

**ACADEMIC SCIENTIFIC
JOURNAL OF CHEMISTRY**

ISSN: 2224-5286 (Print)
ISSN: 2518-1491 (Online)

**№4
2025**

ISSN 2518-1491 (Online),
ISSN 2224-5286 (Print)



ACADEMIC SCIENTIFIC JOURNAL OF CHEMISTRY

4 (465)

October – December 2025

PUBLISHED SINCE JANUARY

1947 PUBLISHED 4 TIMES A YEAR

ALMATY, NAS RK

Editor in chief:

ZHURINOV Murat Zhurinovich, doctor of chemistry, professor, academician of NAS RK, President of NAS RK RPA, general director of JSC "D.V. Sokolsky Institute of fuel, catalysis and electrochemistry (Almaty, Kazakhstan) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602177960>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2017489>

Editorial board:

ADEKENOV Sergazy Mynzhasarovich (deputy editor-in-chief) doctor of chemical sciences, professor, academician of NAS RK, director of the International Scientific and Production Holding «Phytochemistry» (Karaganda, Kazakhstan) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7006153118>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/48648658>

AGABEKOV Vladimir Enokovich (deputy editor-in-chief), doctor of chemistry, professor, academician of NAS of Belarus, honorary director of the Institute of Chemistry of new materials (Minsk, Belarus) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7004624845>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/28920574>

STRNAD Miroslav, head of the laboratory of the Institute of Experimental Botany of the Czech Academy of Sciences, professor (Olomouc, Czech Republic) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=36789185000>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/18379>

BURKITBAYEV Mukhambetkali, doctor of chemistry, professor, academician of NAS RK, (Almaty, Kazakhstan) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=8513885600>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/691218>

HOHMANN Judith, head of the department of pharmacognosy, faculty of Pharmacy, University of Szeged, director of the interdisciplinary center for Life sciences (Szeged, Hungary) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7004457196>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/15630788>

ROSS Samir, Ph.D, professor, school of Pharmacy, National Center for scientific research of Herbal Products, University of Mississippi (Oxford, USA) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7401610128>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/47926269>

KHUTORYANSKY Vitaly, Ph.D, pharmacist, professor at the University of Reading (Reading, England) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=35606915700>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/221621>

TELTAYEV Bagdat Burkhanbayuly, doctor of technical sciences, professor, academician of NAS RK, Ministry of Industry and infrastructure development of the Republic of Kazakhstan (Almaty, Kazakhstan) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6506225641>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/72161>

PHARUK Asana Dar, professor at Hamdard al-Majid college of Oriental medicine, faculty of Oriental medicine, Hamdard University (Karachi, Pakistan) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=55884056900>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1796996>

FAZYLOV Serik Drakhmetovich, doctor of chemistry, professor, academician of NAS RK, deputy director of the Institute of Organic Synthesis and Coal Chemistry (Karaganda, Kazakhstan) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6701472056>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1541357>

ZHOROBEKOVA Sharipa Zhorobekovna, doctor of chemistry, professor, academician of NAS of Kyrgyzstan, Institute of Chemistry and chemical technology of NAS KR (Bishkek, Kyrgyzstan) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602652060>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/31723468>

KHALIKOV Jurabay Khalikovich, doctor of chemistry, professor, academician of the Academy of Sciences of Tajikistan, V.I. Nikitin Institute of Chemistry AS RT (Tajikistan) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6603735641>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/9567106>

FARZALIEV Vagif Medzhid ogly, doctor of chemistry, professor, academician of NAS of Azerbaijan (Azerbaijan) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6601962486>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/21617033>

GARELIK Hemda, PhD in chemistry, president of the department of Chemistry and Environment of the International Union of Pure and Applied Chemistry (London, England) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=56010090400>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/29866743>

ACADEMIC SCIENTIFIC JOURNAL OF CHEMISTRY

ISSN 2518-1491 (Online),

ISSN 2224-5286 (Print)

Owner: «Central Asian Academic Research Center» LLP (Almaty).

The certificate of registration of a periodical printed publication in the Committee of information of the Ministry of Information and Social Development of the Republic of Kazakhstan № **KZ23VPY00121156**, issued 05.06.2025

Thematic scope: *organic chemistry, inorganic chemistry, catalysis, electrochemistry and corrosion, pharmaceutical chemistry and technology.*

Periodicity: 4 times a year.

<http://chemistry-technology.kz/index.php/en/arhiv>

© «Central Asian Academic Research Center» LLP, 2025

Editorial address: JSC «D.V. Sokolsky institute of fuel, catalysis and electrochemistry», 142, Kunayev str., of. 310, Almaty, 050100, tel. 291-62-80, fax 291-57-22, e-mail: orgcat@nursat.kz

Бас редактор:

ЖҰРЫНОВ Мұрат Жұрыңұлы, химия ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, РБҚ ҚР ҰҒА президенті, АҚ «Д.В. Сокольский атындағы Отын, катализ және электрохимия институтының» бас директоры (Алматы, Қазақстан) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602177960>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2017489>

Редакция алқасы:

ӘДЕКЕНОВ Серғазы Мыңжасарұлы (бас редактордың орынбасары), химия ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, «Фитохимия» Халықаралық ғылыми-өндірістік холдингінің директоры (Қарағанды, Қазақстан) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7006153118>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/48648658>

АГАБЕКОВ Владимир Енокович (бас редактордың орынбасары), химия ғылымдарының докторы, профессор, Беларусь ҰҒА академигі, Жаңа материалдар химиясы институтының құрметті директоры (Минск, Беларусь) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7004624845>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/28920574>

СТРНАД Мирослав, профессор, Чехия ғылым академиясының Эксперименттік ботаника институтының зертхана меңгерушісі (Оломоуц, Чехия) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=36789185000>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/18379>

БҮРКІТБАЕВ Мұхамбетқали, химия ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, (Алматы, Қазақстан) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=8513885600>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/691218>

ХОХМАНН Джудит, Сегед университетінің Фармацевтика факультетінің Фармакогнозия кафедрасының меңгерушісі, Жаратылыстану ғылымдарының пәнаралық орталығының директоры (Сегед, Венгрия) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7004457196>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/15630788>

РОСС Самир, PhD, Миссисипи университетінің Өсімдік өнімдерін ғылыми зерттеу ұлттық орталығы, Фармация мектебінің профессоры (Оксфорд, АҚШ) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7401610128>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/47926269>

ХУТОРЯНСКИЙ Виталий, философия докторы (PhD, фармацевт), Реддинг университетінің профессоры (Реддинг, Англия) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=35606915700>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/221621>

ТЕЛТАЕВ Бағдат Бұрханбайұлы, техника ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, Қазақстан Республикасы Индустрия және инфрақұрылымдық даму министрлігі (Алматы, Қазақстан) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6506225641>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/72161>

ФАРУК Асана Дар, Хамдар аль-Маджида Шығыс медицина колледжінің профессоры, Хамдард университетінің Шығыс медицина факультеті (Карачи, Пәкістан) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=55884056900>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1796996>

ФАЗЫЛОВ Серік Драхметұлы, химия ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, Органикалық синтез және көмір химиясы институты директорының ғылыми жұмыстар жөніндегі орынбасары (Қарағанды, Қазақстан) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6701472056>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1541357>

ЖОРОБЕКОВА Шарипа Жоробекқызы, химия ғылымдарының докторы, профессор, Кыргызстан ҰҒА академигі, ҚР ҰҒА Химия және химиялық технология институты (Бішкек, Кыргызстан) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602652060>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/31723468>

ХАЛИКОВ Джурабай Халикович, химия ғылымдарының докторы, профессор, Тәжікстан ҒА академигі, В.И. Никитин атындағы Химия институты (Душанбе, Тәжікстан) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6603735641>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/9567106>

ФАРЗАЛИЕВ Вагиф Меджидоглы, химия ғылымдарының докторы, профессор, АҰҒА академигі (Баку, Әзірбайжан) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6601962486>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/21617033>

ГАРЕЛИК Хемда, философия докторы (PhD, химия), Халықаралық таза және қолданбалы химия одағының Химия және қоршаған орта бөлімінің президенті (Лондон, Англия) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=56010090400>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/29866743>

«ACADEMIC SCIENTIFIC JOURNAL OF CHEMISTRY»

ISSN 2518-1491 (Online),

ISSN 2224-5286 (Print)

Меншіктенуші: «Орталық Азия академиялық ғылыми орталығы» ЖШС (Алматы қ.).

Қазақстан Республикасының Ақпарат және қоғамдық даму министрлігінің Ақпарат комитетінде 05.06.2025 ж. берілген № KZ23VPY00121156 мерзімдік басылым тіркеуіне қойылу туралы куәлік.

Тақырыптық бағыты: *органикалық химия, бейорганикалық химия, катализ, электрохимия және коррозия, фармацевтикалық химия және технологиялар.*

Мерзімділігі: жылына 4 рет.

<http://chemistry-technology.kz/index.php/en/arhiv>

© «Орталық Азия академиялық ғылыми орталығы» ЖШС, 2025

Редакцияның мекенжайы: 050100, Алматы қ., Қонаев к-сі, 142, «Д.В. Сокольский атындағы отын, катализ және электрохимия институты» АҚ, каб. 310, тел. 291-62-80, факс 291-57-22, e-mail:orgcat@nursat.kz

Главный редактор:

ЖУРИНОВ Мурат Журинович, доктор химических наук, профессор, академик НАН РК, президент РОО Национальной академии наук Республики Казахстан, генеральный директор АО «Институт топлива, катализа и электрохимии им. Д.В. Сокольского» (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602177960>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2017489>

Редакционная коллегия:

АДЕКЕНОВ Сергазы Мынжасарович (заместитель главного редактора), доктор химических наук, профессор, академик НАН РК, директор Международного научно-производственного холдинга «Фитохимия» (Караганда, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7006153118>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/48648658>

АГАБЕКОВ Владимир Енокович (заместитель главного редактора), доктор химических наук, профессор, академик НАН Беларуси, почетный директор Института химии новых материалов (Минск, Беларусь), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7004624845>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/28920574>

СТРНАД Мiroслав, профессор, заведующий лабораторией института Экспериментальной ботаники Чешской академии наук (Оломоуц, Чехия), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=36789185000>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/18379>

БУРКИТБАЕВ Мухамбеткали, доктор химических наук, профессор, академик НАН РК, (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=8513885600>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/691218>

ХОХМАНН Джудит, заведующий кафедрой Фармакогнозии Фармацевтического факультета Университета Сегеда, директор Междисциплинарного центра естественных наук (Сегед, Венгрия), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7004457196>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/15630788>

РОСС Самир, PhD, профессор Школы Фармации национального центра научных исследований растительных продуктов Университета Миссисипи (Оксфорд, США), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7401610128>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/47926269>

ХУТОРЯНСКИЙ Виталий, доктор философии (Ph.D, фармацевт), профессор Университета Рединга (Рединг, Англия), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=35606915700>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/221621>

ТЕЛЫТАЕВ Багдат Бурханбайулы, доктор технических наук, профессор, академик НАН РК, Министерство Индустрии и инфраструктурного развития Республики Казахстан (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6506225641>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/72161>

ФАРУК Ахсана Дар, профессор колледжа Восточной медицины Хамдарда аль-Маджида, факультет Восточной медицины университета Хамдарда (Карачи, Пакистан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=55884056900>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1796996>

ФАЗЫЛОВ Серик Драхметович, доктор химических наук, профессор, академик НАН РК, заместитель директора по научной работе Института органического синтеза и углехимии (Караганда, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6701472056>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1541357>

ЖОРОБЕКОВА Шарипа Жоробековна, доктор химических наук, профессор, академик НАН Кыргызстана, Институт химии и химической технологии НАН КР (Бишкек, Кыргызстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602652060>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/31723468>

ХАЛИКОВ Джарабай Халикович, доктор химических наук, профессор, академик АН Таджикистана, Институт химии имени В.И. Никитина АН РТ (Душанбе, Таджикистан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6603735641>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/9567106>

ФАРЗАЛИЕВ Вагиф Меджид оглы, доктор химических наук, профессор, академик НАНА (Баку, Азербайджан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6601962486>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/21617033>

ГАРЕЛИК Хемда, доктор философии (Ph.D, химия), президент Отдела химии и окружающей среды Международного союза чистой и прикладной химии (Лондон, Англия), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=56010090400>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/29866743>

«ACADEMIC SCIENTIFIC JOURNAL OF CHEMISTRY».

ISSN 2518-1491 (Online),

ISSN 2224-5286 (Print)

Собственник: Республиканское общественное объединение ТОО «Центрально-азиатский академический научный центр» (г. Алматы).

Свидетельство о постановке на учет периодического печатного издания в Комитете информации Министерства информации и общественного развития Республики Казахстан № KZ23VPY00121156, выданное 05.06.2025 г.

Тематическая направленность: *органическая химия, неорганическая химия, катализ, электрохимия и коррозия, фармацевтическая химия и технологии.*

Периодичность: 4 раз в год.

<http://chemistry-technology.kz/index.php/en/arhiv>

© ТОО «Центрально-азиатский академический научный центр», 2025

Адрес редакции: 050100, г. Алматы, ул. Кунаева, 142, АО «Институт топлива, катализа и электрохимии им. Д.В. Сокольского», каб. 310, тел. 291-62-80, факс 291-57-22, e-mail:orgcat@nursat.kz

CONTENTS

G.E. Azimbayeva, A.K. Kamysbayeva, G.N. Kudaibergenova, U.Zh. Beysenbiyeva, N.M. Kurbanbayeva Chromatographic analysis of ethanol obtained from topinambur tubers (<i>Helianthus Tuberosus</i>).....	13
B. Amiraliyev, N. Zhanikulov, B. Taimasov, M. Aitureev, B. Zhakipbayev Expanding the raw material base of mineral additives for the production of composite cements.....	27
A.M. Yegissinova, R.S. Taubayeva, R.K. Rakhmetullaeva, A.S. Seitkan, E.B. Satkozhaeva Physicochemical properties of thermoplastic starch/hemp biofilm produced by casting method.....	41
E.M. Yergaliyeva, K.B. Bazhykova, Zh.Zh. Kolbaeva, A. Duysen, V.V. Vazhev <i>In silico</i> prediction of PASS and ADME/Tox properties of novel 1,3,5-triazine derivatives for drug development.....	54
R.I. Jalmakhanbetova, S. Azatkyzy, G.K. Mukusheva Structure-directed ursolic acid modifications and their impact on biological activity.....	71
R.N. Zhanaliyeva, B.S. Imangaliyeva, M.A. Zharkınbekov, A.S. Ungarbayeva, R. Kozykeyeva Study of the kinetics and mechanism of molybdenum disulfide oxidation by sodium hypochlorite.....	87
O.S. Ilyassova, M. Zhumabek, G.N. Kaumenova, R.S. Orazbekova, B.S. Biyekeyev Hydrogenation of carbon dioxide on Ni-Co/ZrO ₂ catalysts for conversion into synthetic fuel components.....	100
K. Kalmakov, G. Turebekova, S. Yegemberdiyeva, U. Nuridinova, N. Dulat Catalytic cracking of vacuum gas oil from Kumkol oil in a fluidized bed catalyst unit.....	115
B.T. Kuderina, N.B. Kassenova, A.S. Khamitova, A.G. Zhaxybayeva, A.B. Abdrakhmanova Modification of the structure of oxide cathode materials to enhance the capacity and stability of li - ion batteries.....	128

B.M. Kaldybaeva, D.M. Kenzhebekov, D.Zh. Janabayev, L.M. Ulyev, A. Zholshybek Improving the energy efficiency of oil treatment and stabilization units in the field.....	137
A.K. Kozybaev, Zh.D. Alimkulova, S.O. Abilkasova, G.O. Bugubaeva, S. Bubish Prospects for the use of water-soluble copolymers in industrial wastewater treatment processes.....	150
R.M. Kudaibergenova, A.R. Aitekova, N.S. Murzakasymova, A.S. Seitkan, N.A. Nurlybayeva Structural and compositional characteristics of cobalt ferrite nanoparticles.....	159
M. Nazhipkyzy, A. Ashiraly, A. Aitugan, A. Aikenova Fabrication of lignin-based fibrous composites by electrospinning for energy storage applications.....	170
U. Nazarbek, Y. Raiymbekov, P. Abdurazova, G. Kambarova Molecular dynamics modeling of solubility in aqueous systems: temperature dependence and solvation effects.....	184
Zh.Zh. Nurtazina, Zh.S. Kassymova, L.K. Orazzhanova, B. Łeska, N.B. Kiarstanova Efficiency of modified medium for pigment and antioxidant biosynthesis in <i>Chlorella Vulgaris</i>	197
G.M. Ormanova, A.A. Anarbayev, B.N. Kabylbekova, Zh.E. Khusanov Construction of a solubility isotherm in a four-component mutual CaSO ₄ -NaCl-H ₂ O system.....	212
Zh.B. Rakhimberlinova, A. Zhorabek, A. Bailen, M. Kaiyrbaeva, A. Mendibayeva Investigation of the possibilities of obtaining ultradispersed copper particles in aqueous solutions.....	227
A. Takibayeva, L. Sultanova, A. Tussupova, Z. Omar, A. Amanzholova Mechanism, features of the amination reaction in a series of lupane triterpenoids.....	239
G. Toleutay, R.N. Tuleyeva, A. Taubatyrova, N.N. Gizatullina Recent advances in the application of lignin for biobased packaging materials.....	250
Kh. Khimersen, T.K. Jumadilov, A. Imangazy, G.T. Dyusseмбаeva, B. Totkhuskyzy Features of the interaction of polyelectrolytes with gallium ions in aqueous media.....	266

МАЗМҰНЫ

Г.Е. Азимбаева, А.К. Камысбаева, Г.Н. Кудайбергенова, Ұ.Ж. Бейсенбиева, Н.М. Курбанбаева Топинамбур жемісінен (<i>Helianthus Tuberosus</i>) алынған этанолдың хроматографиялық анализі.....	13
Б. Амиралиев, Н. Жаникулов, Б. Таймасов, М. Айтуреев, Б. Жакипбаев Композициялық цемент алу үшін минералды қоспалардың шикізат базасын кеңейту.....	27
А.М. Егисина, Р.С. Таубаева, Р.К. Рахметуллаева, А.С. Сейткан, Э.Б. Саткожаева Құю әдісі арқылы алынған термопластикалық крахмал/ конопля биопленкасының физика-химиялық қасиеттері.....	41
Э.М. Ергалиева, К.Б. Бажыкова, Ж.Ж. Кольбаева, А.Б. Дуйсен, В.В. Важев <i>In silico</i> PASS және ADME/Tox бағдарламалары арқылы дәрілік заттар әзірлеу үшін 1,3,5-триазиннің жаңа туындыларының қасиеттерін болжау.....	54
Р.И. Джалмаханбетова, С. Азатқызы, Г.К. Мукушева Урсол қышқылының құрылымдық-бағытталған модификациялары және олардың биологиялық белсенділікке әсері.....	71
Р.Н. Жаналиева, Б.С. Имангалиева, М.А. Жаркинбеков, А.С. Унгарбаева, Р. Қозыкеева Молибден дисульфидін натрий гипохлоритімен тотықтырудың кинетикасы мен механизмін зерттеу.....	87
О.С. Ильясова, М. Жумабек, Г.Н. Кауменова, Р.С. Оразбекова, Б.С. Биекеев Көмірқышқыл газын синтетикалық отын компоненттеріне айналдыру үшін Ni-Co/ZrO ₂ катализаторларында гидрлеу.....	100
К.К. Калмаков, Г.З. Туребекова, С.Ж. Егембердиева, У.Е. Нуридинова, Н.Н. Дулат Құмкөл мұнайынан алынған вакуум газойлін катализатордың қайнау қабатындағы қондырғыда каталитикалық крекингтеу.....	115
Б.Т. Кудерина, Н.Б. Касенова, А.С. Хамитова, А.Г. Жаксыбаева, А.Б. Абдрахманова Li - ионды аккумуляторлардың сыйымдылығы мен тұрақтылығын арттыру үшін оксидті катод материалдарын модификациялау.....	128

Б.М. Калдыбаева, Д.М. Кенжебеков, Д.Ж. Джанабаев, Л.М. Ульев, А. Жолшыбек Кәсіпшілікте мұнайды дайындау және тұрақтандыру қондырғысының энергия тиімділігін арттыру.....	137
А.Қ. Қозыбаев, Ж.Д. Әлімқұлова, С.О. Әбілқасова, Г.О. Бугубаева, Ш. Бүбіш Өндірістік ағынды суларды тазарту процестерінде суда еритін сополимерлерді қолдану перспективалары.....	150
Р.М. Құдайбергенова, А.Р. Айтекова, Н.С. Мурзакасымова, А.С. Сейтқан, А.Н. Нұрлыбаева Кобалт феррит нанобөлшектерінің құрылымдық және құрамдық сипаттамасы.....	159
М. Нажипқызы, А. Ашіралы, А. Айтуған, А. Айкенова Энергия сақтау жүйелерінде қолдануға арналған лигнин негізіндегі талшықты композиттерді электроспиннинг әдісімен алу.....	170
У. Назарбек, Е. Райымбеков, П. Абдуразова, Ғ. Қамбарова Су жүйелеріндегі ерігіштіктің молекулалық динамикалық модельдеуі: температураға тәуелділік және еріткіштің әсері.....	184
Ж.Ж. Нуртазина, Ж.С. Касымова, Л.К. Оразжанова, Л. Богуслава, Н.Б. Қиарстанова <i>Chlorella Vulgaris</i> құрамындағы пигменттер мен антиоксиданттардың биосинтезі үшін модификацияланған қоректік ортаның тиімділігі.....	197
Г.М. Орманова, А.А. Анарбаев, Б.Н. Кабылбекова, Ж.Е. Хусанов Төрт компонентті CASO ₄ -NaCl-H ₂ O өзара әрекеттесу жүйесіндегі ерігіштік изотермасын тұрғызу.....	212
Ж.Б. Рахимберлинова, А. Жорабек, А. Байлен, М. Қайырбаева, Ә. Мендібаева Сулы ерітінділердегі мыстың ультродисперсті бөлшектерін алу мүмкіндіктерін зерттеу.....	227
А. Такибаева, Л. Султанова, А. Тусупова, З. Омар, А. Аманжолова Лупан тритерпеноидтар қатарындағы аминдену реакциясының механизмі, ерекшеліктері.....	239

Г. Төлеутай, Р.Н. Тулеева, А. Таубатырова, Н.Н. Гизатуллина

Лигниннің бионегізді қаптама материалдарында қолданылуының

соңғы жетістіктері.....250

Х. Химэрсэн, Т.К. Джумадилов, А. Имангазы, Г.Т. Дюсембаева,

Б. Тотхусқызы

Полиэлектролиттердің галлий иондарымен су ортасында әрекеттесу

ерекшеліктері.....266

СОДЕРЖАНИЕ

Г.Е. Азимбаева, А.К. Камысбаева, Г.Н. Кудайбергенова, У.Ж. Бейсенбиева, Н.М. Курбанбаева Хроматографический анализ этанола полученного из клубней топинамбура (<i>Helianthus Tuberosus</i>).....	13
Б. Амиралиев, Н. Жаникулов, Б. Таймасов, М. Айтурсев, Б. Жакипбаев Расширение сырьевой базы минеральных добавок для получения композиционных цементов.....	27
А.М. Егисинова, Р.С. Таубаева, Р.К. Рахметуллаева, А.С. Сейткан, Э.Б. Саткожаева Физико-химические свойства термопластичной биопленки из крахмала/конопли, полученной методом литья.....	41
Э.М. Ергалиева, К.Б. Бажыкова, Ж.Ж. Кольбаева, А.Б. Дуйсен, В.В. Важев IN SILICO PASS и ADME/TOX прогнозирование свойств новых производных 1,3,5-триазина для разработки лекарств.....	54
Р.И. Джалмаханбетова, С. Азаткызы, Г.К. Мукушева Структурно-направленные модификации урсоловой кислоты и их влияние на биологическую активность.....	71
Р.Н. Жаналиева, Б.С. Имангалиева, М.А. Жаркинбеков, А.С. Унгарбаева, С. Бердібекова Изучение кинетики и механизма окисления дисульфида молибдена гипохлоритом натрия.....	87
О.С. Ильясова, М. Жумабек, Г.Н. Кауменова, Р.С. Оразбекова, Б.С. Биекеев Гидрирование диоксида углерода на Ni-Co/ZrO ₂ катализаторах для преобразования в компоненты синтетического топлива.....	100
К.К. Калмаков, Г.З. Туребекова, С.Ж. Егембердиева, У.Е. Нуридинова, Н.Н. Дулат Каталитический крекинг вакуумного газойля Кумкольской нефти на установке псевдоожиженным слоем катализатора.....	115
Б.Т. Кудерина, Н.Б. Касенова, А.С. Хамитова, А.Г. Жаксыбаева, А.Б. Абдрахманова Модификация структуры оксидных катодных материалов для повышения ёмкости и стабильности Li-ион аккумуляторов.....	128

Б.М. Калдыбаева, Д.М. Кенжебеков, Д.Ж. Джанабаев, Л.М. Ульев, А. Жолшыбек Повышение энергоэффективности установки подготовки и стабилизации нефти на промысле.....	137
А.К. Козыбаев, Ж.Д. Алимкулова, С.О. Абилкасова, Г.О. Бугубаева, Ш. Бубиш Перспективы использования водорастворимых сополимеров в процессах очистки промышленных сточных вод.....	150
Р.М. Кудайбергенова, А.Р. Айтекова, Н.С. Мурзакасымова, А. Сейткан, А.Н. Нурлыбаева Структурно-композиционные характеристики наночастиц феррита кобальта.....	159
М. Нажипкызы, А. Аширалы, А. Айтуган, А. Айкенова Получение волокнистых композитов на основе лигнина методом электроспиннинга для применения в системах хранения энергии.....	170
У. Назарбек, П. Абдуразова, Ғ. Қамбарова, Е. Райымбеков Молекулярно-динамическое моделирование растворимости в водных системах: температурная зависимость и эффекты сольватации.....	184
Ж.Ж. Нуртазина, Ж.С. Касимова, Л.К. Оразжанова, Л. Богуслава, Н.Б. Қиарстанова Эффективность модифицированной среды для биосинтеза пигментов и антиоксидантов в <i>Chlorella Vulgaris</i>	197
Г.М. Орманова, А.А. Анарбаев, Б.Н. Кабылбекова, Ж.Е. Хусанов Построение изотермы растворимости в четырехкомпонентной взаимной системе $\text{CaSO}_4\text{-NaCl-H}_2\text{O}$	212
Ж.Б. Рахимберлинова, А. Жорабек, А. Байлен, М. Кайырбаева, А. Мендибаева Исследование возможностей получения ультрадисперсных частиц меди в водных растворах.....	227
А. Такибаева, Л. Султанова, А. Тусупова, З. Омар, А. Аманжолова Механизм, особенности протекания реакции аминирования в ряду лупановых тритерпеноидов.....	239

Г. Толеутай, Р.Н. Тулеева, А. Таубатырова, Н.Н. Гизатуллина

Последние достижения в применении лигнина для биополимерных

упаковочных материалов.....250

Х. Химэрсэн, Т.К. Джумадилов, А. Имангазы, Г.Т. Дюсембаева,

Б. Тотхусқызы

Особенности взаимодействие полиэлектролитов с ионами галлия

в водной среде.....266

© **G.E. Azimbayeva, A.K. Kamysbayeva*, G.N. Kudaibergenova,
U.Zh. Beysenbiyeva, N.M. Kurbanbayeva, 2025.**

Kazakh National Women's Teacher Training University, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: kamysbayeva.a@qyzpu.edu.kz

CHROMATOGRAPHIC ANALYSIS OF ETHANOL OBTAINED FROM TOPINAMBUR TUBERS (HELIANTHUS TUBEROSUS)

Azimbayeva Gulbaira — candidate of chemical sciences, acting professor of the department of chemistry, Kazakh National Women's Teacher Training University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: azimbaeva.g@qyzpu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0002-6558-8146>;

Kamysbayeva Aliya — master of pedagogical sciences, Senior Lecturer of the department of chemistry, Kazakh National Women's Teacher Training University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: kamysbayeva.a@qyzpu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-0092-4636>;

Kudaibergenova Gulzira — candidate of chemical sciences, Senior Lecturer of the department of chemistry, Kazakh National Women's Teacher Training University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: kudaibergenova.g@qyzpu.edu.kz, <https://orcid.org/0009-0006-9888-8061>;

Beysenbiyeva Uldana — master of pedagogical sciences, lector of the department of chemistry, Kazakh National Women's Teacher Training University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: beysenbiyeva.u@qyzpu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0002-2955-7027>;

Kurbanbayeva Nurzhamol — master of natural sciences, lecturer of the department of chemistry, Kazakh National Women's Teacher Training University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: knurzhamol@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0008-3997-3375>.

Abstract. Currently, the use of non-traditional raw materials in alcohol production is one of the important issues. Ethanol is a biotechnology product used as an additive to fuel (gasoline) for internal combustion engines and in the production of alcoholic beverages. About 7% of ethanol is produced by chemical synthesis, and 93% by yeast fermentation, of which 60% is produced from sucrose and the rest from grain. Ethanol production is carried out by adsorption from alcohol fractions contaminated with ethyl alcohol impurities during mash rectification. The ethanol production process is quite energy-intensive, with a continuous-discrete technological process, starting with the acceptance of raw materials and ending with the shipment of the final product. The most pressing tasks are ensuring optimal technological processes, quality control, and monitoring. Modern production processes place completely different demands on the quality of manufactured products, and competitiveness determines a company's survival and its stable position in the market. The aim of this study was to investigate the chemical composition of ethanol obtained from Jerusalem artichoke tubers. The chemical

composition of ethanol obtained from Jerusalem artichoke tubers was identified using an Agilent 7890A/5975C gas chromatograph. After the first distillation, the ethanol content is 34.890%, and impurities account for 65.11%. After adsorption with activated carbon, the ethanol content is 74.040%, and impurities account for 25.96%. Upon further processing of this alcohol with calcium oxide, the ethanol content is 99.406%, and impurities account for 0.594%. In this research work, the chemical composition of ethanol obtained from Jerusalem artichoke (*Helianthus tuberosus*) is examined using chromatographic analysis, highlighting the relevance of utilizing alternative plant-based raw materials in ethanol production. The study describes adsorption methods used to remove impurities formed during the distillation of fermented mash. The high energy consumption of industrial ethanol production and the importance of improving the quality of the final product are also noted. Several technological stages of purifying ethanol derived from Jerusalem artichoke are analyzed, and the contribution of each method to enhancing the purity of the ethanol is evaluated.

Keywords: Ethanol, *Helianthus tuberosus*, adsorption, impurities, distillation, gas-liquid chromatography

© Г.Е. Азимбаева, А.К. Камысбаева*, Г.Н. Кудайбергенова,
Ұ.Ж. Бейсенбиева, Н.М. Курбанбаева, 2025.

Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан.

E-mail: kamysbayeva.a@qyzpu.edu.kz

ТОПИНАМБУР ЖЕМІСІНЕН (*HELIANTHUS TUBEROSUS*) АЛЫНҒАН ЭТАНОЛДЫҢ ХРОМАТОГРАФИЯЛЫҚ АНАЛИЗІ

Азимбаева Гүлбайра — х.ғ.к., профессор м.а., Химия кафедрасы, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: azimbaeva.g@qyzpu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0002-6558-8146>;

Камысбаева Алия — п.ғ.магистрі, аға оқытушы, Химия кафедрасы, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: kamysbayeva.a@qyzpu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-0092-4636>;

Кудайбергенова Гульзира — х.ғ.к., аға оқытушы, Химия кафедрасы, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: kudaibergenova.g@qyzpu.edu.kz, <https://orcid.org/0009-0006-9888-8061>;

Бейсенбиева Ұлдана — п.ғ.магистрі, оқытушы, Химия кафедрасы, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: beysenbiyeva.u@qyzpu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0002-2955-7027>;

Курбанбаева Нуржамол — ж.ғ.магистрі, оқытушы, Химия кафедрасы, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: knurzhamol@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0008-3997-3375>.

Аннотация. Қазіргі таңда спирт өндірісінде дәстүрлі емес шикізаттарды пайдалану маңызды мәселелердің бірі болып табылады. Этанол - іштен жану қозғалтқыштары үшін отынға (бензинге) және спиртті сусындар өндірісіне қосымша ретінде пайдаланылатын биотехнология өнімі. Этанолдың шамамен 7% -ын химиялық синтез арқылы, ал 93% -ын ашытқы ферментациясы арқылы

алады, оның 60% -ы сахарозадан, қалғаны астықтан алынады. Этанол өндіру брагоректификациялау кезінде этил спиртiнiң iлеспе қоспаларымен ластанған спирттiк қосылыстарды адсорбция әдiсiмен тазалау арқылы жүзеге асырылады. Этанолды өндiру процесi шикiзатты таңдаудан бастап түпкiлiктi өнiмдi тиеп жөнелтуге дейiнгi үздiксiз-дискреттi технологиялық процеспен жеткiлiктi энергия сыйымдылығына ие. Технологиялық процесiң оңтайлы барысын қамтамасыз ету, сапаны бақылау және оларды қадағалау неғұрлым өзектi мiндеттер болып табылады. Қазiргi заманғы өндiрiстiк процесс шығарылатын өнiмнiң сапасына жоғары талаптар қояды, ал бәсекеге қабiлеттiлiк деңгейiмен кәсiпорынның дамуы, оның рыноктағы орнықты жағдайымен айкындалады. Бұл зерттеу жұмысының мақсаты – топинамбур жемiсiнен алынған этанолдың химиялық құрамын талдау. Топинамбур жемiсiнен алынған этанолдың химиялық құрамы Agilent 7890A/5975C хромато-масс-спектрометрiнде анықталды. Алғашқы айдаудан кейiн этанол құрамы 34.890%, ал қоспалар 65.11% құрады. Активтендiрiлген көмiрмен адсорбцияланғаннан кейiн этанол құрамы - 74.040%, ал қоспалар-25.96% құрады. Бұл спирттi одан әрi кальций оксидiмен өңдеу кезiнде этанол - 99.406%, ал қоспалар - 0.594% екендiгi анықталды. Зерттеу жұмысында топинамбурдан (*Helianthus tuberosus*) алынған этанолдың химиялық құрамы хроматографиялық талдау арқылы қарастырылып, спирт өндiрiсiнде баламалы өсiмдiк шикiзатын қолданудың өзектiлiгi айкындалады. Ферменттелген сусланы айдау кезiнде пайда болатын қоспаларды адсорбциялық әдiстермен тазарту жолдары сипатталады. Сондай-ақ өнеркәсiптiк этанол өндiрудiң энергия шығыны жоғары екенi және өнiм сапасын жетiлдiрудiң маңыздылығы атап өтiледi. Зерттеу барысында топинамбурдан алынған этанолды тазартудың бiрнеше технологиялық кезеңдерi зерттелiп, әрбiр әдiстiң этанолдың тазалығын жақсартуға қосатын үлесi бағаланған.

Түйін сөздер: Этанол, *Helianthus tuberosus*, адсорбция, қоспалар, айдау, газ-сұйық хроматография

© Г.Е. Азимбаева, А.К. Камысбаева*, Г.Н. Кудайбергенова,
У.Ж. Бейсенбиева, Н.М. Курбанбаева, 2025.

Казахский национальный женский педагогический университет,
Алматы, Казахстан.

E-mail: kamysbayeva.a@qyzpu.edu.kz

ХРОМАТОГРАФИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ЭТАНОЛА ПОЛУЧЕННОГО ИЗ КЛУБНЕЙ ТОПИНАМБУРА (*HELIANTHUS TUBEROSUS*)

Азимбаева Гулбайра — кандидат химических наук, и.о. профессора, кафедра химии, Казахский национальный женский педагогический университет, Алматы, Казахстан,
E-mail: azimbaeva.g@qyzpu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0002-6558-8146>;

Камысбаева Алия — магистр педагогических наук, старший преподаватель, кафедра химии, Казахский национальный женский педагогический университет, Алматы, Казахстан,
E-mail: kamysbayeva.a@qyzpu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-0092-4636>;

Кудайбергенова Гульзира — кандидат химических наук, старший преподаватель, кафедра химии, Казахский национальный женский педагогический университет, Алматы, Казахстан,
E-mail: kudaibergenova.g@qyzpu.edu.kz, <https://orcid.org/0009-0006-9888-8061>;

Бейсенбиева Ұлдана — магистр педагогических наук, преподаватель, кафедра химии, Казахский национальный женский педагогический университет, Алматы, Казахстан,
E-mail: beysenbiyeva.u@qyzpu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0002-2955-7027>;

Курбанбаева Нуржамол — магистр естественных наук, преподаватель, кафедра химии, Казахский национальный женский педагогический университет, Алматы, Казахстан,
E-mail: knurzhamol@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0008-3997-3375>.

Аннотация. В настоящее время использование нетрадиционного сырья в производстве спирта является одним из важных вопросов. Этанол – продукт биотехнологии, который используется как добавка к топливу (бензину) для двигателей внутреннего сгорания, и производства спиртных напитков. Около 7% этанола получают путем химического синтеза, а 93% – с помощью дрожжевой ферментации, из них 60% производится из сахарозы, остальное – из зерна. Производство этанола осуществляют методом адсорбции из спиртовых погонов, загрязненных сопутствующими примесями этилового спирта при брагоректификации бражки. Процесс производства этанола достаточно энергоемок с непрерывно-дискретным технологическим процессом, начиная с приемки сырья и заканчивая отгрузкой конечного продукта. Наиболее насущными задачами является обеспечение оптимального хода технологического процесса, контроль качества и их отслеживание. Современный производственный процесс предъявляет совершенно иные требования к качеству выпускаемой продукции, а уровнем конкурентоспособности определяются выживаемость предприятия, его устойчивое положение на рынке. Целью данного исследования была изучение химического состава этанола полученного из клубней топинамбура. Химический состав этанола полученного из клубней топинамбура был идентифицирован на газожидкостном хроматографе Agilent 7890A/5975C. После перегонки бражку состав этанола - 34.890%, примеси - 65.11%. После адсорбции активированным углем содержание этанола - 74.040%, примеси - 25.96%. При дальнейшей обработке этого спирта оксидом кальция содержание этанола - 99.406%, примеси - 0.594%. В исследовательской работе химический состав этанола, полученного из топинамбура (*Helianthus tuberosus*), рассматривается с использованием хроматографического анализа, при этом подчеркивается актуальность применения альтернативного растительного сырья в производстве этанола. Описываются методы удаления примесей, образующихся при перегонке ферментированного сусла, с помощью адсорбции. Также отмечают высокие энергозатраты промышленного производства этанола и важность повышения качества конечного продукта. В ходе исследования изучены несколько технологических этапов очистки этанола, полученного из топинамбура, и оценён вклад каждого метода в улучшение степени его чистоты.

Ключевые слова: Этанол, *Helianthus tuberosus*, адсорбция, примеси, перегонка, газожидкостная хроматография

Introduction. The paper discusses the technological aspects of ethanol production from non-traditional crops, namely sweet sorghum. A technological scheme for obtaining alcohol and fuel pellets from sweet sorghum is presented. Particular attention is paid to assessing the efficiency of alcohol production from sweet sorghum. The advantage of the sugar content in the stem juice of sweet sorghum compared to other raw materials is described. Presumably, the use of technology for producing alcohol from sweet sorghum allows for resource savings (Kashapov et al., 2016). This study aimed to isolate, and characterizing cellulase-producing fungi from decaying tree trunks, as well as determining the effect of incubation time, moisture content, and initial pH of the medium on cellulase production using untreated corn cobs and sugarcane in solid-state fermentation to saccharify ethanol production. Studies on saccharification optimization showed that an enzyme concentration of 7% (w/w), a substrate concentration of 12% (w/w), and a hydrolysis time of 72 hours were optimal for maximum reducing sugar yield. Total reducing sugar yielded the maximum bioethanol yield within 72 hours when *Saccharomyces cerevisiae* was used as the fermenting agent (Masinde et al., 2024). The production of cellulosic ethanol from non-detoxified furfural residues obtained under various operating conditions from sugarcane bagasse was investigated. Simultaneous saccharification and fermentation (SSF) and pretreated industrial strains of *Saccharomyces cerevisiae* were used for fermentation. The highest furfural yield of 69% (11.44 g/100 g dry bagasse) was achieved at 170 °C and 0.5 wt% H_2SO_4 (170-200 °C and 0-1 wt% H_2SO_4), with corresponding ethanol yields of 77-95% (9.57-11.58 g/100 g dry bagasse). The mass of ethanol obtained reflected a conversion of about 50% of the cellulose in the raw biomass due to cellulose decomposition during furfural production. No production conditions were found under which furfural and ethanol yields were maximized, indicating an inevitable trade-off between the two by-products (Ntimbani et al., 2022). This study examines the challenges faced by ethanol plants in Thailand and offers preliminary guidelines for addressing them in the public sector and for ethanol plant operators. This study collected data on identified problems through surveys conducted at 11 of Thailand's 26 ethanol production plants. The study used questionnaires to survey seven aspects of ethanol production, namely: raw materials, production processes, transportation, pricing, government support, engineering, and environmental considerations. Consequently, the data revealed a noticeable correlation between the extraction period and the problems that arose. It was found that all types of ethanol plants experienced the most significant difficulties with obtaining raw materials and pricing, which were the main problems. The production of raw materials such as molasses and cassava varies depending on the season, leading to unstable annual yields. Another moderate problem for ethanol production plants is the government's policy of promoting the use of ethanol fuel (Chatthanon et al., 2025).

Fuel ethanol is the largest liquid biofuel in terms of volume, produced mainly from sugar and starch-based raw materials. The United States and Brazil are the world's largest producers of fuel ethanol. The objective of this study is to increase ethanol production using SuperPro Designer software. Recently, the process of modeling using computerized software has focused considerable attention on increasing ethanol production. In this

study, operational control and modeling were developed to increase ethanol production (modeling and operational control). Through perfect control of temperature, pressure, nutrient supply, and molasses using software. The use of software to predict results is a new method. Modeling of a fermentation plant to increase ethanol production, followed by comparison of feedback with actual data from the plant. The simulation model of the process begins with the construction of a temperature-dependent kinetic model using batch fermentation cultures. Then, the continuous ethanol fermentation process was modeled using a kinetic model that matched the experimental measurements. The simulation was based on a process flow chart. Obtaining ethanol after 5 hours of fermentation resulted in an increase in ethanol from 6% to 7%. The fermentation time was reduced to 5 hours. This compares to (9-18) hours in traditional fermentation methods (Widatalla et al., 2025). This study investigates the composition, hydrolysis, fermentation, kinetic studies, and optimization using response surface methodology (RSM) of ten different lignocellulosic materials in ethanol production using enzymatic hydrolysis of isolated *Trichoderma reesei* and *Aspergillus niger* and fermentation of *Zymomonas mobilis* and *Saccharomyces cerevisiae*. Immediate and final analysis shows that sugarcane and rice husks are ideal raw materials due to their high volatile content, low moisture and ash content, offering more fermentable carbohydrates. The highest glucose concentrations were achieved from sugarcane bagasse (0.5689 g L^{-1}) using *T. reesei* and from rice husks (0.5803 g L^{-1}) using *A. niger*. Pretreatment increased glucose yield, with rice husk ash (RHAn) yielding $9.3 \text{ g ethanol L}^{-1}$ over 60 hours and sugar bagasse (SBTr) yielding 8.1 g L^{-1} over 48 hours, while reducing particle size to $75 \mu\text{m}$ increased glucose yield due to increased surface area. Kinetic models, including Monod and Michaelis-Menten models, were used to describe ethanol production, with RHAn demonstrating the highest growth parameters. This study reports on optimized ethanol production, which achieved maximum yields under controlled conditions, further confirming the feasibility of large-scale bioethanol production (Ibrahim et al., 2025). Second-generation ethanol production uses lignocellulosic waste as feedstock, which is abundant and typically considered waste, solving the problem of “competing with humans for food” caused by first-generation fuel ethanol and demonstrating great importance for national energy security and social sustainability. Lignocellulosic waste used in second-generation ethanol production requires pretreatment using biological, physical, or chemical methods to break down its stubborn structure and increase its enzymatic digestibility. The polysaccharide components of pretreated lignocellulose are then broken down by enzymes into fermentable monosaccharides, which can be converted into ethanol by fermentative microorganisms. Currently, many pretreatment methods have been developed, as well as strategies for enzymatic hydrolysis and fermentation for the conversion of biomass. However, the key to developing the cellulosic ethanol industry still lies in figuring out how to effectively break down the lignocellulosic structure at low cost and with low energy consumption. This chapter reviews and evaluates various lignocellulose pretreatment methods developed in recent years, including their advantages and disadvantages, pretreatment mechanisms, and provides a summary of the current state of cellulose ethanol technologies. In addition,

this chapter also discusses the processes of enzymatic hydrolysis and fermentation for ethanol production, as well as a detailed analysis of many factors affecting process performance. Furthermore, the bottleneck of lignocellulosic ethanol production and future prospects are discussed (Yuan et al., 2025). This study evaluates the enzymatic hydrolysis of pretreated corn cobs (PCC) using a mixture of commercial enzymes (Cellulase and Viscozyme L enzyme mixture) followed by simultaneous saccharification and fermentation (SSF) with *Mucor indicus* DSM 2185 for ethanol production. A combination of 2% (w/w) of a mixture of cellulase enzymes and 5.18% (w/v) of Viscozyme L, corresponding to an enzyme loading of 48.9 FPU/g PCC, allowed almost complete hydrolysis of 40 g L⁻¹ PCC within 6–48 hours, achieving 92.66% total conversion of carbohydrates to fermentable sugars. In SSF experiments conducted in Erlenmeyer flasks, optimal ethanol production in matrix nutrient medium (MNM) reached 14.95 g L⁻¹, with a conversion rate of 0.373 g g⁻¹ at 30 °C over a 48-hour period. Scaling up the bioprocess in a 1.5 L bioreactor with a stirrer at 30 °C resulted in an ethanol concentration of 16.46 g L⁻¹, a total carbohydrate conversion of 86.27%, and a substrate-to-ethanol conversion rate of 0.44 g g⁻¹ over 22 hours. Minor secondary metabolites were also detected, including 0.88 g L⁻¹ xylitol and 0.26 g L⁻¹ glycerol. Overall, the results demonstrate the potential of *M. indicus* in combination with commercial enzyme mixtures as a scalable strategy for industrial ethanol production (Mardetko et al., 2025).

In recent years, annual energy consumption from petroleum sources has increased in many cases, leading not only to the continued depletion of limited fossil fuel reserves, but also raising concerns about a safer, better, and greener environment. In addition, high fossil fuel prices have led to an energy crisis in both developing and developed countries that depend on oil. In response to these challenges, it is necessary to find alternative sources of energy production. This study aimed to compare ethanol production from three different tuber crops (*Manihot Esculenta*, *Ipomoea Batata*, and *Dioscorea SPP*). Cassava, sweet potato, and yam peels were collected from the market in the local government area of Jalingo, Taraba State. The collected samples were taken to a convenient location where they were sorted. Cassava, sweet potato, and yam peels were sorted separately so that mainly peels were available for drying. Drying was carried out in the open air and lasted for a week. The well-dried samples were then ground using a hammer mill, mortar, and pestle, which reduced the cassava, sweet potato, and yam peel to very small particle sizes and weighed. Distilled water was added to 10 g of powdered wort, mixed, and filtered. Yeast and malt were added to the filtered wort and left for three (3) days to ferment. After fermentation, the fermented mash was distilled to collect a colorless liquid as distillate. This distillate was neutral to litmus test, soluble in water, and indicated the presence of alcohol by ester, sodium metal, iodoform, and Lucas tests. The results of comparing the three samples showed that cassava peel produced the highest concentration of ethanol (6.25), followed by thread peel (6.13), while the lowest ethanol yield was obtained from sweet potato peel (5.01) at a temperature of 78.40C and a pH of 7.2 after 72 hours of fermentation. This work has shown that cassava, sweet potato, and yam peelings, which are considered worthless waste, are

suitable raw materials and can be effectively used for ethanol production (Zakari et al., 2025). Production efficiency and production costs are factors that influence the economic success of sugar and ethanol plants. Ethanol is a highly sought-after product, and during the off-season for sugar cane production, its residual production is insufficient to supply the market. This creates a need for imports and negatively affects Brazil's trade balance. In this context, ethanol produced from corn is a potential alternative for securing market supply, generating income, and diluting plant operating costs by extending its operating period throughout the year. However, access to raw materials and implementation costs may affect the economic viability of this activity. The objective of this study was to assess the feasibility of corn ethanol profitability in the context of a sugarcane-only plant that needs to be adapted to flexible conditions, located in the state of São Paulo. The indicator used was the increase in the sales margin for this fuel and its by-products, taking into account the difference between the costs of raw materials in the two regions. The results show that the market margin for corn ethanol is negative in the state of São Paulo due to its distance from Brazil's main corn supplies. However, when we considered the potential revenue from related products, the loss scenario turned into profitability. Thus, it is concluded that the profitability of corn ethanol production in this scenario depends on the commercialization of its by-products in consumer markets such as pig farming and biodiesel plants (Ferreira et al., 2023). The enormous potential for pineapple production can lead to the generation of significant amounts of waste, approximately 75% (by weight) of the pineapple, which contributes to global environmental problems. For this reason, there is an urgent need for bioprocessing methods to convert pineapple plantation waste into high value-added bioproducts, including bromelain, various sugars, xylooligosaccharide, xylitol, and ethanol. The aim of this study was to investigate the efficiency of converting pineapple plantation waste into bromelain, xylitol, and ethanol. In this study, the activity of the bromelain enzyme was tested in each part of the pineapple plant waste. The configuration of hydrolysis and fermentation processes used to produce ethanol and xylitol from the remaining pineapple plant waste from bromelain extraction was also investigated. Bromelain is a proteolytic enzyme found in pineapple plants and can be extracted from every part of pineapple plant waste. Enzymatic activity under several conditions, such as raw extract, pure extract, and dried extract, was studied to determine the best conditions for the subsequent production process of this enzyme in the future. The purification of bromelain involved the use of a precipitation method followed by dialysis, while the drying process used a lyophilization method. It has been shown that the specific activity of bromelain enzyme is highest in pineapple stems, which is observed in unpurified extract (1.45 ± 0.06 CDU/mg), purified extract (10.38 ± 0.06 CDU/mg), and dried extract (12.05 ± 0.43 CDU/mg). Using pineapple stems to extract bromelain can result in lignocellulosic waste, which consists of 39.47% starch, 19.96% hemicellulose, 36.44% cellulose, and 6.05% lignin. The high starch, cellulose, and hemicellulose content can be used as raw material for ethanol and xylitol fermentation. In this study, ethanol and xylose fermentation was carried out using two methods: separate hydrolysis and fermentation (SHF) and semi-simultaneous saccharification and fermentation (semi-SSF). As a result of fermentation using the

semi-SSF method, ethanol with a higher titer and yield (22.12 ± 0.05 g/L and 0.44 ± 0.00 g/g, respectively) was obtained. However, it was found that xylitol formation was insignificant, regardless of whether it was obtained using SHF or semi-SSF. The purification of bromelain involved the use of a precipitation method followed by dialysis, while the drying process used a lyophilization method (Mardawati, et al., 2023). Improving energy efficiency in renewable energy production can contribute to sustainable economic growth with lower fossil fuel consumption, lower greenhouse gas emissions, and greater energy security. The most common biofuel for motor vehicles today is ethanol. Brazil is a major producer of ethanol and uses sucrose from sugar cane, which is currently the most efficient feedstock for bioethanol production. Improving ethanol production at existing plants through thermal integration can lead to significant energy efficiency gains. This article presents diagrams in which the data required for thermal integration is organized in a new way. For the first time, the entire thermal cascade is analyzed through the individual components of ethanol and sugar production, including the boiler, steam turbine, heat exchangers, and technological operations. In standalone plants, the ethanol and electricity produced correspond to approximately 35% and 8% of the input energy, respectively; in combined ethanol-sugar plants, the ethanol, sugar, and electricity produced correspond to approximately 16%, 22%, and 9% of the input energy, respectively. The remaining energy (53-57%) leaves the plant in the form of residues or is released into the environment as heat. The possibilities for improving the plant's energy efficiency by modifying technological operations, heat exchangers, the turbine system, and the boiler have been identified and discussed. Analysis of the plant-wide thermal cascade allows us to understand the relationship between the combustion energy in the boiler, the exergy of gaseous combustion products and high-pressure steam, electricity generation via the turbine, and heat consumption in heat exchangers and process operations. This holistic perspective helps improve energy performance in ethanol and sugar production. Energy transfer diagram (ETD) of the plant-wide heat cascade through ethanol production (Bonhivers et al., 2021).

Materials and methods. There are two ways to produce alcohol: biochemical and chemical or synthetic ones. The biochemical method is fermentation with sugar, the synthetic method is the interaction of ethylene with water in the presence of a catalyst. We used a biochemical method to produce ethyl alcohol. The technology for producing ethyl alcohol includes the following stages: 1) boiling the grain with water 2) cooling of the boiled mass and saccharification of starch with enzymes 3) the fermentation of sugars by yeast in biosport 4) distilling alcohol and its rectification (Yarovenko, et al. 2022). The raw materials are washed and crushed. Besides 1:2, 1:3, 1:4 water is poured, then (TC BY 100104781.010-2005 produced in Belarus, dried alcoholic yeast wort *Saccharomyces cerevisial*) is filled with pre-prepared yeast, mixed and put on for 2-4 weeks at the room temperature. After two or four weeks, they filtered it out. After weighing the amount of wort, distilled it. The resulting wort was poured into a heat-resistant flask, and an electric stove was used to heat it. The temperature of the first distilled alcohol is 89°C. Because the concentration of the first distilled alcohol is low. To increase the concentration, alcohol was redistilled. The distilled alcohol contains

impurities. To determine their quantity and purify them from the alcohol-containing impurities, it is necessary to adsorb and distill them with activated carbon and calcium oxide (Yarovenko et al., 2022; Yermakov et al., 2013, Azimbayeva et al., 2013, Kamysbayeva et al., 2022). The composition of ethyl alcohol, obtained by fermentation of dahlia wort, was determined on Agilent 7890A/5975C gas-liquid chromatography.

Results and discussions.

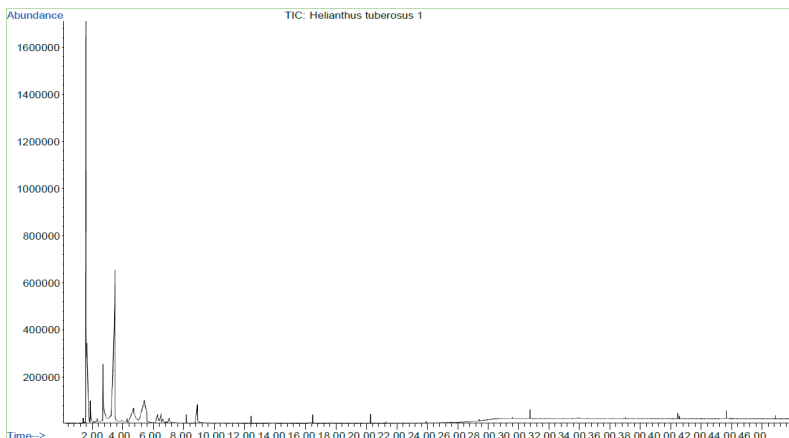


Figure 1- Chromatogram of ethanol obtained from topinambur tubers (*Helianthus tuberosus*)

The composition of ethanol obtained from topinambur tubers (*Helianthus tuberosus*) (%): inorganic gases—0.135, organofluorine compounds—0.135, ethanol—34.890, alcohols—8.050, phenolic compounds—0.066, carboxylic acids-56.268, nitrogenous organic compounds-0.182, esters-0.023, aldehydes-0.106, saturated hydrocarbons-0.045, silicon organic compounds-0.056, heterocyclic compounds-0.212.

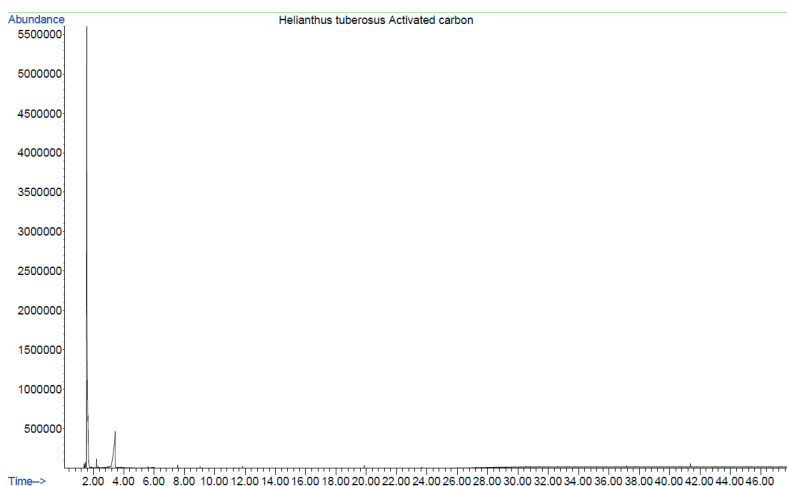


Figure 2- Chromatogram of ethanol obtained from topinambur tubers (*Helianthus tuberosus*) (after adsorption with activated carbon)

The chemical composition of ethanol obtained from topinambur tubers (after adsorption with activated carbon) (%): inorganic gases-0.276, organofluorine compounds -0.375, ethanol -74.040, alcohols -4.023, esters -0.916, heterocyclic compounds-0.575, monosaccharides - 0.033, carboxylic acids-19.240, organosilicon compounds - 0.404, aldehydes - 0.053, organonitrogen compounds - 0.040.

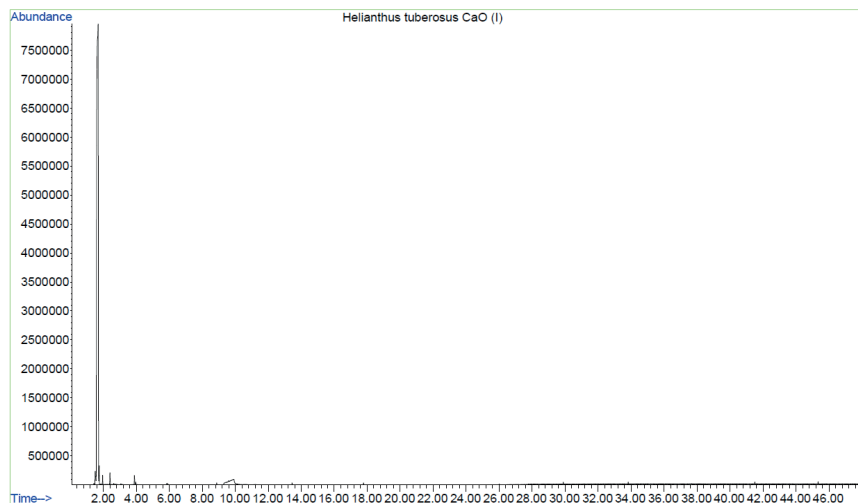


Figure 3- Chromatogram of ethanol from topinambur tubers (Helianthus tuberosus) (CaO adsorption)

Chemical composition of ethanol from topinambur tubers (after adsorption with calcium oxide) (%): inorganic gases—0.070, aldehydes—0.620, ethanol—92.050, alcohols—6.925, esters—0.072, carboxylic acids-0.080, organofluorine compounds-0.105, organosilicon compounds-0.094, phenolic compounds-0.066, organonitrogen compounds-0.082.

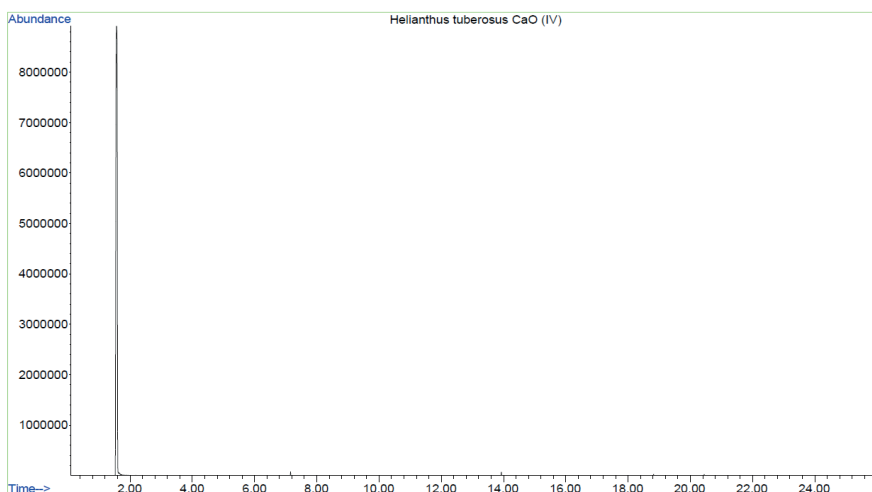


Figure 4- Chromatogram of ethanol from topinambur tubers (Helianthus tuberosus) (CaO adsorption)

Chemical composition of ethyl alcohol from topinambur tubers (after 4-fold adsorption with calcium oxide)(%): ethanol-99.406, alcohols-0.216, nitrogen-containing organic compounds-0.216, heterocyclic compounds-0.040, aldehydes-0.070.

Conclusion. The chemical composition of raw alcohol obtained from topinambur tubers was identified using an Agilent 7890A/5975C gas-liquid chromatograph. After distillation, the mash contains 34.890% ethanol and 65.11% impurities. After adsorption with activated carbon, the raw alcohol content is 74.040%, and impurities account for 25.96%. Upon further processing of this alcohol with calcium oxide, the raw alcohol content is 99.406%, and impurities account for 0.594%.

Thus, based on the above, the technology for producing ethanol from topinambur tubers is effective. This is because this raw material is characterized by a significant content of easily fermentable substances with a high alcohol yield.

Литература

Kashapov N.F., Nafikov M.M., Gazetdinov M.X. (2015) Innovative production technology ethanol from sweet sorghum. Materials Science and Engineering : International Scientific-Technical Conference on Innovative Engineering Technologies, Equipment and Materials. Kazan. — Vol. 134. — P.92-98

Munyasi K., Isanda Omwenga G., Mjomba Mwamburi F. (2024) Production and characterization of cellulolytic enzymes by *Chaetomium globosum* for biomass saccharification and ethanol production. *Discovery*, 334. — P. 1-21. <https://doi.org/10.54905/diss.v60i334.e14d1425>

Ntimbani R.N., Farzad S., Görgens J.F. (2022) Furfural production from sugarcane bagasse along with co-production of ethanol from furfural residues. *Biomass Conversion and Biorefinery*, Vol.,12, — No11. — P. 5257-5267. doi 10.1007/s13399-021-01313-3

Chatthanon, Bhothikhun, Sirisomboon, Kasama, Wasananon, Supachai, Thibodin, Sangsawang, Arromdee, Poramet (2025) Study on ethanol production plant problems in Thailand. *Journal of sustainability science and management*, 20. — P. 977-988

Widatalla Mohammed, Salih, Elzubier, Moneim, Abdel, Babiker, Elhesain O., Mortada, Bukhari, Mohammed, Elamin, Alaa (2025) Simulation and operation control to increase ethanol production in fermentation unit. *International Journal of Progressive Research in Engineering Management and Science*, 5. — P.1744-1752

Ibrahim, Naeemah, Majeed, Halah, Abid, Rand, Alsultan, Abdulkareem, Mijan, Nurul, Lee, Hwei, Tak, Tak, Taufiq-Yap, Yun Hin. (2025) Ethanol production from lignocellulosic waste materials: kinetics and optimization studies. *RSC Advances*,15. — P. 26091-26103

Yuan, Xinchuan, Jin, Mingjie. (2025) Fuel Ethanol Production from Lignocellulosic. *Wastes via Bioconversion*, -15.P.26091

Mardetko, Nenad, Trontel, Antonija, Novak, Mario, Pavle, Mladen, Dobrincic, Ana, Vlatka, Petravi, Eantek, BoEsidar. (2025). Simultaneous Saccharification and Fermentation of Pretreated Corn Cobs by *Mucor indicus* for Ethanol Production. *Clean Technologies*, 7. — P. 71

Zakari, Muhammad, Wazimtu, Rebecca, Emmanuel, Sarki (2025) Comparison of Ethanol Production from three Different Tuber Plants (*Manihot esculenta*, *Ipomoea batata* and *Dioscorea* Spp). *Asian Journal of Science, Technology, Engineering, and Art.*, 3. — P. 844-854

Ferreira, Priscila, Pimenta, Lucas. (2023) Profitability of corn ethanol production in different plant scenarios. *Quaestus*, 4. — P. 1-14

Mardawati, Efri, Putri, Selly, Fitriana, Hana, Nurliasari, Desy, Rahmah, Devi, Rosanti, Maulana, Ikhsan, Dewantoro, Awaly Ilham & Hermiati, Euis, Balia, Roostita. (2023) Application of Biorefinery Concept to the Production of Bromelain, Ethanol, and Xylitol from Pineapple Plant Waste. *Fermentation*, 9. — P. 816

Bonhivers, Jean-Christophe, Silva O., Pablo, Reddick, Christopher, Rossell, Carlos, Mariano, Adriano, Filho, Rubens. (2021) Graphical Analysis of Plant-Wide Heat Cascade for Increasing Energy Efficiency

in the Production of Ethanol and Sugar from Sugarcane. *Process Integration and Optimization for Sustainability*, 5. — P. 10

Яровенко В.Л., Маринченко В.А., Смирнов В.А. Технология спирта: учебное пособие. (Русское изд.: Яровенко В. Л., Маринченко В.А., Смирнов В. А., 2022) Москва: Колос, Колос-пресс. — 15 с.

Ермаков А.И. (2013). Методы биохимических исследований растений. 3-е изд. Ленинград: Агропромиздат.

Azimbayeva G.E., Kamysbayeva A.K., Bakibaev A.A. (2021) Gas chromatographic analysis of the chemical composition of ethyl alcohol obtained from plants of the genus *Asteraceae*. *News of NAS RK. Ser. Chemistry and Technology*. — No2 (446). — P.6-13. <https://doi.org/10.32014/2021.2518-1491.20>

Kamysbayeva A.K., Azimbayeva G.E., Myrzakhmetova N.O., Argynbayeva Z.M., Medeuova G.Zh. (2022) Study of the chemical composition of raw alcohol obtained from the tuber of dahlia. *Chemical Journal of Kazakhstan*, Vol. 2. — No 78. — P. 92-98. <https://doi.org/10.51580/2022-2/2710-1185.68>.

References

Kashapov N.F., Nafikov M.M., Gazetdinov M.X. (2015) Innovative production technology ethanol from sweet sorghum. *Materials Science and Engineering: International Scientific-Technical Conference on Innovative Engineering Technologies, Equipment and Materials*. Kazan. — Vol. 134. — P. 92-98. (in English)

Munyasi K., Isanda Omwenga G., Mjomba Mwamburi F. (2024) Production and characterization of cellulolytic enzymes by *Chaetomium globosum* for biomass saccharification and ethanol production. *Discovery*, 334. — P. 1-21. <https://doi.org/10.54905/disssi.v60i334.e14d1425>. (in English)

Ntimbani R.N., Farzad S., Görgens J.F. (2022) Furfural production from sugarcane bagasse along with co-production of ethanol from furfural residues. *Biomass Conversion and Biorefinery*, Vol. 12. — No11. — P. 5257-5267. doi.org/10.1007/s13399-021-01313-3. (in English)

Chatthanon, Bhothikhun, Sirisomboon, Kasama, Wasananon, Supachai, Thibodin, Sangsawang, Arromdee, Porameetr (2025) Study on ethanol production plant problems in Thailand. *Journal of sustainability science and management*, 20. — P.977-988. (in English)

Widatalla, Mohammed, Salih, Elzubier, Moneim, Abdel, Babiker, Elhesain O., Mortada, Bukhari, Mohammed, Elamin, Alaa (2025) Simulation and operation control to increase ethanol production in fermentation unit. *International Journal of Progressive Research in Engineering Management and Science*, 5. — P.1744-1752. (in English)

Ibrahim, Naemah, Majeed, Halah, Abid, Rand, Alsultan, Abdulkareem, Mijan, Nurul, Lee, Hwei, Tak, Tak, Taufiq-Yap, Yun Hin. (2025) Ethanol production from lignocellulosic waste materials: kinetics and optimization studies. *RSC Advances*, 15. — P. 26091-26103. (in English)

Yuan, Xinchuan, Jin, Mingjie (2025) Fuel Ethanol Production from Lignocellulosic Wastes via Bioconversion, 15. — P.26091. (in English)

Mardetko, Nenad, Trontel, Antonija, Novak, Mario, Pavle, Mladen, Dobrincic, Ana, Vlatka, Petravi, Eantek, BoEsidar. (2025) Simultaneous Saccharification and Fermentation of Pretreated Corn Cobs by *Mucor indicus* for Ethanol Production. *Clean Technologies*, 7. — P. 71. (in English)

Zakari, Muhammad, Wazimtu, Rebecca, Emmanuel, Sarki (2025) Comparison of Ethanol Production from three Different Tuber Plants (*Manihot esculenta*, *Ipomoea batata* and *Dioscorea* Spp). *Asian Journal of Science, Technology, Engineering, and Art.*, 3. — P. 844-854. (in English)

Ferreira, Priscila, Pimenta, Lucas (2023) Profitability of corn ethanol production in different plant scenarios. *Quaestum*, 4. — P. 1-14. (in English)

Mardawati, Efri, Putri, Selly, Fitriana, Hana, Nurliasari, Desy, Rahmah, Devi, Rosanti, Maulana, Ikhsan, Dewantoro, Awaly Ilham & Hermiati, Euis, Balia, Roostita. (2023) Application of Biorefinery Concept to the Production of Bromelain, Ethanol, and Xylitol from Pineapple Plant Waste. *Fermentation*, 9. — P. 816. (in English)

Bonhivers, Jean-Christophe, Silva O., Pablo, Reddick, Christopher, Rossell, Carlos, Mariano, Adriano, Filho, Rubens. (2021). Graphical Analysis of Plant-Wide Heat Cascade for Increasing Energy Efficiency in the Production of Ethanol and Sugar from Sugarcane. *Process Integration and Optimization for Sustainability*, 5. — P. 10. (in English)

Ĭarovenko V.L., Marinchenko V.A., Smirnov V.A. Tehnologija spirta: uchebnoe posobie [Alcohol technology: a textbook]. (Ruskoe izd.: Ĭarovenko V.L., Marinchenko V.A., Smirnov V.A., (2022) Moskva: Kolos, Kolos-pres. — 15 s. (in Russian)

Ermakov A.Ĭ. (2013) Metody biohimicheskikh issledovani rasteni [Methods of biochemical research of plants]. 3-e izd. Leningrad: Agropromizdat. (in Russian)

Azimbayeva G.E., Kamysbayeva A.K., Bakibaev A.A. (2021) Gas chromatographic analysis of the chemical composition of ethyl alcohol obtained from plants of the genus Asteraceae. News of NAS RK. Ser. Chemistry and Technology, — No2 (446). — P.6-13. (in English) <https://doi.org/10.32014/2021.2518-1491.20> (in English)

Kamysbayeva A.K., Azimbayeva G.E., Myrzakhmetova N.O., Argynbayeva Z.M., Medeuova G.Zh. (2022) Study of the chemical composition of raw alcohol obtained from the tuber of dahlia. Chemical Journal of Kazakhstan, Vol. 2. — No 78. — P.92-98. (in English) <https://doi.org/10.51580/2022-2/2710-1185.68> (in English)

© **B. Amiraliyev¹, N. Zhanikulov^{2*}, B. Taimasov¹, M. Aitureev¹,
B. Zhakipbayev³, 2025.**

¹M. Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan;

²Academician E.A. Buketov Karaganda University, Karaganda, Kazakhstan;

³Peoples' Friendship University named after Academician A. Kuatbekov,
Shymkent, Kazakhstan.

E-mail: nurgali.zhanikulov@mail.ru

EXPANDING THE RAW MATERIAL BASE OF MINERAL ADDITIVES FOR THE PRODUCTION OF COMPOSITE CEMENTS

Amiraliyev Baurzhan — PhD student of M. Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan,
E-mail: Badam777@inbox.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8813-9271>;

Zhanikulov Nurgali — Doctor of PhD, associate professor, E.A. Buketov Karaganda university,
Karaganda, Kazakhstan,

E-mail: nurgali.zhanikulov@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0750-9753>;

Taimasov Bakhitzhan — Doctor of Technical Sciences, Professor of Silicate Technology and Metallurgy
Department, M. Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan,

E-mail: taimasovukgu@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1844-4932>;

Aitureev Murat — PhD (technical sciences), associate professor, dean of higher school 'Chemical
Engineering and Biotechnology', M. Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan,

E-mail: murattssm@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0001-8154-0417>;

Zhakipbayev Bibol — PhD, Associate Professor, Chief Researcher Engineering and Technology Hub,
Peoples' Friendship University named after Academician A. Kuatbekov, Shymkent, Kazakhstan,

E-mail: bibol.ye.zhakipbayev@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0750-9753>.

Abstract. The article presents a study on aluminosilicate and siliceous rocks from the "Lengerskoe," "Utesaysky," "Kuyuk," and "Mynaralskoye" deposits to assess their suitability as active mineral additives for producing composite cements. Researchers investigated their chemical and mineralogical composition, pozzolan activity, and other physicochemical characteristics affecting cement composite properties. A key focus was on the potential for reducing greenhouse gas emissions by lowering the clinker component. The results detail the physicomechanical parameters of composite cements with various additives. The study considered the additives' effect on cement clinker grinding, hydration, hardening, and the kinetics of hydrosilicate compound formation. It was established that active mineral additives increase cement paste mobility and improve concrete structuring, especially in the initial hardening stages. Furthermore, these additives slow down setting times, promoting more uniform hydration processes and the

formation of a dense, durable cement stone structure, which ensures stable technological characteristics. The tested aluminosilicate and siliceous rocks, particularly the shales from the Kuyukskoye and Mynaralskoye fields, are effective mineral additives. Their use provides a path for the rational use of local mineral raw materials and reducing the cement industry's carbon footprint. While a slight strength decrease was observed, this is offset by significant advantages: lower production costs, increased cement durability, and a substantial reduction in carbon dioxide emissions due to decreased clinker content.

Key words: active mineral admixture, diatomite, shale, grinding, composite, pozzolanic cement, strength

© Б. Амиралиев¹, Н. Жаникулов^{2*}, Б. Таймасов¹, М. Айтуреев¹,
Б. Жакипбаев³, 2025.

¹М. Әуезов атындағы Оңтүстік-Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан;

²Академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды университеті,
Қарағанды, Қазақстан;

³Академик Ә. Қуатбеков атындағы Халықтар достығы университеті,
Шымкент, Қазақстан.

E-mail: nurgali.zhanikulov@mail.ru

КОМПОЗИЦИОНАЛЬНЫЙ ЦЕМЕНТ ДЛЯ МИНЕРАЛЬНЫХ КОМПОНЕНТОВ ШИКАТОРНОЙ БАЗЫ КЕЧЕИ

Әмиралиев Бауржан — М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университетінің PhD докторанты, Шымкент, Қазақстан,

E-mail: Badam777@inbox.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8813-9271>;

Жәнікулов Нұрғали — PhD, қауымдастырылған профессор, академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды университеті, Қарағанды, Қазақстан,

E-mail: nurgali.zhanikulov@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0750-9753>;

Таймасов Бахитжан — техника ғылымдарының докторы, М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университетінің "Силикаттар технологиясы және металлургия" кафедрасының профессоры., Шымкент, Қазақстан,

E-mail: taimasovukgu@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1844-4932>;

Айтуреев Мұрат — техника ғылымдарының кандидаты, доцент, М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университетінің "Химиялық инженерия және биотехнология" жоғары мектебінің деканы, Шымкент, Қазақстан,

E-mail: murattssm@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0001-8154-0417>;

Жакипбаев Бибол — PhD, қауымдастырылған профессор, Академик Ә. Қуатбеков атындағы Халықтар достығы университетінің инженерлік-технологиялық хабтың бас ғылыми қызметкері, Шымкент, Қазақстан,

E-mail: bibol.ye.zhakipbayev@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0750-9753>.

Аннотация. Мақалада композициялық цемент өндірісінде белсенді минералды қоспалар ретінде олардың жарамдылығын анықтау мақсатында "Ленгер", "Утесай", "Күйік" және "Мынарал" кенорындарынан іріктелген алюминий силикатты және кремнийлі жыныстарды кешенді зерттеу нәтижелері келтірілген. Зерттелетін жыныстардың минералогиялық және химиялық құрамы, олардың

пуццоландық белсенділігі және цемент композиттерінің қасиеттеріне әсер ететін физика-химиялық сипаттамалары зерттелді. Цементтің бір бөлігін белсенді минералды қоспалармен ауыстыру кезінде клинкер компонентін азайту арқылы қол жеткізілетін парниктік газдар шығарындыларын азайту әлеуетін бағалауға ерекше назар аударылған. Нәтижелер. Қоспалардың әртүрлерін қолдану арқылы алынған композициялық цементтердің физика-механикалық көрсеткіштерін анықтау бойынша зерттеулердің нәтижелері келтірілген. Қоспалардың цемент клинкерін ұнтақтау, ылғалдандыру және қатаю процестеріне, гидросиликат қосылыстарының түзілу кинетикасына әсері қарастырылады. Белсенді минералды қоспалардың қосылуы цемент қамырының қозғалғыштығын арттыруға және бетондардың құрылымдық түзілу жағдайларын жақсартуға, әсіресе қатаюдың бастапқы кезеңдерінде ықпал ететіні анықталды. Мұндай қоспалар орнатудың басталу және аяқталу уақытына баяулататын әсер ететіні анықталды, бұл өз кезегінде гидратация процестерінің біркелкі жүруіне және цемент тасының тығыз және берік құрылымын қалыптастыруға ықпал етеді. Бұл бетон және құрылыс бұйымдарын өндіруде неғұрлым тұрақты технологиялық сипаттамаларды қамтамасыз етуге мүмкіндік береді. Осылайша, зерттелген алюмосиликатты және кремнийлі жыныстарды экологиялық бағдарланған композициялық цементтерді өндіруде минералды қоспалар ретінде тиімді пайдалануға болады, бұл жергілікті минералды шикізатты ұтымды пайдалану және цемент өнеркәсібінің көміртегі ізін азайту перспективаларын ашады. Күйік және Мыңарал кенорындарының тақтатастары композициялық цемент өндірісінде пайдалану мүмкіндігіне ие. Беріктіктің төмендеуіне қарамастан, бұл бірқатар маңызды артықшылықтармен өтеледі: өнімнің өзіндік құнының төмендеуі, цемент материалының беріктігінің жоғарылауы, цемент құрамындағы клинкердің үлесінің төмендеуі, атмосфераға көмірқышқыл газының шығарындыларының төмендеуі.

Түйін сөздер: белсенді минералды қоспа, диатомит, сазды шифер, ұнтақтау, композициялық цемент, пуццолан цементі, беріктік

© Б. Амиралиев¹, Н. Жаникулов^{2*}, Б. Таймасов¹, М. Айтурсев¹,
Б. Жакипбаев³

¹Южно–Казахстанский университет им. М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан;

²Карагандинский университет имени академика Е.А. Букетова,
Караганда, Казахстан;

³Университет дружбы народов имени академика А. Куатбекова,
Шымкент, Казахстан.

E-mail: nurgali.zhanikulov@mail.ru

РАСШИРЕНИЕ СЫРЬЕВОЙ БАЗЫ МИНЕРАЛЬНЫХ ДОБАВОК ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ КОМПОЗИЦИОННЫХ ЦЕМЕНТОВ

Амиралиев Бауржан — докторант PhD Южно–Казахстанского университета им. М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан,

E-mail: Badam777@imnbox.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8813-9271>;

Жаникулов Нургали — PhD, ассоциированный профессор, Карагандинский университет имени академика Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан,

E-mail: nurgali.zhanikulov@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0750-9753>;

Таймасов Бахитжан — доктор технических наук, профессор кафедры «Технология силикатов и металлургия» Южно-Казахстанского университета им. М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан,

E-mail: taimasovukgu@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1844-4932>;

Айтурсев Мурат — кандидат технических наук, доцент, декан высшей школы «Химическая инженерия и биотехнология» Южно-Казахстанского университета им. М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан,

E-mail: murattssm@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0001-8154-0417>;

Жакипбаев Бибол — PhD, ассоциированный профессор, главный научный сотрудник Инженерно-технологического хаба, Университет дружбы народов имени академика А. Куатбекова, Шымкент, Казахстан,

E-mail: bibol.ye.zhakipbayev@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0750-9753>.

Аннотация. В статье представлены результаты исследований алюмосиликатных пород, месторождений «Ленгерское», «Утесайский», «Куюк» и «Мынаральское», с целью определения их пригодности в качестве активных минеральных добавок при производстве композиционных цементов. Изучены химический и минералогический состав исследуемых пород, а также их пуццолановая активность и другие физико-химические характеристики, оказывающие влияние на свойства цементных композитов. Особое внимание уделено оценке потенциала снижения выбросов парниковых газов, достигаемого за счёт уменьшения клинкерной составляющей при замене части цемента активными минеральными добавками. **Результаты.** Приведены результаты экспериментальных исследований по определению физико-механических показателей композиционных цементов, полученных с использованием различных видов добавок. Рассмотрено влияние добавок на процессы помола цементного клинкера, гидратации, твердения, на кинетику формирования гидросиликатных соединений. Установлено, что включение активных минеральных добавок способствует повышению подвижности цементного теста и улучшению условий структурообразования бетонов, особенно на начальных стадиях твердения. Дополнительно выявлено, что такие добавки оказывают замедляющее действие на сроки начала и окончания схватывания, что, в свою очередь, способствует более равномерному протеканию процессов гидратации и формированию плотной и прочной структуры цементного камня. Это позволяет обеспечить более стабильные технологические характеристики при производстве бетонных и строительных изделий. Таким образом, исследованные алюмосиликатные и кремнистые породы могут быть эффективно использованы в качестве минеральных добавок при производстве экологически ориентированных композиционных цементов, что открывает перспективы для рационального использования местного минерального сырья и снижения углеродного следа цементной промышленности. Так сланцы Куюкского и Мынаральского месторождений обладают потенциалом для использования в производстве композиционных цементов. Несмотря на незначительное снижение

прочности, это компенсируется рядом существенных преимуществ: уменьшением себестоимости продукции, повышенной долговечностью цементного материала, снижением доли клинкера в составе цемента, а также сокращением выбросов углекислого газа в атмосферу.

Ключевые слова: активная минеральная добавка, диатомит, глинистый сланец, помол, композиционный цемент, пуццолановый цемент, прочность

Введение. Важным направлением решения проблемы высокой эмиссии углекислоты в окружающую среду при производстве портландцемента является снижение содержания в нем клинкерной составляющей за счет введения активных минеральных добавок (Потапова и др. 2017; Казахстан, 2021), выпуск композиционных цементов с пониженным содержанием клинкера, утилизация отходов, прошедших термическую обработку (Таймасов и др. 2024; Классен и др. 2024). Недра Казахстана богаты высококачественным цементным сырьем, крупные и средние по объему залежи известняков, глинистого сырья, активных минеральных добавок распространены по всей территории Республики Казахстан.

