственных средств, отмечена во многих работах. Это относится и к тиосемикарбазонам, которые проявляют высокую биологическую активность и широко применяются в медицинской практике. В частности, тиосемикарбазид широко используется в фармакологической практике в качестве судорожного средства.

В работе [1] обсуждается влияние диантипирилметана (ДПМ) и его гомологов-диантипирилпропилметана (ДАПМ) и диантипирилфенилметана (ДАПФМ) на комплексообразование железа(III) с бис-(2,3,4-тригидроксифенилазо) бензидином и найдены оптимальные условия образования разнолигандных комплексов. Определены молярные коэффициенты поглощения и константы устойчивости комплексов железа(III). Изучено влияние посторонних ионов и маскирующих веществ на комплексообразование. Комплексообразование железа(III) с 3,4-доксибензойной кислотой (3,4-DHB, H₃L) в широком диапазоне pH среды и концентрации реагентов изучено методом электронной спектроскопии и ядерной магнитной релаксации в [2]. Рассчитана константа устойчивости монолигандного комплекса [FeL], в котором происходит быстрое окисление лиганда центральным атомом. Показано что, как и в случае других бидентатных ароматических лигандов, так же образуются комплексы [FeL₂] и [FeL₃]. По полученным данным железо(III) с 3,4-DHB в водном растворе не образует полиядерные комплексы. Показано существование трёх комплексных соединений железа(III) с 3,4-DHB состава металл: лиганд – 1:1, 1:2 и 1:3, для которых определены спектральные параметры ($\lambda_{\text{макс}}$, ϵ_{λ}), коэффициенты релаксационной эффективности и константы устойчивости. В работе [3] проведены исследования комплексообразующей способности флотореагентов по отношению к иону железа(II). Определены константы устойчивости и термодинамические параметры комплексов диалкилдифосфатов натрия с ионами железа(II), а также температурно-зависимые и температурно-независимые характеристики реакций комплексообразования. Авторы работы [4] исследовали комплексообразование железа(III) с салициловой кислотой (СК) и дифенилгуанидином (ДФГ) в водно-органических растворах. Установлено, что в этой системе происходит взаимодействие между отдельными компонентами: Fe(III) – СК и Fe(III) – ДФГ. Определены оптимальные условия для комплексообразования между железом(III), СК и ДФГ в водно-ацетоновом и водно-этанольных растворах. Показано, что устойчивость комплексов в водно-этанольных растворах выше чем в водно-ацетоновых. Триметилацетатные комплексы железа с различными лигандами изучены методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) в [5]. Проанализированы фотоэлектронные спектры Fe2p, Fe3p, O1s и N1s при последовательной замене координационных связей Fe → O на Fe → N. В рентгеноэлектронных спектрах триметилацетатных комплексов железа определена сателитная составляющая, свидетельствующая о высокоспинном состоянии атомов Fe(II) и Fe(III). Результаты РФЭС позволили определить меру ковалентности связи металл-лиганд и выявить два неэквивалентных состояния для атомов железа. Авторам работы [6] удалось получить

комплекс железа(III) с асимметричным тридентатным азометиновым лигандом 4,4-додецилоксибензоилоксибензоил – 4 – салицилиден - N' - этил - N – этилендиамином, содержащим противоион PF_6^- . Установлено, что реакция комплексообразования соли железа(III) с асимметричным тридентатным лигандом приводит к образованию соединения состава 1:1 в октаэдрическом комплексе. Методом ЭПР показано, что ионы железа(III) в комплексе находятся как в низкоспинном (НС), так и высокоспинном (ВС) состоянии. НС и ВС центры железа(III) образуют димерную структуру, в которой молекула воды и противоион PF_6^- выполняют роль соединительных мостиков. Найдено, что для НС комплексов, находящихся в низкотемпературной фазе (4,2 – 300К), состояние $(d_{xz}, d_{yz})^4(d_{xy})^1$ является основным. Установлено, что перевод образца в высокотемпературную, жидкокристаллическую (387 – 405К) фазу сопровождается переключением НС электронных конфигураций $(d_{xz}, d_{yz})^4(d_{xy})^1 \leftrightarrow (d_{xy})^2(d_{xz}, d_{yz})^3$, обратимым по температуре.

В работе [7] представлены результаты по синтезу и исследованию новых комплексов железа(III), образующихся при взаимодействии FeCl_3 с N-гидроксисукцинимидом при соотношении исходных реагентов 1: 1, 1: 2 и 1:3. Для изучения, идентификации, состава и строения синтезированных комплексов использованы различные физико-химические методы (масс-спектрометрия, дериватография, ИК-спектроскопия, мессбауэровская спектроскопия, рентгеновская дифракция). Полученные таким образом соединения были испытаны в технологии обработки кожи. При взаимодействии этанольного раствора гидрохлорида семикарбазида, бензилдегида и морфолина синтезировано N-(I-морфолинобензил) семикарбазидное основание Шиффа [8]. Комплексы марганца(II) и железа(II) синтезированы в смеси этанольных растворов основания Шиффа с хлоридом металлов(II) соответственно. Полученные комплексы характеризовались методами гравиметрии, спектрофотометрии, потенциометрии, молярной проводимости и ИК-спектроскопического анализа. Выявлено, что основание Шиффа и комплексные соединения не растворимы в воде, растворимы в большинстве известных органических растворителей, но легко растворимы в метаноле и этаноле. Установлено, что молярная проводимость комплексов марганца(II) и железа(II) составляют 3,78 и 6,90 $\text{Ом}^{-1} \text{ см}^2 \text{ моль}^{-1}$, соответственно являются неэлектролитами. Потенциометрические исследования показали, $\text{pK}_a=5.40$, для основания Шиффа. Стандартная свободная энергия Гиббса Mn(II) и Fe(II) равны -65,79 кДж/моль^{-1} и -60,35 кДж/моль^{-1} , соответственно. Отношение исходных реагентов, определяемое потенциометрически и спектрофотометрически для комплексных соединений, составило 1:2. Изучение ИК-спектра основания Шиффа показывает изменение полос, наблюдаемые в двух комплексных соединениях на основе основания Шиффа, которое указывает на координацию основания Шиффа с ионами металлов.

В работе [9] определена структура и состав салицилатных комплексов железа(III) в среде этанола. Для установления составов комплексов в среде этанола и в твёрдом состоянии применялись УФ-спектроскопия, ЯМР измерения, метод изомолярных серий и термический анализ. Показано, что взаимодействие салициловой кислоты с хлоридом железа(III) в растворе этанола приводит к образованию комплекса состава $[\text{FeC}_6\text{H}_4\text{O}_2\text{COO}]^+$. Показано, что салициловый лиганд координируется как бидентатный лиганд. Выявлено, что термическое разложение комплекса приводит к образованию соединения состава $\alpha - \text{Fe}_2\text{O}_3$.

В работе [10] представлены данные о комплексообразовании мочевины (U) с ионами марганца(II), кобальта(II), железа(III) и меди(II) при разных температурах. Состав и строение координационных соединений изучено разными методами (элементный анализ, магнитная чувствительность, измерение удельной проводимости, инфракрасный и термический анализ (TG/DTG), сканирующий электронный микроскоп (SEM), энергодисперсионная рентгеновская спектроскопия (EDX) и порошковая рентгеновская дифракция (XRD)). Показано, что полученные комплексы имеют высокие значения молярной проводимости, т.е. являются электролитами. Физические и спектральные данные дали возможность описать образование соединений составов: $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{U} \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ (1),

$\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{U} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (2) $\text{CO}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{U}$ (3), $\text{CO}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{U} \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ (4), $\text{FeCl}_2 \cdot 6\text{U} \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ (5), $\text{FeCl}_2 \cdot 3\text{U} \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ (6), $\text{MnCl}_2 \cdot 3\text{U} \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ (7), $\text{MnCl}_2 \cdot 6\text{U}$ (8). Тиомочевинные комплексы (1, 3, 5 и 7) и (2, 4, 6 и 8) были синтезированы при комнатной температуре и 60°C соответственно. На основе инфракрасных спектральных данных и значений колебательных полос поглощения обеих групп $-\text{C}=\text{O}$ и $-\text{NH}_2$, было установлено комплексообразование ионов металлов с мочевиной. Была исследована антимикробная активность в отношении бактерий (*Escherichia Coli*, *Staphylococcus Aureus*, *Bacillus subtilis* и *Pseudomonas aeruginosa*) и грибов (*Aspergillus Flavus* и *Candida Albicans*), которая показала высокую эффективность. Авторами [11] синтезировано новое соединение пиколинат-железа(III), $\text{Fe}(\text{C}_6\text{H}_4\text{NO}_2)_2(\text{OH})$, из водного раствора комплекса пиколината-железа(II). Соединение получено путем термической обработки пиколинатных комплексов железа из водного раствора, при $\text{pH} = 3-7$. Авторы [12] синтезировали комплексные соединения $\text{Cu}(\text{II})$, $\text{Ni}(\text{II})$, $\text{Zn}(\text{II})$, $\text{Co}(\text{II})$, $\text{Mn}(\text{II})$, $\text{Fe}(\text{III})$ и $\text{Cr}(\text{III})$ с N^4 -(7'-хлорхинолин-4'-иламино)- N^1 -(2-гидроксипенцилиден) тиосемикарбазоном (HL). Проведены ИК-спектроскопические и биологические исследования полученных комплексов. Структуры комплексов определены на основе элементного анализа, спектроскопических данных (ИК, электронный, ^1H и ^{13}C ЯМР и масс-спектры), измерения магнитной восприимчивости, молярной проводимости, термогравиметрического анализа. Изучение электропроводности растворов комплексов показало неэлектролитическую природу комплексов. Установлено, что полученные комплексы являются одноядерными. На основании проведённых исследований показано, что в координации участвует один лиганд с каждым атомом металла, связь осуществляется через атом серы тионной группы, а также участвуют азотметинный азот и фенольный кислород с образованием одноядерных комплексов, в которых тиосемикарбазон ведет себя как одноосновный трехдентатный лиганд.

Координационные соединения салицилатов меди(II), никеля(II), кобальта(III), цинка(II) и железа(III) с тиосемикарбазидом изучены в работе [13]. Полученные соединения были охарактеризованы данными элементного анализа, инфракрасной спектроскопии, спектроскопии диффузного отражения и термогравиметрии. В работе [14] получены комплексы железа(III) с основанием Шиффа, составов $[\text{Fe}(\text{tsc-py})_2](\text{NO}_3)$ (1), $[\text{Fe}(\text{tsc-acpy})_2](\text{NO}_3)$ (2) и $[\text{Fe}(\text{tsc-VB}_6)_2](\text{NO}_3)$ (3), где tsc-py, tsc-acpy и tsc-VB₆ являются соответствующими основаниями Шиффа, полученными из тиосемикарбазид (tsc) и пиридин-2-альдегид (tsc-py), 2-ацетилпиридин (tsc-acpy) и витамин В₆ (пиридоксаль, tsc-VB₆). При этом комплексы были структурно охарактеризованы и их фотоцитотоксичность изучена на раковые клетки HeLa. Исследование рентгеновских структур монокристаллов комплексов состава 1 и 2 показали искаженную восьмигранную геометрию, образованную ядром FeN_4S_2 . Установлено, что комплексы 1 и 2 без VB₆-фрагмента не являются цитотоксичными в светлых или темных условиях. Выявлено, что комплекс 3 значительно фотоцитотоксичнее в видимом свете 400-700нм. Показано, что фотоцитотоксичность комплекса 3 может являться результатом его лучшего фотосенсибилизирующего свойства в сочетании с его повышенным поглощением в раковые клетки посредством транспорта VB₆ диффузионным путём.

По литературным данным, с учетом гидролиза соединения железа(III) комплексообразование рекомендуют проводить в кислой среде при концентрации H_2SO_4 0,1 моль/л и выше. При $\text{pH} > 7$ железо(III) подвергается гидролизу и восстанавливается до железа(II). Вместе с тем, изменение концентрации H_2SO_4 оказывает влияние как на характер комплексообразования, так и на устойчивость образующихся комплексов. Авторами работы [15] исследован процесс комплексообразования молибдена (V) с 1,2,4-триазолтиолом в среде 6 моль/л HCl при температуре 298 К. Методом Бьеррума определены значения ступенчатых констант устойчивости и оценены области доминирования и максимальный выход комплексов, образующихся соединений в системе $(\text{NH}_4)_2[\text{MoOCl}_5]$ - 1,2,4-триазолтиолом. Проведённые исследования позволили установить, что при взаимодействии $(\text{NH}_4)_2[\text{MoOCl}_5]$ с 1,2,4-триазолом в растворе 6 моль/л HCl образуются

комплексные частицы содержащие от одного до пяти координированных молекул 1,2,4-триазолтиола. В работах [16-17] изучены комплексообразования железа(III) с тиосемикарбазидом и 1-формил-3-тиосемикарбазидом в 0,1 моль/л растворе H₂SO₄. Установлено, что железа(III) с тиосемикарбазидом образует три комплексные частицы, а с 1-формил-3-тиосемикарбазидом - две. Рассчитаны константы устойчивости и термодинамические характеристики образующихся комплексов.

В настоящей работе приведены результаты исследования комплексообразования железа(III) с тиосемикарбазидом и 1-формил-3-тиосемикарбазидом в растворах H₂SO₄ с концентрацией равной 0,5, 1,0 и 2,0 моль/л, и обсуждается вопрос влияния состава раствора на термодинамические характеристики реакции комплексообразования.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

В качестве исходных соединений использовали Fe₂(SO₄)₃·9H₂O и FeSO₄·7H₂O, которые были получены по методикам, описанным [18]. TSC- марки «Т», был перекристаллизован из водного раствора. FTSC-получили по методике [19]. Растворы H₂SO₄ различных концентраций были приготовлены из фиксаналов.

Для потенциометрического титрования использовали гальванический элемент без переноса. В качестве индикаторного электрода использовали окислительно-восстановительную систему Fe(III)/Fe(II). Электродом сравнения служил-хлорсеребряный. В качестве титранта использовали кислые растворы соответствующих лигандов. Измерение потенциала системы при потенциометрическом титровании проводили с помощью цифрового рН-метра марки рН-150МП (E=±0,1). Потенциометрическое титрование при каждой температуре проводили по четыре раза. Равновесное значение потенциала на индикаторном электроде устанавливалось в течение 5-7 минут. Температуру в ячейке поддерживали постоянной водяным термостатом (± 0,5⁰C).

Равновесную концентрацию иона железа(III) определяли по уравнению [20]:

где: [Fe³⁺] – равновесная концентрация ионов железа в каждой точке титрования, моль/л;

ΔE = E₁ - E₂; E₁ – начальный потенциал системы, мВ; E₂ – потенциал системы в каждой точке титрования, мВ;

$$\lg [Fe^{3+}] = \lg C_{Fe^{3+}} - \frac{\Delta E}{1,985 \cdot 10^{-4} \cdot T}$$

C_{Fe³⁺} - концентрация железа (III) в каждой точке титрования с учетом разбавления, моль/л;

T-температура, К.

Равновесную концентрацию органических лигандов [L] рассчитывали по уравнению, Ледена:

$$[L] = C_L - n(C_{Fe^{3+}} - [Fe^{3+}])$$

где: C_L - концентрация лиганда в каждой точке титрования с учетом разбавления, моль/л;

n - количество органического лиганда, присоединённого металлом;

Все расчёты по определению и уточнению констант устойчивости, а также мольные доли образующихся в растворе комплексных частиц, проводили на компьютере Пентиум-4 с использованием программы Excel.

РЕЗУЛЬТАТЫ

Количество частиц, образующихся при взаимодействии железа(III) с TSC и FTSC определяли по методике, описанной в работе [21]. На рисунках 1 и 2 приводятся зависимости ΔE от -lg[L] для тиосемикарбазидных и 1-формил-3-тиосемикарбазидных комплексов железа(III) в растворах H₂SO₄ различной концентрации (0,5, 1,0 и 2,0 моль/л).

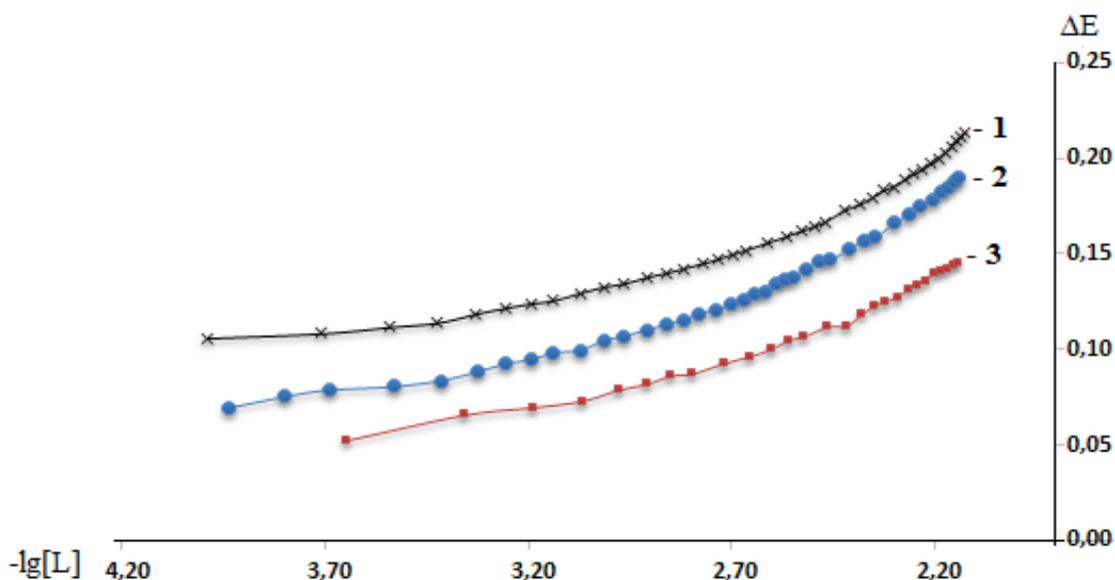


Рис. 1. Зависимость ΔE от $-\lg[L]$ для тиосемикарбазидных комплексов железа(III): 1) в растворе 0,5 моль/л H_2SO_4 ; 2) в растворе 1,0 моль/л H_2SO_4 ; 3) в растворе 2,0 моль/л H_2SO_4

Fig. 1. Dependence of ΔE on $-\log[L]$ for iron(III) thiosemicarbazide complexes: 1) in a solution of 0.5 mol/l H_2SO_4 ; 2) in a solution of 1.0 mol/l H_2SO_4 ; 3) in a solution of 2.0 mol/l H_2SO_4 .

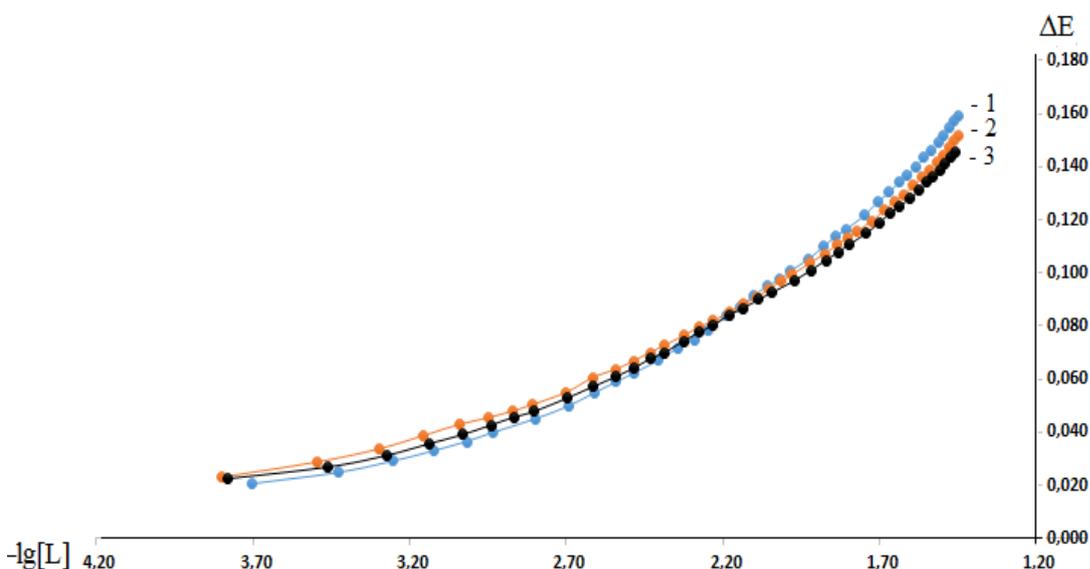


Рис. 2. Зависимость ΔE от $-\lg[L]$ для 1-формил-3-тиосемикарбазидных комплексов железа(III): 1) в растворе 0,5 моль/л H_2SO_4 ; 2) в растворе 1,0 моль/л H_2SO_4 ; 3) в растворе 2,0 моль/л H_2SO_4

Fig. 2. Dependence of ΔE on $-\log[L]$ for 1-formyl-3-thiosemicarbazide complexes of iron(III): 1) in a solution of 0.5 mol/l H_2SO_4 ; 2) in a solution of 1.0 mol/l H_2SO_4 ; 3) in a solution of 2.0 mol/l H_2SO_4

В таблицах 1 и 2 приведены значения констант устойчивости комплексных соединений железа(III) с тиосемикарбазидом и 1-формил-3-тиосемикарбазидом в растворах серной кислоты различной концентрации рассчитанные методом Ледена [21].

Таблица 1. Значения общих констант устойчивости тиосемикарбазидных комплексов железа(III) в растворах серной кислоты различной концентрации, при 298К

Table 1. Values of general stability constants of iron(III) thiosemicarbazide complexes in solutions of sulfuric acid of various concentrations, at 298K

Концентрация серной кислоты, моль/л	Константы устойчивости		
	$\lg\beta_1$ $[\text{FeTSC}]^{3+}$	$\lg\beta_2$ $[\text{Fe}(\text{TSC})_2]^{3+}$	$\lg\beta_3$ $[\text{Fe}(\text{TSC})_3]^{3+}$
0,1	4,74±0,13	6,47±0,09	7,99±0,14
0,5	4,21±0,12	5,94±0,13	7,44±0,15
1,0	4,13±0,11	5,79±0,08	7,29±0,09
2,0	4,01±0,10	5,66±0,11	7,14±0,13

Таблица 2. Значения констант устойчивости 1-формил-3-тиосемикарбазидных комплексов железа(III) в растворах серной кислоты различной концентрации, при 298K

Table 2. Values of stability constants of 1-formyl-3-thiosemicarbazide complexes of iron(III) in solutions of sulfuric acid of various concentrations, at 298K

Концентрация серной кислоты, моль/л	Константы устойчивости	
	$\lg\beta_1$ $[\text{FeFTSC}]^{3+}$	$\lg\beta_2$ $[\text{Fe}(\text{FTSC})_2]^{3+}$
0,1	4,33±0,11	6,12±0,13
0,5	3,57±0,10	5,45±0,10
1,0	3,43±0,07	5,36±0,12
2,0	3,35±0,09	5,29±0,14

На рис. 3 приведены диаграммы распределения разных форм тиосемикарбазида в зависимости от pH среды.

In the picture No. 3 distribution diagrams of different forms of thiosemicarbazide depending on the pH of the medium are presented.

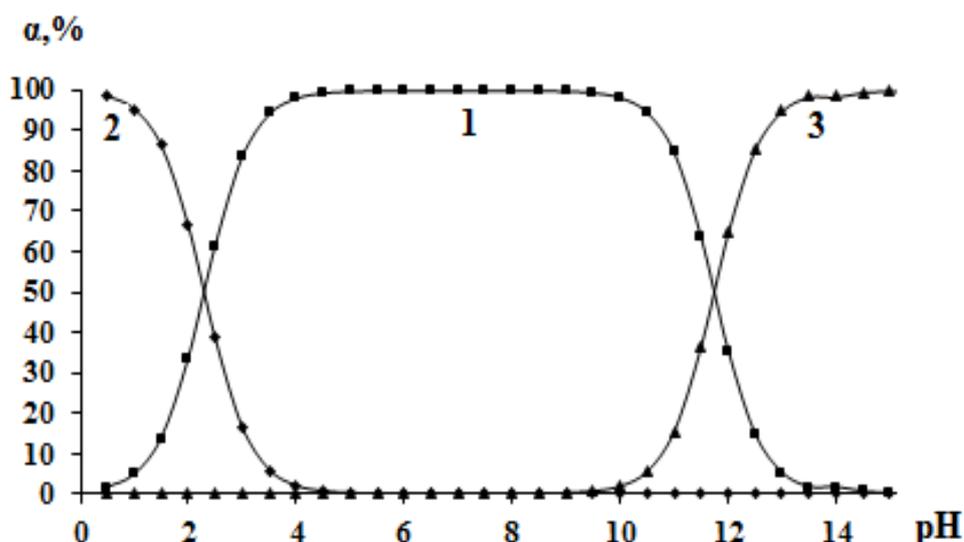


Рис. 3. Диаграммы распределения различных форм тиосемикарбазида в зависимости от pH раствора: 1) TSC; 2) HTSC⁺; 3) TSC⁻

Fig. 3. Distribution diagrams of various forms of thiosemicarbazide depending on the pH of the solution: 1) TSC; 2) HTSC⁺; 3) TSC⁻

В таблице 3 приведены значения ΔG комплексных соединений железа(III) с тиосемикарбазидом и 1-формил-3-тиосемикарбазидом в растворах серной кислоты различной концентрации, рассчитанные по уравнению $\Delta G = -2,3RT \lg \beta_i$.

Таблица 3. Значения ΔG реакции образования тиосемикарбазидных и 1-формил-3-тиосемикарбазидных комплексов железа(III) в растворах серной кислоты разной концентрации, при 298K

Table 3. ΔG values for the formation of thiosemicarbazide and 1-formyl-3-thiosemicarbazide complexes of iron(III) in sulfuric acid solutions of different concentrations, at 298K

Состав комплексных частиц	ΔG , кДж/моль			
	Концентрация серной кислоты, моль/л			
	0,1	0,5	1,0	2,0
$[\text{FeTSC}]^{3+}$	-27,0105	-23,9903	-23,5345	-22,8506
$[\text{Fe}(\text{TSC})_2]^{3+}$	-36,8687	-33,8486	-32,9938	-32,2530
$[\text{Fe}(\text{TSC})_3]^{3+}$	-45,5303	-42,3962	-41,5414	-40,6867
$[\text{FeFTSC}]^{3+}$	-24,6741	-20,3433	-19,5456	-19,0897
$[\text{Fe}(\text{FTSC})_2]^{3+}$	-34,8743	-31,0564	-30,5435	-30,1446

На рисунке 4 приводится зависимость изменение энергии Гиббса переноса $\Delta_r G_p$ ($\Delta_r G_p = \Delta_r G_{\text{H}_2\text{SO}_4(0,5)} - \Delta_r G_{\text{H}_2\text{SO}_4(0,1)}$) реакции образования комплексов железа(III) с TSC.

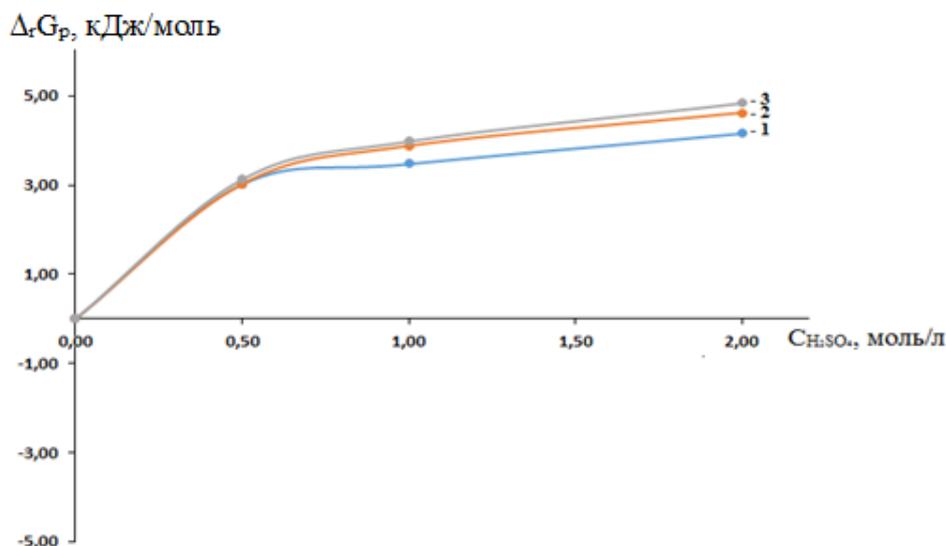


Рис. 4. Изменение энергии Гиббса переноса реакции образования комплексов железа(III) с TSC: 1) $[\text{FeTSC}]^{3+}$; 2) $[\text{Fe}(\text{TSC})_2]^{3+}$; 3) $[\text{Fe}(\text{TSC})_3]^{3+}$

Fig. 4. Change in the Gibbs energy of transfer of the reaction of formation of iron(III) complexes with TSC: 1) $[\text{FeTSC}]^{3+}$; 2) $[\text{Fe}(\text{TSC})_2]^{3+}$; 3) $[\text{Fe}(\text{TSC})_3]^{3+}$

ОБСУЖДЕНИЯ

Проведённые исследования показали, что характер комплексообразования железа(III) с тиосемикарбазидом (рис. 1) при увеличении концентрации серной кислоты практически не изменяется, а остаётся ступенчатым и при всех концентрациях H_2SO_4 (0,1 - 2,0 моль/л) в растворе образуются три комплексные частицы. Такая же зависимость

наблюдается и при исследовании комплексообразования железа(III) с 1-формил-3-тиосемикарбазидом (рис. 2).

Показано, что с возрастанием концентрации серной кислоты в растворе константы устойчивости комплексных соединений железа(III) с тиосемикарбазидом и 1-формил-3-тиосемикарбазидом уменьшаются (таблица 1 и 2). Для объяснения полученных экспериментальных данных, нами проведено исследование кислотно-основных свойств тиосемикарбазида и его ацилпроизводного. Константа кислотной ионизации протонированной формы TSC определенная нами методом рН-метрического титрования оказалась равной $pK_a = 1,82 \pm 0,07$. Для FTSC величина pK_a равна 4,4. Таким образом оба лиганда TSC и FTSC в водных растворах ведут себя как очень слабые основания. Из данных диаграммы (рис. 3) следует, что тиосемикарбазид начинает протонироваться начиная с $pH=3,5$.

Учитывая кислотно-основные свойства TSC и FTSC, можно предположить, что уменьшение устойчивости железа(III) с этими органическими соединениями (табл. 1, 2) при возрастании в растворе концентрации ионов водорода связано с конкуренцией протона и иона металла за органический лиганд.

Проведенные исследования показали, что величина ΔG для всех комплексных форм образующихся в системе Fe(III)-TSC(FTSC)- H_2SO_4 при возрастании в растворе концентрации H_2SO_4 становится положительнее (табл. 3, рис. 4).

ВЫВОДЫ

1. При переходе от TSC к FTSC независимо от температуры опыта и концентрации H_2SO_4 наблюдается незначительное уменьшение констант устойчивости комплексов железа(III). Близость численных значений констант устойчивости комплексов железа(III) с TSC и FTSC является следствием одинаковой координации молекул органических лигандов к железу(III).

2. Показано, что энергия Гиббса для образования всех комплексных форм отрицательна, причём её численные значения с возрастанием молекул органических лигандов во внутренней сфере комплекса становятся более положительными. При возрастании в растворе концентрации H_2SO_4 устойчивость комплексов уменьшается, что связано с протонированием органических лигандов в растворе.