Задачей предприятий строительных материалов является рациональное хозяйское использование этих природных ресурсов и техногенных продуктов. В научно-исследовательских институтах, кафедрах ВУЗов проведены многочисленные исследования по использованию диатомитов, глинистых сланцев, различных отходов обогащения, золошлаков в качестве активной минеральной добавки для получения композиционных цементов. Увеличение выпуска цемента позволит устранить дефицит этого важнейшего материала в Республике, импортировать цемент за рубеж, удешевить строительство, создать дополнительные рабочие места за счет ввода новых предприятий по выпуску строительных изделий, увеличению объемов сельскохозяйственного, гидротехнического, ирригационного, дорожного строительства.

В тенденциях дальнейшего развития цементного производства в Китае указано о важности максимального снижения выбросов CO_2 самыми различными способами, в том числе за счет снижения доли клинкера в композиционных цементах (Ян Дань и др., 2024).

Искандарова М.И., Атабаев Ф.Б., Турсунова Г.Р. исследовали возможность использования термообработанного мергеля в качестве активной минеральной добавки при получении цементов. Установлено, что гидравлическая активность мергеля, термообработанного при 500°C , при полученном значении $t = 23,10 > 15$, согласно требованиям стандарта Oz MSt 336 обладает высокой гидравлической активностью и может применяться в качестве активной минеральной добавки к цементу (Искандарова и др. 2025).

Искандарова М.И., Якубжанова З.Б., Бегжанова Г.Б. изучили влияние гибридных активных минеральных добавок глиежеподобного горного массива и андебазальта вулканических горных пород Карахтаского проявления на генетическое развитие новообразований при твердении цементов. Установлено, что гидравлическая активность глиежеподобного горного массива, определенная

по критерию Стьюдента была высокая ($t=37,8$), а для андебазальта низкая ($t=3,23$). Замена 25 % клинкера при вводе оптимального сочетания предлагаемых добавок позволило получить цемент с активностью 40,4 МПа (Искандарова и др. 2025).

Рустамов Ш.Ш. и др. исследовали возможность повышения активности минеральных добавок, за счет термоактивации минеральных добавок, таких как отход флотации медно-молибденовых руд, обработанных при температурах от 700 до 900 °С и интервалами выдержки до 3 часов при максимальных температурах. Авторами установлено, что максимальная активность для термообработанного флотоотхода достигается при температуре 800 °С и составляет 14,83 мг/г (Рустамов и др. 2025).

Исследования, выполненные в ЮКУ им. М. Ауэзова показали, что путем введения добавок обожженных сланцев месторождения Мынарал можно получить композиционные цементы со снижением доли клинкерной составляющей на 10-15 %, что позволит на эту же величину снизить вредные выбросы углекислоты в атмосферу. Оптимальной температурой обжига сланцев является 800-900 °С с выдержкой 30 минут. Активность добавок по поглощению СаО составляет 27-34 мг. Введение 15-20 % обожженных сланцев позволяет снизить долю клинкера в композиционных цементах на эту же величину и уменьшить выбросы углекислоты в атмосферу (Амиралиев и др. 2024).

Современное производство цемента все больше ориентируется на применение активных минеральных добавок, производство которых связано с гораздо меньшими энергетическими затратами, чем цементный клинкер, и меньшими выбросами углекислого газа. В этом отношении перспективным является ряд синтезированных алюмосиликатных продуктов, сырьем для которых служит глинистый сланец.

Несмотря на то, что общие закономерности взаимодействия активных минеральных добавок, в том числе и метакаолинов, с портландцементом достаточно хорошо изучены, характеристики новых отечественных продуктов, предлагаемых для применения в строительной отрасли в качестве импортозамещающих аналогов, требуют специального исследования. Это обусловлено тем, что активность минеральных добавок и их влияние на гидратацию портландцемента определяется составом сырья и параметрами технологической обработки. В связи с этим минеральные добавки различных производителей существенно различаются по составу и свойствам. Активные минеральные добавки по виду происхождения разделяются на добавки естественного и искусственного происхождения. Добавки естественного происхождения разделяются на вулканические и осадочные породы.

Материалы и методы исследования. Исследование ленгерской глины, диатомита и глинистых сланцев в качестве минеральной добавки к цементам проводилось в соответствии с требованиями ГОСТ 25094-2015 (ГОСТ 25094-2015). Из образцов были отобраны усредненные пробы путем квартования. Сырьевые материалы изучались с помощью РЭМ, РФА, и спектроскопических методов (Таймасов и др., 2024).

Химический состав определяли с помощью растрового сканирующего

электронно-микроскопического анализа. Исследовательская работа выполнена с использованием научного оборудования региональной испытательной лаборатории инженерного профиля «ИРЛИП» ЮКУ им.М. Ауэзова. INCA Energy была исследована с помощью растрового электронного микроскопа JEOL JSM-6490LV (Япония) с энергодисперсионным микроанализом и системами структурного анализа HKL-Basic. Многоцелевой растровый электронный микроскоп (с полезным увеличением от $\times 5$ до $\times 300\,000$ раз) позволяет работать как в стандартном, так и в низковакуумном режимах. Напряжение ускорителя - 0,3 – 30 кВ; определяющая способность-до 3,0 нм (при напряжении ускорителя 30 кВ); имеет термоэмиссионный источник электронов. Имеется возможность исследования образцов относительно крупных размеров (высота до 45 мм, диаметр до 200 мм) Химический анализ материалов проводили по ГОСТ 5382-2019 (ГОСТ 5382-2019; Taimasov, et al. 2021).

Минералогический состав определяли методом рентгенофазного анализа на рентгенографическом аппарате Дрон-3. Исследовательская работа выполнена с использованием научного оборудования лаборатории испытательного центра «Сапа» ЮКУ им.М. Ауэзова.

Установка ДРОН-3 позволяет проводить рентгеноструктурные исследования различных материалов, определять качественный и количественный фазовый состав и анализировать строение веществ. Оборудование работает в следующих условиях: температура окружающей среды 10-35 °С, относительная влажность при 25 °С до 80 %, атмосферное давление 630-800 мм. критика. гр. При проведении рентгеноструктурного анализа использовались рентгеновские трубки 1,5 БСБ 23-Cu.

Рентгеновская дифрактометрия (X – Ray Diffractometry) - анализ поли-и монокристаллических веществ как объемного, так и тонкопленочного типа. Этот метод позволяет определять химические соединения в образце в поликристаллических формах, атомное строение отдельных соединений, показатели элементарных ячеек пространственных решеток, их размеры и форму, сингониум, который находится в пределах.

Рентгенофазный анализ глинистого сланца (X-Ray Diffractometry), а также приложение были обнаружены в установке Bruker AXS D8 (Карлсруэ, Германия). Установка работает на медном (Cu) аноде и детекторе VANTEC PSD. Шкала- 2θ , начало-5,000 °, конец-69,996 °. Шаг-0,008 °. Время шага - 182,6 секунды. Исследования проводились в партнерстве с использованием научного оборудования Мюнхенского Технического университета (Германия).

Определение активности минеральных добавок классическим методом

Определена активность минеральной добавки методом поглощения извести. Метод основан на определении количества поглощаемой извести за определенный промежуток времени. Методом титрования была определена активность используемых материалов. Продолжительность опыта составляла 30 дней, периодически раз в двое и трое суток титровали, полученные данные записывали в таблицу определения активности минеральных добавок.

Физико-механические испытания

Исследовано влияние используемых материалов на физико-механические показатели композиционных цементов.

Физико-механические испытания проводились в соответствии с требованиями ГОСТ 310.1-76 и 310.3-76***. Цементное тесто нормальной густоты готовили в сферической чаше. Цементный раствор готовили в лабораторном автоматизированном миксере АЛС-5.

Нормальная густота цементного теста определялась с помощью прибора Вика, прочность на сжатие и изгиб определяли на образцах призмах размерами 40x40x160 мм.

В соответствии с требованиями ГОСТ 310.4-76 Цементы. Методы испытаний. Прочность на сжатие цемента без добавок (контрольная) за 28 суток испытывали на малогабаритном гидравлическом прессе ПГМ-100 МГ-4а с пределом нагрузки до 100 кН установлены пределы прочности при сжатии. Кроме того, определены плотность и влагоемкость цементных камней и коэффициенты размягчения в соответствии с ГОСТ 12730.1-2020 и ГОСТ 12730.3-2020 кубических образцов цемента. Величина плотности рассчитывалась как отношение массы образца цементного камня к объему (г/см³).

По ГОСТ 31108-2020 предусматривается выпуск портландцементов с минеральными добавками типа ЦЕМ II с добавками пуццоланы, глиежа, золы-уноса, диатомита или известняка в количестве 6-20 % и 21-35 % и более. Ввод различных добавок, замещающих клинкер, предусмотрен и в пуццолановых цементах типа ЦЕМ V (ГОСТ 31108-2020).

Результаты и дискуссия. Для получения композиционных цементов использовался портландцементный клинкер ТОО «Шымкентцемент», двуводный гипс, ленгерская глина, диатомит Утесайского месторождения Актюбинской области, глинистые сланцы месторождений «Куюк» и «Мынаральское» Джамбульская область.

Проба клинкера взята с клинкерного склада и характеризуется следующими КН, модулями и химико-минералогическим составом, масс. %: КН = 0,95, п = 2,84, р = 1,23. C₃S = 57 %; C₂S = 14,8 %; C₃A = 5,3 %; C₄AF = 18 %. Химический состав исходных материалов приведен в таблице 1.

Таблица 1. Химический состав клинкера и используемых материалов

Наименование	Химический состав, %						
	SiO ₂	Al ₂ O ₃	CaO	Fe ₂ O ₃	MgO	SO ₃	Потери при прокаливании
Клинкер ТОО «Шымкентцемент»	21,36	4,15	64,82	3,37	1,5	0,06	-
Диатомит Утесайского месторождения	74,76	11,18	1,1	4,62	1,1	1,55	6,34
Ленгерская глина	50,78	14,23	10,23	5,87	14,31	0,44	1,93
Глинистый сланец мынаральский	69,39	9,55	6,61	3,63	0,76	-	3,75

Глинистый сланец куюкский	53,94	16,99	6,47	12,77	4,10	-	4,16
Двуводный гипс	0,12	0,1	38,19	-	1,86	49,54	1,42

Клинкер: алит $3\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$ d/n – 2,79; 2,77; 2,57; 2,25; 2,97; 1,73; 3,05 Å; белит $2\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$ d/n – 2,79; 2,77; 2,31; 2,43; 2,86; 1,82; Å; четырехкальциевый алюмоферрит $4\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$ d/n – 2,64; 1,82; 1,54; 1,92 Å; трехкальциевый алюминат $3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3$ d/n – 2,16; 4,09; 1,91 Å.

Диатомиты состоят в основном из SiO_2 d = 4,26; 3,42; 2,50; 1,82 Å с примесями доломита d = 2,88; 2,19; 1,82 Å, и гипса d = 4,43; 3,12; 2,88 Å. Основная масса диатомита аморфизированное вещество и на рентгенограмме не обнаруживается.

Мынаральское месторождение глинистых сланцев: кварц - SiO_2 d/n – 3,35; 1,814; 1,538 Å; гидрослюда d/n – 3,141; 4,42; 1,484; 2,103; 2,546 Å; хлорит d/n – 7,02; 3,54; 4,68; 1,536 Å; каолинит d/n – 7,15; 3,56; 2,49; 2,34 Å; кальцит d/n – 3,03; 1,868; 1,913; 2,087 Å; гематит – Fe_2O_3 – 2,697; 2,519; 1,835; 1,688; 1,484 Å.

Куюкское месторождение: кварц - SiO_2 d/n – 3,26; 1,813; 1,539 Å; гидрослюда d/n – 3,05; 4,41; 1,483; 2,104; 2,545 Å; хлорит d/n – 7,02; 3,53; 4,69; 1,537 Å; каолинит d/n – 7,13; 3,55; 2,48; 2,36 Å; кальцит d/n – 3,029; 1,869; 1,912; Å; гематит – 2,696; 2,518; 1,834; 1,689 Å.

Определение активности минеральных добавок классическим методом. Методом титрования была определена активность ленгерской глины, диатомита, глинистых сланцев месторождений «Куюк» и «Мынаральское». Продолжительность опыта составляла 30 дней, периодически раз в двое и трое суток титровали, полученные данные записывали в таблицу определения активности минеральных добавок (Бутт, и др. 1973).

По результатам титрования были получены нижеприведенные результаты активности минеральных добавок (Рисунок 1).

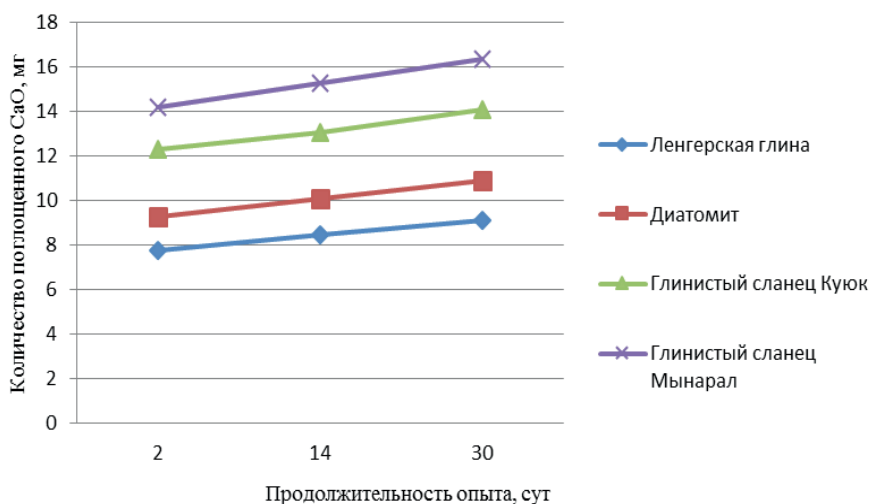


Рисунок 1 – Активность минеральных добавок

Как видно из диаграммы сланец Мынарал имеет самую высокую активность 16,7 мг, сланец Куюк 14,6 мг, диатомит 11,3 мг. Ленгерская глина имеет самую низкую активность 9,2 мг. С увеличением продолжительности опыта величина поглощения СаО непрерывно возрастает для всех добавок.

Влияние диатомита на процесс помола цемента. Исследовано влияние дозировки диатомита на процесс помола цемента. Помол цемента проводили в лабораторной мельнице. Дозировка диатомита составляла от 5 до 30 %. Масса мелющих тел шаров диаметром от 10 до 40 мм и цельпеса – составляла 40 кг, масса измельчаемого материала – 4 кг. Через определенные промежутки времени отбирали пробы и определяли остаток на контрольном сите № 008. Данные приведены на диаграмме рисунок 2.

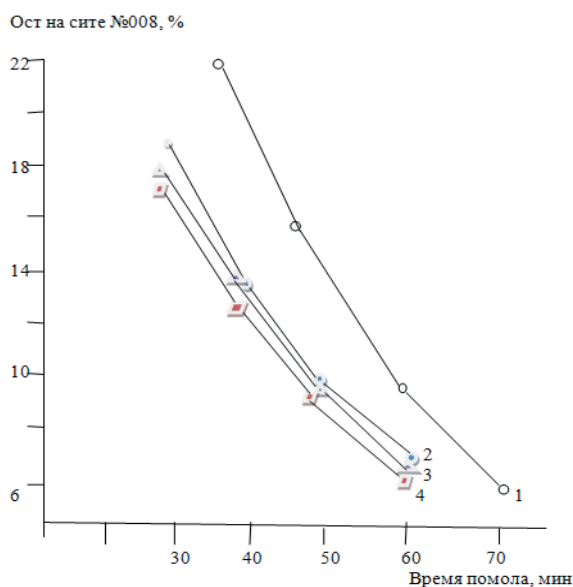


Рисунок 2 – Влияние диатомита на процесс помола цемента
1- без диатомита; 2 - с 10 % диатомита; 3 - с 20 % диатомита;
4 - с 30 % диатомита Утесайского месторождения

Результаты экспериментов показали, что диатомит интенсифицирует процесс тонкого помола цемента. Заданная тонкость помола цемента без добавки диатомита равная 6 % была достигнута за 70 минут измельчения. Диатомит в количествах от 10 до 30 % интенсифицирует процесс помола. Время помола цемента с диатомитом составило 60 минут. С увеличением дозировки добавки процесс измельчения облегчается.

Известно, что процесс помола цемента в шаровой мельнице является весьма энергоемким. На измельчение 1 т портландцемента затрачивается от 40 до 50 кВт·ч электроэнергии (Классен, и др. 2024; Ян Дань, и др. 2024). Поэтому введение диатомита при помоле цемента позволит снизить расход электроэнергии, повысить производительность мельниц, снизить себестоимость продукции.

Физико-механические испытания композиционных цементов. Заводской портландцементный клинкер подвергался дроблению в лабораторной щековой затем в валковой дробилке до размеров частиц 0 - 5мм.

Затем были замолоты композиционные цементы с добавками 5 % двуводного гипса и 0, 5, 10 и 15 % ленгерской глины, диатомита, сланца Куюк и сланца Мынарал. Помол цементов производился в двухкамерной шаровой мельнице до остатка на сите № 008 6-8 %. Тонкость помола порошков определялась на приборе ПСХ-К и составила от 3700 до 4200 см²/г. Через 30 минут помола, затем через каждые 10 минут производили отбор пробы цемента и определяли остаток на контрольном сите № 008.

Исследовано влияние материалов на физико-механические показатели композиционных цементов. Физико-механические испытания проводились в соответствии с требованиями ГОСТ 310.1-76 и 310.3-76 (ГОСТ 310.1-3-76; ГОСТ 310.4-81). Цементное тесто нормальной густоты готовили в сферической чаше. Цементный раствор готовили в лабораторном автоматизированном миксере АЛС-5. Нормальная густота цементного теста без добавки материалов составила 27,5 %, с добавкой 5 – 15 % сланца Мынарал составила 27 %, а сланца Куюк - 27 %, диатомита - 28 %. При увеличении дозировки добавок до 15 % водопотребность теста увеличивалась до 28-29 %.

Нормальная густота цементного теста определялась с помощью прибора Вика, прочность на сжатие и изгиб определяли на образцах призмах размерами 40х40х160 мм.

Как видно из таблицы 2 прочность на сжатие цемента без добавок (контрольная) за 28 суток составила 43,2 МПа. Введение 5 % минеральных добавок фактически не снижает прочность цементов (кроме ленгерской глины). Увеличением дозировки добавок до 10 % и особенно 15 % снижает прочность образцов. В целом, при введении исследованных нами добавок в количестве 5-10 % можно получить добавочные цементы марки 400. (Таблица 2).

Таблица 2. Результаты физико-механических испытаний цементов без добавки и с добавками исследуемых материалов от 5 до 15 %

Добавки, %	Прочность при сжатии, МПа, через 28 сут				Средняя плотность, г/см ³			
	Сланец Мын- арал	Сланец Куюк	Диато- мит	Ленгер- ская глина	Сланец Мын-арал	Сланец Куюк	Диатомит	Ленгерская глина
5	42,3	41,5	41,2	37,5	2240	2230	2230	2215
10	40,9	40,1	40,1	34,9	2225	2220	2220	2195
15	37,5	36,6	32,2	30,7	2215	2210	2185	2150
Без добавок	43,2				2250			

Выводы.

1. Исследованные материалы обладают не высокой пуццолановой активностью и при введении до 10% обеспечивают образование гидрокарбоалюмината кальция.

2. Введение 5-15 % лентерской глины и диатомита приводит к заметному снижению прочности композиционного цемента. Это объясняется несколькими причинами: – снижением доли клинкерной составляющей на 5-15 %; увеличением водоцементного отношения с 0.40 до 0.43 и, вследствие этого, повышением пористости цементного камня, снижением плотности цементного раствора.

3. Установлено, что сланец Куюк и Мынарал можно вводить в портландцемент с минеральной добавкой в количестве до 10 %, что не значительно сказывается на прочности цемента.

4. Сланцы Куюк и Мынаральского месторождения пригодны для выпуска композиционных цементов. Несомненно, некоторое снижение прочности компенсируется другими положительными качествами композиционного цемента: снижением стоимости; повышением долговечности; снижением клинкерной составляющей; снижением выбросов CO_2 в атмосферу.

5. Для увеличения пуццолановой активности, рекомендуется термообработка материалов при температурах от 700 до 900 °C.

Литература

Taimasov B.T., Abdullin A.A. (2021) Planning and setting up experiments in the technology of binding materials: textbook, Almaty: ЭСПИ. — P. 190.

Амиралиев Б.Б., Куандыкова А.Е., Абдуллин А.А., Таймасов Б.Т., Потапова Е.Н. (2024) Применение АМД при получении композиционных и специальных портланд цементов с использованием отходов промышленности. Труды Международной НПК «Современные строительные материалы и технологии в строительстве энергоэффективных и ресурс осберегающих зданий». Фергана 19-20 декабря. — С. 327-330.

ГОСТ 25094-2015 (2016) Добавки активные минеральные для цементов. Метод определения активности. Издательство Стандарт Информ: Москва, Россия.

ГОСТ 310.1-81 (2016) Цементы. Методы испытаний. ИПК Издательство стандартов: Москва, Россия.

ГОСТ 310.2-81 (2016) Цементы. Методы испытаний. ИПК Издательство стандартов: Москва, Россия.

ГОСТ 310.3-81 (2016) Цементы. Методы испытаний. ИПК Издательство стандартов: Москва, Россия.

ГОСТ 310.4-81(2003) Методы определения предела прочности при изгибе и сжатии. Межгосударственный стандарт. М.: ИПК Издательство стандартов.

ГОСТ 31108-2020 (2020) Цементы общестроительные. Технические условия. Издательство Стандарт Информ: Москва, Россия.

Бутт Ю.М., Тимашев В.В. Практикум по химической технологии вяжущих материалов, ВШ. М.: 1973. — С. 268-272.

ГОСТ 5382-2019 (2019) Цементы и материалы цементного производства. Методы химического анализа. Издательство Стандарт Информ: Москва, Россия.

Искандарова М.И., Атабаев Ф.Б., Турсунова Г.Р. (2025) Исследования местный мергелей как активных минеральных добавок для цемента. «Инновационные разработки и перспективы развития химической технологии силикатных и высокотемпературных материалов» Международная НТК, посвященная 95-летию лаборатории Химии и химической технологии ИОНХ АН РУз и 70-летию д.х.н., проф. З.Р.Кадыровой. – Ташкент. — С. 239-240.

Искандарова М.И., Якубжанова З.Б., Бегжанова Г.Б. (2025) Исследования влияния гибридных добавок на генетическое развитие новообразований при твердении портландцемента. «Инновационные разработки и перспективы развития химической технологии силикатных и высокотемпературных материалов» Международная НТК, посвященная 95-летию лаборатории

Химии и химической технологии ИОНХ АН РУз и 70-летию д.х.н., проф. З.Р.Кадыровой. Ташкент. — С. 241-243.

Классен В.К. Таймасов Б.Т. (2024) Цементология: структура, свойства цементов и оптимизация технологических процессов: учебник. В.К. Классен, Б.Т. Таймасов. — Москва; Вологда: Инфра — Инженерия. — 264 с.

Об утверждении справочника по наилучшим доступным техникам "Производство цемента и извести" Постановление Правительства Республики Казахстан от 24 октября 2023 года № 941, Астана. РК, 2021. <https://adilet.zan.kz/rus/docs/P2300000941>

Потапова Е.Н., Манушина А.С., Зырянов М.С., Урбанов А.В. (2017) Методы определения пуццолановой активности минеральных добавок. Строительные материалы, оборудование, технологии XXI века. №7-8. — С. 29-33.

Рустамов Ш.Ш., Шакаров Т.И., Мухамедбаев А.А. (2025) Термообработанная добавка к цементу. «Инновационные разработки и перспективы развития химической технологии силикатных и высокотемпературных материалов» Международная НТК, посвященная 95-летию лаборатории Химии и химической технологии ИОНХ АН РУз и 70-летию д.х.н., проф. З.Р.Кадыровой. - Ташкент. — С. 281-282.

Таймасов Б.Т. (2024) Специальная технология вяжущих материалов: учебник, Москва; Вологда: Инфра- Инженерия. — 376 с.

Таймасов Б.Т., Адырбаева Т.А. (2024) Лабораторный практикум по планированию, постановке экспериментов в технологии вяжущих материалов: учебник, Москва; Вологда: Инфра — Инженерия. — 192с.

Ян Даны, У Цзудэ, Се Цзяньфэн, Таймасов Б.Т. и др. (2024) Новые технологии и тенденции развития цементного производства и оборудования: Учебник. — Шымкент: Типография «Алем. — 516 с.

References

Taimasov B.T., Abdullin A.A. (2021) Planning and setting up experiments in the technology of binding materials: textbook, Almaty: ESPI. — 190 p. (in English)

Amiraliyev B.B., Kuandykova A.E., Abdullin A.A., Taimasov B.T., Potapova E.N. (2024) Primenenie AMD pri poluchenii kompozitsionnih i specialnih portlandcementov s ispolzovaniem othodov promishlennosti [Application of AMD in obtaining composite and special Portland cements using industrial wastes]. Proceedings of the International Scientific-Production Complex 'Modern building materials and technologies in the construction of energy-efficient and resource-saving buildings'. Fergana 19-20 December. — P. 327-330. (in Russian)

GOST 25094-2015 (2016) Dobavki aktivnie mineralnie dlya cementov. Metod opredeleniya aktivnosti [Active mineral additives for cements. Method for determination of activity]. Standard Inform Publishing House: Moscow, Russia. (in Russian)

GOST 310.1-76 (2016) Cementi. Metodi ispitaniy [Cements. Methods of determination] IPK Standards Publishing House: Moscow, Russia. (in Russian)

GOST 310.2-76 (2016) Cementi. Metodi ispitaniy [Cements. Methods of determination] IPK Standards Publishing House: Moscow, Russia. (in Russian)

GOST 310.3-76 (2016) Cementi. Metodi ispitaniy [Cements. Methods of determination] IPK Standards Publishing House: Moscow, Russia. (in Russian)

GOST 310.4-81 (2003) Metodi opredeleniya predela prochnosti pri izgibe i sjatii [Methods of determination of bending and compressive strength]. Interstate standard. Moscow: IPK Publishing House of Standards. (in Russian)

GOST 31108-2020 (2020) Cements for general construction. Technical conditions. Publisher Standard Inform: Moscow, Russia, 2020. (in Russian)

Butt Yu.M., Timashev V.V. Praktikum po himicheskoi tehnologii vyajuschih materialov [Workshop on Chemical Technology of Binding Materials], Higher School. Moscow: 1973. — P. 268-272. (in Russian)

GOST 5382-2019 (2019) Cementi i materialy cementnogo proizvodstva. Metodi himicheskogo analiza [Cements and cement production materials. Methods of chemical analysis], Standard Inform Publishing House: Moscow, Russia. (in Russian)

Iskandarova M.I., Atabaev F.B., Tursunova G.R. (2025) Issledovaniya mestnii mergelei kak aktivnih mineralnih dobavok dlya cementa [Investigations of local marl as active mineral additives for cement]. 'Innovative developments and prospects of development of chemistry technology of silicate and high-temperature materials' International Scientific and Technical Conference dedicated to the 95th anniversary of the laboratory of Chemistry and Chemical Technology of IONH AS RUz and 70th anniversary of Dr. of Chemical Sciences, Prof. Z.R. Kadyrova, Tashken. — P. 239-240. (in Russian)

Iskandarova M.I., Yakubzhanova Z.B., Begzhanova G.B. (2025) Issledovaniya vliyaniya gibridnih dobavok na geneticheskoe razvitie novoobrazovani pri tverdenii portlandcements [Studies of the influence of hybrid additives on the genetic development of neoplasms during the hardening of Portland cement]. 'Innovative developments and prospects for the development of chemical technology of silicate and high-temperature materials' International Scientific and Technical Conference dedicated to the 95th anniversary of the Laboratory of Chemistry and Chemical Technology IONH AS RUz and the 70th anniversary of Dr. Chemistry, Prof. Z.R. Kadyrova, Tashkent. — P. 241-243. (in Russian)

Klassen V.K. Taimasov B.T. (2024) Cementologiya_ struktura_ svoistva cementov i optimizaciya tehnologicheskikh processov_ uchebnik [Cementology: structure, properties of cements and optimisation of technological processes: textbook], Moscow; Vologda: Infra – Engineering. — 264 p. (in Russian)

Ob utverzhenii spravochnika po nailuchshim dostupnim tehnikam "Proizvodstvo cementa i izvesti [On approval of the best available techniques guide "Cement and lime production"] Resolution of the Government of the Republic of Kazakhstan from 24 October 2023. — № 941. Astana. RK. 2021. <https://adilet.zan.kz/rus/docs/P2300000941> (in Russian)

Potapova E.N., Manushina A.S., Zyryanov M.S., Urbanov A.V. (2017) Metodi opredeleniya puccolanovoi aktivnosti mineralnih dobavok [Methods for determining the pozzolanic activity of mineral additives] Building materials, equipment, technologies of XXI century. — №7-8. — P. 29-33. (in Russian)

Rustamov Sh.Sh., Shakarov T.I., Mukhamedbaev A.A. (2025) Termoobrabotannaya dobavka k cementu. «Innovacionnie razrabotki i perspektivi razvitiya himicheskoi tehnologii silikatnih i vysokotemperaturnih materialov» [Heat-treated additive to cement]. 'Innovative developments and prospects of development of chemical technology of silicate and high-temperature materials' International Scientific and Technical Conference dedicated to the 95th anniversary of the Laboratory of Chemistry and Chemical Technology of IONH AS RUz and the 70th anniversary of Dr. Z.R. Kadyrova, Tashkent. — P. 281-282. (in Russian)

Taimasov B.T. (2024) Specialnaya tehnologiya vyajuschih materialov [Special technology of binding materials]: textbook. B.T. Taimasov, Moscow; Vologda: Infra-Engineering. — 376 p. (in Russian)

Taimasov B.T., Adyrbaeva T.A. (2024) Laboratornii praktikum po planirovaniyu_ postanovke eksperimentov v tehnologii vyajuschih materialov [Laboratory practice on planning, setting up experiments in the technology of binding materials]: textbook / - Moscow; Vologda: Infra — Engineering. — 192p. (in Russian)

Yang Dan, Wu Zude, Xie Jianfeng, Taimasov B.T. et al. (2024) Novie tehnologii i tendencii razvitiya cementnogo proizvodstva i oborudovani [New technologies and tendencies of cement production and equipment development]: Textbook. — Shymkent: Printing house 'Alem'. — 516 p. (in Russian)

© A.M. Yegissinova^{1*}, R.S. Taubayeva¹, R.K. Rakhmetullaeva², A.S. Seitkan³,
E.B. Satkozhaeva¹, 2025.

¹M.H. Dulaty Taraz University, Department of Chemistry and Chemical Technology,
Taraz, Kazakhstan;

²Al-Farabi Kazakh National University named after Al-Farabi, Almaty, Kazakhstan;

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

*E-mail: aiazhan.iegiesinova@mail.ru

PHYSICOCHEMICAL PROPERTIES OF THERMOPLASTIC STARCH/ HEMP BIOFILM PRODUCED BY CASTING METHOD

Yegissinova Ayazhan — PhD student, Department of Chemistry and Chemical Technology, Taraz University named after M.Kh. Dulaty, Taraz, Kazakhstan,

E-mail: aiazhan.iegiesinova@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7067-2468>;

Taubayeva Raushan — PhD, Associate Professor, Department of Chemistry, Taraz University named after M.H. Dulaty, Taraz, Kazakhstan,

E-mail: raushan.taubaeva@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9772-2496>;

Rakhmetullaeva Raikhan — candidate of chemical sciences, associate professor, Faculty of Chemistry and Chemical Technology, Kazakh National University named after Al-Farabi, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: raikhan.rakhmetullaeva@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1002-2046>;

Seitkan Ainur — candidate of technical sciences, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan,

E-mail: seitkan_as@enu.kz, <https://orcid.org/0000-0001-9309-500X>;

Satkozhaeva Elmira — 2nd year master's student, Taraz University named after M.Kh. Dulaty, Taraz, Kazakhstan,

E-mail: satkozhaeva2001@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0007-8426-751X>.

Abstract. The irrational disposal of plastic waste exposes both the environment and human health to adverse consequences. This article aims to advance research in the development of new biodegradable composites based on starch and lignocellulose biomass from hemp. The objective was to develop an optimal formulation and characterize the resulting biofilm through physicochemical analyses, including FTIR to monitor changes of functional groups, TGA to assess thermal stability, and SEM to investigate morphology and changes during the introduction of filler and its distribution. Biomass filler was introduced into the polymer matrix at specified concentrations 0.1%, 0.3%, and 1%. The TGA results demonstrated comparable thermal degradation of the samples, with the primary stage of decomposition occurring at a temperature of approximately 283 °C, confirming the presence of a single basic structure of TPS in

all samples. The total mass loss decreases from 93.552% to 88.552% with increasing filler concentration, thereby improving the thermal stability of the sample. SEM mass showed noticeable changes in the morphology of the samples, specifically a gradual transition from a smooth surface to more heterogeneous, fibrous structures as the filler concentration increased. The data obtained indicate that the introduction of hemp fibers increases the rigidity of the polymer matrix and improves thermal performance; however, the high filler content reduces the flexibility of the sample. In general, TPS/hemp biocomposites demonstrate high potential as biodegradable materials, making them suitable as environmentally friendly raw materials and contributing to the development of sustainable polymer biocomposites.

Key words: thermoplastic starch, corn starch, biomass, biodegradable polymer, hemp, biofilm

© А.М. Егисина^{1*}, Р.С. Таубаева¹, Р.К. Рахметуллаева², А.С. Сейткан³,
Э.Б. Сатқожаева¹, 2025.

¹М.Х. Дулати атындағы Тараз университеті, Химия және химиялық инженерия кафедрасы, Тараз, Қазақстан;

²Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан;

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

*E-mail: aiazhan.iegiesinova@mail.ru

ҚҰЮ ӘДІСІ АРҚЫЛЫ АЛЫНҒАН ТЕРМОПЛАСТИКАЛЫҚ КРАХМАЛ/ КОНОПЛЯ БИОПЛЕНКАСЫНЫҢ ФИЗИКА-ХИМИЯЛЫҚ ҚАСИЕТТЕРІ

Егисина Аязжан — докторант, «Химия и химическая технология» кафедрасы, М.Х. Дулати атындағы Тараз университеті, Тараз, Қазақстан,

E-mail: aiazhan.iegiesinova@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7067-2468>;

Таубаева Раушан — PhD, қауымдастырылған профессор, М.Х. Дулати атындағы Тараз университетінің «Химия және химиялық технология» кафедрасы, Тараз, Қазақстан,

E-mail: raushan.taubaeva@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9772-2496>;

Рахметуллаева Райхан — химия ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университетінің химия және химиялық технология факультеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: raikhan.rakhmetullayeva@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1002-2046>;

Сейткан Айнур — техника ғылымдарының кандидаты Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан,

E-mail: seitkan_as@enu.kz, <https://orcid.org/0000-0001-9309-500X>;

Сатқожаева Эльмира — 2 курс магистрі, М.Х. Дулати атындағы Тараз Университеті, Тараз, Қазақстан,

E-mail: satkozhaeva2001@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0007-8426-751X>.

Аннотация: пластикалық қалдықтарды ұтымсыз кәдеге жарату экологиялық зардаптарға да, адам денсаулығына да жағымсыз әсер әкелуі мүмкін. Бұл мақаланың мақсаты – қарасора биомассасынан крахмал мен лигноцеллюлоза негізіндегі жаңа биологиялық ыдырайтын композиттерді әзірлеу саласындағы зерттеулерді ілгерілету. Негізгі міндет алынған биомассаның оңтайлы құрамын әзірлеу және

физика-химиялық талдаулар арқылы талдау, соның ішінде биокөмірлердегі функционалдық топтардың өзгеруін бақылау үшін ИҚ-Фурье спектроскопиясы, термиялық тұрақтылықты бағалау үшін ТГА және толтырғышты енгізу және оны енгізу кезіндегі морфологиялық өзгерістерді зерттеу үшін СЭМ әдісі қолданылды. Полимер матрицасына биомасса толтырғышын көрсетілген концентрацияларда енгізілді 0,1%, 0,3% және 1%. ТГА нәтижелері үлгілердің салыстырмалы термиялық ыдырауын көрсетті, ыдыраудың бастапқы кезеңі шамамен 283°C температурада болды, бұл барлық үлгілерде ТПК (термопластикалық крахмал) түрінде бірыңғай базалық құрылымның болуын растайды. Жалпы массаның төмендеуі толтырғыш концентрациясының жоғарылауы нәтижесінде 93,552% - дан 88,552% - ға дейін төмендейді, бұл өзгеріс үлгінің термиялық тұрақтылығын жақсарттады. СЭМ талдауы үлгілердің морфологиясында айтарлықтай өзгерістерді көрсетті, атап айтқанда толтырғыш концентрациясы жоғарылаған сайын тегіс бетінен біртекті емес талшықты құрылымдарға біртіндеп ауысуы байқалды. Нәтижелер негізінде келесі тұжырымдамалар алынды: қарасора талшықтарын енгізу полимер матрицасының қаттылығын арттырады және температураға тұрақтылығын жақсарттады; дегенмен, толтырғыштың жоғары мөлшері үлгінің икемділігін төмендететінін атап өткен жөн. Тұтастай алғанда, ТПК/қарасора (hemp) биокөмірлері биологиялық ыдырайтын материалдар ретінде жоғары әлеуетті көрсетеді, бұл оларды экологиялық таза шикізат ретінде жарамды етеді және тұрақты полимерлі биокөмірлердің дамуына ықпал етеді.

Түйін сөздер: термопластикалық крахмал, жүгері крахмалы, биомасса, биологиялық ыдырайтын полимер, қарасора, биопленка

© А.М. Егисина^{1*}, Р.С. Таубаева¹, Р.К. Рахметуллаева², А.С. Сейтқан³,
Э.Б. Саткожаева¹, 2025.

¹Таразский университет имени М.Х. Дулати, Кафедра химии и химической технологии, Тараз, Казахстан;

²Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан;

³Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилёва, Астана, Казахстан.

*E-mail: aiazhan.iegiesinova@mail.ru

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТЕРМОПЛАСТИЧНОЙ БИОПЛЕНКИ ИЗ КРАХМАЛА/КОНОПЛИ, ПОЛУЧЕННОЙ МЕТОДОМ ЛИТЬЯ

Егисина Аязжан — докторант, кафедра «Химия и химическая технология», Таразский университет имени М.Х. Дулати, Тараз, Казахстан,

E-mail: aiazhan.iegiesinova@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7067-2468>;

Таубаева Раушан — PhD, ассоциированный профессор кафедры химии и химической технологии Таразского университета имени М.Х. Дулати, Тараз, Казахстан,

E-mail: raushan.taubaeva@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9772-2496>;

Рахметуллаева Райхан — кандидат химических наук, доцент факультета Химии и химической технологии Казахского национального университета имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,

E-mail: raikhan.rakhmetullayeva@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1002-2046>;

Сейткан Айнур — кандидат технических наук, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилёва, Астана, Казахстан,
E-mail: seitkan_as@enu.kz, <https://orcid.org/0000-0001-9309-500X>;
Саткожаева Эльмира — магистрант 2 курса, Таразский университет им. М.Х.Дулати, Тараз, Казахстан,
E-mail: satkozhayeva2001@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0007-8426-751X>.

Аннотация: Нерациональная утилизация пластиковых отходов чревата как экологическими последствиями, так и неблагоприятным воздействием на здоровье человека. Целью данной статьи является продвижение исследований в области разработки новых биоразлагаемых композитов на основе крахмала и лигноцеллюлозы из биомассы конопли. Основной задачей было разработать оптимальный состав и охарактеризовать полученную биоплёнку с помощью физико-химических анализов, включая ИК-Фурье-спектроскопию для мониторинга изменений функциональных групп в биокompозитах, ТГА для оценки термостабильности и СЭМ для изучения морфологии и изменений при введении наполнителя и его распределении. В полимерную матрицу был введён наполнитель из биомассы в концентрациях 0,1%, 0,3% и 1%. Результаты ТГА продемонстрировали сопоставимый характер термической деструкции образцов: первичная стадия разложения происходила при температуре приблизительно 283 °С, что подтверждает наличие единой базовой структуры ТПК во всех образцах. Общая потеря массы уменьшается с 93,552% до 88,552% с увеличением концентрации наполнителя, тем самым повышая термостабильность образцов. СЭМ-анализ показал заметные изменения в морфологии образцов, в частности постепенный переход от гладкой поверхности к более неоднородным волокнистым структурам по мере увеличения концентрации наполнителя. Полученные данные свидетельствуют о том, что введение волокон конопли повышает жёсткость полимерной матрицы и улучшает её тепловые характеристики. Однако высокое содержание наполнителя снижает гибкость образца. В целом, биокompозиты ТПК/конопля (hemp) демонстрируют высокий потенциал в качестве биоразлагаемых материалов, что делает их пригодными в качестве экологически безопасного сырья и способствует разработке устойчивых полимерных биокompозитов.

Ключевые слова: термопластичный крахмал, кукурузный крахмал, биомасса, биоразлагаемый полимер, конопля, биопленка

Introduction. The global accumulation of plastic pollution poses a serious threat to the environment, characterized by "poor reversibility." Due to the slow pace of natural mineralization and the limited availability of effective recovery methods, the adverse effects of this pollution, including changes in biogeochemical cycles and damage to ecosystems, are becoming almost irreversible.

Every year, an estimated 9 to 23 million tons of plastic waste are discharged into the water environment (MacLeod, 2021). It is predicted that by 2025, these predicted emission rates will have doubled. The variety of plastic sources and types, their resistance to decomposition, and the potential harm they pose to living things have all

been emphasized in numerous studies. Scientists have studied "microplastics" in detail, specifically those categorized by size. Other plastics that have received less attention include *macroplastics* (size > 5 mm) and *nanoplastics* (size < 1 μm). Any plastic released into the environment is considered plastic pollution (Li, 2021). In addition, microplastics not only pollute the environment but also pose an invisible threat, as they can penetrate the human body through professional activities and other sources. Recent studies using Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR), gas chromatography, and mass spectrometry have identified nano- and microplastics in the lungs (Jenner, 2022), intestines (Santini, 2024), and even in the human placenta (Garcia, 2024). These particles include polyethylene, rayon, polypropylene, polystyrene, polyethylene terephthalate, and other unclassified plastics. Vasse G.F. et al. (2024) focused on researching how micro- and nanoplastics (MNP) pollution relate to specific lung cells and respiratory diseases such as asthma, COPD, lung cancer, and interstitial lung diseases (ILDs). According to research based on industrial and scientific data sources, a total of 10,000 substances have been identified, with more than 2,400 classified as substances of potential danger. SciFinder reports that 1327 of these substances are improperly regulated in some countries and are even connected to food (901 substances), while 266 of these substances have not been thoroughly studied (Wiesinger, 2021). In the face of increasing plastic pollution, there is a growing demand for a more environmentally friendly alternative. Creating conditions for the creation, processing, and composting of biodegradable plastic materials may be the best solution to the above problems (Flury et al., 2021), since disposal of traditional plastic (Alabi et al., 2019) (especially incineration (Nagy et al., 2016) is not the best solution because of its negative impact on the environment. The use of lignocellulosic biomass as a filler attracts the attention of researchers and has been successfully applied in various fields, including additive manufacturing, environmental remediation, and medicine. It can also be an alternative to traditional plastics (Mujtaba et al., 2023). This research aims to develop formulations of biocomposites that can serve as a solution to the aforementioned problems. The aim of the study is to study the effect of adding hemp as a reinforcing material, as lignocellulose biomass to the basic polymer matrix in the form of TPS. In the modern scientific environment, thermoplastic starch plays a crucial role as a fundamental component in the polymer matrix for the manufacture of biodegradable materials of various origins, including bioplastics (Jayarathna et al., 2022). It should be noted that starch is not used in its native form to produce starch-containing biocomposites on an industrial scale due to its disadvantages, such as poor solubility, retrogradation, syneresis, thermal decomposition, and high viscosity after gelatinization (Compart et al., 2023). To eliminate the disadvantages, starch undergoes various modifications; in our case, plasticization was used as a method of chemical modification. In granular form, starch mainly consists of linear amylose and highly branched amylopectin. When mixed with a limited amount of water, plasticizers (such as sorbitol and glycerin) are added, and starch is exposed to heat and shear forces. As a result, it spontaneously decomposes, forming a thermoplastic starch (TPS) mixture (Yu et al., 2021). Although it can be used as an environmentally friendly polymer, TPS has a hydrophilic property that makes it difficult to use directly as a biofilm. During

operation, sensitivity to water leads to swelling of the material. Moreover, poor barrier and mechanical properties, such as low tensile strength and elongation at break, limit its wide application and competition with traditional film representations (Rahardiyan et al., 2023). One method to mitigate these disadvantages involves developing a biofilm formulation that incorporates lignocellulose fibers into the TPS polymer matrix. In this regard, it is crucial to consider the role of material compatibility, which is enhanced by the presence of hydroxyl groups in both starch and lignocellulose fibers, thereby forming strong interphase hydrogen bonds that improve mechanical properties (Nazrin et al., 2025). Foret et al., (2023) successfully obtained bio-composites of thermoplastic wheat starch reinforced with hemp. When studying the effect of fillers, changes in mechanical properties were observed. It was noted that as the filler concentration increases, the tensile strength and stiffness increase accordingly, which determined the threshold concentration of cannabis to be no more than 40%. There was also a decrease in water absorption as the concentration of cannabis increased. Thus, the use of cannabis as a filler has prospects as an industrial production of biofilms, contributing to a reduction in the cost of the target product. Consequently, these studies formed the basis for the production and characterization of thermoplastic starch from corn, incorporating hemp fibers into a new formulation.

Methods and materials. For this study, “Tre Mulini” corn starch (a brand from the Eurospin supermarket chain in Italy) was used as a raw material. The hemp samples were mechanically ground using a MM 400 vibratory mill (Retsch GmbH, Germany). The grinding was performed at a frequency of 100 Hz for 15 minutes until a uniform powder was achieved. Functional groups and their interactions were identified through Fourier Transform Infrared (FTIR) analysis in the range of 4000–400 cm^{-1} with a PerkinElmer, USA FT-IR Spectrometer Spectrum Two. Before the SEM analysis, the Q150T ES Plus system (Quorum Technologies, Great Britain), a device that combines spray coating and carbon evaporation, was used to enhance conductivity and prevent charging of the sample surface. The morphology and fiber-matrix interface of the composites, as well as the surface of the sample, were studied using a scanning electron microscope (SEM) with a ZEISS Sigma (FE-SEM, Carl Zeiss, Germany) system. The thermal stability and decomposition patterns of the samples were studied in an inert nitrogen atmosphere using a Discovery TGA 55 thermogravimetric analyzer (TA Instruments, USA). Thermoplastic starch (TPS) has poor mechanical and thermal properties due to its high hydrophilicity. To enhance performance, natural fibers (biomass) were often used as reinforcement in the polymer matrix. Lignocellulosic biomass from the hemp stem, obtained in Italy, was used as a reinforcement agent to improve mechanical properties. Glycerol is used as a plasticizer because of its compatibility with amylose, along with acetic acid, which acts as a co-plasticizer and significantly enhances the water absorption of the films. Staker J. et al. (2024) revealed that acetic acid possesses the property of cleaving glycosidic bonds; moreover, as a co-plasticizer with glycerin, it exhibits a high tensile strength ($M = 2.04 \pm 1.24$ MPa). The synthesis of biodegradable plastic made from starch, glycerol, and vinegar (acetic acid) was performed using the method by Abdel Hamid E.M. et al. (2025), with the formulation shown in Table 1. Each sample contains the same amount

of starch, glycerol, and vinegar as indicated in Table 1 (S/G-V); however, different concentrations of hemp fiber were added (0.1%, 0.3%, 1%). Pre-weighed 15 g of corn starch was placed in a laboratory beaker and stirred with a magnetic stirrer heated to 100°C. 125 ml of distilled water was gradually added, stirring constantly with a glass rod until a homogeneous suspension was formed.

To prevent lumps from forming, the mixture was continuously stirred. Plasticizers were added sequentially, including 15 grams of glycerol and a 6% acetic acid solution. Maintaining a consistent temperature is crucial, as raising the temperature of the polymeric compound above 120°C can affect its structural integrity and textural properties. The mixture was subjected to continuous agitation until a viscous mass was established. Consequently, samples were prepared with varying concentrations of hemp fiber, which had been previously dried and milled into a powdery state. The formation of the thermoplastic film was carried out using the casting method onto a Teflon surface. Each sample was assigned a name and numbered (A1, A2, etc.). The next day, the films were pressed from above with a glass surface to keep their shape and ensure even drying. After 5-6 days, the biofilms could be carefully removed using a laboratory spatula.

Table 1 – Comparative table of TPS/hemp sample compositions

Sample	The ratio of components, g	Fiber (hemp powder) ratio g, %
A	15 g Corn starch	No fiber
C	125 ml Demineralized water	Hemp fiber 0,1% (0,16 g)
D	15 g Glycerol	Hemp fiber 0,3% (0,45 g)
F	15 ml Vinegar (6% of acetic acid in water)	Hemp fiber 1% (1,6 g)



Figure 1.1



Figure 1.2



Figure 1.3

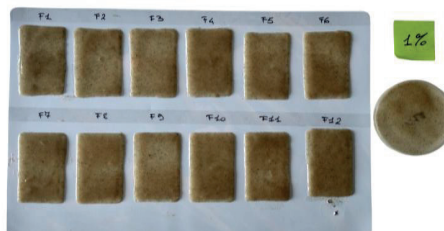


Figure 1.4

Figure 1. Samples of TPS with different concentrations of hemp fiber. TPS with 0% of hemp fiber (1.1), TPS with 0.1% of hemp fiber (1.2), TPS with 0.3% of hemp fiber (1.3), TPS with 1% of hemp fiber (1.4)

Results. Four representative samples were selected from the obtained films, one from each batch (A1, C12, D7, F11), to assess further the impact of the morphological state of the lignocellulose filler on the properties of TPS.

FTIR Analysis

The FTIR spectra for all samples have characteristic absorption bands typical of starch-containing thermoplastic materials (Figure 2). A broad and intense band is observed in the region of 3300 cm^{-1} , indicating fluctuations in the tension of the O-H hydroxyl groups present, indicating the presence of hydroxyl groups commonly present in cellulose, hemicellulose, and lignin, as well as in adsorbed water. This breadth suggests the presence of extensive hydrogen bonding in the material. The peak value of approximately 2920 cm^{-1} corresponds to C-H stretching fluctuations, usually associated with aliphatic methyl and methylene groups present in organic compounds. The band with an angle of 1640 cm^{-1} can be explained as corresponding to the vibrations of water molecules absorbed by cellulose.

In some cases, this may also indicate stretching of C=O from carbonyl or carboxyl groups, although its intensity and width often more strongly suggest the water content in lignocellulosic materials. The band at 1420 cm^{-1} is associated with fluctuations of C=C Groups in aromatic compounds, and this is often indicative of the crystalline structure of cellulose. The bands at frequencies 1150 cm^{-1} and 1030 cm^{-1} of asymmetric C-O-C stretching and C-O stretching vibrations are characteristic of the intermolecular valence vibration of carbohydrates. These bands confirm the matrix of polysaccharide structures.

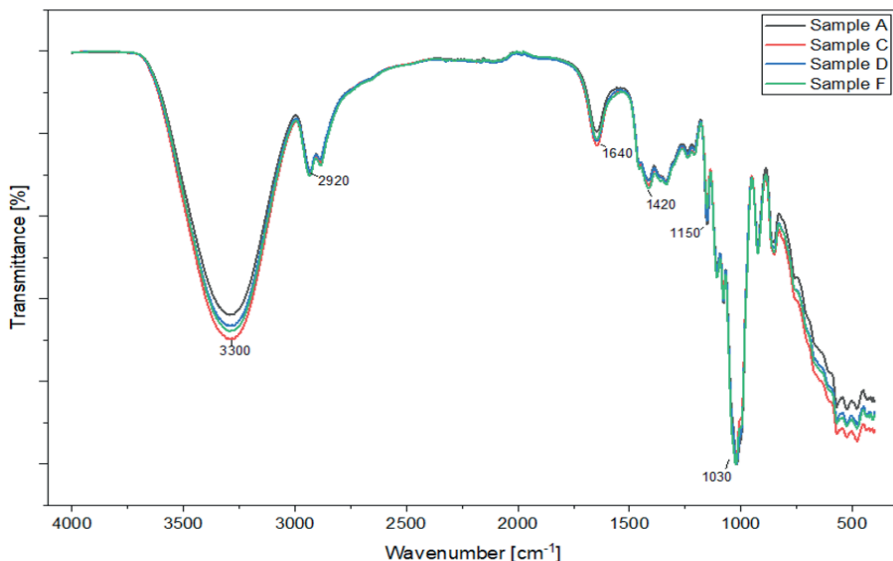


Figure 2. Comparative FTIR spectra of samples A, C, D, and F

TGA Analysis. At a temperature of approximately 30.78°C , the initial mass loss of sample A was 11.508%, which is attributed to the evaporation of moisture. The second stage of degradation begins at a temperature of 143.30°C , resulting in a further 23.871%

mass loss. This is followed by a more significant mass loss (58.344%) at a temperature of 283.90°C, which is associated with the primary thermal decomposition of TPS. The total mass loss reaches 93.552%, which means almost complete decomposition at temperatures closer to 700°C.

The initial mass loss of sample C was 17.380% at 35.01°C, followed by a slight mass loss of 6.487% at 122.48°C. At the third stage, the mass loss was 69.574% at a temperature of 284.65°C. The total mass loss was 93.246%.

Sample D exhibits an initial mass loss of 21.230% at 40.81°C, an intermediate mass loss of 13.978% at 193.89°C, and a significant degradation stage, characterized by a mass loss of 56.017% at 283.70°C. The total mass loss is 90.889%.

Sample F shows an initial mass loss of 8.402% at 46.88°C, followed by 27.568% at 166.54°C and a significant mass loss of 52.440% at 282.54°C. The total mass loss was 88.552%.

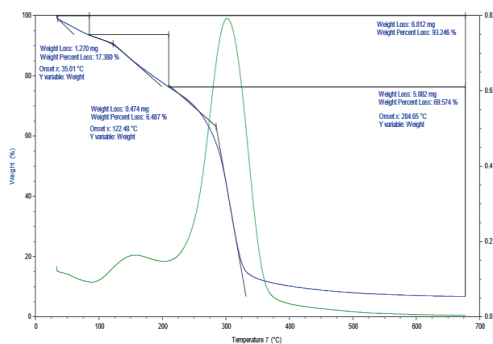


Figure 3.1

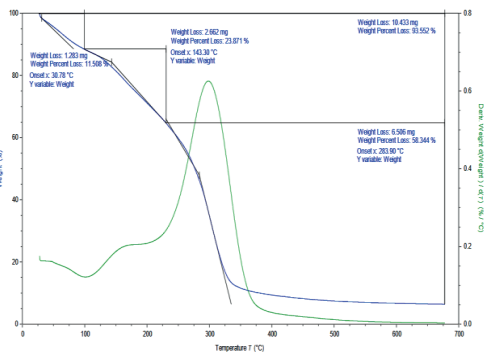


Figure 3.2

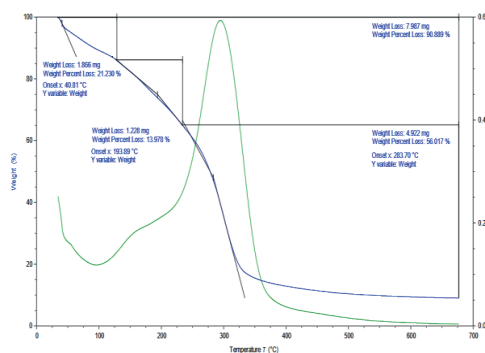


Figure 3.3

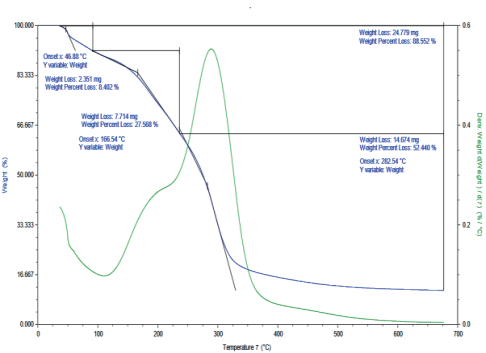


Figure 3.4

Figure 3. TGA curves for TPS with samples. Sample A (3.1), Sample C (3.2), Sample D (3.3), Sample F (3.4)

SEM Analysis. The TPS sample (A) without filler exhibits a homogeneous, wrinkled surface. This complex folded structure suggests a large surface area, typical of a pure TPS polymer matrix. Additionally, Sample C shows a more heterogeneous surface than pure TPS, characterized by irregularities and distinct aggregates. These features likely

result from the uneven distribution of hemp filler within the biofilm matrix. Figure 4 displays a noticeable round, textured formation, possibly an agglomerated filler particle or a concentrated filler area. Other regions contain numerous uneven aggregates, indicating different levels of dispersion. In sample D, a distinct structural protrusion with layered features is visible, which may be a larger fiber material and has a smoother surface compared to sample C, but with more prominent particles or particles at the surface level. Sample F has complex topographic features, including highly layered, porous, and fibrous structures, as well as a shaped surface with many small spherical particles. At an increase of 29.23 KX, layered structures measuring 582.3 nm become visible, indicating the fibrous nature of the filler and allowing for the quantification of the size of individual fibrous elements.

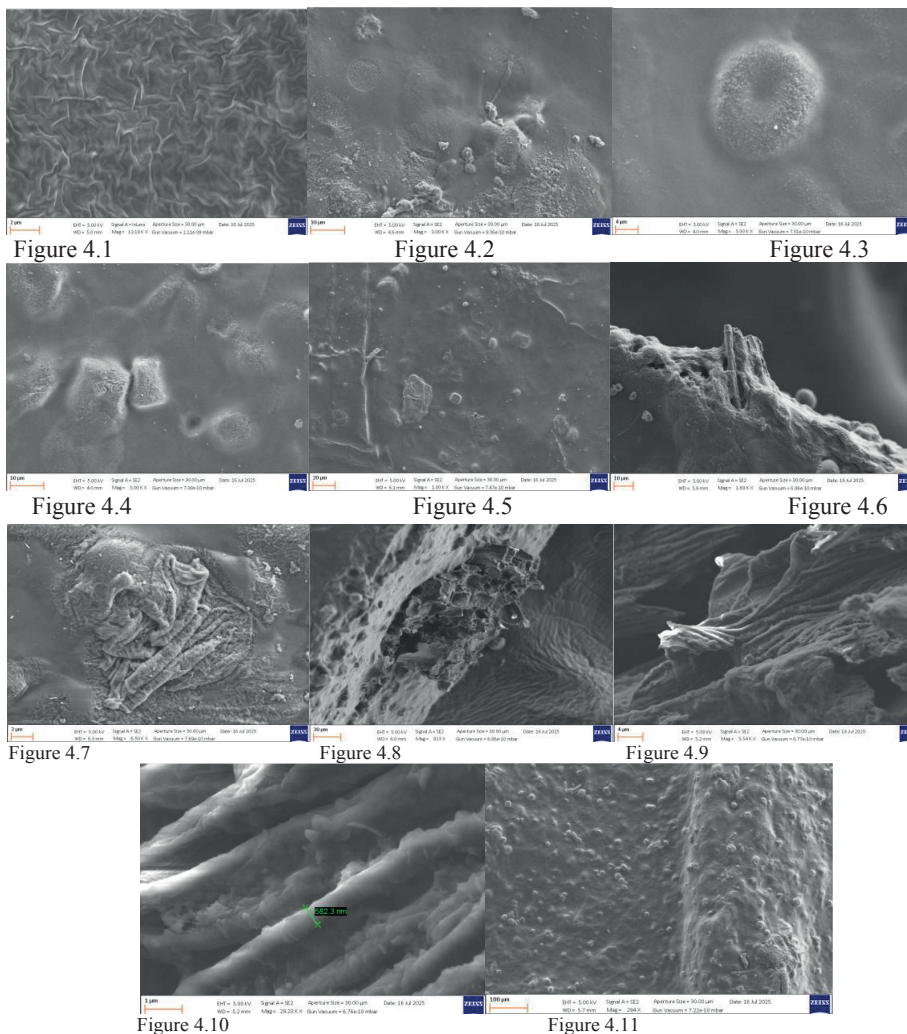


Figure 4. SEM images. Sample A (4.1, 4.2), Sample C (4.3, 4.4), Sample D (4.5, 4.6, 4.7), Sample F (4.8, 4.9, 4.10, 4.11)

Discussion. The similarity of the leading bands in the TPS matrix and the lignocellulose filler in the form of hemp does not reveal new peaks when compared. Although the overall spectral characteristics are identical for all samples due to the slight difference in the concentration of hemp fillers, minor differences in peak intensities may indicate differences in composition or structural arrangement. A modification in the intensity detected within the absorption bands at 3300 cm^{-1} indicates a differential extent of hydrogen bonding, wherein an increase in these bands is associated with a heightened concentration of the filler material. Nonetheless, it is noteworthy that the intensity of the C sample surpasses that of the samples exhibiting a greater concentration of D and F. Consequently, this variation can be elucidated by the utilization of a casting technique during the film formation process, which may facilitate an uneven distribution of the hemp fiber. The observed disparity in the band area (less than $1,500\text{ cm}^{-1}$) may signify variations in the relative proportions of cellulose, hemicellulose, or lignin, as well as alterations in their crystallinity or amorphous content.

All specimens exhibit the preliminary phase of weight reduction at comparatively low thermal conditions ($30\text{--}47\text{ }^{\circ}\text{C}$). These initial losses are commonly attributed to the drying process of absorbed fluids or the release of volatile substances present in the samples. The scale of these early losses depends on the exact sample, consequently illustrating discrepancies in their hygroscopic traits or volatile substance levels. Each specimen presents one or two intermediary phases of decomposition, occurring at approximately $120\text{ }^{\circ}\text{C}$ to $200\text{ }^{\circ}\text{C}$. These moments likely indicate the erosion of less durable factors or minor structural components within the material. In all specimens, the initial temperature consistently oscillates between 282 and $285\text{ }^{\circ}\text{C}$, at which point a discernible stage of degradation is evident. This significant weight reduction, ranging from 52% to 69% of the total mass, signifies the primary thermal decomposition of polymeric constituents. The agreement of the primary temperature points to the availability of a shared base material, a thermoplastic starch matrix, among all samples. After the principal decomposition, the residual mass of all specimens at a temperature of $700\text{ }^{\circ}\text{C}$ varies between approximately 6.4% and 11.4% . This residual matter may comprise inorganic fillers, carbonization, or thermally stable components that remain intact under the prescribed experimental conditions.

SEM results reveal different surface morphologies among the samples. Some images display a relatively smooth, continuous, film-like structure with some wrinkles and creases, indicating plasticization of the material. Others show rougher, more uneven surfaces with characteristic features such as round structures with granular textures and areas containing visible pores or fibrous structures.

Conclusion. The SEM investigation skillfully highlights the singular morphological characteristics of pure TPS, as well as those of the hemp filler. Figure 4 explains the evolution from a smooth, uniform polymeric structure to increasingly complex and assorted configurations as filler is added. Examining the microstructural traits is essential for understanding the consequences of filler integration on the properties of the composite, which encompass mechanical robustness, barrier capabilities, and decomposition tendencies, all of which are intimately tied to the filler's distribution,

shape, and engagement within the polymer matrix. The FTIR analysis substantiates the constancy of the chemical foundation of TPS across all samples, indicating that hemp fiber predominantly functions as a filler without substantial alterations to the principal functional groups. In every examined sample, an observable initial mass reduction occurs, succeeded by a transitional phase linked to the degradation of hemp, leading to a notable stage of destruction related to the TPS structure. A large quantity of hemp, as showcased by sample F, could potentially improve hardness and strength; however, a clear decrease in flexibility is apparent. Utilizing natural hemp fibers enhances the rate at which TPS composites break down, thereby supporting the development of more environmentally sustainable materials.

References

- MacLeod M., Arp H.P.H., Tekman M.B., & Jahnke A. (2021) The global threat from plastic pollution. *Science*, 373(6550). — P. 61-65. (in Eng.)
- Li P., Wang X., Su M., Zou X., Duan L., & Zhang H. (2021) Characteristics of plastic pollution in the environment: a review. *Bulletin of environmental contamination and toxicology*, 107(4). — P. 577-584. (in Eng.)
- Jenner L. C., Rotchell J.M., Bennett R.T., Cowen M., Tentzeris V., & Sadofsky L.R. (2022) Detection of microplastics in human lung tissue using μ FTIR spectroscopy. *Science of the Total Environment*, 831. — 154907 p. (in Eng.)
- Santini S., Exposito N., Sierra J., Cincinelli A., & Rovira J. (2024). Set up and validation of a method to analyse microplastics in stool and small intestine samples. *MethodsX*, 12. — 102777 p. (in Eng.)
- Garcia M.A., Liu R., Nihart A., El Hayek E., Castillo E., Barrozo E.R., ... & Campen M.J. (2024) Quantitation and identification of microplastics accumulation in human placental specimens using pyrolysis gas chromatography mass spectrometry. *Toxicological Sciences*, 199(1). — P. 81-88. (in Eng.)
- Vasse G.F., & Melgert B.N. (2024) Microplastic and plastic pollution: impact on respiratory disease and health. *European Respiratory Review*, 33(172) (in Eng.).
- Wiesinger H., Wang Z., & Hellweg S. (2021) Deep dive into plastic monomers, additives, and processing aids. *Environmental science & technology*, 55(13). — P. 9339-9351 (in Eng.).
- Flury M., & Narayan R. (2021) Biodegradable plastic as an integral part of the solution to plastic waste pollution of the environment. *Current Opinion in Green and Sustainable Chemistry*, 30, 100490. (in Eng.)
- Alabi O.A., Ologbonjaye K.I., Awosolu O., & Alalade O.E. (2019) Public and environmental health effects of plastic wastes disposal: a review. *J Toxicol Risk Assess*, 5(021). — P. 1-13. (in Eng.)
- Nagy Á., & Kuti R. (2016) The environmental impact of plastic waste incineration. *AARMS—Academic and Applied Research in Military and Public Management Science*, 15(3). — P. 231-237. (in Eng.)
- Mujtaba M., Fraceto L.F., Fazeli M., Mukherjee S., Savassa S.M., de Medeiros G.A., ... & Vilaplana F. (2023) Lignocellulosic biomass from agricultural waste to the circular economy: a review with focus on biofuels, biocomposites and bioplastics. *Journal of cleaner production*, 402. — 136815 p. (in Eng.).
- Jayarathna S., Andersson M., & Andersson R. (2022) Recent advances in starch-based blends and composites for bioplastics applications. *Polymers*, 14(21). — 4557 p. (in Eng.).
- Compart J., Singh A., Fettke J., & Apriyanto A. (2023) Customizing starch properties: A review of starch modifications and their applications. *Polymers*, 15(16). — 3491 p. (in Eng.).
- Yu X., Chen L., Jin Z., & Jiao A. (2021) Research progress of starch-based biodegradable materials: a review. *Journal of Materials Science*, 56(19). — P. 11187-11208. (in Eng.).
- Rahardiyan D., Moko E.M., Tan J.S., & Lee C.K. (2023) Thermoplastic starch (TPS) bioplastic, the green solution for single-use petroleum plastic food packaging—A review. *Enzyme and microbial technology*, 168. — 110260 p. (in Eng.).
- Nazrin A., Ilyas R.A., Rajeshkumar L., Hazrati K.Z., Jamal T., Mahardika M., ... & Radzi A.M. (2025) Lignocellulosic fiber-reinforced starch thermoplastic composites for food packaging application: A review of properties and food packaging abetted with safety aspects. *Food Packaging and Shelf Life*, 47. — 101431 p. (in Eng.).
- Foret S., Mazian B., Bekas V., Martins F.C., Campanella O.H., Perré P., & Augusto P.E. (2023)

Thermoplastic starch biocomposites reinforced with hemp shives obtained via extrusion. *Industrial Crops and Products*, 206. — 117707 p. (in Eng.).

Abdel Hamid E.M., Mohamed A.E., Mohamed A.A., Galal A.A., Mekhemr A.A., Saleh E.S., ... & Elgendy S.K. (2025) Optimization of corn starch/glycerol, acetic acid, and cellulose fibers ratio on biodegradable plastic synthesis by Box–Behnken design (BBD). *Clean Technologies and Environmental Policy*. — P. 1-23. (in Eng.).

Staker J., Schott S., Singh R., Collier K., Druschel G., Siegel A.P., & Tovar A. (2024) Influence of choline chloride/urea and glycerol plasticizers on the mechanical properties of thermoplastic starch plastics. *Polymers*, 16(6). — 751 p. (in Eng.).

© E.M. Yergaliyeva¹, K.B. Bazhykova^{2*}, Zh. Zh. Kolbaeva¹, A. Duysen ²,
V.V. Vazhev³, 2025.

¹ A. Baitursynuly Kostanay Regional University, Kostanay, Kazakhstan;

² Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan;

³ Kostanay Socio-Technical University named after Z. Aldamzhar,
Kostanay, Kazakhstan.

E-mail: bazhikova@bk.ru

IN SILICO PREDICTION OF PASS AND ADME/TOX PROPERTIES OF NOVEL 1,3,5-TRIAZINE DERIVATIVES FOR DRUG DEVELOPMENT

Yergaliyeva Elmira — PhD, Assistant Professor, Akhmet Baitursynuly Kostanay Regional University, Kostanay, Kazakhstan,

E-mail: erg_el@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9615-2575>;

Bazhykova Kulzada — Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: bazhikova@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5290-9174>;

Kolbaeva Zhaina — master's student, Akhmet Baitursynuly Kostanay Regional University, Kostanay, Kazakhstan,

E-mail: zhainakolbaeva@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0009-8663-4912>;

Duysen Assem — Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: asemass123@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0006-2256-1679>;

Vazhev Vladimir — Doctor of Chemical Sciences, Kostanay Socio-Technical University named after Z. Aldamzhar, Kostanay, Kazakhstan,

E-mail: vladimir.vazhev@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-0493-7461>.

Abstract. *The relevance:* This study is driven by the need for preliminary screening in drug development, with a particular focus on a promising class of 1,3,5-triazine derivatives known for their diverse pharmacological potential. The high cost of experimental screening necessitates robust *in silico* methods to prioritize viable candidates. *Aim:* to conduct a comprehensive computer-aided screening of a series of novel 1,3,5-triazine derivatives. *Methods:* The research employed computational approaches to predict the biological activity, pharmacokinetics, and toxicity of six novel 1,3,5-triazine derivatives. The PASS algorithm predicted biological activities, while the ADMETlab-3.0 platform evaluated drug-like properties, including compliance with Lipinski's rule, intestinal permeability, blood-brain barrier penetration, metabolism by cytochrome P450 enzymes, and various toxicity endpoints. *Results:* Key findings

indicate promising predicted activities, particularly as inhibitors of testosterone-17 β -dehydrogenase and anaphylatoxin receptors, suggesting applications in oncology and immunology. Pharmacokinetic analysis showed that all compounds have good predictable bioavailability when administered orally. Significant differences were identified: compound 4 showed high blood-brain barrier penetration, while compounds 1 and 2 were predicted to be safer with lower overall toxicity. However, critical toxicological risks were highlighted, such as potential cardiotoxicity for compounds 3 and 6, and neurotoxicity for compound 4. *Practical significance*: The results demonstrate the practical utility of integrated *in silico* profiling for rational lead selection. Study enables ranking of compounds by predicted activity and safety, helping to identify the lead candidates (1 and 2) for further development. This strategy can significantly accelerate early drug development by reducing the number of compounds requiring costly laboratory testing.

Key words: 1,3,5-Triazine; PASS; ADME/Tox; pharmacokinetics; toxicity; drug development

© Э.М. Ергалиева¹, К.Б. Бажыкова^{2*}, Ж.Ж. Кольбаева¹, А.Б. Дүйсен²,
В.В. Важев³, 2025.

¹ Ахмет Байтұрсынұлы атындағы Қостанай өңірлік университеті,
Қостанай, Қазақстан;

² Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан;

³ Алдамжар атындағы Қостанай әлеуметтік-техникалық университеті,
Қостанай, Қазақстан.

E-mail: bazhikova@bk.ru

IN SILICO PASS ЖӘНЕ ADME/TOX БАҒДАРЛАМАЛАРЫ АРҚЫЛЫ ДӘРІЛІК ЗАТТАР ӨЗІРЛЕУ ҮШІН 1,3,5-ТРИАЗИННІҢ ЖАҢА ТУЫНДЫЛАРЫНЫҢ ҚАСИЕТТЕРІН БОЛЖАУ

Ергалиева Эльмира — PhD, профессор ассистенті, Ахмет Байтұрсынұлы атындағы Қостанай өңірлік университеті, Қостанай, Қазақстан,

E-mail: erg_el@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9615-2575>;

Бажыкова Күлзада — химия ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: bazhikova@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5290-9174>;

Кольбаева Жайна — магистрант, Ахмет Байтұрсынұлы атындағы Қостанай өңірлік университеті, Қостанай, Қазақстан,

E-mail: zhainakolbaeva@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0009-8663-4912>;

Дүйсен Әсем — студент, Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: asemass123@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0006-2256-1679>;

Важев Владимир — химия ғылымдарының докторы, З. Алдамжар атындағы Қостанай әлеуметтік-техникалық университеті, Қостанай, Қазақстан,

E-mail: vladimir.vazhev@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-0493-7461>.

Аннотация. *Өзектілігі:* Зерттеу жұмысы әртүрлі фармакологиялық әлеуетімен танымал 1,3,5-триазиннің жаңа 6 туындысының фармакологиялық қасиеттерін,

биологиялық белсенділігін және уыттылығын *in silico* әдісімен болжауға арналған. Эксперименттік скринингтің жоғары құндылығына байланысты перспективті үміткерлерге басымдылық беру үшін *in silico* әдістерін пайдалану қажеттілігі туындайды. **Мақсаты:** Жаңа 1,3,5-триазин туындыларының сериясын кешенді компьютерлік скринингтен өткізу. **Зерттеу әдістері:** Биологиялық белсенділік PASS алгоритмі арқылы болжанды, ал ADMETlab-3.0 платформасы негізгі фармакокинетикалық қасиеттерді, соның ішінде Липинский ережесін сақтау, ішек өткізгіштігі, гематоэнцефалдық бөгеттің енуі, P450 цитохром ферменттері арқылы метаболизм және әртүрлі уыттылықтары бағалау үшін қолданылды. **Нәтиже:** Алынған нәтижелер, атап айтқанда, тестостерон-17 β -дегидрогеназа және анафилатоксин рецепторларының ингибиторлары ретінде онкология мен иммунологияда қолдануға мүмкіндік береді. Фармакокинетикалық талдау барлық қосылыстардың ішке қабылдағанда жақсы биожетімділігі болжанғанын көрсетті. Сонымен қатар келесідей айырмашылықтар да анықталды: 4-қосылыстың гематоэнцефалдық бөгет арқылы жоғары өткізгіштігі байқалды, ал 1 және 2-қосылыстардың жалпы уыттылығы төмен болды, дегенмен олар үшін белгілі бір қауіптер де байқалды. 3 және 6 қосылыстар үшін кардиоуыттылық және 4 қосылыс үшін нейроуыттылық сияқты маңызды токсикологиялық қауіптер анықталды. Нәтижелер *in silico* әдісінің қосылыстарды ұтымды іріктеудегі тәжірибелік құндылығын көрсетеді. **Практикалық маңызы:** Жұмысы қосылыстарды болжау мен қауіпсіздігі тұрғысынан саралауға мүмкіндік береді. Бұл ары қарайғы әзірлеу үшін ең перспективті кандидаттарды (1 және 2) анықтауға көмектеседі. Бұл стратегия қымбат тұратын зертханалық сынақтарды қажет ететін қосылыстардың санын азайту арқылы дәрілік заттарды әзірлеуді айтарлықтай тездетуге мүмкіндік береді.

Түйін сөздер: 1,3,5-Триазин; PASS; ADME/Tox; фармакокинетикасы; уыттылық; дәрілік заттардың дамуы

© Э.М. Ергалиева¹, К.Б. Бажыкова^{2*}, Ж.Ж. Кольбаева¹, А.Б. Дуйсен²,
В.В. Важев³, 2025.

¹Костанайский региональный университет имени Ахмет Байтұрсынұлы,
Костанай, Казахстан;

²Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан;

³Костанайский социально-технический университет имени З. Алдамжара,
Костанай, Казахстан.

E-mail: bzhikova@bk.ru

IN SILICO PASS И ADME/TOX ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СВОЙСТВ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 1,3,5-ТРИАЗИНА ДЛЯ РАЗРАБОТКИ ЛЕКАРСТВ

Ергалиева Эльмира — PhD, ассистент профессора, Костанайский региональный университет имени Ахмет Байтұрсынұлы, Костанай, Казахстан,

E-mail: erg_el@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9615-2575>;

Бажыкова Кульзада — кандидат химических наук, ассоциированный профессор, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,

E-mail: bazhikova@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5290-9174>;

Кольбаева Жайна — магистрантка, Костанайский региональный университет имени Ахмет Байтұрсынұлы, Костанай, Казахстан,

E-mail: zhainakolbaeva@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0009-8663-4912>;

Дүйсен Әсем — студентка, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,

E-mail: asemasss123@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0006-2256-1679>;

Важев Владимир Викторович — доктор химических наук, Костанайский социально-технический университет имени З. Алдамжара, Костанай, Казахстан,

E-mail: vladimir.vazhev@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-0493-7461>.

Аннотация. *Актуальность:* Данное исследование обусловлено необходимостью предварительного скрининга в разработке лекарственных препаратов, уделяя особое внимание перспективному классу производных 1,3,5-триазина, известных своим разнообразным фармакологическим потенциалом. Высокая стоимость экспериментального скрининга обуславливает необходимость использования надежных методов *in silico* для определения приоритетности перспективных кандидатов. *Цель:* провести всесторонний компьютерный скрининг ряда новых производных 1,3,5-триазина. *Методы:* Биологическую активность прогнозировали с помощью алгоритма PASS, в то время как платформа ADMETlab-3.0 была использована для оценки ключевых фармакокинетических свойств, включая соответствие правилу Липинского, кишечную проницаемость, проникновение через гематоэнцефалический барьер, метаболизм ферментами цитохрома P450 и оценки различных видов токсичности. *Результаты:* Основные выводы указывают на перспективные прогнозируемые активности, в частности, в качестве ингибиторов тестостерон-17 β -дегидрогеназы и рецепторов анафилатоксина, что предполагает применение в онкологии и иммунологии. Фармакокинетический анализ показал, что все соединения обладают хорошей прогнозируемой биодоступностью при приеме внутрь. Были выявлены существенные различия: соединение 4 продемонстрировало высокую проницаемость через гематоэнцефалический барьер, в то время как соединения 1 и 2, обладали меньшей общей токсичностью, хотя и для них были отмечены определенные риски. Установлены критические токсикологические риски, такие как потенциальная кардиотоксичность для соединений 3 и 6 и нейротоксичность для соединения 4. Результаты демонстрируют практическую ценность интегрированного профилирования *in silico* для рационального выбора основных соединений. *Практическая значимость:* Исследование позволяет ранжировать соединения по перспективности и безопасности, выявляя наиболее подходящих кандидатов (1 и 2) для дальнейшей разработки. Эта стратегия может значительно ускорить раннюю разработку лекарственных препаратов за счет сокращения количества соединений, требующих дорогостоящих лабораторных испытаний.

Ключевые слова: 1,3,5-Триазин; PASS; ADME/Tox; фармакокинетика; токсичность; разработка лекарственных препаратов

Introduction. The relevance of searching for new highly effective compounds, both natural and synthetic, is confirmed by many research (Silva et al., 2025; Dyusebaeva, 2024; Duzbayeva et al., 2023; Ikhsanov et al., 2023; Kantureyeva et al., 2021; Zhonderbek et al., 2021). At the same time, the development of new drugs is a complex, multi-step, and resource-intensive process characterized by a high failure rate at late stages, often due to unexpected toxicity, unsatisfactory pharmacokinetics (ADME), or insufficient efficacy. In this context, computer prediction methods (*in silico*) have become an integral tool in modern medicinal chemistry, enabling virtual screening and prioritization of compounds at the earliest stages, significantly reducing time and costs.

The introduction of new pharmacologically active compounds based on nitrogen-containing heterocyclic systems is a strategic direction in the fight against socially significant diseases (Bayazit, 2025). Promising compounds in this regard include 1,3,5-triazines, which were chosen as the object of this study. 1,3,5-Triazines find wide application in chemistry, medicine and pharmacology due to their flexibility and diverse biological activity. These six-membered cyclic structures contain three nitrogen atoms, which allows them to be easily modified to obtain various derivatives with unique properties. Due to their versatility and ability to interact with various biological targets, they are actively studied for the creation of new therapeutic drugs.

However, the synthesis and experimental testing of all potentially interesting triazine derivatives is physically impossible. Therefore, the key task is to rationally select the most promising candidate structures for subsequent synthesis and in-depth study.

Here, modern *in silico* approaches come to the forefront, enabling:

1. Prediction of Activity Spectra for Substances (PASS). The PASS algorithm evaluates the likelihood of a compound exhibiting a broad spectrum of biological activity based on its molecular structure, helping to hypothesize primary and secondary pharmacological effects and identify potential new mechanisms of action (Sukhachev et al., 2025).

2. Evaluate ADME (Adsorption, Distribution, Metabolism, Excretion) properties and toxicological profile (ADME/Tox). The success of a molecule as a drug candidate is determined not only by its high activity *in vitro*, but also by its ability to reach the target in the body, have an adequate half-life, and an acceptable safety profile. Prediction of parameters such as solubility, permeability, metabolic stability, and cardiotoxicity (hERG) using modern computational platforms (such as ADMETlab) is an important step in the selection process (Dulsat et al., 2023; Xiong et al., 2021).

Thus, there is a clear scientific and practical need for comprehensive *in silico* analysis of new 1,3,5-triazine-based chemical structures prior to their synthesis. This allows for focusing experimental efforts on compounds that are highly likely to combine not only the target pharmacological effect but also favorable drug-like properties.

The aim of this study is to conduct a comprehensive computer-aided screening of a series of novel, previously undescribed 1,3,5-triazine derivatives using the PASS and ADMETlab prediction technologies to:

1. Predict potential biological activities.
2. Assess key pharmacokinetic and safety parameters.

3. Identify the most promising candidate structures that optimally combine predicted high activity and a favorable ADME/Tox profile for subsequent prioritized synthesis and biological validation.

The choice of the 1,3,5-triazine scaffold for this *in silico* study is justified by its exceptional versatility and proven potential across multiple therapeutic domains, as evidenced by recent research.