**Рецензент: Суяриён К. Дж.,
кандидат химических наук, доцент**

ЛИТЕРАТУРА

1. Алиева, Р.А. Комплексообразование железа(III) с бис-(2,3,4-тригидроксифенилазо) бензидином в присутствии диантипирилметана и его гомологов / Р.А. Алиева, М.Ф. Мамедова, Ф.М. Чырагов // Бакинский Государственный Университет. -2007. -№3. – С. 29-33.
2. Амиров, Р.Р. Комплексообразование железа (III) с 3,4-диоксibenзойной кислотой в водных растворах / Р.Р. Амиров, А.Б. Зиятдинова, А.Н. Солодов, А.В. Ванюкова, Ю.И. Заявкина // Ученые записки казанского университета. -Естественные науки. -2010. –Т. 152. кн. 4. – С.238-247.
3. Амерханова, Ш.Х. Оценка термодинамических параметров процессов комплексообразования дибутилдитиофосфата и диизопропилдитиофосфата натрия с ионами железа (II). Сорбционные и хроматографические процессы / Ш.Х. Амерханова, Р.М. Шляпов, А.С. Уали, Ф.Ж. Беккулина // -2012. –Т. 12. -Вып. 2. – С.304-310.
4. Аликина, Е.Н. Исследование комплексообразования в системе железа(III) салициловая кислота-дифенилгуанидин в водно-ацетоновых и водно-этанольных растворах спектрофотометрическим методом / Е.Н. Аликина, О.Ю. Александрова, П.М. Староверова, Э.С. Заплатина // Вестник Пермского университета. - 2016. -Вып.1(21). - С. 60-67.
5. Иванова, Т.М. Рентгеноэлектронные спектры и структура полиядерных комплексов железа / Т.М. Иванова, А.В. Наумкин, А.В. Щукарев, А.А. Сидоров, М.А. Кискин, В.М. Новоторцев, И.Л. Еременко // Известия РАН. -Серия физическая. -2008. –Т. 72. -№4. – С.551-557.
6. Груздев, М.С. Конверсия низкоспиновых состояний в монохелатном комплексе Fe(III) с асимметричным азометиновым тридентатным лигандом / М.С. Груздев, Н.Е. Домрачева, А.И. Александров, В.П. Осипова, У.В. Червонова, А.М. Колкер, Т.В. Пашкова, Д.В. Барахтенко // Журнал структурной химии, - 2012. –Т. 53. -№6. – С.1090-1101.

7. Marian Crudu. New Coordination Compounds of Fe(III) with Ligand from Nhydroxysuccinimide, with Applications in Ecologic Leather Tanning Technologies / Marian Crudu, Doina Sibiecu, Dana Gurau, Rodica Rohana Constantinescu, Ana Maria Vailescu // REV. CHIM. (Bucharest). -66. -№7. -2015. -Pp. 958-962.
8. Aliyu, H.N. Synthesis and characterization of N-(1-morpholinobenzyl) semicarbazide manganese(II) and iron(II) complexes / H. N. Aliyu, H. Adamu // Bajopas Volume 2 Number 2 December. -2009. -Pp.143-148.
9. Khalipova Olga. The Composition and Structure of Iron(III) Complex Compounds With Salicylic Acid in Ethanol Solution and in The Solid Thin Film State / Olga Khalipova, Svetlana Kuznetsova, Vladimir Kozik // Prospects of Fundamental Sciences Development (PFSD-2016). -Pp. 20007-1-020007-6.
10. Omar B. Ibrahim. Complexes of urea with Mn(II), Fe(III), Co(II), and Cu(II) metal ions / Omar B. Ibrahim // Advances in Applied Science Research. -2012. 3. -Pp. 3522-3539.
11. Junko Sato. Synthesis of picolinate-iron(III) compounds through an aqueous solution process / Junko Sato, Makoto Kobayashi, Hideki Kato, Eunsang Kwon, Masato Kakihana // Journal of the Ceramic Society of Japan, 2015, 123 [9]. -Pp. 751-755.
12. Khlood, S. In-vitro antibacterial, antifungal activity of some transition metal complexes of thiosemicarbazone Schiff base (HL) derived from N4-(70-chloroquinolin-40-ylamino) thiosemicarbazide / S. Khlood, Abou Melha // Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry. -August. -2008. - 23 (4). -Pp. 493-503.
13. Koksharova, T.V. Coordination Compounds of 3d-Metals Salicylates with Thiosemicarbazide / T.V. Koksharova, S.V. Kurando, I. V. Stoyanova // ISSN 1070-3632. Russian Journal of General Chemistry. -2012. -Vol. 82, No. 9. -Pp. 1481-1484.
14. Tukki Sarkar. Significant photocytotoxic effect of an iron(III) complex of a Schiff base ligand derived from vitamin B6 and thiosemicarbazide in visible light / Tukki Sarkar, Samya Banerjee and Akhtar Hussain // Cite this: RSC Adv. -2015. 5. -Pp. 29276-29284.
15. Азизкулова О.А. Исследование процесса комплексообразования молибдена (V) с 1,2,4-триазололтиолом в среде 6 моль/л HCl 298 К / О.А. Азизкулова, Ф.Р. Хамидова, А.Ш. Эгамбердиев, М.И. Абдулхаева, У.М. Джурабеков // Известия ОШТУ, 2020 №2. - С. 102-105.
16. Бобокалонов, Т.Б. Исследование комплексообразования железа (III) с тиосемикарбазидом / Т.Б. Бобокалонов, С.М. Сафармамадов // ISSN 2413 – 452X Вестник ТНУ 1/3(200). -Душанбе «Сино», 2016 г. – С.156-161.
17. Бобокалонов, Т.Б. Комплексообразование железа (III) с 1-формил-3-тиосемикарбазидом/Т.Б. Бобокалонов, С.М. Сафармамадов // - Известия АНРТ. -№3 (172). -2018. – С. 59-65.
18. Карякин, Ю.В. Чистые химические вещества / Ю.В. Карякин, И.И. Ангелов // - М., -1974. – С. 209.
19. Carl-Friedrich Kroger, Wolf Sattler, Und Haus Beyer Die Umsetzung methyl substituierter Thiosemicarbazide mitaliphatischen Carbon-Sauren Liebigs. Ann. Chem. 196Bd. 643. – Pp. 128-135.
20. Хартли, Ф. Равновесия в растворах / Ф. Хартли, К. Бёргес, Р. Оллок // - М.: Мир. -1983. – С. 365.
21. Новаковский, М.С. Лабораторные работы по химии комплексных соединений / М.С. Новаковский // Харьковский университет. -1972. – 217 с.

REFERENCES

1. Alieva, R.A. Complexation of iron (III) with bis-(2,3,4-trihydroxyphenylazo) benzidine in the presence of diantipyrylmethane and its homologues / R.A. Alieva, M.F. Mamedova, F.M. Chiragov // Baku State University. -2007. -No. 3. – Pp. 29-33.
2. Amirov, R.R. Complexation of iron (III) with 3,4-dihydroxybenzoic acid in aqueous solutions / R.R. Amirov, A.B. Ziyatdinova, A.N. Solodov, A.V. Vanyukova, Yu.I. Zayavkina // Scientific notes of Kazan University. -Natural Sciences. -2010. -Т. 152. Book 4. – Pp.238-247.
3. Amerkhanova, Sh.Kh. Assessment of thermodynamic parameters of the processes of complexation of sodium dibutyl dithiophosphate and diisopropyl dithiophosphate with iron (II) ions. Sorption and chromatographic processes / Sh.Kh. Amerkhanova, R.M. Shlyapov, A.S. Wali, F.J. Bekkulina // -2012. -Т. 12. - Issue. 2. – Pp.304-310.
4. A Alikina, E.N. Study of complex formation in the iron(III) system salicylic acid-diphenylguanidine in water-acetone and water-ethanol solutions using the spectrophotometric method / E.N. Alikina, O.Yu. Alexandrova, P.M. Staroverova, E.S. Zaplatina // Bulletin of Perm University. -2016. -Issue 1 (21). – Pp.60-67.
5. Ivanova, T.M. X-ray electron spectra and structure of polynuclear iron complexes / T.M. Ivanova, A.V. Naumkin, A.V. Shchukarev, A.A. Sidorov, M.A. Kiskin, V.M. Novotortsev, I.L. Eremenko // News of the Russian Academy of Sciences. -Physical series. -2008. -Т. 72. -No. 4. – Pp.551-557.
6. Gruzdev, M.S. Conversion of low-spin states in a monochelate Fe(III) complex with an asymmetric azomethine tridentate ligand / M.S. Gruzdev, N.E. Domracheva, A.I. Alexandrov, V.P. Osipova, U.V. Chervonova, A.M. Kolker, T.V. Pashkova, D.V. Barakhtenko // Journal of structural chemistry, -2012. -Т. 53. -No. 6. – Pp.1090-1101.
7. Marian Crudu. New Coordination Compounds of Fe(III) with Ligand from Nhydroxysuccinimide, with Applications in Ecologic Leather Tanning Technologies / Marian Crudu, Doina Sibiecu, Dana Gurau, Rodica Rohana Constantinescu, Ana Maria Vailescu // REV. CHIM. (Bucharest). -66. -№7. -2015. – Pp. 958-962.
8. Aliyu, H.N. Synthesis and characterization of N-(1-morpholinobenzyl) semicarbazide manganese(II) and iron(II) complexes / H. N. Aliyu, H. Adamu // Bajopas Volume 2 Number 2 December. -2009. – Pp.143-148.

9. Olga Khalipova. The Composition and Structure of Iron(III) Complex Compounds With Salicylic Acid in Ethanol Solution and in The Solid Thin Film State / Olga Khalipova, Svetlana Kuznetsova, Vladimir Kozik // Prospects of Fundamental Sciences Development (PFSD-2016). – Pp.20007-1–020007-6.
10. Omar B. Ibrahim. Complexes of urea with Mn(II), Fe(III), Co(II), and Cu(II) metal ions / Omar B. Ibrahim // Advances in Applied Science Research. -2012. 3. – Pp.3522-3539.
11. Junki SATO. Synthesis of picolinate-iron(III) compounds through an aqueous solution process / Junki SATO, Makoto KOBAYASHI, Hideki KATO, Eunsang KWON, Masato KAKIHANA // Journal of the Ceramic Society of Japan, 2015. 123 [9]. – Pp. 751-755.
12. Khlood, S. In-vitro antibacterial, antifungal activity of some transition metal complexes of thiosemicarbazone Schiff base (HL) derived from N4-(70-chloroquinolin-40-ylamino) thiosemicarbazide / S. Khlood, Abou Melha // Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry. –August. -2008. -23 (4). – Pp. 493–503.
13. Koksharova, T.V. Coordination Compounds of 3d-Metals Salicylates with Thiosemicarbazide / T.V. Koksharova, S.V. Kurando, I. V. Stoyanova // ISSN 1070-3632. Russian Journal of General Chemistry. -2012. -Vol. 82, No. 9. – Pp. 1481–1484.
14. Tukki Sarkar. Significant photocytotoxic effect of an iron(III) complex of a Schiff base ligand derived from vitamin B6 and thiosemicarbazide in visible light / Tukki Sarkar, Samya Banerjee and Akhtar Hussain // Cite this: RSC Adv. -2015. 5. – Pp. 29276–29284.
15. Azizkulova O.A. Study of the process of complexation of molybdenum (V) with 1,2,4-triazololthiol in a medium of 6 mol/l HCl 298 K / O.A. Azizkulova, F.R. Khamidova, A.Sh. Egamberdiev, M.I. Abdulkhaeva, U.M. Jurabekov // News of OshTU, 2020 No. 2. – Pp.105.
16. Bobokalonov, T.B. Study of complex formation of iron (III) with thiosemicarbazide / T.B. Bobokalonov, S.M. Safarmamadov // ISSN 2413 – 452X Vestnik TNU 1/3(200). -Dushanbe "Sino", 2016. – Pp. 156-161.
17. Bobokalonov, T.B. Complexation of iron (III) with 1-formyl-3-thiosemicarbazide / T.B. Bobokalonov, S.M. Safarmamadov // - News of ANRT. -No. 3 (172). -2018. – Pp. 59-65.
18. Karyakin, Yu.V. Pure chemicals / Yu.V. Karyakin, I.I. Angelov // - M., -1974. – P. 209.
19. Carl-Friedrich Kroger, Wolf Sattler, Und Haus Beyer Die Umsetzung methyl substituierter Thiosemicarbazide mitaliphatischen Carbon-Sauren Liebigs. Ann. Chem. 196Bd. 643.P.128-135.
20. Hartley, F. Equilibria in solutions / F. Hartley, K. Burges, R. Alcock // - M.: Mir, 1983. – Pp. 365.
21. Novakovsky, M.S. Laboratory work on the chemistry of complex compounds / M.S. Novakovsky // Kharkov University. -1972. –217 p.

КОМПЛЕКСХОСИЛКУНИИ ОҶАН(III) БО TSC ВА FTSC ДАР МАҲЛУЛҶОИ КОНСЕНТРАТСИЯИ ГУНОГУНИ H₂SO₄

Бо усули потенциометрӣ раванди комплексҳосилшавии оҳан (III) бо тиосемикарбазид ва 1-формил-3-тиосемикарбазид дар маҳлули концентратсияи гуногуни H₂SO₄ таҳқиқ карда шуд. Константаҳои устувории комплексҳои ҳосилшуда ҳисоб карда шуда, дар ҳамон шароит константаҳои ионизатсияи лигандҳо баҳо дода шуданд. Нишон дода шуд, ки характери комплексҳосилшавӣ аз концентратсияи ионҳои гидроген вобастагӣ надорад. Аммо устувории комплексҳо бо афзоиши pH коҳиш меёбад. Омӯзиши комплекси оҳан(III) бо тиосемикарбазид ва ҳосилаи атсилии он нишон дод, ки дар табиати комплексҳосилшавӣ ҳам монандӣ ва ҳам фарқият вучуд дорад. Ҳарду лиганд бо оҳан (III) ба таври зинагӣ ба реаксия рафта, комплексҳои устуворро ҳосил мекунанд. Бо баланд шудани ҳарорат устувории комплексҳо зиёд мешавад. Тағйирёбии қувваи ионии маҳлул ва концентратсияи H₂SO₄ ба устувории комплексҳо якхел таъсир мерасонад. Дар айни замон ҳангоми гузаштан аз тиосемикарбазид ба 1-формил-3-тиосемикарбазид шумораи заррачаҳои дар маҳлул ҳосилшуда кам шуда, устувории комплексҳо паст мешавад.

Калидвожаҳо: комплексҳосилкунӣ, оҳан(III), TSC-тиосемикарбазид, FTSC-1-формил-3-тиосемикарбазид, константаи устуворӣ, функцияи термодинамикӣ.

КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ ЖЕЛЕЗА(III) С TSC И FTSC В РАСТВОРАХ H₂SO₄ ПЕРЕМЕННОГО СОСТАВА

Потенциометрическим методом исследован процесс комплексообразования железа(III) с тиосемикарбазидом и 1-формил-3-тиосемикарбазом в растворах H₂SO₄ различной концентрации. Рассчитаны константы устойчивости образующихся комплексов и в тех же условиях оценены константы ионизации лигандов. Показано, что ступенчатый характер комплексообразования не зависит от концентрации ионов водорода. Однако устойчивость комплексов при возрастании pH уменьшается. Исследование комплексообразования железа(III) с тиосемикарбазидом и его ацилпроизводным показало, что есть как общность, так и различие в характере протекания комплексообразования. Оба лиганда реагируют с железом(III) ступенчато, образуя прочные комплексы. С повышением температуры устойчивость комплексов возрастает. Изменение ионной силы раствора и концентрации H₂SO₄ одинаково влияет на устойчивость комплексов. Вместе с тем при переходе от тиосемикарбазид к 1-формил-3-тиосемикарбазиду количество частиц, образующихся в растворе уменьшается, и снижается устойчивость комплексов.

Ключевые слова: комплексообразования, железа(III), TSC-тиосемикарбазид, FTSC-1-формил-3-тиосемикарбазид, константы устойчивости, термодинамические функции.

COMPLEXATION OF IRON (III) WITH TSC AND FTSC IN H₂SO₄ SOLUTIONS OF VARIABLE COMPOSITION

The process of complex formation of iron (III) with thiosemicarbazide and 1-formyl-3-thiosemicarbazide in H₂SO₄ solutions of various concentrations was studied using the potentiometric method. The stability constants of the resulting complexes were calculated, and the ionization constants of the ligands were estimated under the same conditions. It was shown that the stepwise nature of complex formation does not depend on the concentration of hydrogen ions. However, the stability of the complexes decreases with increasing pH. A study of the complex formation of iron(III) with thiosemicarbazide and its acyl derivative showed that there are both similarities and differences in the nature of complex formation. Both ligands react with iron(III) in a stepwise manner, forming stable complexes. With increasing temperature, the stability of the complexes increases. Changing the ionic strength of the solution and the concentration of H₂SO₄ equally affect the stability of the complexes. At the same time, moving from thiosemicarbazide to 1-formyl-3-thiosemicarbazide, the number of particles formed in the solution decreases, and the stability of the complexes decreases.

Keywords: complexation, iron(III), TSC-thiosemicarbazide, FTSC-1-formyl-3-thiosemicarbazide, stability constants, thermodynamic functions.

Маълумот дар бораи муаллиф: Бобокалонов Тоҷиддин Баротмахмадович – Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, номзади илмҳои химия, муаллими калони кафедраи химияи таҳлилий. **Суроға:** 734025, шаҳри Душанбе, Ҷумҳурии Тоҷикистон, хиёбони Рӯдакӣ, 17. **Телефон:** (+992) 918157026. **E-mail:** tojiddin_8989@mail.ru

Ҳақимов Фируз Холиқович – Донишгоҳи давлатии Самарқанд ба номи Шарофа Рашидова, номзади илмҳои химия, дотсенти кафедраи химияи физикӣ ва коллоидӣ. **Суроға:** 140104, шаҳри Самарқанд, Ҷумҳурии Узбекистон, Булвори донишгоҳ, 15. **Тел.:** (+998)915 44 44 50. **E-mail:** Khakimov-firuz@mail.ru

Сафармамадзода Сафармамад Муборақшо - Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, доктори илмҳои химия, профессори кафедраи химияи ғайриорганикӣ. **Суроға:** 734025, шаҳри Душанбе, Ҷумҳурии Тоҷикистон, хиёбони Рӯдакӣ, 17. **Телефон:** (+992) 93 827 04 04. **E-mail:** sash65@mail.ru

Мамадгаминова Зебо Раҳматшоевна – Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, магистри курси дуҷуми кафедраи химияи ғайриорганикӣ. **Суроға:** 734025, шаҳри Душанбе, Ҷумҳурии Тоҷикистон, хиёбони Рӯдакӣ, 17. **Телефон:** (+992)900 55 08 98. **E-mail:** mamadgaminovazebo@gmail.com.

Сведения об авторах: **Бобокалонов Тоҷиддин Баротмахмадович** - Таджикский национальный университет, кандидат химических наук, старший преподаватель кафедры аналитической химии. **Адрес:** 734025, город Душанбе, Республика Таджикистан, проспект Рудаки, 17. **Телефон:** (+992)918 15 70 26. **E-mail:** tojiddin_8989@mail.ru

Ҳақимов Фируз Холиқович - Самарқандский государственный университет имени Шарофа Рашидова, кандидат химических наук, доцент кафедры физической и коллоидной химии. **Адрес:** 140104, город Самарқанд, Республика Узбекистан, Университетский бульвар, 15. **Телефон:** (+998)915 44 44 50. **E-mail:** Khakimov-firuz@mail.ru

Сафармамадзода Сафармамад Муборақшо - Таджикский национальный университет, доктор химических наук, профессор кафедры неорганической химии **Адрес:** 734025, город Душанбе, Республика Таджикистан, проспект Рудаки, 17. **Телефон:** (+992)93 827 04 04. **E-mail:** sash65@mail.ru

Мамадгаминова Зебо Раҳматшоевна – Таджикский национальный университет, магистрант второго курса кафедры неорганической химии. **Адрес:** 734025, город Душанбе, Республика Таджикистан, проспект Рудаки, 17. **Телефон:** (+992)900 55 08 98. **E-mail:** mamadgaminovazebo@gmail.com.

Information about the authors: **Bobokalonov Tojiddin Barotmakhmadovich** - Tajik National University, Candidate of Chemical Sciences, Senior Lecturer of the Department of Analytical Chemistry. **Address:** 734025, Dushanbe city, Republic of Tajikistan, Rudaki Avenue, 17. **Phone:** (+992)918 15 70 26. **E-mail:** tojiddin_8989@mail.ru

Khakimov Firuz Kholikovich - Samarkand State University named after Sharof Rashidov, Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor of the Department of Physical and Colloid Chemistry. **Address:** 140104, Samarkand, Republic of Uzbekistan, University Boulevard, 15. **Phone:** (+998)915 44 44 50. **E-mail:** Khakimov-firuz@mail.ru

Safarmamadzoda Safarmamad Muboraksho - Tajik National University, Doctor of Chemical Sciences, Professor of the Department of Inorganic Chemistry. **Address:** 734025, Dushanbe city, Republic of Tajikistan, Rudaki Avenue, 17. **Phone:** (+992)93 827 04 04. **E-mail:** sash65@mail.ru

Mamadgaminova Zebo Rahmatshoevna – Tajik National University, second-year master's student of the Department of Inorganic Chemistry. **Address:** 734025, Dushanbe city, Republic of Tajikistan, Rudaki Avenue, 17. **Phone:** (+992)900 55 08 98. **E-mail:** mamadgaminovazebo@gmail.com.

Статья поступила в редакцию 02.12.2024
Одобрена после рецензирования 22.02.2024
Принята к публикации 10.04.2024

УДК 547.574 + 547.863.1

СИНТЕЗ 6,8-ДИНИТРО-11Н-ИНДЕНО[1,2-*b*]ХИНОКСАЛИН-11-ОНА И 1,3-ДИНИТРО-6Н-ИНДОЛО[2,3-*b*]ХИНОКСАЛИНА НА ОСНОВЕ 4,6-ДИНИТРО-*o*-ФЕНИЛЕНДИАМИНА

Мухторов¹ Л.Г., Каримов² М.Б., Шахкельдян¹ И.В., Атрощенко¹ Ю.М.

¹Тулский государственный педагогический университет им. Л.Н. Толстого,

²Душанбинский филиал национального исследовательского технологического университета «МИСиС» в городе Душанбе

Одним из интересных и перспективных классов гетероциклических соединений является индено[1,2-*b*]хиноксалин, производные которого используются в медицине и являются основой для разработки новых противовоспалительных, антибактериальных, противогрибковых препаратов, а также они обладают противоопухолевой активностью. Также эти производные используются в качестве красителей, антикоррозийного составляющего, органических полупроводников и т.д. [8-11]. Индоло[2,3-*b*]хиноксалины впервые получили в 1925 г. Эти вещества в своих молекулах имеют фрагменты индола и хиноксалина, их химия постоянно изучается. Vuu-Hoi N.P. и Saint-Ruf G. детально исследовали их получение конденсацией изатина и ароматических диаминов [12]. Они же предложили новое название исследованному классу соединений – индофеназины, поскольку они, как и феназин с серной кислотой дают красную окраску.

Данные соединения обладают различными видами биологической активности и, тем самым, принимают участие в создании новых лекарственных препаратов [13]. Изучение литературных источников показало, что основным способом формирования структуры 11Н-индено[1,2-*b*]хиноксалин-11-она и 6Н-индоло[2,3-*b*]хиноксалины является реакция взаимодействия *o*-фенилендиамина с нингидрином в уксуснокислой среде [14]. Большой интерес вызвала возможность расширить круг производных данного класса соединений. С этой целью был разработан метод получения 6,8-динитро-11Н-индено[1,2-*b*]хиноксалин-11-она, а также способ синтеза 1,3-динитро-6Н-индоло[2,3-*b*]хиноксалина, исходя из 4,6-динитро-орто-фенилендиамина (2-амино-4,6-динитроанилина). Поскольку оба данных исходных субстрата являются малодоступными соединениями, то в ходе нашего исследования были разработаны схемы их получения, основанные на использовании доступного и относительно дешевого фенола.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Выполнена с использованием приборов отечественного и зарубежного производства. ИК-спектры были сняты на Фурье-спектрометре ФСМ 2202 в таблетках KBr (1:200) с разрешением 4 см⁻¹. Спектры ¹H ЯМР регистрировались на спектрометре Bruker DRX-400 (400 МГц, DMSO-*d*₆), внутренний стандарт ГМДС. Спектры ¹³C ЯМР были сняты на спектрометре Bruker DRX-400 (151 МГц, DMSO-*d*₆), внутренний стандарт ГМДС.

Оптимизацию геометрических параметров исследуемых структур, расчет полной энергии проводили в программном пакете Firefly 8.2.0 [15] в рамках приближения теории функционала плотности с использованием гибридного трехпараметрического обменного функционала Беке [16] с корреляционным функционалом Ли-Янга-Парра [17] (B3LYP) [18] и базисного набора Даннинга aug-cc-pVDZ [19]. Полная оптимизация геометрии проводилась без ограничений по типу симметрии. Все рассчитанные в данной работе структуры являются стационарными точками на ППЭ, что было подтверждено анализом теоретического колебательного спектра, рассчитанного из гессиана, при этом для минимумов на ППЭ диагонализированная матрица Гесса содержит только положительные члены.

2-амино-4,6-динитроанилина. Синтез проводили по известной методике [20].

6,8-динитро-11Н-индено[1,2-*b*]хиноксалин-11-он (2). В круглодонную колбу, снабженную обратным холодильником и магнитной мешалкой, поместили 5 г (0,0252 моль) 2-амино-4,6-динитроанилина, 4,48 г (0,0252 моль) нингидрина и 150 мл ледяной СН₃СООН.

Смесь нагревали на кипящей водяной бане в течение 6 часов. После окончания реакции раствор оставили на ночь для созревания осадка. На следующий день осадок отфильтровали на фильтре Шотта, промыли его холодным изопропанолом. Перекристаллизацию проводили из этанола, а затем выделенный осадок сушили при комнатной температуре и при 60°C. Полученный продукт представляет собой кристаллы бурого-зеленого цвета. Выход составил 75% (8,15 г), $T_{пл} = 281-283^\circ\text{C}$. ИК-спектр (KBr): 1733 cm^{-1} (C=O); 1581 cm^{-1} , 1541 cm^{-1} (-NO₂). ЯМР ¹H спектр (400 МГц, DMSO-*d*₆): δ 9.25 (д, $J = 2.4$ Гц, 1H), 9.21 (д, $J = 2.4$ Гц, 1H), 8.15 (д, $J = 7.5$ Гц, 1H), 8.01 (д, $J = 7.4$ Гц, 1H), 7.96 (т, $J = 7.3$ Гц, 1H), 7.86 (т, $J = 7.4$ Гц, 1H). ¹³C ЯМР (151 МГц, DMSO-*d*₆): δ 187.94, 160.64, 154.15, 148.05, 146.53, 141.75, 140.13, 137.10.

1,3-динитро-6H-индоло[2,3-*b*]хиноксалин (3). В круглодонную колбу, снабженную обратным холодильником и магнитной мешалкой, мы поместили 3 г (0,015 моль) 2-амино-4,6-динитроанилина, 2,27 г (0,015 моль) изатина и 30 мл ледяной уксусной кислоты. Смесь нагревали на кипящей водяной бане в течение 9 часов. После окончания реакции раствор оставили на ночь для созревания осадка. На следующий день осадок отфильтровали на фильтре Шотта, промыли его холодным изопропанолом. Перекристаллизацию проводили из этанола, а затем выделенный осадок сушили при комнатной температуре и при 60°C. Полученный продукт представляет собой кристаллы темно-песочного цвета. Выход составил 92% (2,76 г). $R_f=0$, 39. ЯМР ¹H спектр (600 МГц, DMSO-*d*₆): δ 7,59 (ддд, $J = 7,6$; 1,4;0, 8 Гц, 1H), 7,50 (дд, $J = 7,7$;1,3 Гц, 1H), 7,07 (тд, $J = 7,5$,0,9 Гц, 1H), ¹³C ЯМР (151 МГц, DMSO-*d*₆): δ 184.83, 159.80, 151.17, 144.01, 134.71, 133.10 и 118.26 м.д. Вычислено, %: С, 54.39; Н, 2.50; N, 22.70; О 20.71. Найдено, %: С₁₄Н₇Н₅О₄: С, 54.38; Н, 2.28; N, 22.65; О, 20.69.

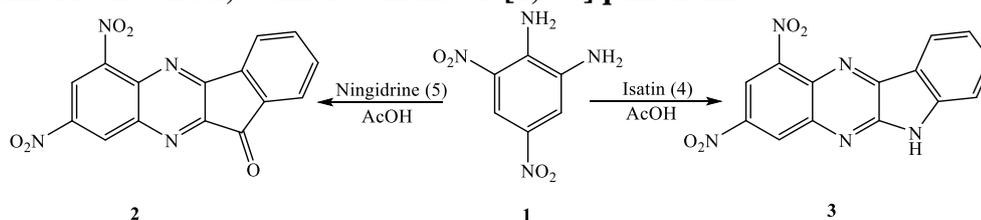
ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

В целом, общие методы получения 6,8-динитро-11H-индено[1,2-*b*]хиноксалин-11-она и 1,3-динитро-6H-индоло[2,3-*b*]хиноксалина, использованные в работе, представляют собой сложные многостадийные процессы, представленные на **схеме 1**.

Синтез 6,8-динитро-11H-индено[1,2-*b*]хиноксалин-11-она и 1,3-динитро-6H-индоло[2,3-*b*]хиноксалина был проведён путём ацилирования, проведённого между имидной (NH₂) и карбонильной (C=O) группами. Из исходного соединения 2-амино-4,6-динитроанилина (1) было получено новым методом межмолекулярной циклизации в присутствии приобретённого коммерческим путём трикетогидринденгидрата (нингидрин) в растворе уксусной кислоты соединение 6,8-динитро-11H-индено[1,2-*b*]хиноксалин-11-он (2). Далее методом межмолекулярной циклизации в присутствии приобретённого коммерческим путём индол-2,3-диона (изатин) в растворе уксусной кислоты было получено соединение 1,3-динитро-6H-индоло[2,3-*b*]хиноксалин (3). Образование указанных соединений было доказано с применением методов ИК-, ¹H и ¹³C ЯМР-спектроскопии и элементного анализа.

Схема 1. Общий план синтеза 6,8-динитро-11H-индено[1,2-*b*]хиноксалин-11-она и 1,3-динитро-6H-индоло[2,3-*b*]хиноксалина

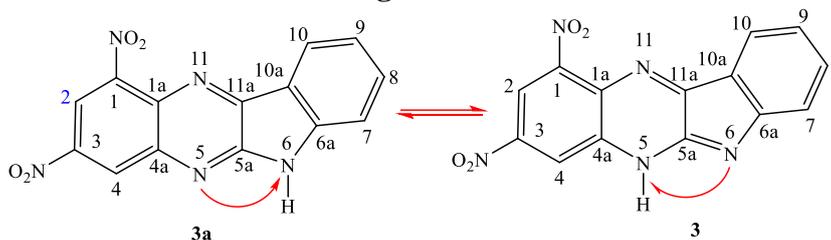
Scheme 1. General plan for the synthesis of 6,8-dinitro-11H-indeno[1,2-*b*]quinoxalin-11-one and 1,3-dinitro-6H-indolo[2,3-*b*]quinoxaline



Данные литературных источников [21] индолохиноксалиновых производных показали, что возможна таутомерия внутримолекулярного водорода имидной группы между индольным и бензольным кольцами (схема 2)

Схема 2. Таутомерия внутримолекулярного водорода между индольными и бензольными кольцами

Scheme 2. Tautomerism of intramolecular hydrogen between indole and benzene rings



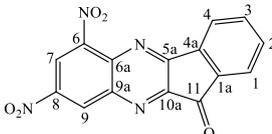
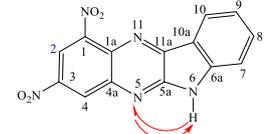
Проведена геометрическая оптимизация и расчет полной энергии соединений **3** и **3a** методом DFT/B3LYP/aug-cc-pVDZ в газовой фазе. Как показали данные расчёта структура **3a** является более стабильной на 51,4 кДж/моль.