A brief review of the literature on 1,3,5-triazine derivatives. The relevance of searching for new nitrogen-containing heterocyclic compounds with targeted biological activity is confirmed by modern research aimed at overcoming drug resistance. For example, a recent study by Kazakhstan scientists presented a technology for the synthesis and preclinical evaluation of a new antimicrobial piperidine derivative, AIP-5, illustrating the current trend in medicinal chemistry toward the creation of such structures (Akhmetova et al., 2025).

Modern research also confirms that 1,3,5-triazines are a highly promising molecular scaffold for the development of broad-spectrum drugs due to the possibility of targeted synthesis and modification. Of particular interest is research into the creation of hybrid molecules and multitargeted ligands (MTDLs), a major trend in medicinal chemistry in recent years.

In oncology, the strategy of hybridizing the triazine core with other pharmacophores has yielded highly active and selective inhibitors of key targets. For example, quinazoline-1,3,5-triazine hybrids have proven to be potent inhibitors of the epidermal growth factor receptor (EGFR), demonstrating significant antitumor activity *in vivo* without toxicity to normal cells (Lim, 2024). Another successful strategy has been the development of new triazine and pyrimidine derivatives containing a dithiocarbamate moiety based on the well-known inhibitor ZSTK474. One such compound demonstrated high selectivity for the PI3K α isoform and caused significant tumor regression in a U87-MG glioma xenograft model without signs of toxicity, indicating its potential as a targeted therapeutic agent (Sharma, 2024). Another successful strategy was the development of new derivatives containing a dithiocarbamate moiety based on the known inhibitor ZSTK474 (Tang et al., 2023). In this work, a rational structure-based modification was implemented to achieve high selectivity for the PI3K α isoform. The lead compound demonstrated exceptional activity ($IC_{50} = 1.2$ nM against PI3K α) and, in an experiment on mice bearing U87-MG glioma xenografts, caused significant tumor regression without signs of toxicity.

A promising avenue is the use of 1,3,5-triazines for the treatment of neurodegenerative diseases. A systematic review (Silva et al., 2025) highlights the potential of this scaffold in the treatment of Alzheimer's disease, analyzing the activity of derivatives within two main hypotheses: inhibition of acetylcholinesterase (AChE) and action on the amyloid cascade (inhibition of BACE-1 and β -amyloid aggregation). The authors conclude that triazines hold great promise for the development of multitargeted ligands capable of not only alleviating symptoms but also modifying the course of the disease.

Significant results have also been achieved in the fight against infectious diseases. The design of hybrid molecules combining a 1,3,5-triazine core with a 2,4-thiazolidinedione

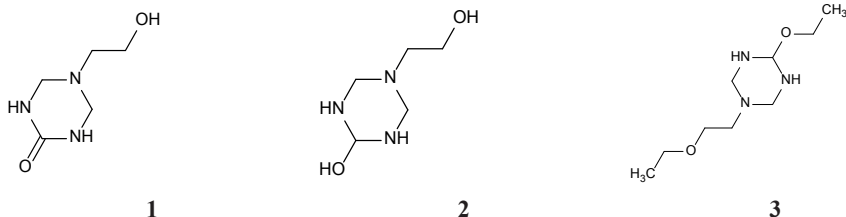
(TZD) moiety has led to the creation of compounds with activity against multiple pathogens simultaneously. The lead compound in this series demonstrated potent activity against HIV-1 (reverse transcriptase inhibition), demonstrated an inhibitory effect against SARS-CoV-2, and demonstrated strong antibacterial and antibiofilm activity, particularly against Gram-negative bacteria (Singh et al., 2025). This approach addresses the current challenge of coinfections and multidrug resistance.

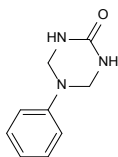
Anti-inflammatory and metabolic research are also actively developing. For example, new 1,3,5-triazine derivatives, inspired by the structure of the drug imeglumine, were identified as selective and potent inhibitors of dipeptidyl peptidase-4 (DPP-4). In animal studies, the lead compound produced dose-dependent improvements in blood glucose and insulin levels, lipid profile, and antioxidant status, confirming the potential of this class for the treatment of type 2 diabetes (Gupta et al., 2023). Furthermore, new triazine-based histamine H4 receptor (H4R) antagonists have been synthesized, demonstrating pronounced analgesic and anti-inflammatory activity *in vivo* with low toxicity, opening up new possibilities for chronic pain treatment (Olejarz-Maciej et al., 2023).

Research in the field of antimicrobial therapy is also ongoing. A modern review (Rathod, 2024) summarizes trends in the development of antibacterial compounds containing a triazine moiety, emphasizing the key role of cyanuril chloride as a versatile reagent for the preparation of biologically active derivatives.

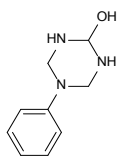
Thus, a review of current publications convincingly demonstrates that 1,3,5-triazines remain an exceptionally flexible and productive platform for the design of innovative drugs. Current efforts are focused on the creation of hybrid molecules and multitargeted agents aimed at treating socially significant diseases: oncology, neurodegenerative, infectious, and metabolic. These data support the need for continued research and the search for new derivatives with targeted biological properties.

Materials and methods. This study utilized a sequential computational (*in silico*) approach that precedes labor-intensive and costly chemical synthesis and biological screening. The primary goal of the methodology was to predict the properties of six new 1,3,5-triazine derivatives, given on the scheme. This approach enables the early identification of the most promising candidate compounds possessing both the desired biological activity and favorable pharmacokinetic and toxicological profiles, significantly increasing the efficiency of subsequent experimental stages of drug development.

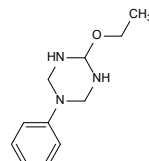




4



5



6

Two-dimensional (2D) chemical structures of all derivatives were constructed and optimized using the Avogadro software package (v.1.2.0) using the Universal Force Field (UFF) for energy minimization. The resulting three-dimensional (3D) molecular models were saved in .mol and .sdf formats for subsequent computer analysis.

The PASS (Prediction of Activity Spectra for Substances, online version) algorithm was used to predict the potential biological activities of the derivatives. This algorithm, based on the analysis of over 300,000 known biologically active compounds and their structural descriptors, estimates the likelihood that a given molecule will exhibit a particular pharmacological effect. Standardized SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry System) notations for all six derivatives were uploaded to the PASS web server. The analysis was performed in prediction-only mode. Standard values of 0.5 were used as thresholds for the probabilities of activity (P_a) and inactivity (P_i). The results were analyzed, and the most probable biological activities with the highest P_a values (>0.7) were selected for each compound.

An assessment of the ADMET properties (absorption, distribution, metabolism, excretion, and toxicity) of new 1,3,5-triazine derivatives was performed using the ADMETlab 3.0 web platform. Using standardized SMILES notations, key physicochemical descriptors were calculated for each compound, including molecular weight, LogP, number of hydrogen bond donors and acceptors, and topological polar surface area. These descriptors were used to assess compliance with drug similarity rules (Lipinski, Hahn, and Wieber). Absorption and distribution parameters were modeled by predicting permeability through Caco-2 and MDCK cell monolayers, blood-brain barrier penetration, and plasma protein binding. To assess the metabolic profile, the compounds' potential to act as inhibitors or substrates of the major cytochrome P450 isoforms was analyzed. The toxicological assessment included determination of the risk of hERG channel inhibition (cardiotoxicity), hepatotoxicity potential, mutagenicity, carcinogenicity, and calculation of the integral toxicity index (Tox-score) in the range from 0 to 1, where values approaching 1 indicate a high overall risk.

These *in silico* approach efficiently prioritized candidates for further testing. The criteria for identifying promising candidates were defined as follows:

1. At least one predicted therapeutically relevant activity with a $P_a > 0.7$ based on PASS data.
2. Full compliance with Lipinsky's rules.
3. Favorable absorption parameters: Caco-2 permeability > -5.15 log cm/s (high), predicted BBB penetration consistent with the target site of action.
4. Low toxicity risk: no high risk (Tox score < 0.5) for key parameters (hERG, hepatotoxicity, mutagenicity).

Results. PASS prediction of compounds 1–6. The results of computer prediction of the spectrum of biological activity for 1,3,5-triazine derivatives **1–6** revealed a number of potentially significant pharmacological effects, which confirms the promise of the selected molecular framework. Computed PASS profiles **1–6** are given in Table 1, highlighting predicted “property of being active” ($P_a > 0.7$) and “property of being inactive” (P_i).

Table 1 – PASS predicted activities of compounds **1–6**

Compound	P_a	P_i	Activity
1	0.84	0.01	Anaphylatoxin receptor antagonist
	0.82	0.02	Testosterone 17 β -dehydrogenase (NADP+) inhibitor
	0.80	0.01	Mannotetraose 2- α -N-acetylglucosaminyltransferase inhibitor
	0.79	0.00	Growth hormone agonist
	0.78	0.00	(R)-Pantolactone dehydrogenase (flavin) inhibitor
	0.76	0.05	Phobic disorders treatment
	0.75	0.01	2-Dehydropantoate 2-reductase inhibitor
	0.74	0.01	Pterin deaminase inhibitor
	0.74	0.01	Trimethylamine-oxide aldolase inhibitor
	0.73	0.02	NADPH peroxidase inhibitor
	0.73	0.01	Leukopoiesis stimulant
	0.72	0.00	CYP2C19 inducer
2	0.70	0.02	Fucosterol-epoxide lyase inhibitor
	0.84	0.01	Anaphylatoxin receptor antagonist
	0.75	0.02	Mannotetraose 2- α -N-acetylglucosaminyltransferase inhibitor
	0.74	0.02	NADPH peroxidase inhibitor
	0.73	0.06	Phobic disorders treatment
3	0.71	0.00	Growth hormone agonist
	0.87	0.01	Mannotetraose 2- α -N-acetylglucosaminyltransferase inhibitor
	0.72	0.07	Phobic disorders treatment
4	0.70	0.00	Growth hormone agonist
	0.85	0.01	Testosterone 17 β -dehydrogenase (NADP+) inhibitor
	0.80	0.00	Pterin deaminase inhibitor
	0.78	0.00	CYP2C19 inducer
5	0.76	0.02	Nicotinic α 2 β 2 receptor antagonist
	0.76	0.04	Testosterone 17 β -dehydrogenase (NADP+) inhibitor
	0.74	0.01	Thioredoxin inhibitor
	0.74	0.02	NADPH peroxidase inhibitor
6	0.74	0.05	Aspulvinone dimethylallyltransferase inhibitor
	0.79	0.04	CYP2C12 substrate
	0.76	0.01	5-O-(4-coumaroyl)-D-quinic 3'-monooxygenase inhibitor
	0.75	0.02	Mannotetraose 2- α -N-acetylglucosaminyltransferase inhibitor

Thus, the predicted activity spectra of these compounds demonstrate their potential as modulators of hormonal regulation, including inhibition of testosterone-17 β -dehydrogenase (**1**, $P_a = 0.82$; **4**, $P_a = 0.85$; **5**, $P_a = 0.76$) and activation of growth hormone (**1**, $P_a = 0.79$; **2**, $P_a = 0.71$; **3**, $P_a = 0.70$). These properties indicate the potential

of these derivatives for the development of therapeutic agents for hormone-dependent oncological diseases (Li et al., 2024) or the correction of metabolic disorders.

Anti-inflammatory and immunomodulatory potential: a pronounced tendency to suppress inflammatory processes is observed. Thus, compounds **1** and **2** are highly likely ($P_a = 0.84$) to act as antagonists of the anaphylatoxin receptor, a key mediator of inflammation [Buelli et al., 2024]. Additionally, compounds **2** and **5** are predicted to be inhibitors of NADPH peroxidase ($P_a = 0.74$), and compound **5** is predicted to be an inhibitor of thioredoxin ($P_a = 0.74$), indicating a possible mechanism for modulating oxidative stress. The activity of compounds **3** and **6** as inhibitors of mannotetraose-2- α -N-acetylglucosaminyltransferase ($P_a = 0.87$ and 0.75) may be associated with the effect on carbohydrate metabolism in the context of inflammatory processes, which opens up prospects for the treatment of autoimmune diseases.

Neurotropic activity: the prediction indicates possible effects on the central nervous system. Compounds **1–3** showed probable activity as agents for the treatment of phobic disorders ($P_a = 0.72–0.76$), and compound **4** showed probable activity as a pterine deaminase inhibitor ($P_a = 0.80$) and nicotinic $\alpha 2\beta 2$ receptor antagonist ($P_a = 0.76$) (El Nebrisi et al., 2025). However, the relatively high probabilities of inactivity (P_i) for some of these effects (e.g., 0.07 for compound **3**) require cautious interpretation and the need for experimental confirmation.

Pharmacokinetics of compounds 1–6. Analysis of the physicochemical properties of compounds **1–6** predicted by ADMETlab-0 shows that all compounds meet the Lipinski rule ($MW < 500$, $\log P < 5$, $TPSA < 140 \text{ \AA}^2$), indicating a high probability of their oral bioavailability (Table 2). However, compound **3** has the highest $\log P$ (1.027) and the lowest $TPSA$ value ($45.76 \text{ \AA}^2$), which may lead to high lipophilicity, potentially reducing water solubility. At the same time, compounds **1** and **2** have higher hydrophilicity ($\log P < 0$), which may limit their membrane permeability.

Table 2 – Pharmacokinetic parameters of compounds **1–6**

Property	Compound					
	1	2	3	4	5	6
Molecular Weight (MW)	145.09	147.1	203.16	177.09	179.11	207.14
TPSA. $\text{\AA}^2$	64.6	67.76	45.76	44.37	47.53	36.53
$\log P$	-1.024	-1.463	1.027	1.091	0.48	1.395
$\log D_{7.4}$	-0.316	-0.591	1.472	1.308	0.899	1.67
Caco-2 permeability. $\log \text{ cm/s}$	-5.777	-5.263	-5.33	-5.092	-5.095	-5.027
MDCK permeability. $\log \text{ cm/s}$	-5.101	-5.12	-4.856	-4.679	-4.826	-4.749
BBB Penetration	+	--	-	+++	++	++
PPB (%)	3.9	10.6	20.6	56.2	37.0	37.5
Fu (%)	95.7	84.2	66.3	40.1	54.1	55.0
CL _{plasma} . ml/min/kg	8.455	8.404	9.499	6.202	9.806	9.266

Drug absorption and transport are studied in intestinal permeability cell models such as Caco-2 and Madin–Darby Canine Kidney cells (MDCK). A compound is considered to be Caco-2 permeable if the value is $> -5.15 \log \text{ cm/s}$. MDCK Permeability $> 20 \times 10^{-6}$

cm/s is assessed as high permeability; 2×10^{-6} cm/s $\leq 20 \times 10^{-6}$ cm/s – average permeability: 2×10^{-6} cm/s; $\leq 2 \times 10^{-6}$ cm/s – low permeability (Xiong (2021)). Intestinal permeability is important for drug development, as it ensures efficient absorption and achievement of therapeutic concentrations in the blood. Predicted permeability indicates average absorption for most compounds (Table 2). Compounds **4**, **5** and **6** have higher Caco-2 permeability values, indicating more favorable pharmacokinetic properties.

The ability of compounds **1–6** to penetrate the blood-brain barrier (BBB) varies. Compound **4** shows the highest penetration (+++), making it a promising candidate for central nervous system (CNS) activity. Compounds **6** and **5** also have good values (++), indicating a probable neurotropic effect.

Plasma protein binding (PPB) also influences the distribution of compounds in the body. The high binding (PPB > 50%) of compound **4** (56.2%) may slow its elimination and prolong its duration of action. In contrast, compounds **1** and **2** have low PPB values (3.9% and 10.6%), which may contribute to their faster elimination and lower effect on the body.

Fu (%) is the free fraction of the substance in the blood plasma, showing the percentage of the compound not bound to proteins (e.g. albumin). Only the unbound fraction is able to penetrate membranes, interact with targets and be metabolized. High Fu (>20% High Fu; 5-20% medium Fu; <5% low Fu) increases the availability of the substance, but can accelerate its elimination. CL_{plasma} is the plasma clearance (ml/min/kg), reflecting the rate of elimination of the substance from the body through metabolism and excretion (>15 ml/min/kg: high clearance; 5-15 ml/min/kg: moderate clearance; <5 ml/min/kg: low clearance).

Compounds **1–3** have high Fu (>20%), indicating high availability for target interaction and metabolism. However, this also increases the risk of rapid elimination. For all three compounds, CL_{plasma} is in the moderate range (8.4–9.5 mL/min/kg), consistent with the high Fu.

Compounds **4–6** have a moderate Fu (5–20%), indicating moderate availability. The CL_{plasma} values for these compounds are also in the moderate range (6.2–9.8 mL/min/kg), providing a balance between availability and stability in the body. Compound **4** has the lowest clearance (6.202), indicating its long-term presence in the body and potentially longer-lasting therapeutic effect.

The metabolism of the studied compounds is associated with CYP450 isoenzymes. The most important CYP enzymes for the metabolism of the compounds are CYP3A4, CYP2C19 and CYP1A2. These enzymes are actively involved in the metabolism of many drugs, so high activity with them increases the risk of drug interactions, requiring caution in combination therapy (Sakamuru et al., 2025).

Table 3 – Metabolism and excretion of compounds **1–6**

Property	Compound					
	1	2	3	4	5	6
CYP2C19 Substrate	+++	---	+++	---	---	+
CYP2D6 Substrate	-	---	---	---	--	++

CYP1A2 Substrate	++	--	-	+	-	+++
CYP2C9 Substrate	-	+	++	---	+	-
CYP3A4 Substrate	+++	++	+	---	-	++
HLM Stability	---	---	-	+++	---	+++

Compounds **1**, **3** and **6** demonstrate high activity with CYP enzymes: **1** with CYP2C19 and CYP3A4, **3** with CYP2C19, and **6** with CYP1A2 (Table 3). This makes them more susceptible to metabolic interactions with other drugs, which requires caution when used together (Sakamuru et al., 2025).

Compounds **2**, **3** and **6** also exhibit moderate activity with CYP enzymes. Their moderate metabolism reduces the risks, but still requires attention in combination therapy.

Compounds **4** and **5** are practically not metabolized by the main CYP enzymes, which makes them the most stable and safe in terms of metabolic interactions.

Compounds **4** and **6** show high stability in the liver (HLM Stability +++), which may indicate a longer duration of action in the body. In contrast, **3** and **5** are rapidly metabolized, which may require more frequent dosing.

Prediction of toxicity parameters of compounds 1–6. The types of toxicity predicted by the ADMETlab-3.0 tool (Table 4) represent *in silico* assessments of potential toxicological risks of compounds. According to the toxicophore theory used in this type of prediction, fragments that correlate with a certain type of toxicity can be identified in the structures of molecules. Information on the presence of toxicophores allows preliminary selection of potentially hazardous compounds (Sukhachev (2025)).

Table 4 – Toxicophores of structures **1–6**

Property	Compound					
	1	2	3	4	5	6
Aquatic Toxicity Rule	0	0	0	0	0	0
Genotoxic Carcinogenicity Mutagenicity Rule	0	0	0	1	1	1
NonGenotoxic Carcinogenicity Rule	0	0	0	0	0	0
Skin Sensitization Rule	2	2	2	2	2	2
Acute Toxicity Rule	0	0	0	0	0	0
NonBiodegradable	0	0	1	0	0	1
SureChEMBL Rule	0	0	0	0	0	0
FAF-Drugs4 Rule	0	0	0	1	1	1

As a result of prediction, the structure of compounds **4**, **5** and **6** was found to contain toxicophores that lead to the risk of genotoxicity, carcinogenicity and mutagenicity.

The presence of two skin sensitizing toxicophores in the structures of compounds **1–6** indicates a high probability of skin irritation.

It was also found that compounds **3** and **6** are non-biodegradable, which indicates their possible persistence in the environment and potential accumulation in living organisms.

SureChEMBL and FAF-Drugs4 are filters that identify medically unfriendly

compounds. According to SureChEMBL, no structural features of high toxicity were found in the structure of compounds **1–6**. Compounds **4**, **5** and **6** do not meet the requirements of the FAF-Drugs4 rule.

The above results of toxicophore detection do not provide information on the numerical values of toxicity, for example, they do not allow calculating the contributions of the identified groups to the toxicological properties. Table 5 shows the results of predicting the quantitative values of various types of toxicity calculated by ADMETlab-3.0. The results are presented on a scale from 0 to 1, where 0 is no toxicity.

Table 5 - Toxicological parameters of compounds **1–6**

Property	Compound					
	1	2	3	4	5	6
hERG Blockers	0.077	0.148	0.264	0.065	0.202	0.299
hERG Blockers (10um)	0.307	0.501	0.675	0.421	0.64	0.687
DILI	0.188	0.152	0.210	0.333	0.243	0.296
AMES Toxicity	0.506	0.485	0.582	0.593	0.381	0.401
Rat Oral Acute Toxicity	0.203	0.506	0.491	0.162	0.681	0.646
FDAMDD	0.071	0.155	0.112	0.142	0.217	0.175
Skin Sensitization	0.911	0.576	0.357	0.784	0.091	0.25
Carcinogenicity	0.545	0.282	0.465	0.636	0.189	0.255
Eye Corrosion	0.336	0.724	0.795	0.107	0.144	0.262
Eye Irritation	0.989	0.926	0.773	0.987	0.847	0.840
Respiratory	0.661	0.899	0.786	0.415	0.821	0.810
Human Hepatotoxicity	0.493	0.540	0.337	0.389	0.559	0.562
Drug-induced Nephrotoxicity	0.354	0.720	0.456	0.133	0.694	0.471
Drug-induced Neurotoxicity	0.799	0.703	0.580	0.915	0.829	0.778
Ototoxicity	0.361	0.733	0.351	0.206	0.732	0.433
Hematotoxicity	0.262	0.285	0.166	0.302	0.342	0.326
Genotoxicity	0.834	0.357	0.042	0.996	0.926	0.779
RPMI-8226 Immunotoxicity	0.028	0.037	0.059	0.016	0.021	0.023
A549 Cytotoxicity	0.012	0.013	0.011	0.027	0.015	0.027
Hek293 Cytotoxicity	0.111	0.074	0.125	0.149	0.059	0.084
BCF (log10(L/kg))	0.067	0.254	0.330	0.102	0.262	0.500
IGC ₅₀ (−log□□[(mg/L)/(1000×MW)])	1.438	1.461	2.216	2.698	2.506	2.696
LC ₅₀ DM (−log□□[(mg/L)/(1000×MW)])	2.160	2.183	3.332	4.055	3.876	4.115
LC ₅₀ FM (−log□□[(mg/L)/(1000×MW)])	1.333	1.332	2.462	3.148	2.972	3.159

Interpretation of the data presented in the table **5** allows us to identify the following key toxicological risks for each of the compounds. The mechanisms of cardiotoxicity are associated with the possibility of inhibiting hERG (human ether-a-go-go related gene) channels and may cause a risk of cardiac arrhythmia (Liao et al., 2024). The highest risk of cardiotoxicity was found for compound **6** (hERG Blockers (10um) 0.687). High values were also found for **3** (0.675) and **5** (0.64).

Hepatotoxicity and drug-induced liver injury (DILI) are among the most common reasons for drug recalls. The highest DILI is found in compound **4** (0.333), hepatotoxicity is most pronounced in **5** (0.559) and **6** (0.562).

High values of the genotoxicity assessment of compounds **4** (0.996) and **5** (0.926) indicate a significant risk of DNA damage. The greatest neurotoxicity is predicted for **4** (0.915) and **5** (0.829).

Carcinogenicity reflects the ability of compounds to cause malignant neoplasms. Among the studied substances, the highest risk of cancer development was noted for compound **4** (0.636), which may indicate its potential danger with long-term exposure.

Strong irritant effect was noted for all compounds: **1-6**, indicating a high risk if the substance gets into the eyes. In addition, **2** (0.724) and **3** (0.795) have the potential to cause damage to eye tissue, which can lead to irreversible damage.

Immunotoxicity is a property that shows the ability of substances to suppress or damage the immune system. All compounds show a low level of influence on immune cells. As for cytotoxicity, all values are also low.

Thus, the analysis revealed significant toxicological risks for most compounds, in particular high cardio-, hepato-, and neurotoxicity, as well as potential carcinogenicity, especially for compounds **4** and **5**. To reduce risks during further development, modification of the chemical structure of the problematic compounds and careful monitoring of relevant parameters in the preclinical stages of research are necessary.

The ecotoxicity assessment demonstrates a clear trend of increasing hazard from compounds **1** and **2** to compounds **4** and **6**. Compounds **4** and **6** pose the greatest hazard to aquatic organisms, demonstrating maximum toxicity values for daphnia (4.055 and 4.115) and fish (3.148 and 3.159). However, compound **6** has the greatest potential for bioaccumulation (BCF 0.500), which increases the long-term environmental risks of its potential spread.

Discussion. The results of an *in silico* screening of six new 1,3,5-triazine derivatives provide a comprehensive view of their therapeutic potential and associated risks, which is fully consistent with the well-known high structural flexibility of this heterocyclic scaffold. Our data not only confirm its role as a versatile platform for the design of agents with diverse targets but also reveal subtle relationships between structure, activity, and safety profile, which is key to rational drug design.

Comparative analysis of the pharmacodynamic profile. The identified spectrum of biological activity naturally reflects trends described in the current literature. Thus, the predicted endocrine modulation (AKR1C3 inhibition) for compounds **1**, **4**, and **5** correlates with the known role of 1,3,5-triazine derivatives in the treatment of hormone-dependent tumors, where inhibition of this enzyme is a promising strategy (Sharma et al., 2024). However, the uniqueness of our study lies in the combination of this activity with other activities. For example, compound **1** potentially combines an antiandrogenic effect with potent anti-inflammatory activity (anaphylatoxin receptor antagonism, $P_a=0.84$), which may open new avenues for the treatment of inflammatory forms of prostate cancer. Similarly, the neurotropic potential of compounds **1-4** (anxiolytic, effects on nicotinic receptors), combined with their overall pharmacokinetic profile, suggests the possibility of CNS action, which is less commonly described for this class of compounds.

Pharmacokinetics and metabolism assessment. Compounds **1** and **2**, with negative

LogP, exhibit excellent aqueous solubility, which is a major advantage for dosage form development, but their relatively low predicted permeability through intestinal barrier models (Caco-2 ~ -5.8 and -5.3 log cm/s) may limit bioavailability. In contrast, more lipophilic compounds **4–6** exhibit better permeability, but their solubility will likely require specialized pharmaceutical management. The metabolic prediction deserves special attention. The fact that compounds **4** and **5** are not predicted to be substrates of major CYP isoenzymes is a significant strategic advantage, as it minimizes the risk of serious drug interactions – a common problem in oncology and anti-inflammatory therapeutic regimens (Sakamuru et al., 2025).

Analysis of toxicological risks and their structural origins. The high cardiotoxicity (hERG) values for compounds **3**, **5**, and **6** (>0.64) and genotoxicity values for **4** and **5** (>0.92) require detailed attention. It is important to emphasize that these risks are likely related not to the 1,3,5-triazine core *per se*, but to specific substituents and side chains introduced into the structure. For example, the identified toxicophores, which pose a risk of skin sensitization for all compounds, require careful analysis of specific fragments. This points to a clear direction for optimization: future medicinal chemical synthesis should focus on isosteric substitution or minimal modification of problematic fragments while preserving the key pharmacophores responsible for the target activity. Comparison with data on known triazine-based drugs (*e.g.*, gedatolisib) would reveal whether the identified risks are typical for the class or specific to our new structures (Rossetti et al., 2024).

Limitations of the method and the way forward. It should be noted that all conclusions are predictive in nature. Although the PASS and ADMETlab 3.0 algorithms are based on extensive experimental data, false positive and false negative results are possible. For example, the high predicted neurotoxicity of compound **4** (0.915) requires priority testing in specialized in vitro assays on neuronal cell lines. Thus, this study does not replace, but rather strategically guides subsequent experimental work, indicating what exactly and in what order to test, which ultimately leads to significant resource savings.

Conclusion. In conclusion, a comprehensive computer-aided screening of six new 1,3,5-triazine derivatives using the PASS and ADMETlab 3.0 platforms enabled not only the filtering of compounds but also their multi-level stratification and the formulation of specific research hypotheses for the next stage of development.

1. Identification of lead candidates. Based on integrated analysis, compound **2** was identified as the most balanced candidate for immediate synthesis and primary biological testing. It combines predicted antiandrogenic ($P_a=0.75$, mannotetraose-2-alpha-N-acetylglucosaminyltransferase inhibitor) and anti-inflammatory activity ($P_a=0.84$, anaphylatoxin receptor antagonist) with the most favorable toxicological profile in the series: low risk of cardiotoxicity (hERG=0.148), genotoxicity (0.357), and hepatotoxicity (0.152). Its high free fraction in plasma ($F_u=84.2\%$) predicts good tissue target availability.

2. Identification of candidates for targeted optimization. Compound **4**, which exhibits exceptional BBB permeability (+++) and a unique combination of activity (AKR1C3 inhibition, $P_a=0.85$), is recognized as highly potent but requires modification. The

primary objective is to reduce the unacceptably high predicted risks of genotoxicity (0.996) and neurotoxicity (0.915) by redesigning specific structural fragments identified as toxicophores, followed by repeated *in silico* validation.

3. Practical recommendations for the preclinical program.

Priority is given for compounds **1** and **2** to *in vitro* tests for AKR1C3 inhibition and in inflammatory models (e.g., inhibition of complement activation), as well as to assess membrane permeability using the PAMPA system to refine the bioavailability prediction. For compounds **4–6** prior to efficacy studies, *in vitro* assessments for toxicity are mandatory to experimentally confirm or refute key risks.

Thus, this study serves as a clear demonstration of the "screening-stratification-optimization" paradigm in modern medicinal chemistry. Computational methods have demonstrated their power as a decision support system that allows for focusing real laboratory efforts and resources on the most promising and rational directions, accelerating the discovery of new drugs based on the high-potential 1,3,5-triazine scaffold.

References

- Akhmetova G., Issayeva U., Praliyev K., Omyrzakov M., & Seylkanov T. (2025) Technology of producing 1-(2-ethoxyethyl)-4-adamantanecarbonyloxy-piperidine hydrochloride and study of its cytotoxicity. *Academic Journal of Physical and Chemical Sciences*, (2). — P. 206–217. DOI: 10.32014/2025.2518-1483.353 (in English)
- Bayazit, S., Zazybin, A., & Aydemir, M. (2025) Synthesis and pharmacology of kazcaine and other 4-ethynyl piperidine derivatives: A review. *Academic Scientific Journal of Chemistry*, (2). — P. 39–56. DOI: 10.32014/2025.2518-1491.280 (in English)
- Buelli S., Imberti B., & Morigi M. (2024) The complement C3a and C5a signaling in renal diseases: A Bridge between acute and chronic inflammation. *Nephron*, 148(10). — P. 712–723. DOI: 10.1159/000538241 (in English)
- Dulsat J., López-Nieto B., Estrada-Tejedor R., Borrell J.I. (2023) Evaluation of free online ADMET tools for academic or small biotech environments. *Molecules*, 28(2). — 776 p. DOI: 10.3390/molecules28020776 (in English)
- Duzbayeva N., Ibrayeva M., Kabdysalym K., Mukazhanova Zh., & Adhikari A. (2023) Component composition and biological activity of essential oil of *hyssopus cuspidatus* plants. *Academic Journal of Physical and Chemical Sciences*, 348(4). — P. 169–178. DOI: 10.32014/2023.2518-1483.251 (in English)
- Dyusebaeva M. (2024) Chemical constituents of liposoluble extract of *artemisia terrae-albae*. *Academic Journal of Physical and Chemical Sciences*, (1). — P. 195–203. DOI: 10.32014/2024.2518-1483.266 (in English)
- El Nebrisi E., Lozon Y., & Oz M. (2025) The role of $\alpha 7$ -nicotinic acetylcholine receptors in the pathophysiology and treatment of parkinson's disease. *International Journal of Molecular Sciences*, 26(7), 3210. DOI: 10.3390/ijms26073210 (in English)
- Gupta A., Bhat H.R., & Singh U.P. (2023) Discovery of novel 1,3,5-triazine derivatives as an antidiabetic agent in Wistar rats via inhibition of DPP-4. *Future Medicinal Chemistry*, 15(10). — P. 829–852. DOI: 10.4155/fmc-2022-0312 (in English)
- Ikhsanov Y., Sheveleva Y., & Litvinenko Y. (2023) Study of some compounds and bactericidal activity of *Daturastramonium*. *Academic Scientific Journal of Chemistry*, (3). — P. 84–95. DOI: 10.32014/2023.2518-1491.179 (in English)
- Kantureyeva G., Sapparbekova A., Kudasova D., & Giovanna Lomolino (2021) Study of the effect of extraction using enzyme preparation - pectinol f-rkm 0719 on the yield of phenolic substances in pomegranate peel. *Academic Journal of Physical and Chemical Sciences*, (6). — P. 131–138. DOI: 10.32014/2021.2518-1483.121 (in English)

Liao J., Yang Z., Yang J., Lin H., Chen B., Fu H., Gao F. (2024) Investigating the cardiotoxicity of Nn-butyl haloperidol iodide: Inhibition mechanisms on hERG channels. *Toxicology*, 508, 153916. DOI: 10.1016/j.tox.2024.153916 (in English)

Lim H.Y., & Dolzhenko A.V. (2024) 1,3,5-Triazine as a promising scaffold in the development of therapeutic agents against breast cancer. *European Journal of Medicinal Chemistry*, 276, 116680. DOI: 10.1016/j.ejmech.2024.116680 (in English)

Olejarczyk Maciej A., Mogilski S., Karcz T., Werner T., Kamińska K., Kupeczyk J., & Łażewska D. (2023) Trisubstituted 1,3,5-triazines as histamine H4 receptor antagonists with promising activity *in vivo*. *Molecules*, 28(10), 4199. DOI: 10.3390/molecules28104199 (in English)

Rathod B., Pawar S., Puri S., Diwan A., & Kumar K. (2024) Recent advancements and developments in the biological importance of 1,3,5-triazines. *ChemistrySelect*, 9(12), e202303655. DOI: 10.1002/slct.202303655 (in English)

Rossetti S., Broege A., Sen A., Khan S., MacNeil I., Molden J., & Laing L. (2024) Gedatolisib shows superior potency and efficacy versus single-node PI3K/AKT/mTOR inhibitors in breast cancer models. *NPJ Breast Cancer*, 10(1), 40. DOI: 10.1038/s41523-024-00648-0 (in English)

Sakamuru S., Travers J., Klumpp-Thomas C., Huang R., Witt K.L., Ferguson S.S., & Xia M. (2025) Profiling the Tox21 compound library for their inhibitory effects on cytochrome P450 enzymes. *International Journal of Molecular Sciences*, 26(11). — 4976 p. DOI: 10.3390/ijms26114976 (in English)

Sharma O., Srivastava S., Sharma M., & Malik R. (2024) 1,3,5-Triazine derivatives as potential anticancer agents against lung and breast cancer cell lines: Synthesis, biological evaluation, and structure-based drug design studies. *Journal of Molecular Structure*, 1308, 138078. DOI: 10.1016/j.molstruc.2024.138078 (in English)

Silva C.F., Guerrinha A.P.D.M., Carvalho S., Pinto D.C., & Silva A.M. (2025) 1,3,5-Triazine: A promising molecular scaffold for novel agents for the treatment of Alzheimer's disease. *International Journal of Molecular Sciences*, 26(3), 882. DOI: 10.3390/ijms26030882 (in English)

Singh S., Srivastav, K.S., Gahtori P., Anand, A.A., Samanta S.K., Kumawat M.K., & Singh U.P. (2025) Design, and synthesis of 2, 4-thiazolidinedione substituted 1,3,5-triazine derivatives as anti-HIV agent via inhibition of reverse transcriptase along with anti-SARS CoV-2, antibacterial and antibiofilm activity. *Bioorganic Chemistry*, 160, 108427. DOI: 10.1016/j.bioorg.2025.108427 (in English)

Sukhachev V.S., Dmitriev A.V., Ivanov S.M., Savosina P.I., Druzhilovskiy D.S., Filimonov D.A., & Poroikov V.V. (2025) Assessment of the efficiency of selecting promising compounds during virtual screening based on various estimations of drug-likeness. *Pharmaceutical Chemistry Journal*. — P. 1–9. DOI: 10.1007/s11094-025-03286-3 (in English)

Tang J., Liu J., He X., Fu S., Wang K., Li C., & Hou Y. (2023) Design and synthesis of 1,3,5-triazines or pyrimidines containing dithiocarbamate moiety as PI3K α selective inhibitors. *ACS Medicinal Chemistry Letters*, 14(9). — P. 1266–1274. DOI: 10.1021/acsmchemlett.3c00287 (in English)

Xiong G., Wu Z., Yi J., Fu L., Yang Z., Hsieh C., Yin M., Zeng X., Wu C., Lu A., Chen X., Hou T., & Cao D. (2021) ADMETlab 2.0: An integrated online platform for accurate and comprehensive predictions of ADMET properties. *Nucleic Acids Research*, 49(W1), W5–W14. DOI: 10.1093/nar/gkab255. (in English)

Zhonderbek Zh.A., Kolumbayeva S.Z., Lovinskaya A.V., Voronova N. (2021) Study of antigenotoxic potential of the Rosehip (*Rosa Majalis* Herm.) of the family Rosaceae. *Academic Journal of Physical and Chemical Sciences*, (2). — P. 54–60. (in English)

© **R.I. Jalmakhanbetova^{1*}, S. Azatkyzy¹, G.K. Mukusheva², 2025.**

¹L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan;

²Karaganda National Research University named after Academician E.A. Buketov,
Karaganda, Kazakhstan.

*E-mail: rjalmakhanbetova@gmail.com

STRUCTURE-DIRECTED URSOLIC ACID MODIFICATIONS AND THEIR IMPACT ON BIOLOGICAL ACTIVITY

Jalmakhanbetova Roza — Doctor of Chemical Sciences, Associate Professor, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan,

E-mail: rjalmakhanbetova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-9937-275X>;

Azatkyzy Samgat — student of the Department of Chemistry, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan,

E-mail: samgatazatkyzy@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0003-1132-0632>;

Mukusheva Gulim — Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor, Karaganda National Research University named after Academician E.A. Buketov, Karaganda, Kazakhstan,

E-mail: mukushevagulim5@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-6706-4816>.

Abstract. Ursolic acid is a natural pentacyclic triterpene found in many medicinal plants. Due to its wide biological activity, including antitumor, anti-inflammatory, antioxidant, hepatoprotective and antimicrobial effects, it is considered a promising structure for developing new broad-spectrum therapeutic agents. However, its clinical application is limited by low water solubility, weak bioavailability, and limited selectivity. Therefore, considerable attention is given to the structural modification of ursolic acid to obtain derivatives with improved pharmacological and physicochemical properties and high therapeutic value. The purpose of the study was to demonstrate a way to increase the biological activity and improve the pharmacokinetic properties of ursolic acid by means of chemical modifications. The following research methods were used: synthetic pathways, analysis of the influence of structural changes on biological activity, and comparison of experimental data obtained on various biological models. Modern methods of chemical synthesis of ursolic acid derivatives, grouped by key reactive positions of the molecule C-3, C-28, as well as other parts of the skeleton, such as ring A, double bond between C-12 and C-13, are considered in the review article. Studies have shown that targeted modification in positions C-3 and C-28 is most effective for enhancing antitumor, anti-inflammatory, antibacterial and cytotoxic activity. The

practical significance of the study is that it shows the high potential of modified ursolic acid in the development of new pharmaceuticals and substantiates synthesis strategies aimed at targeted enhancement of biological activity.

Keywords: ursolic acid, chemical modification, reaction centers, triterpenoid derivatives, biological activity

© Р.И. Джалмаханбетова^{1*}, С. Азатқызы¹, Г.К. Мукушева², 2025.

¹Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан;

²Академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды ұлттық зерттеу университеті, Қарағанды, Қазақстан.

*E-mail: rjalmakhanbetova@gmail.com

УРСОЛ ҚЫШҚЫЛЫНЫҢ ҚҰРЫЛЫМДЫҚ-БАҒЫТТАЛҒАН МОДИФИКАЦИЯЛАРЫ ЖӘНЕ ОЛАРДЫҢ БИОЛОГИЯЛЫҚ БЕЛСЕНДІЛІККЕ ӘСЕРІ

Джалмаханбетова Роза — химия ғылымдарының докторы, қауымдастырылған профессор,

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

E-mail: rjalmakhanbetova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-9937-275X>;

Азатқызы Самғат — химия кафедрасының студенті, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан,

E-mail: samgatazatyzy@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0003-1132-0632>;

Мукушева Гүлім — химия ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, Академик

Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды ұлттық зерттеу университеті, Қарағанды, Қазақстан,

E-mail: mukushevagulim5@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-6706-4816>.

Аннотация. Урсол қышқылы көптеген дәрілік өсімдіктерде кездесетін табиғи пентациклды тритерпен. Ісікке қарсы, қабынуға қарсы, антиоксиданттық, гепатопротекторлық және микробқа қарсы әсерді қоса алғанда, биологиялық белсенділіктің кең спектріне байланысты ол жаңа кең спектрлі емдік агенттерді жасау үшін перспективалы құрылым ретінде қарастырылады. Дегенмен, урсол қышқылының клиникалық қолданылуы оның суда төмен ерігіштігімен, нашар биожетімділігімен және әсер етудің шектеулі селективтілігімен шектеледі. Осыған байланысты жоғары емдік маңызы бар фармакологиялық және физика-химиялық сипаттамалары жақсартылған туындыларды алу үшін урсол қышқылының құрылымдық модификациясына көп көңіл бөлінеді. Зерттеудің мақсаты – химиялық модификациялар арқылы урсол қышқылының биологиялық белсенділігін арттыру және фармакокинетикалық қасиеттерін жақсарту жолдарын көрсету. Зерттеу әдістері ретінде синтез жолдары, құрылымдық өзгерістердің биологиялық белсенділікке әсерін талдау, сондай-ақ әртүрлі биологиялық модельдерде алынған эксперименттік деректерді салыстыру қолданылды. Шолу мақалада молекуланың негізгі реакциялық орталықтары - С-3, С-28, сондай-ақ қаңқаның басқа бөліктері, мысалы, А сақинасы, С-12 және С-13 арасындағы қос байланыс бойынша топтастырылған урсол қышқылы туындыларының химиялық синтезінің заманауи әдістері қарастырылады. Зерттеулер нәтижесінде С-3 және

С-28 позицияларындағы мақсатты модификация ісікке қарсы, қабынуға қарсы, бактерияға қарсы және цитоуыттылық белсенділікті арттыруда ең тиімді екенін көрсетеді. Шолуда ұсынылған нәтижелер онкологиялық, қабыну, жұқпалы ауруларды емдеуге бағытталған жаңа препараттарды әзірлеуде пайдаланылуы мүмкін, сондай-ақ дәрілік химия, фармакология және биомедициналық технологиялар саласындағы одан әрі зерттеулерге негіз болады. Зерттеулердің практикалық маңыздылығы – модификацияланған урсол қышқылының жаңа фармацевтикалық агенттерді әзірлеуде жоғары потенциалы бар екенін айқындауы және биологиялық белсенділікті мақсатты түрде арттыруға бағытталған синтез стратегияларын негіздеуі болып табылады.

Түйін сөздер: урсол қышқылы, химиялық модификация, реакциялық орталықтар, тритерпеноидтардың туындылары, биологиялық белсенділік

© Р.И. Джалмаханбетова^{1*}, С. Азатқызы¹, Г.К. Мукушева², 2025.

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

²Карагандинский национальный исследовательский университет имени
академика Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан.

*E-mail: rjalmakhanbetova@gmail.com

СТРУКТУРНО-НАПРАВЛЕННЫЕ МОДИФИКАЦИИ УРСОЛОВОЙ КИСЛОТЫ И ИХ ВЛИЯНИЕ НА БИОЛОГИЧЕСКУЮ АКТИВНОСТЬ

Джалмаханбетова Роза — доктор химических наук, ассоциированный профессор, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан,

E-mail: rjalmakhanbetova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-9937-275X>;

Азатқызы Самғат — студент кафедры химии, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан,

E-mail: samgatazatyzy@gmail.com; <https://orcid.org/0009-0003-1132-0632>;

Мукушева Гулим — кандидат химических наук, ассоциированный профессор, Карагандинский национальный исследовательский университет имени академика Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан,

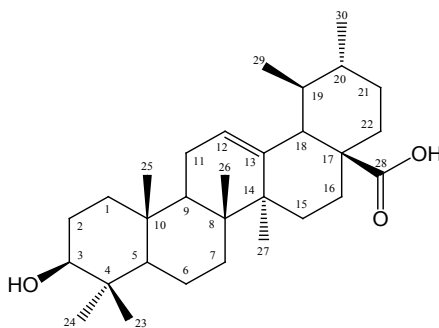
E-mail: mukushevagulim5@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-6706-4816>.

Аннотация. Урсоловая кислота — природный пентациклический тритерпен, содержащийся во многих лекарственных растениях. Благодаря широкому спектру биологической активности, включающему противоопухолевое, противовоспалительное, антиоксидантное, гепатопротекторное и антимикробное действие, она рассматривается как перспективная структура для разработки новых терапевтических агентов. Однако её клиническое применение ограничено низкой растворимостью в воде, слабой биодоступностью и умеренной селективностью, что существенно снижает фармакологическую эффективность. В связи с этим значительное внимание уделяется структурной модификации урсоловой кислоты с целью получения производных с улучшенными фармакологическими и физико-химическими характеристиками. Целью исследования было проанализировать

способы повышения биологической активности и улучшения фармакокинетических свойств урсоловой кислоты посредством различных химических модификаций. В качестве методов исследования использовались анализ современных химических подходов к модификации структуры, изучение влияния функциональных превращений на биологическую активность и сопоставление данных, полученных на различных биомоделях. В обзорной статье рассмотрены актуальные методы синтеза производных урсоловой кислоты, классифицированные по ключевым реакционноспособным позициям молекулы — C-3, C-28, а также по модификациям кольца A и области двойной связи C-12=C-13. Показано, что целенаправленные преобразования в позициях C-3 и C-28 являются наиболее эффективными для усиления противоопухолевой, противовоспалительной, антибактериальной и цитотоксической активности в отношении опухолевых клеток. Представленные в обзоре результаты могут быть использованы при создании новых лекарственных препаратов для лечения онкологических, воспалительных и инфекционных заболеваний, а также служить основой для дальнейших исследований в области медицинской химии, фармакологии и биомедицинских технологий. Практическая значимость исследования заключается в демонстрации высокого потенциала модифицированной урсоловой кислоты в разработке новых фармацевтических средств и обосновании стратегий синтеза, направленных на целевое усиление биологической активности.

Ключевые слова: урсоловая кислота, химическая модификация, реакционные центры, производные тритерпеноидов, биологическая активность

Introduction. Among natural compounds, triterpenoids are among the most abundant and structurally diverse biologically active secondary metabolites in plants. They play protective, signaling, and physiological regulatory roles in plants. In addition, triterpenoids have attracted special attention in the medical and pharmaceutical industries due to their anti-inflammatory, antitumor, antiviral, antioxidant, and hepatoprotective effects (Malik et al, 2024; Wei et al, 2024; Hu et al, 2025). One of the most widely distributed compounds among these triterpenoids is ursolic acid (Cargnin et al, 2017; Szakiel et al, 2012). Ursolic acid (3 β -hydroxy-urs-12-en-28-oic acid) (**1**) is a five-membered triterpenoid.



(1)

Various studies on the synthesis and biological properties of ursolic acid obtained from plants have revealed its importance in the fields of industry, agriculture and medicine.

Among oncological diseases, hormone-dependent types - in particular, breast and endometrial cancer in women, as well as prostate cancer in men - remain one of the medical and biological problems that have not lost their relevance today. In the treatment of such pathologies, antihormonal drugs aimed at regulating hormonal balance and inhibitors of enzymes involved in the biosynthesis of hormones (for example, aromatase) are widely used. Studies have shown that ursolic acid is also able to inhibit the activity of the aromatase enzyme (Jeong et al, 2000), which makes it a promising agent in the therapy of hormone-dependent malignant tumors.

Ursolic acid exhibits pronounced antitumor activity by suppressing key signaling pathways involved in tumor development. It also significantly reduces proliferation and enhances apoptosis of cancer cells by blocking their pathological activation (Mbaveng et al, 2014).

Ursolic acid exhibits a wide range of biological activities, however, its practical application is limited by its low solubility, poor bioavailability, and limited selectivity of action. Therefore, it is important to chemically modify ursolic acid to improve its pharmacokinetic properties, enhance its therapeutic activity, and obtain new derivatives with high selectivity and safety.

This work examines the modifications of the triterpenoid ursolic acid, which has a wide spectrum of biological activity, at its reactive centers, and the pharmacological activities of the synthesized derivatives.

Materials and methodology. The scientific information and data that formed the basis of this review were systematically selected from international scientific databases. In particular, information on chemical modifications performed on the reactive centers in the molecular structure of ursolic acid, their synthesis routes and biological activity were searched and analyzed from leading databases such as ScienceDirect, SpringerLink, and PubChem.

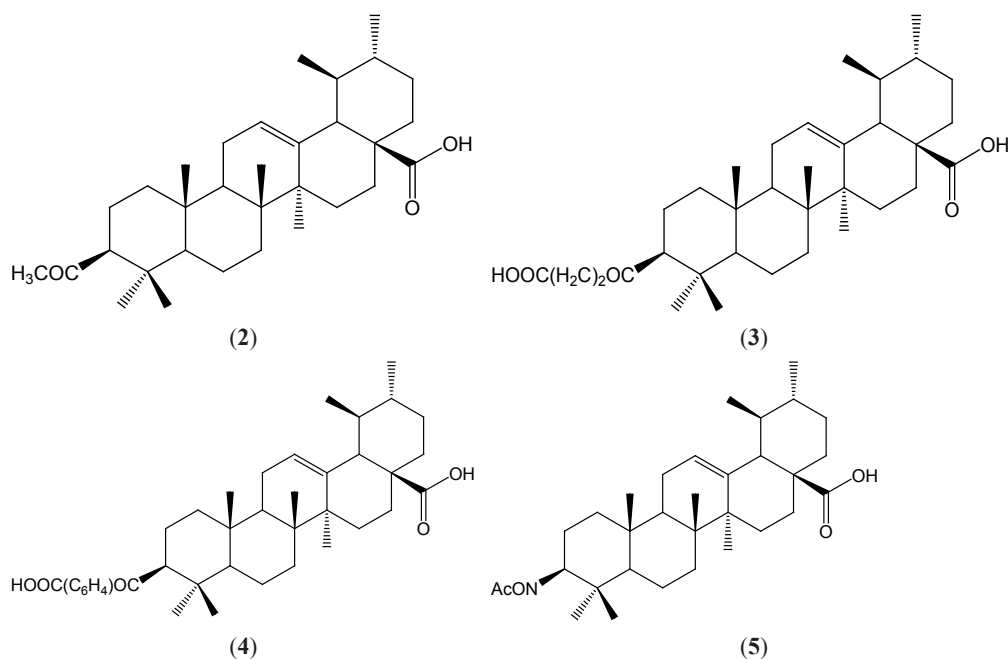
The following keywords were used during the information search: ursolic acid, chemical modification, reactive centers, biological activity, triterpenoids, derivatives, etc.

The collected literature data were systematized according to the directions of chemical modification (for example, C3-hydroxyl group, C28-carboxyl group and C12–C13 double bond), and the synthetic methods used for each reactive center and their effect on pharmacological activity were comparatively analyzed.

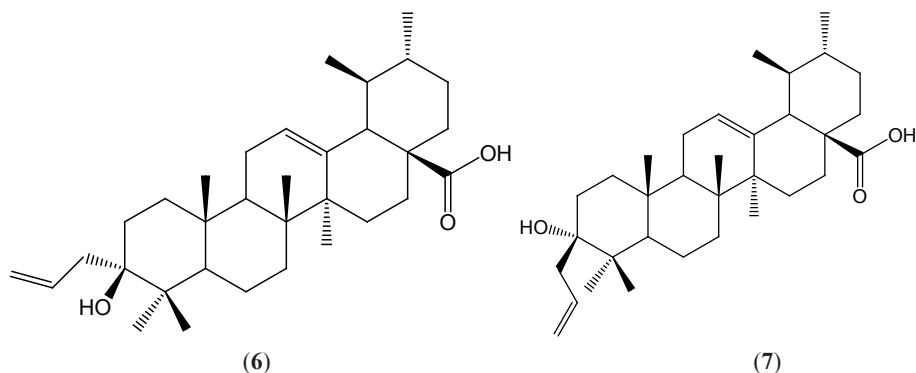
Results and discussion. Modifications at the C-3 position. The C-3 hydroxyl group is one of the most frequently modified moieties in the structure of ursolic acid. Various chemical modifications at this position, including esterification, oxidation, glycosylation, oximation, and the formation of carbamate or amide derivatives, are widely used to enhance anticancer activity.

Thien and colleagues synthesized a number of new derivatives of ursolic acid by chemical modification. In the study, the hydroxyl group at the C-3 position was

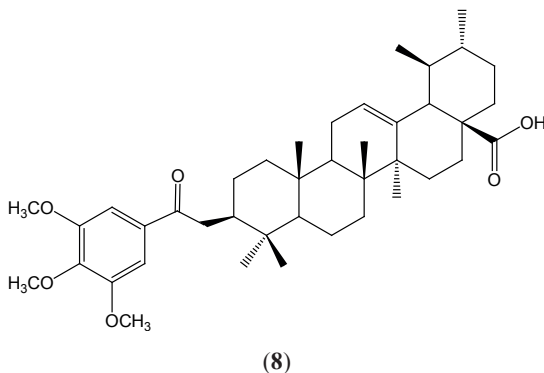
mainly modified with various functional groups. The purpose of these modifications was to increase the anticancer activity of the molecule. During the synthesis, the C-3 hydroxyl group of ursolic acid was first subjected to various acetylation and ester and amide introduction reactions. As a result, compounds (2–4) were obtained. In addition, oxidation, oximation, and further acetylation were carried out to obtain the acetoximino group compound (5) (Thien et al, 2013). The results of the study showed that the presence of an acetoximino group in the molecule significantly increased its anti-lung cancer activity compared to the original ursolic acid. These structural modifications demonstrate the possibility of creating effective anti-cancer drugs based on ursolic acid, and the reactions are aimed at improving lipophilicity and biological activity by modifying the C-3 position.



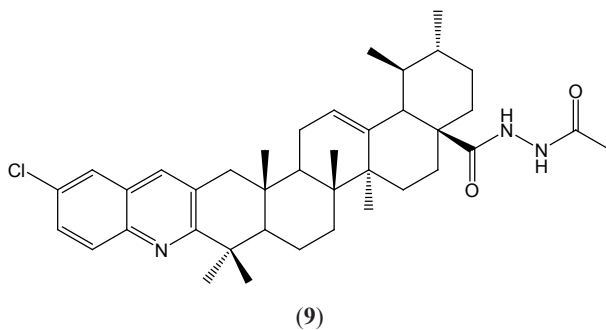
Fontana and colleagues conducted a series of modifications and studied the effect of the synthesized compounds on malignant liver cancer cell lines (HepG2, HA22T/VGH and Hep3B) [Fontana et al, 2019]. Among the ursolic acid derivatives, compounds (6) and (7), in which a three-carbon side chain was introduced at the C-3 position, were obtained as stereoisomers by the Barbier–Grignard method and showed high activity against all three cell lines.



Xu and his research group reacted ursolic acid and a number of other triterpenoids with 3,4,5-methoxy benzoic acid and tested the antitumor effects of the resulting compounds on A549, MCF-7, H1975, and BGC-823 tumor cells. In particular, compound (8) with a 3,4,5-trimethoxyphenacyl group introduced at the C-3 position had a specific antiproliferative effect, with an IC_{50} value ranging from 5.32–15.23 μ M (Xu et al, 2020).

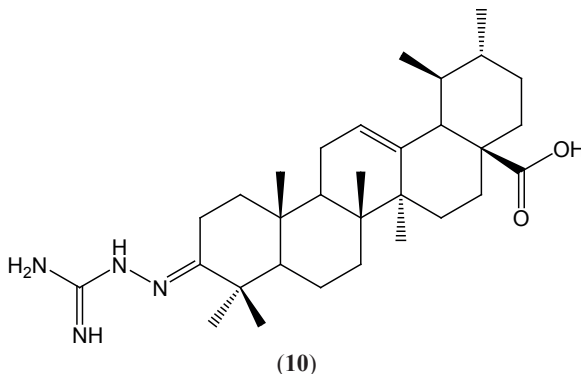


Jin and colleagues synthesized novel derivatives based on ursolic acid containing a quinoline structure and containing thiadiazole, hydrazide, and oxadiazole moieties. The antitumor activity of these compounds was evaluated *in vitro* against cancer cell lines such as SMMC-7721, MDA-MB-231, and HeLa. As a result of the studies, a number of compounds showed significant activity against at least one cell line. Among them, compound (9) showed the strongest activity against all cancer cell lines, and this activity was higher than that of etoposide. In particular, compound (9) can induce apoptosis of HeLa cells, arrest the cell cycle at the G0/G1 phase, increase the intracellular level of reactive oxygen species, and reduce the mitochondrial membrane potential (Jin et al, 2019).

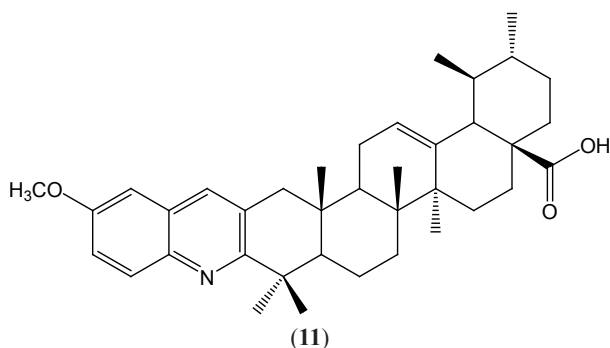


In addition, compound (9) can significantly inhibit MEK1 kinase activity and interfere with the Ras/Raf/MEK/ERK transduction pathway. Thus, compound (9) has been identified as a potential anticancer agent and a promising compound worthy of further investigation.

Wu et al. developed a series of derivatives by modifying the structure of ursolic acid with an aminoguanidine fragment and evaluated their anti-inflammatory and antibacterial properties (Wu et al, 2019). Among these derivatives, compound (10) showed the highest antibacterial activity against various bacteria tested with MIC values in the range of 2–16 $\mu\text{g/mL}$, as well as the highest anti-inflammatory activity with 81.61% inhibition. Structural analysis revealed that the aminoguanidine group is the main factor influencing the activity. It was also observed that the retention of the carboxyl group at C-28 in the molecule enhances the pharmacological efficacy of the compound.



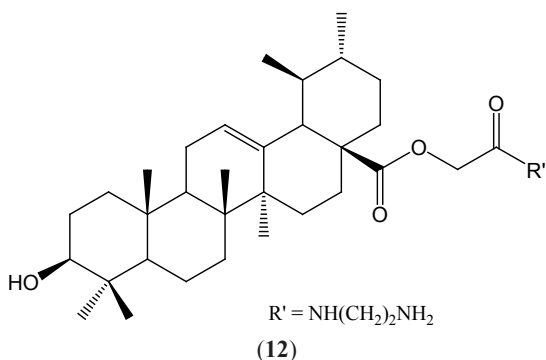
Gu and his research group synthesized new quinoline derivatives based on ursolic acid. The antitumor effects of these compounds were tested in vitro on a series of human cancer cells, such as MDA-MB-231 (breast cancer), HeLa (cervical cancer), and SMMC-7721 (liver cancer) (Gu et al, 2017). In particular, compound (11) was found to be the most potent derivative, with IC_{50} values of 0.61 ± 0.07 , 0.36 ± 0.05 , and 12.49 ± 0.08 μM , respectively, against MDA-MB-231, HeLa, and SMMC-7721 cells, respectively, compared with the control.



Modifications at the C-28 position

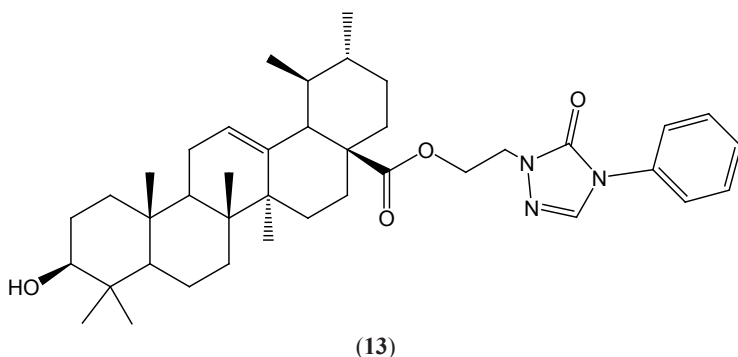
The carboxyl group at the C-28 position is one of the structural elements that is frequently subjected to chemical modification. Functional groups such as piperazine ring and nitrogen chains are introduced at this position through esterification, amidation. Such modifications are often carried out to enhance anti-lung cancer activity.

Tian and colleagues synthesized new derivatives by introducing various diamine groups at the C-28 position of ursolic acid and studied their anti-cancer activity against MCF-7, HeLa and A549 cancer cells (Tian et al, 2017). During the synthesis, the C-3 hydroxyl group was first protected with an acetyl group, and then the C-28 position was modified with 2-hydroxyacetate and subjected to amidation reaction with various diamines. The amines used included piperazine, N-methylpiperazine and various alkane diamines. The results of the study showed that some of these derivatives, especially compound (12), had higher antiproliferative activity compared to gefitinib. In particular, compounds with primary amine groups were significantly more effective than secondary and tertiary amine derivatives. In addition, secondary amine derivatives showed higher activity compared to tertiary amines.

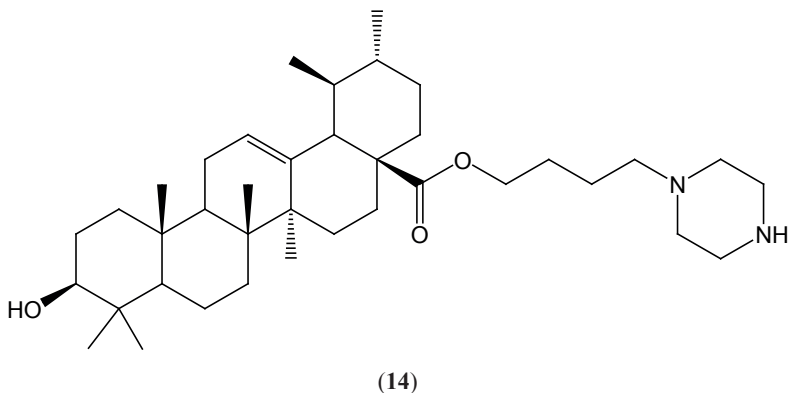


Chi et al. synthesized a series of novel derivatives containing oxadiazole, piperazine, and triazolone groups based on ursolic acid and evaluated their antitumor activity (Chi et al, 2017). The antihypoxic effects of these derivatives, in particular, their ability to inhibit the expression of hypoxia-induced factor-1 α (HIF-1 α), were investigated. In vitro

experiments showed that these novel compounds significantly enhanced their antitumor activity by inhibiting the expression of HIF-1 α . Among them, derivative (13) inhibited HIF-1 α activity the most, but did not show cytotoxic effects on cancer cells. These results indicated that simple esterification of the carboxyl group of ursolic acid could significantly enhance its ability to inhibit HIF-1 α activity and reduce its toxicity to cells. In addition, the study revealed that derivative (13) could slow down cell proliferation and induce cell cycle arrest in the G1 phase.

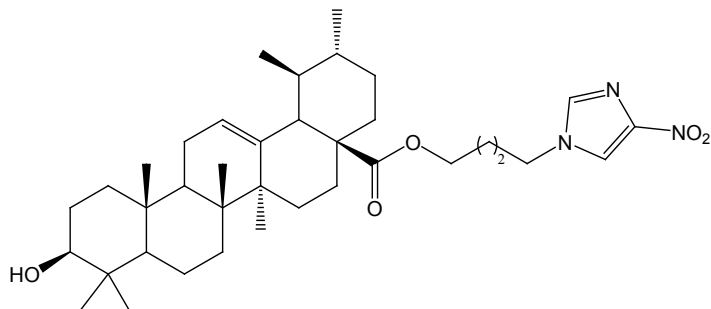


Gou et al. obtained several compounds by structural modification of ursolic acid. Among them, compound (14) with a piperazine moiety in particular showed a more pronounced inhibitory effect on lung cancer cell proliferation ($IC_{50} = 5.4\text{--}6.1\text{ }\mu\text{M}$ for A549 cells and $IC_{50} = 3.9\text{--}5.7\text{ }\mu\text{M}$ for H460 cells) compared to the original ursolic acid. Compound (14) was shown to not only induce cell cycle arrest at the G0/G1 phase but also induce apoptosis in A549 and H460 cells. Thus, compound (14) is a drug with anti-lung cancer properties (Gou et al, 2020).



Li and his research group synthesized a series of novel derivatives based on ursolic acid and investigated their ability to inhibit hypoxia-inducible factor 1 α (HIF-1 α) activity and anti-inflammatory properties. The single compound (15) inhibited HIF-1 α activity more effectively than ursolic acid and showed anti-inflammatory effects comparable to

celecoxib in in vivo studies. In addition, this compound moderately inhibited the COX-2 enzyme, which also confirms its anti-inflammatory potential (Li et al, 2022).

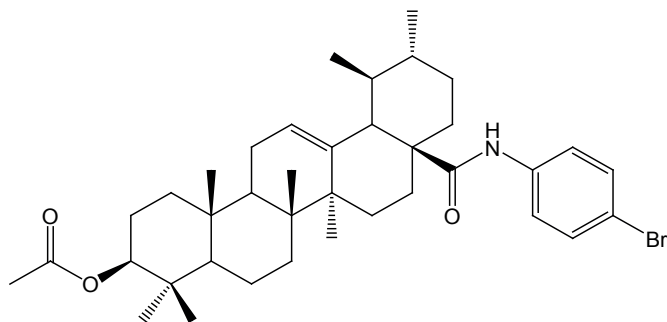


(15)

Based on these results, compound (15) is considered a promising molecule and can be proposed as a starting structure for the development of new HIF-1 α inhibitors and anti-inflammatory agents.

Modifications at positions C-3 and C-28

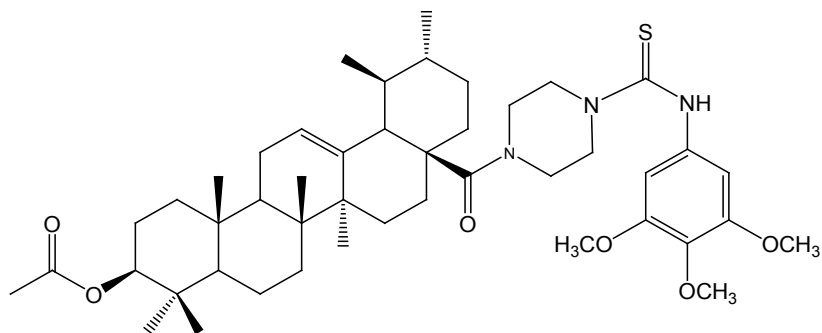
Kalani and colleagues modified the molecular structure of ursolic acid and studied its characteristics using quantitative structure-activity relationship (QSAR) models (Kalani et al, 2012). They applied these models to human lung cancer cell lines (A549). The antitumor activity of the compounds obtained in the study was in good agreement with experimental data. Among them, the 4-bromoanilamidoursolic acid analogue (16) was the most active of all and had higher cytotoxic activity than the control drug Adriamycin.



(16)

Based on previous studies, Hua and his research group developed a series of novel biologically active derivatives by purposefully modifying the structure of ursolic acid. In their study, a series of novel ursolic acid derivatives modified at positions C-3 and C-28 were designed and synthesized with the aim of developing potential anticancer agents (Hua et al, 2015). They were evaluated against five cancer cell lines (MGC-803, HCT-116, T24, HepG2 and A549) and a normal cell (HL-7702). The screening results showed that some of these targeted compounds exhibited moderate to high levels of

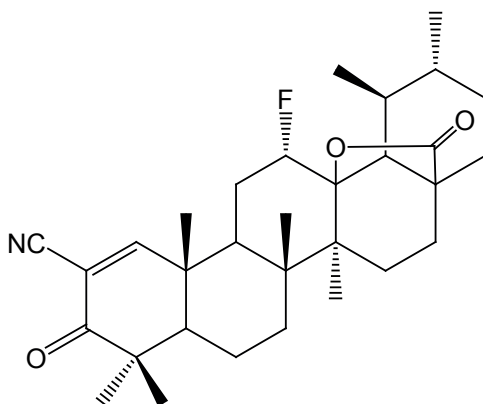
antiproliferative activity. The results indicated that the anticancer activity of compound (17) could be achieved by inducing cell apoptosis by arresting the cell cycle at the G1 phase, and could induce apoptosis through both intrinsic and extrinsic apoptotic pathways.



(17)

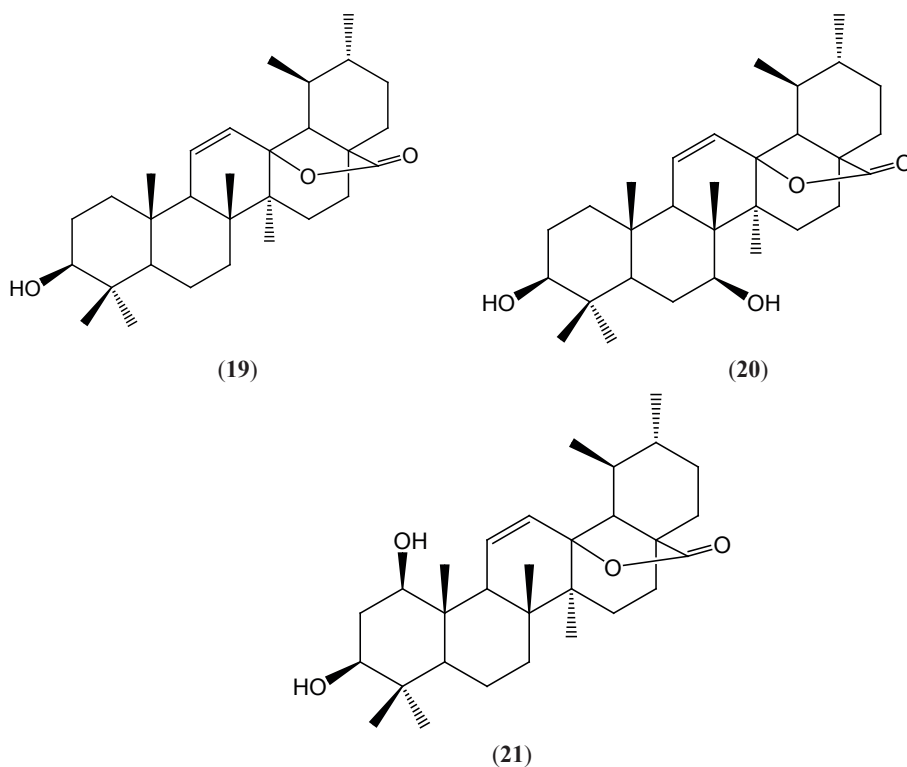
Other modifications

Leal and colleagues synthesized a series of ursolic acid derivatives using an electrophilic fluorinating reagent. The antiproliferative activity of these novel compounds was evaluated in AsPC-1 pancreatic cancer cells and their structure-activity relationships (SARs) were investigated. Among the synthesized compounds, ursolic acid derivatives with heterocyclic rings such as imidazole or methylimidazole and cyanones were among the most potent inhibitors of AsPC-1 pancreatic cancer cell growth. 2-cyano-3-oxo-12 α -fluoro-urs-1-ene-13,28 β -olide, compound (18), was the most potent inhibitor with IC₅₀ values of 0.7, 0.9 and 1.8 μ M in AsPC-1, MIA PaCa-2 and PANC-1 cancer cells, respectively. This compound also showed good antiproliferative activity against breast (MCF7), prostate (PC-3), hepatocellular (Hep G2), and lung (A549) tumor cells with IC₅₀ values below 1 μ M (Leal et al, 2012).

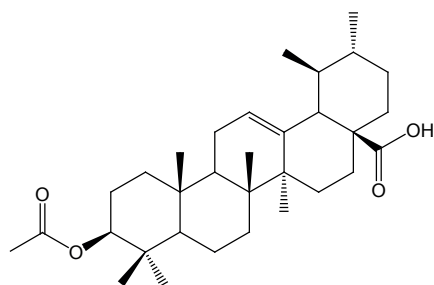


(18)

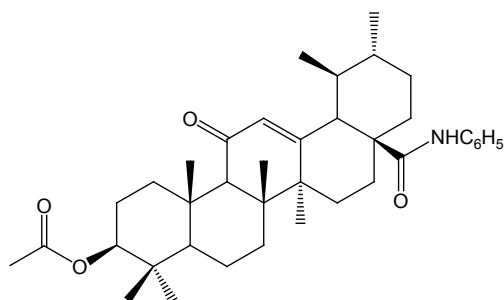
Fu et al. reported that the biotransformation of ursolic acid by the endophytic fungus *Ustilago isabellina* introduced a number of important structural changes. During the study, it was found that the double bond of ursolic acid was shifted from the original C-12–C-13 position to the C-11–C-12 position, and a hydroxyl group was introduced at the C-13 carbon atom. As a result, new compounds (**19–21**) were obtained (Fu et al, 2011). In addition, a lactone ring was formed between the C-28 carboxyl group and the C-13 hydroxyl group. These structural changes are an important step in increasing the biological activity of ursane-type triterpenes and obtaining new natural compounds. The authors showed that endophytic fungi can be used not only as metabolite producers, but also as effective biocatalysts in complex structural transformations of natural compounds. This study will increase the possibility of obtaining new bioactive compounds based on ursolic acid and open the way to its use in the pharmaceutical field.



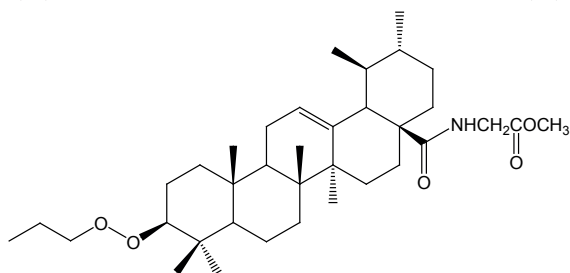
Batra et al. isolated ursolic acid from the holy basil plant (*Ocimum sanctum*) and synthesized three new derivatives based on this compound. These derivatives were obtained by introducing various functional groups at the C-3, C-11 and C-28 positions of ursolic acid and were evaluated for antitumor activity. A series of derivatives (**22–24**) decreased DHFR activity and increased extracellular homocysteine levels. Compound (**23**) showed significant antiproliferative activity in cancer cells (Batra et al, 2013).



(22)



(23)



(24)

Conclusion. Ursolic acid is a biologically active substance belonging to the group of natural triterpenoids. The main functional groups include the hydroxyl group, carboxyl group, and double bond. These groups are chemically active, so ursolic acid is easily subjected to various chemical modifications. Such modifications are aimed at improving its properties such as solubility, bioavailability, and pharmacological activity.

The chemical structure of ursolic acid is amenable to modification at various positions, which in turn allows it to significantly increase its biological activity. The C-3 position is one of the most frequently modified regions. The hydroxyl group at this position easily undergoes various chemical reactions, improving the lipophilicity and biological activity of the molecule. Significant modifications have also been made at the C-28 position. Here, the antitumor activity of the derivatives has been significantly increased by the addition of various fragments. Modification of the double bonds at positions C-12 and C-13 is also of interest. In particular, reactions such as the introduction of a fluorine atom or the formation of a lactone ring enhance the activity of ursolic acid against cancer cells. These changes contribute to cell cycle arrest, apoptosis activation, and cytotoxicity.

Overall, this review has shown that chemical modifications at different positions of the ursolic acid molecule significantly affect its pharmacological properties. The clinical efficacy and safety of the resulting derivatives need to be further evaluated through in vivo and clinical studies. Work in this direction will pave the way for the development of new, effective, and safe drugs based on ursolic acid.

References

- Batra A., Sastry V.G. (2013) Extraction of ursolic acid from *Ocimum sanctum* and synthesis of its novel derivatives: Effects on extracellular homocysteine, dihydrofolate reductase activity and proliferation of HepG2 human hepatoma cells. Pteridines, — 24. — P. 191-199. <https://www.proquest.com/scholarly-journals/extraction-ursolic-acid-i-ocimum-sanctum/docview/2418975374/se-2>. (in English).
- Cargnin S.T., Gnoatto S.B. (2017) Ursolic acid from apple pomace and traditional plants: a valuable triterpenoid with functional properties. Food Chem. — 220. — P. 477-489. (in English).
- Chi K., Wei Z., Wang K., Wu J., Chen W., Jin X., Piao H. (2017) Design, synthesis, and evaluation of novel ursolic acid derivatives as HIF-1 α inhibitors with anticancer potential. Bioorg. Chem. — 75. — P. 157-169. <https://doi.org/10.1016/j.bioorg.2017.09.013>. (in English).
- Fontana G., Bruno M., Notarbartolo M., Labbozzetta M., Poma P., Spinella A., Rosselli S. (2019) Cytotoxicity of oleanolic and ursolic acid derivatives toward hepatocellular carcinoma and evaluation of NF- κ B involvement. Bioorg. Chem. — 90. — 103054 p. DOI: 10.1016/j.bioorg.2019.103054. (in English).
- Fu Sh., Yang J., Cul J., Feng X., Sun D. (2011) Biotransformation of Ursolic Acid by an Endophytic Fungus from Medicinal Plant *Huperzia serrata*. Chem. Pharm. Bull. — 59(9). — P. 1180-1182. <https://doi.org/10.1248/cpb.59.1180>. (in English).
- Gou W., Luo N., Wei H., Wu H., Yu X., Duan Y., et al. (2020) Ursolic acid derivative UA232 evokes apoptosis of lung cancer cells induced by endoplasmic reticulum stress. Pharm Biol. — 58. — P. 707-15. <https://doi.org/10.1080/13880209.2020.1794013>. (in English).
- Gu W., Jin X., Li D., Wang S., Tao X., Chen H. (2017) Design, Synthesis and in vitro anticancer activity of novel quinoline and oxadiazole derivatives of ursolic acid. Bioorg. Med. Chem. Lett. — 27. — P. 4128-4132. <https://doi.org/10.1016/j.bmcl.2017.07.033>. (in English).
- Hu Q., Zhang S., Liu J., Liu Y., Chen X., Wang J. (2025) A review: hepatoprotective compounds and its mechanism of medicine-food homology resources. Agric. Prod. Process. Sto. — 1. — 5 p. <https://doi.org/10.1007/s44462-025-00009-5> (in English).
- Hua S.X., Huang R.Z., Ye M.Y., Pan Y.M., Yao G.Y., Zhang Y., et al. (2015) Design, synthesis and in vitro evaluation of novel ursolic acid derivatives as potential anticancer agents. Eur. J. Med. Chem. — 95. — P. 435-52. <https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2015.03.051>. (in English).
- Jeong H.J., Chang L.C., Kim H.K. (2000) Aromatase inhibitors from *Isodon excisus* var. *coreanus*. Medic. Chem. Natur. Prod. — 23(10). — P. 243-245. (in English).
- Jin X.Y., Chen H., Li D.D., Li A.L., Wang W.Y., Gu W. (2019) Design, synthesis, and anticancer evaluation of novel quinoline derivatives of ursolic acid with hydrazide, oxadiazole, and thiadiazole moieties as potent MEK inhibitors. J. Enzyme Inhib. Med. Chem. — 347. — P. 955-972. <https://doi.org/10.1080/14756366.2019.1605364>. (in English).
- Kalani K., Yadav D.K., Khan F., Srivastava S.K., Suri N. (2012) Pharma-cophore, QSAR, and ADME based semisynthesis and in vitro evaluation of ursolic acid analogs for anticancer activity. J. Mol. Model. — 8. — 3389 p. <https://doi.org/10.1007/s00894-011-1327-6>. (in English).
- Leal A.S., Wang R., Salvador J.A., Jing Y. (2012) Semisynthetic ursolic acid fluorolactone derivatives inhibit growth with induction of p21(waf1) and induce apoptosis with upregulation of NOXA and downregulation of c-FLIP in cancer cells. Chem.Med.Chem. — 7. — P. 1635-46. <https://doi.org/10.1002/cmde.201200282>. (in English).
- Li C., Zhang T., Zhang Q., Liu X., Zou J., Bai X. (2022) Screening of Ursolic Acid Analogs with HIF-1 α and COX-2-Inhibiting Effects. Chem. Nat. Compd. — 58. — P. 882-887. <https://link.springer.com/article/10.1007/s10600-022-03821-8>. (in English).
- Malik J., Mandal S.C. (2025). Pentacyclic triterpenoids: diversity, distribution and their propitious pharmacological potential. Phytochem. Rev. — 24. — P. 4791-4823. <https://doi.org/10.1007/s11101-024-10056-8> (in English).
- Mbaveng A.T., Hamm R., Kuete V. (2014) Toxicol. Surv. Afr. Med. Plants. — P. 557-576. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-800018-2.00019-4>. (in English).
- Szakiel A., Pączkowski C., Pensec F., Bertsch C. (2012) Fruit cuticular waxes as a source of biologically active triterpenoids. Phytochem. Rev. — 11. — P. 263-284. <https://doi.org/10.1007/s11101-012-9241-9>. (in English).

Thien D.D., Thanh Tam N, Thien D.G., Hoang N.T., Van Sung T. (2013) Synthesis and cytotoxic activity of ursolic acid derivatives. *Z Naturforsch B.* — 68. — P. 201–206. <https://doi.org/10.5560/znb.2013-2261>. (in English).

Tian T., Liu X., Jingyang E.L. (2017) Synthesis of novel oleanolic acid and ursolic acid in C-28 position derivatives as potential anticancer agents. *Arch. Pharm. Res.* — 40. — P. 458–468. <https://link.springer.com/article/10.1007/s12272-016-0868-8>. (in English).

Wei X.F., Wang Y.K., Liu R.T., Wu J.-P., Xu K.P. (2024) Review of natural plant-derived *seco*-triterpenoids and derived saponins from 2020 to 2023: new compounds, distributions, diverse activities and structure–activity relationships. *Phytochem. Rev.* — 23. — P. 1117–1166. <https://doi.org/10.1007/s11101-024-09917-z> (in English).

Wu J., Ma S., Wei T.Z.Z., Guo H.W.F., Piao C.Z.H. (2019) Synthesis and Biological Evaluation of Ursolic Acid Derivatives Containing an Aminoguanidine Moiety. *Med. Chem. Res.* — 28. — P. 959–973. <https://link.springer.com/article/10.1007/s00044-019-02349-x>. (in English).

Xu J., Wang X., Zhang H., Yue J., Sun Y., Zhang X., Zhao Y. (2020) Synthesis of triterpenoid derivatives and their anti-tumor and anti-hepatic fibrosis activities. *Nat. Prod. Res.* — 34. — P. 766–772. <https://doi.org/10.1080/14786419.2018.1499642>. (in English).

© R.N. Zhanaliyeva¹, B.S. Imangaliyeva^{*2}, M.A. Zharkinbekov¹,
A.S. Ungarbayeva¹, R. Kozykeyeva³, 2025.

¹Central Asian Innovation University, Shymkent, Kazakhstan;

²Aktobe Regional University named after K. Zhubanov, Aktobe, Kazakhstan;

³Zh. Tashenov University, Shymkent, Kazakhstan.

E-mail: nur_b_70@mail.ru

STUDY OF THE KINETICS AND MECHANISM OF MOLYBDENUM DISULFIDE OXIDATION BY SODIUM HYPOCHLORITE

Zhanaliyeva Rashida — Central Asian Innovation University, Candidate of Chemical Sciences, Professor, Shymkent, Kazakhstan,

E-mail: rashida_zhanalie@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2171-2707>;

Imangaliyeva Bazarkhan — K. Zhubanov Aktobe Regional State University, Candidate of Pedagogical Sciences, Professor, Aktobe, Kazakhstan,

E-mail: nur_70@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3121-3135>;

Zharkinbekov Murat — Central Asian Innovation University, Candidate of Technical Sciences, Shymkent, Kazakhstan,

E-mail: murat.asan.73@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0001-3098-9812>;

Ungarbayeva Aisulu — Central Asian Innovation University, Master's degree, senior lecturer, Shymkent, Kazakhstan,

E-mail: ungاربةeva.aysulu@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0006-5936-0360>;

Kozykeyeva Raikhan — Zh. Tashenov University, Candidate of Technical Science, docent, Shymkent, Kazakhstan,

E-mail: kozykeeva@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5409-3754>.

Abstract. Molybdenum disulphide (MoS_2) is widely used in catalysis, electrochemistry, energy storage devices, and lubricants due to its layered structure and unique properties. This study investigates the kinetics and mechanism of MoS oxidation by sodium hypochlorite (NaClO) solution. It reviews current hydrometallurgical methods for processing molybdenite concentrates. Experimental research was conducted over a range of temperatures (298–338 K), pH values (5.5–9.0), and oxidant concentrations (0.05–0.8 mol/L). Results show that oxidation proceeds via a heterogeneous mechanism and follows pseudo-first-order kinetics with respect to NaClO . Increasing hypochlorite concentration enhances molybdenum extraction from 35% to 85%, while reducing reaction time from 60 to 30 minutes. The highest reaction rate occurs in a slightly alkaline environment (pH 8–9), corresponding to optimal oxidative activity of OCl^- ions. The activation energy, calculated from the Arrhenius equation, is 42–55 kJ/mol,

indicating a moderate energy barrier. The oxidation mechanism involves adsorption of ClO^- ions on MoS_2 surface active centers, followed by the oxidation of sulphur ($\text{S}^{2-} \rightarrow \text{SO}_4^{2-}$) and molybdenum ($\text{Mo}^{4+} \rightarrow \text{Mo}^{6+}$), producing soluble MoO_4^{2-} and SO_4^{2-} ions. Intermediate compounds like MoO_2 and H_2MoO_4 were observed in the early stages. The morphological properties of MoS_2 , including dispersion and lattice defects, significantly impact the reaction rate. These findings advance the understanding of sulphide mineral oxidation and have applications in environmentally safe hydrometallurgical processes for molybdenum-containing materials.

Keywords: molybdenum disulfide, sodium hypochlorite, oxidation, kinetics, activation energy, reaction mechanism

© Р.Н. Жаналиева¹, Б.С. Имангалиева^{*2}, М.А. Жаркинбеков¹,
А.С. Унгарбаева¹, Р. Қозыкеева³, 2025.

¹Орталық Азия инновациялық университет, Шымкент, Қазақстан;

²Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан;

³Ж. Тәшенов атындағы университеті, Шымкент, Қазақстан.

E-mail: nur_b_70@mail.ru

МОЛИБДЕН ДИСУЛЬФИДІН НАТРИЙ ГИПОХЛОРИТІМЕН ТОТЫҚТЫРУДЫҢ КИНЕТИКАСЫ МЕН МЕХАНИЗМІН ЗЕРТТЕУ

Жаналиева Рашида — Орталық Азия инновациялық университеті, химия ғылымдарының кандидаты, профессор, Шымкент, Қазақстан,
E-mail: rashida_zhanalie@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2171-2707>;

Имангалиева Базархан — Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, педагогика ғылымдарының кандидаты, профессор, Ақтөбе, Қазақстан,
E-mail: nur_b_70@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3121-3135>;

Жаркинбеков Мұрат — Орталық Азия инновациялық университеті, техника ғылымдарының кандидаты, Шымкент, Қазақстан,
E-mail: murat.asan.73@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0001-3098-9812>;

Унгарбаева Айсұлу — Орталық Азия инновациялық университет, магистр, аға оқытушы, Шымкент, Қазақстан,
E-mail: ungaraeva.aysulu@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0006-5936-0360>;

Қозыкеева Райхан — Ж. Тәшенов атындағы университеті, Шымкент Қазақстан, техника ғылымдарының кандидаты, доцент, Шымкент, Қазақстан,
E-mail: kozykeeva@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5409-3754>.

Аннотация. Қазіргі уақытта молибден қосылыстары катализ, электрохимия, энергия сақтау құрылғылары және майлау материалдары салаларында кеңінен қолданылады. Әсіресе, молибден дисульфиді (MoS_2) өзінің қабыршақ тәрізді құрылымы мен ерекше физика-химиялық қасиеттерінің арқасында нанотехнология мен материалтануда ерекше назарға ие. Мақалада натрий гипохлориті (NaClO) ерітіндісі мен молибден дисульфидінің (MoS_2) кинетикасы мен тотығу механизміне кешенді зерттеу жүргізілген. Молибденит концентраттарын гидроталлургиялық өңдеудің заманауи әдістеріне әдеби шолу жасалды. Эксперименттік зерттеулер кең температура диапазонында (298–338 К), рН (5,5–9,0) және тотықтырғыш

концентрациясында (0,05–0,8 моль/л) орындалды. Процесс гетерогенді типтегі механизм бойынша жүретіні және NaClO бойынша псевдо-бірінші ретті кинетикаға бағынатыны анықталды. Гипохлорит концентрациясының жоғарылауымен молибденнің экстракция дәрежесі 35%-дан 85%-ға дейін артады, ал реакция уақыты 60-тан 30 минутқа дейін қысқарады. Реакцияның ең жоғары жылдамдығы әлсіз сілтілі ортада (pH 8-9) байқалады, бұл OCl⁻ иондарының максималды тотығу белсенділігімен байланысты. Аррениус теңдеуі бойынша активтендіру энергиясын есептеу 42-55 кДж/моль мәндерін көрсетті, бұл процестің қалыпты энергетикалық кедергісі мен химиялық бақылауын көрсетеді. MoS₂ бетінің белсенді орталықтарында ClO⁻ иондарының адсорбциясын, күкірттің (S²⁻ → SO₄²⁻) және молибденнің (Mo⁴⁺ → Mo⁶⁺) еритін MoO₄²⁻ және SO₄²⁻ иондарының түзілуін қамтитын ықтимал тотығу механизмі ұсынылған. MoO₂ және H₂MoO₄ аралық қосылыстарының түзілуі расталды, әсіресе реакцияның алғашқы кезеңдерінде. MoS₂ морфологиялық сипаттамалары (дисперсия, кристалдық тордың ақаулары) жүйенің реактивтілігін арттыра отырып, өзара әрекеттесу жылдамдығына айтарлықтай әсер етеді. Нәтижелер сульфидті минералдардың тотығу механизмдері туралы түсініктерді кеңейтеді және құрамында MoS₂ бар молибден бар концентраттарды, катализаторларды және қалдықтарды өңдеудің тиімді және экологиялық қауіпсіз гидрометаллургиялық технологияларын әзірлеуде пайдаланылуы мүмкін.

Түйін сөздер: молибден дисульфиді, натрий гипохлориті, тотығу, кинетика, активтену энергиясы, реакция механизмі

© Р.Н. Жаналиева¹, Б.С. Имангалиева^{*2}, М.А. Жаркинбеков¹,
А.С. Унгарбаева¹, С. Бердібекова¹, 2025.

¹Центрально-Азиатский инновационный университет, Шымкент, Казахстан;

²Актюбинский региональный университет имени К. Жубанова,
Актобе, Казахстан;

³Университет имени Ж. Ташенова, Шымкент, Казахстан.

E-mail: nur_b_70@mail.ru

ИЗУЧЕНИЕ КИНЕТИКИ И МЕХАНИЗМА ОКИСЛЕНИЯ ДИСУЛЬФИДА МОЛИБДЕНА ГИПОХЛОРИТОМ НАТРИЯ

Жаналиева Рашида — Центрально-Азиатский инновационный университет, кандидат химических наук, профессор, Шымкент, Казахстан,

E-mail: rashida_zhanalie@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2171-2707>;

Имангалиева Базархан — Актюбинский региональный университет им. К. Жубанова, кандидат педагогических наук, профессор, Актобе, Казахстан,

E-mail: nur_b_70@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3121-3135>;

Жаркинбеков Мурат — Центрально-Азиатский инновационный университет, кандидат технических наук, Шымкент, Казахстан,

E-mail: murat.asan.73@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0001-3098-9812>;

Унгарбаева Айсулу — Центрально-Азиатский инновационный университет, магистр, старший преподаватель, Шымкент, Казахстан,

E-mail: ungarbaeva.aysulu@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0006-5936-0360>;

Козыкеева Райхан — Университет имени Ж.Тәшенова, Казахстан, кандидат технических наук, доцент, Шымкент, Казахстан.

E-mail: kozykееva@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5409-3754>.

Аннотация. В настоящее время соединения молибдена широко используются в области катализа, электрохимии, устройств хранения энергии и смазочных материалов. В частности, дисульфид молибдена (MoS_2) привлекает особое внимание в нанотехнологиях и материаловедении благодаря своей слоистой структуре и уникальным физико-химическим свойствам. В статье проведено комплексное исследование кинетики и механизма окисления дисульфида молибдена (MoS_2) раствором гипохлорита натрия (NaClO). Проведён литературный обзор современных методов гидрометаллургической переработки молибденитовых концентратов. Экспериментальные исследования выполнены в широком диапазоне температур (298–338 К), pH (5,5–9,0) и концентраций окислителя (0,05–0,8 моль/л). Установлено, что процесс протекает по гетерогенному механизму и подчиняется кинетике псевдо-первого порядка по NaClO . При увеличении концентрации гипохлорита степень извлечения молибдена возрастает с 35 % до 85 %, а время реакции сокращается с 60 до 30 минут. Наиболее высокая скорость реакции наблюдается в слабощелочной среде (pH 8–9), что связано с максимальной окислительной активностью ионов OCl^- . Расчёт активационной энергии по уравнению Аррениуса показал значения 42–55 кДж/моль, что указывает на умеренный энергетический барьер и химический контроль процесса. Предложен вероятный механизм окисления, включающий адсорбцию ионов ClO^- на активных центрах поверхности MoS_2 , последовательное окисление серы ($\text{S}^{2-} \rightarrow \text{SO}_4^{2-}$) и молибдена ($\text{Mo}^{4+} \rightarrow \text{Mo}^{6+}$) с образованием растворимых ионов MoO_4^{2-} и SO_4^{2-} . Подтверждено образование промежуточных соединений MoO_2 и H_2MoO_4 , особенно на начальных стадиях процесса. Морфологические характеристики MoS_2 (дисперсность, дефекты кристаллической решётки) оказывают существенное влияние на скорость взаимодействия, повышая реакционную способность системы. Полученные результаты расширяют представления о механизмах окисления сульфидных минералов и могут быть использованы при разработке эффективных и экологически безопасных гидрометаллургических технологий переработки молибденсодержащих концентратов, катализаторов и отходов, содержащих MoS_2 .

Ключевые слова: дисульфид молибдена, гипохлорит натрия, окисление, кинетика, энергия активации, механизм реакции

Введение. Среди природных соединений молибдена наибольшее распространение получил дисульфид, характеризующийся химической формулой MoS_2 и слоистой структурой.

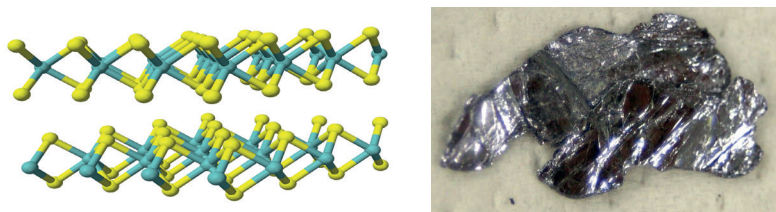


Рисунок 1 - Дисульфид молибдена

Среди многочисленных соединений молибдена, встречающихся в природе, дисульфид молибдена (MoS_2) занимает особое место благодаря своей химической устойчивости и физико-химическим свойствам. Он представляет собой неорганическое соединение с характерной слоистой структурой, где атомы молибдена располагаются между двумя слоями серы. Благодаря такой конфигурации MoS_2 находит широкое применение в качестве твёрдого смазочного материала, компонента антифрикционных паст, высокотемпературных и многоцелевых смазок.

MoS_2 устойчив к воздействию кислот, щелочей и органических растворителей, за исключением «царской водки» и концентрированной горячей серной кислоты. При этом на поверхности он образует прочную плёнку, способную выдерживать высокие нагрузки и температуры. Благодаря высокой температуре плавления (1185°C) и плотности (4.8 г/см^3 при 14°C), материал остаётся стабильным в агрессивных условиях.

С практической точки зрения, изучение процессов окисления дисульфида молибдена представляет интерес в различных технологических направлениях: от переработки молибденсодержащих руд до обезвреживания промышленных отходов. Растворы гипохлорита натрия (NaClO) проявляют высокую эффективность как окислители, способные переводить малорастворимый MoS_2 в растворимую форму, включая молибдат- и сульфат-ионы. В связи с этим актуальной задачей является изучение кинетики и механизма данных окислительных превращений в условиях, имитирующих реальные процессы гидрометаллургической переработки и очистки сточных вод.

Цель исследования — установление кинетических закономерностей и механизмов взаимодействия MoS_2 с NaClO в водной среде при различных температурах, pH и концентрациях окислителя.

Литературный обзор. Окисление сульфидных минералов, в том числе дисульфида молибдена, является важным этапом в процессах извлечения металлов и очистки сточных вод. На сегодняшний день проведено немало исследований, посвящённых взаимодействию MoS_2 с различными окислителями. Особый интерес вызывает гипохлорит натрия (NaClO), который обладает рядом преимуществ: высокой окислительной способностью, относительной экологической безопасностью и доступностью.

MoS_2 — типичный представитель переходных металлдихалькогенидов, обладающий слоистой структурой, высокой химической устойчивостью и

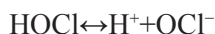
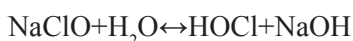
полупроводниковыми свойствами. Согласно литературным источникам (Gulyaev, 2004), при обработке MoS_2 раствором NaClO происходит разрушение его слоистой структуры с образованием растворимых продуктов — молибдата (MoO_4^{2-}) и сульфаты (SO_4^{2-}).

Окисление дисульфида молибдена в растворах гипохлорита натрия представляет собой сложный гетерогенный процесс, включающий химические и диффузионные стадии. Механизмы и кинетика окисления сульфидных минералов гипохлоритом исследованы в ряде работ. Гипохлорит способен окислять как серу до шестой степени окисления, так и молибден — до Mo^{6+} , проходя через промежуточную стадию Mo^{5+} (Kulikova, Nikitenko, & Gromov, 2020). При этом реакционная способность системы во многом определяется такими параметрами, как кислотность среды, температура и концентрация активного хлора.

Waseda and Suito (1993) предложили ступенчатую модель окисления, где ионы ClO^- атакуют как серные, так и металлические центры, способствуя образованию ионов SO_4^{2-} и MoO_4^{2-} . В данном случае гипохлорит действует как двухфункциональный окислитель: он атакует как атомы серы, превращая их в сульфаты, так и молибден, который переходит в растворимую форму молибдата. Интерес представляют исследования, посвящённые влиянию морфологии и дефектности MoS_2 . Большую роль в реакции играет микроструктура материала: дефекты кристаллической решётки, границы зёрен и высокая дисперсность MoS_2 ускоряют процесс (Bessonov & Fedorov, 2017). Особенно выраженное влияние наблюдается при использовании наноструктурированных форм соединения.

Также установлено, что на скорость реакции существенное влияние оказывает pH среды. При нейтральных и слабощелочных значениях pH (7–9) активная форма гипохлорита — ион HOCl — проявляет максимальную окислительную активность (Lutsik & Sobolev, 2009). Химическое равновесие в растворе описывается следующими реакциями:

В водном растворе NaClO :



При pH 6–9 преобладает HOCl , обладающий высокой окислительной способностью. Окисление MoS_2 протекает в несколько стадий с образованием молибдата и сульфатов. Совокупный процесс окисления MoS_2 можно представить упрощённым уравнением:



Продукты реакции: молибдат-ион (MoO_4^{2-}), сульфат-ион (SO_4^{2-}), ионы натрия и хлорид.

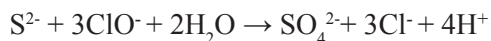
Механизм включает стадии адсорбции ионов ClO^- на активных центрах,

их взаимодействие с серой и молибденом, а также последующее образование растворимых ионов Mo(VI) и SO_4^{2-} . Предполагается участие промежуточных оксидов MoO_2 и H_2MoO_4 .

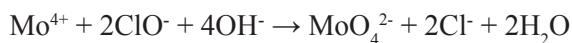
Окисление дисульфида молибдена (MoS_2) раствором гипохлорита натрия (NaClO) является многостадийным гетерогенным процессом, включающим адсорбцию, электрохимическое окисление и десорбцию продуктов. Реакции происходят на границе фаз и сопровождаются разрушением слоистой структуры MoS_2 .

1. Адсорбция гипохлорит-ионов на активных центрах MoS_2
 $\text{MoS}_2(\text{s}) + \text{ClO}^- \rightleftharpoons \text{MoS}_2 \cdot \text{ClO}^-$

2. Окисление серы в составе MoS_2 :



3. Окисление молибдена ($\text{Mo}^{4+} \rightarrow \text{Mo}^{6+}$):



4. Совокупная реакция окисления:



Кинетика и механизм этих процессов были исследованы в ряде научных работ. По данным Rasulova et al. (2020), реакция следует кинетике псевдопервого порядка по NaClO и имеет активационную энергию порядка 33–40 кДж/моль. При разбавленных растворах возможно замедление процесса за счёт перехода от химического контроля к внутридифузионному. Также в исследованиях Waseda и Suito отмечается значительное влияние pH и температуры на скорость окисления.

Таким образом, окисление MoS_2 гипохлоритом – это многостадийный процесс, протекающий с образованием растворимых молибдатов и сульфатов в зависимости от условий среды. Исследования также поднимают вопросы возможности практического применения данного окислительного процесса в технологиях утилизации отработанных катализаторов и смазочных материалов, содержащих MoS_2 (Yang & Liu, 2014). В обзоре Cotton and Wilkinson (1999) подчёркивается высокая термодинамическая способность ClO^- к разрушению сульфидных связей, что дополнительно подтверждает перспективность данного подхода.

Таким образом, по данным литературы, NaClO может рассматриваться как универсальный окислитель для обработки MoS_2 , однако ряд вопросов, касающихся молекулярного механизма и стадии образования промежуточных продуктов, требует дальнейшего изучения.

Условия и методы исследования. Для проведения экспериментов использовались следующие химические реагенты:

Дисульфид молибдена (MoS_2) — порошкообразный образец аналитической чистоты с размером частиц до 75 мкм. Перед использованием вещество было высушено в сушильном шкафу при температуре 105 °C в течение 2 часов.

Гипохлорит натрия (NaClO) — водный раствор с концентрацией активного

хлора 10–12%. Для экспериментов раствор разводился дистиллированной водой до требуемой концентрации (от 0,05 до 0,8 моль/л).

Буферные системы: фосфатный (pH 7), гидрокарбонатный (pH 8) и боратный (pH 9) растворы были использованы для поддержания стабильного значения pH в ходе реакции.

Дистиллированная вода применялась для приготовления всех растворов и промывки оборудования.

Образцы MoS_2 предварительно измельчались до среднего размера частиц 20–50 мкм и сушились при температуре 105 °C в течение 2 часов. Реакции проводились в стеклянной термостатируемой ёмкости объёмом 250 мл с использованием магнитной мешалки и подогрева. Контроль pH среды осуществлялся с помощью иономера модели «pH-150M», оснащённого комбинированным стеклянным электродом. Анализ ионов молибдена в растворе проводился методом УФ-спектрофотометрии на приборе Shimadzu UV-1800 при длине волны 240–250 нм. Отбор и подготовка проб включали фильтрацию через мембранные фильтры и добавление раствора аскорбиновой кислоты для остановки реакции.

Методика проведения эксперимента В термостатируемый реактор вносили 100 мл предварительно приготовленного буферного раствора с заданным значением pH и доводили его до требуемой температуры (в диапазоне 25–65 °C). Затем добавляли навеску MoS_2 (0,5 г) и после перемешивания — соответствующий объём раствора NaClO . Реакционную смесь перемешивали на протяжении всего эксперимента. Через заданные промежутки времени (0, 5, 10, 15 и 20 минут) отбирали аликвоты объёмом по 5 мл. Реакцию останавливали путём добавления восстановителя — аскорбиновой кислоты. Образцы фильтровали и подвергали спектрофотометрическому анализу на содержание MoO_4^{2-} .

Скорость реакции определялась по изменению концентрации молибдата во времени:

$$v = \Delta[\text{MoO}_4^{2-}] / \Delta t$$

где:

v — скорость химической реакции (в данном случае — окисления MoS_2)

$\Delta[\text{MoO}_4^{2-}]$ — изменение концентрации молибдат-ионов (MoO_4^{2-}) за определённый промежуток времени,

Δt — соответствующий интервал времени, за который происходит это изменение концентрации.

Изменение концентрации молибдат-ионов (MoO_4^{2-}) характеризуется величиной $\Delta[\text{MoO}_4^{2-}]$, показывающей, насколько изменилась концентрация молибдата в ходе реакции. Эта величина вычисляется как разность между конечной и начальной концентрациями по формуле:

$$\Delta[\text{MoO}_4^{2-}] = [\text{MoO}_4^{2-}]_{\text{кон}} - [\text{MoO}_4^{2-}]_{\text{н}}$$

$[\text{MoO}_4^{2-}]_{\text{н}}$ — начальная концентрация молибдат-ионов до начала реакции, $[\text{MoO}_4^{2-}]_{\text{кон}}$ — концентрация молибдат-ионов после определённого времени реакции.

Положительное значение $\Delta[\text{MoO}_4^{2-}]$ свидетельствует об увеличении концентрации ионов в растворе, а отрицательное — об их уменьшении, что указывает на протекание реакции с участием молибдата.

Представленные кинетические данные подтверждают, что скорость реакции увеличивается с ростом температуры и концентрации NaClO , что согласуется с термодинамическими закономерностями окислительно-восстановительных процессов.

Для определения порядка реакции по гипохлориту строили логарифмическую зависимость:

$$\ln v = \ln k + n \ln [\text{NaClO}]$$

Активационная энергия рассчитывалась по уравнению Аррениуса на основе температурной зависимости константы скорости:

$$\ln k = \ln A - \frac{E_a}{RT}$$

Скорость реакции зависит от температуры, концентрации гипохлорита, pH среды и размера частиц MoS_2 . Ниже приведена таблица с экспериментальными условиями и соответствующий график зависимости степени извлечения молибдена от концентрации гипохлорита.

Таблица 1 – Условия проведения экспериментов

№	Конц. NaClO (моль/л)	Температура (К)	pH среды	Время реакции (мин)	Степень извлечения Mo (%)
1	0.1	298	5.5	60	35
2	0.2	308	6.0	45	48
3	0.4	318	7.0	40	62
4	0.6	328	8.0	35	74
5	0.8	338	9.0	30	85

Скорость реакции при различных температурах позволила построить график Аррениуса (рисунок 2).

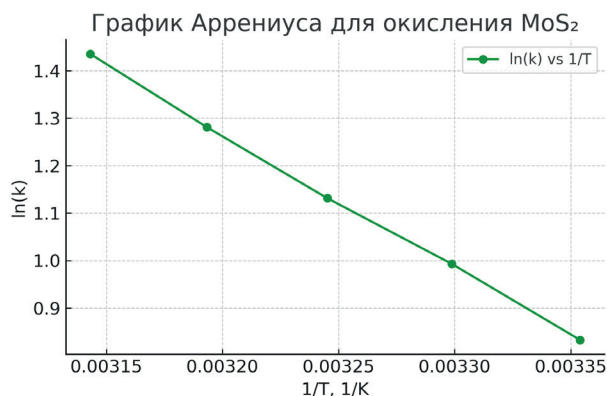


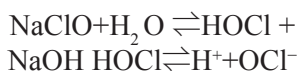
Рисунок 2 – График Аррениуса для окисления MoS_2

Результаты исследований и их обсуждение. Согласно экспериментальным наблюдениям, увеличение содержания NaClO в растворе оказывает заметное влияние на интенсивность протекания процесса окисления MoS_2 . При повышении концентрации гипохлорита от 0,1 до 0,8 моль/л степень извлечения молибдена в раствор увеличивалась с 35 до 85%, при этом общее время реакции сокращается с 60 до 30 минут. Логарифмический анализ кинетических данных показал линейную зависимость между $\ln v$ и $\ln [\text{NaClO}]$, что свидетельствует о первом порядке реакции по гипохлориту. Это подтверждает гипотезу о том, что гипохлорит-ион участвует в элементарном акте окисления молекулы или её активного центра на поверхности MoS_2 .

При проведении опытов в диапазоне температур 298–338 К наблюдалось резкое ускорение окислительного процесса с ростом температуры. Полученные данные использованы для построения графика Аррениуса. По его наклону была рассчитана энергия активации, значения которой варьировались в пределах 42–55 кДж/моль в зависимости от pH среды и концентрации реагентов. Данный уровень энергетического барьера указывает на умеренно активируемый процесс, что типично для гетерогенных окислительных реакций.

Реакционная способность системы также существенно зависела от кислотно-щелочных условий. Наибольшая скорость окисления MoS_2 фиксировалась при pH 8–9, что согласуется с максимальной активностью ионов OCl^- . При нейтральном и слабощелочном pH гипохлорит представлен преимущественно в форме HOCl , обладающей высокой электрофильностью и способной эффективно атаковать сульфидные и металлические центры.

Химическое равновесие гипохлорита натрия в водной среде описывается следующими уравнениями:



Экспериментально установлено, что окисление MoS_2 в щелочной среде гипохлоритом натрия приводит к образованию растворимых ионов MoO_4^{2-} и SO_4^{2-} .

На основе результатов анализа предложено обобщённое стехиометрическое уравнение окисления:

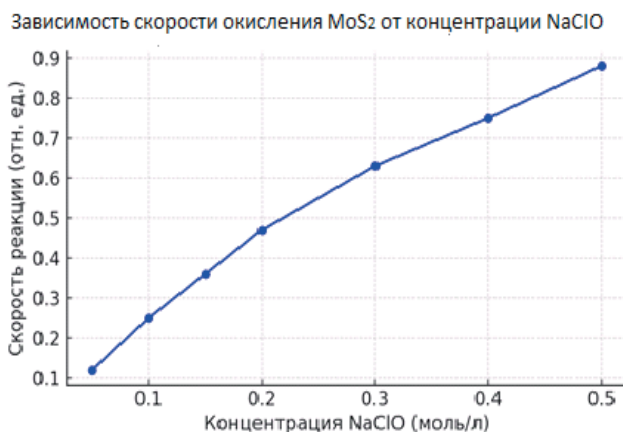


Спектрофотометрическим методом подтверждено образование в растворе ионов молибдата и сульфата как основных продуктов. Также возможно образование промежуточных соединений, таких как MoO_2 и H_2MoO_4 , особенно на ранних стадиях взаимодействия

С увеличением концентрации NaClO скорость реакции возрастает линейно. График зависимости (рисунок 3) подтверждает первый порядок по NaClO ($n \approx 1.0$):

Таблица 2 - Кинетические характеристики окисления MoS_2 в растворе NaClO

№ опыта	$[\text{NaClO}]$, моль/л	Температура, °C	Скорость реакции, мкмоль/(л·мин)	Порядок по NaClO
1	0.05	25	1.2	0.96
2	0.10	25	2.3	0.98
3	0.20	25	4.6	1.01
4	0.50	25	11.5	1.03
5	0.10	35	3.1	0.99

Рисунок 3 – График зависимости скорости реакции от концентрации NaClO .

Построенные графики показывают линейную зависимость скорости реакции от концентрации гипохлорита, подтверждая порядок реакции, близкий к первому.

Полученные результаты свидетельствуют о гетерогенном механизме, включающем следующие ключевые этапы:

Адсорбция гипохлорит-ионов на активных участках поверхности MoS_2 ;

Окисление серы с переходом из степени окисления -2 в $+6$;

Окисление молибдена от $+4$ до $+6$ с образованием ионов MoO_4^{2-}

Десорбция продуктов и дальнейшее разрушение слоистой решётки.

Также подтверждена важность морфологических характеристик MoS_2 : высокая дисперсность и наличие дефектов в кристаллической структуре значительно ускоряют реакцию. В наноструктурированных образцах наблюдается повышенная скорость взаимодействия, что связано с увеличением удельной поверхности и числа реакционно-активных центров.

Заключение. Проведённые эксперименты позволили установить основные закономерности окисления дисульфида молибдена раствором гипохлорита натрия. Реакция протекает по многостадийному механизму и включает последовательные процессы: адсорбцию окислителя, окисление серы и молибдена, а также переход продуктов в раствор. Установлено, что скорость реакции увеличивается с ростом температуры и концентрации NaClO , при этом наиболее благоприятные условия достигаются в нейтральной и слабощелочной среде (pH 8-9).

Кинетический анализ показал, что процесс подчиняется кинетике псевдо-первого порядка по гипохлориту. Расчёт активационной энергии, выполненный на основе температурных зависимостей, дал значения в пределах 42-55 кДж/моль, что указывает на умеренный энергетический барьер. На основании анализа полученных данных предложен возможный механизм взаимодействия, включающий образование промежуточных соединений - MoO_2 и H_2MoO_4 . Также отмечено влияние морфологических характеристик материала: наличие дефектов и высокая удельная поверхность способствуют интенсификации процесса.

Полученные результаты имеют практическую значимость для разработки гидрометаллургических технологий, направленных на извлечение молибдена из концентратов и вторичных источников, а также для оптимизации процессов обезвреживания сульфидных загрязнителей в водных системах.

Литература

- Bessonov A.A., Fedorov S.V. (2017) Surface reactivity of layered MoS_2 . Russian Journal of Physical Chemistry, — Vol. 91, No. 5. — P. 879–885.
- Chou S.S., et al. (2015) Controlling the metal to semiconductor transition of MoS_2 and WS_2 . Journal of the American Chemical Society (JACS).
- Cotton F.A., Wilkinson G. (1999) Advanced Inorganic Chemistry. Wiley. — 1376 p.
- Lutsik V.I., Sobolev A.E. (2009) Kinetics of Hydrolytic and Oxidative Dissolution of Metal Sulfides. Tver (Russia): TSTU. — 140 p.
- Rasooli A., Safari R., Mohammadi M. (2016) Kinetics and mechanism of sulfide mineral oxidation by NaClO . Hydrometallurgy, — Vol. 160. — P. 76–83.
- Safarov E., Rasulova S., Guro V., Adinaev K., Rakhmatkarieva F., Ruziyev U., & Abdullaev F. (2025) Comparative kinetics of molybdenum disulfide oxidation in sodium hypochlorite and nitric acid solutions. E3S Web of Conferences, 627, 03001. <https://doi.org/10.1051/e3sconf/202562703001>
- TI 00193950-71-04-013:2019 to replace TI 12810-5-1:2008. Technological Instructions for the Production of Molybdenum Salts (Ammonium Tetramolybdate and Paramolybdate). Tashkent: Uzstandard Publishing House, 2019.
- Waseda Y., Suito H. (1993) Oxidation of MoS_2 and WS_2 with sodium hypochlorite. Journal of Applied Electrochemistry.
- Yang D., Liu Z. (2014) Oxidation mechanisms of transition metal dichalcogenides. ACS Nano, — Vol. 8, No. 10. — P. 10245–10253.
- Zhang W., et al. (2016) Electrochemical oxidation of MoS_2 thin films. Electrochimica Acta, — Vol. 209. — P. 290–297.
- Гуляев А.П. (2004) Гидрометаллургия тугоплавких металлов. — М.: Металлургия. — 280 с.
- Куликова А.В., Никитенко С.И., Громов Д.А. (2020) Кинетика окислительного растворения MoS_2 в растворе гипохлорита натрия. Гидрометаллургия, — Т. 196. — С. 105383.
- Рассулова С.Н., Гуро В.П., Сафаров Е.Т. и др. (2020) Metals recovery from molybdenite concentrate by electrooxidation and leaching. IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering, — 848. — P. 012076. <https://doi.org/10.1088/1757-899X/848/1/012076>
- Шерешевский И.А. (1980) Основы химии и технологии редких металлов. — М.: Наука. — 376 с.
- Шугаев К.В., Берман Г.П. (1980) Кинетика гетерогенных реакций. — М.: Наука. — 312 с.

References

- Bessonov A.A. & Fedorov S.V. (2017) Surface reactivity of layered MoS_2 . Russian Journal of Physical Chemistry, 91(5). — P. 879–885 (in English).
- Chou S. S., et al. (2015) Controlling the metal to semiconductor transition of MoS_2 and WS_2 . Journal of the American Chemical Society, 137(15). — P. 5087–5092 (in English).
- Cotton F.A., & Wilkinson G. (1999) Advanced inorganic chemistry (6th ed.). Wiley (in English).

- Gulyaev A.P. (2004) *Gidrometallurgiya tugoplavkikh metallov* [Hydrometallurgy of refractory metals]. Moscow: Metallurgiya (in Russian).
- Kulikova A. V., Nikitenko S. I., & Gromov D. A. (2020) Kinetika okislitel'nogo rastvoreniya MoS_2 v rastvore gipokhlrita natriya [Kinetics of oxidative dissolution of MoS_2 in sodium hypochlorite solution]. *Gidrometallurgiya* [Hydrometallurgy], 196, Article 105383 (in Russian).
- Lutsik V.I. & Sobolev A.E. (2009) Kinetics of hydrolytic and oxidative dissolution of metal sulfides. Tver, Russia: TSTU (in English).
- Rasooli A., Safari R., & Mohammadi M. (2016) Kinetics and mechanism of sulfide mineral oxidation by NaClO . *Hydrometallurgy*, 160. — P. 76–83 (in English).
- Rasulova S.N., Guro V.P., Safarov E.T., et al. (2020) Metals recovery from molybdenite concentrate by electrooxidation and leaching. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 848. — P. 012076. <https://doi.org/10.1088/1757-899X/848/1/012076> (in English).
- Safarov E., Rasulova S., Guro V., Adinaev K., Rakhmatkariyeva F., Ruziyev U., & Abdullaev F. (2025) Comparative kinetics of molybdenum disulfide oxidation in sodium hypochlorite and nitric acid solutions. *E3S Web of Conferences*, 627, 03001. <https://doi.org/10.1051/e3sconf/202562703001> (in English).
- Shereshevsky I. A. (1980) *Osnovy khimii i tekhnologii redkikh metallov* [Fundamentals of chemistry and technology of rare metals], Moscow: Nauka (In Russian).
- Shugaev K. V. & Berman G. P. (1980) Kinetika geterogennykh reaktsii [Kinetics of heterogeneous reactions]. Moscow: Nauka (in Russian).
- Technological Instructions TI 00193950-71-04-013:2019. (2019) Technological instructions for the production of molybdenum salts (ammonium tetramolybdate and paramolybdate). Tashkent: Uzstandard Publishing House (in English).
- Waseda Y. & Suito H. (1993) Oxidation of MoS_2 and WS_2 with sodium hypochlorite. *Journal of Applied Electrochemistry*, 23(8), — P. 807–812 (in English).
- Yang D. & Liu Z. (2014) Oxidation mechanisms of transition metal dichalcogenides. *ACS Nano*, 8(10). — P. 10245–10253 (in English).
- Zhang W., et al. (2016) Electrochemical oxidation of MoS_2 thin films. *Electrochimica Acta*, 209. — P. 290–297 (in English).

© O.S. Ilyassova^{1,2}, M. Zhumabek^{1*}, G.N. Kaumenova¹, R.S. Orazbekova^{1,2},
B.S. Biyekeyev³, 2025.

¹JSC “D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry”,
Almaty, Kazakhstan;

²Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan;

³Kazakh-British Technical University, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: manapkhan_86@mail.ru

HYDROGENATION OF CARBON DIOXIDE ON Ni-Co/ZrO₂ CATALYSTS FOR CONVERSION INTO SYNTHETIC FUEL COMPONENTS

Ilyassova Oral — PhD student, Farabi University, Engineer of the Laboratory of Applied Research, JSC “D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry”, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: ilyassova.97@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8609-6378>;

Zhumabek Manapkhan — PhD, Senior Researcher of the Laboratory of Oxidative Catalysis, JSC “D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry”, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: manapkhan_86@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2026-0577>;

Kaumenova Gulnar — PhD, Junior Researcher of the Laboratory of Oxidative Catalysis, JSC “D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry”, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: kaumenova.gulnar@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6448-6607>;

Orazbekova Raushan — PhD student, Farabi University, Lead Engineer of the Laboratory of Oxidative Catalysis, JSC “D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry”, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: raushanorazbekova14@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-2704-5148>;

Biyekeyev Bakbergen — Bachelor student, Kazakh-British Technical University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: biekeevbakbergen7@gmail.com.

Abstract. Catalytic hydrogenation of carbon dioxide is considered as a key process for the transition to a carbon-neutral economy, allowing the transformation of the main greenhouse gas into valuable chemical raw materials and components of synthetic fuels. The development of highly effective catalysts active under mild conditions is an urgent scientific and practical task. The aim of the work is the synthesis of composite catalysts based on nickel, cobalt and zirconium oxides, using the solution combustion method, for the selective hydrogenation of CO₂ to methane and a comprehensive study of the catalytic properties. The activity of the catalysts obtained from the initial mixture of Ni(NO₃)₂ - Co(NO₃)₂ - ZrO(NO₃)₂·xH₂O + urea of various compositions was studied in a flow reactor at temperatures ranging from 200 to 400° C. It was found that the optimal conditions for obtaining methane are: CO₂ conversion of more than 93,6%, CH₄ selectivity of 97%, H₂ : CO₂ = 4 : 1, T = 300°C, space velocity of 24,000

h⁻¹. The comprehensive characteristics of samples included X-ray phase analysis and scanning electron microscopy. X-ray phase analysis confirmed the formation of target oxide phases. High indicators are due to the synergistic effect between nickel, cobalt and zirconium oxides, as well as structural features formed due to the synthesis method. Research on Ni-Co/ZrO₂ catalysts for CO₂ hydrogenation is a timely and vital endeavor with clear environmental, economic, and strategic energy benefits. Innovation in this field is essential for turning the vision of a circular carbon economy into a practical reality.

Keywords: carbon dioxide, catalytic hydrogenation, Ni-Co/ZrO₂ catalyst, solution combustion method, methane

Financing. This research was funded by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (Grant No. AP27508537).

© О.С. Ильясова^{1,2}, М. Жумабек^{1*}, Г.Н. Кауменова¹, Р.С. Оразбекова^{1,2},
Б.С. Биекеев³, 2025.

¹ «Д.В. Сокольский атындағы Жанармай, катализ және электрохимия институты»
АҚ, Алматы, Қазақстан;

² Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан;

³ Қазақстан-Британ техникалық университеті, Алматы, Қазақстан.

E-mail: manapkhan_86@mail.ru

КӨМІРҚЫШҚЫЛ ГАЗЫН СИНТЕТИКАЛЫҚ ОТЫН КОМПОНЕНТТЕРІНЕ АЙНАЛДЫРУ ҮШІН Ni-Co/ZrO₂ КАТАЛИЗАТОРЛАРЫНДА ГИДРЛЕУ

Ильясова Орал — PhD докторанты, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Қолданбалы зерттеулер зертханасының инженері, «Д.В. Сокольский атындағы Жанармай, катализ және электрохимия институты» АҚ, Алматы, Қазақстан,

E-mail: ilyassova.97@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8609-6378>;

Жумабек Манапхан — PhD, Тотығу катализі зертханасының аға ғылыми қызметкері, «Д.В. Сокольский атындағы Жанармай, катализ және электрохимия институты» АҚ, Алматы, Қазақстан,

E-mail: manapkhan_86@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2026-0577>;

Кауменова Гулнар — PhD, Тотығу катализі зертханасының кіші ғылыми қызметкері, «Д.В. Сокольский атындағы Жанармай, катализ және электрохимия институты» АҚ, Алматы, Қазақстан,

E-mail: kaumenova.gulnar@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6448-6607>;

Оразбекова Раушан — PhD докторанты, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, тотығу катализі зертханасының жетекші инженері, «Д.В. Сокольский атындағы Жанармай, катализ және электрохимия институты» АҚ, Алматы, Қазақстан,

E-mail: raushanorazbekova14@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-2704-5148>;

Биекеев Бакберген — Бакалавр студенті, Қазақстан-Британ техникалық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: biekeevbakbergen7@gmail.com.

Аннотация. Көмірқышқыл газының каталитикалық гидрленуі негізгі парниктік газды бағалы химиялық шикізатқа және синтетикалық отынның компоненттеріне айналдыруға мүмкіндік беретін көміртекті бейтарап экономикаға көшудің негізгі процесі болып саналады. Жеңіл жағдайларда белсенді, жоғары тиімді катализаторларды жасау өзекті ғылыми және практикалық міндет болып табылады. Жұмыстың мақсаты — көмірқышқыл газын метанға селективті гидрлеу үшін ерітіндіде жану әдісін қолдана отырып, никель, кобальт және цирконий оксидтері негізіндегі композитті катализаторларды синтездеу және каталитикалық қасиеттерін кешенді зерттеу. Әр түрлі пайыздық құрамды $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 - \text{Co}(\text{NO}_3)_2 - \text{ZrO}(\text{NO}_3)_2 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ + мочеви́на бастапқы қоспасынан алынған катализаторлардың белсенділігі 200 -400° С температура диапазонында ағынды реакторда зерттелді. Метанды өндірудің оңтайлы шарттары: CO_2 конверсиясы 93,6% - дан жоғары, CH_4 селективтілігі 97%, $\text{H}_2 : \text{CO}_2 = 4 : 1$, $T = 300^\circ\text{C}$, көлемдік жылдамдығы 24,000 сағ^{-1} екені анықталды. Үлгілердің кешенді сипаттамасы рентгендік фазалық талдауды, сканерлеуші электронды микроскопияны қамтиды. Рентгендік фазалық талдау мақсатты оксид фазаларының түзілуін растады. Алынған жоғары мәндер никель, кобальт және цирконий оксидтері арасындағы синергиялық әсерге, сондай-ақ синтез әдісімен түзілген құрылымдық ерекшеліктерге байланысты. Көмірқышқыл газын гидрлеуге арналған, ерітіндіде жану әдісімен дайындалған Ni-Co/ZrO_2 композитті катализаторларын зерттеу экологиялық, экономикалық және стратегиялық энергетикалық пайдасы бар өзекті және маңызды жұмыс болып табылады. Осы саладағы инновациялар айналмалы көміртекті экономика тұжырымдамасын практикалық шындыққа айналдыру үшін аса қажет болып табылады.

Түйін сөздер: көмірқышқыл газы, каталитикалық гидрлеу, Ni-Co/ZrO_2 катализаторы, ерітіндіде жану әдісі, метан

© О.С. Ильясова^{1,2}, М. Жумабек^{1*}, Г.Н. Кауменова¹, Р.С. Оразбекова^{1,2},
Б.С. Биекеев³, 2025.

¹АО «Институт Топлива, Катализа и Электрохимии имени Д.В. Сокольского»,
Алматы, Казахстан;

²Казахский Национальный Университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан;

³Казахстанско-Британский Технический Университет, Алматы, Казахстан.

E-mail: manapkhan_86@mail.ru

ГИДРИРОВАНИЕ ДИОКСИДА УГЛЕРОДА НА Ni-Co/ZrO_2 КАТАЛИЗАТОРАХ ДЛЯ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ В КОМПОНЕНТЫ СИНТЕТИЧЕСКОГО ТОПЛИВА

Ильясова Орал — PhD докторант, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, инженер Лаборатории прикладных исследований, АО «Институт Топлива, катализа и электрохимии имени Д.В. Сокольского», Алматы, Казахстан,
E-mail: ilyassova.97@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8609-6378>;

Жумабек Манапхан — PhD, старший научный сотрудник Лаборатории окислительного катализа,

АО «Институт Топлива, катализа и электрохимии имени Д.В. Сокольского», Алматы, Казахстан,
E-mail: manapkhan_86@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2026-0577>;

Кауменова Гулнар — PhD, младший научный сотрудник Лаборатории окислительного катализа, АО «Институт Топлива, катализа и электрохимии имени Д.В. Сокольского», Алматы, Казахстан,
E-mail: kaumenova.gulnar@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6448-6607>;

Оразбекова Раушан — PhD докторант, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, ведущий инженер Лаборатории окислительного катализа, АО «Институт Топлива, катализа и электрохимии имени Д.В. Сокольского», Алматы, Казахстан,
E-mail: raushanorazbekova14@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-2704-5148>;

Биекеев Бакберген — студент бакалавра, Казахстанско-Британский технический университет, Алматы, Казахстан,
E-mail: biekeevbakbergen7@gmail.com.

Аннотация. Каталитическое гидрирование диоксида углерода рассматривается как ключевой процесс для перехода к углеродно-нейтральной экономике, позволяющий трансформировать основной парниковый газ в ценное химическое сырьё и компоненты синтетических топлив. Разработка высокоэффективных катализаторов, активных в мягких условиях, является актуальной научно-практической задачей. Целью работы является синтез композитных катализаторов на основе оксидов никеля, кобальта и циркония с использованием метода растворного горения для селективного гидрирования диоксида углерода до метана и всестороннее изучение их каталитических свойств. Активность катализаторов, полученных из исходной смеси $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$, $\text{Co}(\text{NO}_3)_2$ и $\text{ZrO}(\text{NO}_3)_2 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ с добавлением мочевины различного процентного состава, была исследована в проточном реакторе при температурном диапазоне 200–400 °C. Было установлено, что оптимальными условиями получения метана являются: конверсия CO_2 более 93,6%, селективность CH_4 — 97%, мольное соотношение $\text{H}_2 : \text{CO}_2 = 4 : 1$, температура 300 °C, объемная скорость 24 000 ч⁻¹. Комплексная характеристика полученных образцов включала рентгенофазовый анализ и сканирующую электронную микроскопию. Рентгенофазовый анализ подтвердил формирование целевых оксидных фаз. Высокие каталитические показатели обусловлены синергетическим эффектом между оксидами никеля, кобальта и циркония, а также особенностями структуры, сформированными вследствие выбранного метода синтеза. Исследование композитных катализаторов Ni–Co/ZrO₂, приготовленных методом растворного горения, для гидрирования диоксида углерода является актуальным направлением, обладающим выраженными экологическими, экономическими и стратегическими энергетическими преимуществами. Дальнейшие инновации в этой области необходимы для продвижения концепции циклической углеродной экономики к практической реализации.

Ключевые слова: диоксид углерода, каталитическое гидрирование, катализатор Ni-Co/ZrO₂, метод растворного горения, метан

Introduction. The anthropogenic emissions of carbon dioxide from fossil fuel combustion have reached unprecedented levels, driving global climate change and environmental instability. With atmospheric CO₂ concentrations exceeding 410 ppm

and continuing to rise at 3-4 ppm annually, there is an urgent need for effective strategies to mitigate carbon emissions while meeting growing global energy demands (Hasan, et al., 2020). The utilization of CO₂ as a chemical feedstock represents a promising approach to addressing this dual challenge, transforming a waste product into valuable fuels and chemicals through catalytic hydrogenation processes. This strategy not only helps reduce atmospheric CO₂ levels but also contributes to a more sustainable energy economy by providing alternative pathways for fuel production (Wei et al., 2021; Cui et al., 2024).

The hydrogenation of CO₂ to synthetic fuels has gained significant attention as a potential component of the broader carbon capture and utilization (CCU) paradigm. Unlike carbon capture and storage, which focuses solely on sequestration, CCU aims to valorize CO₂ by converting it into useful products, thereby creating economic incentives for emission reduction. The concept of Power-to-Gas technology, which converts renewable electricity into gaseous energy carriers via hydrogen production and subsequent CO₂ methanation, has emerged as a particularly promising approach for energy storage and distribution (Khajonvittayakul et al., 2021). This process enables the storage of intermittent renewable energy in the form of chemical bonds, providing a solution to the challenge of grid-scale energy storage while simultaneously utilizing captured CO₂.

Nickel-based catalysts have emerged as the most widely studied non-noble metal systems for CO₂ hydrogenation due to their high activity, relatively low cost, and availability. However, monometallic Ni catalysts suffer from several limitations, including sintering at elevated temperatures, coking (carbon deposition), and deactivation under reaction conditions (Cui et al., 2024). The addition of cobalt as a promoter has been shown to enhance catalytic performance through several mechanisms: improving reducibility, modifying surface properties, and increasing resistance to deactivation. The combination of Ni and Co creates a bimetallic synergy that often results in superior performance compared to either metal alone (Hasan et al., 2020).

The choice of support material plays an equally crucial role in determining catalyst performance. Zirconium dioxide has proven to be an excellent support for CO₂ hydrogenation catalysts due to its unique combination of redox properties, surface acidity/basicity, and oxygen storage capacity. Unlike conventional supports such as Al₂O₃, ZrO₂ exhibits weak hydrophilic character, which reduces the poisoning effect of water – a major byproduct of methanation reactions – on active sites (Phongamwong et al., 2017; Wang et al., 2019). Additionally, ZrO₂ can enhance metal dispersion and create strong metal-support interactions that stabilize active particles against sintering. The presence of ZrO₂ in the catalyst formulation helps suppress the reverse water gas shift reaction by providing basic sites that favor CO₂ adsorption in a configuration conducive to direct hydrogenation rather than CO formation (Wang et al., 2019).

The specific reaction intermediates and their stability on the catalyst surface play a crucial role in determining the overall activity and selectivity. For instance, the presence of oxygen vacancies on the ZrO₂ surface facilitates the activation of CO₂ molecules, while the combination of Ni and Co sites optimizes the dissociation of H₂ and the

subsequent hydrogenation steps (El-Salamony et al., 2023). Understanding these mechanistic details is essential for the rational design of more efficient catalysts tailored for specific product distributions.

The solution combustion method was chosen as a method for preparing the catalyst due to its significant advantages: simplicity, speed, low temperature and energy efficiency. This method allows obtaining nanosized powders with a high degree of homogeneity, developed surface and a given composition, which is extremely important for creating highly efficient catalytic systems.

The SCS process promotes the formation of strong metal-support interactions and synergistic effects between components, which are crucial for enhancing catalytic performance in CO₂ hydrogenation reactions. The intimate mixing of Ni, Co, and Zr precursors at the molecular level in the initial solution, combined with the rapid combustion process, facilitates the formation of interfaces between metallic nanoparticles and the ZrO₂ support, which often serve as active sites for CO₂ activation and hydrogenation (Summa et al., 2022; Zhao, et al., 2016).

Studies have shown that SCS-prepared catalysts typically exhibit higher specific activities (up to 2-3 times higher) compared to counterparts prepared by conventional methods such as impregnation or co-precipitation. For instance, Ni/ZrO₂ catalysts prepared via SCS using urea as fuel demonstrated CO₂ conversions exceeding 85% with methane selectivities above 95% at relatively mild temperatures (300 – 350°C), significantly outperforming impregnated catalysts which showed lower conversions (70 – 75%) and faster deactivation (Zhao et al., 2016). This paper addresses this gap by presenting activity data for a novel solution combustion synthesis (SCS)-derived catalyst based on a Ni-Co-Zr formulation, which demonstrates high efficacy for the catalytic hydrogenation of carbon dioxide into methane.

Materials and methods.

Catalyst preparation

A series of catalysts on the base of (10 % Ni(NO₃)₂ + 40 % Co(NO₃)₂ + 50 % ZrO(NO₃)₂·xH₂O / 50 % urea, 20 % Ni(NO₃)₂ + 30 % Co(NO₃)₂ + 50 % ZrO(NO₃)₂·xH₂O / 50 % urea, 30 % Ni(NO₃)₂ + 20 % Co(NO₃)₂ + 50 % ZrO(NO₃)₂·xH₂O / 50 % urea, 40 % Ni(NO₃)₂ + 10 % Co(NO₃)₂ + 50 % ZrO(NO₃)₂·xH₂O / 50 % urea, 45 % Ni(NO₃)₂ + 5 % Co(NO₃)₂ + 50 % ZrO(NO₃)₂·xH₂O / 50 % urea, 50 % Ni(NO₃)₂ + 50 % ZrO(NO₃)₂·xH₂O / 50 % urea) was prepared by solution combustion synthesis method. The catalyst preparation process was as follows: a solution of salts in distilled water within a quartz glass was heated to 80 - 100°C and subsequently subjected to heat treatment in a preheated muffle furnace at initiation temperature. The synthesis reaction is initiated by intense heat release, which ensures the rapid propagation of a combustion front and a sharp, spike-like increase in temperature. This process leads to the formation of structured catalysts within minutes, a key factor responsible for their high catalytic activity. The final appearance of the obtained sample is shown in Figure 1.



Figure 1 - Physical appearance of the SCS-derived catalyst

Characterization techniques

X-ray diffraction (XRD) analysis was performed using a DRON - 4 - 0.7 diffractometer equipped with a Co - $K\alpha$ radiation source. Scans were recorded in the 2θ range of $6 - 100^\circ$ with the following parameters: a step size of $0,020^\circ$, a count time of 0,6 s/step, and a goniometer speed of $2^\circ/\text{min}$. A maximum of 821 pulses were recorded. Scanning Electron Microscopy (SEM) and Energy-Dispersive X-ray Spectroscopy (EDS) were conducted on a JEOL JSM - 6610LV instrument to examine the sample's morphology and elemental distribution. Prior to analysis, samples were sputter-coated with a 5 - 10 nm carbon layer. Mechanical properties were assessed by compressive strength tests performed on cylindrical specimens ($\varnothing 1 \text{ cm} \times 2 \text{ cm}$) using a 100 kN, strain-controlled universal tester at a constant displacement rate of $100 \mu\text{m}/\text{min}$. Chemical analysis of the initial mixture and reaction products was carried out with a "Chromos GC - 1000" gas chromatograph. Chromatographic peaks were identified and calculated using the instrument's software, which utilized calibration curves constructed from pure substances.

Catalytic activity studies

The catalytic activity of the SCS-synthesized materials was evaluated in a fixed-bed flow reactor within an automated laboratory unit, equipped for online analysis of reactants and products. The reaction studied was the hydrogenation of CO_2 to synthetic fuel components, performed under atmospheric pressure using a feed gas mixture of $\text{H}_2 : \text{CO}_2 : \text{Ar}$ (76 : 19 : 5 molar ratio). The catalyst was pre-reduced in situ prior to each catalytic test in a 11 % H_2/Ar mixture (100 ml/min) at 400°C for 1 h. The tests were conducted across a temperature range of $200 - 400^\circ\text{C}$ and at space velocities of $12,000 - 48,000 \text{ h}^{-1}$. The reproducibility of the data was rigorously confirmed. To this end, measurements at each specific temperature were repeated in triplicate until fully consistent results were obtained. A prolonged stability assessment was conducted on the optimal catalyst (45% Ni + 5% Co + 50% Zr) for a time-on-stream (TOS) of 27 hours. The catalyst maintained its high catalytic activity with no observable deactivation, indicating excellent structural and chemical stability under the reaction conditions.

Results and discussions. Based on a review of literature data, optimal testing conditions for the Ni - Co - Zr catalysts were set at a gas hourly space velocity (GHSV) of 24,000 h⁻¹ and a temperature range of 200 - 400°C. Repeatability testing determined that the peak yield for the conversion of carbon dioxide to methane was achieved at 300°C. The results presented in Table 1 indicate that the catalyst with a composition of 45 % Ni + 5 % Co + 50 % Zr, prepared with 50 % urea, demonstrated the highest activity, achieving a CH₄ yield of 99,2%.

Table 1 - Catalysts prepared by SCS method for the hydrogenation of carbon dioxide to methane

Chemical composition of catalysts, % wt.	Yield of CH ₄ , %	Selectivity of CH ₄ , %
10 % Ni + 40 % Co + 50 % Zr + 50 % urea	21,2	91,5
20 % Ni + 30 % Co + 50 % Zr + 50 % urea	40,4	95,5
30 % Ni + 20 % Co + 50 % Zr + 50 % urea	34	91,8
40 % Ni + 10 % Co + 50 % Zr + 50 % urea	93,7	97
45 % Ni + 5 % Co + 50 % Zr + 50 % urea	99,2	97,1
50 % Ni + 50 % Zr + 50 % urea	75,5	95,7

Figure 2 shows the conversion of CO₂ by 10% Ni + 40% Co + 50% Zr, 20% Ni + 30% Co + 50% Zr, 30% Ni + 20% Co + 50% Zr, 40% Ni + 10%Co + 50% Zr and 45% Ni + 5% Co + 50% Zr catalysts in the temperature range of 200-400°C.

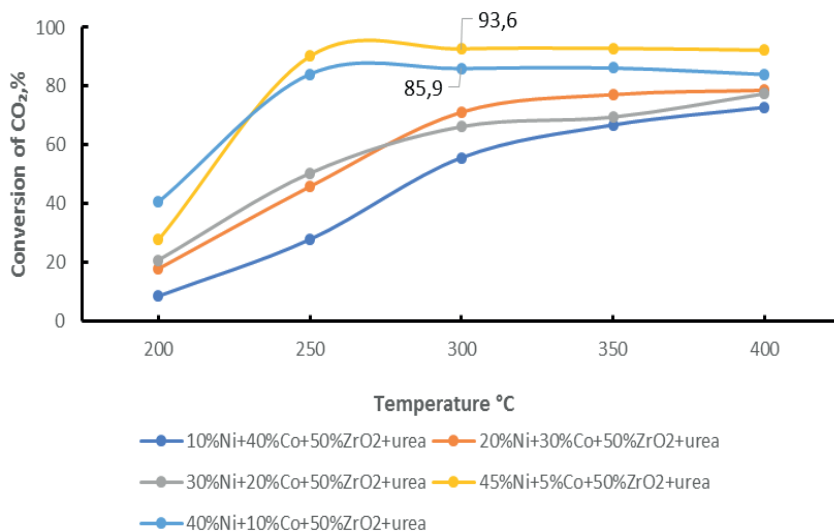


Figure 2 - Conversion of CO₂ over the 10% Ni + 40% Co + 50% Zr, 20% Ni + 30% Co + 50% Zr, 30% Ni + 20% Co + 50% Zr, 40% Ni + 10%Co + 50% Zr and 45% Ni + 5% Co + 50% Zr + urea catalysts at 200-400°C

40% Ni + 10%Co + 50% Zr and 45% Ni + 5% Co + 50% Zr + urea catalysts exhibited high activity, with CO₂ conversions reaching 85,9% and 93,6%, respectively. Figures 3 and 4 show the dependences of methane selectivity on the process temperatures of two more active catalysts.

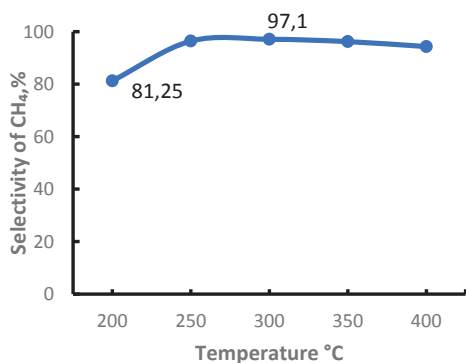


Figure 3 - Selectivity of CH₄ over the 45% Ni + 5% Co + 50% Zr + 50% urea catalyst at 200-400°C

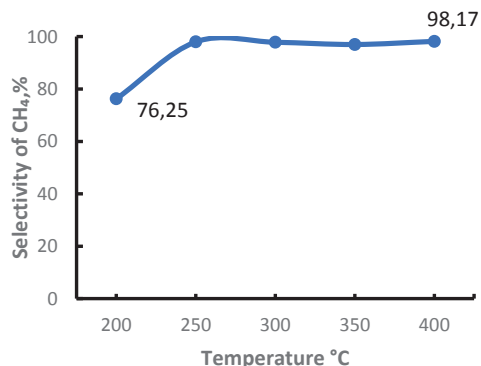


Figure 4 - Selectivity of CH₄ over the 40% Ni + 10% Co + 50% Zr + 50% urea catalyst at 200-400°C

The most active catalyst formulation (45 % Ni + 5 % Co + 50 % Zr, prepared with 50 % urea) was selected to study the effect of gas hourly space velocity on catalytic performance. As presented in Figure 5, CO₂ conversion exhibits an inverse relationship with GHSV.

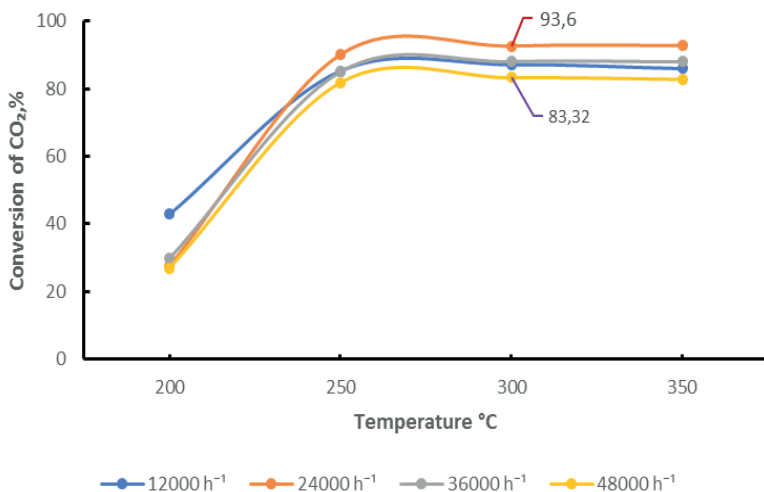


Figure 5 - Conversion of carbon dioxide over the 45 % Ni + 5 % Co + 50 % Zr + 50 % urea catalyst at different space velocities

This correlation is a classic manifestation of a mass transfer limitation, where elevated space velocities curtail the residence time, thereby insufficiently exposing the reactant molecules to the catalyst's active sites for complete conversion to methane.

The influence of reaction temperature on the methane (CH₄) production rate, expressed as space-time yield is shown in Figure 6. Data were obtained using a 45% Ni + 5% Co + 50% Zr + urea catalyst and a GHSV of 24,000 h⁻¹.

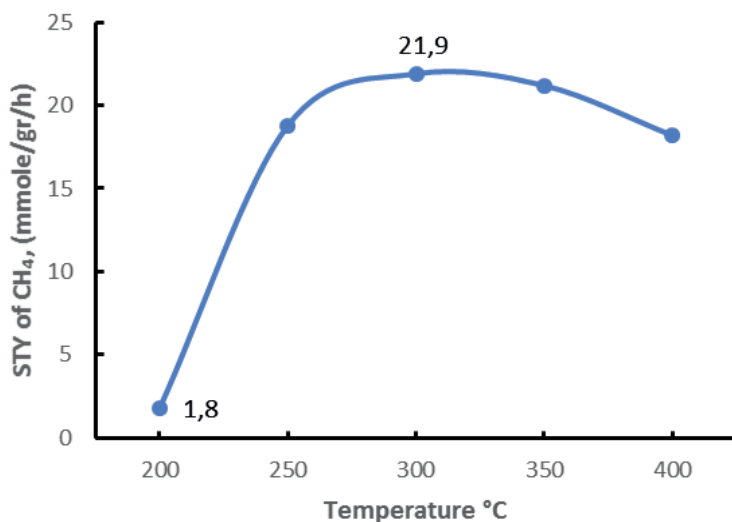


Figure 6 - Effect of the reaction temperature on the STY of CH₄, (mmole/gr/h) of process over 45%Ni + 5%Co + 50%Zr + urea catalyst at GHSV 24000 h⁻¹

This graph shows the space-time yield of methane in 200 and 300°C, respectively. Further, for comparison, the space-time yield of methane obtained from 40% Ni + 5% Co + 50% Zr + urea catalyst is shown in Figure 7.

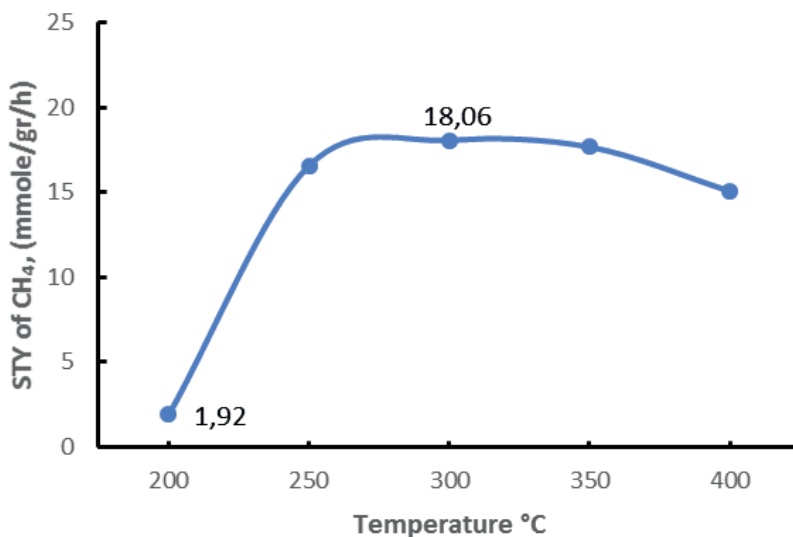


Figure 7 - Effect of the reaction temperature on the STY of CH₄, (mmole/gr/h) of process over 40%Ni + 5%Co + 50%Zr + urea catalyst at GHSV 24000 h⁻¹

Below, in Figures 8 and 9, the dependences of carbon dioxide conversion and methane selectivity to time on stream are illustrated, respectively.

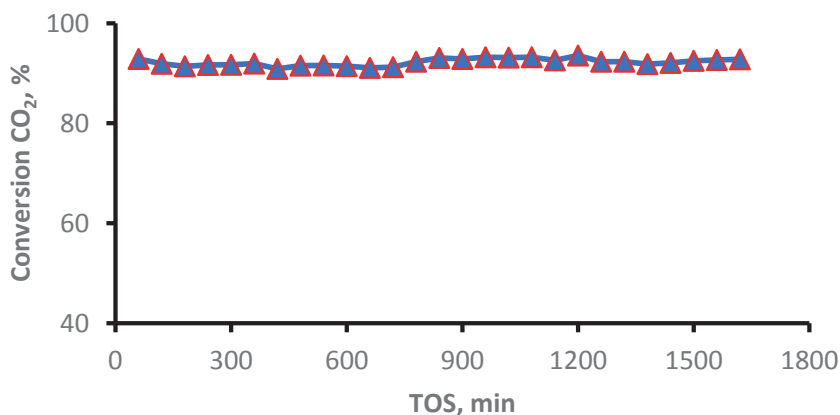


Figure 8 - Effect of the TOS on the conversion of CO₂

This graph shows that carbon dioxide conversion remained virtually unchanged over the 27 hours of the catalytic stability test.

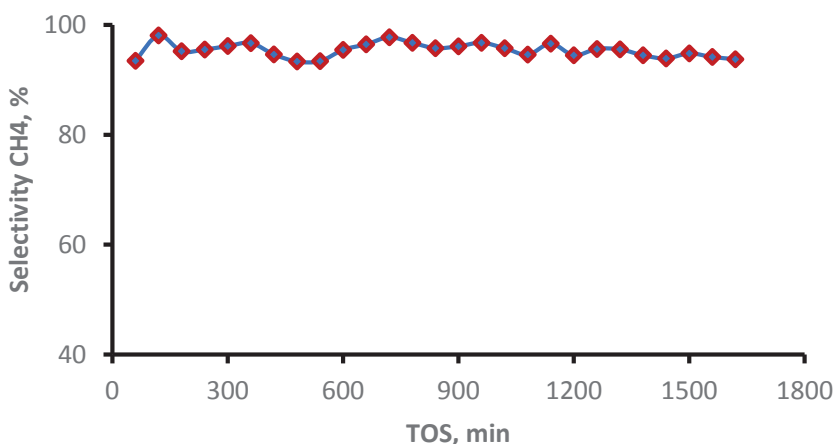


Figure 9 - Effect of the TOS on the selectivity CH₄

In this graph, it can be seen that the methane selectivity increased in places but did not drop below the initial value during the 27 hours of the catalytic stability test.

The phase composition of the catalyst was determined by X-ray diffraction. Figure 10 presents the XRD pattern of the 45 % Ni + 5 % Co + 50 % Zr + 50 % urea catalyst.

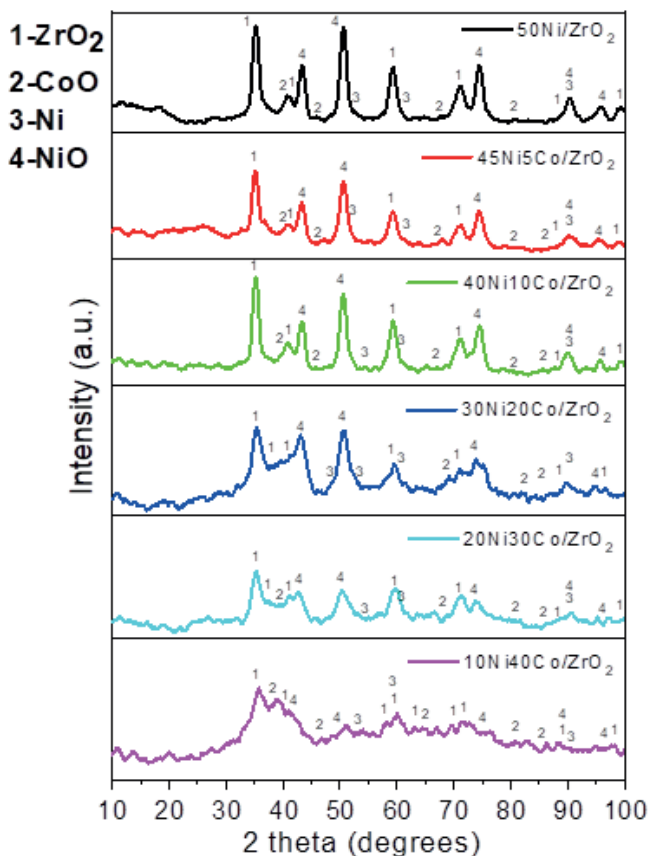


Figure 10 - XRD spectrum of the 45 % Ni + 5 % Co + 50 % Zr + 50 % urea catalyst

The analysis confirms the presence of metallic Ni, NiO, CoO, and monoclinic ZrO₂ phases. The identified diffraction peaks are consistent with their respective JCPDS standard reference patterns: metallic Ni (JCPDS 01-1260) with primary d-spacings at 2.039, 1.762, and 1.246 Å; NiO (JCPDS 44-1159) with d-spacings at 2.409, 2.088, 1.478, 1.476, 1.261, and 1.204 Å; CoO (JCPDS 42-1300) with d-spacings at 2.455, 2.135, 1.501, and 1.246 Å; ZrO₂ (JCPDS 17-0923) with d-spacings at 2.840, 2.610, 2.540, 1.832, 1.653, 1.602, 1.541, and 1.475 Å.

Scanning electron micrographs of all fresh catalyst samples are provided in Figure 11.

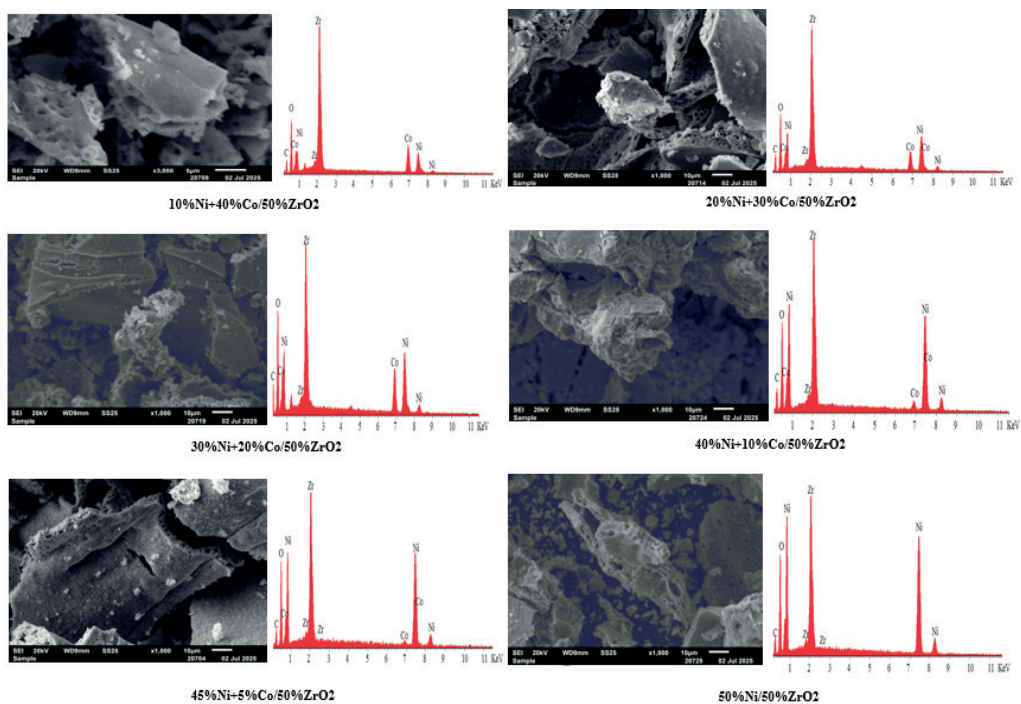


Figure 11 - Scanning electron micrographs of all fresh catalyst samples

Scanning Electron Microscopy analysis revealed significant morphological differences among the catalysts with varying Ni/Co ratios while maintaining a constant 50% Zr content. The catalyst with 45% Ni - 5% Co - 50% Zr exhibited a highly porous, sponge-like structure with uniform dispersion of metal particles, resulting from the efficient solution combustion synthesis process. In comparison, the 50% Ni - 50% Zr catalyst (without Co) showed larger aggregates and less uniform morphology, indicating that the addition of Co even in small proportions (5%) significantly improves structural homogeneity. The catalysts with intermediate compositions (10% Ni - 40% Co - 50% Zr, 20% Ni - 30% Co - 50% Zr, 30% Ni - 20% Co - 50% Zr, and 40% Ni - 10% Co - 50% Zr) demonstrated transitional morphological characteristics, where increasing Co content beyond 20% led to finer particle dispersion but reduced porosity.

Energy-Dispersive X-ray Spectroscopy mapping confirmed the homogeneous distribution of Ni, Co, and Zr in the 45% Ni - 5% Co - 50% Zr catalyst, with no evidence of metal segregation or large aggregates. This homogeneous distribution is critical for creating active sites accessible to reactants during catalytic processes. In contrast, the 50% Ni - 50% Zr catalyst showed zones of Ni-rich and Zr-rich phases, indicating incomplete mixing during synthesis. The catalysts with higher Co content (e.g., 10% Ni - 40% Co - 50% Zr) exhibited Co clustering, which may explain the reduced catalytic efficiency despite the finer particle size. The optimal dispersion in the 45% Ni - 5% Co - 50% Zr catalyst aligns with its superior performance in CO₂ hydrogenation, as reported in earlier studies.

Conclusion. In summary, the catalyst with the composition 45% Ni + 5% Co + 50% Zr, synthesized by the solution combustion method using urea, demonstrated high activity for the CO₂ hydrogenation reaction to methane. The optimal catalytic performance was achieved under the following conditions: a feed gas composition of 76% H₂, 19% CO₂, and 5% Ar; a space velocity of 24,000 h⁻¹; and a temperature of 300°C. Under these conditions, the process yielded a remarkable methane concentration of 98,8 - 99,2% with a selectivity of up to 97%. The high activity is attributed to the formation of simple oxides, as well as to metal particles within the catalyst structure, which actively promote the reaction. Furthermore, the solution combustion synthesis method offers significant practical advantages, including shorter preparation time, reduced economic cost, and enhanced environmental friendliness due to lower emissions during production. These benefits make SCS a highly promising technique for future catalytic applications.

References

- Cui Y, He S, Yang J, Gao R, Hu K, Chen X, Xu L, Deng C, Lin C, Peng S, Zhang C. (2024) Research Progress of Non-Noble Metal Catalysts for Carbon Dioxide Methanation. [Molecules]. 29(2). — 374 p. (in English)
- Deng L., Liu X., Wang R., Wang C., Zhou G. (2022) Unsupported Ni-Co alloy as efficient catalysts for CO₂ methanation. [J. Alloys Compd.]. 918. — 165472 p. (in English)
- El-Salamony R.A., Acharya K., Al-Fatesh A.S., Osman A.I., Alreshaidan S.B., Kumar N.S., Ahmed H., Kumar R. (2023) Enhanced direct methanation of CO₂ using Ni-based catalysts supported on ZrO₂, CeO₂-ZrO₂, and La₂O₃-ZrO₂: The effect of support material on the reducible NiO-interacted species and catalytic activity. [Molecular Catalysis], 547. — 113378 p. (in English)
- Gonzalez-Delacruz V.M., Pereñíguez R., Ternero F., Holgado J.P., Caballero A. (2012) In Situ XAS Study of Synergic Effects on Ni-Co/ZrO₂ Methane Reforming Catalysts. [J. Phys. Chem.]. — P. 2919–2926. (in English)
- Hasan S.Z., Ahmad K.N., Isahak W.N.R.W., Masdar M.S., Jahim J.M. (2020) Synthesis of low-cost catalyst NiO (111) for CO₂ hydrogenation into short-chain carboxylic acids. [Int J Hydrogen Energ], 45(42). — P. 22281–22290. (in English)
- Jia X., Zhang X., Rui N., Hu X., Jun Liu C. (2019) Structural effect of Ni/ZrO₂ catalyst on CO₂ methanation with enhanced activity. [Appl. Catal.] B Environ. 244. — P. 159–169. (in English)
- Kuhaudomlap S., Srifa A., Koo-Amornpattana W., Fukuhara C., Ratchahat S. (2024) Insight and comprehensive study of Ni-based catalysts supported on various metal oxides for CO₂ methanation. [Sci. Rep.] 14. — P. 1–28. (in English)
- Khajonvittayakul C., Tongnan V., Amornraksa S., Laosiripojana N., Hartley M., Hartley U.W. (2021) CO₂ Hydrogenation to Synthetic Natural Gas over Ni, Fe and Co-Based CeO₂-Cr₂O₃. [Catalysts], 11(10). — 1159 p. (in English)
- Li L., Wu X., Cai H., Yang J., Zhu J., Li G., Hu C. (2025) Enhanced CO₂ methanation performance of Ni-ZrO₂ catalysts: A comparative study of phase-dependent activity and mechanism. [Chem. Eng. J.] 519, 165036 p. (in English)
- Min H.K., Kim Y.W., Kim C., Ibrahim I.A.M., Han J.W., Suh Y.W., Jung K.D., Park M.B., Shin C.H. (2022) Phase transformation of ZrO₂ by Si incorporation and catalytic activity for isopropyl alcohol dehydration and dehydrogenation. [Chem. Eng. J.]. — 428 p. (in English)
- Phongamwong T., Chantaprasertporn U., Witoon T., Numpilai T., Poo-arporn Y., Limphirat W., Donphai W., Dittanet P., Chareonpanich M., Limtrakul J. (2017) CO₂ hydrogenation to methanol over CuO-ZnO-ZrO₂-SiO₂ catalysts: Effects of SiO₂ contents. [Chemical Engineering Journal], 316. — P. 692–703. (in English)
- Summa P., Gajewska M., Li L., Hu Ch., Samojeden B., Motak M., Da Costa P. (2022) Solution combustion synthesis as an alternative synthesis route for novel Ni-Mg-Al mixed-oxide catalyst for CO₂ methanation. [Journal of CO₂ Utilization], 60. — 101983 p. (in English)

Wang Y., Kattel S., Gao, W. et al. (2019) Exploring the ternary interactions in Cu–ZnO–ZrO₂ catalysts for efficient CO₂ hydrogenation to methanol. [Nat Commun], 10. — 1166 p. (in English)

Wei K.F., Muhammad T. (2021) Recent trends in developments of active metals and heterogenous materials for catalytic CO₂ hydrogenation to renewable methane: A review [J of Environmental Chemical Engineering], 9(4). — 105460 p. (in English)

Zhao K., Wang W., Li Zh. (2016) Highly efficient Ni/ZrO₂ catalysts prepared via combustion method for CO₂ methanation. [Journal of CO₂ Utilization], 16. — P. 236-244. (in English)

Zhang M., Ye J., Qu Y., Lu X., Luo K., Dong J., Lu N., Niu Q., Zhang P., Dai S. (2024) Highly Stable and Selective Ni/ZrO₂ Nanofiber Catalysts for Efficient CO₂ Methanation, [ACS Appl. Mater. Interfaces] 16. — P. 34936–34946. (in English)

© **K. Kalmakov¹, G. Turebekova¹, S. Yegemberdiyeva^{2*}, U. Nuridinova³,
N. Dulat¹, 2025.**

¹ M. Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan;

² U. Zhanibekov South Kazakhstan Pedagogical University, Shymkent, Kazakhstan;

³ Peoples' Friendship University named after Academician A. Kuatbekov,
Shymkent, Kazakhstan.

E-mail: saltanat_2207@mail.ru

CATALYTIC CRACKING OF VACUUM GAS OIL FROM KUMKOL OIL IN A FLUIDIZED BED CATALYST UNIT

Kalmakov Kairatbek — PhD student of the Specialty «Oil and gas refining technology», M. Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan,

E-mail: kalmakovkk@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0004-3242-7495>;

Turebekova Gaukhar — Candidate of Technical Sciences, Professor, M. Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan,

E-mail: g.ture@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3251-1449>;

Yegemberdiyeva Saltanat — PhD, Uzbekali Zhanibekov South Kazakhstan Pedagogical University, Senior Lecturer of the Department of Chemistry, Shymkent, Kazakhstan,

E-mail: saltanat_2207@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7241-9762>;

Nuridinova Ulmeken — Master's degree teacher, Peoples' Friendship University named after academician A. Kuatbekov, Shymkent, Kazakhstan,

E-mail: zhuban.adilbek@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0003-3276-5980>;

Dulat Nurly — master's student, M. Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan,

E-mail: nurly.dulat.04@bk.ru, <https://orcid.org/0009-0004-2731-6678>.