В спектре ^1H ЯМР 6,8-динитро-11H-индено[1,2-*b*]хиноксалин-11-она наблюдаются две группы сигналов. В более слабом поле сигналы атомов водорода H^7 и H^9 динитрозамещенного кольца хиноксалина представлены в виде двух дублетных сигналов при δ 9.25 и 9.21 м.д. с константой спин-спинового взаимодействия 4J 2,5 Гц. Четырехспиновая система бензаннелированного кольца индена в более сильном поле выражена двумя дублетами при δ 8.15 и 8.01 м.д. и двумя триплетами при δ 7.95 и 7.86 м.д. ($^3J = 7.4 - 7.5$ Гц). Следует отметить, что эти сигналы уширены. В спектре ЯМР с использованием импульсной последовательности DEPT-135 амплитуды сигналов четвертичных атомов углерода положительны ($\delta_c = 187.94, 106.64, 145.15, 148.05, 146.53, 141.75, 140.13, 138.44, 137.10$ м.д.), а групп C-H – отрицательны ($\delta_c = 137.86, 135.20, 129.53, 125.07, 124.04, 120.25$ м.д.). В наиболее слабом поле при $\delta_c = 187.94$ м.д. наблюдается сигнал карбонильного атома углерода C=O. Таким образом, полученные данные могут служить для идентификации 6,8-динитро-11H-индено[1,2-*b*]хиноксалин-11-она методом ^1H ЯМР спектроскопии. Строение синтезированного соединения подтверждается данными ЯМР спектроскопии. В наиболее слабом поле при δ 11.02 м.д. фиксируется уширенный синглет NH-протона индольного фрагмента. Интересно отметить, что при δ 8.98 м.д. также наблюдается уширенный синглет, который может быть отнесен к NH-протону хиноксалинового фрагмента, если предположить возможность 5H – 6H таутомерии (схема 1). Сигналы протонов H^2 и H^4 динитроароматического фрагмента объединяются в общий синглет при δ 9.05 м.д. В области δ 6.91-8.98 м.д. наблюдаются сигналы 4-х спиновой системы протонов конденсированного бензольного кольца индола. При этом, пики ароматических протонов хорошо разрешены и проявляются в виде: дублета триплетов протона H^8 при δ 6.11 м.д. ($J = 7.9; 0.8$ Гц), дублета дублетов дублетов протона H^7 при δ 7.59 м.д. ($J = 7.6; 1.4; 0.8$ Гц), триплета дублетов протона H^9 при δ 7.07 м.д. ($J = 7.5; 0.9$ Гц) и дублета дублетов протона H^{10} при δ 7.50 м.д. ($J = 7.7; 1.3$ Гц). В спектре гомоядерной H-H корреляции COSY присутствуют пики, соответствующие КССВ через 3 связи ($J_{\text{орто}}$).

Молекулярное строение 1,3-динитро-6H-индола[2,3-*b*]хиноксалина подтверждается также данными ^{13}C ЯМР спектроскопии. В спектре анализируемого соединения должны наблюдаться сигналы от 14 неэквивалентных атомов углерода, 8 из которых четвертичные, а 6 - третичные. В спектре ЯМР с использованием импульсной последовательности DEPT-135 амплитуды сигналов четвертичных атомов углерода положительны ($\delta_c = 184.83, 159.80, 151.17, 144.01, 134.71, 133.10$ и 118.26 м.д.), а групп C-H - отрицательны ($\delta_c = 138.83, 128.49, 125.13, 123.22$ и 112.66 м.д.). При этом, сигналы атомов углерода C^1 и C^3 , а также C^2 и C^4 , проявляются в спектре в виде общих сигналов при δ_c 133.10 и 128.49 м.д., соответственно. Вероятно, этот факт также связан с возможностью NH-таутомерии.

Для отнесения сигналов атомов углерода для соединения 1,3-динитро-6H-индола[2,3-*b*]хиноксалина (**3**) 1,3-динитро-5H-индола[2,3-*b*]хиноксалина (**3a**) были записаны двумерные спектры гетероядерной C-H корреляции HSQC и HMBC. В спектре

HSQC наблюдаются корреляционные пики КССВ через 2 связи $^1J_{C-H}$, что помогает отнести сигналы третичных атомов углерод: $\delta_C = 133.10$ (C^1, C^3), 128.49 (C^2, C^4), 112.66 (C^7), 138.83 (C^8), 123.22 (C^9) и 125.13 (C^{10}) м.д. Сделанное отнесение подтверждается наличием корреляционных пиков в спектре HMBC, соответствующие КССВ через 2 и 3 связи. Для NH-протона фрагмента индола в спектре HMBC фиксируется слабый корреляционный пик NH/ C^{5a} , что позволяет выделить сигнал этого атома углерода при δ_C 184.83 (C^{5a}). Сигналы атомов углерода C^{1a} (δ_C 144.01 м.д.) и C^{4a} (δ_C 134.71 м.д.) могут быть обнаружены по КССВ с протонами H^2 и H^4 фрагмента хиноксалина, а атомов углерода C^{6a} (δ_C 151.17 м.д.) и C^{10a} (δ_C 118.26 м.д.) – соответственно по КССВ с протонами $H^7 - H^{10}$ фрагмента индола. Сигнал, не имеющий корреляционных пиков в спектре HMBC, при δ_C 159.80 м.д. может быть отнесен к четвертичному атому углерода C^{11a} . Структуры 6,8-динитро-11H-индено[1,2-*b*]хиноксалин-11-она (**3-3a**) и 1,3-динитро-6H-индола[2,3-*b*]хиноксалина (**7**) были установлены методами спектрального анализа (рис.1-9). Результаты приведены в таблице 1.

								
№ атома	δ_H , м.д.	δ_C , м.д.	HSQC ($^1H/^{13}C$)	HMBC ($^1H/^{13}C$)	δ_H , м.д.	δ_C , м.д.	HSQC ($^1H/^{13}C$)	HMBC ($^1H/^{13}C$)
1	8.01 (д)	125.07	H^1/C^1	H^1/C^3 , H^1/C^2 , H^1/C^{4a} , H^1/C^{11}	-	133.10	-	-
1a	-	138.44	-	-	-	144.01	-	$-H^2/C^1; H^2/C^{1a}$
2	7.86 (т)	135.20	H^2/C^2	H^2/C^1 , H^2/C^4 , H^2/C^{1a}	9.05 с	128.49	H^2/C^2	-
3	7.96 (т)	137.86	H^3/C^3	H^3/C^1 , H^3/C^4 , H^3/C^2 , H^3/C^{4a}	-	133.10	-	-
4	8.15 (д)	124.04	H^4/C^4	H^4/C^2 , H^1/C^{1a} , H^4/C^{5a}	9.05 с	128.49	H^4/C^4	$H^4/C^3; H^4/C^{1a}$, H^4/C^{4a}
4a	-	140.13	-	-	-	134.71	-	-
5a	-	160.64	-	-	-	184.83	-	-
6	-	148.05	-	-	-	-	-	-
6a	-	137.10	-	-	-	151.17	-	-
7	9.25 (д)	120.25	H^7/C^7	H^7/C^9 , H^7/C^{6a} , H^7/C^8 , H^7/C^6	6.11 дт. (7.9;0.8)	112.66	H^7/C^7	H^7/C^{10a}
8	-	146.53	-	-	7.59 дд. (7.6; 1.4; 0.8)	138.83	H^8/C^8	$H^8/C^{10}; H^8/C^{6a}$
9	9.21 (д)	129.53	H^9/C^9	H^9/C^7 , H^9/C^{6a}	7.07 тд. (7.5;0.9)	123.22	H^9/C^9	$H^9/C^7; H^9/C^{10a}$

				H^9/C^{9a} , H^9/C^8 , H^9/C^6				
9a	-	141.75	-	-	-	-	-	-
10	-	129.53	-	-	7.50 тд. (7.7;1.3)	125.13	H^{10}/C^{10}	$H^{10}/C^{6a}; H^{10}/C^8$
10a	-	154.15	-	-		118.26	-	-
11	-	187.95	-	-	-	-	-	-
NH	-	-	-	-	8.98 с. 11.02 с.	-	-	NH/C^{5a}

Таблица 1. Данные спектров 1H , ^{13}C и гетероядерной корреляции (HSQC, HMBC)

Table 1. Data from 1H , ^{13}C spectra and heteronuclear correlation (HSQC, HMBC)

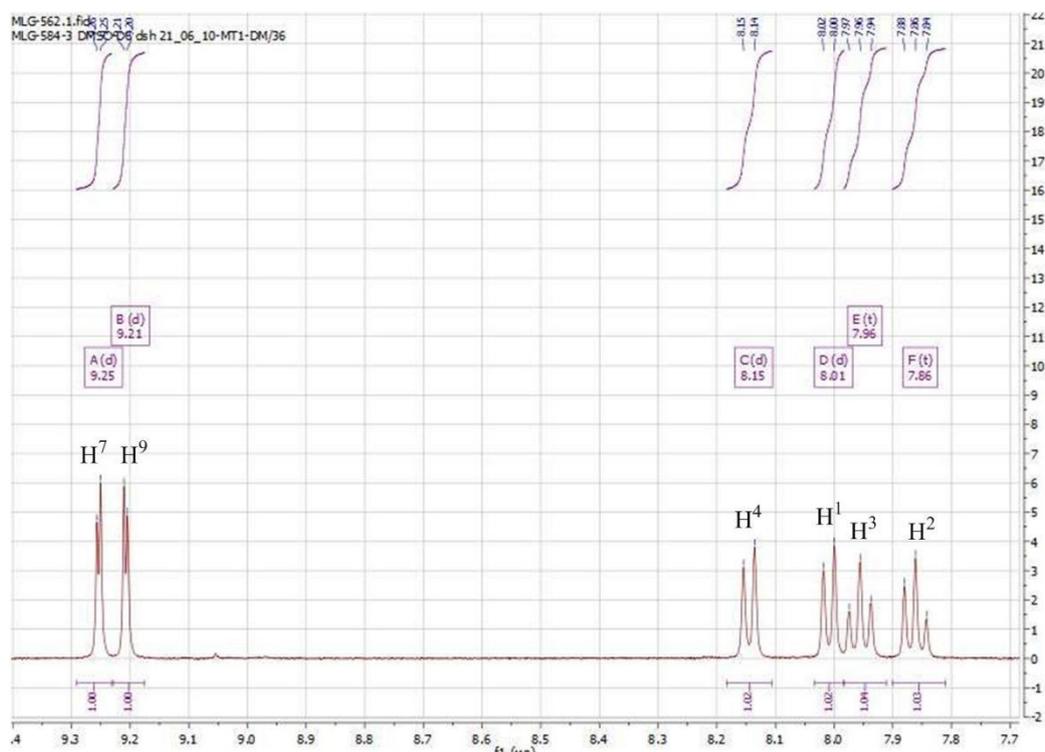


Рис. 1. Спектр ЯМР 1H (400 МГц, $DMSO-D_6$) 6,8-динитро-11H-индено[1,2-*b*]хиноксалин-11-она

Fig. 1. 1H NMR spectrum (400 MHz, $DMSO-D_6$) of 6, 8-dinitro-11H-indeno[1,2-*b*]quinoxalin-11-one

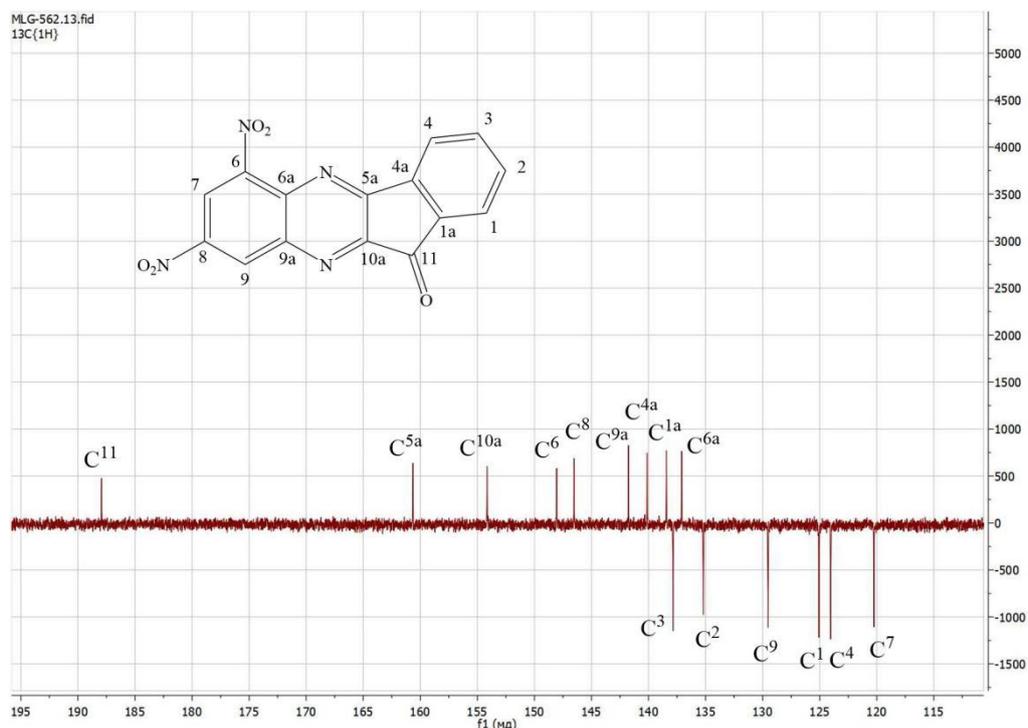


Рис. 2. Спектр ЯМР ^{13}C (151 МГц, DMSO- D_6) 6,8-динитро-11H-индено[1,2-
b]хиноксалин-11-она

Fig.2. ^{13}C NMR spectrum (151 MHz, DMSO- D_6) of 6,8-dinitro-11H-indeno[1,2-
b]quinoxalin-11-one