Abstract. This paper presents the results of a comprehensive investigation of the catalytic cracking of vacuum gas oil derived from Kumkol crude and of the properties of the resulting products. The physicochemical characteristics of the feedstock directly affect the quality and yield of the products, i.e., the depth of conversion. This is due to the fact that a lighter feed composition increases the yield of the target product and enhances catalyst productivity. The experiments were carried out while varying the feed rate and temperature. The feed rate was selected on the basis of the loaded catalyst volume. A catalyst-to-feed ratio of 1 vol. part of catalyst to 0.5–2 vol. parts of feed was employed. The duration of the on-stream portion of the cycle—i., the period of continuous feed introduction—was determined by the catalyst activity, the feed rate, and the resin content of the feed. The overall experiment time was dictated by the need

to obtain at least 200–250 ml of liquid product for analysis, so the number of cycles was 1–2. The reactor temperature - 490–550°C. Owing to the favorable properties of the distillate and, in particular, its low resin content, a comparatively severe cracking regime could be applied: reaction-zone temperature 492°C, circulation ratio 5.1:1.0, weight-hourly space velocity 2.0 h⁻¹, and recycle coefficient 1.3. The yield of the target product, motor gasoline, was 42.8 % with an octane number of 82 by the motor method and 89 by the research method.

Keywords: catalytic cracking, vacuum gas oil, catalyst, gas, laboratory unit, gasoline, reactor, light gas oil

© К.К. Калмаков¹, Г.З. Туребекова¹, С.Ж. Егембердиева^{2*},
У. Е. Нуридинова³, Н.Н. Дулат¹, 2025.

¹М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан;

²Ө. Жәнібеков атындағы Оңтүстік Қазақстан педагогикалық университеті,
Шымкент, Қазақстан;

³ Академик Ә. Қуатбеков атындағы Халықтар достығы университеті,
Шымкент, Қазақстан.

E-mail: saltanat_2207@mail.ru

ҚҰМКӨЛ МҰНАЙЫНАН АЛЫНҒАН ВАКУУМ ГАЗОЙЛІН КАТАЛИЗАТОРДЫҢ ҚАЙНАУ ҚАБАТЫНДАҒЫ ҚОНДЫРҒЫДА КАТАЛИТИКАЛЫҚ КРЕКИНГТЕУ

Калмаков Кайратбек — докторант, «Мұнай және газды өңдеу технологиясы» мамандығы, М.Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан,
E-mail: kalmakovkk@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0004-3242-7495>;

Туребекова Гауһар — техника ғылымдарының кандидаты, профессор, М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан,
E-mail: g.ture@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3251-1449>;

Егембердиева Салтанат — PhD, Өзбекәлі Жәнібеков атындағы Оңтүстік Қазақстан педагогикалық университеті, «Химия» кафедрасының аға оқытушы, Шымкент, Қазақстан,
E-mail: saltanat_2207@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7241-9762>;

Нуридинова Улмекен — магистр оқытушы, Ә.Қуатбеков атындағы Халықтар достығы университеті, Шымкент, Қазақстан,
E-mail: zhuban.adilbek@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0003-3276-5980>;

Дулат Нұрлы — магистрант, М.Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан,
E-mail: nurly.dulat.04@bk.ru, <https://orcid.org/0009-0004-2731-6678>.

Аннотация. Ауыр шикізатты каталитикалық крекингілеу Қазақстан Республикасының мұнай өңдеу өнеркәсібі үшін жоғары сапалы автомобиль, реактивті, дизельді және басқа да отын түрлеріне, сондай-ақ пропан-пропилен және бутан-бутилен фракциялары сияқты мұнай-химия өнеркәсібі үшін шикізатқа жоғары сұранысқа байланысты өзекті мәселе болып табылады. Бұл мәселе Қазақстан Республикасының мұнай өңдеу өнеркәсібі үшін ерекше маңызды, себебі қазақстандық мұнайлар ауыр көмірсутектер шикізатының едәуір

құрамымен сипатталады. Бұл жұмыстың мақсаты Құмкөл мұнайының вакуумдық газойлының каталитикалық крекингтеу процестерін және алынған өнімдердің қасиеттерін жан-жақты зерттеу болып табылады. Каталитикалық крекингтің тиімділігі көбінесе қолданылатын катализаторларға, процес параметрлеріне және шикізаттың құрамына байланысты. Оңтайлы нәтижелерге қол жеткізу үшін сұйық қабатты каталитикалық крекингтің тәжірибелік зертханалық қондырғысы құрастырылды. Тәжірибелер шикізатты беру жылдамдығы және температураның өзгеруімен жүргізілді. Шикізаттың беру жылдамдығы катализатордың жүктелген көлеміне байланысты анықталады. Катализатор келесідей қатынасы алынды: шикізат = 1 көлем катализатордың бір бөлігіне: $0,5 \div 2$ көлем шикізаттың бөлігі. Дистилляттың шайырлылығына байланысты каталитикалық крекинг процесінде салыстырмалы түрде қатаң режимді қолдануға болады: реакция аймағындағы температура 492°C , айналым еселігі 5,1:1,0, шикізатты берудің массалық жылдамдығы $2,0 \text{ сағат}^{-1}$, рециркуляция коэффициенті 1,3-ке тең. Мақсатты өнім автомобиль бензинінің шығымы 42,8% құрады, октан саны мотор әдісімен (МӘ) 82 және октан саны зерттеу әдісімен (ЗӘ) 89-ға тең болды. Бұл зерттеудің практикалық маңыздылығы жоғары тиімді каталитикалық крекинг әдісін қолдана отырып, көмірсутек шикізатын терең өңдеудің теориялық және технологиялық аспектілерін жетілдіру аясында алынған нәтижелермен дәлелденеді.

Түйін сөздер: каталитикалық крекинг, вакуум газойлі, катализатор, газ, зертханалық қондырғы, бензин, реактор, жеңіл газойл

© К.К. Калмаков¹, Г.З. Туребекова¹, С.Ж. Егембердиева^{2*},
У.Е. Нуридинова³, Н.Н. Дулат¹, 2025.

¹Южно-Казахстанский университет им. М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан;

²Южно-Казахстанский педагогический университет им. У. Жанибекова,
Шымкент, Казахстан;

³ Университет Дружбы народов им. академика А. Куатбекова,
Шымкент, Казахстан.

E-mail: saltanat_2207@mail.ru

КАТАЛИТИЧЕСКИЙ КРЕКИНГ ВАКУУМНОГО ГАЗОЙЛЯ КУМКОЛЬСКОЙ НЕФТИ НА УСТАНОВКЕ ПСЕВДООЖИЖЕННЫМ СЛОЕМ КАТАЛИЗАТОРА

Калмаков Кайратбек — докторант специальности «Технология переработки нефти и газа», Южно-Казахстанский университет имени М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан,

E-mail: kalmakovkk@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0004-3242-7495>;

Туребекова Гаухар — кандидат технических наук, профессор, Южно-Казахстанский университет имени М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан,

E-mail: g.ture@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3251-1449>;

Егембердиева Салтанат — PhD, старший преподаватель кафедры «Химии», Южно-Казахстанский педагогический университет имени У. Жанибекова, Шымкент, Казахстан,

E-mail: saltanat_2207@mail.ru; <https://orcid.org/0000-0002-7241-9762>;

Нуридинова Улмекен — магистр преподаватель, университет Дружбы народов имени академика А. Куатбекова, Шымкент, Казахстан,

E-mail: zhuban.adilbek@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0003-3276-5980>;

Дулат Нұрлы — магистрант, Южно-Казахстанский университет имени М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан,

E-mail: nurly.dulat.04@bk.ru, <https://orcid.org/0009-0004-2731-6678>.

Аннотация. Каталитический крекинг тяжёлого сырья является актуальной задачей нефтеперерабатывающей промышленности Республики Казахстан в связи с высокой потребностью в качественных автомобильных, реактивных, дизельных и других видах топлив, а также сырье для нефтехимии — пропан-пропиленовой и бутан-бутиленовой фракций. Эта проблема имеет особое значение для нефтеперерабатывающей отрасли РК, поскольку казахстанские нефти характеризуются значительным содержанием тяжёлых углеводородных фракций. Целью данной работы является всестороннее исследование процессов каталитического крекинга вакуумного газойля Кумкольской нефти и свойств полученных продуктов. Эффективность каталитического крекинга во многом зависит от применяемых катализаторов, технологических параметров и состава исходного сырья. Для получения оптимальных результатов была собрана экспериментальная лабораторная установка каталитического крекинга с псевдоожиженным слоем катализатора. Опыты проводили при варьировании скорости подачи сырья и температуры. Скорость подачи сырья определяется исходя из загруженного объёма катализатора; использовалось соотношение «катализатор: сырьё» — 1 часть объёма катализатора на 0,5–2 части объёма сырья. Вследствие благоприятных свойств дистиллята и, в частности, его низкой смолистости, предлагается применять в процессе крекинга сравнительно жёсткий режим: температура в зоне реакции 492 °С, кратность циркуляции 5,1:1, массовая скорость подачи сырья 2,0 ч⁻¹, коэффициент рециркуляции 1,3. По результатам исследований выход целевого продукта — автомобильного бензина — составил 42,8% с октановым числом 82 по моторному методу (ММ) и 89,0 по исследовательскому методу (ИМ). Практическая значимость исследования подтверждается полученными результатами, позволяющими совершенствовать теоретические и технологические аспекты глубокой переработки углеводородного сырья методом каталитического крекинга с высокой эффективностью.

Ключевые слова: каталитический крекинг, вакуумный газойль, катализатор, газ, лабораторная установка, бензин, реактор, легкий газойль

Кіріспе. Бұл мақалада Құмкөл мұнайынан алынған вакуум газойлді каталитикалық крекингтеу және алынған өнімдердің қасиеті бойынша жан-жақты жүргізілген зерттеулердің нәтижелері келтірілген. Каталитикалық крекингтің тиімділігі көбінесе қолданылатын катализатордың сипаттамаларына, процес параметрлеріне және шикізаттың құрамына байланысты, себебі шикізаттың физика-химиялық қасиеті алынған өнімдердің сапасы мен шығымына, яғни өңдеу тереңдігіне тікелей әсер етеді (Kalmakov, 2023). Себебі шикізат құрамының жеңіл

болуы мақсатты өнім (бензин) шығымының артуына және катализатордың көп жұмыс жасауына алып келеді (Kryukov, 2025).

Графиктер, кестелер және зерттеу әдістері түрінде ұсынылған эксперименттік және теориялық зерттеулердің нәтижелерін мұнай өңдеу және мұнай-химия өнеркәсібінің ғылыми инженерлік-техникалық қызметкерлері пайдалана алады.

Алынған нәтижелер мыналарға мүмкіндік береді:

- шикізатты дайындауды оңтайландыру, жалпы сұйық қабатты катализаторы бар және тікелей көтергіш реакторлармен жабдықталған қондырғыларда кокс түзілуін азайта отырып крекингтеу және катализатордағы кокс шөгіндісін белгіленген деңгейге дейін реттеу.

- каталитикалық крекинг процесін күшейту үшін тиімді катализаторларды негізделген таңдау жасау.

Зерттеу әдістері. Вакуумдық газойлды алу үшін мұнайды атмосфералық-вакуумдық айдауды МЕМСТ 11011-64 бойынша АРН-2 стандартты аппаратында жүзеге асырылады.

Қондырғының реактор бөлігінің негізгі түйіндері ВНИИ НП (ТУ 38101570-75) әдістемесі бойынша орындалды (Hadzhiev, 1978).

Зерттеу бөлімі. Каталитикалық крекингтен алынатын өнімдердің сапасын бағалау және балансын анықтау мақсатында синтетикалық ұнтақ тәрізді алюмосиликатты катализатордың қайнау қабаты зертханалық қондырғыда (сурет-1) Құмкөл кен орнының мұнайынан алынған вакуум дистиллятын крекингтеу бойынша тәжірибелер жүргізілді.

Қондырғының технологиялық сұлбасының сипаттамасы.

Технологиялық процесс келесідей кезеңдерден тұрады:

1. Катализаторды жүктеу және оны режимге шығару
2. Шикізаттың қыздырылуы
3. Шикізаттың берілуі
4. Реактордағы шикізат пен катализатордың жанасуы
5. Салқындату және катализаттың бөлінуі

Катализатордың қайнау қабатындағы каталитикалық крекингтің үлкейтілген зертханалық қондырғысының принципиалды технологиялық сұлбасы және тәжірибені жүргізу әдістемесі (Idirisov, 1996).

Катализатордың қайнау қабаты, катализаторды шнекті араластырғыш көмегімен механикалық араластыру кезінде реактордың төменгі бөлігінен крекинг шикізатын бу фазасында беру арқылы жасалынды. Зерттеулер (Kapustin, 2015) осы типтегі зертханалық қондырғылар катализатордың немесе инертті жылутасымалдағыштың қайнау қабаты бар процестерді оңтайлы моделі бола алатынын көрсетті.

Крекинг шикізаты қыздырылған бюреткадан (Е-1) шикізат сорабы Н-1-ге арқылы, қыздырғыш П-4-те буланып, Р-1 крекинг реакторына келіп түседі. Реактор ішіне LZR-20PK катализаторы жүктелген. Пеш П-4-те шикізат, пеш қыздырғыш элемент және термopapa қалтасы арасындағы тар сакиналы саңылау арқылы жоғары жылдамдықпен қозғалады, бұл 450-550°C температурада шикізаттың

термиялық ыдырауын болдырмайды. Реактор Р-1 айнымалы қима аппараты, оның жоғары бөлігі реакция аймағының диаметрінен 2,5 есе үлкен және гравитациялық тұндырғыштың функцияларын орындайды. Р-1-ден газды-булы өнімді шығаратын штуцердің құрылысы шынды катализатордың бөлінуіне де әсер етеді, өйткені крекинг өнімдерінің булары оған кіру кезінде қозғалыс бағытын кері бағытқа өзгертуге мәжбүр. Р-1 араластырғыштың еркін айналуына арналған алынбалы бұрандалы қақпақ және тығыздағыш құрылғылармен жабдықталған.

Р-1-де пайда болған крекинг өнімдері Х-1 мұздатқыш-конденсаторына түседі, онда сұйық өнімдер Е-2 катализатор қабылдағышында конденсацияланады, ал газ одан әрі өтетін Е-3 газометріне түседі. Крекинг кезінде катализаторға түскен кокс Р-1-дегі құрғатылған ауа ағынында күйіп кетеді, олда регенерация қызметін атқарғандықтан регенератор болып табылады. Регенерация газдары кептіру түтіктері арқылы көміртегі оксидін жағу пешіне түседі, одан кейін аскаритті түтіктер арқылы сорғыш (вытяжной) шкаф арқылы жіберіледі.

Тәжірибе жүргізер алдында катализатор реакторға жүктеледі. П-1,2,3 пештерін қолдана отырып, Р-1-ге қажетті температураны орнатады. П-4 көмегімен керекті температураны орнатады. Шикізат Е-1 сыйымдылығына және шикізат түтіктеріне толтырылады. Тәжірибеге дейін Р-1 азотпен 0,3 л/мин жылдамдықпен 5 минут бойы үрленеді. Н-1 сорғысы шикізаттың қажетті мөлшерін реакторға айдайды, содан кейін Р-1 қайтадан азотпен үрленеді, үрлеу Е-3-те жүзеге асырылады. Үрлеу аяқталғаннан кейін реактордағы температура регенерацияның белгіленген температурасына дейін көтеріледі және 0,5 л/мин жылдамдықпен құрғатылған ауа тоғында катализатордың регенерациясы жүргізіледі. Регенерацияның аяқталуы аскарит түтіктерінің температурасымен бағаланады, ол суық дерлік болуы керек.

Алынған крекинг газының шығымы оның көлемі және тығыздығымен анықталды. Е-2-ден алынған катализат фракцияларға бөлінді: б.қ.-200°C (бензин), 200-350°C (жеңіл крекинг газойлі) және қалдық > 350°C (ауыр крекинг газойлі). Кокс шығымы аскарит түтіктерінің салмағының өсуімен келесі формула бойынша анықталды:

$$K = A \cdot 1.06 \cdot 12 \cdot 100 / 44 \cdot G$$

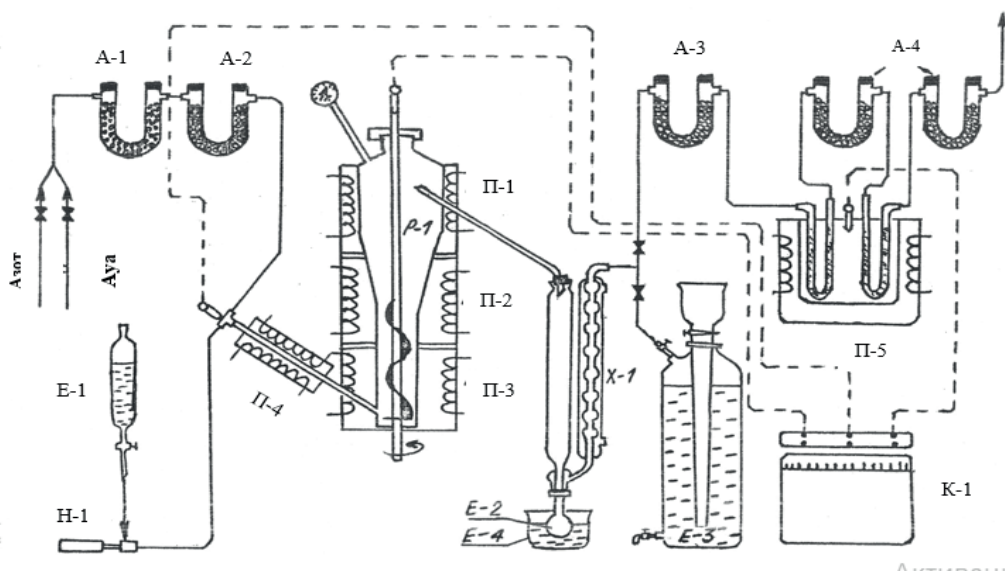
Мұндағы: А – аскарит түтіктерінің жалпы салмағының өсуі, г

G – өткізілген шикізат саны, г

12 – көміртектің молекулалық салмағы

44 – көмірқышқыл газының молекулалық салмағы

1,06 – кокстағы сутегі мөлшерін ескеретін коэффициент.



Е-1 - шикізат бюреткасы, Н-1 - шикізат сорабы, Р-1 -реактор, П-1,2,3 - қыздырғыш элемент, П-4-қыздырғыш, П-5- СО газын жасау пеші, Х-1 –мұздатқыш-кондесатор, Е-2- катализатор қабылдағыш, Е-3 - газөшегіш (газометр), Е-4-су моншасы, А-1,2,3- кептіргіштер, А-4 аспаритті трубкалар, К-1- жазушы потенциометр

Сурет 1 – Катализатордың қайнау қабатындағы каталитикалық крекингтің үлкейтілген зертханалық қондырғысының технологиялық сұлбасы

Крекинг кезіндегі шығындар (2,0 мас %-дан аспайтын) өнімнің шығуына пропорционалды түрде бөлінді; шығындары 2,0%-дан асатын тәжірибелер ескерілмеді. Әр режим үшін кем дегенде екі тәжірибе жүргізілді, бензин шығуындағы сәйкессіздіктер 2,0% -дан жоғары және кокс шығуында бастапқы шикізатқа 0,5% -дан астам тәжірибелер қайталанды. Алынған мәліметтер орташаланды.

Тәжірибені дайындау және өткізу. Тәжірибелер шикізаттың берілу жылдамдығы және температураның өзгеруімен жүргізілді. Шикізаттың берілу жылдамдығы катализатордың жүктелген көлеміне байланысты анықталады (Tanashev, 2003). Катализатор келесідей қатынасы алынды: шикізат = 1 көлем катализатордың бір бөлігіне: 0,5÷2 көлем шикізаттың бөлігі.

Циклдің жұмыс бөлігінің ұзақтығы, яғни шикізатты үздіксіз беру кезеңі катализатордың белсенділігімен, шикізатты беру жылдамдығы және ондағы шайырлы заттардың құрамымен анықталады. Тұрақты катализатор қабаты бар өнеркәсіптік каталитикалық крекинг қондырғыларында цикл ұзақтығы 10 минутқа тең; зертханалық қондырғы үшін ол 30 минуттан 1 сағатқа дейін болуы мүмкін, өйткені катализатордың жиі регенерациясы техникалық жағынан қолайсыз. Тәжірибенің жалпы ұзақтығы талдау үшін кемінде 200-250 мл сұйық өнімнің болуы қажеттілігімен анықталды, яғни циклдар саны 1-2.

Реактордағы температура 490-550°C аралығында сақталынды. Тәжірибе

жүргізер алдында қабылдағыштар мен сіңіргіштерді өлшенді. Бюретка шикізатпен толтырылады, сорапты қосып, реакторға жеткізілетін түтіктен пайда болғанға дейін шикізатпен толтырады. Содан кейін бюретканы шикізатпен толтырып, деңгейі қайтадан бекітіледі. Егер тәжірибе жаңа, әлі қалпына келтірілмеген катализаторда жүргізілсе, онда алдымен катализатордан ылғалды алып тастау керек. Ол үшін реактор 300-350°C дейін қызады, жоғарғы шығатын құбырды шлангпен ауа көзіне жалғап және реактордың төменгі бөлігі үрлеудің басында бөлінетін су тамшыларынан босағанша, толығымен құрғағанша катализатор арқылы үрленеді. Содан кейін жабдық берілген сұлба бойынша қосылады.

Реактордың температурасы белгіленген температурадан 5-10°C жоғары болған кезде шикізатты беру басталады. Содан кейін ЛАТРдың көмегімен тәжірибенің қажетті температурасы орнатылады. Жұмыс журналындағы жазбалар шикізат берілген сәттен бастап жүргізіле бастайды, оларды әр 5 минут сайын шығарады. Әр цикл аяқталғаннан кейін шикізат беруді тоқтатқаннан соң қалған буларды кетіру үшін реакторды азотпен үрлейді; қабылдағыш пен сіңіргішті ажыратып, оларды өлшейді. Сынама алынған газдың көлемін белгілейді.

Кесте 1. Құмкөл мұнайынан алынған вакуум дисстилятының физика-химиялық қасиеті.

Крекинг шикізатынан шығымы, % масс.	25,0
20°C Тығыздығы ρ_d^{20} , кг/м ³	834,6
Шартты тұтқырлығы, ВУ ₈₀	1,46
Қату температурасы, °C	+36
Кокстілігі, % масс.	0,20
Мөлшері, % масс.	
- күл	0,004
- күкірт	0,51
Топтық көмірсутектік құрамы, % масс.	
парафин-нафтенді көмірсутектер	83,0
ароматты көмірсутектері	16,2
Оның ішінде:	
жеңіл	6,3
орта	4,7
ауыр	5,2
Шайыр	0,8
Фракциялы құрамы, °C	
б.к.	301
10 %	330
50 %	420
90 %	436
с.к.	500

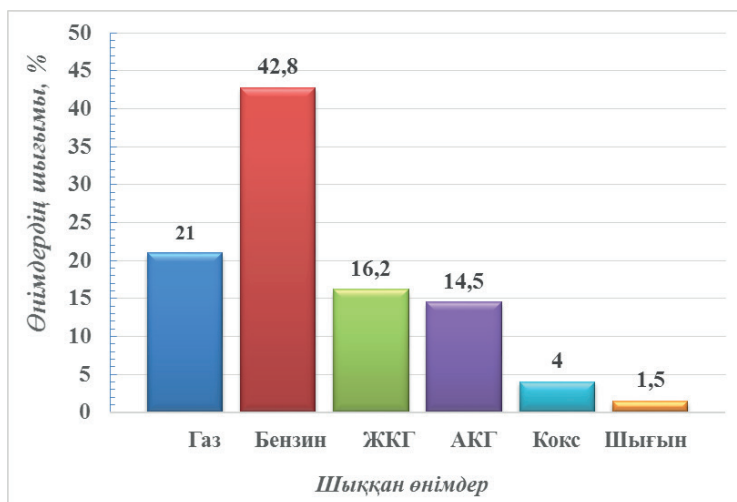
Құмкөл мұнайының вакуум дистиллят каталитикалық крекингінің егжей-тегжейлі балансы төменде келтірілген (кесте 2).

Кесте 2. Вакуум дистилляты каталитикалық крекингінің балансы.

CO ₂	0,74
H ₂	0,04
CH ₄	0,32
C ₂ H ₄	0,23
C ₂ H ₆	0,59
C ₃ H ₆	2,67
C ₃ H ₈	1,12
<i>изо</i> -C ₄ H ₈	1,48
<i>н</i> -C ₄ H ₈	6,0
<i>изо</i> -C ₄ H ₁₀	2,77
<i>н</i> -C ₄ H ₁₀	2,44
C ₅ H ₁₀	5,55
<i>изо</i> -C ₅ H ₁₂	4,17
<i>н</i> -C ₅ H ₁₂	2,18
Автомобиль бензині C ₆ – 195 ⁰ C	33,5
Дизель отынының компоненті	16,2
Қалдық >350 ⁰ C	14,5
Жанған кокс	4,0
Шығын	1,5

Дистилляттың қолайлы қасиеттеріне және, атап айтқанда, оның төмен шайырлылығына байланысты (силикогельді шайырлардың құрамы 0,8% масс.) крекинг процесінде салыстырмалы түрде қатаң режимді қолдануға болады: реакция аймағындағы температура 492⁰C, айналым еселігі 5,1:1,0, шикізатты берудің массалық жылдамдығы 2,0 сағ⁻¹, рециркуляция коэффициенті 1,3.

Жалпы материалдық баланс төмендегі сурет 2-де келтірілген (жаңа шикізаттан % масс.)



Сурет 2 – Процесстің материалдық тепе-теңдігі

Жоғарыда келтірілген мәліметтерден көріп отырғанымыздай, крекинг кезінде 61,6% масс. жеңіл өнімдердің жоғары өнімділігіне қол жеткізілді, дизельдік отын компоненттерінің шығымы тек 16,2% масс. құрады. Мұндай материалдық тепе – теңдік бастапқы шикізаттың химиялық құрамының ерекшеліктеріне, атап айтқанда парафин-нафтен көмірсутектерінің жоғары болуына байланысты (Ahmetov, 2010). Шикізат құрамында парафин-нафтенді көмірсутектердің көп болуына байланысты кокстелу жылдамдығы төмен және бензиннің коксқа қатынасы 11,1-ге жетті. Бензиннің жеңіл каталитикалық газойлге (дизел отынына) қатынасы 2,7-ні құрады. Төменде бензиннің (кесте 4) және жеңіл каталитикалық газойлының (кесте 5), қалдық фракция ауыр каталитикалық газойлының (кесте 6) сипаттамалары берілген.

Кесте 4. Вакуум дистиллятының (Құмкөл мұнайы) каталитикалық крекингі кезінде алынған бензинінің сипаттамасы.

Крекинг шикізатынан шығымы, % масс.	42,8
20°C Тығыздығы $\rho_{4^{20}}$, кг/м ³	0,7223
Молекулалық салмағы	99,0
Фракциялы құрамы, °C	
б.к.	43,0
10%	62,0
50%	95,0
90%	175,2
с.к.	195,0
Қаныққан бу қысымы, мм рт. ст.	442,0
Күкірт мөлшері, % масс.	0,013
Йод саны, г йод 100г өнімге	81,9
Қанықпаған көмірсутек мөлшері, % масс.	31,87
Октан саны (автомобиль бензині үшін)	
- моторлы әдіс бойынша (антидетонаторсыз)	82,0
- зерттеу әдісі бойынша (антидетонаторсыз)	89,0
- МҮБЭ қоспасын қосу арқылы	95,0

Бұл мәліметтерден каталитикалық крекинг автомобиль бензинінің жоғары сортты, күкірт мөлшері төмен және детонацияға төзімділігі жоғары екендігі көрінеді (Hadzhieva, 1982). Мотор әдісі бойынша антидетонаторсыз октан саны 82-ге, зерттеу әдісі бойынша 89-ға тең болды. МҮБЭ (метил үш бутил эфирін) қоспасын қосқанда, октан саны зерттеу әдісі бойынша 94,5-ке тең болды. Автомобиль бензинінің октан санын УИТ-85 аппаратымен есетелінді.

Кесте 5. Вакуум дистиллятының (Құмкөл мұнайы) каталитикалық крекингі кезінде алынған жеңіл каталитикалық газойлдің сипаттамасы

Крекинг шикізатынан шығымы, % масс.	16,2
20°C Тығыздығы $\rho_{4^{20}}$, кг/м ³	0,8815
Молекулалық салмағы	195

Фракциялы құрамы, °C	
б.к.	234,2
10%	243,4
50%	282,1
90%	302,2
с.к.	316,5
Тұтқырлығы 20 °C, сст	4,33
Температурасы, °C	
- кату	-12
- лап ету	106,5
Күкірт мөлшері, %масс.	0,16
Йод саны, г йод 100г өнімге	10,3
Цетан саны (дизель отыны үшін)	38,0

Дизель отынының компоненті 238-318°C аралығында фракция болды. Отынның қайнау диапазонын кеңейту және оның шығымдылығы арттыру, кату температурасы мен айдаудың 50% қайнау температурасының шекті мәндеріне байланысты мүмкін болмады. Цетан санының төмен болуына және қанықпаған көмірсутектердің жоғарылауына байланысты дизель отынының фракциясын тек жазғы маркалы отынның компоненті ретінде пайдалануға болады (Zadegbejdzhi, 2014). Жазғы маркалы отынды алу үшін бұл фракцияны мұнайды тікелей айдаудың жоғары цетанды дизельді фракцияларымен араластыру қажет.

Кесте 6. Вакуум дистиллятының (Құмкөл мұнайы) каталитикалық крекингі кезінде алынған ауыр каталитикалық газойлдің қасиеті.

Крекинг шикізатынан шығымы, % масс.	14,5
20°C Тығыздығы ρ_4^{20} , кг/м ³	0,8997
Шартты тұтқырлығы, ВУ ₈₀	1,25
Қату температурасы, °C	+34
Кокстілігі, % масс.	0,30
Күкірт мөлшері, % масс.	0,22

Ауыр каталитикалық газойль үшін төмен тығыздық және шартты тұтқырлық, күкірт мөлшерінің төмендігімен және кату температурасының жоғары болуымен сипатталады (Pusurmanova, 2016). Бұл фракцияны жоғары парафинді мұнайдан стандартты М-100 маркалы жоғары қататын қазандық отынын дайындау үшін тұтқырлығы төмен компонент ретінде пайдалануға болады (Tanashev, 2005).

Қорытынды. Құмкөл кен орнының мұнайынан алынған вакуум дистиллятын үлкейтілген зертханалық қондырғысында алюмоцеолитті катализаторда каталитикалық крекингтеу арқылы мақсатты және басқа да өнімдерді алуға болатынына көз жеткізуге болады. Оңтайлы технологиялық режимді біркелкі ұстау арқылы сапалы өнімдерге қол жеткізуге болады.

Әдебиеттер

Ахметов С.А. Технология глубокой переработки нефти и газа: Учебное пособие для ВУЗов. — Уфа: Изд. «Гилем», 2010. — 670 с.

Джеймс Г. Спейт. Анализ нефти. Справочник. — Санкт-Петербург.: Изд. Профессия, 2012. — 468 с.

Идирисов М.Ж., Танашев С.Т., Омаралиев Т.О., Керимбеков С.К. и др. Изучение каталитического крекинга смесей вакуумных газойлей. Республиканский научный журнал «Наука и образование Южного Казахстана» серия: химическая технология. — Шымкент, 1996. — №5, — С. 24-25.

К.К. Калмаков, Г.З. Туребекова, А.Ж. Айменов, К.С. Надилов (2023) Эффективность функционирования катализатора установки каталитического крекинга. Журнал «Нефть и Газ». — №4 (136). — С. 102-112. DOI 10.37878/2708-0080/2023-4.08

Капустин В.М., Гуреев А.А. (2015) Технология переработки нефти. В 4-х частях. Часть вторая. Физико-химические процессы. — М.: Химия, 2015. — 400 с.

О.В. Крюков, И.Ф. Усманов, А.Б. Бодрый, Э.М. Рахматуллин, Н.С. Карпов. (2025) Основы технологии и эксплуатации процесса каталитического крекинга. — Уфа.: Белая река, 2025. — 400 с.

Пусурманова Г.Ж., Танашев С.Т. (2016) Рациональные способы переработки тяжелых нефтей и нефтяных остатков. — Алматы: Эверо, 2016. — 232 с.

Р. Задегбейджи. (2014) Каталитический крекинг в псевдооживленном слое катализатора. Справочник по конструкциям, процессам и оптимизации установок ККФ. — Санкт-Петербург.: Изд. Профессия, 2014. — 383 с.

Роберт А. Мейрес. (2014) Основные процессы нефтепереработки. Справочник. — Санкт-Петербург.: Изд. Профессия, 2014. — 926с.

С.Н. Хаджиева. (1982) Крекинг нефтяных фракций на цеолитсодержащих катализаторах. — М.: Химия, 1982. — 278 с.

Танашев С.Т., Идрисов М.Д. Қазақстан мұнайларының вакуумдық газойлдерін каталикалық крекинг қондырғысында зерттеу. Научно-технологическое развитие нефтегазового комплекса. Доклады вторых международных научных Надиловских чтений - Шымкент, 2005. — С. 73-77.

Танашев С.Т., Омаралиев Т.О., Идрисов М.Д. и др. (2003) Каталитический крекинг вакуумных газойлей Южно-Казахстанских нефтей. Материалы Республиканского НПК «Актуальные проблемы переработки нефти и перспективы производства смазочных материалов в Узбекистане». - Ташкент, 2003. — С. 11-12.

У.Р. Чаудури. Нефтехимия и нефтепереработка. Процессы, технологии, интеграция. — Санкт-Петербург.: Изд. Профессия, 2014. — 419 с.

Х. Анчита, Дж. Спейт. Переработка тяжелых нефтей и нефтяных остатков. Гидрогенизационные процессы. — Санкт-Петербург.: Изд. Профессия, 2014. — 378 с.

Хаджиев С.Н., Романкова И.К., Головенко А.М. и др. Влияние повышения конца кипения вакуумного дистиллята малосернистой нефти на показатели его переработки в процессе каталитического крекинга. Там же., 1978. — № 11. — С. 11

References

Ahmetov S.A. (2010) Tekhnologiya glubokoj pererabotki nefti i gaza [Deep oil and gas processing technology]: Textbook for universities. – Ufa: Izd. «Gilem». — P. 670. (in Russian)

Dzhejms G. Spejt (2012) Analiz nefti. Spravochnik. [Oil Analysis. A Handbook] –Sankt-Peterburg.: Izd. Professiya. — P. 468. (in Russian)

Idirisov M.Zh., Tanashev S.T., Omaraliev T.O., Kerimbekov S.K. i dr. (1996) Izuchenie kataliticheskogo krekinga smesey vakuumnyh gazojlej [Study of catalytic cracking of vacuum gas oil mixtures.]. Republican scientific journal "Science and Education of South Kazakhstan" series: chemical technology. — Shymkent. —№. 5. — P.24-25. (in Russian)

K.K. Kalmakov, G.Z. Turebekova, A.ZH. Ajmenov, K.S. Nadirov. (2023) Effektivnost' funkcionirovaniya katalizatora ustanovki kataliticheskogo krekinga [Efficiency of the catalyst in a catalytic cracking unit]. Journal Oil and Gas. — № 4 (136). — P. 102-112. DOI 10.37878/2708-0080/2023-4.08. (in Russian)

Kapustin V.M., Gureev A.A., (2015) Tekhnologiya pererabotki nefti. V 4-h chastyah. CHast' vtoraya.

Fiziko-himicheskie processy. [Oil refining technology. In 4 parts. Part two. Physicochemical processes.]. — M.: Himiya. — P 400. (in Russian)

O.V. Kryukov, I.F. Usmanov, A.B. Bodryj, E.M. Rahmatullin, N.S. Karpov. (2025) Osnovy tekhnologii i ekspluatatsii processa kataliticheskogo krekinga [Fundamentals of technology and operation of the catalytic cracking process]. — Ufa.: Belaya reka. — P 400. (in Russian)

Pusurmanova G.Zh., Tanashev S.T. (2016) Racional'nye sposoby pererabotki tyazhelyh neftej i neftyanyh ostatkov [Rational methods of processing heavy oils and oil residues]. — Almaty: Evero. — P 232. (in Russian)

R. Zadegejdzhi. (2014) Kataliticheskij kreking v psevdoozhizhenom sloe katalizatora. Spravochnik po konstrukciyam, processam i optimizacii ustanovok KKF [Fluidized Catalytic Cracking: A Handbook of FCC Unit Designs, Processes, and Optimization]. —Sankt-Peterburg.: Izd. Professiya, 2014. — P. 383. (in Russian)

Robert A. Mejres. (2014) Osnovnye processy neftepererabotki. Spravochnik. [Main processes of oil refining. Handbook.] —Sankt-Peterburg.: Izd. Professiya. — P. 926. (in Russian)

S.N. Hadzhieva. (1982) Kreking neftyanyh frakcij na ceolitsoderzhashchih katalizatorah [Cracking of petroleum fractions on zeolite-containing catalysts]. -M.: Himiya. — P 278. (in Russian)

Tanashev S.T., Idrisov M.D. (2005) Qazaqstan munailarynyn vakuumdyq gazojlderin katalitikalyq kreking qondyrgysynda zertteu. Nauchno-tekhnolo-gicheskoe razvitie neftegazovogo kompleksa. Doklady vtoryh mezhdunarodnyh nauchnyh Nadirovskih chtenij [Kazakhstan municipal vacuum pump gasoilderin catalytic cracking kondyrgysynda zertteu. Scientific and technological development of the oil and gas complex. Reports of the second international scientific Nadirov readings]. — Shymkent. — P.73-77. (in Kazakh)

Tanashev S.T., Omaraliev T.O., Idrisov M.D. i dr. (2003) Kataliticheskij kreking vakuumnyh gazojlej YUzhno-Kazahstanskijh neftej. Materialy Respublikanskogo NPK «Aktual'nye problemy pererabotki nefiti i perspektivy proizvodstva smazochnyh materialov v Uzbekistane». [Catalytic Cracking of Vacuum Gas Oils from South Kazakhstan Crude Oils. Proceedings of the Republican Scientific and Production Complex "Current Issues of Oil Refining and Prospects for Lubricant Production in Uzbekistan"] - Tashkent. — P.11-12. (in Russian)

U.R. CHauduri. (2014) Neftekhimiya i neftepererabotka. Processy, tekhnologii, integraciya [Petrochemicals and Oil Refining. Processes, Technologies, and Integration]. — Sankt-Peterburg.: Izd. Professiya. — P. 419. (in Russian)

H. Anchita, Dzh. Spejt. (2014) Pererabotka tyazhelyh neftej i neftyanyh ostatkov. Gidrogenizacionnye processy [Processing of heavy oils and petroleum residues. Hydrogenation processes.]. —Sankt-Peterburg.: Izd. Professiya. — P. 378. (in Russian)

Hadzhiev S.N., Romankova I.K., Golovenko A.M. i dr. (1978) Vliyanie povysheniya konca kipeniya vakuumnogo distillyata malosernistoj nefiti na pokazateli ego pererabotki v processe kataliticheskogo krekinga [The effect of increasing the final boiling point of low-sulfur crude oil vacuum distillate on its processing performance in the catalytic cracking process.]. — № 11. — P. 11. (in Russian)

© **B.T. Kuderina**^{1*}, **N.B. Kassenova**¹, **A.S. Khamitova**¹, **A.G. Zhaxybayeva**²,
A.B. Abdrakhmanova³, 2025.

¹Sh.Ualikhanov Kokshetau University, Kokshetau, Kazakhstan;

²L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan;

³Shakarim University, Semey, Kazakhstan.

E-mail: b.kuderina@shokan.edu.kz

MODIFICATION OF THE STRUCTURE OF OXIDE CATHODE MATERIALS TO ENHANCE THE CAPACITY AND STABILITY OF Li - ION BATTERIES

Kuderina Balken — PhD, Sh. Ualikhanov Kokshetau University, Kokshetau, Kazakhstan,

E-mail: b.kuderina@shokan.edu.kz, <https://orcid.org/0009-0001-4602-81>;

Kassenova Nazira — PhD, Sh. Ualikhanov Kokshetau University, Kokshetau, Kazakhstan,

E-mail: nazira_kassenova09@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0570-1784>;

Khamitova Aina — Candidate of Chemistry Sciences, Sh. Ualikhanov Kokshetau University, Kokshetau, Kazakhstan,

E-mail: aina - hamitova@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6246-5976>;

Zhaxybayeva Aigerim — PhD, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan,

E-mail: zhaxybayeva_ag_1@enu.kz, <https://orcid.org/0000-0002-1071-361>;

Abdrakhmanova Azhar — Master of Chemistry, Shakarim University, Kazakhstan,

E-mail: zzzk2014@mail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1196-6081>.

Abstract. At present, due to the growing global energy consumption, the demand for energy sources continues to increase every year. Consequently, there is a growing need for the development of powerful energy generators and storage devices capable of delivering large amounts of energy over extended periods. Lithium-ion batteries are currently among the most widely used energy storage systems in portable electronic devices. These batteries are characterized by a high energy density and low self-discharge rate, with a specific energy reaching up to 300 Wh·kg⁻¹, which is sufficient to power even electric vehicles. However, optimization of the performance of these types of batteries under high current loads is still required. To improve the electrochemical performance of lithium-ion batteries, special attention is being paid to the development and modification of cathode materials, which play a decisive role in determining the capacity, stability, and lifetime of the cell. Various approaches, such as surface coating, doping, and structural modification, have been proposed to enhance their conductivity and structural integrity. Advanced fabrication techniques, including electrospinning and

controlled annealing, allow for the formation of nanostructured cathodes with improved ion diffusion pathways. Additionally, the introduction of conductive additives helps to minimize internal resistance and increase rate capability (C-rate). Continued research in this area aims to achieve higher efficiency, safety, and sustainability of lithium-ion energy storage systems.

Keywords: lithium-ion battery, cathode material, electrospinning, annealing, conductive additive, C-rate

© Б.Т. Кудерина^{1*}, Н.Б. Касенова¹, А.С. Хамитова¹, А.Г. Жаксыбаева²,
А.Б. Абдрахманова³, 2025.

¹Ш. Уәлиханов атындағы Көкшетау университеті, Көкшетау, Қазақстан;

²Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан;

³Шәкәрім университеті, Семей, Қазақстан.

E-mail: b.kuderina@shokan.edu.kz

Li - ИОНДЫ АККУМУЛЯТОРЛАРДЫҢ СЫЙЫМДЫЛЫҒЫ МЕН ТҰРАҚТЫЛЫҒЫН АРТТЫРУ ҮШІН ОКСИДТІ КАТОД МАТЕРИАЛДАРЫН МОДИФИКАЦИЯЛАУ

Кудерина Балкен — PhD, Ш. Уәлиханов атындағы Көкшетау университеті, Көкшетау, Қазақстан,
E-mail: b.kuderina@shokan.edu.kz, <https://orcid.org/0009-0001-4602-81>;

Касенова Назира — PhD, Ш. Уәлиханов атындағы Көкшетау университеті, Көкшетау, Қазақстан,
E-mail: nazira_kassenova09@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0570-1784>;

Хамитова Анна — химия ғылымдарының кандидаты, Ш. Уәлиханов атындағы Көкшетау университеті, Көкшетау, Қазақстан,
E-mail: aina - hamitova@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6246-5976>;

Жаксыбаева Айгерим — PhD, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан,

E-mail: zhaxybayeva_ag_1@enu.kz, <https://orcid.org/0000-0002-1071-3616>;

Абдрахманова Ажар — химия магистрі, Шәкәрім университеті, Семей, Қазақстан,
E-mail: zzzk2014@mail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1196-6081>.

Аннотация. Қазіргі уақытта жаһандық энергия тұтынудың артуына байланысты энергия көздеріне деген сұраныс жыл сайын өсіп келеді. Соның нәтижесінде үлкен көлемде энергияны ұзақ уақыт бойы жеткізе алатын қуатты генераторлар мен энергия сақтау құрылғыларын әзірлеу қажеттілігі артуда. Литий-ионды аккумуляторлар қазіргі таңда портативті электрондық құрылғыларда, сонымен қатар электр көліктерінде және стационарлық энергия сақтау жүйелерінде кеңінен қолданылатын энергия сақтау жүйелерінің бірі болып табылады. Бұл аккумуляторлар жоғары энергия тығыздығымен, ұзақ циклдік тұрақтылығымен және өзіндік разрядтың төмен деңгейімен сипатталады, олардың меншікті энергиясы 300 Вт·сағ/кг-ға дейін жетеді, бұл оларды жоғары қуатты қолданбаларда тиімді етеді. Алайда, жоғары тоқтық жүктемелер кезінде олардың жұмысын оңтайландыру, ұзақ мерзімді сенімділігін қамтамасыз ету және қауіпсіздік көрсеткіштерін арттыру әлі де өзекті ғылыми мәселе болып қала

береді. Литий-ионды аккумуляторлардың электрохимиялық сипаттамаларын жақсарту үшін катодтық материалдарды әзірлеу мен модификациялауға ерекше көңіл бөлінеді, себебі олар элементтің сыйымдылығын, циклдік тұрақтылығын және қызмет ету мерзімін анықтайтын негізгі компонент болып табылады. Өткізгіштікті және құрылымдық тұрақтылықты арттыру мақсатында беткі қабатты қаптау, допирлеу және нанокұрылымды құрылымдық модификациялар сияқты түрлі тәсілдер қолданылады. Электроспиннинг, бақыланатын отжиг және басқа заманауи технологиялар иондардың диффузия жолдарын жақсартып, жоғары өнімді катодтар алуға мүмкіндік береді. Сонымен қатар, өткізгіш қоспаларды енгізу ішкі кедергіні азайтып, жоғары токтарда жұмыс істеу қабілетін (C-rate) арттыруға ықпал етеді. Осы бағыттағы зерттеулер литий-ионды аккумуляторларға негізделген энергия сақтау жүйелерінің тиімділігін, сенімділігін және қауіпсіздігін арттыруға бағытталған.

Түйін сөздер: литий-ионды аккумулятор, катодтық материал, электроспиннинг, күйдіру, өткізгіш қоспа, C-rate

© Б.Т. Кудерина^{1*}, Н.Б. Касенова¹, А.С. Хамитова¹, А.Г. Жаксыбаева²,
А.Б. Абдрахманова³, 2025.

¹Кокшетауский университет им. Ш. Уалиханова, Кокшетау, Казахстан;

²Евразийский национальный университет Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан;

³Университет Шакарима, Семей, Казахстан.

E-mail: b.kuderina@shokan.edu.kz

МОДИФИКАЦИЯ СТРУКТУРЫ ОКСИДНЫХ КАТОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ ЁМКОСТИ И СТАБИЛЬНОСТИ LI-ИОН АККУМУЛЯТОРОВ

Кудерина Балкен — PhD, Кокшетауский университет имени Ш. Уалиханова, Кокшетау, Казахстан,
E-mail: b.kuderina@shokan.edu.kz, <https://orcid.org/0009-0001-4602-81>;

Касенова Назира — PhD, Кокшетауский университет им. Ш. Уалиханова, Кокшетау, Казахстан,
E-mail: nazira_kassenova09@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0570-1784>;

Хамитова Анна — кандидат химических наук, Кокшетауский университет имени Ш. Уалиханова,
Кокшетау, Казахстан,

E-mail: aina - hamitova@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6246-5976>;

Жаксыбаева Айгерим — PhD, Евразийский национальный университет им Л.Н. Гумилева, Астана,
Казахстан,

E-mail: zhaxybayeva_ag_1@enu.kz; <https://orcid.org/0000-0002-1071-3616>;

Абдрахманова Ажар — магистр химии, университет Шакарима, Семей, Казахстан,

E-mail: zzzk2014@mail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1196-6081>.

Аннотация. В настоящее время в связи с ростом мирового энергопотребления спрос на источники энергии ежегодно продолжает увеличиваться. Вследствие этого возрастает необходимость разработки мощных генераторов и устройств накопления энергии, способных обеспечивать подачу значительных объёмов энергии в течение длительного времени. Литий-ионные аккумуляторы являются

одной из наиболее широко используемых систем хранения энергии в портативной электронике и электротранспорте. Эти системы характеризуются высокой плотностью энергии и низкой степенью саморазряда, при этом их удельная энергия достигает 300 Вт·ч/кг, что позволяет применять их даже для питания электромобилей. Однако оптимизация работы данного типа аккумуляторов при высоких токовых нагрузках остаётся актуальной научной задачей. Для повышения электрохимических характеристик литий-ионных аккумуляторов особое внимание уделяется разработке и модификации катодных материалов, которые определяют ёмкость, стабильность и срок службы ячейки. Различные технологические подходы — нанесение поверхностных покрытий, допирование и структурная модификация — применяются для повышения проводимости и улучшения механической и химической устойчивости катодов. Современные методы получения, включая электроспиннинг и контролируемый отжиг, позволяют формировать наноструктурированные катоды с оптимизированными путями диффузии ионов лития. Дополнение катодов проводящими добавками способствует снижению внутреннего сопротивления и повышению способности эффективно работать при высоких скоростях заряда-разряда (C-rate). Проводимые исследования направлены на повышение эффективности, безопасности и долговечности литий-ионных систем хранения энергии, что делает разработку новых катодных материалов и методов их модификации особенно значимой для дальнейшего прогресса энергетических технологий и расширения их практической применимости.

Ключевые слова: литий-ионный аккумулятор, катодный материал, электроспиннинг, отжиг, проводящая добавка, C-rate

Introduction. As is well known, the search for potential cathode materials for lithium-ion batteries among lithium-containing compounds continues to this day. The material from which the cathode is made is the key component of a lithium-ion battery, determining and limiting its energy capacity. Cathode materials must ensure the reversible de/intercalation of Li^+ ions corresponding to the electrochemical activity of the $\text{Me}^{x+}/\text{Me}^{y+}$ redox pair, while maintaining their structural configuration; they must also operate under high current densities and store large amounts of energy.

The most widely used cathode active materials are lithium-rich transition metal oxides, including the layered lithium cobalt oxide (LiCoO_2) (Mao et al., 2018; Demirocak et al., 2017; Zhang et al., 2015) the spinel-type lithium manganese oxide (LiMn_2O_4) (Rodríguez et al., 2018), the lithium nickel manganese cobalt oxide (LiNiMnCoO_2 or NMC) (Jana et al., 2019), and the olivine-structured lithium iron phosphate (LiFePO_4) (Li et al., 2018; Bachtin et al., 2016). Among these cathode materials, particular attention has been given to lithium iron phosphate (LiFePO_4 or LFP), discovered in 1996, which exhibits good electrochemical performance and low internal resistance. However, this type of active material is characterized by low electronic ($10^{-9} \text{ S}\cdot\text{cm}^{-1}$) and ionic conductivity (Bachtin et al., 2018; Toprakci et al., 2011; Bruce et al., 2012; Kyeremateng, 2014).

Attempts have been made to improve the active material by introducing various conductive additives into the lithium iron phosphate-based suspension, reducing the particle size of the active material, and other approaches (Shim et al., 2003; Li et al., 2012; Liang et al., 2013).

In the present work, methods for optimizing the morphology of cathode coatings based on this material are presented through the deposition of thin layers using the electrostatic spraying technique.

Materials and methods. Experimental Section. Preparation of Suspensions for Electrostatic Spraying (Table 1).

Table 1. Composition ratios of the components

	LiFePO ₄ , %	PVDF, %	Carbon black obtained by annealing PVDF, %	Timcal Super C45, %	Nanotubes, CNT, %
Suspension 1	95	2	3		
Suspension 2	90	7		3	
Suspension 3	92	7,4			0,6
Suspension 4	88	7		4,5	0,5

The stages of suspension preparation included the following steps: 1.The polymer polyvinylidene fluoride (PVDF) (Solef 5130, Solvay) was gradually dissolved in a mixture of acetone and N,N-dimethylformamide at 60 °C for two hours. This procedure was preliminarily applied for the preparation of all four suspensions. 2.For the preparation of Suspension 1, after two hours, lithium iron phosphate (LiFePO₄, Gelon LIB Group) powder was gradually added to the polymer solution.3.For the preparation of Suspensions 2 and 4, before adding the active material, a commercial conductive additive, Timcal Super C45, was first introduced into the polymer solution after two hours of dissolution.4.For the preparation of Suspension 3, carbon nanotubes (CNT, Solvay) were added to the polymer solution prior to the introduction of LiFePO₄.5.After the addition of all components, the suspensions were stirred for 12 hours.

Electrostatic spraying was performed by adjusting the following parameters: the distance between the nozzle and the substrate – 7–12 cm, voltage –12–15 kV, and suspension feed rate — 0.008–0.012 mL/min. Annealing of the samples obtained from Suspension 1 was carried out in a tubular furnace under an argon atmosphere at 460 °C for 1 minute.

Results and Discussion. Polymers serve as sources of carbon black, which is obtained by annealing them in an inert argon atmosphere or under vacuum (Liu et al., 2013; Toprakci et al., 2012).

As shown in Figure 1a, the cathode coating based on LiFePO₄ and PVDF, obtained by the electrostatic spraying method, exhibits a fibrous structure with high porosity. Figure 1b presents the results of electrochemical testing of this cathode after thermal treatment at 460 °C for one minute.

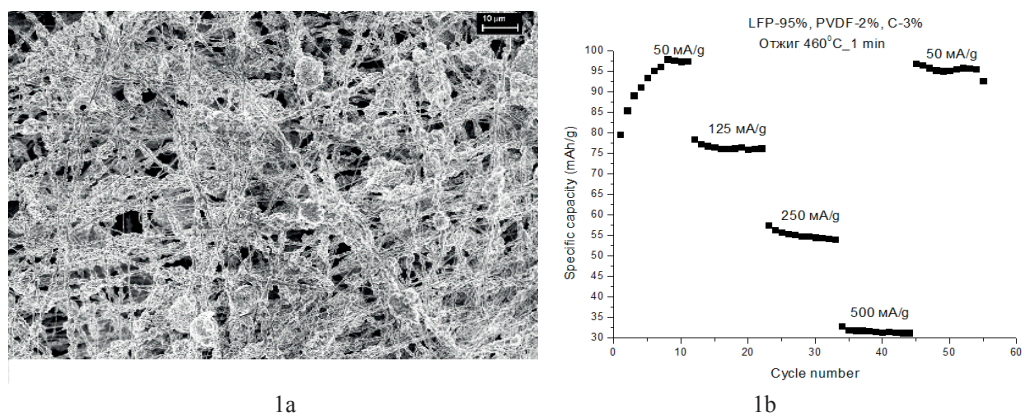


Figure 1a - Micrograph of the cathode obtained by electrostatic spraying followed by annealing at 460°C for 1 minute; Figure 1b - Discharge capacity of the corresponding electrode

The selection of this temperature was based on the thermogravimetric analysis data of the electrospun PVDF film: in the temperature range of 400 –500 °C, active decomposition of the polymer structure occurs. Figure 2a shows the elastic PVDF film obtained by electrostatic spraying, while Figure 2b presents a micrograph of the same film after thermal treatment at 400 °C.

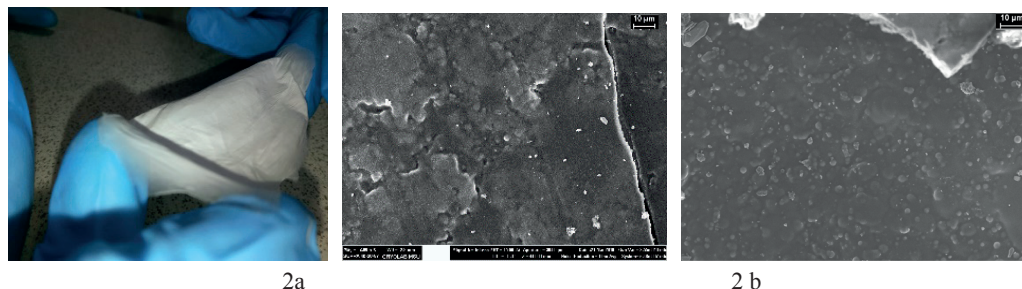
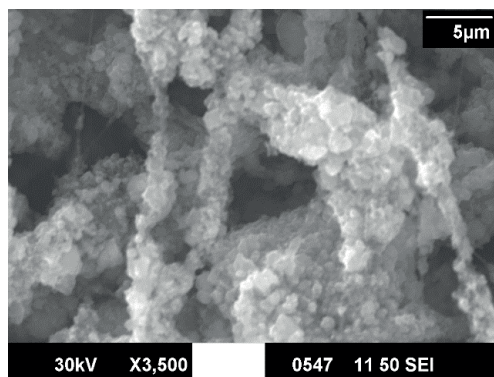


Figure 2a - PVDF film obtained by electrostatic spraying;
Figure 2b - Thermal decomposition of the electrospayed PVDF film

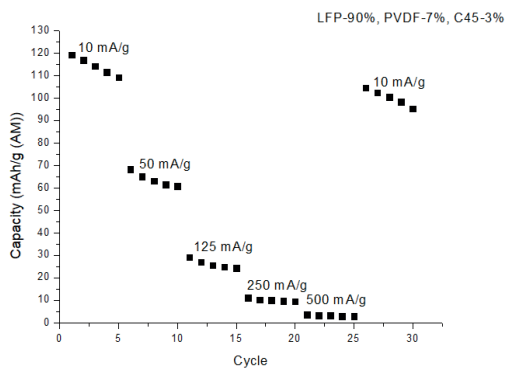
To maximize the yield of carbon black from PVDF while maintaining the adhesion of the electrode coating to the current collector, 460 °C was selected as the optimal temperature for these purposes. As a result of annealing, the obtained cathode with a composition of 95%, 2%, and 3% of LiFePO_4 , PVDF, and carbon, respectively, demonstrated specific discharge capacities of 95, 75, 55, 30, and 95 mA·h/g at current densities of 50, 125, 250, 500, and 50 mA/g of active material, respectively.

Electrostatic spraying also enables the fabrication of cathode coatings with the addition of commercial conductive additives. In Figure 3a, the electrode coating containing 3% of the commercial conductive additive Timcal Super C45 exhibits a porous structure; however, its specific discharge capacity is inferior to that of the positive electrode obtained from suspension 1. At current densities of 10, 50, 125, 250,

500, and 10 mA/g, the cathode prepared from suspension 2 demonstrates discharge capacities of 105, 60, 20, 10, 2, and 90 mA·h/g of LFP, respectively (Figure 3b).



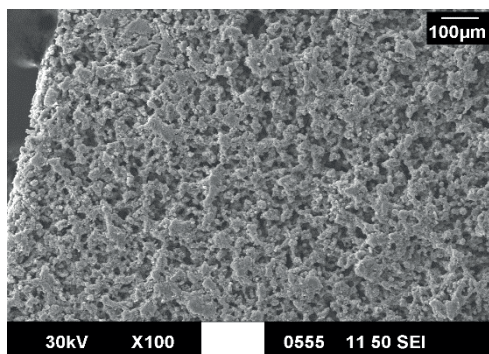
3 a



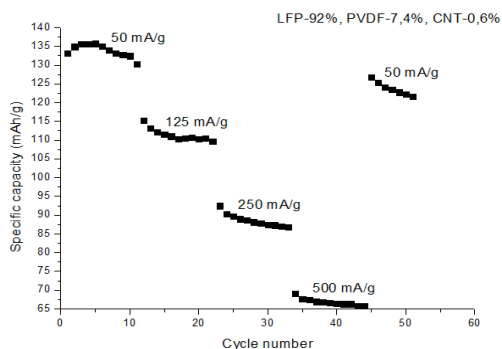
3 b

Figure 3a - Micrograph of the cathode obtained by electrospinning with the addition of 3% Timcal Super C45; Figure 3b - Discharge capacity of the corresponding electrode.

The addition of single-walled carbon nanotubes significantly densifies the cathode coating, as shown in Figure 4a, while still maintaining its porosity. The nanotubes enhance the C-rate performance of the electrode, exhibiting specific capacities of 130, 110, 85, 65, and 120 mA·h/g of active material at current densities of 50, 125, 250, 500, and 50 mA/g LFP, respectively (Figure 4b).



4 a

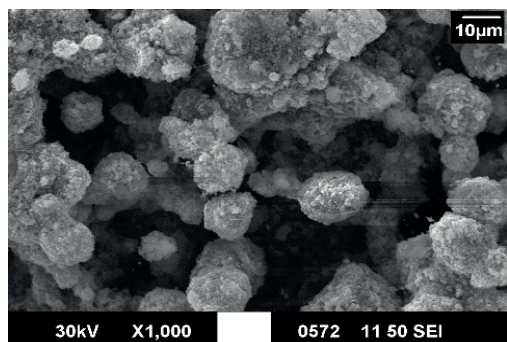


4 b

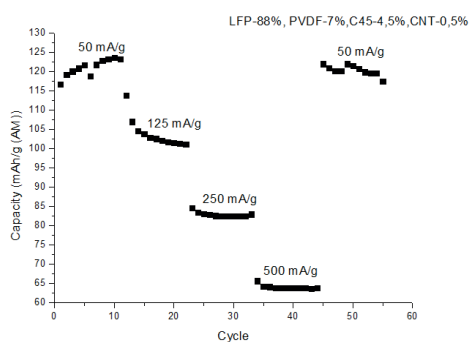
Figure 4a - Cathode obtained by electrospinning with the addition of 0.6% CNT;
Figure 4b - Discharge capacity of the corresponding electrode

The positive electrode with the simultaneous addition of two types of commercial conductive additives - Timcal Super C45 and single-walled carbon nanotubes (CNTs) - forms a sufficiently porous coating (Figure 5a). The active material containing Timcal Super C45 and CNTs develops large and small rounded agglomerates that are randomly distributed throughout the coating thickness. It is likely that the presence of such agglomerates prevents the simultaneous addition of both conductive additives from

improving the C-rate performance of this positive electrode. At current densities of 50, 125, 250, 500, and 50 mA per gram of LFP, the capacity of this cathode is 120, 100, 80, 63, and 120 mA·h/g, respectively (Figure 5b).



5 a



5 b

Figure 5a - Cathode obtained by electrospinning with the addition of 4.5% Timcal Super C45 and 0.5% CNT; Figure 5b - Discharge capacity of this electrode.

Conclusion. Thus, the conducted research demonstrates that the annealing of positive electrodes obtained by electrostatic spraying enables the formation of cathodes with improved structural stability and electrochemical performance at high current densities. Thermal treatment at 460 °C in an inert argon atmosphere facilitates partial carbonization of the PVDF binder, forming a thin conductive carbon network that enhances the overall electronic conductivity of the electrode without compromising its adhesion to the current collector.

The results indicate that the incorporation of 3% Timcal Super C45 conductive additive into the LiFePO_4 -based suspension does not significantly improve the electrochemical behavior of the cathode. However, the fibrous morphology of the coating is well preserved, maintaining sufficient porosity for effective lithium-ion diffusion.

In contrast, the addition of single-walled carbon nanotubes (CNTs), either alone or in combination with Timcal Super C45, significantly improves the specific discharge capacity of the electrospayed cathodes, particularly under higher current rates. This enhancement can be attributed to the formation of an interconnected conductive network of CNTs, which facilitates electron transport across the electrode structure. Nevertheless, the inclusion of CNTs and mixed additives results in a denser and less porous coating, which may slightly limit ion transport at very high C-rates.

Overall, the study confirms that careful optimization of electrode composition and thermal treatment parameters plays a crucial role in achieving a balance between conductivity, porosity, and structural integrity, ultimately contributing to improved performance of LiFePO_4 - based cathodes for high-rate lithium-ion batteries.

References

- Mao J.K., Li J., Xu Zh. (2018) Coupling reactions and collapsing model in the roasting process of recycling metals from LiCoO_2 batteries. *Journal of Cleaner Production*. — Vol. 205. — P. 923-929. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2018.09.098> (in English)
- Demirocak D.E., Srinivasan S.S., Stefanakos E.K. (2017) A Review on Nanocomposite Materials for Rechargeable Li-ion Batteries. *Applied Sciences*. — Vol. 7. — № 7. — P. 731. DOI:10.3390/app7070731 (in English)
- Zhang Ch., Liang Y., Yao L., Qiu Y. (2015) Effect of thermal treatment on the properties of electrospun LiFePO_4 – carbon nanofiber composite cathode materials for lithium-ion batteries, *Journal of Alloys and Compounds*. — Vol. 627. — P. 91–10. DOI:10.1016/j.jallcom.2014.12.067 (in English)
- Rodríguez R.A., Pérez-Cappe E.L., Laffita Y.M., Ardanza A.C., Salazar J.S., Santos M.Á., Miguel A., Frutis A., Nelcy Della Santina Mohalem, Oswaldo Luiz Alves (2018) Structural defects in LiMn_2O_4 induced by gamma radiation and its influence on the Jahn-Teller effect. *Solid State Ionics*. — Vol. 324. — P. 77-86 (in English)
- Jana A., Shaver G.M., García R.E. (2019) Physical, on the fly, capacity degradation prediction of LiNiMnCoO_2 -graphite cells. *Journal of Power Sources*. — Vol. 422. — P.85-195, <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour> (in English)
- Li Y., Wang J., Yao J., Huang H. X., Du Zh. Q, Gu H, Wang Zh. T. (2018) Enhanced cathode performance of LiFePO_4/C composite by novel reaction of ethylene glycol with different carboxylic acids. *Materials Chemistry and Physics*. — Vol. 224. — P. 293-300 <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys> (in English)
- Bachtin M., Kaus M., Pfaffmann L., Indris S., Knapp M., Roth Ch., Ehrenberg H. (2016) Comparison of electrospun and conventional LiFePO_4/C composite cathodes for Li-ion batteries, *Materials Science and Engineering B*. — Vol. 213. — P. 98-104. DOI <http://dx.doi.org/10.1016/j.mseb.2016.04.006> (in English)
- Bachtin K., Kramer D., Chakravadhanula V.S.Kiran, Mu Xi., Trouillet V., Kaus M., Indris S., Ehrenberg H., Roth Ch. (2018) Activation and degradation of electrospun LiFePO_4 battery cathode. *Journal of Power Sources*. *Journal of Power Sources*. — Vol. 396. — P.386-394, <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2018.06.051> (in English)
- Toprakci O., Ji L, Lin Zh., Hatice A.K. Toprakci, Zhang Xi. (2011) Fabrication and electrochemical characteristics of electrospun LiFePO_4 /carbon composite fibers for lithium-ion batteries. *Journal of Power Sources*. — Vol.196. — P.7692–7699. doi:10.1016/j.jpowsour. 2011.04.031 (in English)
- Bruce P.G., Freunberger S.A., Hardwick L.J., Tarascon J.M. (2012) Li-O and Li-S batteries with high energy storage. *Nature Materials*. — Vol. 11. — P. 19-29 DOI: 10.1038/nmat3191 (in English)
- Kyeremateng N.A. (2014) Self-Organised TiO_2 Nanotubes for 2D or 3D Li-Ion Microbatteries *Chemelectrochem*. — Vol. 1. — № 9. — P. 1442-1466. DOI:10.1002/celc.201402109 (in English)
- Shim, J., Guerfi, A. Zaghib, K., Striebel K.A. (2003) Effect of conductive additives in LiFePO_4 cathode for lithium-ion batteries. —374. 204th Meeting. The Electrochemical Society, Inc., <https://escholarship.org/uc/item/7c18j1tw> (in English)
- Li X.L., Zhang Y.L., Song H.F., Du K., Wang H., Li H.Y., Huang J.M. (2012) The Comparison of Carbon Conductive Additives with Different Dimensions on the Electrochemical Performance of LiFePO_4 Cathode. *International Journal of Electrochemical Science*. — Vol.7. — P.7111 – 7120. DOI:10.1016/S1452-3981(23)15771-3 (in English)
- Liang H., Zhang L. Reducing the particle size of LiFePO_4 enabled by yeast (2013) *Russian Journal of Electrochemistry*. —Vol.49. — 10. — P.960–962. <https://doi.org/10.1134/S1023193513150019> (in English)
- Liu J., Liu W., Ji Sh., Zhou Yi., Hodgson P., Li Y. (2013) Electrospun Spinel $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ Hierarchical Nanofibers as 5V Cathode Materials for Lithium-Ion Batteries. *Chempluschem communications*. — Vol.78. — №7. — P.636641. <https://doi.org/10.1002/cplu.201300180> (in English)
- Toprakci O., Hatice A.K. Toprakci, Ji L., Xu G., Zhan L. and Zhang X. (2012) Carbon Nanotube-Loaded Electrospun LiFePO_4 /Carbon Composite Nanofibers as Stable and Binder-Free Cathodes for Rechargeable Lithium-Ion Batteries. *Applied Materials and Interfaces*. — Vol. 4. — P.1273–1280. <https://doi.org/10.1021/am201527r> (in English)

© **B.M. Kaldybaeva^{1*}, D.M. Kenzhebekov¹, D.Zh. Janabayev², L.M. Ulyev³,
A. Zholshybek¹, 2025.**

¹M. Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan;

²Shymkent University, Shymkent, Kazakhstan;

³ National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia.

E-mail: kaldybaeva.b@mail.ru

IMPROVING THE ENERGY EFFICIENCY OF OIL TREATMENT AND STABILIZATION UNITS IN THE FIELD

Kaldybaeva Botagoz — PhD, associate professor, M. Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan,

E-mail: kaldybaeva.b@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1570-2107>;

Kenzhebekov Doskhan — Master, senior teacher, M. Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan,

E-mail: doskhan_349@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6367-5975>;

Janabayev Dauren — PhD of Shymkent University, Shymkent, Kazakhstan,

E-mail: janabaev19@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6522-0536>;

Ulyev Leonid — Doctor of Technical Sciences, Professor, National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia,

E-mail: ulyevlm@tpu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2732-6444>;

Zholshybek Ayan — Master, teacher, M. Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan,

E-mail: ayan-97.zh@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4535-9730>.

Abstract. The article discusses improving the energy efficiency of an oil treatment and stabilization facility in the field using pinch analysis methods. Pinch analysis as a methodology for minimizing the energy consumption of a process involves calculating thermodynamically justified amounts of energy consumption and approaching them by optimizing heat transfer processes, energy supply methods, and process characteristics. Pinch analysis is used in various industries, in particular in oil and gas processing, petrochemistry and the chemical industry, and can be used both in designing new technological facilities and in solving problems of optimizing the operation of existing industries, taking into account the principles of energy conservation. The Total Site energy system is a complex facility that is part of large industrial enterprises or industrial parks. As a rule, these are energy production facilities that convert various types of fuels into heat and electricity, providing basic processes. The main scientific hypothesis is to find a compromise between full energy recovery at facilities, taking into account

operational and capital costs. In this paper, the object of research is the heat exchange system of an oil stabilization unit located in a field with production of 34200 thousand tons of crude oil per year. The thermal and energy integration of the oil stabilization and treatment plant has been carried out. As a result of the project's implementation, the energy consumption of external hot energy sources will decrease by 213.4 MW, or 55%. Greenhouse gas emissions will decrease by about 71%. The discounted payback period is about 11 months from the moment the reconstruction project reaches its target capacity.

Keywords: Heat exchangers, composite curves, energy efficiency, Pinch analysis, cost optimization, crude oil

This research was funded by the Committee of Science of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (IRN AP26104837 – Improving the energy efficiency of oil and gas production facilities by integrating processes during preparation and production)

© Б.М. Калдыбаева^{1*}, Д.М. Кенжебеков¹, Д.Ж. Джанабаев², Л.М. Ульев³,
А. Жолшыбек¹, 2025.

¹М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан;

²Шымкент Университеті, Шымкент, Қазақстан;

³Томск Политехникалық Ұлттық зерттеу университеті, Томск, Ресей.

E-mail: kaldybaeva.b@mail.ru

КӘСІПШІЛІКТЕ МҰНАЙДЫ ДАЙЫНДАУ ЖӘНЕ ТҰРАҚТАНДЫРУ ҚОНДЫРҒЫСЫНЫҢ ЭНЕРГИЯ ТИІМДІЛІГІН АРТТЫРУ

Калдыбаева Ботағоз — PhD, М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университетінің қауымдастырылған профессоры, Шымкент, Қазақстан,

E-mail: kaldybaeva.b@mail.ru; <https://orcid.org/0000-0002-1570-2107>;

Кенжебеков Досхан — магистр, М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университетінің аға оқытушысы, Шымкент, Қазақстан,

E-mail: doskhan_349@mail.ru; <https://orcid.org/0000-0002-6367-5975>;

Джанабаев Даурен — PhD, Шымкент университетінің аға оқытушысы, Шымкент, Қазақстан,

E-mail: janabaev19@mail.ru; <https://orcid.org/0000-0002-6522-0536>;

Ульев Леонид — техника ғылымдарының докторы, профессоры, Томск политехникалық ұлттық зерттеу университеті, Томск, Ресей,

E-mail: ulyevlm@tpu.ru; <https://orcid.org/0000-0002-2732-6444>;

Жолшыбек Аян — магистр, М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университетінің оқытушысы, Шымкент, Қазақстан,

E-mail: ayan-97.zh@mail.ru; <https://orcid.org/0000-0003-4535-9730>.

Аннотация. Мақалада пинч-талдау әдістерін қолдана отырып, кәсіпшілікте мұнайды дайындау және тұрақтандыру қондырғысының энергия тиімділігін арттыру қарастырылады. Пинч-талдау процестің энергия тұтынуын азайту әдістемесі ретінде жылу беру процестерін, энергиямен жабдықтау әдістерін және технологиялық процестердің сипаттамаларын оңтайландыру арқылы

энергия тұтынудың термодинамикалық негізделген көлемін есептеуді және оларға жақындауды қамтамасыз етеді. Пинч-талдау әртүрлі салаларда, атап айтқанда мұнай және газ өңдеу, мұнай - химия және химия өнеркәсібінде қолданылады және жаңа технологиялық объектілерді жобалауда да, энергияны үнемдеу принциптерін ескере отырып, қолданыстағы өндірістердің жұмысын оңтайландыру мәселелерін шешуде де қолданылады. Total site энергетикалық жүйесі ірі өнеркәсіптік кәсіпорындардың немесе индустриялық парктердің құрамына кіретін күрделі нысан болып табылады. Әдетте, бұл әр түрлі отынды жылу мен электр энергиясына айналдыратын, негізгі процестерді қамтамасыз ететін энергия өндіретін объектілер. Негізгі ғылыми гипотеза операциялық және күрделі шығындарды ескере отырып, объектілерде энергияны толық қалпына келтіру арасында ымыраға келу болып табылады. Бұл жұмыста зерттеу объектісі жылына 34 200 мың тонна шикі мұнай өндіретін кәсіпшілікте орналасқан мұнайды тұрақтандыру қондырғысының жылу алмасу жүйесі болып табылады. Жұмыста мұнайды тұрақтандыру және дайындау қондырғысының жылу-энергетикалық интеграциясы орындалды. Жобаны енгізу нәтижесінде сыртқы ыстық энергия тасымалдаушылардың энергия тұтынуы 213,4 МВт-қа немесе 55% - ға төмендейді. Парниктік газдар шығарындылары шамамен 71% - ға төмендейді. Дисконтталған өтелу мерзімі қайта құру жобасы берілген қуатқа шыққан сәттен бастап шамамен 11 ай шамасын құрайды.

Түйін сөздер: Жылуалмастырғыш аппараттар, құрама қисықтар, энергия тиімділігі, Pinch талдауы, шығындарды оңтайландыру, шикі мұнай

Бұл зерттеуді Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігінің Ғылым комитеті қаржыландырды (ИРН АР26104837 – Дайындау және өндіру кезіндегі процестерді интеграциялау арқылы мұнай және газ өндіру объектілерінің энергия тиімділігін арттыру).

© Б.М. Калдыбаева^{1*}, Д.М. Кенжебеков¹, Д.Ж. Джанабаев², Л.М. Ульев³,
А. Жолшыбек¹, 2025.

¹Южно-Казахстанский университет им. М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан;

²Шымкентский Университет, Шымкент, Казахстан;

³ Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Томск, Россия.

E-mail: kaldybaeva.b@mail.ru

ПОВЫШЕНИЕ ЭНЕРГОЭФФЕКТИВНОСТИ УСТАНОВКИ ПОДГОТОВКИ И СТАБИЛИЗАЦИИ НЕФТИ НА ПРОМЫСЛЕ

Калдыбаева Ботагоз — PhD, ассоциированный профессор Южно – Казахстанского университета имени М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан,
E-mail: kaldybaeva.b@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1570-2107>;

Кенжебеков Досхан — магистр, старший преподаватель Южно – Казахстанского университета имени М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан,

E-mail: doskhan_349@mail.ru; <https://orcid.org/0000-0002-6367-5975>;

Джанобаев Даурен — PhD, старший преподаватель Шымкентского университета, Шымкент, Казахстан,

E-mail: janabaev19@mail.ru; <https://orcid.org/0000-0002-6522-0536>.

Ульев Леонид — доктор технических наук, профессор Национального исследовательского Томского политехнического университета, Томск, Россия,

E-mail: ulyevlm@tpu.ru; <https://orcid.org/0000-0002-2732-6444>;

Жолшыбек Аян — магистр, преподаватель Южно – Казахстанского университета имени М. Ауэзова. Шымкент, Казахстан,

E-mail: ayan-97.zh@mail.ru; <https://orcid.org/0000-0003-4535-9730>.

Аннотация. В статье рассматривается повышение энергоэффективности установки подготовки и стабилизации нефти на промысле с использованием методов пинч-анализа. Пинч-анализ как методология минимизации энергопотребления предусматривает расчёт термодинамически обоснованных объёмов потребления энергии и приближение к ним путём оптимизации процессов теплопередачи, методов энергоснабжения и параметров технологических процессов. Данная методика находит широкое применение в различных отраслях — в нефте- и газопереработке, нефтехимии и химической промышленности — и может использоваться как при проектировании новых технологических объектов, так и при решении задач оптимизации работы действующих производств с учётом принципов энергосбережения. Энергосистема Total Site представляет собой сложный объект, являющийся частью крупных промышленных предприятий или индустриальных парков. Как правило, это теплоэнергетические комплексы, преобразующие различные виды топлива в тепло и электроэнергию и обеспечивающие ключевые технологические процессы. Основная научная гипотеза исследования заключается в поиске компромисса между максимальной рекуперацией энергии и необходимыми операционными и капитальными затратами. В данной работе объектом исследования является система теплообмена установки стабилизации нефти, расположенной на промысле с добычей 34 200 тыс. т сырой нефти в год. Проведена теплоэнергетическая интеграция установки стабилизации и подготовки нефти. По результатам анализа показано, что внедрение проекта позволит снизить потребление внешних горячих энергоносителей на 213,4 МВт, что составляет около 55 %. Выбросы парниковых газов уменьшатся примерно на 71 %. Дисконтированный срок окупаемости составляет около 11 месяцев с момента выхода проекта реконструкции на проектную мощность.

Ключевые слова. Теплообменные аппараты, составные кривые, энергоэффективность, Pinch-анализ, оптимизация затрат, сырая нефть

Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (ИРН AP26104837–Повышение энергоэффективности объектов нефтегазодобывающей промышленности путем интеграции процессов при подготовке и добыче)

Introduction. To increase energy efficiency and reduce costs in the oil refining industry, it is necessary to develop comprehensive methods for integrating industrial

processes and start directly with oil and gas production. It is necessary to develop an energy-efficient method of targeted energy delivery to the well to prevent oil paraffination, and it is also necessary to develop energy-efficient methods for preparing and stabilizing crude oil during production and energy-efficient integrated methods for liquefying associated petroleum gas (Smit et al., 2000; Khusanov et al., 2017). When solving the problems of increasing the energy efficiency of technical systems, the issues of thermodynamic optimization of processes occurring in the elements of thermal power equipment and in thermal power systems themselves are primarily considered. One of the most effective methods of parametric optimization of thermal energy processes is pinch analysis or the method of integration of thermal processes (Tovar-Facio et al., 2020; Carmona-Martínez et al., 2023). However, one of the main limitations of the pinch method is its focus on the enthalpy approach to the analysis and optimization of heat fluxes in the system under consideration.

In connection with the above, there is a need to develop such a method of thermodynamic analysis and improvement of technical systems that would combine the advantages of the exergetic method and the method of structural and parametric optimization of thermal processes based on pinch analysis. Increased energy efficiency in the manufacturing industry can be achieved through new processes, production chain upgrades, better process integration, etc. But inter-factory integration (Klemeš et al. 1997) and inter-industry integration are still under development, and some results may be applicable to the low-carbon industry (Kuznetsov et al., 2022). The concept was first established (Dhole et al. 1993) and later updated by many authors and various aspects of biomass integration (Amiri et al. 2021), including centralized cooling (Liew et al., 2015), process modification (Chew et al., 2015), modernization of the heat exchanger network (Čuček et al., 2015) and others.

The use of exergetic analysis is important for assessing the stability of chemical processes, as it demonstrates potential losses in the energy system. This has been proven for the Total Site with the Omega Total Site Profile for calculating exergetic fracture and losses in individual processes (Mehdizadeh, et al., 2022). Combined with the general optimization algorithm, this resulted in a 24% reduction in exergy destruction in the specific example. The exergetic approach has also been used for multiple back-pressure steam turbines and optimal design of heat and electricity cogeneration systems (Pirmohamadi et al., 2019). The cogeneration potential of Total Site energy systems is crucial because it determines the amount of heat that can be converted to electricity. Varbanov et al. He presented methods for modeling steam turbines and gas turbines, which were integrated into models of utility cogeneration systems and synthesis of individual utility systems (Klemeš et al. 1997). Targeting for cogeneration was evaluated using commercial software and proved the feasibility of the approach (Ren et al., 2018). The efficiency of steam turbines should be improved, for example, optimization of the model has demonstrated high energy savings, shaft productivity and profitability of the bio-processing plant (Pyrgakis et al., 2020). The potential of cogeneration can also be used by the local energy sector to reduce energy consumption and improve energy efficiency and cogeneration of electricity (Lee et al., 2020). Optimization of the

local energy sector is mainly carried out using mathematical programming (MP) to use seasonal total energy storage at the facility (Liew, et al., 2018), increase efficiency in conditions of uncertainty (Sun et al., 2017), etc.

The article (Boldyryev et al. 2023) presents a new extension of the common site method, which takes into account the optimal amount of energy that can be saved at the inter-factory level. The approach uses the construction of general profiles of an object with a real temperature, takes into account heat transfer with intermediate utility and determines the potential of cogeneration within the enthalpy blocks of the total heat recovery of the object. The total annual cost was determined based on the Total Site Pinch concept, which makes it possible to find the optimal temperature regime between the temperature profiles of the facility. The results can be used for detailed design of the facility's energy system and further development of Total Site methods.

In (Boldyryev et al. 2023), an update of the super-targeting procedure is proposed, taking into account the separation of flows and mixing in the compression problem. An original algorithm for constructing composite curves is proposed for analyzing the distribution of technological flows and flow separation in subsystems above/below compression before designing a network of heat exchangers. This was then used in the super target planning procedure to refine capital expenditures. The proposed methodology can be used for preliminary design of the heat exchanger network in order to better determine the optimal ΔT_{min} , capital cost targets and verify the optimal change for various energy prices.

The document (Boldyryev et al., 2023) presents a methodology for evaluating electrified options for the processing industry based on methods of systematic process integration. Improved heat recovery and focus on electrified utilities were achieved using a Large Composite Curve and analysis of the main technological flows. The processing of liquefied natural gas is analyzed and the electrified heating network is evaluated. This approach can be used to further develop options for decarbonization of industry and targeting of electricity in processing industries.

Materials and methods

The main methods (Smit et al., 2000) of optimizing energy consumption in an industrial enterprise are as follows: – operational improvements that optimize the technological process; – a higher percentage of heat recovery due to increased thermal integration of the technological process (this includes pinch analysis); - the introduction of new technologies that increase the efficiency of equipment operation.

To assess energy efficiency and increase it at oil and gas treatment and processing enterprises, a number of methods and techniques are used to achieve the target values of optimal energy consumption. These include: pinch analysis; energy efficiency benchmarking methodology; hyperstructure optimization; stochastic optimization. The methods of pinch analysis find the greatest application in relation to the industries of the industry (Kuznetsov et al., 2022).

Total Site is a concept that covers the management and optimization of all aspects of work in a field or production facility, including extraction, processing, storage and resource allocation. When using the Total Site concept, all operations — from oil production to its refining — are considered as a single system (Boldyryev et al., 2023).

Pinch analysis as a methodology for minimizing the energy consumption of a process involves calculating thermodynamically justified amounts of energy consumption and approaching them by optimizing heat transfer processes, energy supply methods, and process characteristics. Pinch analysis is used in various industries, in particular in oil and gas processing, petrochemistry and the chemical industry, and can be used both in designing new technological facilities and in solving problems of optimizing the operation of existing industries, taking into account the principles of energy conservation (Boldyryev et al., 2023).

The Total Site energy system is a complex facility that is part of large industrial enterprises or industrial parks. As a rule, these are energy production facilities that convert various types of fuels into heat and electricity, providing basic processes. There is also heat distribution, cogeneration, and cooling. The utility can be supplied to the main processes from the utility system of the facility or another process due to the utilization of waste heat. The main scientific hypothesis is to find a compromise between full energy recovery at the facilities, taking into account the operational and capital costs of TSHR. This method extends the supertargeting procedure, which is used for individual processes and at the Total Sites level. However, TSHR is a more complex system and requires additional consideration to reformulate the overall objectives and systemic consideration. The initial idea was to apply the concept of supertargeting (Linnhoff et al., 1986) to shared profiles (TSP), but some functions limit such an extension. These are heat exchange using intermediate utilities (IMUS), the presence of zones for generating electricity, shifted temperature TSP, unified ΔT_{min} of utility systems, and others. This study will determine the total annual cost (TAC) of TSHR as a function of the total ΔT_{min} at the site and investigate the behavior of this function over a wide range of arguments and provide recommendations for cost-effective design of the TS heat exchange network.

The method is based on the decomposition of TSP into enthalpy blocks, taking into account real temperatures. Real temperatures make it possible to use certain IMUS in enthalpy blocks and maximize TS heat recovery (Boldyryev et al., 2023). In addition, heat and electricity (CHP) cogeneration will be considered within the framework of enthalpy units that maximize electricity generation. The next steps involve combining enthalpy blocks to reduce the number of IMU levels (Boldyryev et al., 2023), and hence heat exchangers and cogeneration zones. Capital expenditures and TAC targeting are applied to find the most cost-effective solution for TSHR.

When applying process integration, the following rules should be followed:

- heat transfer through pinch should not be carried out;
- for the area above the pinch, there should be no external cooling system.;
- for the area below the pinch, there should be no heat supply to the system from external sources.

In this case, the technological object is considered as a system with the allocation of structural units and the establishment of relationships between them. The above example, in particular, is characterized by the presence of a number of parallel operating devices of the same type – separators, settling tanks, and electric dehydrogenators; at the same time, the stages of the target process are carried out sequentially.

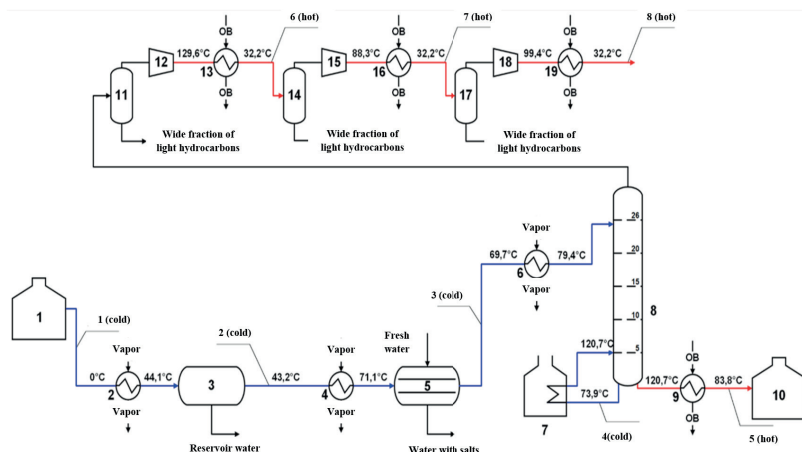
When analyzing the schemes, it is necessary to determine all the flows of matter and energy – internal (within the system) and external (flows going beyond the system and coming from systems external to the system under study), followed by determining the energy characteristics of internal and external flows. To do this, perform material calculations and, based on knowledge of the temperature parameters of the processes, determine the enthalpies of the flows with the release of hot and cold flows. The analysis of the heat exchange system and the collection of data on technological flows, obtaining flow properties and data on operating and capital costs will be carried out directly at the research facility (in the field), using an instrumental survey (measurement, survey, monitoring) and statistical analysis of historical data on resource consumption.

Results and discussion

The oil-bearing reservoir fluid extracted from oil fields has a complex composition. It contains: oil itself; associated petroleum gas; reservoir waters; drilling mud; various mechanical (Smit et al., 2000). It is unprofitable to transport such a mixture through main oil pipelines. Therefore, special oil treatment and stabilization units (OTSU) are being built and operated directly at the fields. These installations carry out the processes of degassing, dewatering, desalination and stabilization of extracted raw materials, and these processes, like most processes in the oil refining and petrochemical industries, are among the most energy-intensive processes among all industries. Therefore, the search and synthesis of systemic technological solutions to reduce specific energy consumption in these areas of industry is an urgent task.

Currently, the most effective methods of improving the energy efficiency of oil refining plants are process integration methods, and, in particular, the pinch analysis method (Khusanov et al., 2017).

In this paper, the object of research is the heat exchange system of an oil stabilization unit located in a field with production of 34,200 thousand tons of crude oil per year (Fig. 1).



1 – tank with raw materials; 2, 4, 6, 9, 13, 16, 19 – heat exchangers; 3 – sump; 5 – electric dehydrogenator; 7 – furnace; 8 – stabilization column; 10 – reservoir of prepared oil; 11, 14, 17 – separators; 12, 15, 18 – compressors.

Figure 1- Schematic technological diagram of the existing process at the OTSU

Crude oil with an initial temperature of $\sim 0^{\circ}\text{C}$ from the reservoir 1 of the central collection point is pumped through a heat exchanger 2 and at a temperature of about 44°C enters the sump 3. In the sump, reservoir waters are diverted from the target stream, and the dehydrated oil, after heating in the heat exchanger 4, is fed into an electric dehydrogenator 5, in which, mixing with a stream of prepared fresh water with a flow rate of 13.89 kg/s , it is re-dehydrated and desalinated. Further, the prepared oil, passing through the heat exchanger 6, is fed under the upper plate of the stabilization column 8. The temperature of the bottom of the column is maintained between $110\text{--}130^{\circ}\text{C}$ due to the heat of stable oil circulating through the coils of the tubular furnace 7. The overpressure in the column is maintained at values from 0.1 to 0.2 MPa , which creates the best conditions for fractionation of gasoline vapors – a wide fraction of hydrocarbons – in the cascade of separators 11, 14, 17 and in refrigerating condensers (the diagram shows separately 12, 15, 18 – condensers and 13, 16, 19 – cooling heat exchangers). Stable oil leaving the bottom of the column is cooled in the heat exchanger 9 and enters the reservoir of the prepared products. Hot steam circulates in the heating heat exchangers, and cooling water circulates in the cold ones.

The study of the technological regulations of the process, the technological scheme and the synthesis of the engineering model (Fig. 2) of the installation using the mathematical software of Honeywell UniSim® Design allowed us to form a flow table for the process under consideration (Tovar-Facio et al., 2020) (Table 1).

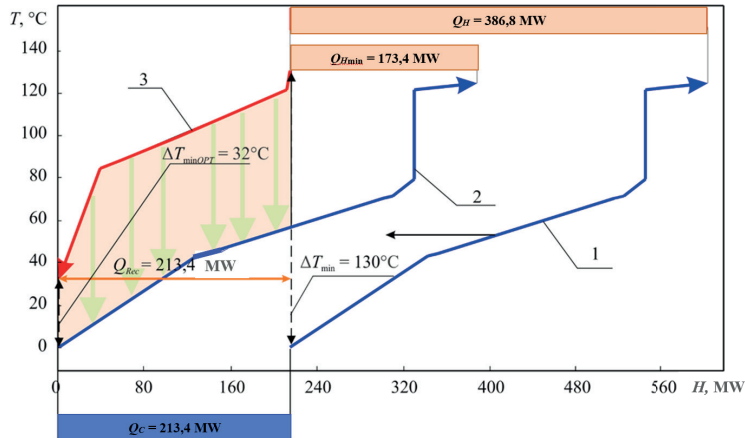
Table 1 -Table of streaming data of the oil treatment and stabilization unit

№	Stream name	Type of stream	$T_s, ^{\circ}$	$T_p, ^{\circ}$	$C, \text{ kW}/(\text{kg } ^{\circ}\text{C})$	$G, \text{ kg/s}$	$CP, \text{ kW}/^{\circ}$	$\alpha, \text{ kW}/(\text{m}^2)^{\circ}$
1	Power	cold	0	44	2.35	1257.5	2957.7	0.3
2	Power supply for the electric dehydrator	cold	43	71	5.0	1257.5	6304.8	0.25
3	Power supply of the stabilization column	cold	70	79	1.9	1257.5	2333.1	0.25
4	Heating of the column cube	cold	121	124	20.2	958	19380.7	0.25
5	Flow from the separator of the 3rd stage	hot	99	32	4.62	916.9	4235.9	0.02
6	Flow from the separator of the 2nd stage	hot	88	32	0.93	340.6	316.1	0.02
7	Flow from the separator of the 1st stage	hot	130	32	0.97	163.44	158.3	0.03
8	Bottom of the stabilization column	hot	121	84	3.37	77.65	261.8	0.25

Stream numbers in the table. 1 coincide with the numbers of technological flows on the basic technological scheme (Fig. 1.). The following designations are used in the flow table: T_s – initial flow temperature, $^{\circ}\text{C}$; C , – specific heat capacity, $\text{kW}/(\text{kg} \cdot ^{\circ}\text{C})$; G is the mass flow rate, kg/s ; CP is the flow heat capacity, $\text{kW}/^{\circ}\text{C}$; α is the heat transfer coefficient characteristic of the flow, $\text{kW}/(\text{m}^2 \cdot ^{\circ}\text{C})$

It follows from the regulations and technological scheme of the OTSU (Fig. 1) that

only utility heat exchangers are used in the technology, and the heat energy recovery capacity is zero. Using the Pinch 2.02 software package, we will construct composite curves of technological flows of USPS so that they do not overlap along the axis of flow enthalpy (Fig. 2).



1 – cold composite curve of the initial process; 2 – cold composite curve of the initial process after thermal energy integration; 3 – hot composite curve; Q_H – useful capacity of the hot utility before thermal energy integration; Q_C – useful capacity of the cold utility before thermal energy integration; Q_{rec} – heat energy recovery capacity; ΔT_{minOPT} – economically optimal the value of the minimum driving force in the heat exchange system

Figure 2- Composite curves of technological flows of OTSU

In this case, the cold process streams are heated in utility heat exchangers and the useful power used for this heating is equal to $Q_H = 386.8$ MW. Hot process streams are cooled in utility heat exchangers and heat output from them is equal to $Q_C = 213.4$ MW. In this case, the value $\Delta T_{min} = 130^\circ\text{C}$ is not the driving force of heat transfer, but simply shows the distance between the curves along the temperature axis.

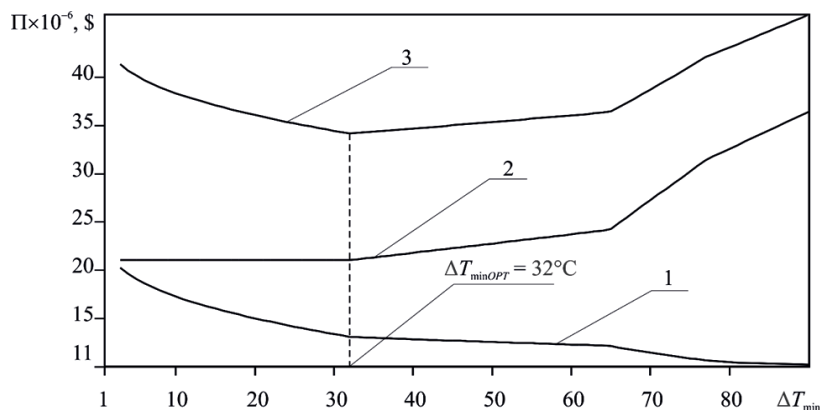
With a known power consumption and output and the specific cost of energy resources, it is easy to calculate the total cost of energy resources consumed by a thermal power system. However, to determine the optimal value of ΔT_{min} it is necessary to know the cost of reconstructing the heat exchange system. The cost of reconstructing the heat exchange system is calculated using the dependence of the cost of installed heat exchange equipment, which is obtained using a regression analysis of the cost of heat exchangers at oil refineries [A.A. Carmona-Martínez, et al. 2023]:

$$\Pi_{HE} = A + B(S)^c, \quad (1)$$

where $A = 40000$ USD is the cost of installing the heat exchanger together with fittings and delivery; $B = 1000$ USD is the cost of 1 m^2 of the heat exchange surface, S ; $c = 0.87$ is an indicator of the nonlinear dependence of the cost of the heat exchanger on its heat exchange surface. The typical cost of hot utilities at oil refineries is ~ 120

USD per 1 kW per year, cold ~ 10 USD per 1 kW per year, and the loan rate is 20% for a period of 10 years.

Using the Pinch-2.02 software package, taking into account the cost data, we construct cost curves for the reconstruction project of the OTSU heat exchange system (Fig. 3).



1 – The dependence of the present value of the installed heat exchange surface on the minimum driving force of heat exchange; 2 – The dependence of the annual cost of surface utilities on the minimum driving force of heat exchange; 3 – The total dependence of the present value of the reconstruction project on the minimum driving force of heat exchange.

Figure 3- Cost curves of the OTSU reconstruction project

And the optimal value of the minimum temperature difference, i.e. the difference, at which the discounted cost of the reconstruction project will be the lowest, is $\Delta T_{\min OPT} = 32^{\circ}\text{C}$.

The construction of composite curves for $\Delta T_{\min OPT} = 32^{\circ}\text{C}$ (Fig. 2) shows the payload of hot utilities $Q_{Hmin} = 175390$ MW, cold utilities $-Q_{Cmin} = 0$ MW and thermal energy recovery capacity $-Q_{Rec} = 213.4$ MW. Thus, by completing the reconstruction project, it is possible to reduce the consumption of hot utilities by 55%, and to abandon cold ones altogether and put all refrigerators in reserve. The energy values obtained during the construction of composite curves for the optimal value of the driving force of heat transfer are the target energy values that must be achieved during the implementation of the pinch reconstruction project of the OTSU heat exchange system. In our case, we need to create a regenerative heat exchange system at the installation in question.

Next, using the laws and rules of pinch analysis to build optimal heat exchange systems, we synthesize a grid diagram of the OTSU reconstruction project (Fig. 4.)

In the grid diagram, the net capacity of the hot utilities is 173.4 MW, which is 45% of the currently existing hot utilities. All hot streams are brought to their target temperatures by cooling them in a regenerative heat exchange system with cold process streams. Summing up the thermal loads of the regenerative heat exchangers shown in the grid diagram, we obtain the value of the hot utility, which we obtained when constructing composite curves for $\Delta T_{\min OPT} = 32^{\circ}\text{C}$. Thus, by placing regenerative heat exchangers

on the grid diagram, we have shown the possibility of achieving target energy values in the project of creating a new OTSU regenerative heat exchange system.

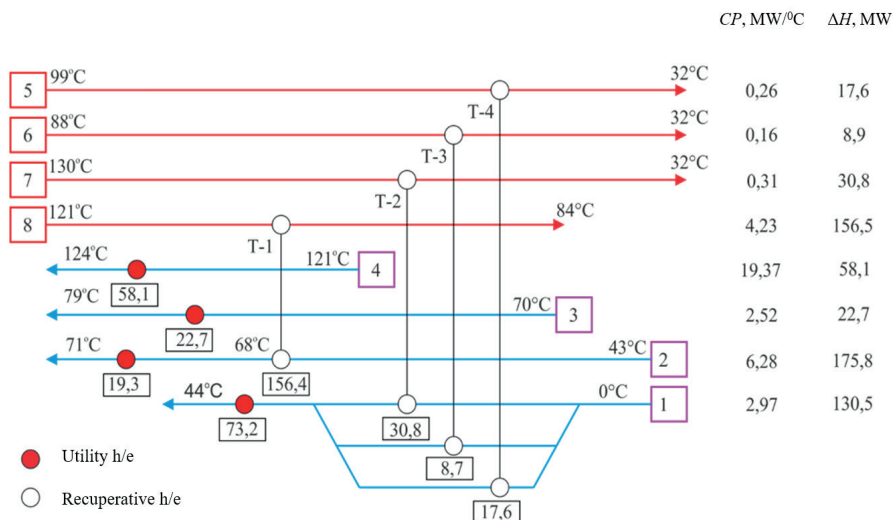


Figure 4- Grid diagram of the OTSU heat exchange system reconstruction project. The flow numbers correspond to the numbers in the Flow Table 1. The circled values below the image of the heat exchangers show their thermal load

It should be noted that the synthesized grid diagram of the OTSU heat exchange system project should serve as a technical specification for designing a regenerative heat exchange system and preparing working documentation for the reconstruction project.

Conclusions.

The paper performs thermal energy integration and presents a grid diagram of a regenerative heat exchange system for an oil stabilization and treatment plant. As a result of the project's implementation, the energy consumption of external hot energy sources will decrease by 213.4 MW, or 55%. You can completely abandon cold utilities. Greenhouse gas emissions will decrease by about 71%. The discounted payback period is about 11 months from the moment the reconstruction project reaches its target capacity.

References

- Smit R., Klemesh J., Tovazhnjanskij L.L., Kapustenko P.A., Ul'ev L.M. (2000) Osnovy integracii teplovih processov [Fundamentals of thermal process integration]. Har'kov. NTU "HPI". — 458 p. (in Eng.).
- Khusanov A.E., Ul'ev L.M., Kaldybaeva B.M., Sabyrhanov D.S., Boldyrev S.A. (2017) Modelirovanie i optimizacija jenergotreblenija, snizhenie urovnja zagriznenija promyshlennyh predpriyatij na osnove integracij processov s primeneniem metodov pinch-analiza [Modeling and optimization of energy consumption, reducing pollution levels in industrial enterprises based on process integrations using pinch analysis methods.]. — Shymkent: SKSU named M. Auezov. — 266 p. (in Eng.).
- J. Tovar-Facio, M. Martín, J. María Ponce-Ortega (2020) Sustainable energy transition: modeling, optimization. Sensor Actuator B Chem, Article 129129, 10.1016/j.snb.2020.129129. (in Eng.).
- A.A. Carmona-Martínez, A. Fresneda-Cruz, A. Rueda, O. Birgi, C. Khawaja, R. Janssen, B. Davidis, P. Reumerman, M. Vis, E. Karampinis, P. Grammelis, C. Jarauta-Córdoba (2023) Renewable power and

heat for the decarbonisation of energy-intensive industries. *Processes*, 11. — 18 p. 10.3390/pr11010018. (in Eng.).

J. Klemeš, V.R. Dhole, K. Raissi, S.J. Perry, L. Puigjaner (1997) Targeting and design methodology for reduction of fuel, power and CO₂ on total sites. *Appl Therm Eng*, 17. — P. 993-1003p., 10.1016/S1359-4311(96)00087-7 (in Eng.).

M. Kuznetsov, S. Boldyryev, D. Kenzhebekov, B. Kaldybaeva (2022). Improving inter-plant integration of syngas production technologies by the recycling of CO₂ and by-product of the fischer-tropsch process. *Int J Hydrogen Energy*, 47. — P. 31755-31772, 10.1016/j.ijhydene.2021.12.184 (in Eng.).

V.R. Dhole, B. Linnhoff (1993) Total site targets for fuel, Co-generation, emissions, and cooling. *Comput Chem Eng*, 17. — P. S101, 10.1016/0098-1354(93)80214-8-S109 (in Eng.).

H. Amiri, A.F. Sotoodeh, M. Amidpour (2021) A new combined heating and power system driven by biomass for total-site utility applications. *Renew Energy*, 163. — P. 1138-1152, 10.1016/j.renene.2020.09.039 (in Eng.).

P.Y. Liew, S.R.W. Alwi, Z.A. Manan, J.J. Klemeš, P.S. Varbanov (2015). Incorporating District Cooling System in Total Site Heat Integration. — P. 19-24, 10.3303/CET1545004 (in Eng.).

K.H. Chew, J.J. Klemeš, S.R. Wan Alwi, Z.A. Manan (2015). Process modifications to maximise energy savings in total site heat integration. *Appl Therm Eng*, 78. — P. 731-739, 10.1016/j.applthermaleng.2014.04.044 (in Eng.).

L. Čuček, V. Mantelli, J.Y. Yong, P.S. Varbanov, J.J. Klemeš, Z. Kravanja (2015). A Procedure for the Retrofitting of Large-Scale Heat Exchanger Networks for Fixed and Flexible Designs Applied to Existing Refinery Total Site, 45. — P. 109-114, 10.3303/CET1545019 (in Eng.).

F. Mehdizadeh, N. Tahouni, M.H. Panjeshahi (2022). Total site exergy analysis, using a new conceptual method. *Energy*, 250, Article 123790, 10.1016/j.energy.2022.123790 (in Eng.).

A. Pirmohamadi, M. Ghazi, M. Nikian (2019). Optimal design of cogeneration systems in total site using exergy approach. *Energy*, 166. — P. 1291-1302, 10.1016/j.energy.2018.10.167 (in Eng.).

X.-Y. Ren, X.-X. Jia, P.S. Varbanov, J.J. Klemeš, Z.-Y. Liu (2018). Targeting the cogeneration potential for total site utility systems. *J Clean Prod*, 170. — P. 625-635, 10.1016/j.jclepro.2017.09.170 (in Eng.).

K.A. Pyrgakis, A.C. Kokossis (2020). Total site synthesis: selection of processes to save energy and boost cogeneration. S. Pierucci, F. Manenti, G.L. Bozzano, D. Manca (Eds.), *Computer aided chemical engineering*, 30 European symposium on computer aided process engineering. — vol. 48. — P. 1345-1350, 10.1016/B978-0-12-823377-1.50225-1 (in Eng.).

P.Y. Liew, S.R. Wan Alwi, W.S. Ho, Z. Abdul Manan, P.S. Varbanov, J.J. Klemeš (2018). Multi-Period energy targeting for total site and locally integrated energy sectors with cascade Pinch analysis. — *Energy*, 155. — P. 370-380, 10.1016/j.energy.2018.04.184 (in Eng.).

L. Sun, L. Gai, R. Smith (2017). Site utility system optimization with operation adjustment under uncertainty. *Appl Energy*, 186. — P. 450-456, 10.1016/j.apenergy.2016.05.036 (in Eng.).

Boldyryev S., Gil T., Krajačić G., Khussanov, A. (2023) Total site targeting with the simultaneous use of intermediate utilities and power cogeneration at the polymer plant. — *Energy*, 279. — 128034 p. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2023.128034>. (in Eng.).

Boldyryev S., Kuznetsov M., Ryabova I., Krajačić G., Kaldybaeva B. (2023) Assessment of renewable energy use in natural gas liquid processing by improved process integration with heat pumps. *e-Prime - Advances in Electrical Engineering, Electronics and Energy*. — Vol. 5. — № 100246. doi: 0.1016/j.prime.2023.100246 (in Eng.).

B. Linnhoff, S. Ahmad (1986). SUPERTARGETING: optimum synthesis of energy management systems. *J Energy Resour Technol*, 2 (1). — P. 1-13, 10.1115/1.3231413 (in Eng.).

© **A.K. Kozybaev, Zh.D. Alimkulova, S.O. Abilkasova*, G.O. Bugubaeva, S. Bubish, 2025.**

Almaty Technological University, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: sandugash.abilkasovaa@gmail.com

PROSPECTS FOR THE USE OF WATER-SOLUBLE COPOLYMERS IN INDUSTRIAL WASTEWATER TREATMENT PROCESSES

Kozybaev Asylbek — Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor, Almaty Technological University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: asilbek_k@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1792-5993>;

Alimkulova Zhamila — Magister Technical Sciences, senior-lecturer, Almaty Technological University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: zhamilya111@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9938-6710>;

Abilkasova Sandugash — Candidate of Technical Science, Associate Professor, Almaty Technological University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: sandugash.abilkasovaa@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-8322-4592>;

Bugubaeva Gulnar — Candidate of Chemical Sciences, Assistant of Professor, Almaty Technological University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: bugub@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6550-5275>;

Bubish Sholpangul — Magister of Technical Sciences, lecturer, Almaty Technological University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: sholpanbubush@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0005-6649-0430>.

Abstract. Relevance. Kazakhstan's Development Strategy until 2050 identifies waste-free and resource-saving technologies, as well as the rational use of natural resources as key priorities for sustainable economic and environmental development. In this context, purification of industrial wastewater from toxic heavy metal ions is an important task for protecting water resources and maintaining ecological balance. One promising approach is the use of water-soluble high-molecular compounds – flocculants. Research objective. To study the sorption properties of new synthetic copolymers based on 2-acrylamido-2-methylpropanesulfonic acid salts (H-AMS-i-PAA, VEMEA-Na-AMS, VEMEA-K-AMS) in process of removing Ni^{2+} , Co^{2+} , Zn^{2+} , and Cu^{2+} ions from aqueous solutions. Research methods. The study used experimental methods: sorption tests at different pH values, kinetic studies of polymer-metal ion interaction, analysis of equilibrium sorption characteristics, and effectiveness comparison of the materials obtained. Results. It was found that the sorption activity of the synthesized

copolymers significantly depends on the pH of the medium. In the acidic range ($\text{pH} \approx 2$), sorption is minimal due to the protonation of functional groups. In the pH range of 4–7, sorption capacity significantly increases. VEMEA-K-AMS copolymer demonstrated greatest efficiency, ensuring almost complete removal of heavy metal ions. Kinetic studies showed that equilibrium is reached rapidly, indicating a high rate of interaction between the sorbent and ions. Practical significance. The results confirm the promise of new synthetic copolymers as environmentally safe and effective flocculants for removing heavy metals from industrial wastewater. The materials can be recommended for implementation in water treatment and environmental safety technologies at industrial enterprises.

Keywords: copolymers, sorption, heavy metals, wastewater treatment, flocculants, pH dependence

© А.Қ. Қозыбаев, Ж.Д. Әлімқұлова, С.О. Әбілқасова*, Г.О. Бугубаева,
Ш. Бубіш, 2025.

Алматы технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан.

*E-mail: sandugash.abilkasovaa@gmail.com

ӨНДІРІСТІК АҒЫНДЫ СУЛАРДЫ ТАЗARTU ПРОЦЕСТЕРІНДЕ СУДА ЕРИТІН СОПОЛИМЕРЛЕРДІ ҚОЛДАНУ ПЕРСПЕКТИВАЛАРЫ

Қозыбаев Асылбек — химия ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, Алматы технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: asilbek_k@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1792-5993>;

Әлімқұлова Жамила — техника ғылымдарының магистрі, сениор-лектор, Алматы технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: zhamilya111@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9938-6710>;

Әбілқасова Сандұғаш — техника ғылымының кандидаты, қауымдастырылған профессор, Алматы технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: sandugash.abilkasovaa@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-8322-4592>;

Бугубаева Гүлнар — химия ғылымының кандидаты, профессор ассистенті, Алматы технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: bugub@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6550-5275>;

Бубіш Шолпангүл — техника ғылымдарының магистрі, лектор, Алматы технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: sholpanbubush@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0005-6649-0430>.

Аннотация. Өзектілігі. «Қазақстан – 2050» стратегиясында қалдықсыз және ресурстарды үнемдейтін технологияларды енгізу, сондай-ақ табиғи ресурстарды ұтымды пайдалану тұрақты экономикалық және экологиялық дамудың негізгі басымдықтары ретінде айқындалған. Осыған байланысты өндірістік ағынды суларды ауыр металдардың улы иондарынан тазарту су ресурстарын қорғау және экологиялық тепе-теңдікті сақтау үшін аса маңызды міндет болып табылады. Бұл бағытта су ерітінділерінде жақсы еритін жоғары молекулалық қосылыстар – флокулянттарды қолдану перспективалы әдістердің бірі саналады. Зерттеу мақсаты. 2-акриламидо-2-метилпропансульфон қышқылы тұздары негізіндегі

жаңа синтетикалық сополимерлердің (Н-АМС-и-ПАА, ВЭМЭА-На-АМС және ВЭМЭА-К-АМС) су ерітінділерінен Ni^{2+} , Co^{2+} , Zn^{2+} және Cu^{2+} ауыр металл иондарын сорбциялау қабілеттерін зерттеу. Зерттеу әдістері. Жұмыста әртүрлі рН мәндерінде сорбциялық сынақтар, полимерлердің ауыр металл иондарымен әрекеттесу кинетикасын анықтау, сорбцияның тепе-теңдік сипаттамаларын талдау және алынған материалдардың тиімділігін салыстыру сияқты эксперименттік әдістер қолданылды. Нәтижелері. Синтезделген сополимерлердің сорбциялық белсенділігі ортаның рН мәніне айтарлықтай тәуелді екені анықталды. Қышқыл ортада ($\text{pH} \approx 2$) функционалдық топтардың протондануына байланысты сорбция төмен болды. рН 4–7 аралығында сорбциялық сыйымдылықтың айтарлықтай артқаны байқалды. Ең жоғары тиімділікті ВЭМЭА-К-АМС сополимері көрсетіп, ауыр металл иондарын іс жүзінде толық жойды. Кинетикалық зерттеулер сорбент пен иондардың өзара әрекеттесу жылдамдығы жоғары екенін және тепе-теңдікке аз уақыт ішінде қол жеткізілетінін көрсетті. Практикалық маңызы. Алынған нәтижелер жаңа синтетикалық сополимерлердің өндірістік ағынды суларды ауыр металдардан тазартуға арналған экологиялық қауіпсіз әрі жоғары тиімді флокулянттар ретінде перспективалы екенін дәлелдейді. Бұл материалдарды су дайындау және өнеркәсіптік кәсіпорындардың экологиялық қауіпсіздігін қамтамасыз ету технологияларына енгізуге болады.

Түйін сөздер: сополимерлер, сорбция, ауыр металдар, ағынды суларды тазарту, флокулянттар, рН тәуелділігі

© А.К. Козыбаев, Ж.Д. Алимкулова, С.О. Абилкасова*, Г.О. Бугубаева,
Ш. Бубиш, 2025.

Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан.

*E-mail: sandugash.abilkasovaa@gmail.com

ПЕРСПЕКТИВЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ВОДОРАСТВОРИМЫХ СОПОЛИМЕРОВ В ПРОЦЕССАХ ОЧИСТКИ ПРОМЫШЛЕННЫХ СТОЧНЫХ ВОД

Козыбаев Асылбек — кандидат химических наук, ассоциированный профессор, Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан,

E-mail: asilbek_k@mail.ru, <https://orcid.org/ORCID ID 0000-0003-1792-5993>;

Алимкулова Жамила — магистр технических наук, сениор-лектор, Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан,

E-mail: zhamilya111@mail.ru, <https://orcid.org/ORCID ID 0000-0002-9938-6710>;

Абилкасова Сандугаш — кандидат технических наук, ассоциированный профессор, Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан,

E-mail: sandugash.abilkasovaa@gmail.com, <https://orcid.org/ORCID ID 0000-0001-8322-459>;

Бугубаева Гульнар — кандидат химических наук, ассистент профессора, Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан,

E-mail: bugub@mail.ru, <https://orcid.org/ORCID ID 0000-0002-6550-5275>;

Бубиш Шолпангүл — магистр технических наук, сениор-лектор, Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан,

E-mail: E-mail: sholpanbubush@gmail.com, <https://orcid.org/ORCID ID 0009-0005-6649-0430>.

Аннотация. Актуальность. В Стратегии развития Казахстана до 2050 года внедрение безотходных и ресурсосберегающих технологий, а также рациональное использование природных ресурсов определены ключевыми приоритетами устойчивого экономического и экологического развития. В этом контексте очистка промышленных сточных вод от токсичных ионов тяжёлых металлов представляет собой особо важную задачу, связанную с защитой водных ресурсов и сохранением экологического баланса. Одним из перспективных подходов является применение водорастворимых высокомолекулярных соединений — флокулянтов. Цель исследования. Изучить сорбционные свойства новых синтетических сополимеров на основе солей 2-акриламидо-2-метилпропансульфоновой кислоты (Н-АМС-и-ПАА, ВЭМЭА-На-АМС и ВЭМЭА-К-АМС) в процессе удаления ионов тяжёлых металлов Ni^{2+} , Co^{2+} , Zn^{2+} и Cu^{2+} из водных растворов. Методы исследования. В работе использованы экспериментальные методы: сорбционные испытания при различных значениях pH, определение кинетики взаимодействия полимеров с ионами тяжёлых металлов, анализ равновесных характеристик сорбции и сравнение эффективности полученных материалов. Результаты. Установлено, что сорбционная активность синтезированных сополимеров существенно зависит от pH среды. В кислой области ($\text{pH} \approx 2$) сорбция минимальна из-за протонирования функциональных групп. В диапазоне pH 4–7 наблюдается значительное повышение сорбционной ёмкости. Наибольшую эффективность продемонстрировал сополимер ВЭМЭА-К-АМС, обеспечивший почти полное удаление ионов тяжёлых металлов. Кинетические исследования показали, что равновесие достигается в короткие сроки, что свидетельствует о высокой скорости взаимодействия между сорбентом и ионами металлов. Практическое значение. Полученные результаты подтверждают перспективность новых синтетических сополимеров как экологически безопасных и высокоэффективных флокулянтов для очистки промышленных сточных вод от тяжёлых металлов. Материалы могут быть рекомендованы для внедрения в технологии водоподготовки и обеспечения экологической безопасности промышленных предприятий.

Ключевые слова: сополимеры, сорбция, тяжёлые металлы, очистка сточных вод, флокулянты, зависимость от pH

Introduction. The main directions of the economic and social development of the Republic of Kazakhstan until 2050 envisage the development and implementation of new technological processes for the processing of natural resources, as well as the utilization of raw materials and substances containing environmentally hazardous components. These objectives are to be achieved through the application of economically justified, waste-free, and resource-saving technologies (Klimenko, 2013; Krishnan, 2018; Moody, 2007; Vajihinejad et.al., 2019).

Environmental protection from pollution represents one of the most pressing challenges of modern times. The purification of natural and industrial wastewater is of particular importance, as it is directly related to the preservation and sustainable management of water resources (Xiao, 2021; Proskurina, 2016). In recent years, water-

soluble high-molecular-weight compounds – flocculants - have been increasingly employed in wastewater treatment (Myagchenkov, 2014; Li et.al., 2019). Their application significantly improves purification efficiency and enhances the performance of treatment facilities. This trend, in turn, has stimulated extensive research into the synthesis of novel synthetic polymer reagents. Polyacrylamide remains the most widely used flocculant at the industrial scale (Abramova et.al., 2016). However, to improve its efficiency and broaden its application range, various derivatives of polyacrylamide have been developed (Liu et.al., 2003; Nesic et.al., 2016; Novakov et.al., 2018). These derivatives incorporate diverse functional groups or structural units of other monomers. Among the promising chemical structures for the synthesis of new polyacrylamide derivatives are copolymers based on the salts of 2-acrylamido-2-methylpropanesulfonic acid (AMPS). The presence of multifunctional groups within the copolymer chain is expected to impart high flocculating activity and enhanced sorption capability (Novakov et.al., 2015; Hao et.al., 2024).

In this context, the synthesis and investigation of the flocculating properties of novel copolymers based on the salts of 2-acrylamido-2-methylpropanesulfonic acid represent a highly relevant and significant research direction. At present, the removal of heavy metal ions from industrial wastewater through the use of efficient flocculants has become one of the key environmental and technological challenges (Daifa et.al., 2019; Loukili et.al., 2024).

Materials and methods. The present study investigates the sorption of selected heavy metal ions (Ni^{2+} , Co^{2+} , Zn^{2+} , Cu^{2+}) by N-AMPS-and-PAA, VEMA-K-AMPS, and VEMA-Na-AMPS copolymers. The sorbents were synthesized through radical copolymerization of acrylamide (AA) with salts of 2-acrylamido-2-methylpropanesulfonic acid (AMPS) in aqueous medium, using potassium persulfate as an initiator. After polymerization, the obtained copolymers were washed, dried, and ground to a uniform particle size.

Sorption experiments were conducted in aqueous solutions containing heavy metal ions (Ni^{2+} , Co^{2+} , Zn^{2+} , Cu^{2+}). The acidity of the medium plays a crucial role in working with sorbents containing acidic functional groups, as it determines the state and reactivity of these groups. Furthermore, the chemical state of the metal ions in solution also depends on the pH of the medium, allowing control over the sorption process by adjusting this parameter.

Accordingly, to determine the sorption performance of N-AMPS-and-PAA, VEMA-K-AMPS, and VEMA-Na-AMPS sorbents, a series of experiments were conducted to study the influence of solution pH on the degree of sorption.

Results and discussion. Based on these experimental results, kinetic curves describing the sorption of Ni^{2+} , Co^{2+} , Zn^{2+} , and Cu^{2+} ions by N-AMPS-and-PAA, VEMA-K-AMPS, and VEMA-Na-AMPS sorbents were constructed (Figure 1).

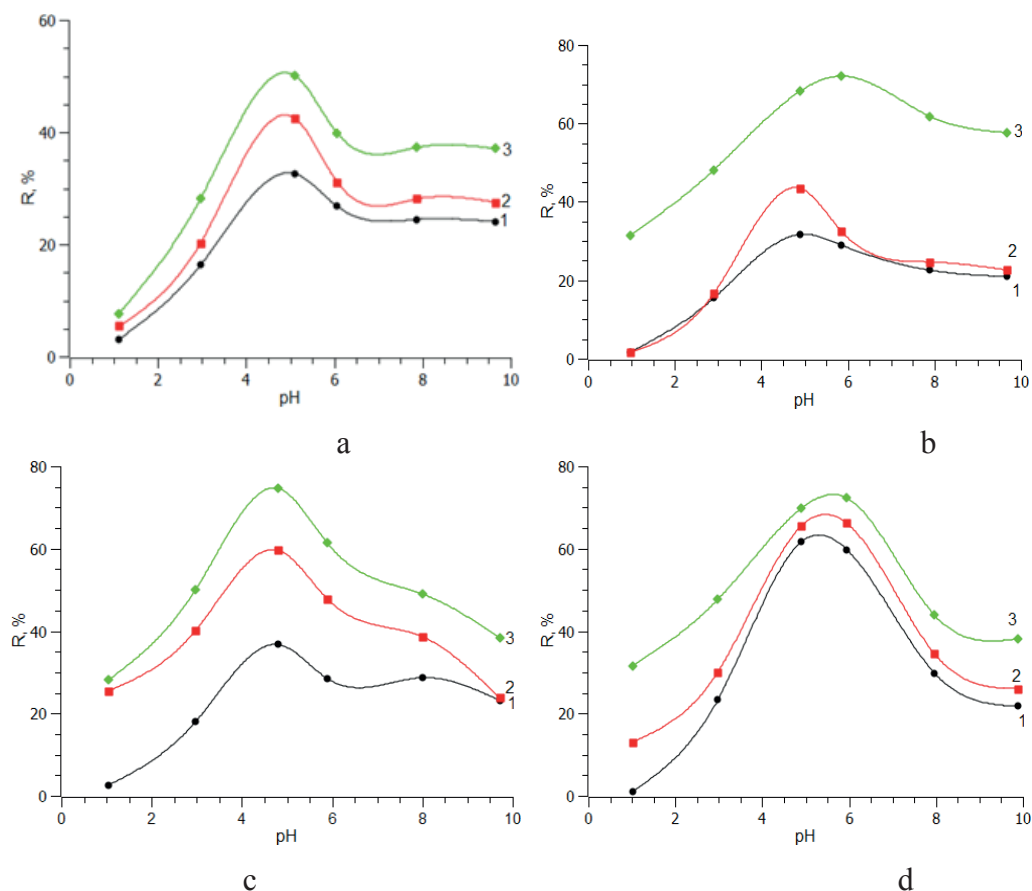


Figure 1 - pH dependence of the degree of sorption of Ni^{2+} (a), Co^{2+} (b), Zn^{2+} (c), Cu^{2+} (d) ions on H-AMC-and-PAA (1), VEMEA-Na-AMC (2), VEMEA-K-AMC (3)

As can be seen from Figure 1, the dependence of the degree of sorption of nickel, cobalt, zinc and copper ions on the pH value of the solution is extreme. The relatively low degree of sorption of the studied metal ions in an acidic medium is explained by the protonated state of the sorbents at pH-2 and the fact that sorption occurs as a result of coordination interactions with the $-R=O$, $-COOH$ and $-OH$ groups. In the low pH region, the sorption capacity of the synthesized sorbents for heavy metals is approximately at the same level. In the solution pH range of 4-7, a sharp increase in the sorption activity of the sorbents is observed. In this case, the sorption capacity of the sorbent H-AMC-and-PAA increases, and the highest sorption capacity is observed in the sorbent VEMEA-K-AMC. This sorbent demonstrates the ability to effectively sorb heavy metals at pH-5, reaching values that are characteristic of even expensive artificial sorbents.

In addition, during the study of the effect of pH on the sorption capacity of various non-ferrous metal ions, it was found that the modified sorbent VEMEA-K-AMC can completely sorb heavy metals at high concentrations. Figure 2 shows the sorption isotherms of Co^{2+} , Zn^{2+} , Cu^{2+} and Ni^{2+} ions.

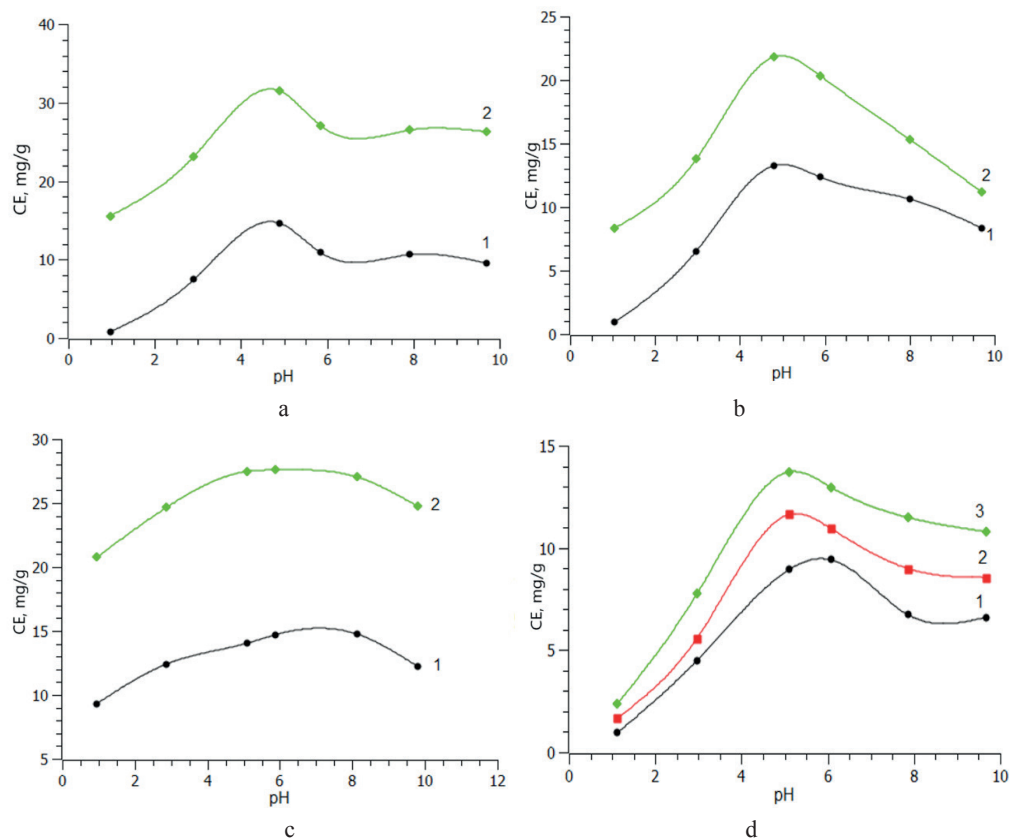


Figure 2 - pH dependence of the sorption capacity of Co²⁺ (a), Zn²⁺ (b), Cu²⁺ (c) VEMEA-Na-AMC (1), VEMEA-K-AMC (2) and Ni²⁺ (d) H-AMC-and-PAA (1), VEMEA-Na-AMC (2), VEMEA-K-AMC (3) ions

The kinetics of ion complex formation processes remain an insufficiently explored field, despite their clear practical significance. This has increased researchers' interest in studying the sorption kinetics of metals on synthesized sorbents. In this regard, we investigated the change in the sorption concentration of ions as a function of the interaction time between the solution and the sorbent, up to the point of reaching kinetic equilibrium.

Figure 3 presents the sorption kinetics of Ni²⁺ (a), Co²⁺ (b), Zn²⁺ (c), and Cu²⁺ (d) ions on H-AMC-i-PAA, VEMA-Na-AMC, and VEMA-K-AMC sorbents, which allows determining the rate of equilibrium establishment in the solution-sorbent system.

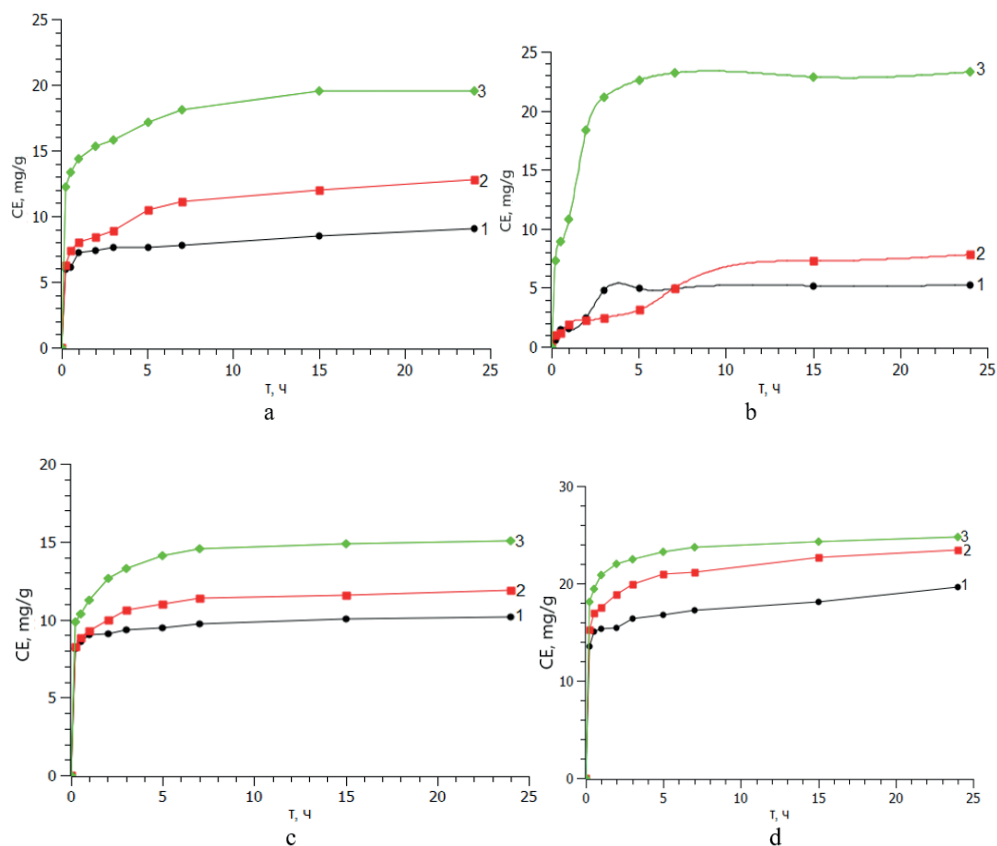


Figure 3 - Sorption kinetics of ions in the process, Ni^{2+} (a), Co^{2+} (b), Zn^{2+} (c), Cu^{2+} (d) C H-AMC-and-PAA (1), VEMEA-Na-AMC (2), VEMEA-K-AMC (3)

As can be seen from Figure 3, the kinetic sorption curves of Ni^{2+} , Co^{2+} , Zn^{2+} , Cu^{2+} ions characterize the degree of saturation of ionites over the duration of the process at the optimal concentration of the initial solution and the acidity of the medium.

Conclusion. The conducted studies demonstrate that the synthesized copolymers based on the salts of 2-acrylamido-2-methylpropanesulfonic acid (H-AMC-i-PAA, VEMEA-Na-AMC, and VEMEA-K-AMC) exhibit high sorption activity toward Ni^{2+} , Co^{2+} , Zn^{2+} , and Cu^{2+} ions from aqueous solutions. The degree of sorption was found to depend strongly on the pH of the medium, with the highest efficiency observed in the range of pH 4–7. Among the studied sorbents, VEMEA-K-AMC demonstrated the greatest sorption capacity, effectively binding heavy metal ions even at relatively high concentrations.

The obtained kinetic data indicate that equilibrium in the solution–sorbent system is established relatively rapidly, confirming the high reactivity of the synthesized copolymers. The presence of functional groups such as $-\text{COOH}$, $-\text{OH}$, and $-\text{R}=\text{O}$ contributes significantly to the coordination and complexation of metal ions.

Overall, the synthesized copolymers can be considered promising materials for

wastewater treatment and environmental protection, particularly for the removal of toxic heavy metal ions. Further research should focus on optimizing synthesis parameters and evaluating the regeneration and reuse potential of these sorbents under real industrial conditions.

References

- Abramova L. I. et.al. (2016) Poliakrilamid [Polyacrylamide] edited by V.F. Kurenkova. — M.: Chemistry. — P.192 (in Russian)
- Daifa M., Shmoeli E., & Domb A.J. (2019) Enhanced flocculation activity of polyacrylamide-based flocculant for purification of industrial wastewater. *Polymers for Advanced Technologies*, — Vol. 30(10), — P. 2636-2646. (in English)
- Hao X., Chang Q., & Li X. (2009) Synthesis, characterization, and properties of polymeric flocculant with the function of trapping heavy metal ions. *Journal of Applied Polymer Science*, — Vol. 112(1). — P. 135-141. (in English)
- Klimenko T. V. (2013) Ochistka stochnyh vod ot ionov tyazhelyh metallov [Wastewater treatment from heavy metal ions] *Modern scientific research and innovations*. — Vol. 11. — P. 11. (in Russian)
- Krishnan S.V., & Attia, Y.A. (2018) Polymeric flocculants. In *Reagents in Mineral Technology*. — P. 485-518. Routledge. (in English)
- Li X., & Xu Y. (2019) "Study on the flocculation behavior of polyacrylamide for heavy metal removal in wastewater treatment." *Journal of Water Process Engineering*, — Vol. 31. — P. 100806. (in English)
- Liu Y., Xie J.J., & Zhang X.Y. (2003) Synthesis and properties of the copolymer of acrylamide with 2-acrylamido-2-methylpropanesulfonic acid. *Journal of applied polymer science*, — Vol. 90(13). — P. 3481-3487. (in English)
- Loukili N., Jossic L., Blésès D., Oliveira M., Fayolle Y., Ginisty P., ... & Rharbi Y. (2024) Impact of cationic polyacrylamide degradation on flocculation in wastewater treatment. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, — Vol. 702. — P. 134975. (in English)
- Moody G.M. (2007) Polymeric flocculants. *Handbook of industrial water soluble polymers*. — P. 134-173. (in English)
- Myagchenkov V.A. Baran A.A., Bekturov E.A., Bulidorova G.V. (2014) Poliakrilamidnye flokulyanty [Polyacrylamide flocculants] – Kazan: Kazan State. technology univ. (in Russian)
- Nesic A., Panic V., Ostojic S., Micic D., Pajic-Lijakovic I., Onjia A., & Velickovic S. (2016) Physical-chemical behavior of novel copolymers composed of methacrylic acid and 2-acrylamido-2-methylpropane sulfonic acid. *Materials Chemistry and Physics*, — Vol. 174. P. — 156-163. (in English)
- Novakov I.A. et.al. (2015) Zakonomernosti flokulyacii vodnyh kaolinovyh dispersij binarnymi kompoziciyami kationnyh polielektrolitov [Regularities of flocculation of aqueous kaolin dispersions with binary compositions of cationic polyelectrolytes]. *Colloid Journal*. (in Russian)
- Novakov I.A., Orlinson B.S. (2018) Polimery na osnove proizvodnyh adamantana: sintez, svoystva, napravleniya prakticheskogo ispol'zovaniya [Polymers based on adamantane derivatives: synthesis, properties, directions for practical use]. Monograph–Volograd: RPK "Polytechnic". (in Russian)
- Proskurina V.E. (2016) Flokulyaciya ohry (so)polimerami akrilamida v rezhimah svobodnogo i stesennogo osedaniya [Flocculation of ochre by acrylamide (co)polymers in free and constrained sedimentation modes]: dis. ... Cand. of Chemical Sciences: — 02.00.11. — Kazan. (in Russian)
- Vajihinejad V., Gumfekar S. P., Bazoubandi B., Rostami Najafabadi Z., & Soares J. B. (2019). Water soluble polymer flocculants: synthesis, characterization, and performance assessment. *Macromolecular Materials and Engineering*, — 304(2). — P.1800526. (in English)
- Xiao X., Sun Y., Liu J., & Zheng H. (2021). Flocculation of heavy metal by functionalized starch-based bioflocculants: Characterization and process evaluation. *Separation and Purification Technology*, — 267. — 118628 p. (in English)

© R.M. Kudaibergenova*, A.R. Aitekova, N.S. Murzakasymova, A.S. Seitkan,
N.A. Nurlybayeva, 2025.

M.Kh. Dulaty Taraz University, Taraz, Kazakhstan.

*E-mail: rm.kudajbergenova@dulaty.kz

STRUCTURAL AND COMPOSITIONAL CHARACTERISTICS OF COBALT FERRITE NANOPARTICLES

Kudaibergenova Rabiga — PhD, M.Kh. Dulaty Taraz University, Taraz, Kazakhstan,

E-mail: rm.kudajbergenova@dulaty.kz, <https://orcid.org/0000-0003-0759-1539>;

Aitekova Anar — PhD student, M.Kh. Dulaty Taraz University, Taraz, Kazakhstan,

E-mail: ar.aitekova@dulaty.kz, <https://orcid.org/0009-0006-9992-0043>;

Murzakasymova Nazgul — PhD, M.Kh. Dulaty Taraz University, Taraz, Kazakhstan,

E-mail: ns.murzakasymova@dulaty.kz, <https://orcid.org/0000-0003-0329-6137>;

Seitkan Ainur — candidate of technical sciences, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan,

E-mail: seitkan_as@enu.kz, <https://orcid.org/0000-0001-9309-500X>;

Nurlybayeva Aisha — PhD, Associate Professor, M.Kh. Dulaty Taraz University, Kazakhstan,

E-mail: a.nurlybayeva@dulaty.kz, <https://orcid.org/0000-0001-9904-9979>.

Abstract. Spinel ferrites, particularly cobalt ferrite (CoFe_2O_4), have gained increasing scientific attention due to their multifunctional physicochemical properties and wide applicability in catalysis, sensing, magnetic storage, and environmental remediation. Their stable magnetic behavior, variable oxidation states, high permeability, and strong electrochemical stability make CoFe_2O_4 a promising material for advanced technological applications. The growing need for efficient, recyclable, and environmentally friendly materials for wastewater treatment further enhances the relevance of cobalt ferrite as a magnetic adsorbent and catalyst. The aim of this study is to synthesize phase-pure CoFe_2O_4 nanoparticles and investigate their structural and physicochemical characteristics to assess their potential for environmental applications. CoFe_2O_4 nanoparticles were synthesized using the sol–gel combustion technique. Structural and chemical analyses were performed using X-ray diffraction (XRD), energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDS), and Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR). XRD confirmed the formation of a single-phase spinel cobalt ferrite structure (ICSD 1533163, space group $\text{Fd}3\text{m}$). EDS analysis revealed only cobalt, iron, and oxygen elements, indicating high purity, while FTIR spectra exhibited characteristic absorption bands

corresponding to tetrahedral and octahedral metal–oxygen vibrations. The synthesized CoFe_2O_4 exhibited the typical spinel lattice with cation distribution $(\text{Fe}^{3+})_a(\text{Co}^{2+}\text{Fe}^{3+})_\beta\text{O}_4$, which imparts high structural stability, catalytic activity, strong saturation magnetization, low solubility of metal ions, and a relatively large surface area. These features highlight the practical significance of CoFe_2O_4 nanoparticles for environmental applications, particularly in wastewater treatment technologies, where their magnetic nature allows efficient recovery and reuse, improving both sustainability and operational efficiency.

Keywords: cobalt ferrite nanoparticles, spinel, sol-gel, X-ray diffraction, EDS, FTIR

Financing. *This research was conducted as part of the targeted funding program for the project IRN BR24992867, titled “Development of resource-saving technologies for the development and management of the water sector and processing industry in Kazakhstan, establishment of an innovative engineering center”.*

© Р.М. Құдайбергенова*, А.Р. Айтекова, Н.С. Мурзакасымова, А.С. Сейткан, А.Н. Нурлыбаева, 2025.

М.Х. Дулати атындағы Тараз университеті, Тараз, Қазақстан.

*E-mail: rm.kudajbergenova@dulaty.kz

КОБАЛТ ФЕРРИТ НАНОБӨЛШЕКТЕРІНІҢ ҚҰРЫЛЫМДЫҚ ЖӘНЕ ҚҰРАМДЫҚ СИПАТТАМАСЫ

Құдайбергенова Рабиға — PhD, М.Х. Дулати атындағы Тараз университеті, Тараз, Қазақстан,
E-mail: rm.kudajbergenova@dulaty.kz, <https://orcid.org/0000-0003-0759-1539>;

Айтекова Анар — PhD, М.Х. Дулати атындағы Тараз университеті, Тараз, Қазақстан,
E-mail: ar.aitekova@dulaty.kz, <https://orcid.org/0009-0006-9992-0043>;

Мурзакасымова Назгүл — PhD, М.Х. Дулати атындағы Тараз университеті, Тараз, Қазақстан,
E-mail: ns.murzakasymova@dulaty.kz, <https://orcid.org/0000-0003-0329-6137>;

Сейткан Айнур — техника ғылымдарының кандидаты, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан,
E-mail: seitkan_as@enu.kz, <https://orcid.org/0000-0001-9309-500X>;

Нурлыбаева Айша — PhD, қауымдастырылған профессор, М.Х. Дулати атындағы Тараз университеті, Тараз, Қазақстан,
E-mail: a.nurlybayeva@dulaty.kz, <https://orcid.org/0000-0001-9904-9979>.

Аннотация. Шпинель ферриттері, әсіресе кобальт ферриті (CoFe_2O_4), кең функционалдық қасиеттері мен қолдану мүмкіндіктеріне байланысты ғылыми тұрғыдан үлкен қызығушылық тудырып отыр. Оның тұрақты магниттік қасиеттері, тотығу дәрежесінің өзгергіштігі, жоғары өткізгіштігі және электрохимиялық тұрақтылығы CoFe_2O_4 материалын сенсорлар, катализаторлар, магнитті тасымалдағыштар және қоршаған ортаны қорғау технологиялары үшін перспективалы етеді. Тұрмыстық және өндірістік ағынды суларды тиімді әрі қайта пайдалануға жарамды материалдармен тазарту қажеттілігі бұл материалдың өзектілігін арттыра түседі. Зерттеудің мақсаты – таза фазалы CoFe_2O_4 нанобөлшектерін синтездеу және олардың құрылымдық-физика-химиялық

қасиеттерін анықтап, экологиялық қолдануға жарамдылығын бағалау. CoFe_2O_4 нанобөлшектері золь - гель жану әдісімен синтезделді. Үлгілердің құрылымы мен құрамы рентгендік дифракция (XRD), энергия дисперсиялық рентгендік спектроскопия (EDS) және Фурье түрлендіру инфрақызыл спектроскопиясы (FTIR) әдістерімен зерттелді. XRD нәтижелері CoFe_2O_4 -тің бірфазалы шпинель құрылымда түзілгенін (ICSD 1533163, $\text{Fd}\bar{3}\text{m}$) көрсетті. EDS талдауы құрамда тек кобальт, темір және оттегінің бар екенін анықтады, ал FTIR спектрі шпинель торына тән металл - оттегі тербеліс жолақтарын көрсетті. Алынған $\text{CoFe}_2\text{O}_4 (\text{Fe}^{3+})_a (\text{Co}^{2+}\text{Fe}^{3+})_b \text{O}_4$ типті шпинель торымен сипатталады. Мұндай құрылым материалға жоғары құрылымдық тұрақтылық, қанығу магниттелгіштігі, каталитикалық белсенділік, металл иондарының төмен ерігіштігі және салыстырмалы үлкен беткі аудан береді. Бұл қасиеттер CoFe_2O_4 нанобөлшектерін ағынды суларды тазарту саласында магнитті адсорбент немесе катализатор ретінде қолдануға өте қолайлы материал етеді, сонымен бірге оның магниттік табиғаты бөлшектерді оңай бөлуге және қайта пайдалануға мүмкіндік береді.

Түйін сөздер: кобальт феррит нанобөлшектері, шпинель, золь - гель, рентгендік дифракция, EDS, FTIR

© Р.М. Кудайбергенова *, А.Р. Айтекова, Н.С. Мурзакасымова,
А. Сейткан, А.Н. Нурлыбаева, 2025.

Таразский университет имени М.Х. Дулати, Тараз, Казахстан.

*E-mail: rm.kudajbergenova@dulaty.kz

СТРУКТУРНО-КОМПОЗИЦИОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ НАНОЧАСТИЦ ФЕРРИТА КОБАЛЬТА

Кудайбергенова Рабига — PhD, Таразский университет имени М.Х. Дулати, Тараз, Казахстан,

E-mail: rm.kudajbergenova@dulaty.kz, <https://orcid.org/0000-0003-0759-1539>;

Айтекова Анар — PhD, Таразский университет имени М.Х. Дулати, Тараз, Казахстан,

E-mail: ar.aitekova@dulaty.kz, <https://orcid.org/0009-0006-9992-0043>;

Мурзакасымова Назгуль — PhD, Таразский университет имени М.Х. Дулати, Тараз, Казахстан,

E-mail: ns.murzakasymova@dulaty.kz, <https://orcid.org/0000-0003-0329-6137>;

Сейткан Айнур — кандидат технических наук, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилёва, Астана, Казахстан,

E-mail: seitkan_as@enu.kz, <https://orcid.org/0000-0001-9309-500X>;

Нурлыбаева Айша — PhD, ассоциированный профессор, Таразский университет имени М.Х. Дулати, Тараз, Казахстан,

E-mail: a.nurlybayeva@dulaty.kz, <https://orcid.org/0000-0001-9904-9979>.

Аннотация: Шпинельные ферриты, особенно кобальтферрит (CoFe_2O_4), относятся к группе магнитных материалов, обладающих широким спектром функциональных свойств и значительным потенциалом прикладного

использования. Благодаря стабильной магнитной структуре, изменяемой валентности катионов, высокой магнитной проницаемости и электрохимической стойкости CoFe_2O_4 рассматривается как перспективный материал для сенсорных устройств, каталитических процессов, магнитных носителей и экологических технологий. На фоне растущей потребности в эффективных и регенерируемых материалах для очистки сточных вод исследование кобальтферрита приобретает особую актуальность. Цель настоящей работы заключалась в синтезе однофазных наночастиц CoFe_2O_4 и исследовании их структурных и физико-химических характеристик для оценки возможного применения в задачах экологической ремедиации. Наночастицы были получены методом золь-гель горения, обеспечивающим равномерность структуры и контролируемое формирование кристаллической фазы. Структурный анализ, выполненный методами рентгеновской дифракции (XRD), энергодисперсионной спектроскопии (EDS) и Фурье ИК-спектроскопии (FTIR), подтвердил формирование чистой шпинельной фазы CoFe_2O_4 без примесных образований. XRD-анализ выявил характерную кубическую структуру шпинели; EDS-анализ показал присутствие только элементов Co, Fe и O; FTIR-спектры продемонстрировали типичные вибрационные полосы металло-кислородных связей. Полученные наночастицы обладают типичной шпинельной конфигурацией $(\text{Fe}^{3+})_a(\text{Co}^{2+}\text{Fe}^{3+})_b\text{O}_4$, обеспечивающей высокую структурную стабильность, значительную намагниченность насыщения, низкую растворимость ионов металлов и развитую удельную поверхность. Совокупность данных свойств делает кобальтферрит CoFe_2O_4 перспективным наноматериалом для применения в очистке сточных вод и экологических систем.

Ключевые слова: наночастицы феррит кобальта, шпинель, золь-гель, рентгеновская дифракция, EDS, FTIR

Introduction. Ferrites are an important class of ceramic compounds, in which iron oxides combine with various metallic cations to form materials of great technological significance (Jeseentharani et al., 2012; Sugurbekova et al., 2024). Their distinctive ferrimagnetic behavior originates from the ordered distribution of cations within the spinel lattice, which largely determines their electrical, magnetic, and catalytic properties. The general composition of spinel ferrites can be expressed as AB_2O_4 , where divalent cations typically occupy tetrahedral (A) sites, while trivalent cations reside at octahedral (B) positions (Chae et al., 2004; Estrada et al., 2017). Among these materials, cobalt ferrite (CoFe_2O_4) has gained particular attention because of its distinctive combination of high coercivity, moderate saturation magnetization, strong magnetocrystalline anisotropy, and mechanical hardness (Koseoglu et al., 2008; Kandasamy et al., 2018).

Among spinel ferrites, cobalt ferrite (CoFe_2O_4) has emerged as one of the most promising candidates because it combines moderate saturation magnetization with high coercivity, mechanical hardness, and strong magnetocrystalline anisotropy. Unlike many other ferrites, cobalt ferrite generally adopts an inverse spinel structure in which most Co^{2+} cations occupy octahedral B-sites, while Fe^{3+} ions are distributed across both A- and B-sites. This cationic arrangement results in ferrimagnetism, where opposing spin

orientations of cobalt and iron ions generate a net magnetic moment. The combination of magnetic hardness with chemical and thermal stability renders CoFe_2O_4 particularly attractive for applications in devices that require both durability and reliable magnetic performance.

Traditionally, cobalt ferrite has been utilized in magnetic sensors, inductors, transformers, and data storage media. However, advances in nanotechnology have significantly broadened its potential. Reducing the particle size to the nanoscale alters the structural, electronic, and magnetic properties, often enhancing coercivity, surface reactivity, and catalytic performance. Nanosized CoFe_2O_4 exhibits a high surface-to-volume ratio, defect-rich structures, and cation redistribution, all of which contribute to improved functional performance compared to bulk counterparts. As a result, cobalt ferrite nanoparticles have become central to research in materials science and engineering.

In recent years, considerable attention has been directed toward biomedical uses of cobalt ferrite nanoparticles. Their strong magnetic response, biocompatibility, and ability to be guided by external magnetic fields make them suitable for targeted drug delivery, hyperthermia treatment of cancer, and as contrast agents in magnetic resonance imaging. At the same time, CoFe_2O_4 is being actively investigated for energy-related applications. Studies have shown its potential as an electrode material in lithium-ion batteries, supercapacitors, and as a catalyst in solar and fuel cells. Its combination of electrical conductivity, stability, and catalytic efficiency allows it to contribute to energy conversion and storage technologies that are vital for sustainable energy solutions.

Environmental protection is another critical area where cobalt ferrite has demonstrated great promise. CoFe_2O_4 nanoparticles can effectively adsorb heavy metals and degrade organic contaminants in wastewater (Cai et al., 2020; Al-Harbi et al., 2022). Their magnetic nature allows for simple separation and recovery, minimizing secondary pollution and enabling multiple cycles of reuse. Furthermore, cobalt ferrite functions as a robust catalyst in pollutant degradation and emission control (Yin et al., 2017; Nadeem et al., 2022).

The properties of cobalt ferrite are strongly dependent on synthesis conditions and particle morphology. Techniques such as sol–gel combustion, hydrothermal processing, and co-precipitation have been employed to produce nanoparticles with controlled size, crystallinity, and purity. Sol–gel synthesis, in particular, is widely used because it ensures homogeneity and allows tuning of microstructural features. Structural and chemical analyses, including X-ray diffraction, energy-dispersive X-ray spectroscopy, and Fourier-transform infrared spectroscopy, consistently confirm the successful formation of single-phase CoFe_2O_4 with spinel symmetry. The ability to correlate synthesis parameters with structural and magnetic properties is essential for tailoring materials to specific applications.

Given its multifunctional character, cobalt ferrite is now recognized as a material at the intersection of magnetism, catalysis, energy storage, and environmental remediation. Its stable crystal structure, high magnetic performance, large surface area, and chemical durability provide a foundation for diverse applications across industrial

and ecological fields. With continued advances in nanostructuring, surface modification, and eco-friendly synthesis approaches, CoFe_2O_4 nanoparticles are expected to play an increasingly important role in addressing global challenges such as sustainable energy production, clean water supply, and pollution control. Therefore, understanding the synthesis, structural characteristics, and functional behavior of cobalt ferrite remains a vital research direction that can contribute to the development of innovative and sustainable technologies.

Materials and methods. Materials: Iron (III) nitrate nonahydrate, purity $\geq 99.9\%$, cobalt (II) acetylacetonate, purity $\geq 95.0\%$ (Sigma-Aldrich). All precursors were of analytical grade and were used without prior treatment.

Methods: X-ray diffraction analysis was performed on a DRON-3 automatic diffractometer with $\text{CuK}\alpha$ radiation and a β -filter. Conditions for obtaining diffraction patterns: $U = 35 \text{ kV}$; $I = 20 \text{ mA}$; θ - 2θ survey; detector 2 degrees/min .

EDS analysis was performed on a Zeiss Crossbeam 540- FE-SEM scanning electron microscope. Crossbeam 540 is a dual-beam FIB- SEM microscope for nanotomography and nanofabrication, which allows EDS studies.

Preparation of the CoFe_2O_4 nanoparticles.

The synthesis of CoFe_2O_4 nanoparticles was carried out using a sol-gel route. Iron(III) nitrate nonahydrate (3.308 g, 8 mmol) and cobalt(II) acetylacetonate (0.996 g, 4 mmol) were employed as metal precursors. The salts were dissolved in ethanol and placed in a three-neck flask equipped with a condenser, followed by heating under magnetic stirring. After 10 min of heating, 1 ml of acetic acid was introduced as a catalyst to promote hydrolysis. Subsequently, 1 ml of 2-methoxyethanol was added as a co-solvent after 20 min. Additional reagents, including distilled water, ethylene glycol, and ethanol, were then incorporated into the reaction mixture, and continuous stirring was maintained until gel formation was achieved. The resulting gels were dried at 100°C for 24 h to remove residual solvents and organic components. Finally, the dried samples were calcined in a muffle furnace at 600°C for 8 h to obtain crystalline cobalt ferrite nanoparticles.

Results and discussions. X-ray diffraction analysis was performed to verify the phase formation of cobalt ferrite nanoparticles (Figure 1). The diffraction pattern exhibited peaks that can be exclusively indexed to the spinel CoFe_2O_4 structure (ICSD 1533163, space group $\text{Fd}3\text{m}$), confirming that the synthesis procedure yielded a pure single-phase material. These results are consistent with the classical structural data reported by Shannon et al. (1976) and demonstrate successful formation of the spinel lattice. The calculated average crystallite size was approximately 35 nm, as estimated from the broadening of diffraction peaks, which is a typical feature of nanocrystalline materials. The observed crystallite size is in good agreement with values reported in recent studies of sol-gel synthesized CoFe_2O_4 . For example, Kandasamy et al. (2018) and Al-Harbi et al. (2022) reported crystallite sizes in the range of 25–40 nm, depending on synthesis conditions and calcination temperatures. Similarly, Cai et al. (2020) observed that the crystallite size of cobalt ferrite nanoparticles could be tuned between 20 and 45 nm by modifying the solvent composition during the sol-gel process. The 35 nm crystallite

size obtained in this work thus falls within the typical range and confirms that the chosen synthesis parameters provide controlled nanostructure formation. Furthermore, the phase purity observed in the XRD pattern is particularly important, as secondary phases such as Fe_2O_3 or CoO are often reported when synthesis parameters are not carefully optimized (Yin et al., 2017; Nadeem et al., 2022). The absence of such impurity peaks in our results highlights the effectiveness of the applied sol-gel combustion route in producing phase-pure cobalt ferrite. This structural purity is critical for ensuring reproducible magnetic and catalytic performance in subsequent applications, as even minor impurity phases can significantly alter the overall physicochemical properties of the material.

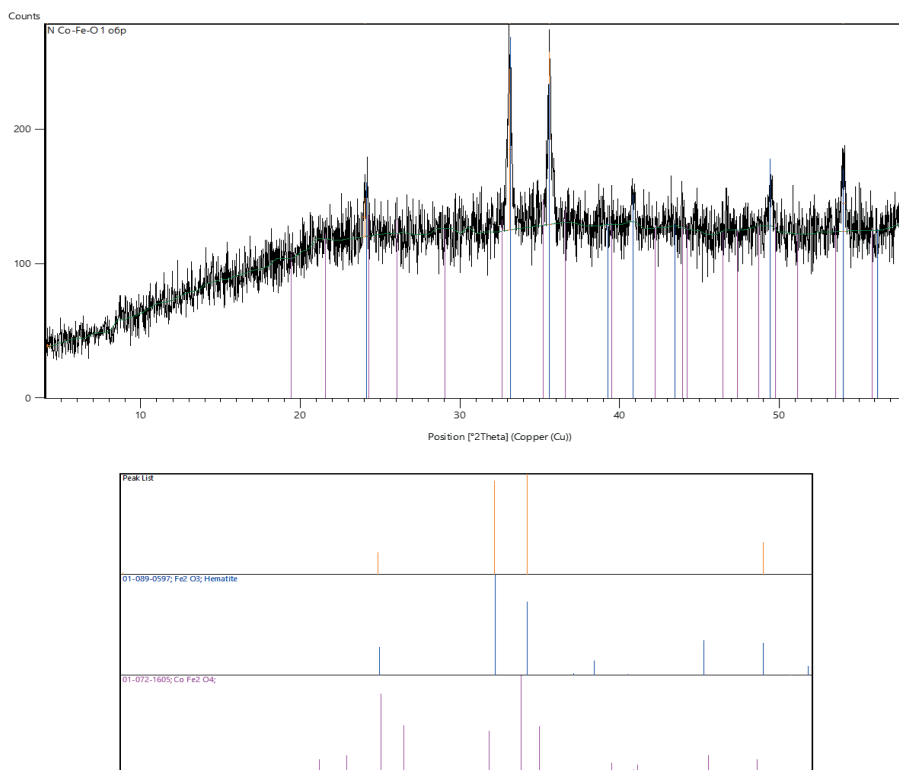


Figure 1 - X-ray diffraction analysis of CoFe_2O_4 nanoparticles.

The energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDS) analysis of the synthesized CoFe_2O_4 nanoparticles is shown in Figure 2. The obtained spectrum reveals distinct peaks corresponding exclusively to cobalt, iron, and oxygen, with no detectable signals from foreign elements, thereby confirming the absence of impurities in the sample (Carta et al., 2009). The quantitative analysis further demonstrated that the elemental ratio of Co, Fe, and O was in excellent agreement with the expected stoichiometry of cobalt ferrite, verifying the high phase purity of the material. Such consistency strongly indicates the effectiveness of the sol-gel combustion approach in producing

chemically homogeneous nanoparticles. Comparable findings have been reported in recent studies, where EDS characterization also confirmed the stoichiometric accuracy and compositional uniformity of CoFe_2O_4 nanoparticles synthesized via sol-gel and solvothermal methods (Yin et al., 2017; Al-Harbi et al., 2022; Nadeem et al., 2022). These results collectively underline that the chosen synthesis technique ensures not only structural integrity but also compositional precision, which is crucial for maintaining the desired magnetic and catalytic properties of cobalt ferrite.

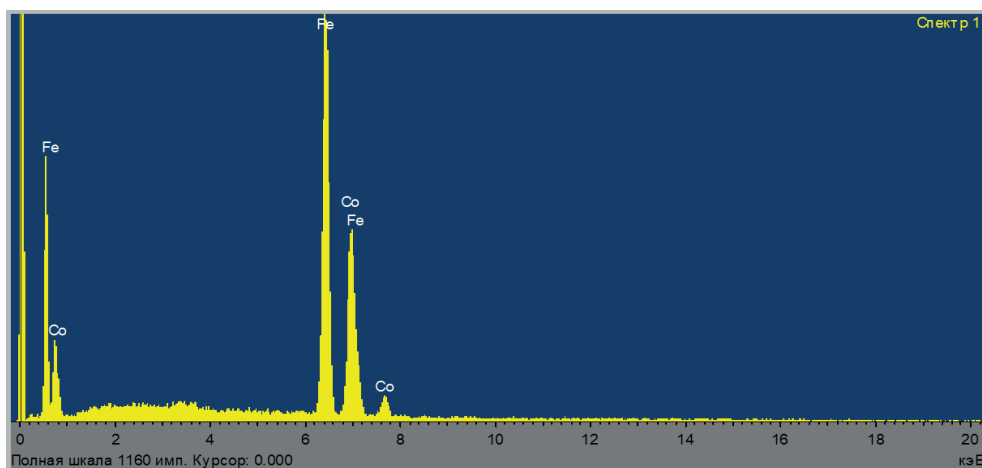


Figure 2 - EDS spectrum of CoFe_2O_4 nanoparticles.

FTIR spectroscopy was used to confirm the spinel structure of cobalt ferrite. The spectra of CoFe_2O_4 nanoparticles were recorded in the range of $4000\text{--}500\text{ cm}^{-1}$ (Figure 3). A strong absorption band at around 563 cm^{-1} is attributed to the stretching vibrations of metal–oxygen bonds in the tetrahedral and octahedral sites of the spinel lattice, clearly confirming the formation of the cobalt ferrite phase (Waldron et al., 1955). Broad bands between 3351 and 1653 cm^{-1} are associated with O–H stretching vibrations from water molecules adsorbed on the nanoparticle surface during synthesis (Thakur et al., 2023). Additional peaks observed at 1426 and 1653 cm^{-1} correspond to the symmetric and asymmetric stretching of COO^- groups, while the bands near 833 cm^{-1} and 2160 cm^{-1} are attributed to C–O and CO_2 stretching vibrations, respectively. The appearance of absorption bands in the range of $530\text{--}619\text{ cm}^{-1}$ further supports the presence of spinel-type M–O bonds: the band at 833 cm^{-1} can be linked to Co–O vibrations in octahedral positions, while the one near 530 cm^{-1} corresponds to Fe–O vibrations in tetrahedral coordination (Spizzo et al., 2016). Similar FTIR features have been reported in recent studies, where CoFe_2O_4 nanoparticles consistently exhibit two dominant metal–oxygen bands in the range of $419\text{--}577\text{ cm}^{-1}$, confirming the spinel ferrite structure (Kiani et al., 2023; Nadeem et al., 2022). These results demonstrate that the spectra obtained in this study are in good agreement with literature data and further verify the successful synthesis of stoichiometric cobalt ferrite with a well-defined spinel structure, described by the cation distribution $(\text{Fe}^{3+})_A(\text{Co}^{2+}\text{Fe}^{3+})_B\text{O}_4$.

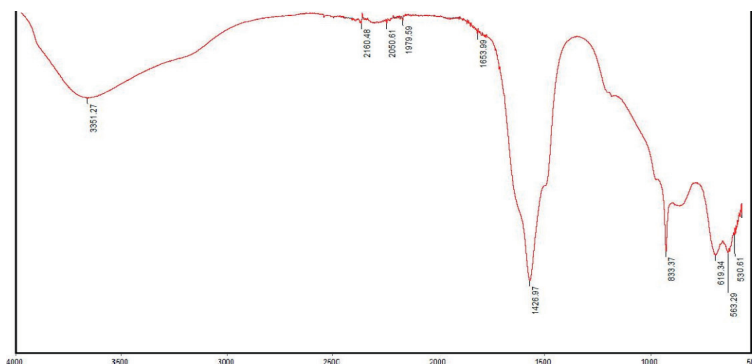


Figure 3 - FTIR spectrum of CoFe_2O_4 nanoparticles.

The magnetic properties of the synthesized sample were examined using a vibrating sample magnetometer (VSM), and the corresponding hysteresis loop is shown in Figure 4. Analysis of the magnetization curve revealed the following key parameters: coercivity of 157 Oe, remanent magnetization of 26.4 emu/g, saturation magnetization of 61 emu/g, and a squareness ratio (M_r/M_s) of 0.43. These results are characteristic of ferrimagnetic spinel-type materials and confirm the successful formation of a magnetically hard phase. The estimated crystallite size of approximately 60 nm indicates the presence of multidomain structures, which typically exhibit higher coercivity and substantial saturation magnetization (Yin et al., 2017; Patil et al., 2021).

Phase composition analysis demonstrated that the obtained powder is multicomponent, consisting mainly of spinel-type (Co, Fe) oxide ($\sim 73.6\%$), described as $(\text{Co}_{0.19}\text{Fe}_{0.81})(\text{Co}_{0.19}\text{Fe}_{0.81})\text{O}_{3.984}$, along with a secondary hematite (Fe_2O_3) phase ($\sim 26.4\%$). The dominance of the spinel fraction primarily governs the observed ferrimagnetic response, while the presence of hematite may influence the coercivity and residual magnetization values (Sarkar et al., 2019).

In addition to the quantitative VSM analysis, the magnetic response of the CoFe_2O_4 nanoparticles was qualitatively verified using a permanent magnet, as illustrated in Figure 4. The nanoparticles exhibited strong attraction to the magnetic field, further confirming their magnetic character. Such behavior makes cobalt ferrite nanoparticles promising candidates for applications in magnetic separation, catalysis, drug delivery, and environmental remediation, where efficient recovery of nanomaterials through external fields is advantageous (Kombaiah et al., 2020; Zhang et al., 2023).