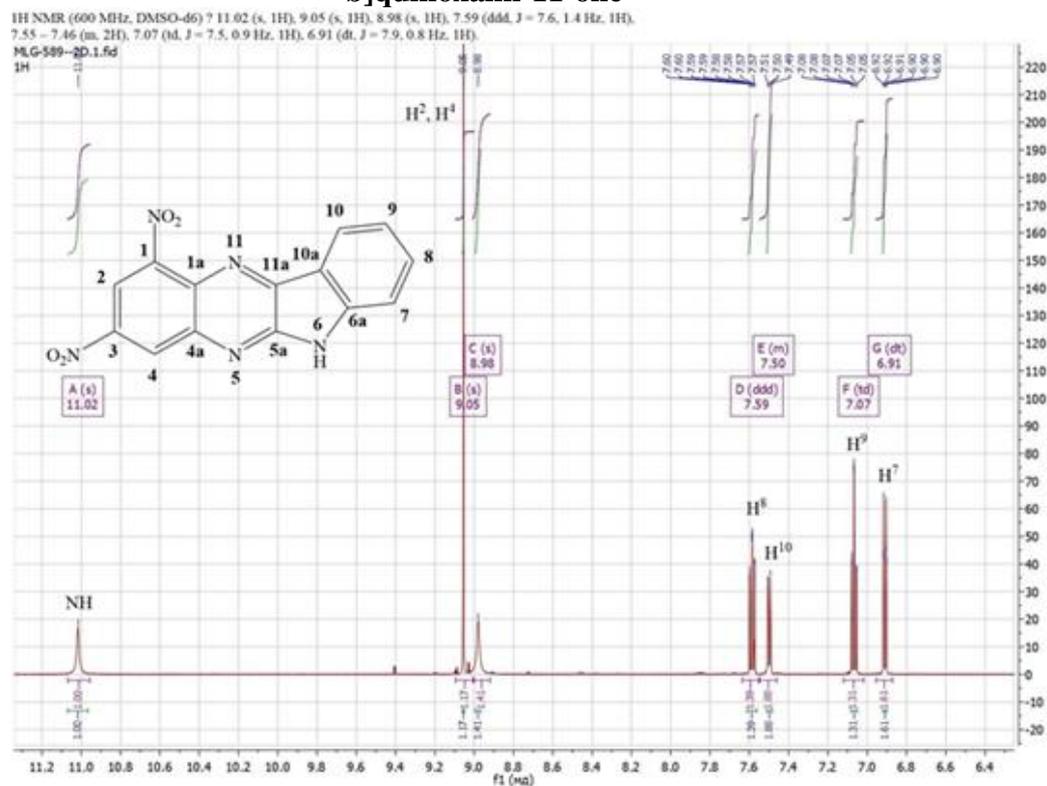


Рис.3. Спектр ЯМР ^1H (600 МГц, DMSO- D_6) 1,3-динитро-6H-индоло[2,3-
b]хиноксалина

Fig.3. ^1H NMR spectrum (600 MHz, DMSO- D_6) of 1,3-dinitro-6H-indolo[2,3-
b]quinoxaline

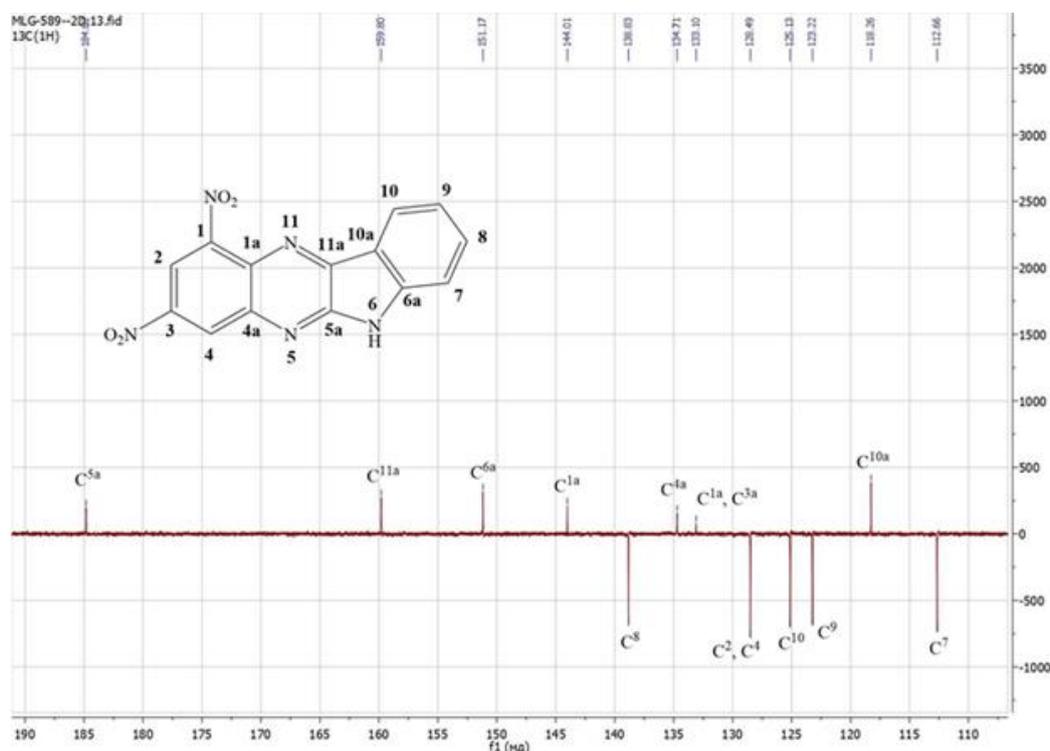


Рис.4. Спектр ЯМР ^{13}C (151 МГц, DMSO-D_6) 1,3-динитро-6H-индоло[2,3-b]хиноксалина

Fig.4. ^{13}C NMR spectrum (151 MHz, DMSO-D_6) of 1,3-dinitro-6H-indolo[2,3-b]quinoxaline

ВЫВОДЫ

В рамках расширения группы производных хиноксалина разработаны и осуществлены многостадийные синтезы не описанных ранее в литературных источниках соединений - 6,8-динитро-11H-индено[1,2-*b*]хиноксалин-1-она и 1,3-динитро-6H-индоло[2,3-*b*]хиноксалина, проведённые новым методом межмолекулярной циклизации в присутствии приобретённых коммерческим путём трикетогидринденгидрата (нингидрин) и индол-2,3-диона (изатин) в растворе уксусной кислоты. Перечень использованные реагентов, а также условия для проведения реакций были определены экспериментальным путём. Данные соединения, как производные хиноксалина, обладают различными видами биологической активности и, тем самым, возможно использование их в создании новых лекарственных препаратов. Изучением литературных источников по части индолохиноксалиновых производных установлена возможность таутомерии внутримолекулярного водорода имидной группы между индольным и бензольным кольцами. Методами ИК-, ЯМР ^1H , ^{13}C , НМВС и HSQC-спектроскопии доказана структура полученных соединений, а также определены их физико-химические характеристики. Разработанные методики синтезов отличаются относительной простотой исполнения, мягкими условиями, доступностью реагентов и позволяют получать целевые продукты с выходом 75% (для 6,8-динитро-11H-индено[1,2-*b*] хиноксалин-11-она) и 92% (для 1,3-динитро-6H-индоло[2,3-*b*]хиноксалина).

Рецензент: Манонов К. А.,
кандидат химических наук, доцент

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Cabal M.P., 1,2,1, 3, and 1,4-Diazines and Related Systems. Modern Heterocyclic Chemistry / M.P. Cabal, J. Alvarez-Builla, J.J. Vaquero, J. Barluengo, Six-Membered Heterocycles // Weinheim. Wiley-VCH Verlag & Co. 2011. – Pp.1683 – 1776.
- [2] Шибинская М.О., Синтез и биологическая активность производных 7H-бензо [4,5] индоло[2,3-*b*]хиноксалина. / М.О. Шибинская, С.А. Ляхов, А.В. Мазепа, Андронати С.А., Туров А.В.,

- Жолобак Н.М., Спивак Н.Я. // Европейский журнал медицинской химии. - 2011. - С.1237-1243. doi:10.1016/j.ejmech.2010.11.040
- [3] Luo X., Cinnamil- and Quinoxaline-Derivative Indicator Dyes for Detecting Volatile Amines in Fish Spoilage. / X. Luo, L.-T. Lim // Department of Food Science, University of Guelph. Guelph. 2019. 13. P. doi:10.3390/molecules24203673
- [4] Achelle S., Luminescent materials incorporating pyrazine or quinoxaline moieties. / S. Achelle, C. Baudequin, N. Plé // Dyes and Pigments. Elsevier. 2013. 98. No. 3. P. 575-600. doi:10.1016/j.dyepig.2013.03.030
- [5] Kim H., Synthesis and Characterization of Quinoxaline Derivative as Organic Semiconductors for Organic Thin-Film Transistors. / H. Kim, M. R. Reddy, S.-S. Hong, C. Kim, S.Y. Seo // Journal of Nanoscience and Nanotechnology. 2017. V. 17. No. 8. P. 5530-5538.
- [6] Jonathan L., Quinoxaline-oligopyrroles / L. Jonathan, M. Hiromitsu, M. Toshihisa, M.L. Vincent, F. Hiroiyuki, // Improved pyrrole-based anion receptors. Chem. Commun. 2002. No. 8. P. 862 – 863.
- [7] Gu Z., cytotoxic evaluation and DNA binding study of 9-fluoro-6H-indolo[2,3-*b*]quinoxaline derivatives / Z. Gu, Li Y, Ma S, Li S., G. Zhou, S. Ding, J. Zhang, S. Wang, C. Zhou, Synthesis // RSC Advances. 2017. V. 7. No. 66. P. 41869-41879. doi:10.1039/c7ra08138c
- [8] Коврижина А., 11Н-индено[1,2-*b*] хиноксалин-11-он 2-(4-этилбензилиден)гидразин / А. Коврижина, Е. Самородова, А. Хлебников // Милбанк . - 2021. Вып. – С. 4. 7.
- [9] Tseng C.-H., Discovery of indeno[1,2-*b*] quinoxaline derivatives as potential anticancer agents / C.-H. Tseng, Y.-R. Chen, C.-C. Tzeng, W. Liu, C.-K. Chou, C.-C. Chiu, Y.-L. Chen // European Journal of Medicinal Chemistry. 2016. V. 108. P. 258-273. doi:10.1016/j.ejmech.2015.11.031
- [10] Singh R., Recent advancement in the synthesis of diverse spiro-indeno[1,2-*b*]quinoxalines: a review / R. Singh, D. Bhardwaj, M. R. Saini // RSC Advances. 2021. V. 11. No. 8. P.4760–4804. doi:10.1039/d0ra09130h
- [11] Obota I.B., Indeno-1-one [2,3-*b*]quinoxaline as an effective inhibitor for the corrosion of mild steel in 0.5M H₂SO₄ solution / I.B. Obota, N.O. Obi-Egbedi // Materials Chemistry and Physics. 2010. V. 122. P. 325-328.
- [12] Buu-Hoi N.P, Saint-Ruf G. Bull. Soc. Chim. Fr. 1960, 1920.
- [13] Pereira J.A., Quinoxaline, its derivatives and applications / J.A. Pereira, A.M. Pessoa, M.N.D. Cordeiro, R. Fernandes, C. Prudêncio, J.P. Noronha, M. Vieira // A State of the Art review. Eur. J. Med. Chem. 2015. V. 97. P. 664–672. doi:10.1016/j.ejmech.2014.06.058
- [14] Ruhemann S. Cyclic di- and tri-ketones. J. Chem. Soc / Ruhemann S. // Trans. 1910. V. 97.
- [15]. Granovsky A. A. Firefly version 8.0. – 2016. – URL: [http / A. A. Granovsky // classic.chem.msu.ru/firefly/index.html](http://A.A.Granovsky/classic.chem.msu.ru/firefly/index.html).
- [16]. Becke A. D. Density-functional thermochemistry. III. / A. D. Becke // The role of exact exchange. J. Chem. Phys. 1993. T 98. No. 7. P. 5648-5652.
- [17]. Lee C., Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density / C. Lee, W. Yang, R. G. Parr // Physical review B. 1988. T 37. No. 2. P. 785. doi:10.1103/physrevb.37.785
- [18]. Stephens P. J., Ab initio calculation of vibrational absorption and circular dichroism spectra using density functional force fields / P. J. Stephens, F. J. Devlin, C. F. Chabalowski, M. J. Frisch // The Journal of Physical Chemistry. 1994. T 98. No. 45. P. 11623-11627. doi:10.1021/j100096a001
- [19]. Dunning Jr T. H. Gaussian basis sets for use in correlated molecular calculations. I. The atoms boron through neon and hydrogen / T. H. Dunning Jr // The Journal of chemical physics. 1989. T 90. N 2. P. 1007-1023.
- [20] Corona P., Synthesis of N-(5,7-diamino-3-phenyl-quinoxalin-2-yl)-3,4,5-substituted anilines and N-[4[(5,7-diamino-3-phenylquinoxalin-2-yl)amino]benzoyl]-L-glutamic acid diethyl ester: Evaluation of in vitro anti-cancer and anti-folate activities / P. Corona, M. Loriga, M. P. Costi, S. Ferrari, G. Paglietti // European Journal of Medicinal Chemistry. 2008. N 43. P.189-203. doi:10.1016/j.ejmech.2007.03.035
- [21] Грачев В. Т., Таутомерия, электронные структуры и электронные спектры индоло[2,3-*b*]хиноксалина и его производных / В. Т. Грачев, А. В. Иващенко, С. П. Иващенко, Б. Г. Герасимов, В. Н. Лисютенко, Б. Е. Зайцев // Химия гетероциклических соединений. - 1982. - Т 18. – С. 974-978. doi:10.1007/bf00513446

REFERENCES

- [1] Cabal M.P., 1,2,1, 3, and 1,4-Diazines and Related Systems. Modern Heterocyclic Chemistry / M.P. Cabal, J. Alvarez-Builla, J.J. Vaquero, J. Barluengo, Six-Membered Heterocycles // Weinheim. Wiley-VCH Verlag & Co. 2011. – P.1683 – 1776.
- [2] Shibinskaya M.O., Synthesis and biological activity of 7H-benzo[4,5]indolo[2,3-*b*]quinoxaline derivatives / M.O. Shibinskaya, S.A. Lyakhov, A.V. Mazepa, S.A. Andronati, A.V. Turov, N.M. Zholobak, N.Ya. Spivak // European Journal of Medicinal Chemistry. 2011. – P.1237-1243. doi:10.1016/j.ejmech.2010.11.040
- [3] Luo X., Cinnamil- and Quinoxaline-Derivative Indicator Dyes for Detecting Volatile Amines in Fish Spoilage / X. Luo, L.-T. Lim // Department of Food Science, University of Guelph. Guelph. 2019. – 13 p. doi:10.3390/molecules24203673
- [4] Achelle S., Luminescent materials incorporating pyrazine or quinoxaline moieties / S. Achelle, C. Baudequin, N. Plé // Dyes and Pigments. Elsevier. 2013. V 98. N. 3. – P.575-600. doi:10.1016/j.dyepig.2013.03.030
- [5] Kim H., Synthesis and Characterization of Quinoxaline Derivative as Organic Semiconductors for Organic Thin-Film Transistors / H. Kim, M. R. Reddy, S.-S. Hong, C. Kim, S.Y. Seo // Journal of Nanoscience and Nanotechnology. 2017. V 17. N. 8. – P.5530-5538.

- [6] Jonathan L., Quinoxaline-oligopyrroles: Improved pyrrole-based anion receptors / L. Jonathan, M. Hiromitsu, M. Toshihisa, M.L.Vincent, F. Hiroyuki // *Chem. Commun.* 2002. N. 8. – P.862 – 863.
- [7] Gu Z., cytotoxic evaluation and DNA binding study of 9-fluoro-6H-indolo[2,3-b]quinoxaline derivatives / Z. Gu, Y. Li, S. Ma, S. Li, G. Zhou, S. Ding, Zhang J., Wang S., Zhou C. *Synthesis*, // *RSC Advances*. 2017. V 7. N. 66. – P.41869-41879. doi:10.1039/c7ra08138c
- [8] Kovrizhina A., 11H-Indeno[1,2-b]quinoxalin-11-one 2-(4-ethylbenzylidene)hydrazine / A. Kovrizhina, E. Samorodova, A. Khlebnikov // *Molbank*. 2021. N. 4. – 7 p.
- [9] Tseng C.-H., Discovery of indeno[1,2-b]quinoxaline derivatives as potential anticancer agents / C.-H. Tseng, Y.-R. Chen, C.-C. Tzeng, W. Liu, C.-K. Chou, C.-C. Chiu, Y.-L. Chen // *European Journal of Medicinal Chemistry*. 2016. V. 108. – P.258-273. doi:10.1016/j.ejmech.2015.11.031
- [10] Singh R., Recent advancement in the synthesis of diverse spiro-indeno[1,2-b]quinoxalines: a review / R. Singh, D. Bhardwaj, M. R. Saini // *RSC Advances*. 2021. V. 11. N. 8. – P.4760–4804. doi:10.1039/d0ra09130h
- [11] Obota I.B., Obi-Egbedi N.O. Indeno-1-one [2,3-b]quinoxaline as an effective inhibitor for the corrosion of mild steel in 0.5M H₂SO₄ solution / I.B. Obota, N.O. Obi-Egbedi // *Materials Chemistry and Physics*. 2010. V. 122. – P. 325-328.
- [12] Buu-Hoi N.P, Soc / Buu-Hoi N.P, Saint-Ruf G. Bull. // *Chim. Fr.* 1960, 1920.
- [13] Pereira J.A., Quinoxaline, its derivatives and applications / J.A. Pereira, A.M. Pessoa, M.N.D.Cordeiro, R. Fernandes, C. Prudêncio, J.P. Noronha, M. Vieira // *A State of the Art review. Eur. J. Med. Chem.* 2015. V. 97. – P.664–672. doi:10.1016/j.ejmech.2014.06.058
- [14] Ruhemann S. Cyclic di- and tri-ketones. *J. Chem. Soc / S. Ruhemann // Trans.* 1910. V 97.
- [15]. Granovsky A. A. Firefly version 8.0. – 2016. – URL: [http / A. A. Granovsky //classic.chem.ms.u.su/gran/firefly/index.html](http://A.A.Granovsky/classic.chem.ms.u.su/gran/firefly/index.html).
- [16]. Becke A. D. Density-functional thermochemistry. III. / A. D. Becke // *The role of exact exchange. J. Chem. Phys.* 1993. T 98. N. 7. – P.5648-5652.
- [17]. Lee C., Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density / C. Lee, W. Yang, R. G. Parr // *Physical review B.* 1988. T 37. N. 2. –785 p. doi:10.1103/physrevb.37.785
- [18]. Stephens P. J., Ab initio calculation of vibrational absorption and circular dichroism spectra using density functional force fields / P. J. Stephens, F. J. Devlin, C. F. Chabalowski, M. J. Frisch // *The Journal of Physical Chemistry.* 1994. T 98. N 45. – P. 11623-11627. doi:10.1021/j100096a001
- [19]. Dunning Jr T. H. Gaussian basis sets for use in correlated molecular calculations. I. The atoms boron through neon and hydrogen / T. H. Dunning Jr // *The Journal of chemical physics.* 1989. V. 90. N. 2. – P. 1007-1023.
- [20] Corona P., Synthesis of N-(5,7-diamino-3-phenyl-quinoxalin-2-yl)-3,4,5-substituted anilines and N-[4[(5,7-diamino-3-phenylquinoxalin-2-yl)amino]benzoyl]-L-glutamic acid diethyl ester: Evaluation of in vitro anti-cancer and anti-folate activities / P. Corona, M. Loriga, M. P. Costi, S. Ferrari, G. Paglietti // *European Journal of Medicinal Chemistry.* 2008. N 43. – P.189-203. doi:10.1016/j. ejmech. 2007.03.035
- [21] Grachev V. T., Tautomerism, electronic structures, and electronic spectra of indolo[2,3-b]quinoxaline and its derivatives / V. T. Grachev, A. V. Ivashchenko, S. P. Ivashchenko, B. G. Gerasimov, V. N. Lisyutenko, B. E. Zaitsev // *Chemistry of Heterocyclic Compounds.* 1982. V. 18. – P. 974–978. doi:10.1007/bf00513446

СИНТЕЗИ 6,8-ДИНИТРО-11Н-ИНДЕНО[1,2-Ь]ХИНОКСАЛИН-11-ОН ВА 1,3-ДИНИТРО-6Н-ИНДОЛО [2,3- Ъ]ХИНОКСАЛИН ДАР АСОСИ 4,6-DINITRO-о – ФЕНИЛЕНДИАМИН

Вазифаи аввалиндарачаи химияи органикӣ аз истеҳсоли системаҳои нави гетеросиклӣ иборат аст. Ҳосилаҳои хиноксалин порчаҳои бисёр пайвастагиҳои аз ҷиҳати биологӣ фаъол ва фармакологӣ муҳим мебошанд [1]: агонистҳо ва антагонистҳои ретсепторҳои гуногун, доруҳои дорони фаъолияти баланди бактериявӣ ё зиддивирӯсианд [2]. Илова бар ин, онҳо ҳамчун соҳаҳои рангуборсозӣ васеъ истифода бурда шуда[3], маводи самараноки электролюминесцентӣ мебошанд [4] ва ҳамчун нимқоқилҳои органикӣ [5], "блокҳои сохтмонӣ" дар синтези ретсепторҳои анионҳо [6] ва агентҳои пайваस्तкунандаи ДНК [7] истифода мешаванд. Дар доираи тадқиқот, синтези пайвастагиҳои, ки қаблан дар адабиёт тавсиф нашудаанд- 6,8-динитро-11Н-индено[1,2-Ь]хиноксалин-1-он ва 1,3-динитро-6Н-индоло гузаронида шуданд. [2, 3-Ь] хиноксалин. 6,8-динитро-11Н-индено[1,2-Ь]хтноксалин-1-он бо табадулоти 2-амин-4,6-динитроанилин, нингидрин ва кислотаи уксусии яхин (беоб) тавассути гарм кардани омехта дар оби ҷӯшон омода карда шуд. Ҳамоҷаи обӣ барои шаш соат дар ҳарорати гамрӣ гузаронида шудааст. Мо таҳшинро дар муддати як шабонарӯз интизор шудем, то тақсон нағз ба табадулоти кимиёвӣ ва ҷамъшавии модди охирро интизор шудем. Пас аз тақсон кардан дар тақсон (элакча)-и ном олими барҷастаи олам (Шотт) тақсон кардем, ва бо изопропаноли хунук шуста, аз этанол дубора кристалл карда шуд ва филтрати (тақшони баъди карда) ҷудошуда дар ҳарорати хонагӣ ва дар 60°C хушк карда шуд. 1,3-динитро-6Н-индоло[2,3-Ь]хтноксалин бо реаксияи 2-амин-4,6-динитроанилин, изитин ва кислотаи уксуси хунук (бе об) синтез карда шуд. Омехтаро дар ҳамоҷаи обӣ дар муддати 9 соат ҷӯшонидем. Пас аз ба итмом расидани реаксия маҳлулро дар муддати 24 соат мондем. Рӯзи дигар он дар филтри Шотт тақсон ва бо изопропаноли хунук шуста шуд. Пекристаллизатсия аз этанол гузаронида шуд, сипас тақшони ҷудошуда аввал дар ҳарорати хонагӣ, сипас дар 60°C эҳтиёткорона хушк карда шуд, то таркибашро вайрон накунад. Сохтори пайвастагиҳои бадастомада бо истифода аз маълумоти спектроскопии ¹H, ¹³C NMR ва гетеронуклеарӣ (HMBC, HSQC), инчунин, таҳлили элементарӣ, масса ва спектроскопияи IR муқаррар карда шуд. Усулҳои таҳияшудаи синтез бо осонии нисбии

ичро, шароити мусоид, мавҷудияти реактивҳо фарқ мекунад ва имкон медиҳанд, ки маҳсулоти мақсаднок бо ҳосили 75% (барои 6,8-динитро-11Н-индено[1,2-б]) ба даст оварда шаванд.

Калидвожаҳо: конденсатсия, изотин, нингидрин, халкаи бензолии 4,6-динитро-о-фенилендиамин, 6,8-динитро-11Н-индено[1,2-б]хиноксалин-11-он, 1,3-динитро-6Н-индоло[2,3-б]хиноксалин.

СИНТЕЗ 6,8-ДИНИТРО-11Н-ИНДЕНО[1,2-б]ХИНОКСАЛИН-11-ОНА И 1,3-ДИНИТРО-6Н-ИНДОЛО [2,3- б]ХИНОКСАЛИНА НА ОСНОВЕ 4,6-ДИНИТРО-о-ФЕНИЛЕНДИАМИНА

К первостепенным задачам органической химии относится получение новых азотсодержащих гетероциклических систем. Производные хиноксалина представляют собой фрагменты многих биологически активных и фармакологически важных соединений [1]: агонистов и антагонистов различных рецепторов, препаратов с высокой антибактериальной или противовирусной активностью [2]. Кроме того, известно, что они используются в качестве красителей [3], эффективных электролюминесцентных материалов [4], органических полупроводников [5], «строительных блоков» в синтезе анионных рецепторов [6] и ДНК-связывающих агентов [7]. В рамках исследования проведены синтезы не описанных ранее в литературных источниках соединений - 6,8-динитро-11Н-индено[1,2-б]хиноксалин-1-она и 1,3-динитро-6Н-индоло[2,3-б]хиноксалина. 6,8-динитро-11Н-индено[1,2-б]хиноксалин-1-он получен реакцией 2-амино-4,6-динитроанилина, нингидрина и ледяной уксусной кислоты при нагреве смеси на кипящей водяной бане в течение 6 часов и созревании осадка в течение ночи. После фильтрации осадка на фильтре Шотта, проводилась его промывка холодным изопропанолом, перекристаллизация из этанола, выделенный осадок сушили при комнатной температуре и при 60°C. 1,3-динитро-6Н-индоло[2,3-б]хиноксалин синтезирован в ходе реакции 2-амино-4,6-динитроанилина, изатина и ледяной уксусной кислоты. Смесь нагревали на кипящей водяной бане в течение 9 часов. После окончания реакции раствор оставили на ночь для созревания осадка. На следующий день осадок отфильтровали на фильтре Шотта, промыли его холодным изопропанолом. Перекристаллизацию проводили из этанола, а затем выделенный осадок сушили при комнатной температуре и при 60°C. Строение полученных соединений установлено с помощью данных ЯМР ¹H, ¹³C и гетероядерной (HMBC, HSQC) корреляционной ЯМР спектроскопии, а также данными элементного анализа, масс- и ИК-спектроскопии. Разработанные методики синтезов отличаются относительной простотой исполнения, мягкими условиями, доступностью реагентов и позволяют получать целевые продукты с выходом 75% (для 6,8-динитро-11Н-индено[1,2-б]хиноксалин-11-она) и 92% (для 1,3-динитро-6Н-индоло[2,3-б]хиноксалина).

Ключевые слова: конденсация, изатин, нингидрин, ароматический 4,6-динитро-о-фенилендиамин, 6,8-динитро-11Н-индено[1,2-б]хиноксалин-11-он, 1,3-динитро-6Н-индоло[2,3-б]хиноксалин.

SYNTHESIS OF 6,8-DIHYDRO-11H-INDENO[1,2-b]QUINOXALINE-11-ONE AND 1,3-DIHYDRO-6H-INDOLO[2,3-b]QUINOXALINE BASED ON 4,6-DINITRO-o-PHENYLENEDIAMINE

The primary tasks of organic chemistry include the production of new nitrogen-containing heterocyclic systems. Quinoxalin derivatives are fragments of many biologically active and pharmacologically important compounds [1]: agonists and antagonists of various receptors, drugs with high antibacterial or antiviral activity [2]. In addition, they are known to be used as dyes [3], effective electroluminescent materials [4], organic semiconductors [5], "building blocks" in the synthesis of anionic receptors [6] and DNA-binding agents [7]. As part of the study, syntheses of compounds not previously described in the literature - 6,8-dinitro-11H-indeno[1,2-b]quinoxaline-1-one and 1,3-dinitro-6H-indolo[2,3-b]quinoxaline-1-one and 1,3-dinitro-6H-indolo[2,3-b]quinoxaline- were carried out. 6,8-dinitro-11H-indeno[1,2-b]quinoxalin-1-oh was obtained by the reaction of 2-amino-4,6-dinitroaniline, ninhydrin and glacial acetic acid when the mixture was heated in a boiling water bath for 6 hours and the sediment matured overnight. After filtration of the precipitate on the Schott filter, it was washed with cold isopropanol, recrystallized from ethanol, the isolated precipitate was dried at room temperature and at 60°C. 1,3-dinitro-6H-indolo[2,3-b]quinoxalin was synthesized during the reaction of 2-amino-4,6-dinitroaniline, isatin and glacial acetic acid. The mixture was heated in a boiling water bath for 9 hours. After the end of the reaction, the solution was left overnight to mature the precipitate. The next day, the sediment was filtered on a Schott filter, washed with cold isopropanol. Recrystallization was carried out from ethanol, and then the isolated precipitate was dried at room temperature and at 60°C. The structure of the obtained compounds was established using ¹H, ¹³C NMR data and heteronuclear (HMBC, HSQC) correlation NMR spectroscopy, as well as data from elemental analysis, mass and IR spectroscopy. The developed synthesis methods are characterized by relative simplicity of execution, mild conditions, availability of reagents and allow obtaining target products with a yield of 75% (for 6,8-dinitro-11H-indeno[1,2-b]quinoxaline-11-one) and 92% (for 1,3-dinitro-6H-indolo[2,3-b]quinoxaline).

Keywords: condensation, isatin, ninhydrin, aromatic 4,6-dinitro-o-phenylenediamine, 6,8-dihydro-11H-indeno[1,2-b]quinoxaline-11-one, 1,3-dinitro-6H-indolo[2,3-b]quinoxaline.

Маълумот дар бораи муаллиф: Мухторов Лоик Гургович - Донишгоҳи давлатии педагогии шаҳри Тула ба номи Л. Н. Толстой, Маркази бартарии технологӣ-кимиёвӣ ва биотехнологияи пешрафта, корманди илмӣ. **Суроға:** 300026, Русия, Тула, хиёбони Ленин, 125. ЧДММ «Львинка» **Телефон:** +7 (953) 188-46-16. **E-mail:** mukhtorov.loik@mail.ru.

Каримов Махмадкул Бобоевич - Филиали Донишгоҳи Миллии Таҳқиқоти Технологии "МИСиС", доктори илҳои химия, профессор. **Суроға:** Душанбе, Ҷумҳурии Тоҷикистон, кӯчаи Назаршоев, 7. **Телефон:** +992 (919) 410241. **E-mail:** karimovm.b@mail.ru

Шахкелдян И.В. –Донишгоҳи давлатии педагогии шаҳри Тула ба номи Л. Н. Толстой, Маркази бартарии технологӣ-кимиёвӣ ва биотехнологияи пешрафта, ходими илмӣ. **Суроға:** 300026, Русия, Тула, хиёбони Ленин, 125. ЧДММ «Львинка». **Телефон:** 8 (4872) 357808. **E-mail:** reaktiv@tsput.ru

Атрошенко Ю.М. – Донишгоҳи давлатии педагогии шаҳри Тула ба номи Л. Н. Толстой, Маркази бартарии технологӣ-кимиёвӣ ва биотехнологияи пешрафта, ходими илмӣ. **Суроға:** 300026, Русия, Тула, хиёбони Ленин, 125. ЧДММ «Львинка». **Телефон:** +7 (919) 0870595.

Сведения об авторах: – **Мухторов Лоик Гургович** – Тульский государственный педагогический университет им. Н. Толстой, Центр передового технологического, химического и биотехнологического совершенства, научный сотрудник **Адрес:** 300026, г. Тула, пр. Ленина, 125. ООО «Львинка» **Телефон:** +7 (953) 188-46-16. **E-mail:** mukhtorov.loik@mail.ru.