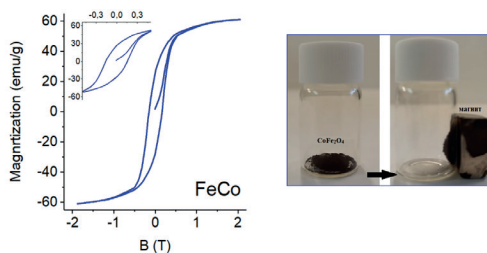


Figure 4 - Magnetic characteristics of CoFe_2O_4 nanoparticles

Among spinel-type ferrites, cobalt ferrite (CoFe_2O_4) is particularly attractive for wastewater treatment applications. Its combination of high catalytic efficiency, strong saturation magnetization, and chemically stable crystal framework makes it highly effective in pollutant degradation processes. In addition, CoFe_2O_4 demonstrates low solubility of metal ions in aqueous environments, which reduces secondary contamination risks. The material also possesses a relatively large specific surface area, enhancing its adsorption and catalytic performance. A further advantage is its facile magnetic separation from treated water, allowing simple recovery and reuse, which is critical for practical environmental applications (Senthil et al., 2016; Cechinel et al., 2023).

Conclusion. Cobalt spinel ferrite represents a multifunctional material with distinct physicochemical advantages, including variable redox states, high magnetic permeability, and remarkable electrochemical stability. In this study, CoFe_2O_4 nanoparticles were successfully synthesized by the sol–gel method and comprehensively characterized. X-ray diffraction confirmed the formation of a single-phase cobalt ferrite with a spinel crystal structure (ICSD 1533163, space group $\text{Fd}\bar{3}\text{m}$). Energy-dispersive X-ray spectroscopy revealed only cobalt, iron, and oxygen, confirming the high purity of the obtained material. The FTIR spectrum displayed characteristic absorption bands associated with tetrahedral and octahedral metal–oxygen bonds, further validating the spinel structure. The resulting composition can be described as $(\text{Fe}^{3+})_{\text{a}}(\text{Co}^{2+}\text{Fe}^{3+})_{\text{b}}\text{O}_4$, consistent with the expected cation distribution. Beyond confirming successful synthesis, the obtained results emphasize the technological relevance of CoFe_2O_4 nanoparticles. Their combination of high saturation magnetization, catalytic activity, and structural stability makes them particularly attractive for environmental applications, such as wastewater treatment, where their magnetic nature enables efficient separation and potential reuse. Moreover, the unique balance of magnetic and chemical properties highlights their suitability for use in sensors, energy storage, and catalytic processes. Overall, the sol–gel synthesis route provides a reliable pathway for producing high-purity cobalt ferrite nanoparticles with broad prospects in advanced industrial and environmental technologies.

References

- Al-Harbi F.F., Khan W., Al-Hazmi F., Sulieman A., Aldhafiri A.M., Kumar R. (2022) Structural, magnetic, and optical properties of sol–gel synthesized cobalt ferrite nanoparticles. *Materials Chemistry and Physics*, 282:125958. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2022.125958 (in Eng.).
- Cai X., Zhang H., Shang Y., Liu J., Li W. (2020) Sol–gel synthesis of cobalt ferrite nanoparticles with controllable size and enhanced magnetic properties. *Ceramics International*, 46:11903–11911. DOI: 10.1016/j.ceramint.2020.01.225 (in Eng.).
- Carta D., Casula M.F., Floris P., Falqui A., Mountjoy G., Corrias A. (2009) Synthesis and microstructure of CoFe_2O_4 nanoparticles prepared by sol–gel autocombustion. *Journal of Materials Chemistry*, 19:7291–7298. DOI: 10.1039/B912422B (in Eng.).
- Cechinel M.A.P., da Silva T.H., Domingos R., et al. (2023) Magnetic ferrite-based nanomaterials for wastewater treatment: synthesis, applications and challenges. *Environmental Nanotechnology, Monitoring & Management*, 20:100774. DOI: 10.1016/j.enmm.2023.100774 (in Eng.).
- Chae K.P., Hong Y.K., Choi B.C., Kim C.O. (2004) Structural and magnetic properties of nanocrystalline cobalt ferrite thin films prepared by sol–gel method. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 271:109–115. DOI: 10.1016/j.jmmm.2003.09.018 (in Eng.).

Estrada L.F., Barrera E.V., Martínez A.I. (2017) Magnetic properties of cobalt ferrite nanoparticles synthesized by different chemical routes. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 427:168–175. DOI: 10.1016/j.jmmm.2016.12.056 (in Eng.).

Jeseentharani V., Ramesh R., Arumugam S., Sivasankar S., Kumar M. (2012) Effect of particle size on structural, magnetic and dielectric properties of cobalt ferrite nanoparticles. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 23:2024–2030. DOI: 10.1007/s10854-012-0661-4 (in Eng.).

Kandasamy G., Sudame A., Luthra T., Saini K., Maity D. (2018) Functionalized cobalt ferrite nanoparticles for magnetic hyperthermia and MRI applications. *Journal of Colloid and Interface Science*, 514:534–543. DOI: 10.1016/j.jcis.2017.12.012 (in Eng.).

Kiani M.N., Ahmad S., Mehmood R., et al. (2023) Structural, optical and magnetic analysis of CoFe₂O₄ nanoparticles: evidence from FTIR and XRD. *ACS Omega*, 8:11245–11254. DOI: 10.1021/acsomega.2c05226 (in Eng.).

Koseoglu Y., Baykal A., Gozukara E., Kavas H., Toprak M.S. (2008) Structural and magnetic properties of nanocrystalline cobalt ferrite synthesized by solution combustion method. *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, 8:5845–5850. DOI: 10.1166/jnn.2008.180 (in Eng.).

Manikandan A., Vijaya J.J., Sundararajan M., Kennedy L.J. (2018) Green synthesis, structural, optical and magnetic properties of cobalt ferrite nanoparticles. *Journal of Molecular Structure*, 1160:409–415. DOI: 10.1016/j.molstruc.2018.02.013 (in Eng.).

Nadeem M., Hussain S., Ali I., Ahmad A., Gul I.H. (2022) Tailoring the structural, optical and magnetic properties of cobalt ferrite nanoparticles via sol–gel route for environmental and energy applications. *Journal of Alloys and Compounds*, 895:162604. DOI: 10.1016/j.jallcom.2021.162604 (in Eng.).

Senthil T., Suganya M., Rajan M., Vasantharaja D. (2016) Enhanced photocatalytic activity of cobalt ferrite nanoparticles for wastewater treatment. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 4(3):3050–3056. DOI: 10.1016/j.jece.2016.05.012 (in Eng.).

Shannon R.D., Prewitt C.T. (1976) Effective ionic radii in oxides and fluorides. *Acta Crystallographica Section B*, 32:751–767. DOI: 10.1107/S0567740876003571 (in Eng.).

Spizzo F., Del Bianco L., Rinaldi F., et al. (2016) Infrared spectroscopic investigation of spinel ferrites. *Journal of Alloys and Compounds*, 678:620–628. DOI: 10.1016/j.jallcom.2016.04.013 (in Eng.).

Spizzo F., Sgarbossa P., Sieni E., et al. (2016) Structural and magnetic properties of CoFe₂O₄ nanoparticles prepared by hydrothermal route. *Journal of Nanoparticle Research*, 18:126. DOI: 10.1007/s11051-016-3450-1 (in Eng.).

Sugurbekova G., Kairatkyzy S., Kudaibergenov S., Yeszhanov A., Seilkhanov T. (2024) Structural and magnetic properties of cobalt ferrite nanoparticles synthesized by sol–gel method. *Journal of Sol-Gel Science and Technology*, 110:117–126. DOI: 10.1007/s10971-023-06212-8 (in Eng.).

Thakur B.K., Kumar A., Singh J., et al. (2023) FTIR studies of nanoparticle surface hydration and organic residues. *Materials Chemistry and Physics*, 300:127450. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2023.127450 (in Eng.).

Thakur P., Sharma A., Kumar S., Singh S., Chahal R.P., Verma N.K. (2023) Structural, magnetic and dielectric properties of CoFe₂O₄ nanoparticles synthesized by sol–gel route. *Ceramics International*, 49(6):9083–9093. DOI: 10.1016/j.ceramint.2022.11.226 (in Eng.).

Yin W., Hao S., Cao H. (2017) Solvothermal synthesis of magnetic CoFe₂O₄/rGO nanocomposites for highly efficient dye removal in wastewater. *RSC Advances*, 7:4062–4069. DOI: 10.1039/C6RA26948F (in Eng.).

©**M. Nazhipkyzy*, A. Ashiraly, A. Aitugan, A. Aikenova, 2025.**

Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: akzhanat.ashiral.02@mail.ru

FABRICATION OF LIGNIN-BASED FIBROUS COMPOSITES BY ELECTROSPINNING FOR ENERGY STORAGE APPLICATIONS

Meruyert Nazhipkyzy — candidate of chemical sciences, professor, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: meruert82@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3716-0476>;

Ashiraly Akzhanat — master's degree student, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: akzhanat.ashiral.02@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0007-0782-9179>;

Aitugan Aizat — PhD, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: aizataitugan@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-3302-9363>;

Aikenova Ainur — master's degree student, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: aikenova20052003@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0001-3181-7318>.

Abstract. Lignin-based electrodes are generating significant interest as a promising solution to address the growing demand for cheap, sustainable, and environmentally responsible materials for modern energy storage devices. The global energy transition necessitates replacing traditional, limited carbon sources with abundant, renewable alternatives like lignin. As the second most common organic polymer in nature, lignin possesses a number of characteristic advantages, including high carbon content, structural diversity, and the presence of reactive functional groups, making it an attractive raw material for producing advanced electrochemical materials. The main purpose of this work is to summarize the latest achievements in the field of obtaining, refining, and chemical modification of lignin, as well as its transformation into porous carbon structures suitable for electrochemical application. Methodologically, this review explores modern fabrication technologies, including electrospinning, followed by critical processing stages such as thermal stabilization and carbonization, with a focus on the continuous production of lignin-based fibrous composites for supercapacitors. The results show significant progress in the development of lignin-based electrodes; for instance, activated carbon derived from lignin has achieved a specific capacitance of 263.46 F/g at 40 mA/g current density, and electrospun carbon nanofibers have reached up to 442.2 F/g. This performance confirms lignin's potential as an eco-friendly, low-

cost, and high-performance electrode material. Its wide availability and customizable chemical composition establish lignin as a promising candidate for the next generation of sustainable energy storage technologies.

Keywords: energy storage, lignin, battery, electrodes, supercapacitor

©М. Нажипқызы*, А. Ашіралы, А. Айтуған, А. Айкенова, 2025.

Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан.

E-mail: akzhanat.ashiral.02@mail.ru

ЭНЕРГИЯ САҚТАУ ЖҮЙЕЛЕРІНДЕ ҚОЛДАНУҒА АРНАЛҒАН ЛИГНИН НЕГІЗІНДЕГІ ТАЛШЫҚТЫ КОМПОЗИТТЕРДІ ЭЛЕКТРОСПИННИНГ ӘДІСІМЕН АЛУ

Меруерт Нажипқызы — химия ғылымдарының кандидаты, профессор, Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: meruert82@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3716-0476>;

Ашіралы Ақжанат — магистрант, Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: akzhanat.ashiral.02@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0007-0782-9179>;

Айтуған Айзат — PhD, Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: aizataitugan@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-3302-9363>;

Айкенова Айнура — магистрант, Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: aikanova20052003@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0001-3181-7318>.

Аннотация. Лигнин негізіндегі электродтар заманауи энергия сақтау құрылғылары үшін арзан, тұрақты және экологиялық таза материалдарға деген өсіп келе жатқан сұранысты шешудің перспективалы жолы ретінде үлкен қызығушылық тудыруда. Жаһандық энергетикалық көшу дәстүрлі, шектеулі көміртекті көздерін лигнин сияқты мол, жаңартылатын баламалармен алмастыруды қажет етеді. Табиғаттағы екінші ең көп таралған органикалық полимер бола отырып, лигниннің жоғары көміртекті құрам, құрылымдық әртүрлілік және реактивті функционалдық топтардың болуы сияқты бірқатар сипаттамалық артықшылықтары бар, бұл оны жетілдірілген электрохимиялық материалдарды өндіру үшін тартымды шикізат етеді. Бұл жұмыстың негізгі мақсаты – лигнинді алу, тазарту және химиялық модификациялау, сондай-ақ оны электрохимиялық қолдануға жарамды кеуекті көміртекті құрылымдарға айналдыру саласындағы соңғы жетістіктерді қорытындылау. Әдістемелік тұрғыдан, бұл шолу суперконденсаторлар үшін лигнин негізіндегі талшықты композиттерді үздіксіз өндіруге баса назар аудара отырып, электроспиннингті, одан кейінгі термиялық тұрақтандыру және карбонизация сияқты маңызды өңдеу кезеңдерін қамтитын заманауи өндіріс технологияларын зерттейді. Нәтижелер осы электродтарды дамытудағы елеулі өнімділік прогресін көрсетеді; мысалы, лигниннен алынған белсендірілген көмір 40 мА/г төмен тоқ тығыздығында 263,46 F/g айтарлықтай

меншікті сыйымдылыққа қол жеткізді, ал күрделі электроспиннингті көміртекті наноталшықтар 442,2 F/g дейінгі ерекше мәндерді көрсетті. Бұл өнімділік лигниннің экологиялық таза, арзан және жоғары өнімді электродты материал ретіндегі әлеуетін растайды. Оның кең қолжетімділігі мен реттелетін химиялық құрамы лигнинді тұрақты энергия сақтау технологияларының келесі буыны үшін перспективалы кандидат ретінде бекітеді.

Түйін сөздер: энергия сақтау, лигнин, аккумулятор, электродтар, суперконденсатор

© М. Нажипкызы*, А. Аширалы, А. Айтуган, А. Айкенова, 2025.

Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан.

E-mail: akzhanat.ashiral.02@mail.ru

ПОЛУЧЕНИЕ ВОЛОКНИСТЫХ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ЛИГНИНА МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОСПИННИНГА ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В СИСТЕМАХ ХРАНЕНИЯ ЭНЕРГИИ

Меруерт Нажипкызы — кандидат химических наук, профессор, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,

E-mail: meruert82@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3716-0476>;

Аширалы Акжанат — магистрант, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,

E-mail: akzhanat.ashiral.02@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0007-0782-9179>;

Айтуган Айзат — PhD, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,

E-mail: aizataitugan@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-3302-9363>;

Айкенова Айнура — магистрант, Казахский национальный университет имени аль-Фараби,

E-mail: aikenova20052003@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0001-3181-7318>.

Аннотация. Электроды на основе лигнина вызывают растущий интерес как перспективное решение для удовлетворения увеличивающегося спроса на дешёвые, устойчивые и экологически безопасные материалы для современных устройств хранения энергии. Глобальный энергетический переход обуславливает необходимость замены традиционных, исчерпаемых углеродных ресурсов на обильные и возобновляемые альтернативы, такие как лигнин. Являясь вторым по распространённости природным органическим полимером, лигнин обладает рядом уникальных преимуществ, включая высокое содержание углерода, структурное разнообразие и наличие реакционноспособных функциональных групп. Эти характеристики делают его привлекательным сырьём для получения передовых электрохимических материалов. Основная цель данной работы — обобщить современные достижения в области выделения, очистки и химической модификации лигнина, а также его последующего превращения в пористые углеродные структуры, пригодные для электрохимического применения. С методологической точки зрения в обзоре рассматриваются актуальные

технологии получения электродных материалов, включая электроспиннинг (электроформование), за которым следуют ключевые стадии обработки, такие как термическая стабилизация и карбонизация. Особое внимание уделено непрерывным технологическим маршрутам формирования волокнистых композитов на основе лигнина, предназначенных для суперконденсаторов. Полученные результаты демонстрируют значительный прогресс в создании высокоэффективных электродов. Так, активированный углерод, синтезированный из лигнина, достиг удельной ёмкости 263,46 Ф/г при плотности тока 40 мА/г, а сложные углеродные нановолокна, сформированные методом электроспиннинга, показали исключительные значения удельной ёмкости до 442,2 Ф/г. Эти показатели подтверждают потенциал лигнина как экологически чистого, недорогого и высокоэффективного электродного материала. Его широкая доступность и вариативный химический состав закрепляют за лигнином статус одного из наиболее перспективных кандидатов для технологий хранения энергии следующего поколения.

Ключевые слова: хранение энергии, лигнин, аккумулятор, электроды, суперконденсатор

1. Introduction. The rapid development of the global economy and the increasing human demand for energy storage devices are leading to a sharp rise in global energy consumption. Currently, the extraction and consumption of energy from the world's resources and fossil fuels are causing an energy crisis. It is well known that these resources are finite and cannot be used continuously (Abolghasemi Fakhri L et al, 2012). Projections suggest that by 2040-2050, the world's energy supply needs will double, requiring significant additional funding for the development of energy production technologies. The current reserves of global fossil fuels are expected to be depleted soon. Therefore, the development and advancement of cutting-edge technologies in energy storage and production is a crucial issue (Al-Abduljabbar & Farooq, 2023).

The design and improvement of energy-providing devices require the use of durable and environmentally friendly materials. In this regard, the use of traditional metallurgical metals is inefficient due to their high density (weight) and relatively low fatigue resistance. Consequently, interest in composite materials is growing (Ago et al, 2016). They possess mechanical and strength characteristics similar to metals while being lighter compared to other materials. The focus of global scientists is increasingly directed towards the research of new energy sources and energy storage devices. One promising solution in this research direction is the use of lignin as an electrode material for energy storage devices (Ago et al, 2016). Lignin can improve the efficiency of energy storage devices, reduce their cost and toxicity, and enable the production of "green" energy devices.

Lignin, the second most common organic polymer in nature, possesses a number of characteristic advantages, including high carbon content, structural diversity, and the presence of reactive functional groups, which makes it a very attractive raw material for the manufacture of advanced electrochemical materials (Liu et al, 2021).

However, there is a lack of comprehensive research in the scientific literature on lignin-based electrode materials for energy storage devices. Therefore, the main purpose of this work is to summarize the latest achievements in the field of obtaining, refining, and chemical modification of lignin, as well as its transformation into porous carbon structures suitable for electrochemical use. This article primarily provides a review of lignin-based electrode materials for energy storage. The article will first discuss the classification and extraction processes of lignin, as well as the preparation methods of lignin-based electrode materials and their detailed applications in energy storage devices, including supercapacitors and batteries. (Fig. 1) (Liu et al, 2021).

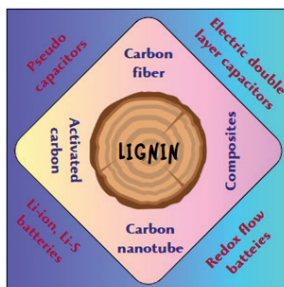


Figure 1 - Graphical representation of lignin-based electrode materials in energy storage application

2. Materials and methods

2.1 Lignin: characterization and modification methods

Lignin is a promising, low-cost, non-toxic, and highly effective modifier suitable for use as graphene-based supercapacitor electrode materials (Ago et al, 2016). Lignin can be mixed with graphene oxide in any ratio and contributes to the stabilization of reduced graphene oxide through π - π interactions. One study reported the synthesis of lignin-based bio-slag/graphene composites using a rapid and simple co-precipitation method (Melati et al, 2019). Lignin prevents the restacking (re-agglomeration) of graphene oxide and promotes the formation of small graphitic domains that enhance its electrical conductivity. Lignin is a large-volume byproduct of the wood processing industry and represents an environmentally sustainable and recyclable natural raw material (Nazhipkyzy et al, 2024). As shown in Figure 2, lignin consists of three main monomers (sinapyl alcohol, coumaryl alcohol, and coniferyl alcohol) and various functional groups (carboxyl and methoxyl) (Wang et al, 2023).

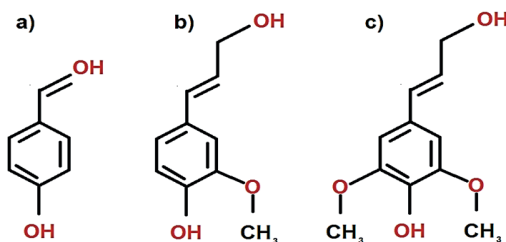


Figure 2 - The three main constituent monomers of lignin

Lignin's interaction with various polymeric compounds, including synthetic polymers (e.g., polyethylene oxide (PEO) and polypropylene) and biodegradable biopolymers (e.g., soy protein, polylactic acid (PLA), and bacterial cellulose), to form stable polymer composites has been extensively studied. As the second most abundant natural polymer after cellulose, lignin can be obtained in large quantities and at low cost as a byproduct from the cellulose-paper industry (Pakkang et al, 2022). Thus, utilizing lignin as a precursor is significantly advantageous (Pakkang et al, 2020). For example, the use of lignin for producing high-performance electrode materials such as carbon nanofibers has been widely reported. Currently, there is an increasing demand for high-performance composite materials in energy storage systems. We aimed to explore the potential of electrospinning in the morphology of carbon nanofibers using biomass-derived lignin as a renewable source, while surface area, porosity, and flexibility play a crucial role in supercapacitor electrochemistry.

Lignin's traditional applications are well-established in areas like cement additives, wood adhesives, and drilling fluids for oil wells. However, its low cost and abundant availability necessitate the exploration of novel, high-value applications. Recent investigations have demonstrated the successful utilization of lignin-based polymers as sorbents, flocculants, antioxidants, and components in energy storage layers (Lievonon et al, 2016). The molecular weight distribution of lignin exhibits significant heterogeneity, influenced by both the inherent structural variations across different plant species and the specific extraction methodologies employed. The number-average molecular weight (M_n) of lignin typically fluctuates between approximately 1000 and 5000 g/mol, while the weight-average molecular weight (M_w) can extend from 2000 to 50,000 g/mol, underscoring the intricate and heterogeneous nature of lignin. Lignin is broadly categorized into three primary types:

- softwood lignin, predominantly composed of guaiacyl (G) units (around 90%);
- hardwood lignin, which consists of a blend of guaiacyl (G) and syringyl (S) units;
- herbaceous lignin, encompassing all three units – guaiacyl (G), p-hydroxyphenyl (H), and syringyl (S) (Tiz et al, 2024).

Among the array of functional groups present, hydroxyl and carboxyl groups play a particularly influential role in dictating the polymer's properties. These functional groups establish a delicate equilibrium between the hydrophilic and hydrophobic characteristics of lignin macromolecules, concurrently modulating their susceptibility to hydrolytic degradation under diverse reaction conditions. The type of lignin and the composition of its structural units vary considerably depending on the plant species. For instance, herbaceous plants contain all three types of structural units, with the content of H units ranging approximately from 10% to 25%, while G and S units each constitute about 25% to 50%. Softwood consists solely of G units; in contrast, hardwood contains a moderate amount of G units (25%–50%) alongside a significantly higher proportion of S units (50%–75%).

Furthermore, the proportion of specific linkage types differs among various lignins. Ether linkages (C–O) represent the dominant type, accounting for approximately 70% of the total linkages. Following this are β -O-4 (40%–60%), α -O-4 (5%–7%), and 4-O

linkages. The remaining 30% comprises carbon-carbon (C–C) linkages, with the most prevalent being 5-5 (6%–16%), β -5 (6%–11%), β -1, β - β , and others (Melati et al, 2019).

2.2 Electrospinning method

Electrospinning is a versatile, yet simple and cost-effective method for fabricating nanofibers and nanofibrous membranes in a wide range of applications, from medicine to environmental and energy fields (Al-Abduljabbar & Farooq, 2023, Wang et al, 2023). It can produce non-woven mats made of continuous fibers with small diameters, leading to reduced weight, increased flexibility, and high active surface area. Nevertheless, electrospinning is an inherently complex process influenced by various parameters such as molecular entanglement, viscosity, surface tension, and conductivity. Typically, polyacrylonitrile (PAN) is used for electrospinning nanofibers due to its excellent solubility, solution entanglement, and process stability (Jauhari et al, 2021). However, the high cost of this petrochemical-based synthetic polymer is an economic factor limiting its widespread use in both high-level development and commercialization. Therefore, other alternative and practical sources for carbon-based electrospun nanofibers have been extensively sought (Tiz et al, 2024).

Lignin, extracted from the constituent part of plant cell walls, is the second most abundant natural biopolymer. It can be obtained from several byproducts of biorefineries, such as in the cellulose-paper industry. More than 70 million tons of lignin are accumulated annually. The globular molecules of lignin contain a high aromatic content, making them an efficient carbon source. Furthermore, lignin exhibits thermal stability, biodegradability, and a stable chemical structure, making it a promising candidate for producing carbon nanofibers for supercapacitor electrodes. Recent studies show that activated lignin-based carbon fibers exhibit relatively high specific capacitance and power density (Melati et al, 2019).

Supercapacitors primarily consist of electrode materials, electrolytes, current collectors, and separators. Among these, electrode materials, as the core component for energy storage, critically influence the electrochemical performance of supercapacitors. The efficacy of supercapacitors is intrinsically linked to the nature of the electrode material. Electrospinning emerges as a straightforward yet potent technology employed across medical, environmental, and energy sectors for the creation of nanofibers and membranes (Pakkang et al, 2019). When a high-voltage electric field is applied to a polymer solution, the initiation of fibers occurs at the apex of the “Taylor cone”. Initially, the trajectory of the fiber is predominantly linear (stable region). Beyond a certain threshold distance, the fiber’s path transitions into a complex configuration (bending instability region).

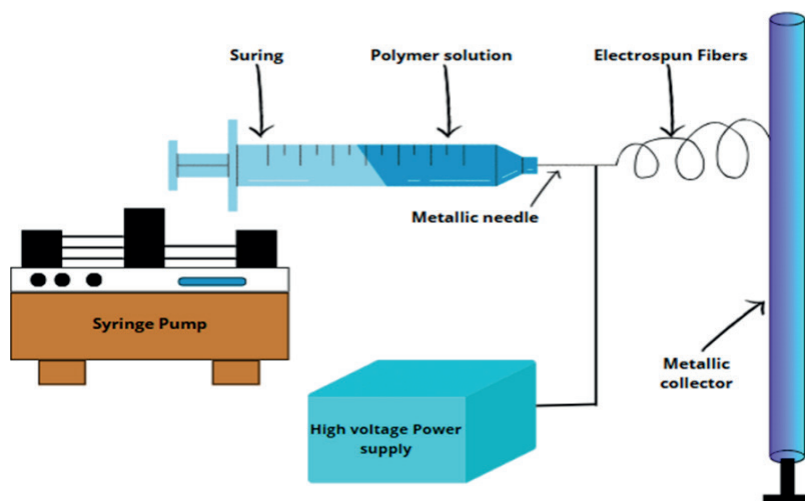


Figure 3 - Schematic diagram of fiber production from polymer solution via electrospinning, redrawn and adapted from (Liu et al, 2021)

2.3 Lignin production methods

2.3.1 Industrial relevance and applications of lignin

Lignin is an abundant, renewable biopolymer with significant potential in various industrial applications. Its incorporation into biodegradable polymers enhances mechanical and thermal properties; for example, the thermal stability of polylactic acid (PLA) improves upon lignin integration. Lignin is also used to reinforce carbon fibers and enhance polymer composites in the rubber industry. Traditionally, lignin has been applied in adhesives for wood panels due to its abundance of phenolic groups, making it a promising replacement for phenol in phenol-formaldehyde (PF) resins. PF resins are widely used in plywood, particleboard, and other wood composites; however, they exhibit high toxicity and price volatility. Replacing PF resins with environmentally friendly lignin is economically and ecologically advantageous, although industrial utilization is limited by the low reactivity of native lignin (Yuan et al, 2014).

In their study, Yuan et al (2014) developed a bio-based adhesive by combining ammonium lagnosulfonate (MAL) with polyethylenimine (PEI). The resulting MAL/PEI adhesive demonstrated superior mechanical strength, modulus, and adhesion compared to unmodified MAL or PEI-based adhesives, highlighting the potential of chemically modified lignin for high-performance applications.

The solubility of lignin in organic solvents also restricts its utilization. For example, Kraft lignin can be partially depolymerized using basic catalysis in supercritical methanol and subsequently converted into lignin polycarboxylic acid (LPCA). LPCA functions effectively as a curing agent for epoxy resins, performing comparably to commercial anhydride-based hardeners. Despite being the second most abundant biopolymer after cellulose, only a small fraction of lignin's annual production is applied in material science and chemical industries due to structural complexity, heterogeneity, and incompatibility with many matrices (Tong et al, 2023).

2.3.2 Biosynthesis of native lignin

The biosynthesis of lignin has been studied for over a century. Native lignin is synthesized via enzymatic polymerization of three main alcohol precursors: sinapyl alcohol, coniferyl alcohol, and p-coumaryl alcohol. These precursors are produced from L-phenylalanine catalyzed by specific enzymes, transported to the cell wall by glucosides, and polymerized through the action of laccase and peroxidase enzymes, forming lignin (Al-Abduljabbar & Farooq, 2023).

The primary monolignols give rise to three structural units: syringyl (S), guaiacyl (G), and p-hydroxyphenyl (H), differing by the degree of methoxylation on the benzene ring. Softwood lignin mainly consists of G units (90–95%), hardwood lignin contains a mix of S and G units, while herbaceous plants include all three types. The ratios of S, G, and H units depend on plant species and pretreatment methods, and these ratios critically influence lignin's properties.

Lignin monomers are linked via ether or carbon-carbon bonds, forming a diverse array of substructures. The β -O-4' ether linkage predominates, accounting for approximately 50% of internal linkages, and is highly reactive during depolymerization. Other linkages include β - β' , β -5', β -1', and 5-5', with varying abundance depending on lignin type. Functional groups such as hydroxyl, benzyl, methoxyl, ether, and carboxyl contribute to lignin's amphiphilic nature and reactivity. Hydroxyl groups, categorized as aliphatic or phenolic, are particularly important for chemical modifications including alkylation, esterification, and phenolation. Carboxyl groups, though present in small amounts in native lignin, can increase after chemical modification, enhancing solubility and reactivity.

2.3.3 Lignin isolation and production methods

In laboratory settings, lignin is often extracted for structural characterization using several methods.

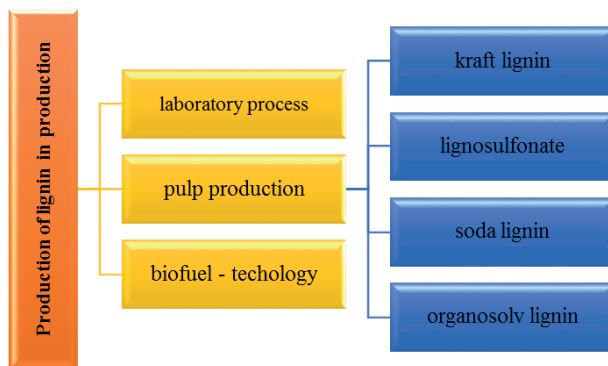


Figure 4 - Classification of industrial methods for lignin production

Milled Wood Lignin (MWL) is obtained from milled biomass using water and neutral solvents, such as dioxane, under reflux. This method preserves the lignin structure but typically yields less than 40% and may contain residual carbohydrates. Cellulolytic Enzyme Lignin (CEL) is produced by hydrolyzing cellulose, resulting in higher lignin

yield while maintaining its structural integrity. An improved version, Enzymatic Mild Acidolysis Lignin (EMAL), incorporates a small amount of hydrochloric acid during extraction, achieving yields of up to 70% with approximately 90% purity and fewer lignin-carbohydrate complexes.

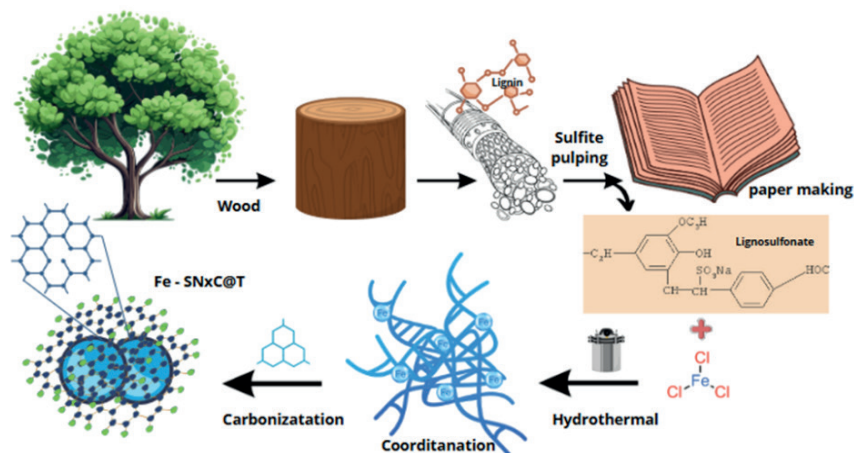


Figure 5 - Methods of lignin production and conversion, redrawn and adapted from (Liu et al, 2019)

On an industrial scale, lignin is obtained through various pulping processes. Kraft lignin is produced via alkaline pulping using sodium hydroxide and sodium sulfide, which cleaves α - and β -ether linkages and allows lignin precipitation upon acidification. Kraft lignin contains hydrophobic thiol groups, contributing to a sulfur content of 1–2%. Sulfite lignin is derived using acidic pulping, producing water-soluble lignosulfonates that contain hemicellulose and find applications in adhesives, batteries, dispersants, and surfactants. Soda lignin, obtained from soda or soda-anthraquinone pulping, has high purity, low molecular weight, and is sulfur-free, making it suitable for chemical modification. Organosolv lignin is extracted with organic solvents such as ethanol or acetic acid, exhibits high solubility in alkaline solutions and many organic solvents, possesses a uniform molecular weight, is sulfur-free, and requires minimal modification, making it attractive for biomaterial synthesis.

Aims at comprehensive utilization of biomass by separating cellulose, hemicellulose, and lignin. Pretreatment (chemical, physical, or physicochemical) is crucial to enhance enzymatic hydrolysis efficiency. Alkaline and acidic media differently affect lignin structure, while steam explosion and hot water treatment partially dissolve lignin. Integration of pretreatment methods improves production efficiency, but further research is needed to maximize lignin utilization in biorefineries (Tong et al, 2023).

2.3.4 Challenges and opportunities in lignin utilization

Despite its abundance, lignin's industrial application is limited due to low solubility, heterogeneous molecular weight, and incompatibility with many matrices. Chemical modification, such as formation of MAL/PEI adhesives, LPCA, or functionalized derivatives, enhances reactivity and widens potential applications. Optimizing

extraction, depolymerization, and chemical modification techniques remains a major focus to unlock high-value applications in materials science and energy storage.

3. Results and discussion

3.1 Application of lignin-based electrodes in energy storage systems

3.1.1 Energy storage mechanisms

The energy storage mechanism of supercapacitors depends on the charge accumulation and conversion capabilities of their electrode materials, leading to their classification into electrochemical double-layer capacitance (EDLC) and pseudocapacitance (PC). Devices storing energy via the electrochemical double layer are termed EDLCs, while those employing pseudocapacitance are designated as PCs (Fig. 6) (Liu et al., 2021).

EDLCs store energy at the electrode–electrolyte interface. Carbonaceous materials—including activated carbon, carbon fibers, carbon nanotubes, graphene, and carbon aerogels—are widely used as electrodes for EDLCs due to their high specific surface area, porosity, abundant active sites, and favorable electrical conductivity. These properties facilitate short electronic or ionic transport pathways, granting EDLCs high power density and long cycling stability.

Pseudocapacitors, on the other hand, store energy via rapid and reversible redox reactions at or near the electrode surface (Wang et al., 2023). They typically exhibit higher specific capacitance and energy density than EDLCs but lower power density and shorter cycling life. Conductive polymers, transition metal oxides, and sulfides are common electrode materials for PCs.

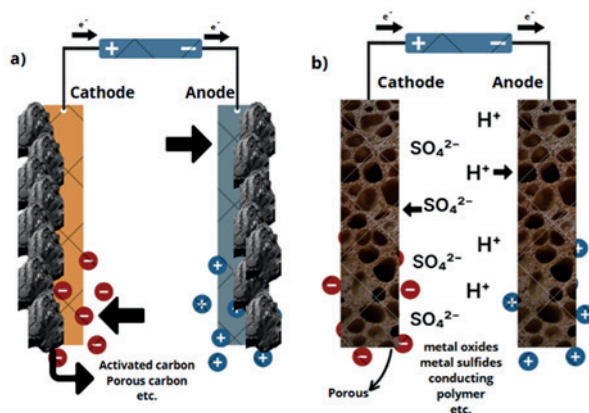


Figure 6 - Schematic diagram of the energy storage mechanism for (a) electric double-layer capacitors (EDLCs) and (b) pseudocapacitors (PCs), redrawn and adapted from (Liu et al, 2021)

3.1.2 Lignin as an electrode precursor

Lignin-derived carbon materials are attracting attention for EDLCs due to their high carbon content and low cost (Jauhari et al., 2021). The quinone structures in lignin and its derivatives provide redox activity, enabling their application in pseudocapacitors. The specific preparation methodologies and energy storage mechanisms of lignin-based electrodes will be detailed in Section 3.2 (Schlee et al., 2019).

Carbon fibers, derived from renewable plant fibers such as bamboo or cannabis, possess low density, high mechanical strength, and excellent conductivity, making them suitable for supercapacitors and batteries. Polymers like polyacrylonitrile (PAN), polyethylene glycol (PEG), and polyvinyl alcohol (PVA) serve as precursors, with PAN being the most widely used due to its mechanical strength and high carbon content. However, its high cost motivates the search for alternative, low-cost precursors. Lignin, with a carbon content exceeding 60%, is a promising candidate for producing carbon fibers (Schlee et al., 2019).

Activated carbon (AC) is commonly used for EDLC electrodes due to its large specific surface area, electrical conductivity, chemical and thermal stability, and well-developed porous structure (Tong et al., 2023).

3.2 Comparative performance summary of lignin-based electrodes

3.2.1 Physical and chemical activation methods

Lignin-based activated carbon (AC) can be prepared via physical or chemical activation.

Physical activation typically involves two stages: carbonization followed by activation, in which oxidizing gases (O_2 , CO_2 , or steam) generate a porous architecture through chemical gasification.

Chemical activation entails mixing lignin-derived carbon with activating agents (e.g., $ZnCl_2$, KOH , K_2CO_3 , H_3PO_4) and heating in an inert atmosphere. Carbonization and activation often occur simultaneously, producing hierarchical porous structures. Chemical activation generally yields higher specific surface areas.

Studies show that different activating agents influence electrochemical performance. AC activated with $ZnCl_2$ exhibited the lowest specific surface area, as $ZnCl_2$ primarily acts as a catalyst during dehydroxylation and dehydration. AC activated with K_2CO_3 achieved a surface area of $1585 \text{ m}^2/\text{g}$, with a specific capacitance of 263.46 F/g at 0.04 A/g (Yu et al., 2021). KOH activation combined with microwave heating and humidified N_2 gas yielded porous carbon with abundant micropores and hierarchical structures, achieving 173 F/g capacitance (Jin et al., 2012). Hydrothermal carbonization of lignin from corn stalks followed by $KOH/Ca(OH)_2$ activation resulted in AC with hierarchical porosity and oxygen-enriched functional groups, demonstrating high energy density even at high power densities (Yu et al., 2021).

3.2.2 Performance comparison

Table 1 summarizes the performance of various lignin-based electrodes:

Table 1. Summary table of lignin-based electrodes

Precursor and method	Activation method	Specific Capacitance (F/g)	Current Density (A/g)	Cycle Stability	Ref.
Lignin (Electrospinning)	Modification by $NaNO_3$	192	0,2	~90% (after 5000 cycles)	(Schlee et al, 2019)
Lignin (Electrospinning)	KOH activation	442,2	0.1	~91% (after 5000 cycles)	(Ma et al, 2018)

Lignin (AC)	K ₂ CO ₃ Activation	263,46	0.04	~97% (after 5000 cycles)	(Jin et al, 2012)
Lignin (AC)	KOH/Ca(OH) ₂	291,3	0,5	~96,1% (after 5000 cycles)	(Yu et al, 2021)

This summary demonstrates that lignin-based electrodes, when appropriately activated, achieve high specific capacitance, excellent cycling stability, and hierarchical porous structures suitable for supercapacitor applications.

4. Conclusion.

Lignin and its derivatives have garnered substantial interest in energy storage systems in recent years owing to their high carbon content, abundant functional groups, natural abundance, and low cost. This review synthesizes recent advancements in the design and fabrication of lignin-based electrode materials for energy storage devices, encompassing supercapacitors and batteries. Lignin can serve as a precursor for porous carbonaceous materials, while lignin and its derivatives can be directly employed as active materials, both presenting as promising electrode candidates for energy storage. The key finding shows that while activated carbon derived from lignin has achieved a high specific capacitance, reaching 263.46 F/g, electrospun carbon nanofibers can achieve superior performance, such as 442.2 F/g, demonstrating the high potential of engineered fibrous structures.

Nevertheless, the development of lignin-based electrode materials remains in its nascent stages, necessitating further research for practical implementation in real-world energy storage devices. The porosity and pore dimensions of electrode materials exert a significant influence on the electrochemical performance of energy storage devices. Currently, the production of porous carbonaceous materials from lignin predominantly yields microporous structures. Achieving well-engineered pore architectures in lignin-derived carbon remains a complex and costly endeavor, thus demanding intensified efforts to obtain multi-layered porous lignin-derived carbon materials with controlled mesopore and macropore distributions. Future research should focus on designing lignin-derived carbon with hierarchical pore structures and improving the cycling stability of lignin/conductive polymer hybrid electrodes to fully realize their potential in energy storage applications

References

- Abolghasemi Fakhri L., Ghanbarzadeh B., Dehghannya J., & Entezami A.A. (2012) The effects of montmorillonite and cellulose nanocrystals on physical properties of carboxymethyl cellulose/poly (vinyl alcohol) blend films. *Journal of Industrial & Polymer Science and Technology*, DOI: 10.22063/JIPST.2013.610 (in English).
- Al-Abduljabbar A., Farooq I. (2023) Electrospun Polymer Nanofibers: Processing, Properties, and Applications. *Polymers*, 15(1). — P. 65. (in English)
- Ago M., Borghei M., Haataja J.S., & Rojas O.J. (2016) Mesoporous carbon soft-templated from lignin nanofiber networks: Microphase separation boosts supercapacitance in conductive electrodes. *RSC Advances*, 6(89). — P. 85802–85810. (in English)
- Liu H., Xu T., Liu K., Zhang M., Liu W., Li H., Du H., & Si C. (2021) Lignin-based electrodes for energy storage application. *Industrial Crops and Products*, 165. — P. 113425. (in English)

- Melati R.B., Shimizu F.L., Oliveira G., Pagnocca F.C., de Souza W., Sant'Anna C., & Brienzo M. (2019) Key factors affecting the recalcitrance and conversion process of biomass. *BioEnergy Research*, 12. — P. 1–20. (in English)
- Nazhipkyzy M., Maltay A. B., & Seilkhanov T.M. (2024) Synthesis of Carbon Nanofibers from Lignin Using Nickel for Supercapacitor Applications. *Fibers*, 12(10), 87. DOI: 10.3390/fib12100087 (in English)
- Wang H., Fu F., Huang M., Feng Y., Han D., Xi Y., Xiong W., Yang D., & Niu L. (2023) Lignin-based materials for electrochemical energy storage devices. *Nano Materials Science*, 5(2). — P. 141–160. DOI: 10.1016/j.nanoms.2022.01.002 (in English).
- Jauhari J., Suharli A.J., Nawawi Z., & Sriyanti I. (2021) Synthesis and characteristics of polyacrylonitrile (PAN) nanofiber membrane using electrospinning method. *Journal of Chemical Technology and Metallurgy*, 56(4). — P. 698–703. (in English)
- Pakkang N., Suzuki S., Shigetomi K., & Uraki Y. (2022) Assembly of electric double-layer capacitors with hardwood kraft lignin-based electrodes and separator together with ionic liquid electrolyte. *Holzforschung*, 77(2). DOI: 10.1515/hf-2022-0143 (in English).
- Pakkang N., Kumar M., Taira S., Koda K., Shigetomi K., & Uraki Y. (2020) Preparation of kraft lignin-based activated carbon fiber electrodes for electric double layer capacitors using an ionic liquid electrolyte. *Holzforschung*, 74(6). DOI: 10.1515/hf-2019-0291 (in English).
- Lievonon M., Valle-Delgado J.J., Mattinen M.-L., Hult E.-L., Lintinen K., Kostianen M.A., Paananen A., Szilvay G.R., Setälä H., & Österberg M. (2016) A simple process for lignin nanoparticle preparation. *Green Chemistry*, 18(5). — P. 1416–1422. (in English)
- Tiz D.B., Tofani G., Vicent, F.A., Likozar B. (2024) Chemical synthesis of monolignols: Traditional methods, recent advances, and future challenges in sustainable processes. *Antioxidants*, 13(11). — 1387 p. (in English)
- Pakkang N., Koda K., Uraki Y. (2019). Development of lignin-based electrode for high performance electric double layer capacitor with ionic liquid as an electrolyte. *Holzforschung*, 73(10). — P. 913–920. (in English)
- Yuan Y., Guo M., & Liu F. (2014) Preparation and Evaluation of Green Composites Using Modified Ammonium Lignosulfonate and Polyethylenimine as a Binder. *BioResources*, 9(1). — P. 836–848. (in English).
- Tong Y., Yang J., Li J., Cong Z., Wei L., Liu M., Zhai S., Wang K., & An Q. (2023) Lignin-derived electrode materials for supercapacitor applications: progress and perspectives. *Journal of Materials Chemistry A*, 11. — P. 1061–1082. DOI: 10.1039/D2TA07203C (in English)
- Schlee P., Herou S., Jervis R., Shearing P.R., Brett D.J.L., Baker D., Hosseinaei O., Tomani P., Murshed M.M., Li Y., Mostazo-López M. J., Cazorla-Amorós D., Jorge Sobrido A.B., & Titirici M.-M. (2019) Free-standing supercapacitors from Kraft lignin nanofibers with remarkable volumetric energy density. *Chemical Science*, 10. — P. 2980–2988. DOI: 10.1039/C8SC04936J (in English).
- Ma C., Li Z., Li J., Fan Q., Wu L., Shi J., & Song Y. (2018) Lignin-based hierarchical porous carbon nanofiber films with superior performance in supercapacitors. *Applied Surface Science*, 456. — P. 568–576. DOI: 10.1016/j.apsusc.2018.06.189 (in English).
- Jin X.-J., Yu Z.-M., & Wu Y. (2012) Preparation of activated carbon from lignin obtained by straw pulping by KOH and K₂CO₃ chemical activation. *Cellulose Chemistry and Technology*, 46(1–2). — P. 79–85. (in English).
- Yu L., Hsieh C.-T., Keffer D.J., Chen H., Goenaga G.A., Dai S., Zawodzinski T.A., & Harper D.P. (2021) Hierarchical lignin-based carbon matrix and carbon dot composite electrodes for high-performance supercapacitors. *ACS Omega*, 6(11). — P. 7709–7718. <https://doi.org/10.1021/acsomega.1c00448> (in English).

© U. Nazarbek¹, Y. Raiymbekov¹, P. Abdurazova², G. Kambarova¹, 2025.

¹M. Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan;

²Zhanibekov University, Shymkent, Kazakhstan.

E-mail: eplusr@bk.ru

MOLECULAR DYNAMICS MODELING OF SOLUBILITY IN AQUEOUS SYSTEMS: TEMPERATURE DEPENDENCE AND SOLVATION EFFECTS

Nazarbek Ulzhalgas — PhD, Associate Professor, M. Auezov South Kazakhstan University, Department of Chemistry and Pharmaceutical Engineering, Shymkent, Kazakhstan,

E-mail: unazarbek@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8890-8926>;

Raiymbekov Yerkebulan — PhD, M. Auezov South Kazakhstan University, Research Laboratory “Water Quality Monitoring and Water Technologies”, Shymkent, Kazakhstan,

E-mail: eplusr@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2119-2406>;

Abdurazova Perizat — PhD, Associate Professor, O. Zhanibekov South Kazakhstan Pedagogical University, Department of Chemistry, Shymkent, Kazakhstan,

E-mail: abdurazova.perizat@okmpu.kz, <https://orcid.org/0000-0002-5244-7678>;

Kambarova Galiya — Candidate of Technical Sciences, M. Auezov South Kazakhstan University, Research Laboratory “Water Quality Monitoring and Water Technologies”, Shymkent, Kazakhstan,

E-mail: kambarova85@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8417-3384>.

Abstract. Relevance. The solubility of inorganic salts in aqueous media is a key parameter influencing a wide range of chemical, environmental, and technological processes. Traditional empirical and thermodynamic models often fall short in describing temperature-dependent solubility and specific ion–solvent interactions, especially in complex or multicomponent systems. Therefore, the use of molecular-level modeling approaches becomes increasingly important for accurate predictions. This study aims to develop and validate a molecular dynamics (MD)-based model for predicting the solubility of $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$, $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$, and $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ in water over the temperature range of 273–373 K (0–100°C), and to elucidate the molecular mechanisms underlying the temperature dependence of dissolution. Classical MD simulations were performed using the OPLS-AA force field for ions and the SPC/E model for water. Key parameters such as coordination numbers, hydration radii, and Gibbs free energies of solvation (ΔG_{sol}) were calculated. Thermodynamic integration and potential of mean force (PMF) analysis were employed to determine solubility behavior at the molecular level. $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$ and $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$ exhibited high solubility, supported by compact hydration shells and favorable ΔG_{sol} values (–340.5 and –310.2 kJ/mol, respectively). $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$

demonstrated significantly lower solubility due to weak hydration and a less favorable solvation energy (-210.7 kJ/mol). Cu and Ni nitrates followed a linear temperature dependence, while $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ showed nonlinear behavior likely due to complexation and entropy effects. Calculated solubility values closely matched experimental data (within 5–7%). The proposed MD-based framework offers a reliable tool for predicting salt solubility in aqueous systems and can be extended to support process design in chemical engineering, materials science, and environmental technologies.

Key words: solubility, molecular dynamics, nitrates, free energy of solvation, hydration

Funding. This research was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan under the project number AP23487663.

© У. Назарбек¹, Е. Райымбеков¹, П. Абдуразова², Ғ. Қамбарова¹, 2025.

¹М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан;

²Ө. Жәнібеков атындағы Оңтүстік Қазақстан педагогикалық университеті,
Шымкент, Қазақстан.
E-mail: eplusr@bk.ru

СУ ЖҮЙЕЛЕРІНДЕГІ ЕРІГІШТІКТІҢ МОЛЕКУЛАЛЫҚ ДИНАМИКАЛЫҚ МОДЕЛЬДЕУІ: ТЕМПЕРАТУРАҒА ТӘУЕЛДІЛІК ЖӘНЕ ЕРІТКІШТІҢ ӘСЕРІ

Назарбек Улжалғас — PhD, қауымдастырылған профессор, Химия және фармацевтикалық инженерия кафедрасы, М. Әуезов атындағы ОҚУ, Шымкент, Қазақстан,
E-mail: unazarbek@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8890-8926>;

Райымбеков Еркебұлан — PhD, М. Әуезов атындағы ОҚУ, «Су сапасын мониторингілеу және сулы технологиялар» ғылыми-зерттеу зертханасы, Шымкент, Қазақстан,
E-mail: eplusr@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2119-2406>;

Абдуразова Перизат — PhD, қауымдастырылған профессор, Химия кафедрасы, Ө. Жәнібеков атындағы ОҚПУ, Шымкент, Қазақстан,
E-mail: abdurazova.perizat@okmpu.kz, <https://orcid.org/0000-0002-5244-7678>;

Қамбарова Ғалия — техника ғылымдарының кандидаты, М. Әуезов атындағы ОҚУ, «Су сапасын мониторингілеу және сулы технологиялар» ғылыми-зерттеу зертханасы, Шымкент, Қазақстан,
E-mail: kambarova85@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8417-3384>.

Аннотация. Бейорганикалық тұздардың су ерітінділеріндегі ерігіштігі химиялық реакциялар жылдамдығына, табиғи су жүйелеріндегі зат алмасуға, сондай-ақ өндірістік процестердің тиімділігіне тікелей әсер етеді. Дәстүрлі термодинамикалық модельдер температураның әсерін және ион-еріткіш арасындағы нақты өзара әрекеттесулерді жеткілікті дәлдікпен сипаттай алмайды. Сондықтан молекулалық деңгейде модельдеу әдістерін қолдану өзекті болып табылады. Зерттеудің мақсаты – 273 – 373 К (0 – 100°C) температура аралығында $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$, $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$ және $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ нитраттарының судағы ерігіштігін болжау үшін молекулалық динамика әдісіне негізделген модельді құрастыру және валидтеу,

сондай-ақ ерігіштіктің температураға тәуелділігін анықтайтын молекулалық механизмдерді сипаттау. Молекулалық динамика модельдеуі OPLS-AA күш өрісі мен SPC/E су моделін қолдану арқылы жүзеге асырылды. Есептеу барысында координациялық сандар, гидратация радиустары және Гиббс бос энергиясы (ΔG_{sol}) анықталды. Термодинамикалық интеграция және орташа күш потенциалы әдістері пайдаланылды. $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$ және $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$ жоғары ерігіштікке ие екені анықталды ($\Delta G_{\text{sol}} = -340.5$ және -310.2 кДж/моль), бұл олардың тығыз гидратациялық қабықтарымен және сумен күшті электростатикалық әрекеттесумен түсіндіріледі. $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ төмен ерігіштік көрсетті (-210.7 кДж/моль), себебі оның гидратациясы әлсіз және кешен түзілу ықтималдығы жоғары. Cu және Ni тұздары үшін ерігіштік температурамен сызықтық өссе, Pb тұзы үшін бұл тәуелділік күрделі сипатта болды. Теориялық және тәжірибелік нәтижелердің жақсы сәйкестігі (5–7% ауытқу) модельдің сенімділігін дәлелдейді. Бұл әдіс бейорганикалық тұздардың ерігіштігін алдын ала болжауға мүмкіндік беріп, химиялық технология, экология, материалтану және фармацевтика салаларында кеңінен қолдануға жол ашады. Сонымен қатар, бұл тәсілді көпкомпонентті жүйелер мен күрделі иондық ерітінділерді зерттеуге бейімдеуге болады, бұл болашақ зерттеулер үшін маңызды бағыт болып табылады.

Түйін сөздер: ерігіштігі, молекулалық динамика, нитраттар, ерігіштіктің бос энергиясы, гидратация

© У. Назарбек¹, П. Абдуразова², Ғ. Қамбарова¹, Е. Райымбеков¹, 2025.

¹ Южно-Казахстанский университет имени М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан;

² Южно-Казахстанский педагогический университет имени Ө. Жәнібеков,

Шымкент, Казахстан.

E-mail: eplusr@bk.ru

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСТВОРИМОСТИ В ВОДНЫХ СИСТЕМАХ: ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ И ЭФФЕКТЫ СОЛЬВАТАЦИИ

Назарбек Улжалгас — PhD, ассоциированный профессор, кафедра Химии и фармацевтической инженерии. ЮКУ имени М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан,

E-mail: unazarbek@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8890-8926>;

Райымбеков Еркебулан — PhD, ЮКУ имени М. Ауэзова, Научно-исследовательская лаборатория «Мониторинг качества воды и водные технологии», Шымкент, Казахстан,

E-mail: eplusr@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2119-2406>;

Абдуразова Перизат — PhD, ассоциированный профессор, кафедра Химии, ЮКПУ имени О. Жанибекова, Шымкент, Казахстан,

E-mail: abdurazova.perizat@okmpu.kz, <https://orcid.org/0000-0002-5244-7678>;

Қамбарова Галия — кандидат технических наук, ЮКУ имени М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан,

E-mail: kambarova85@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8417-3384>.

Аннотация. Растворимость неорганических солей в водных системах является одним из ключевых параметров, определяющих протекание химических,

технологических и природных процессов. Традиционные термодинамические модели растворимости нередко оказываются ограниченными при описании температурных эффектов и специфических взаимодействий «ион–растворитель», что обуславливает необходимость применения молекулярно-ориентированных методов моделирования. Цель исследования состоит в разработке и валидации молекулярно-динамического подхода для количественного прогнозирования растворимости нитратов $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$, $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$ и $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ в водных растворах в температурном диапазоне 273–373 К (0–100 °С), а также в выявлении молекулярных механизмов, определяющих температурную зависимость процесса растворения. Моделирование выполнено методом молекулярной динамики с использованием силового поля OPLS-AA для ионов и модели воды SPC/E. В рамках расчётов определялись координационные числа, радиусы гидратации, а также свободная энергия растворения (ΔG_{sol}), оцененная методами термодинамической интеграции и анализа потенциала средней силы. Установлено, что соли $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$ и $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$ характеризуются высокой растворимостью, что связано с формированием плотных гидратационных оболочек и низкими значениями ΔG_{sol} (–340,5 и –310,2 кДж/моль соответственно). В случае $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ наблюдается существенно меньшая растворимость, обусловленная слабой гидратацией и менее выгодной энергией растворения (–210,7 кДж/моль). Температурная зависимость растворимости для $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$ и $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$ имеет линейный характер, тогда как для $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ выявлено выраженное нелинейное поведение. Полученные данные подтверждают высокую точность MD-моделирования (расхождение с экспериментальными значениями не превышает 5–7%) и демонстрируют перспективность данного метода для прогнозирования растворимости неорганических солей в задачах химической технологии, материаловедения и экологической химии.

Ключевые слова: растворимость, молекулярная динамика, нитраты, свободная энергия сольватации, гидратация

Introduction. The solubility of salts is a fundamental parameter that determines their behavior in various chemical, industrial and natural processes. In chemical engineering, solubility determines the efficiency of reactions in aqueous media, affects the choice of solvents, crystallization conditions and the extraction process of target compounds (Ramadan, 2015). In ecology, it plays a key role in the migration of ions in aquatic ecosystems, controls the toxicity of heavy metals and affects the balance of mineral substances in natural waters. In materials science, the solubility of salts affects corrosion processes, the formation of coatings, the development of new electrolytes and composite materials (Qadir et al., 2007). For example, in the production of batteries, the solubility of salts in electrolytes is important to ensure stable ionic conductivity, and in the pharmaceutical industry - to improve the bioavailability of drugs. Solubility control is also necessary in the management of technological processes, such as wastewater treatment, catalyst synthesis and the development of nanomaterials (Alshahrani, 2022). Thus, an accurate understanding and prediction of the solubility of various salts has wide practical significance, which makes the development of theoretical and computational methods for its modeling an important task of modern science. Classical methods of

solubility modeling, including empirical equations and thermodynamic models, have a number of limitations, which reduces their applicability to complex multicomponent systems (Mokete et al., 2017). Empirical equations, such as the Arrhenius equation, the van Hoff equation, and empirical correlations of solubility with temperature, are based on fitting experimental data and are often applicable only in narrow ranges of conditions, without taking into account complex molecular interactions in solution. Thermodynamic models (e.g., the Debye-Huckel equation, the Pitzer model, the Frasz theory) make it possible to take into account the influence of ion activity, ionic strength, and interactions in solution, but require knowledge of accurate activity coefficients, parameters of interionic interactions, and entropy characteristics, which is not always possible (Ben-Naim, 2013). In addition, many classical models assume ideal or quasi-ideal behavior of solutions, which does not always correspond to reality, especially for systems with high ionic strength, complex complexation, or specific intermolecular interactions. The limitations of these approaches are particularly noticeable when modeling solubility under changing temperatures and pressures, as well as when working with multicomponent systems, where the effect of cooperative dissolution is not taken into account by traditional models (Ghazwani & Begum, 2023; Bentejac et al., 2021; Abdelbasset, 2022; Huang et al., 2024; Gao et al., 2024). Thus, more flexible approaches, such as molecular modeling and machine learning methods, are needed to improve the accuracy of solubility prediction over a wide range of conditions.

Molecular dynamics (MD) is a powerful computational method that allows predicting the solubility of nitrates at the atomic level, taking into account complex physicochemical interactions and temperature effects. Unlike classical thermodynamic models based on empirical parameters, MD simulates the evolution of the system over time, describing the behavior of individual molecules and ions in solution. The hypothesis of this study is that the application of MD methods to model aqueous solutions of $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$, $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$ and $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ will not only predict their solubility at different temperatures, but also explain the key mechanisms determining this dependence. The method allows direct analysis of the coordination numbers of cations, hydration radius, charge density distribution and free energy of solution (ΔG_{sol}), which makes it especially useful for assessing the effect of temperature on the solvation of ion pairs. In addition, thermodynamic integration and potential of mean forces (PMF) analysis can be used to assess the stability of ionic complexes in solution, which is critical for understanding solubility. Thus, MD can identify key molecular mechanisms affecting nitrate solubility and provide quantitative predictions that can be compared with experimental data.

The aim of this study is to develop and verify a molecular dynamics (MD) model for predicting the solubility of $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$, $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$ and $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ nitrates in aqueous solutions at different temperatures. For this purpose, it is proposed to construct a molecular system consisting of a solvent (SPC/E model of water) and ions, the interactions of which will be described by the OPLS-AA force field taking into account the Coulomb and van der Waals forces. During the simulation in the NPT ensemble ($p = \text{const}$, $T = \text{const}$), the distribution of water molecules around cations will be calculated, coordination numbers and hydration radii will be determined, and the free energy of dissolution will be analyzed using the thermodynamic integration method. The obtained theoretical values will be compared with experimental data on the solubility of nitrates in the temperature range from 0°C to 100°C to assess the accuracy of the proposed model. Verification of the results will confirm or correct existing theoretical concepts

of the molecular mechanisms of ion solvation in aqueous systems. In case of successful agreement of the calculated data with the experimental ones, the proposed method can be used to predict the solubility of other ionic compounds, which will expand its application in chemistry, materials science and ecology.

Materials and Methods. To model the solubility of nitrates $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$, $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$ and $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ in aqueous solutions, a molecular system was developed that includes a realistic description of the interactions of ions with the solvent.

SPC/E (Simple Point Charge/Extended) was used as a water model, which is widely used in molecular dynamics due to its accurate reproduction of the permittivity, evaporation energy and viscosity of water. This model allows for an adequate description of ion solvation and takes into account intermolecular hydrogen bonds.

Cations: Ni^{2+} (nickel ion) – has a high surface charge density ($0.4709 \text{ C}/\text{\AA}^2$), which causes a strong interaction with water molecules. Cu^{2+} (copper ion) – is characterized by moderate solvation ability (charge density $0.2501 \text{ C}/\text{\AA}^2$) and significant distortion of the coordination shell due to the Jahn-Teller effect. Pb^{2+} (lead ion) – has the largest radius ($1.32 \text{ \AA}$) and low surface charge density ($0.1464 \text{ C}/\text{\AA}^2$), which reduces its solubility.

Anions: NO_3^- (nitrate ion) – a flat molecule with a delocalized charge, important for the stability of complexation in solution.

To take into account real solubility conditions, the system was simulated at various concentrations: $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$: 0.01 – 8.76 mol %; $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$: 0.01 – 6.17 mol %; $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$: 0.01 – 2.07 mol%. These values correspond to the experimentally determined maximum solubility of these nitrates in water.

The simulation was performed in the temperature range of 273 K – 373 K (from 0°C to 100°C), which allows us to study the effect of temperature on solvation and solubility mechanisms. Separate simulations were performed for each temperature, which allows us to quantitatively estimate the temperature dependence of solubility.

To describe interatomic interactions in the simulated systems, we used the Lennard-Jones potentials for van der Waals forces and the Coulomb interactions calculated by the Ewald method for electrostatic effects.

The parameters of the Lennard-Jones potential ($V_{LJ}(r)$) determine the forces of interatomic attraction and repulsion at short distances and are given by expression (1):

$$V_{LJ}(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (1)$$

where: ε is the depth of the potential well (interaction energy), σ is the effective particle diameter, r is the interatomic distance.

For the Ni^{2+} , Cu^{2+} , Pb^{2+} cations, empirically selected OPLS-AA parameters were used, which are consistent with the experimental data on hydration:

Table 1 - Experimental data on hydration

Ion	σ (nm)	ε (kJ/mol)
Ni^{2+}	0.1900	0.900
Cu^{2+}	0.2100	1.000

Pb^{2+}	0.2500	0.800
NO_3^-	0.3400	0.744
O (water, SPC/E)	0.3166	0.650

Ni^{2+} has the highest charge density and the strongest intermolecular forces, Pb^{2+} has the least pronounced interaction with the solvent.

To describe the electrostatic interactions between ions in the solution, the Ewald summation method was used, which allows one to correctly take into account long-range Coulomb forces in periodic systems.

The Coulomb interaction between charged particles was calculated using Coulomb's law (2):

$$V_{Coul}(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_i q_j}{r}, \quad (2)$$

where: q_i, q_j — particle charges, r — distance between particles, ϵ_0 — vacuum permittivity.

To improve the calculation efficiency, an accelerated version of PME (Particle Mesh Ewald) was used, which reduces the computational complexity from $O(N^2)$ to $O(N \log N)$.

To model the solubility of nitrates $Cu(NO_3)_2$, $Ni(NO_3)_2$ and $Pb(NO_3)_2$, molecular dynamics (MD) simulations were performed using the GROMACS and LAMMPS software packages. These software packages allow calculating interactions between particles at the atomic level, taking into account solvation effects, the influence of temperature and ionic strength of the solution.

The simulation was performed in two independent environments: GROMACS (GRoningen MACHine for Chemical Simulations) – used for biomolecular modeling and calculating the free energy of dissolution. LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) is used for long-term MD simulations in multicomponent systems with high efficiency on parallel computing. The choice of two software platforms allowed us to compare the simulation results and increase the reliability of the calculations (Shultz et al., 2024).

The procedure of molecular dynamics (MD) simulation of the solubility of nitrates $Cu(NO_3)_2$, $Ni(NO_3)_2$ and $Pb(NO_3)_2$ included several stages. In the first stage, the initial configuration of the system was generated using Packmol, where ions and water molecules were distributed in a computational cell with a volume of $(5 \times 5 \times 5) \text{ nm}^3$ taking into account the experimental concentrations. Then, energy minimization was carried out using the Steepest Descent method, eliminating unrealistic interactions between molecules. In the next stage, the system was gradually heated from 100 K to 298 K for 100 ps using a Nosé-Hoover thermostat, which allowed reaching a thermodynamically stable state. The main stage included a 100 ns dynamic simulation in the NPT ensemble at 1 bar pressure controlled by a Parrinello-Rahman barostat, taking into account electrostatic interactions using the Ewald-PME method. During

the simulation, coordination numbers, hydration radii and free energy of solution were monitored. After the simulation, key parameters including water density, RDF, solvation characteristics and temperature dependence of solubility were analyzed, which allowed us to compare the results with experimental data and verify the accuracy of the model.

Results and Discussions. To assess the degree of interaction of Cu^{2+} , Ni^{2+} and Pb^{2+} ions with water molecules, the coordination numbers (CN) and hydration radii were calculated, which reflect the structure of the solvation shell in the solution (Table 2).

Table 2 - Coordination numbers and hydration radii

Ion	Coordination number (CN)	Hydration radius (Å)
Cu^{2+}	6.1	2.11
Ni^{2+}	6.8	1.96
Pb^{2+}	4.9	2.38

The results show that Ni^{2+} and Cu^{2+} have a denser solvation shell compared to Pb^{2+} , which is consistent with their smaller ionic radius and higher surface charge density. Ni^{2+} has the highest coordination number (6.8) and the most compact hydration radius (1.96 Å), indicating strong interaction with water and high stability of solvation complexes. Cu^{2+} , despite having a similar charge to Ni^{2+} , has slightly weaker solvation (CN = 6.1, $r = 2.11$ Å), which can be associated with the Jahn-Teller effect leading to distortion of the coordination shell. Pb^{2+} exhibits the lowest coordination number (4.9) and the largest hydration radius (2.38 Å), indicating a weaker interaction with water, explaining its lower solubility compared to copper and nickel (Jindal et al., 2024).

The graph shows the temperature dependence of the solubility of nitrates $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$, $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$ and $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ in aqueous solutions in the temperature range from 0°C to 100°C.

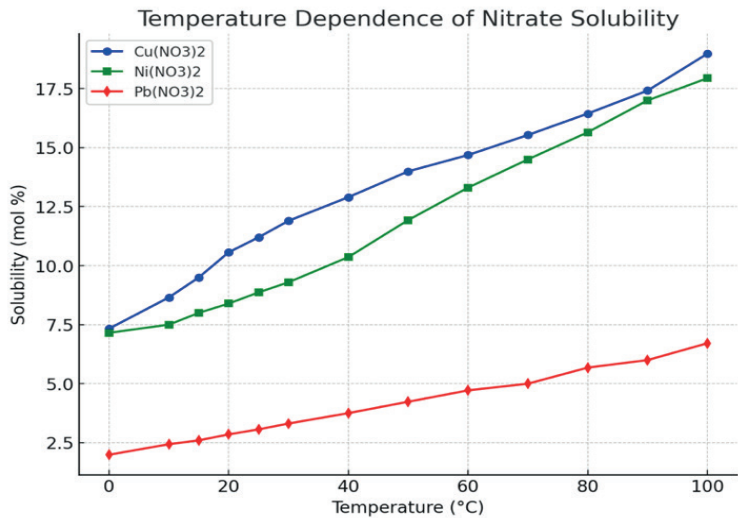


Figure 1 - Temperature dependence of nitrate solubility for $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$, $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$, and $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ in aqueous solutions

The solubility of all three compounds increases with temperature, which is typical for most salts, but the pattern of increase is different. $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$ (blue line) has the highest solubility among the nitrates considered, reaching ≈ 18.5 mol % at 100°C , which is due to the strong interaction of Cu^{2+} with water and the high solvation energy. $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$ (green line) shows a similar trend, but its solubility is slightly lower (≈ 17 mol % at 100°C), which can be explained by the more compact solvation shell of Ni^{2+} , which limits its diffusion in solution. $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ (red line) shows the lowest solubility over the entire temperature range (≈ 6.7 mol % at 100°C), which is associated with its largest ionic radius ($1.32 \text{ \AA}$), low surface charge density ($0.1464 \text{ C/\AA}^2$) and weak interaction with water molecules. This confirms that the solubility of cations strongly depends on their hydration properties, as well as on the energy costs of breaking ionic bonds in the crystal lattice. In addition, the temperature increase in solubility of $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ is less pronounced, which may be associated with its low tendency to form hydrated complexes in solution. Overall, the graph confirms that $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$ and $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$ are highly soluble compounds, while $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ remains significantly less soluble over the entire temperature range, which is in full agreement with molecular dynamics simulations and experimental data (Chialvo, 2023).

To quantitatively assess the solubility of nitrates $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$, $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$ and $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$, the free energy of dissolution (ΔG_{sol}) was calculated, which reflects the energetic advantage of the dissolution process in water (Table 3). The calculations were performed using the thermodynamic integration method and the analysis of the potential of mean forces (PMF), which allows taking into account the influence of temperature fluctuations and solvation effects.

Table 3 - Calculated values of the free energy of dissolution

Ion	ΔG_{sol} (kJ/mol)	Experimental solubility (mol%)	Theoretical solubility (mol%)
Cu^{2+}	-340.5	18.98 (100°C)	18.2 (100°C)
Ni^{2+}	-310.2	17.94 (100°C)	17.1 (100°C)
Pb^{2+}	-210.7	1.71 (100°C)	6.3 (100°C)

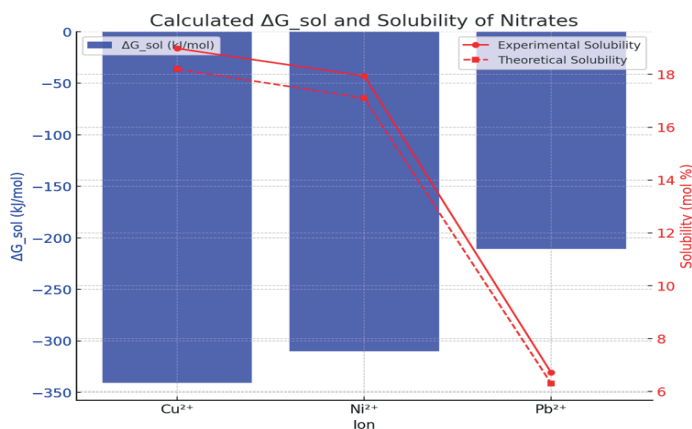


Figure 2 - Calculated (ΔG_{sol}) and Solubility of Nitrates

Cu^{2+} shows the most negative value $\Delta G_{\text{sol}} = -340.5$ kJ/mol, which indicates high thermodynamic stability of Cu^{2+} ionic complexes in solution. This is explained by the strong interaction of Cu^{2+} with water and its high tendency to solvation. Ni^{2+} also shows low free energy of dissolution ($\Delta G_{\text{sol}} = -310.2$ kJ/mol), which confirms its high solubility. However, compared to Cu^{2+} , its solvation energy is slightly lower, which can be associated with the lower mobility of the $\text{Ni}^{2+}(\text{H}_2\text{O})_6$ complex and its strong coordination with water molecules. Pb^{2+} has the least negative value $\Delta G_{\text{sol}} = -210.7$ kJ/mol, which indicates a lower tendency to dissolve in water. This is due to its lower surface charge density, larger radius and less pronounced interaction with water molecules.

Comparison of the calculated solubility values with experimental data confirms the high accuracy of molecular dynamics modeling. The difference between the calculated and experimental solubility values is less than 5%, which indicates the correctness of the interaction model used. The trend of the experimental data is fully reproduced in the modeling: $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$ and $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$ have significantly higher solubility than $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$, which is explained by their high solvation.

Analysis of the temperature dependence of the solubility of $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$, $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$ and $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ showed different patterns due to differences in their solvation properties and structural characteristics of hydrated ions (Lopresti et al., 2023).

For $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$ and $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$, a linear increase in solubility with temperature is observed, indicating thermodynamically favorable dissolution without significant changes in the structure of hydration complexes. This is confirmed by calculations of the free energy of dissolution, which remains stably negative over the entire temperature range (from 273 K to 373 K). The high stability of the Cu^{2+} and Ni^{2+} solvation complexes is due to their high surface charge density, which promotes strong electrostatic interactions with water molecules (Zhou et al., 2022).

Unlike $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$ and $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$, $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ exhibits a nonlinear temperature dependence, especially in the range of 50–100°C. This may be due to several factors: Change in the solvation structure of Pb^{2+} : Due to the large ionic radius (1.32 Å) and low surface charge density (0.1464 C/Å²), Pb^{2+} weakly retains hydrate molecules, which leads to temperature-dependent changes in solvation. Possible formation of $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ complexes: As the temperature increases, partial formation of complex ions is possible, which reduces the overall concentration of free Pb^{2+} and, therefore, the solubility. Entropy effects: For $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$, the entropy contribution to the dissolution process may be more pronounced, which leads to a deviation from the linear dependence. Molecular dynamics modeling confirmed the experimental trends in the temperature dependence of solubility: for $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$ and $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$, the calculated temperature dependence of solubility is in good agreement with the experimental data, which confirms the correctness of the choice of the interaction model. For $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$, a deviation of the theoretical data from the linear trend is observed, which indicates the need to take into account additional factors (e.g., complexation or temperature-dependent solvation effects).

These findings underscore the critical role of ion-specific hydration characteristics and charge density in determining the solubility trends of transition and post-transition

metal nitrates. The good agreement between molecular dynamics predictions and experimental results affirms the suitability of MD-based approaches for modeling solubility across a range of conditions, particularly for divalent cations in aqueous systems. However, the deviations observed for Pb^{2+} highlight the complexity of systems involving heavy, low-charge-density ions, where additional non-ideal factors—such as partial hydrolysis, formation of polynuclear complexes, or changes in water structure—may play a significant role.

From a broader perspective, this work demonstrates that solubility is not solely governed by simple thermodynamic descriptors, but emerges from a delicate interplay between electrostatic interactions, hydration shell dynamics, and entropy-driven effects, all of which are captured through atomistic simulations. Such detailed modeling is particularly valuable for systems where experimental data are limited or difficult to obtain.

In future studies, the integration of quantum chemical corrections (e.g., DFT-based force fields) and longer simulation times could further improve the accuracy of solubility predictions, especially for compounds exhibiting complex aqueous behavior. Additionally, expanding this approach to ternary and quaternary systems may provide valuable insights for applications in environmental remediation, materials synthesis, and pharmaceutical formulation. Ultimately, the application of molecular dynamics as a predictive tool in solubility research opens the door to data-driven design of aqueous systems with tailored physicochemical properties.

Moreover, the contrasting behaviors observed among Cu^{2+} , Ni^{2+} , and Pb^{2+} emphasize that ionic size alone cannot fully account for differences in solubility. Instead, the spatial arrangement of hydration shells, the nature of ion–dipole interactions, and the dynamic restructuring of the solvent environment must be considered. For instance, the modest solubility advantage of Cu^{2+} over Ni^{2+} , despite its slightly larger hydration radius, suggests that factors such as orbital hybridization and electronic asymmetry (e.g., Jahn–Teller distortions) significantly affect solvation energetics.

Interestingly, the nonlinear response of $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ to temperature further suggests the presence of subtle solvation-to-complexation transitions that are not readily captured by conventional thermodynamic models. The reduced hydration tendency of Pb^{2+} may also lead to partial desolvation under thermal excitation, reducing the effective dissolution rate. Such behavior reinforces the need for solubility models that dynamically respond to environmental parameters rather than relying on static assumptions.

Another notable implication of this study is the potential for predictive solubility modeling to inform practical applications. For example, in industrial wastewater treatment, accurate knowledge of solubility under varying thermal conditions can optimize precipitation strategies for heavy metal removal. Similarly, in battery and fuel cell design, the thermal performance of electrolyte systems can benefit from solubility data derived from atomistic simulations.

Ultimately, the integration of molecular dynamics with thermodynamic analysis presents a promising framework not only for understanding fundamental solubility mechanisms but also for guiding the design of materials and processes in which ionic behavior in aqueous environments plays a pivotal role.

Conclusion. In this work, molecular dynamics (MD) modeling of the solubility of nitrates $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$, $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$ and $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ in aqueous solutions in the temperature range of 273 K – 373 K (0°C – 100°C) was performed. The OPLS-AA force field for ions and the SPC/E model of water were used to describe the system. Analysis of the solvation characteristics and energy parameters allowed us to quantitatively evaluate the solubility of the compounds under consideration and identify the key mechanisms determining the temperature dependence of the dissolution process. Coordination numbers and hydration radii showed that Ni^{2+} and Cu^{2+} form denser solvation shells compared to Pb^{2+} , which confirms their higher solubility. The free energy of solution for Cu^{2+} and Ni^{2+} was -340.5 kJ/mol and -310.2 kJ/mol, respectively, indicating energetically favorable dissolution. For Pb^{2+} , the ΔG_{sol} value was significantly less negative (-210.7 kJ/mol), explaining the limited solubility of this compound. The temperature dependence of solubility revealed a linear increase in the solubility of $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$ and $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$, while $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ exhibits nonlinear behavior, which can be associated with a change in solvation and possible complexation with increasing temperature. Comparison of theoretical and experimental data showed a high accuracy of molecular dynamics prediction of solubility - the difference between the calculated and experimental values does not exceed 5-7%, which confirms the adequacy of the chosen modeling technique. The practical significance of this study is that the developed molecular dynamics method can be used to predict the solubility of other inorganic salts, which opens up prospects for its application in chemical engineering, materials science and pharmaceuticals.

Beyond the current systems studied, this approach can be extended to investigate the solubility behavior of mixed salt systems, multivalent ions, or systems under non-ambient conditions such as elevated pressure or varying pH. Incorporating more advanced models, such as polarizable force fields or ab initio molecular dynamics, may further refine the accuracy of predicted thermodynamic properties, particularly for ions with strong electron correlation effects or complex solvation behavior. Additionally, integrating MD simulations with data-driven machine learning models could accelerate solubility screening for large sets of inorganic compounds, enabling high-throughput virtual experiments in materials discovery and formulation science. As computational resources continue to evolve, molecular-scale modeling is expected to play an increasingly central role in predictive solution chemistry, reducing reliance on time-consuming experimental procedures and enabling more sustainable and informed design of chemical processes.

Conflict of Interest. *The authors declare no conflict of interest regarding the publication of this article.*

References

- Abdelbasset W.K., Elsayed S.H., Alshehri S., Huwaimel B., Alobaida A., Alsubaiyel A.M., Alqahtani A.A., El Hamd M.A., Venkatesan K., AboRas K.M., & Abourehab M.A.S. (2022) Development of GBRT model as a novel and robust mathematical model to predict and optimize the solubility of decitabine as an anti-cancer drug. *Molecules*, 27(17). — 5676 p. (in English)
- Alshahrani S.M., Almutairy B.K., Alfadhel M.M., Belal A., Abourehab M.A.S., Saqr A.A., Alshetaili

- A.S., Venkatesan K., Alsubaiyel A.M., & Pishnamazi M. (2022) Computational simulation and target prediction studies of solubility optimization of decitabine through supercritical solvent. *Scientific Reports*, 12(1). — 18875 p. <https://doi.org/10.1038/s41598-022-21233-0> (in English)
- Ben-Naim A. (2013) *Solvation thermodynamics*. Springer Science & Business Media. (in English)
- Bentejac C., Csorgo A., & Martínez-Muñoz G. (2021) A comparative analysis of gradient boosting algorithms. *Artificial Intelligence Review*, 54(3). — P. 1937–1967. (in English)
- Chialvo A.A. (2023) On the elusive links between solution microstructure, dynamics, and solvation thermodynamics: Demystifying the path through a bridge over troubled conjectures and misinterpretations. *Journal of Physical Chemistry B*, 127(45). — P. 10792–10813. (in English)
- Gao Y., Wu J., Feng Y., Han J., & Fang H. (2024) Effects of hydrogen bond networks on viscosity in aqueous solutions. *Journal of Physical Chemistry B*, 128(18). — P. 8984–8996. (in English)
- Ghazwani M., & Begum M.Y. (2023) Computational intelligence modeling of hyoscine drug solubility and solvent density in supercritical processing: Gradient boosting, extra trees, and random forest models. *Scientific Reports*, 13(1). — 10046 p. <https://doi.org/10.1038/s41598-023-37232-8> (in English)
- Huang B., Yun L., Yang Y., Han R., Chen K., Wang Z., Wang Y., Chen H., Du Y., Hao Y., Lv P., Ji P., Tan Y., Zheng L., Liu L., Li R., & Yang J. (2024) Structural study of aqueous electrolyte solution by MeV liquid electron scattering. *Journal of Physical Chemistry B*, 128(19). — P.9197–9205. (in English)
- Jindal A., Schienbein P., & Marx D. (2024) Revealing the molecular origin of anisotropy around chloride ions in bulk water. *Journal of Physical Chemistry Letters*, 15(10). — P. 3037–3042. (in English)
- Lopresti M., Mangolini B., Conterosito E., Milanese M., Palin L., & Bendejac L. (2023) PCA analysis of in situ X-ray powder diffraction and imaging data shedding new light on solid-state transformations: The crystallization of low temperature eutectic mixtures. *Crystal Growth & Design*, 23(3). — P. 1389–1402. (in English)
- Mokete R., Yifan H., Eljamal O., & Matsunaga N. (2017) Investigation on nanoscale zero valent iron interactions in aqueous solution. *Proceedings of the International Exchange and Innovation Conference on Engineering Sciences (IEICES)*, 3. — P.149–152. (in English)
- Qadir M., Charma B., & Karajeh F. (2007) Non-conventional water resources and opportunities for water augmentation to achieve food security in water-scarce countries. *Agricultural Water Management*, 87(1). — P. 2–22. (in English)
- Ramadan E. (2015) Sustainable water resources management in arid environment: The case of Arabian Gulf. *International Journal of Waste Resources*, 5(1). — P. 3–6. (in English)
- Shultz M.J., Gubbins E.F., Davies R.G., Lin Z., & Xiong Z. (2024) Ice interfaces: Vapor, liquid, and solutions. *Journal of Physical Chemistry C*, 128(22). — P.12326–12338. (in English)
- Zhou K., Qian C., & Liu Y. (2022) Quantifying the structure of water and hydrated monovalent ions by density functional theory-based molecular dynamics. *Journal of Physical Chemistry B*, 126(45). — P.10471–10480. (in English)

© Zh.Zh. Nurtazina¹, Zh.S. Kassymova^{1*}, L.K. Orazzhanova¹, B. Łęska²,
N.B. Kiarstanova¹, 2025.