Каримов Махмадкул Бобоевич – Филиал Национального исследовательского технологического университета «МИСиС», доктор химических наук, профессор. **Адрес:** Республика Таджикистан, Душанбе, улица Назаршоева, 7. **Телефон:** +992 (919) 410241. **E-mail:** karimovm.b@mail.ru

Шахкелдян И.В. Кафедра химии. ФГБОУ ВО «Тульский государственный педагогический университет им. Л.Н. Толстого», научный сотрудник. **Адрес:** 300026, г. Тула, Россия, проспект Ленина, 125. **Тел.:** 8 (4872) 357808; **E-mail:** reaktiv@tsput.ru

Атрошенко Ю.М. –Тульский государственный педагогический университет им. Л.Н. Толстого, Центр технологического превосходства «Передовые химические и биотехнологии», научный сотрудник. **Адрес:** 300026, г. Тула, Россия, проспект Ленина, 125. **Тел.:** +7 (919) 0870595; **E-mail:** reaktiv@tsput.ru

Information about the authors: Mukhtorov Loik Gurgovich – Tula State Pedagogical University named after N. Tolstoy, Center for Advanced Technological, Chemical and Biotechnological Excellence, Researcher. **Address:** 300026, Tula, Lenin Ave., 125. LLC "Lvinka". **Phone:** +7 (953) 188-46-16. **E-mail:** mukhtorov.loik@mail.ru.

Karimov Makhmadkul Boboevich – Branch of the National Research Technological University “MISiS”, Doctor of Chemical Sciences, Professor. **Address:** Republic of Tajikistan, Dushanbe, Nazarshoeva street, 7. **Phone:** +992 (919) 410241. **E-mail:** karimovm.b@mail.ru

Shakhkeldyan I.V.- Tula State Pedagogical University named after L.N. Tolstoy, Department of Chemistry, Researcher. **Address:** 300026, Tula, Russia, Lenin Avenue, 125. **Phone:** 8 (4872) 357808; **E-mail:** reaktiv@tsput.ru.

Atroshenko Y.M. - Tula State Pedagogical University named after L.N. Tolstoy, Center of Technological Excellence "Advanced Chemical and Biotechnologies", Researcher. **Address:** 300026, Tula, Russia, Lenin Avenue, 125. **Phone:** +7 (919) 0870595.

Статья поступила в редакцию 25.12.2023
Одобрена после рецензирования 17.02.2024
Принята к публикации 08.04.2024

МУНДАРИЧА МАТЕМАТИКА

Одинаев Р. Н., Афзалшоҳи С. Истифодаи усулҳои барномасозии ҳаттӣ барои ҳалли масъалаҳои оптимизатсияи буҷети табиғоти бонк.....	5
Муродов П. С., Пруцков А. В. Амсилаи математикии таърифи норавшани мавзӯоти мақолоти илмӣ бо истифода аз калимоти аз ҷиҳати наҳвӣ алоқаманд.....	14
Талбаков Ф. М. Дар бораи наздик кардани функсияҳои якхелаи қариб даврии чамъ ва интегралҳои муайян.....	23
Пежмон Ч. Ҳатти камбизоатӣ, ҳадди камбизоатӣ, пешгуи камбизоатӣ, усулҳо.....	33

ФИЗИКА

Раҷабов Т.М. Физикаи сабабҳо: майдони трансверс-сексияҳо ба ҷои масса.....	42
Солиҳова М. И., Курзина И.А., Хоҷазода Т.А., Хоҷаев А.Т., Дайбова Е. Б. Таъсири разряди монеагӣ ба энергияи сабзиши гандуми навъи “Наврӯз” дар таҷрибаҳои саҳроӣ.....	52
Махсудов Б.И., Эгамов М.Х., Раҳимова У.Ҷ. Таъсири концентратсияи пав ба тағирёбии ҳамвории поляризатори нур ҳангоми гузаштан аз муҳит.....	63
Ҷӯраев Х. Ш., Ҷӯраева Г. Х. Тадқиқи падидаи статсионари интиқоли гармӣ дар муҳити конденсатсии сферавӣ.....	70
Имом М. Ш., Ромоданов В. Л., Фарҳод Р., Одинаев С. Ф. Омӯзиши акси садои синтиллиатсионии нейтронҳо ва гамма-квантҳо бо усули бартарафкунии импульсҳои гузошташуда.....	84
Султонов Н., Ақобирова А. Т., Наимов У. Р., Раҳматов Б. А., Ҳамроқулов Р. Б. Таъғироти сохторӣ дар монокристаллҳои $cdte$ ҳангоми нурборонкуни бо ионҳои вазнини газҳои инертӣ.....	99

ХИМИЯ

Шокаримов С.М., Наимов Н.А., Рузиев Ҷ.Р., Рафиев Р.С., Аслонов А.А., Сафиев Х. Таҳқиқи технологияи ҳосил намудани омехтаи силитсийфторид ва фториди натрий аз маҳсулоти иловагии истеҳсоли кислотаи фторид.....	110
Содатдинова А. С., Акимбекова Х. А., Усачева Т. Р. Комплексҳосилшавии нукра(I) бо 2-этилимидазол.....	124
Қодиров М. З., Бобизода Ғ. М., Зафаров С. З. Модификатсия ва таҳқиқи кислотаҳои α , β , γ -аминоравғанӣ бо фуллерен c_{60}	135
Эшова Г. Б., Давлатшоева Ҷ. А., Раҳимова М., Мираминзода Ф. Ҳосилшавии гидроксокомплексҳои $FE(II)$ дар маҳлулҳои обӣ.....	144
Раҷабов Ш. Х. Истифодаи партовҳои БСК-и баъди таҷзияи кислотагӣ барои пайдошавии хосияти васеъшавандагии семент.....	153
Бобокалонов Т. Б., Ҳакимов Ф. Х., Сафармамадзода С. М., Мамадгаминова З. Р. Комплексҳосилкунии оҳан(III) бо TSC ва FTSC дар маҳлулҳои концентратсияи гуногуни H_2SO_4	162
Мухторов Л. Г., Каримов М. Б., Шахкельдян И.В., Атрошенко Ю.М. Синтези 6,8-динитро-11н-индено[1,2-b]хиноксалин-11-он ва 1,3-динитро-6h-индоло[2,3-b]хиноксалин дар асоси 4,6-dinitro-o – фенилендиамин.....	173

СОДЕРЖАНИЕ

МАТЕМАТИКА

Одинаев Р. Н., Афзалшохи С. Использование методов линейного программирования для решения задач оптимизации рекламного бюджета банка.....	5
Муродов П. С., Пруцков А. В. Математическая модель нечеткого определения тематики научных статей с помощью синтаксически связанных слов.....	14
Талбаков Ф. М. О приближении равномерных почти-периодических функций некоторыми суммами и интегралами.....	23
Пежман Дж. Черта бедности, порог бедности, прогнозирование бедности, методы.....	33

ФИЗИКА

Раджабов Т. М., Причинная физика: площадь поперечного сечения вместо массы.....	42
Солихова М. И., Курзина И. А., Ходжазода Т. А., Ходжаев А. Т., Дайбова Е. Б. Влияние барьерного разряда на энергию прорастания и всхожесть семян пшеницы сорта «навруз» на открытом грунте.....	52
Махсудов Б.И., Эгамов М.Х., Рахимова У.Дж. Влияние концентрации пав на изменения плоскости поляризации света при прохождении через жк-среду.....	63
Джураев Х. Ш., Джураева Г. Х. Исследование стационарное явление теплообмена в сферической конденсированной среде.....	70
Имом М. Ш., Ромоданов В. Л., Фарход Р., Одинаев С. Ф. Исследование сцинтилляционных откликов нейтронов и гамма-квантов методом удаления наложенных импульсов.....	84
Султонов Н., Акобиров А. Т., Наимов У. Р., Рахматов Б. А., Хамрокулов Р. Б. Структурные изменения в монокристаллах cдте при облучении тяжелыми ионами инертных газов.....	99

ХИМИЯ

Шокаримов С. М., Наимов Н. А., Рузиев Дж. Р., Рафиев Р.С., Аслонов А.А., Сафиев Х. Исследование технологии получения смеси кремнефторида и фторида натрия из побочного продукта производства плавиковой кислоты.....	110
Содатдинова А.С., Акимбекова Х.А., Усачева Т.Р., Сафармамадзода С.М. Комплексообразование серебра(I) с 2-этилимидазолом.....	124
Кодиров М. З., Бобизода Г. М., Зафаров С. З. Модификация и исследование α, β, γ -аминомасляных кислот фуллереном C_{60}	135
Эшова Г. Б., Давлатшоева Дж. А., Рахимова М., Мираминзода Ф. Образование гидроксильных комплексов $Fe(II)$ в водных растворах	144
Раджабов Ш. Х. Использование отходов БСК после кислотного разложения для развития расширительных свойств цемента.....	153
Бобокалонов Т. Б., Хакимов Ф. Х., Сафармамадзода С. М., Мамадгаминова З. Р. Комплексообразование железа(III) с TSC и FTSC в растворах H_2SO_4 переменного состава.	162
Мухторов Л. Г., Каримов М. Б., Шахкельдян И.В., Атрошенко Ю.М. Синтез 6,8-динитро-11н-индено[1,2-b]хиноксалин-11-она и 1,3-динитро-6h-индоло[2,3-b]хиноксалина на основе 4,6-динитро-о-фенилендиамин.....	173

CONTENTS
MATHEMATICS

Odinaev R.N., Afzalshokhi S. Use of linear programming methods for solving the problems of optimizing the advertising budget of a bank.....	5
Murodov P. S., Prutzkow A. V. Mathematical model of fuzzy recognizing of the topics of scientific articles using syntactically related words.....	14
Talbakov F. M. On the approximation of uniform almost-periodic functions by some sums and integrals.....	23
Pejman J. Poverty line, poverty threshold, poverty forecasting, methods.....	33

PHYSICS

Radzhabov T. M., Causal physics: cross-sectional area instead of mass.....	42
Solikhova M. I., Kurzina I. A., Khojazoda T. A., Khojaev A. T., Daibova E. B. Effect of barrier discharge on germination energy and germination of "navruz" wheat seeds in the open field.....	52
Makhsudov B.I., Egamov M.Kh., Rahimova U.J. The effect of surfactant concentration on changes in the plane of polarization of light passing through the lcd medium.....	63
Juraev K. Sh., Juraeva G. Kh. Investigation of the stationary phenomenon of heat transfer in a cylindrical condensed medium.....	70
Imom M. Sh., Romodanov V. L., Farhod R., Odinaev S. F. Investigation of the scintillation response of neutrons and gamma-quants by the method of removing superimposed pulses.....	84
Sultonov N., Akobirova A. T., Naimov U. R., Rakhmatov B. A., Khamrokulov R. B. Structural changes in cdte single crystals upon irradiation with heavy ions of inderent gases.....	99

CHEMISTRY

Shokarimov S. M., Naimov N. A., Ruziev J. R., Rafiev R. S., Aslonov A.A., Safiev H. Study of the technology for obtaining a mixture of silicofluoride and sodium fluoride from a by-product of hydrofluoric acid production.....	110
Sodatdinova A.S., Akimbekova Kh.A., Usacheva T.R., Safarmamadzoda S.M. Complexation of silver(I) c 2- ethylimidazole.....	124
Kodirov M. Z., Bobizoda G. M., Zafarov S. Z. Modification and research of α , β , γ - aminoil acids with fullerene c_{60}	135
Eshova C. B., Davlatshoeva J. A., Rakhimova M., Miraminzoda F. Formation of fe(II) hydroxyl complexes in aqueous solutions.....	144
Radjabov Sh. Kh. Use of bsc after acid solution to develop the expansion properties of cement.....	153
Bobokalonov T. B., Khakimov F. Kh., Safarmamadzoda S.M., Mamadgaminova Z. R. Complexation of iron(III) with TSC and FTSC in H_2SO_4 solutions of variable composition.....	162
Mukhtorov L. G., Karimov M. B., Shakhkeldyan I.V. Atroshenko Y.M. Synthesis of 6,8-dihydro-11H-indeno[1,2-b]quinoxaline-11-one and 1,3-dihydro-6H-indolo[2,3-b]quinoxaline based on 4,6-dinitro-o-phenylenediamine.....	173

ИНФОРМАЦИЯ ДЛЯ АВТОРОВ

Требования к научным статьям, поступающим в научный журнал «Вестник Таджикского национального университета.

Серия естественных наук»

Все поступающие в редакцию журнала научные статьи должны соответствовать следующим требованиям: а) статья должна быть написана с соблюдением установленных требований журнала; б) статья должна быть результатом научных исследований; в) статья должна соответствовать одному из направлений (разделов) журнала.

Все поступающие в редакцию материалы проверяются на наличие заимствований из открытых источников (плагиат), проверка выполняется с помощью системы Antiplagiat. Статьи, содержащие элементы плагиата, автоматически снимаются с рассмотрения, а авторы лишаются возможности опубликовать свою работу в журнале.

Требования к оформлению научных статей:

Статья должна быть подготовлена в формате Microsoft Word, шрифтом Times New Roman, кегль 14, поля 2,5 см со всех сторон, интервал полуторный.

Объем статьи (включая аннотацию и список литературы) должен быть в пределах от 15 до 20 стр. формата А4 (не более чем 30-и страниц).

Статья должна иметь следующую структуру:

– индекс УДК (индекс можно получить в любой научной библиотеке);
– название статьи;

– фамилия и инициалы автора (ов) (например, Шарипов Д.М.);

– название организации, в которой работает автор статьи;

– аннотация и ключевые слова

– основной текст статьи;

– название статьи, аннотация и ключевые слова оформляются на трех языках (на таджикском, русском и английском языках). Аннотация не должна быть меньше 150 слов, ключевые слова оформляются в объеме от 7 до 10 слов или словосочетаний;

– список использованной литературы (не менее 20-30 наименований научной литературы) должны быть за последние 15-20 лет (издания не ранее 2000 г.), более ранние ссылки не должны превышать 10%. Список литературы оформляется согласно требованиям ГОСТ 7.1-2003 и ГОСТ 7.0.5-2008, и в 2 вариантах: 1) в оригинальном написании (таджикский, русский, английский); 2) все источники должны быть указаны (переведены) на английском языке;

– информация об авторе на русском и английском языках. Здесь указываются ФИО автора полностью, ученая степень, ученое звание (если имеются), название организации, в которой работает автор (авторы), должность автора (авторов) в данной организации, телефон, e-mail, а также почтовый адрес с место работы автора. При цитировании конкретного материала ссылки указываются в квадратных скобках [].

Таблицы, схемы, диаграммы и рисунки должны быть черно-белым, и нужно их сгруппировать и пронумеровать. Таблицы, схемы, диаграммы и рисунки должны иметь название на русском и английском языках.

При электронной подаче статьи необходимо представить 1 экземпляр статьи в распечатанном виде.

Статьи, не рекомендованные рецензентами к печати, не публикуются и не возвращаются авторам.

**ВЕСТНИК
ТАДЖИКСКОГО НАЦИОНАЛЬНОГО УНИВЕРСИТЕТА
Серия естественных наук**

Научный журнал «Вестник Таджикского национального университета. Серия естественных наук» основан в 2012 г. Выходит 4 раз в год. Печатная версия журнала зарегистрирована в Министерстве культуры Республики Таджикистан. Журнал включен в «Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук» ВАК Министерства образования и науки Российской Федерации.

Журнал принимает научные статьи по следующим отраслям науки: математика, физика и химические науки.

Журнал включен в базу данных Российского индекса научного цитирования (РИНЦ), регулярно предоставляет в РИНЦ информацию в виде метаданных.

Полнотекстовая версия журнала доступна на сайте издания (www.vestnik-tnu.com).

**ВЕСТНИК
ТАДЖИКСКОГО НАЦИОНАЛЬНОГО УНИВЕРСИТЕТА
Серия естественных наук**

2024. №2.

Над номером работали:

Ответственный редактор: С.М.Мухиддинова

Редактор русского языка: О.Ашмарин

Редактор английского языка: С.Хакимова

**Издательский центр
Таджикского национального университета
по изданию научного журнала
«Вестник Таджикского национального университета.**

Серия естественных наук»:

734025, Республика Таджикистан, г.Душанбе, проспект Рудаки, 17.

Сайт журнала: www.vestnik-tnu.com

E-mail: vestnik-tnu@mail.ru

Тел.: (+992 37) 227-74-41

Подписано в печать 17.05.2024.