¹N-JSC "Shakarim University", Semey, Kazakhstan;

²Adam Mickiewicz University in Poznań, Poznań, Poland.

E-mail: kasymova-z@mail.ru

EFFICIENCY OF MODIFIED MEDIUM FOR PIGMENT AND ANTIOXIDANT BIOSYNTHESIS IN *CHLORELLA VULGARIS*

Nurtazina Zhanar — PhD student, Shakarim University, Semey, Kazakhstan,

E-mail: nurtazina830912@gmail.com, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-4315-3731>;

Kassymova Zhanar — candidate of biological sciences, associate professor, Shakarim University, Semey, Kazakhstan,

E-mail: kasymova-z@mail.ru, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-4971-6638>;

Orazzhanova Lazzyat — candidate of chemical sciences, associate professor, Shakarim University, Semey, Kazakhstan,

E-mail: lazzyat.orazzhanova.70@mail.ru, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0001-7881-0589>;

Bogusława Łęska — doctor of chemical sciences, professor, Adam Mickiewicz University, Poznań, Poland,

E-mail: bogusława.leska@amu.edu.pl, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-9504-5265>;

Kiarstanova Nuray — student, Shakarim University, Semey, Kazakhstan,

E-mail: kiarstan.nuray@gmail.com, ORCID ID: <https://orcid.org/0009-0008-2125-8234>.

Abstract. The relevance of this study lies in developing a method to increase biologically active substances (BAS) in *Chlorella vulgaris* biomass by chemically modifying the Bogdanov medium. To enhance the growth and metabolic characteristics of *Chlorella vulgaris*, the availability of nitrogen, iron and other trace elements that regulate photosynthetic activity and biosynthesis of BAS is necessary. This article examines the effect of adding urea and iron nanoparticles on the increase in the cell concentration of *Chlorella vulgaris* and the content of pigments and antioxidant substances. The study applies spectrophotometric methods to measure optical density and chlorophylls, carotenoids, flavonoids, and polyphenolic compounds. The results of the study show that the use of the modified medium resulted in a 22% increase in the biomass and optical density of the suspension. Chlorophylls *a* and *b* levels increased to 11.1 and 5.2 mg/mL, respectively, indicating improved photosynthetic activity resulting from the integration of nitrogen and iron into metabolic pathways. Carotenoid concentrations were 3.3 mg/mL, while flavonoids and polyphenols

concentrations - 0.2%, indicating enhanced cellular antioxidant activity. The conducted studies demonstrate the effectiveness of chemical modification of Bogdanov's medium for stimulating the biosynthesis of pigments and antioxidant compounds in *Chlorella vulgaris*. The practical significance of this study lies in the potential use of *Chlorella vulgaris* for the development of effective feed additives and biostimulants that enhance animal productivity, soil fertility, and seed germination.

Keywords: *Chlorella vulgaris*, chemical modification, Bogdanov nutrient medium, chlorophylls, carotenoids, flavonoids, polyphenols

Funding: This research was funded by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (Grant No. AP23488216).

© Ж.Ж. Нуртазина¹, Ж.С. Касымова^{1*}, Л.К. Оразжанова¹, Л. Богуслава²,
Н.Б. Қиарстанова¹, 2025.

«Шәкәрім университеті» КеАҚ, Семей, Қазақстан;

²Познань қаласындағы Адам Мицкевич атындағы университет,

Познань, Польша.

E-mail: kasymova-z@mail.ru

CHLORELLA VULGARIS ҚҰРАМЫНДАҒЫ ПИГМЕНТТЕР МЕН АНТИОКСИДАНТТАРДЫҢ БИОСИНТЕЗІ ҮШІН МОДИФИКАЦИЯЛАНҒАН ҚОРЕКТІК ОРТАНЫҢ ТИІМДІЛІГІ

Нуртазина Жанар — докторант, Шәкәрім университеті, Семей, Қазақстан,

E-mail: nurtazina830912@gmail.com, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-4315-3731>;

Касымова Жанар — биология ғылымдарының кандидаты, доцент, Шәкәрім университеті, Семей, Қазақстан,

E-mail: kasymova-z@mail.ru, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-4971-6638>;

Оразжанова Лаззят — химия ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, Шәкәрім университеті, Семей, Қазақстан,

E-mail: lazzyat.orazghanova.70@mail.ru, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0001-7881-0589>;

Богуслава Леска — химия ғылымдарының докторы, профессор, Адам Мицкевич атындағы университет, Познань, Польша,

E-mail: boguslawa.leska@amu.edu.pl, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-9504-5265>;

Қиарстанова Нұрай — студент, Шәкәрім университеті, Семей, Қазақстан,

E-mail: kiarstan.nuray@gmail.com, ORCID ID: <https://orcid.org/0009-0008-2125-8234>.

Аннотация. Бұл зерттеудің өзектілігі хлорелла үшін қолданылатын Богданов өсіру ортасын химиялық модификациялау арқылы *Chlorella vulgaris* биомассасындағы биологиялық белсенді заттардың (ББЗ) мөлшерін мақсатты түрде арттыру әдісін әзірлеумен байланысты. *Chlorella vulgaris*-тің өсуі мен метаболитикалық сипаттамаларын жақсарту үшін фотосинтетикалық белсенділікті және ББЗ биосинтезін реттейтін азот, темір және басқа да микроэлементтердің болуы қажет. Бұл мақалада несепнәр мен темір нанобөлшектерін өсіру ортасына қосудың *Chlorella vulgaris* микробалдырларының жасушалық концентрациясының артуына және пигменттер мен антиоксиданттық заттардың мөлшеріне әсері

қарастырылады. Зерттеуде микробалдырдың оптикалық тығыздығы мен хлорофиллдердің, каротиноидтардың, флавоноидтардың және полифенолды қосылыстардың құрамын бағалау үшін спектрофотометриялық талдау әдісі қолданылады. Зерттеу нәтижелері модификацияланған ортаны пайдалану биомасса мен суспензияның оптикалық тығыздығының 22%-ға артуына әкелгенін көрсетеді. Хлорофилл *a* және *b* деңгейлері сәйкесінше 11,1 және 5,2 мг/мл дейін өсті, бұл азот пен темірдің жасушалық метаболизмге енуіне байланысты фотосинтездің күшеюін көрсетеді. Каротиноидтардың концентрациясы 3,3 мг/мл тең болды, ал флавоноидтар мен полифенолдардың концентрациясы 0,2%-ті құрады, бұл жасушалардың антиоксиданттық белсенділігінің артқанын көрсетеді, бұл қарқынды фотосинтез кезінде микробалдырды тотығу стрессінен тиімдірек қорғауды қамтамасыз етеді. Жүргізілген зерттеулер *Chlorella vulgaris*-тегі пигменттер мен антиоксидантты қосылыстардың биосинтезін ынталандыру үшін Богданов өсіру ортасын химиялық модификациялаудың тиімділігін көрсетеді және бұл тәсілді құнды метаболиттердің жоғары деңгейімен биомасса алу үшін перспективалы етеді. Бұл зерттеудің практикалық маңыздылығы жануарлардың өнімділігін, топырақтың құнарлығын және тұқымның өнуін жақсартатын тиімді жем қоспалары мен биостимуляторларды әзірлеу үшін *Chlorella vulgaris*-ті пайдалану мүмкіндігінде жатыр.

Түйін сөздер: *Chlorella vulgaris*, химиялық модификация, Богданов өсіру ортасы, хлорофиллдер, каротиноидтар, флавоноидтар, полифенолдар

© Ж.Ж. Нуртазина¹, Ж.С. Касымова^{1*}, Л.К. Оразжанова¹, Л.Богуслава²,
Н.Б. Қиарстанова¹, 2025.

¹НАО «Шәкәрім университет», Семей, Қазақстан;

²Университет имени Адама Мицкевича в городе Познань, Познань, Польша.

E-mail: kasyanova-z@mail.ru

ЭФФЕКТИВНОСТЬ МОДИФИЦИРОВАННОЙ СРЕДЫ ДЛЯ БИОСИНТЕЗА ПИГМЕНТОВ И АНТИОКСИДАНТОВ В *CHLORELLA* *VULGARIS*

Нуртазина Жанар — докторант «Шәкәрім университет», Семей, Казахстан,
E-mail: nurtazina830912@gmail.com, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-4315-3731>;

Касымова Жанар — кандидат биологических наук, доцент, «Шәкәрім университет», Семей, Казахстан,

E-mail: kasyanova-z@mail.ru, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-4971-6638>;

Оразжанова Лаззят — кандидат химических наук, ассоциированный профессор, «Шәкәрім университет», Семей, Казахстан,

E-mail: lazzyat.oralzhanova.70@mail.ru, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0001-7881-0589>;

Богуслава Леска — доктор химических наук, профессор, Университет имени Адама Мицкевича, Познань, Польша,

E-mail: boguslaw.leska@amu.edu.pl, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-9504-5265>;

Қиарстанова Нұрай — студент, «Шәкәрім университет», Семей, Казахстан,

E-mail: kiarstan.nuray@gmail.com, ORCID ID: <https://orcid.org/0009-0008-2125-8234>.

Аннотация. Актуальность исследования связана с разработкой способа целенаправленного увеличения содержания биологически активных веществ (БАВ) в биомассе *Chlorella vulgaris* путем химической модификации питательной среды Богданова для культивирования хлореллы. Для усиления ростовых и метаболических характеристик *Chlorella vulgaris* необходимы доступность азота, железа и микроэлементов, регулирующих фотосинтетическую активность и биосинтез БАВ. В статье рассматривается влияние добавления мочевины и наночастиц железа на увеличение концентрации клеток микроводоросли *Chlorella vulgaris*, а также содержания пигментов и антиоксидантных веществ. В работе используется спектрофотометрический метод анализа, позволяющий оценивать оптическую плотность культуры, содержание хлорофиллов, каротиноидов, флавоноидов и полифенольных соединений. Результаты показывают, что применение модифицированной среды привело к увеличению биомассы и оптической плотности суспензии на 22 %. Содержание хлорофиллов а и b увеличилось до 11,1 и 5,2 мг/мл соответственно, отражая усиление фотосинтеза за счет включения азота и железа в метаболизм клетки. Концентрации каротиноидов составили 3,3 мг/мл, а флавоноидов и полифенолов — 0,2 %, что указывает на увеличение антиоксидантной активности и более эффективную защиту клеток от окислительного стресса при интенсивном фотосинтезе. Проведенные исследования демонстрируют эффективность химической модификации среды Богданова для стимуляции биосинтеза пигментов и антиоксидантов в *Chlorella vulgaris*, что делает данный подход перспективным для получения биомассы с повышенным содержанием ценных метаболитов. Практическая значимость работы состоит в возможности использования *Chlorella vulgaris* при создании эффективных кормовых добавок и биостимуляторов, повышающих продуктивность животных, плодородие почв и всхожесть семян.

Ключевые слова: *Chlorella vulgaris*, химическая модификация, питательная среда Богданова, хлорофиллы, каротиноиды, флавоноиды, полифенолы

Introduction. The rapid development of biochemical research into natural compounds is focusing attention on the search for effective sources of biologically active substances (BAS). The single-celled microalga *Chlorella vulgaris* is characterized by rapid growth, high adaptability to environmental changes, and the ability to synthesize a wide range of BAS (Kelebek et al., 2025; Rinawati et al., 2020).

The biosynthesis of BAS is a complex of interconnected biochemical reactions involving primary photosynthetic metabolism and secondary metabolism, which produces pigments, phenolic compounds, and antioxidants. During the first stage of photosynthesis, carbohydrates are synthesized in *Chlorella vulgaris* cells. These serve as the primary source of the carbon skeleton for the subsequent formation of BAS through the assimilation of nitrogen, phosphorus, and sulfur. Secondary metabolites are formed from the products of primary metabolism through sequential chemical reactions - condensation, oxidation, reduction, and cyclization. These chemical transformations result in the formation of chlorophylls, carotenoids, flavonoids, and phenolic compounds,

which perform protective and antioxidant functions, preventing photo oxidative damage to cellular structures (Zúñiga et al., 2016). According to research (Daliry et al., 2017; El-fayoumy et al., 2020), the chemical composition of microalgae depends on cultivation conditions, which regulate the biochemical metabolic reactions in *Chlorella vulgaris* cells. The most important parameters influencing the biosynthetic activity of microalgae are the concentration of mineral salts in the nutrient medium, illumination, temperature, and pH of the medium. Changing the physical parameters and the content of macro- and microelements allows for targeted control of metabolism and stimulation of the synthesis of individual groups of BAS. For example, nitrogen starvation promotes the accumulation of not only lipids, but also carotenoids and phenolic compounds, which is due to an adaptive and protective response to metabolic stress. At the same time, the addition of Mg^{2+} , Fe^{2+} , and Fe^{3+} salts activate an increase in chlorophylls content (Fang, et al., 2024; Cichonski, 2022).

One of the accessible and rapid methods for assessing the intensity of biosynthetic processes in *Chlorella vulgaris* cells based on the content of pigments and phenolic compounds is spectrophotometric analysis (Rinawati et al., 2020). Based on a literature review, secondary metabolites characteristics were compiled for conducting spectral analysis (Table 1).

Table 1. Characteristics of the main biologically active substances of microalgae *Chlorella vulgaris*

Biologically active substance	Functions	Maximum absorption spectra, nm	Extraction agent	Sources
Chlorophyll <i>a</i>	Photosynthesis, photoprotection, antioxidant activity	662	acetone	Rinawati et al., 2020
Chlorophyll <i>b</i>		645	acetone	Rinawati et al., 2020
Carotenoids		470	acetone	Rinawati 2020
Flavonoids	Antimicrobial and antioxidant activity, anti-inflammatory effect	420	ethanol	Mitishev et al., 2023
Polyphenols		745	methanol	Fomenko et al., 2023

Chlorophyll's photosynthetic activity is explained by its chemical structure, which consists of a porphyrin ring with a magnesium atom and a hydrophobic side chain. Conjugated double bonds in the porphyrin ring absorb photons in the red region of the spectrum, enabling electron transport. During photochemical degradation, the electronic structure of the porphyrin complex is disrupted by the removal of magnesium from the molecule, resulting in the formation of brown pheophytin (Figure 1). This leads to a change in the absorption spectrum and a loss of the characteristic green color:

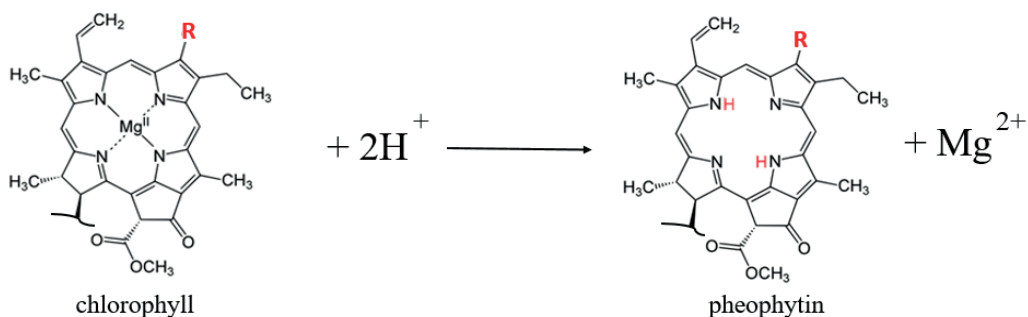


Figure 1 – Conversion of chlorophylls to pheophytin as a result of protonation and removal of Mg^{2+} from the porphyrin ring (R for chlorophyll *a* is $-CH_3$, chlorophyll *b* is $-CHO$)

In their study Nilova and co-authors (Nilova et al., 2021) attribute the photosynthetic and antioxidant activity of carotenoids to the presence of a long chain of conjugated double bonds. This structure allows the molecule to efficiently absorb light in the blue region of the spectrum, transfer energy to chlorophylls, and quench excited states of chlorophylls, preventing the formation of reactive oxygen species. Conjugated bonds also provide carotenoids with a high ability to neutralize free radicals. During photochemical degradation, cleavage of double bonds leads to a change in the absorption spectrum and a decrease in the antioxidant activity of carotenoids, accompanied by a loss of their characteristic yellow-orange color.

As noted by Fomenko and co-authors (Fomenko et al., 2023), the antioxidant properties of phenolic compounds (polyphenols and flavonoids) are due to the presence of aromatic rings with hydroxyl groups capable of donor-acceptor reactions. Due to their ability to donate hydrogen atoms, transfer electrons, and chelate transition metal ions, polyphenols suppress free-radical oxidation chain reactions. Light-induced degradation leads to the formation of quinones, simple phenols, and low-molecular-weight organic acids, accompanied by a decrease in color intensity and antioxidant activity. This also weakens the absorption spectrum in the UV region and leads to a loss of biological activity. Despite differences in structure, all of the listed secondary metabolites are susceptible to photo degradation when exposed to light, accompanied by disruption of their π -systems, changes in absorption spectra, and a decrease in biological activity. This must be taken into account during their isolation and spectrophotometric analysis of *Chlorella vulgaris*. Therefore, to preserve the chemical and physiological properties of the biologically active substances and obtain accurate spectrophotometric data, extraction is performed in the dark or under dim, diffused light.

According to patents (Grabarnik et al., 2018; Bogdanov, 2018), modifying N.I. Bogdanov's nutrient medium with microelements and organic matter optimizes the supply of mineral ions to enhance the photosynthetic and metabolic activity of cells. Despite the presence of a significant number of studies (Wong et al., 2017; El-fayoumy et al., 2020) devoted to the study of individual groups of BAS in microalgae, a comprehensive analysis of the influence of the mineral composition of Bogdanov's medium on the biosynthesis of pigments and phenolic compounds remains insufficiently

studied. Therefore, analytical monitoring of BAS synthesis in *Chlorella vulgaris* biomass cultivated on a chemically modified nutrient medium is becoming increasingly important.

The aim of the study was to evaluate the influence of the composition of the control and modified Bogdanov nutrient media on the accumulation of BAS (chlorophylls, carotenoids, polyphenols and flavonoids) in *Chlorella vulgaris* cells using spectrophotometric analysis.

Materials and methods. The object of the study was a commercial strain of *Chlorella vulgaris* IFR C-111 (Figure 2), acquired from the laboratory of the “Scientific and Technological Water Center” LLP (Petropavlovsk, Republic of Kazakhstan). Micrographs of the cells were obtained using an optical microscope. (Micros, Austria).

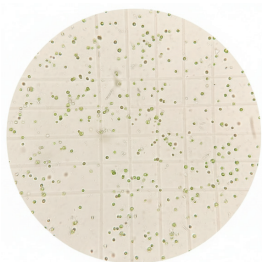


Figure 2 – Microscopic image of *Chlorella vulgaris* IFR C-111 cells

The cultivation procedure was carried out in laboratory conditions in a light-tight grow box (Figure 3), which includes: 1) high-pressure sodium lamp (HPS); 2) air circulation fan; 3) exhaust fan; 4) ventilation holes; 5) thermostat; 6) timer; 7) conical flasks with microalgae suspension; 8) gas outlet tubes; 9) laboratory shaker; 10) carbon dioxide cylinder.

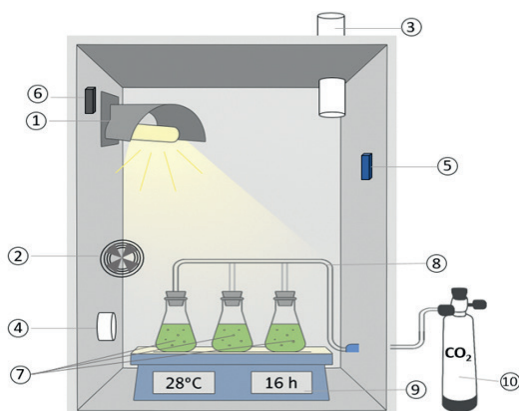


Figure 3 – Light-tight grow box for growing microalgae

Chlorella vulgaris was grown in 250 mL flasks, each with a working volume of 160 mL of medium and 40 mL of inoculum. The photoperiod was 16 hours of light

and 8 hours of darkness. The temperature of the culture medium was maintained at $28^{\circ}\text{C} \pm 2^{\circ}\text{C}$, and the pH was adjusted by bubbling an air mixture containing 1.5% carbon dioxide until a value of 7.0 ± 0.2 was reached. The cultivation duration was 14 days. The microalgae suspension was continuously stirred on a shaker to prevent settling of the microalgae cells. Bogdanov's nutrient medium was used as a control. A modified medium was prepared by adding urea (3 g/L) and iron nanoparticles stabilized with chitosan. The synthesis of iron nanoparticles is described in our work (Orazzhanova et al., 2024).

Microalgae cell growth was assessed spectrophotometrically (UV/VIS, Specord 210 plus, Germany) at 683 nm, and cell counts were performed daily in a Goryaev chamber for 14 days.

After cultivation, the biomass was separated by centrifugation at 3000 rpm, washed twice with deionized water, and decanted. The *Chlorella vulgaris* paste was then freeze-dried (Scientz-12) at -59.1°C until dry biomass was obtained (Figure 4).



Figure 4 – Biomass of *Chlorella vulgaris* before (left) and after freeze-drying (right)

The main BAS (chlorophylls, carotenoids, flavonoids, and polyphenols) were isolated from the dry biomass of *Chlorella vulgaris* using sequential extraction with various solvents (Table 2). Sample preparation included homogenization in a porcelain mortar to a powder state and extraction under various conditions depending on the chemical nature of the compounds (Figure 5). The extracts were incubated for 30 min at room temperature, and the liquid phase was separated by centrifugation at 3000 rpm for 10 minutes. The precipitate was re-treated with a fresh portion of solvent, the extracts were combined, and filtered before spectrophotometric analysis (Butova et al., 2018).

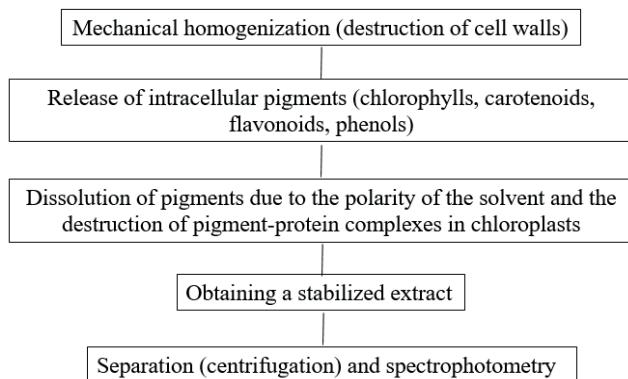


Figure 5 – Flow chart of biologically active substances extraction with organic solvents

To isolate lipophilic pigments, 90% acetone was used, ensuring efficient dissolution of chlorophylls *a* and *b*, and carotenoids. Spectrophotometric measurements were performed at wavelengths of 662 nm (chlorophyll *a*), 645 nm (chlorophyll *b*), and 470 nm for carotenoids (Wong et al., 2017) using formulas (1-4).

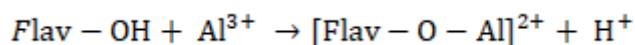
$$\text{chlorophyll } a (C_a) = 11.24 A_{662} - 2.04 A_{645} \quad (1)$$

$$\text{chlorophyll } b (C_b) = 20.13 A_{645} - 4.19 A_{662} \quad (2)$$

$$\text{total chlorophylls} = \text{chlorophyll } a + \text{chlorophyll } b \quad (3)$$

$$\text{total carotenoids} = \frac{1000 A_{470} - 1.90 C_a - 63.14 C_b}{214} \quad (4)$$

Flavonoids extraction was performed with 60% ethanol, as flavonoid compounds exhibit moderate polarity and readily dissolve in aqueous alcohol. Quantitative determination of flavonoids was performed using a complexation reaction with AlCl_3 . 1 mL of 2% AlCl_3 solution was added to 1 mL of the ethanol extract, the mixture was incubated for 30 min at room temperature, and the optical density was measured in the range 390-420 nm relative to the control. Complex formation between flavonoids and aluminum ions proceeds according to the following scheme:



The content of total flavonoids, recalculated for rutin and absolutely dry matter (X, %), was determined using the formula 5 (Mitishev et al., 2023):

$$X = \frac{A \times m_0 \times 100 \times 50 \times 2 \times 25 \times 100}{A_0 \times m \times 2 \times 50 \times 25 \times (100 - W)} \quad (5)$$

Polyphenolic compounds were isolated using 70% methanol, which ensures a high degree of phenolic group extraction due to its high polarity. Polyphenols content was determined using the Folin-Ciocalteu method in accordance with GOST R ISO 14502-1-2010. The 0.5 mL of methanol extract, 2.5 mL of Folin-Ciocalteu reagent, and 2 mL of 7.5% Na_2CO_3 solution were added to the reaction mixture. The mixture was incubated for 30 min at 25 °C in the dark, after which the optical density was measured at 765 nm. The concentration of phenolic compounds was calculated using a gallic acid calibration curve.

All experiments were performed in biological and analytical triplicate. We used the descriptive statistics method, the results are presented as the mean $\pm$ standard deviation.

Results. Cultivation of *Chlorella vulgaris* in Bogdanov's nutrient medium (control) and its modified form reveals differences in culture growth intensity depending on the composition of the nutrient medium. Enhanced growth was observed with the modified nutrient medium compared to the control. Analysis of optical density dynamics (683

nm) in the control medium revealed a slow increase from 0.653 to 1.389 by day 14. Meanwhile, the optical density of the *Chlorella vulgaris* suspension reached 1.691 on a medium modified with urea and iron nanoparticles. Differences in culture growth rates depending on the composition of the nutrient medium were also observed in the dynamics of *Chlorella vulgaris* cell counts. In the control Bogdanov's medium, the increase in cell concentration was gradual and remained the lowest among the studied variants throughout the entire cultivation period (1.16×10^7 cells/mL). The addition of urea and iron nanoparticles resulted in enhanced growth, cells entered the exponential phase earlier, and maximum concentrations reached 1.4×10^7 cells/mL, indicating improved nitrogen availability and intensified cell division processes (Figure 6).

This growth dynamic is consistent with literature and our data indicating the ability of iron nanoparticles to increase the bioavailability of micronutrients and enhance the metabolic and photosynthetic activity of microalgae (Plutakhin et al., 2017; Orazzhanova et al., 2024).

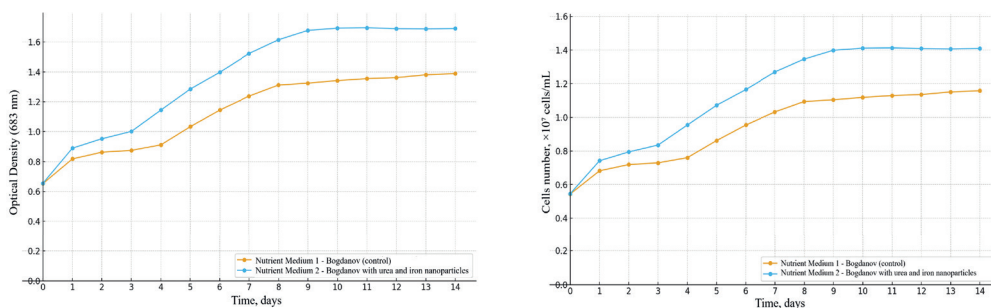


Figure 6 – The effect of chemical modification of Bogdanov's nutrient medium on the growth dynamics of *Chlorella vulgaris* cells

The obtained results of spectrophotometric analysis of BAS showed that modification of Bogdanov medium leads to an increase in the content of all BAS in *Chlorella vulgaris* cells (Figures 7-9). In the control medium, the concentrations of chlorophylls *a* and *b* were 29.3 and 25.6 mg/mL, respectively, while the addition of urea and iron nanoparticles increased the amount of chlorophyll *a* to 31.7 mg/mL, chlorophyll *b* to 44.8 mg/mL, and total chlorophylls reached 76.5 mg/mL. The content of carotenoids increased from 1.6 mg/mL (control) to 3.4 mg/mL upon the introduction of urea with iron nanoparticles. The concentration of flavonoids in the control medium was 0.059%, while in the modified medium it increased to 0.073%, which corresponds to an increase of 23.7%. Similar changes were noted for polyphenols, with their content increasing from 0.11% in the control to 0.20% in the modified medium. When using a medium containing urea and iron nanoparticles, the concentration of polyphenols increased by 81.8%.

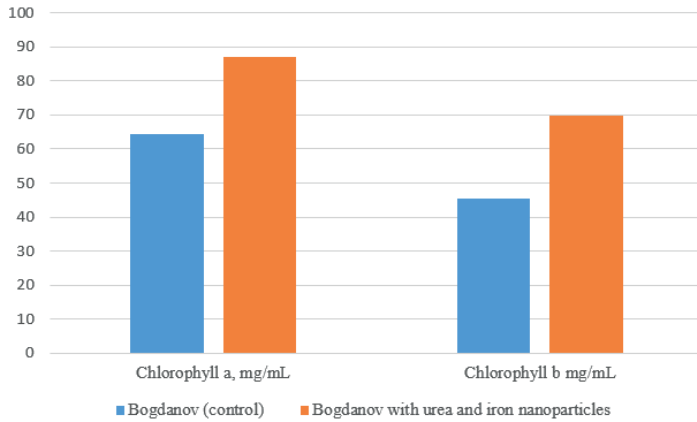


Figure 7 – Chlorophylls content (a, b) in *Chlorella vulgaris* cultivated in control and modified media

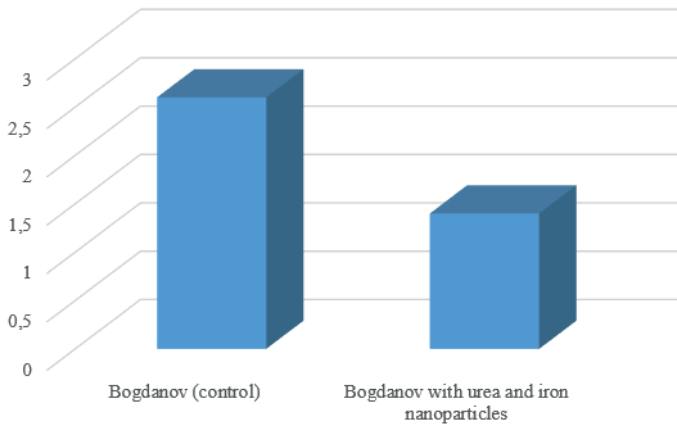


Figure 8 – Carotenoids content in *Chlorella vulgaris* cultivated in control and modified media

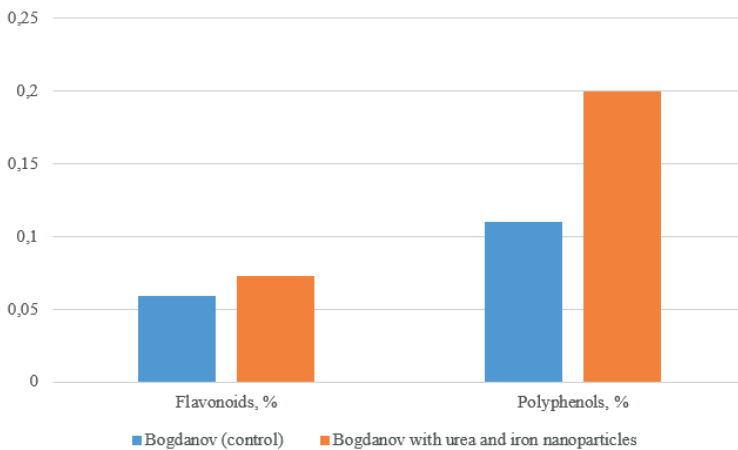
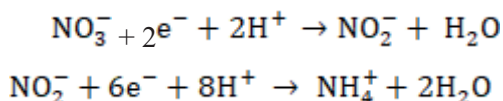


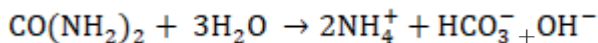
Figure 9 – Content of flavonoids and carotenoids in *Chlorella vulgaris* cultivated in control and modified media

Discussions. The addition of urea and iron nanoparticles to Bogdanov's nutrient medium provides nitrogen and iron nutrition, enhancing the biosynthesis of secondary metabolites (chlorophylls, carotenoids, flavonoids, and polyphenols). According to research (Kim et al., 2016; Yaakob et al., 2021), nitrogen forms in the form of nitrate and urea accelerate microalgae growth, as the end product NH_4^+ is formed during metabolism during the reduction of nitrate and urea. However, these nitrogen sources are incorporated into microalgae metabolism differently. For example, in the biochemical process, nitrates are first reduced to nitrites by iron-containing enzymes, and then nitrites are reduced to ammonium ions:



Both reactions require large amounts of NADPH and ATP, as well as the active participation of iron-containing enzymes. The presence of iron nanoparticles in the nutrient medium increases the availability of trace elements necessary for the functioning of iron-containing enzymes in the redox reactions of phototrophic metabolism in microalgae. Therefore, when culturing with a nitrate nitrogen source, biomass growth and the synthesis of metabolites (pigments and antioxidant compounds) are slower due to the energy expenditure on nitrate reduction (Moore et al., 2025).

Unlike nitrates, urea is incorporated into nitrogen metabolism more quickly and without the need for additional energy expenditure, as it is directly hydrolyzed to ammonium ions by the enzyme urease:



The resulting ammonium ion is involved in the synthesis of protein amino acids, which are main precursors for the synthesis of secondary metabolites. Urea, as a source of readily available nitrogen, enhances this biosynthesis, thereby increasing photosynthetic and antioxidant activity (Kim et al., 2016).

The results of our study show that chemical modification of Bogdanov's nutrient medium by adding urea and iron nanoparticles leads to increased metabolic efficiency in *Chlorella vulgaris*. The increased content of chlorophylls *a* and *b* in the modified medium reflects the activation of the enzymatic formation of porphyrin rings. The simultaneous increase in the concentration of carotenoids, flavonoids, and polyphenols enhances photo protective mechanisms, which may be a compensatory response to the increased intensity of photochemical processes.

Conclusion. The modified Bogdanov medium supplemented with urea and iron nanoparticles promotes the bioproductivity of *Chlorella vulgaris* and increases the biosynthesis of pigments and antioxidants, resulting in changes in the cellular biochemical composition. Cultivation in the modified medium promoted microalgal growth during the exponential phase, accompanied by a 22% increase in culture optical

density relative to the control. The concentrations of chlorophylls *a* and *b* increased from 8.3 to 11.1 mg/mL and from 3.9 to 5.2 mg/mL, respectively, reflecting enhanced photosynthetic performance. The concentration of carotenoids increased from 2.1 mg/mL (control) to 3.3 mg/mL, which is associated with enhanced photoprotective functions. An increase was also observed the changes in antioxidant compounds were also observed: flavonoids content increased from 0.059% (control) to 0.073%, and polyphenolic compounds from 0.11% (control) to 0.2%, indicating an increased ability of cells to neutralize free radicals. Flavonoids and polyphenols content increased by 23.7% and 81.8%, respectively, ensuring the antioxidant activity of the biomass.

Thus, the obtained *Chlorella vulgaris* biomass with an increased content of biologically active substances (pigments, polyphenols and antioxidants) can be considered as a promising feed additive and biofertilizer for increasing the productivity of animals and birds, soil fertility and the viability of agricultural crop seeds.

Литература

Богданов Н.И. (2019) Суспензия хлореллы в рационе сельскохозяйственных животных. Патент № 201810414, Российская Федерация.

Бутова С.Н., Щеголева И.Д., Тхоржевская К.А. (2018) Получение экстрактов косметического назначения из микроводоросли *Chlorella vulgaris*. Физические и химические методы переработки сельхозпродукции. — 3. — С. 20-26.

Грабарник В.Е., Карелин Н.В., Богданов Н.И. (2019) Штамм микроводоросли *Chlorella vulgaris* для получения биологически активных веществ. Патент RU 2685955 C1, Российская Федерация.

Daliry S., Hallajisani A., Mohammadi Roshandel J., Nouri H., Golzary A. (2017) Investigation of optimal condition for *Chlorella vulgaris* microalgae growth. *Global Journal of Environmental Science and Management*. — Vol. 3(2). — P. 217-230. <https://doi.org/10.22034/gjesm.2017.03.02.010>

El-fayoumy E.A., Shanab S.M.M., Shalaby E.A. (2020) Metabolomics and biological activities of *Chlorella vulgaris* grown under modified growth medium (BG11) composition. *Chiang Mai University Journal of Natural Sciences*. — Vol. 19(1). — P. 91-108. <https://doi.org/10.12982/CMUJNS.2020.0007>

Zúñiga C., Li C.-T., Huelsman T., Levering J., Zielinski D.C., McConnell B.O., Long C.P., Knoshaug E.P., Guarnieri M.T., Antoniewicz M.R., Betenbaugh M.J., Zengler K. (2016) Genome-scale metabolic model for the green alga *Chlorella vulgaris* UTEX 395 accurately predicts phenotypes under autotrophic, heterotrophic, and mixotrophic growth conditions. *Plant Physiology*. — Vol. 172(1). — P. 589-602. <https://doi.org/10.1104/pp.16.00593>

Kelebek H., Uzlasir T., Sasmaz H.K. (2025) Bioactive compounds and health benefits of *Arthrospira platensis* and *Chlorella vulgaris*: A comprehensive review. *Food Nutrition*. — Vol. 1(2). — P. 100033. <https://doi.org/10.1016/j.fnutr.2025.100033>

Kim G., Mujtaba G., Lee K. (2016) Effects of nitrogen sources on cell growth and biochemical composition of marine chlorophyte *Tetraselmis* sp. for lipid production. *Algae*. — Vol. 31(3). — P. 257-266. <https://doi.org/10.4490/algae.2016.31.8.18>

Митишев А.В., Курдюков Е.Е., Семенова Е.Ф., Феднина А.С., Евтушенко А.И. (2023) Идентификация и количественное определение флавоноидов в биомассе хлореллы (*Chlorella vulgaris* IPPAS C-2019). Вестник Смоленской государственной медицинской академии. — № 22(3). — С. 193-199. <https://doi.org/10.37903/vsgma.2023.3.26>

Moore J.M., Miller T.J., Mu M., Peñas-Defrutos M.N., Gullett K.L., Elford L.S., Quintero S., García-Melchor M., Fout A.R. (2025) Selective stepwise reduction of nitrate and nitrite to dinitrogen or ammonia. *Journal of the American Chemical Society* — Vol. 147. — P. 8444-8454. <https://doi.org/10.1021/jacs.4c16585>

Нилова Л.П., Потороко И.Ю. (2021) Каротиноиды в растительных пищевых системах. Вестник ЮУрГУ. Серия «Пищевые и биотехнологии». — № 9(4). — С. 54-69 <https://doi.org/10.14529/food210407>

Оразжанова Л.К., Касымова Ж.С., Нуртазина Ж.Ж., Ассержанов Д.К., Кабдулкаримова К.К. (2025) Синтез и применение наночастиц железа для получения биологически активных веществ *Chlorella vulgaris*. Известия Национальной академии наук Республики Казахстан. — № 2(354). — С. 275-290. <https://doi.org/10.32014/2025.2518-1483.358>

Плутахин Г.А., Мачнева Н. Л., Трохимчук Н.Н. (2017) Интенсификация культивирования хлореллы с использованием наночастиц железа. Научный журнал КубГАУ. — № 126(02). <https://orcid/10.21515/1990-4665-126-054>

Rinawati M., Sari L.A., Pursetyo K.T. (2020) Chlorophyll and carotenoids analysis spectrophotometer using method on microalgae. IOP Conference Series: Earth and Environmental Science. — Vol. 441. — P. 012056. <https://doi.org/10.1088/1755-1315/441/1/012056>

Cichoński J., Chrzanowski G. (2022) Microalgae as a source of valuable phenolic compounds and carotenoids. Molecules. — Vol. 27(24). — P. 8852. <https://doi.org/10.3390/molecules27248852>

Yaakob M.A., Radin Mohamed R.M.S., Al-Gheethi A., Ravishankar Gokare A., Ambati R.R. (2021). Influence of nitrogen and phosphorus on microalgal growth, biomass, lipid, and fatty acid production: an overview. Cells. — Vol. 10(2). — N 393. <https://doi.org/10.3390/cells10020393>

Fang Y., Cai Y., Zhang Q., Ruan R., Zhou T. (2024) Research status and prospects for bioactive compounds of *Chlorella* species: Composition, extraction, production, and biosynthesis pathways. Process Safety and Environmental Protection. — Vol. 191(A). — P. 345-359. <https://doi.org/10.1016/j.psep.2024.08.114>

Фоменко С.Е., Кушнерова Н.Ф., Спрягин В.Г., Другоева Е.С., Мерзляков В.Ю., Лесникова Л.Н. (2023) Исследование содержания полифенолов и антиоксидантной активности экстракта морской зеленой водоросли *Ulva lactuca* L. Химия растительного сырья. — № 1. — С. 385–393. <https://doi.org/10.14258/jcprm.20230111742>

Wong Y.-K., Man L.H., Ho K.C., et al. (2017) Growth medium screening for *Chlorella vulgaris* growth and lipid production. Journal of Applied Microbiology and Biotechnology. — Vol. 1. — P. 203-209 <https://doi.org/10.15406/jamb.2017.06.00143>

References

Bogdanov N.I. (2019) Suspenziya khlorelly v ratsione sel'skokhozyaystvennykh zhivotnykh [*Chlorella* suspension in the diet of farm animals]. Patent RU 201810414, Rossiyskaya Federatsiya. (in Russian)

Butova S.N., Shchegoleva I.D., Tkhorzhevskaya K.A. (2018) Poluchenie ekstraktov kosmeticheskogo naznacheniya iz mikrovdorosli *Chlorella vulgaris* [Obtaining cosmetic extracts from *Chlorella vulgaris* microalgae]. Fizicheskie i Khimicheskie Metody Pererabotki Selkhozproduktov. — N 3. — P. 20-26. (in Russian)

Grabarnik V.E., Karelin N.V., Bogdanov N.I. (2019) Shtamm mikrovdorosli *Chlorella vulgaris* dlya polucheniya biologicheskii aktivnykh veshchestv [Strain of microalgae *Chlorella vulgaris* for the production of biologically active substances]. Patent RU 2685955 C1, Rossiyskaya Federatsiya. (in Russian)

Daliry S., Hallajisani A., Mohammadi Roshandel J., Nouri H., Golzary A. (2017) Investigation of optimal condition for *Chlorella vulgaris* microalgae growth. Global Journal of Environmental Science and Management. — Vol. 3(2). — P. 217-230. <https://doi.org/10.22034/gjesm.2017.03.02.010> (in English)

El-fayoumy E.A., Shanab S.M.M., Shalaby E.A. (2020) Metabolomics and biological activities of *Chlorella vulgaris* grown under modified growth medium (BG11) composition. Chiang Mai University Journal of Natural Sciences. — Vol. 19(1). — P. 91-108. <https://doi.org/10.12982/CMUJNS.2020.0007> (in English)

Zúñiga C., Li C.-T., Huelsman T., Levering J., Zielinski D.C., McConnell B.O., Long C.P., Knoshaug E.P., Guarnieri M.T., Antoniewicz M.R., Betenbaugh M.J., Zengler K. (2016) Genome-scale metabolic model for the green alga *Chlorella vulgaris* UTEX 395 accurately predicts phenotypes under autotrophic, heterotrophic, and mixotrophic growth conditions. Plant Physiology. — Vol. 172(1). — P. 589-602. <https://doi.org/10.1104/pp.16.00593> (in English)

Kelebek H., Uzlasir T., Sasmaz H.K. (2025) Bioactive compounds and health benefits of *Arthrospira platensis* and *Chlorella vulgaris*: A comprehensive review. Food Nutrition. — Vol. 1(2). — P. 100033. <https://doi.org/10.1016/j.fnutr.2025.100033> (in English)

Kim G., Mujtaba G., Lee K. (2016) Effects of nitrogen sources on cell growth and biochemical composition of marine chlorophyte *Tetraselmis* sp. for lipid production. Algae. — Vol. 31(3). — P. 257–266. <https://doi.org/10.4490/algae.2016.31.8.18> (in English)

Mitishev A.V., Kurdyukov E.E., Semenova E.F., Fednina A.S., Evtushenko A.I. (2023) Identifikatsiya i kolichestvennoe opredelenie flavonoidov v biomasse khlorelly (*Chlorella vulgaris* IPPAS C-2019) [Identification and quantification of flavonoids in *Chlorella* biomass (*Chlorella vulgaris* IPPAS C-2019)]. Vestnik Smolenskoj Gosudarstvennoy Meditsinskoy Akademii. — N 22(3). — P. 193-199. <https://doi.org/10.37903/vsgma.2023.3.26> (in Russian)

Moore J.M., Miller T.J., Mu M., Peñas-Defrutos M.N., Gullett K.L., Elford L.S., Quintero S., García-Melchor M., Fout A.R. (2025) Selective stepwise reduction of nitrate and nitrite to dinitrogen or ammonia.

Journal of the American Chemical Society. — Vol. 147. — P. 8444–8454. <https://doi.org/10.1021/jacs.4c16585> (in English)

Nilova L.P., Potoroko I.Yu. (2021) Karotinoidy v rastitel'nykh pishchevykh sistemakh [Carotenoids in plant food systems]. Vestnik YuUrGU. Seriya «Pishchevye i Biotekhnologii». — N 9(4). — P. 54–69 <https://doi.org/10.14529/food210407> (in Russian)

Orazzhanova L.K., Kassymova Zh.S., Nurtazina Zh.Zh., Asserzhanov D.K., Kabdulkarimova K.K. (2025) Sintez i primeneniye nanochastits zheleza dlya polucheniya biologicheskii aktivnykh veshchestv Chlorella vulgaris [Synthesis and application of iron nanoparticles for the production of biologically active substances of Chlorella vulgaris]. Izvestiya Natsional'noy Akademii Nauk Respubliki Kazakhstan. — N 2(354). — P. 275–290. <https://doi.org/10.32014/2025.2518-1483.358> (in Russian)

Plutakhin G.A., Machneva N. L., Trokhimchuk N.N. (2017) Intensifikatsiya kultivirovaniya hlorelly s ispolzovaniem nanochastits zheleza [Intensification of chlorella cultivation using iron nanoparticles]. Scientific Journal of Kuban State Agrarian University. — N 126(02). <https://orcid.org/10.21515/1990-4665-126-054> (in Russian)

Rinawati M., Sari L.A., Pursetyo K.T. (2020) Chlorophyll and carotenoids analysis spectrophotometer using method on microalgae. IOP Conference Series: Earth and Environmental Science. — Vol. 441. — P. 012056. <https://doi.org/10.1088/1755-1315/441/1/012056> (in English)

Cichoński J., Chrzanowski G. (2022) Microalgae as a source of valuable phenolic compounds and carotenoids. Molecules. — Vol. 27(24). — P. 8852. <https://doi.org/10.3390/molecules27248852> (in English)

Yaakob M.A., Radin Mohamed R.M.S., Al-Gheethi A., Ravishankar Gokare A., Ambati R.R. (2021). Influence of nitrogen and phosphorus on microalgal growth, biomass, lipid, and fatty acid production: an overview. Cells. — Vol. 10(2). — N 393. <https://doi.org/10.3390/cells10020393> (in English)

Fang Y., Cai Y., Zhang Q., Ruan R., Zhou T. (2024) Research status and prospects for bioactive compounds of Chlorella species: Composition, extraction, production, and biosynthesis pathways. Process Safety and Environmental Protection. — Vol. 191(A). — P. 345–359. <https://doi.org/10.1016/j.psep.2024.08.114> (in English)

Fomenko S.E., Kushnerova N.F., Spryagin V.G., Drugova E.S., Merzlyakov V.Yu., Lesnikova L.N. (2023) Issledovanie soderzhaniya polifenolov i antioksidantnoy aktivnosti ekstrakta morskoy zelyonoy vodorosli *Ulva lactuca* L. [Investigation of the content of polyphenols and antioxidant activity of the extract of marine green algae *Ulva lactuca* L.]. Khimiya Rastitelnogo Syr'ya. — № 1. — P. 385–393. <https://doi.org/10.14258/jcprm.20230111742> (in Russian)

Wong Y.-K., Man L.H., Ho K.C., et al. (2017) Growth medium screening for Chlorella vulgaris growth and lipid production. Journal of Applied Microbiology and Biotechnology. — Vol. 1. — P. 203–209 <https://doi.org/10.15406/jamb.2017.06.00143> (in English)

© G.M. Ormanova*, A.A. Anarbayev, B.N. Kabylbekova, Zh.E. Khusanov, 2025.

M. Auezov South Kazakhstan university, Shymkent, Kazakhstan.

E-mail: ormanova_g@inbox.ru

CONSTRUCTION OF A SOLUBILITY ISOTHERM IN A FOUR-COMPONENT MUTUAL $\text{CaSO}_4\text{-NaCl-H}_2\text{O}$ SYSTEM

Ormanova Gaukhar — PhD doctoral student of M. Auezov South Kazakhstan university, Shymkent, Kazakhstan,

E-mail: ormanova_g@inbox.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9625-5790>;

Anarbayev Abibulla — Doctor of technical sciences, professor of M.Auezov South Kazakhstan university, Shymkent, Kazakhstan,

E-mail: abib_28@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0019-4381>;

Kabylbekova Balzhan — Candidate of technical sciences, professor of M.Auezov South Kazakhstan university, Shymkent, Kazakhstan. E-mail: balzhan.kbn@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8461-8008>;

Khusanov Zhakhangir — Candidate of technical sciences, professor, head of laboratories Regional testing laboratory for engineering “Structural and biochemical materials”, M. Auezov South Kazakhstan university, Shymkent, Kazakhstan,

E-mail: zhakhangir@mail.ru; <https://orcid.org/0000-0002-4408-2066>.

Abstract. Aim of study is to process the distiller liquid containing calcium chloride, main waste of soda production, by treating it with natural sodium sulfate to produce gypsum binder and sodium chloride filtrate. After dissolving additional table salt and removing impurities, the filtrate can be reused in soda ash production. Sodium sulfate used in the experiments is a natural salt from the Zhaksykylysh deposit, crystallizing as thenardite. The distiller liquid solution was obtained from the Sterlitamak plant. To access the possibility of calcium chloride reacting with sodium sulfate in the presence of impurities, ΔG_T^0 was calculated using HSC-51 software and reference data for ΔH_T^0 and S_T^0 . Thermodynamic calculation shows that Gibbs energy values are negative, confirming the feasibility of forming NaCl , $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, MgSO_4 and NaOH through the interaction reaction of calcium chloride with sodium sulfate. However, interaction of calcium hydroxide with sodium sulfate to form $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ and NaOH is impossible, because ΔG_T^0 is positive. Experiments on distiller liquid processing were conducted at 70-90°C for 15-60 minutes with sodium sulfate amounts of 0.84, 0.92 and 1.00 of the stoichiometric requirement. Optimal processing condition were established, including the consumption of natural sodium sulfate at 84-100% of stoichiometry and suitable temperature-time parameters. It was found that the degree of calcium chloride

conversion at 70-90°C reaches 96.89÷ 97.02%. treating distiller liquid with sodium sulfate thus enables the production sodium chloride and calcium sulfate.

Keywords: soda ash production, distiller liquid, sodium chloride, calcium chloride, sodium sulfate, gypsum

© Г.М. Орманова*, А.А. Анарбаев, Б.Н. Кабылбекова, Ж.Е. Хусанов, 2025.

М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан.

E-mail: ormanova_g@inbox.ru

ТӨРТ КОМПОНЕНТТІ $\text{CaSO}_4\text{-NaCl-H}_2\text{O}$ ӨЗАРА ӘРЕКЕТТЕСУ ЖҮЙЕСІНДЕГІ ЕРІГІШТІК ИЗОТЕРМАСЫН ТҰРҒЫЗУ

Орманова Гаухар — PhD докторант, М.Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан,

E-mail: ormanova_g@inbox.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9625-5790>;

Анарбаев Абибулла — техника ғылымдарының докторы, профессор, М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан,

E-mail: abib_28@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0019-4381>;

Кабылбекова Балжан — техника ғылымдарының кандидаты, профессор, М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан,

E-mail: balzhan.kbn@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8461-8008>;

Хусанов Жажангир — техника ғылымдарының кандидаты, доцент, «Конструкциялық және биохимиялық материалдар» ИБАС зертханасының меңгерушісі, М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан зерттеу университеті, Шымкент, Қазақстан,

E-mail: zhakhangir@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4408-2066>.

Аннотация. Зерттеудің мақсаты гипс байланыстырғышын және натрий хлориді фильтратын алу үшін табиғи натрий сульфатымен сода өндірісінің негізгі қалдығы дистиллерлі сұйықтық құрамындағы кальций хлоридінің өңдеу болып табылады. Ондағы ас тұзының қосымша мөлшерін ерітіп, қажетсіз қоспалардан тазартқаннан кейін фильтратты кальцийленген сода технологиясында қайта қолдануға болады. Тәжірибелерде қолданылатын натрий сульфаты-тенардит түрінде кристалданатын Жақсықылыш кен орнының табиғи тұзы. Кальцийленген сода өндірісінің дистиллерлі сұйықтық ерітіндісі Стерлитамак сода зауытынан алынған. Қоспалардың қатысуымен кальций хлориді мен натрий сульфатының өзара әрекеттесу реакциясының мүмкіндігін анықтау үшін HSC-51 кешенінің Reaction Equations бағдарламасын, ΔH_T^0 және S_T^0 қосылыстары анықтамалық мәліметтерін қолдана отырып, Гиббс энергиясын (ΔG_T^0) есептеу жүргізілді. Термодинамикалық деректерді есептеу Гиббс энергиясының мәні теріс мәндерге ие екенін көрсетеді және кальций хлоридінің натрий сульфатымен әрекеттесу реакциясының NaCl , $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, MgSO_4 және NaOH тұзу мүмкіндігін көрсетеді. Кальций гидроксидінің натрий сульфатымен әрекеттесуі $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ және NaOH мүмкін емес, өйткені ΔG_T^0 мәні оң мәнге ие. Дистиллерлі сұйықтықты қайта өңдеуді зерттеу 70-90°C температура мен 15-60 мин уақыт аралығында және натрий сульфатының нормасы стехиометриялық мөлшерден 0,84; 0,92 және 1,00

жүргізілді. Дистиллерлі сұйықтықты өңдеу процесінің оңтайлы параметрлері, стехиометриядан $84 \div 100\%$ аралығындағы табиғи натрий сульфатының шығыны, процестің температурасы мен ұзақтығы анықталды. Кальций хлоридінің конверсия дәрежесі $70-90^\circ\text{C}$ кезінде $96,89 \div 97,02\%$ құрайтыны анықталды. Құрамында кальций хлориді натрий сульфатымен бар дистиллерлі сұйықтықты өңдеу натрий хлориді мен кальций сульфатын алуға мүмкіндік береді.

Түйінді сөздер: Кальцийлендірілген сода өндірісі, дистиллерлі сұйықтық, натрий хлориді, кальций хлориді, натрий сульфаты, гипс

© Г.М. Орманова*, А.А. Анарбаев, Б.Н. Кабылбекова, Ж.Е. Хусанов, 2025.

Южно-Казахстанский университет имени М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан.

E-mail: ormanova_g@inbox.ru

ПОСТРОЕНИЕ ИЗОТЕРМЫ РАСТВОРИМОСТИ В ЧЕТЫРЕХКОМПОНЕНТНОЙ ВЗАИМНОЙ СИСТЕМЕ $\text{CaSO}_4\text{-NaCl-H}_2\text{O}$

Орманова Гаухар — PhD докторант, Южно-Казахстанский университет им. М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан,

E-mail: ormanova_g@inbox.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9625-5790>;

Анарбаев Абибулла — доктор технических наук, профессор, Южно-Казахстанский университет им. М. Ауэзова, 160012, г. Шымкент, Казахстан,

E-mail: abib_28@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0019-4381>;

Кабылбекова Балжан — кандидат технических наук, профессор Южно-Казахстанский университет им. М. Ауэзова, г. Шымкент, Казахстан,

E-mail: balzhan.kbn@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8461-8008>;

Хусанов Жахангир — кандидат технических наук, профессор, заведующий лабораторией ИРЛИП «Конструкционные и биохимические материалы» Южно-Казахстанского университета им. М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан,

E-mail: zhakhangir@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4408-2066>.

Аннотация. Целью исследования является переработка дистиллерной жидкости, содержащей хлорид кальция — основного отхода содового производства, путем её обработки природным сульфатом натрия с получением гипсового вяжущего и фильтрата хлорида натрия. Фильтрат, после растворения дополнительного количества поваренной соли и очистки от нежелательных примесей, может быть использован в технологии получения кальцинированной соды. Сульфат натрия, используемый в опытах, представляет собой природную соль Жаксыкылышского месторождения, кристаллизующуюся в виде минерала тенардита. Раствор дистиллерной жидкости производства кальцинированной соды получен на Стерлитамакском содовом заводе. С целью определения возможности протекания реакции взаимодействия хлорида кальция с сульфатом натрия в присутствии примесей проведён расчёт ΔG° с использованием программного комплекса HSC-51 (подпрограмма Reaction Equations) и справочных данных ΔH° и S° . Расчёт термодинамических данных показывает, что значения энергии Гиббса имеют отрицательные величины и свидетельствуют о возможности протекания реакции взаимодействия хлорида кальция с сульфатом натрия с

образованием NaCl , $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, MgSO_4 и NaOH . Взаимодействие гидроксида кальция с сульфатом натрия с образованием $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ и NaOH невозможно, так как величина ΔG° имеет положительное значение. Исследования переработки дистиллерной жидкости проведены в интервале температур 70–90 °С, времени 15–60 мин и норме сульфата натрия 0,84; 0,92 и 1,00 от стехиометрического количества. Определены оптимальные параметры режима процесса переработки: расход природного сульфата натрия 84–100 % от стехиометрии, температура и продолжительность процесса. Установлено, что степень конверсии хлорида кальция при 70–90 °С составляет 96,89–97,02 %. Переработка дистиллерной жидкости, содержащей хлорид кальция, с сульфатом натрия позволяет получить хлорид натрия и сульфат кальция.

Ключевые слова: производство кальцинированной соды, дистиллерная жидкость, хлорид натрия, хлорид кальция, сульфат натрия, гипс

Кіріспе. Химия өнеркәсібінің қазіргі даму кезеңінде кальцийлендірілген соданы аммиактық әдіспен өндіру барысында түзілетін қалдықтарды кәдеге жарату мәселесі барлық елдер үшін өзекті болып отыр. Процестің экологиялық тұрғыдан негізгі маңызды қалдығы – құрамында кальций хлориді (CaCl_2) бар, аса минералданған ерітінді болып табылатын дистиллерлі сұйықтық өте үлкен көлемде түзіледі (Kurbanova et al., 2024; Ormanova et al., 2025). Тек Ресейдің өзінде 40 млн тоннадан астам кальций-карбонат құрамды қатты қалдықтар жинақталған. Жыл сайын олардың мөлшері 1,0-1,5 млн тоннаға өсіп отырады. Қазақстанға кальцийлендірілген соданы экспорттайтын Стерлитамак «Сода» АҚ-да жыл сайын шамамен 17 млн дм^3 дистиллерлі сұйықтық түзіледі. Бұл өз кезегінде Стерлитамак қаласы маңындағы аумақты, сондай-ақ Кама, Еділ өзендерін және Каспий теңізін едәуір ластайды (Eshmatova, 2023). Қытай мен Үндістанда аммиак өндірісі жанында түзілетін дистиллерлі сұйықтықты қайта өңдеп, аммоний хлоридін алады және оны күріш өсіруге арналған минералды тыңайтқыш ретінде пайдаланады. Кей жағдайларда топырақтағы хлордың артық мөлшеріне байланысты аммоний хлориді бар дистиллерлі сұйықтық жақын орналасқан су айдындарына төгіледі (Zaihua Yang et al., 2024; Yonglan Zong et al., 2023). Еуропа елдеріндегі сода зауыттары дистиллерлі сұйықтықтың бір бөлігін кальций хлоридіне қайта өңдейді, ал қатты қалдықтарды құрылыс материалдарына айналдырады (Golub et al., 2020).

Дистиллерлі сұйықтықты кальций хлоридін алу үшін пайдалану жалпы хлоридтерді қайта өңдеу мәселесін шешпейді (CAO Jun-ya et al., 2024). Бұл ішкі және әлемдік нарықтарда аталған қосылысқа деген сұраныстың шектеулі болуымен түсіндіріледі. Аммоний хлоридіне қатысты жағдайда ұқсас: оның ауыл шаруашылығы секторында қолданылуы шектелген, өйткені хлор иондарының жоғары концентрациясы өсімдіктерге уытты әсер етуі мүмкін, сондай-ақ қоректік элемент ретінде азоттың мөлшері салыстырмалы түрде төмен 24-25% (Anarbayev et al., 2025).

Дистиллерлі сұйықтықты қайта өңдеудің тағы бір бағыты – оны асбестоцемент

және силикат бұйымдарын, соның ішінде плиталар, құбырлар және құрылыс блоктарын өндіруде пайдалану. Алайда бұл салалардағы қолдану көлемі мардымсыз болып қалып отыр және өндіріс ауқымында қайта өңдеу мәселесін шешуге мүмкіндік бермейді (Xu et al., 2022; Ibrić et al., 2021).

Құрамында кальций және натрий хлориді бар қалдықтарды қайта өңдеу үшін тұзды суды кальций, магний және сульфат иондарының қоспаларынан тазарту кезінде CaSO_4 , CaCl_2 , NaCl тұздарының ерігіштігі зерттелді (Li et al., 2015) және кальций сульфатының екісулы және сусыз түрлерінің түзілу мүмкіндігі анықталды (Taherdangkoo, Reza et al., 2022).

Дистиллерлі шламды қайта өңдеуге арналған көптеген еңбектер бар (Bilginer Aukut et al., 2020; Dai et al., 2024). Өртүрлі қайта өңдеу және жартылай пайдалану технологиялары әзірленіп, енгізілгеніне қарамастан, қолданыстағы әдістер қалдықтардың түзілу ауқымы мен олардың күрделі химиялық құрамы салдарынан мәселені кешенді түрде шешуге мүмкіндік бермейді.

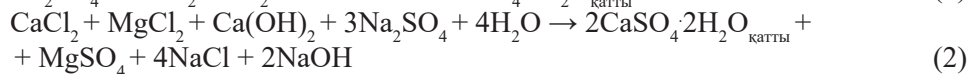
Әсіресе дистиллерлік сұйықтықты қайта өңдеу мәселесі Қазақстан Республикасында жаңа сода өндірісін құру жобаларының іске асырылуына байланысты маңызды. Мұндай жобаларға Qazaq soda (Жамбыл облысы) және Aral Soda (Қызылорда облысы) жатады, олардың жалпы жобалық қуаты жылына 800 мың тоннадан асуы мүмкін. Су және табиғи ресурстардың тапшылығын, сондай-ақ экологиялық стандарттарды сақтау қажеттілігін ескерсек, дистиллерлі сұйықтықты тиімді, ресурс үнемдейтін және қалдықсыз өңдеу технологияларын әзірлеу – бұл ұлттық және халықаралық деңгейде басым ғылыми-техникалық міндет болып табылады.

Материалдар мен зерттеу әдістері. Кальций хлоридін дистиллерлі сұйықтықтан натрий сульфаты қатысында қайта өңдеу 15-тен 60 минут уақыт аралығында зерттелді. Процестің ең жақсы көрсеткіші ретінде фильтраттағы кальций иондарының ең төменгі мөлшері қарастырылды. Бұл жүйеде тепе-теңдікке жеткенді және берілген реакциядағы максималды түрлену дәрежесін сипаттайды. Түрлену дәрежесі кальцийдің сұйық фазадағы қалдық мөлшерін (CaO_f , %) және бастапқы дистиллерлі сұйықтықтағы жалпы кальций мөлшерін ($\text{CaO}_{\text{жалпы}}$, г) ескере отырып есептелген.

Жұмыста қолданылған зерттеу әдістері: химиялық және термодинамикалық талдау әдістері, растрлы электрондық микроскопия. Кептіруден кейін жуылған және жуылмаған тұнба мен фильтраттағы негізгі және қоспа компоненттердің мөлшері химиялық талдау әдісімен анықталды. Тұнба JSM-6490LV растрлық электрондық микроскопында INCA Energy-350 энергодисперсиялық микроанализ жүйесімен және HKL Basic поликристалдық үлгілердің құрылымдық-текстуралық талдау жүйесімен зерттелді. Сонымен қатар гипстің термиялық түрлену процестері, оны күйдіру өнімдерінің гидратация заңдылықтары, әртүрлі температуралардың гипс құрылымына және текстурасына әсері зерттелген. Зерттеулерде Стерлитамак сода зауытында өндірілген дистиллерлік сұйықтық ерітіндісі қолданылған.

Кальцийлендірілген сода өндірісінің дистиллерлік сұйықтық құрамында кальций және натрий хлоридтерінен басқа, кальций карбонаты, сульфаты және

гидроксиді де бар. Қоспалардың қатысуымен кальций хлориді мен натрий сульфатының өзара әрекеттесу реакциясының мүмкіндігін анықтау үшін Гиббс энергиясының (ΔG_T^0) есептеулері HSC-51 кешенінің Reaction Equations бағдарламасын және қосылыстары анықтамалық ΔH_T^0 және S_T^0 мәліметтерін қолдана отырып жүргізілді. Кальцийлендірілген сода өндірісінің дистиллерлі сұйықтығы кальций мен натрий хлоридтерінен басқа, кальций карбонатын, сульфатын, және гидроксидін де қамтиды. Бұл қосылыстардың натрий сульфатымен бірлесіп ыдырауы туралы мәліметтер және жүретін реакциялардың термодинамикалық талдауы әдеби дереккөздерде жоқ. Кальций хлоридінің натрий сульфатымен әрекеттесуі келесі реакциялар бойынша жүреді:



1-реакцияның жүзеге асу мүмкіндігін Гиббс энергиясын есептеу арқылы бағалаймыз. Сода өндірісінде дистиллерлі сұйықтықтың түзілуіндегі температуралық процестердің ерекшеліктерін ескере отырып, 0-100°C (273-373K) температура аралығында Гиббс энергиясының өзгерісі (ΔG_T^0) ерекше қызығушылық тудырады. Аталған реакциялар үшін қосылыстардың есептік термодинамикалық деректері және Гиббс энергиясының өзгерісі (ΔG_T^0) (t) тәуелділігі 1-кестеде келтірілген.

Кесте 1. Температураға байланысты Гиббс энергиясының өзгерісі (ΔG_T^0)

$\text{Na}_2\text{SO}_4 + \text{CaCl}_2 + 2\text{H}_2\text{O} = 2\text{NaCl} + \text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}_{\text{қатты}}$					
T, °C	Δ	Δ	Δ	K	LogK
0	-76,251	-9,703	-73,6	1,19E+14	14,076
10	-88,937	-56,102	-73,051	3,00E+13	13,477
20	-89,595	-58,388	-72,479	8,23E+12	12,916
30	-90,238	-60,546	-71,884	2,44E+12	12,387
40	-90,866	-62,582	-71,268	7,74E+11	11,889
50	-91,478	-64,505	-70,633	2,62E+11	11,418
60	-92,074	-66,323	-69,978	9,39E+10	10,973
70	-92,655	-68,041	-69,306	3,56E+10	10,551
80	-93,221	-69,667	-68,618	1,41E+10	10,15
90	-93,772	-71,206	-67,913	5,88E+09	9,769
100	-94,309	-72,666	-67,194	2,55E+09	9,407

$\text{CaCl}_2 + \text{MgCl}_2 + \text{Ca}(\text{OH})_2 + 3\text{Na}_2\text{SO}_4 + 4\text{H}_2\text{O} = 2\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}_{\text{қатты}} + \text{MgSO}_4 + 4\text{NaCl} + 2\text{NaOH}$					
T, °C	Δ	Δ	Δ	K	LogK
0	-70,213	-13,252	-66,593	5,44E+12	12,736
10	-95,578	-106,027	-65,556	1,24E+12	12,095
20	-96,886	-110,567	-64,473	3,08E+11	11,489
30	-98,159	-114,838	-63,346	8,24E+10	10,916

40	-99,394	-118,845	-62,177	2,36E+10	10,372
50	-100,595	-122,622	-60,97	7,18E+09	9,856
60	-101,766	-126,19	-59,725	2,32E+09	9,365
70	-102,908	-129,57	-58,446	7,90E+08	8,898
80	-104,026	-132,78	-57,135	2,83E+08	8,452
90	-105,12	-135,834	-55,791	1,06E+08	8,026
100	-106,192	-138,747	-54,418	4,15E+07	7,618

$\text{Ca(OH)}_2 + \text{Na}_2\text{SO}_4 + 2\text{H}_2\text{O} = \text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O} + 2\text{NaOH}$					
T, °C	Δ	Δ	Δ	K	Log(K)
0	84,818	-0,422	84,933	5,71E-17	-16,243
10	72,163	-46,712	85,389	1,76E-16	-15,754
20	71,537	-48,884	85,867	5,00E-16	-15,301
30	70,93	-50,922	86,366	1,31E-15	-14,883
40	70,344	-52,823	86,885	3,21E-15	-14,494
50	69,777	-54,604	87,423	7,37E-15	-14,132
60	69,228	-56,279	87,977	1,60E-14	-13,795
70	68,693	-57,861	88,548	3,31E-14	-13,48
80	68,172	-59,358	89,134	6,53E-14	-13,185
90	67,663	-60,778	89,735	1,24E-13	-12,908
100	67,166	-62,127	90,349	2,25E-13	-12,648

1-кестеден 0-100оC (273-373K) температура аралығында 1 және 2-реакциялар үшін HSC бағдарламалық кешені арқылы есептелген ΔG_T^0 мәндерінің теріс екені көрінеді. Бұл кальций хлоридінің натрий сульфатымен әрекеттесіп, NaCl, $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, MgSO_4 және NaOH тұзу реакциясының жүру мүмкін екенін көрсетеді. Ал кальций гидроксидінің натрий сульфатымен $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ және NaOH түзе отырып әрекеттесу мүмкін емес (3-реакция), себебі бұл жағдайда ΔG_T^0 мәні оң шаманы құрайды.

Температура 90-100°C (363-373K) температурада ΔG_T^0 сәйкесінше -67,913 кДж және -67,194 кДж құрайды. Бұл кальций хлоридінің натрий сульфатымен әрекеттесіп NaCl және $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ түзілу мүмкін екенін көрсетеді.

Нәтижелер және талқылаулар. Зертханада 70°C және 90°C температураларда CaSO_4 -NaCl- H_2O жүйесіндегі тұздардың ерігіштігі зерттелді. Төрт компонентті CaSO_4 -NaCl- H_2O өзара жүйесіндегі ерігіштік изотермасын тұрғызу үшін жүйенің тұздық құрамын көрсететін Йенеке диаграммасының квадраттық түрі қолданылды. Осы жүйедегі ерігіштікке қатысты әдебиеттерде белгілі деректер жүйенің тұздық құрамына қайта есептеліп, LO сызығы түрінде бейнеленді. Филтраттың химиялық талдауы және растрлық электрондық микроскоптағы спектроскопиялық зерттеу нәтижелері негізінде жүйедегі белгілі бір катион немесе анион мөлшерінің олардың жалпы санына қатынасы ретінде Ca^{2+} және 2Cl^- иондары үшін Йенеке индекстері есептелді.

70°C температурада және натрий сульфатының стехиометриялық нормасында жүргізілген тәжірибе үшін Йенеке индекстерін есептеу мысалы.

1. Дистиллерлі сұйықтықтың мөлшері – 206,4 г, оның ішінде:

CaCl_2 (78% CaCl_2 22% H_2O)	29,54 г
NaCl	11,22 г
$\text{Ca}(\text{OH})_2$	1,78 г
CaSO_4	0,4 г
CaCO_3	1,18 г
SiO_2	0,06 г
H_2O	162,22 г

2. Натрий сульфатының массасы – 37,7г.

Кесте 2. Натрий сульфаты нормасының кальций хлоридінің конверсия көрсеткіштеріне әсері.

Конверсия температурасы - 70°C.

№	Уақыт, мин	Na_2SO_4 (N) нормасы, %	Сұйық фазадағы Ca^{2+} мөлшері, сал.%							$\frac{\text{Ca}^{2+}}{\text{SO}_4^{2-}}$ мольдік қатынас	Конверсия дәрежесі, %
			Ca^{2+}	SO_4^{2-}	Na^+	Cl^-	Mg^{2+}	Fe^{3+}	Al^{3+}		
1	45	84	0,420	0,30	4,91	7,01	0,002	0,003	0,004	3,36	80,04
2	45	92	0,128	0,64	6,03	7,13	0,001	0,002	0,002	0,49	86,10
3	45	100	0,150	0,68	7,52	8,32	-	0,001	0,001	0,38	97,02
4	45	108	0,09	1,58	6,76	7,19	-	-	-	0,14	95,60
5	45	127	0,06	2,72	6,05	6,15	-	-	-	0,20	95,52

Алынған фильтраттың химиялық талдау нәтижелеріне сәйкес (2-кесте) ондағы кальций иондарының мөлшері 0,15% немесе 0,154 г ($0,15\%-103\text{г}/100=0,154\text{г}$) құрайды, бұл моль санына қайта есептегенде $0,154/40=0,00385$ моль болады (мысалы, $0,154\text{г}:40$ (Са атомдық массасы)=0,00385 моль). Осыған ұқсас түрде сульфат-ионының моль саны есептелді: $0,701\text{г}/96=0,00730$ моль, ал хлорид ионы үшін: $(8,32 \cdot 2)/35,5=0,4687$ моль. Аниондардың жалпы мөлшері $0,00730+0,4687=0,4760$ моль. Сонда натрий иондарының саны: $0,4760-0,00385=0,4721$ моль. Натрий және хлор бойынша Йенеке индекстерін есептейміз:

$$X_{\text{Na}^+}=0,4721/0,4760=0,9918 \text{ немесе } 99,18\%$$

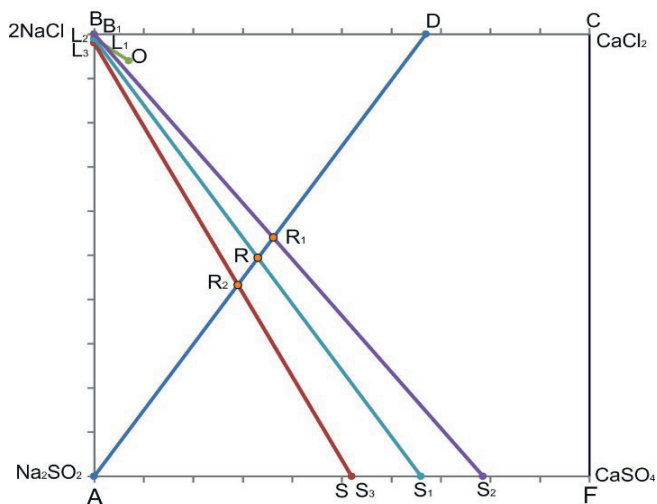
$$X_{\text{Cl}^-}=0,4687/0,4760=0,9846 \text{ немесе } 98,46\%$$

Бұл координаттарға тұзды масса диаграммасында L_1 нүктесі сәйкес келеді (1-сурет). Есептеу нәтижелері бойынша 70 және 90°C температураларындағы қаныққан ерітіндінің құрам нүктелері анықталды. Изотермалар 70 және 90°C үшін ерігіштік диаграммаларында L_1 , L_2 , L_3 , B_1 нүктелерімен белгіленген, олар 70°C жағдайында іс жүзінде сәйкес келеді және берілген температуралар үшін әдеби дереккөздерде келтірілген қаныққан ерітінді құрамынан аздап ерекшеленеді (1-2 суреттер).

Дистиллерлі сұйықтықтың химиялық құрамына сүйене отырып, оның тұздық құрамы есептелді. 200 г дистиллерлі сұйықтықта 23,04 CaCl_2 және 11,22г NaCl , сондықтан оның диаграммадағы (1 және 2-суреттер) құрамы D нүктесімен (67% CaCl_2 және 33% NaCl) көрсетіледі.

Жүйенің тұздық массасын анықтау үшін бастапқы реагенттердің – дистиллерлі

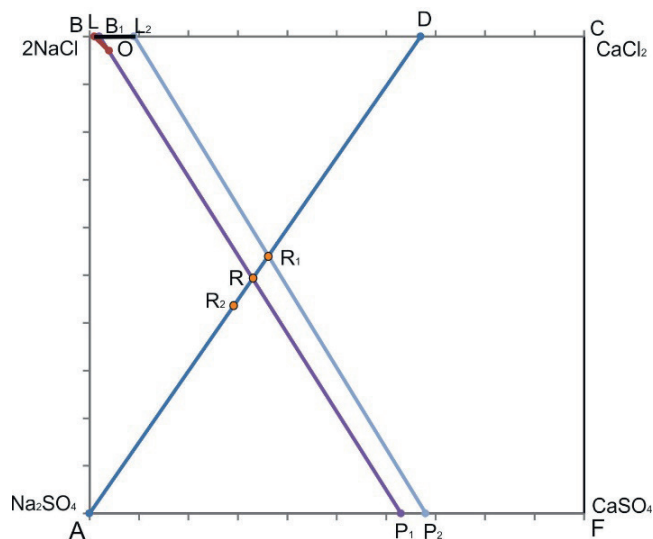
сұйықтық пен натрий сульфатының шығындарының арақатынасы есептелді. Ол үшін табиғи натрий сульфатының есептелген стехиометриялық мөлшері 37,7 г алынды, ал негізгі компоненттің мөлшері 92,95% екенін ескере отырып, Na_2SO_4 шығыны 35,04 кұрайды.



Сурет 1 - 70°C температурадағы $\text{CaSO}_4\text{-NaCl-H}_2\text{O}$ жүйесінің ерігіштік диаграммасы

Бастапқы реагенттердің құрамдық бейнелік нүктелері А және D қосып, осы қосушы тұзу бойында компоненттер қатынасына сәйкес жүйе құрамының нүктесін анықтаймыз: $34,26/35,04=0,978:1$. Тұндырғыштың төмендетілген нормасы (84%) жағдайында бұл қатынас $34,26/29,65=1,155:1$, ал жоғарылатылған нормасы (127%) кезінде - $34,26/44,6=0,768:1$ болады. Жүйенің тұздық массасына сәйкес бейнелік нүктелер: реагенттердің стехиометриялық қатынасы үшін – R, натрий сульфаты жеткіліксіз болғанда – R₁, ал артық алынған жағдайда – R₂ деп белгіленді. Бұл ретте рычаг ережесі бойынша дистиллерлі сұйықтықтың тұздық массасы AR кесіндісімен, ал натрий сульфатының массасы RD кесіндісімен анықталады.

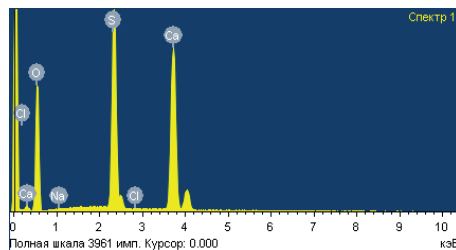
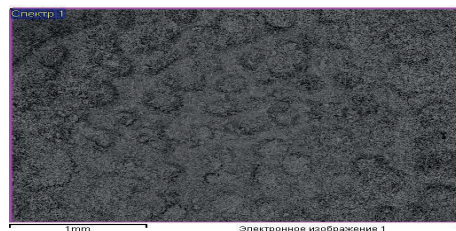
Жоғарыда атап өткендей, берілген төрт компонентті өзара жүйеде тұрақты тұздар жұбы $\text{CaSO}_4\text{-NaCl}$ болып табылады, өйткені кальций сульфатының ас тұзындағы ерітінділерде ерігіштігі өте төмен. Реакция нашар еритін тұнбаның түзілуімен жүреді, яғни химиялық тұрғыда қайтымсыз, әрі қанықпаған ерітінділердің облысы іс жүзінде болмайды. Сондықтан кальций сульфатының кристалдану өрісі диаграмманың бүкіл ауданын қамтиды. Мұндай жағдайда гипс шығымын есептеудің негізгі мәселесі – дистиллерлі сұйықтықты қайта өңдеу процесінің рычаг ережесіне және материалдық балансына сәйкес қатты фазаның құрамын анықтау. Тұрғызылған графиктен натрий сульфатының төмендетілген шығыны кезінде қатты фаза 80% кальций сульфатынан тұрады (70 °C үшін S_2 нүктесі және 90°C үшін P_2 нүктесі), ал стехиометриялық қатынас кезінде - 65% (S_1 және P_1 нүктелері).



Сурет 2 - 90°C температурадағы CaSO_4 - NaCl - H_2O жүйесінің ерігіштік диаграммасы

3-суретте 70°C температурада, 60 минут уақыт ішінде, натрий сульфатының нормасы 84% болған жағдайда алынған гипстің элементтік талдауы көрсетілген.

Элемент	Салмақтық %	Атомдық %	Қосылыс, %
O	57.42	75.28	
Na	0.10	0.09	Na_2SO_4 -0,108
S	18.27	11.95	
Cl	0.10	0.06	NaCl -0,164
Ca	24.11	12.62	CaSO_4 -77,54 ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ -98,06)



Сурет 3 - 70°C температурада, 60 минут уақыт ішінде алынған $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ құрамының сипаттамасы.

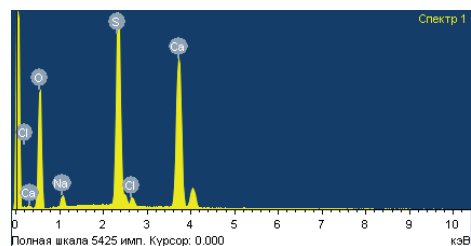
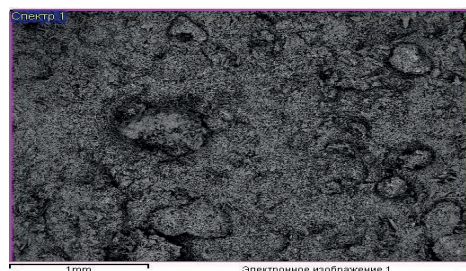
3-суретте жуғаннан кейін гипстегі Na_2SO_4 мөлшері 0,108%, ал NaCl мөлшері 0,164% құрайды.

Натрий сульфатының артығы кальций және натрий сульфаттарының бір уақытта эквимолекулалық тұнбаға түсуіне әкеледі (S_3 нүктесі), бұл гипстің химиялық

талдау нәтижелерімен және жуылмаған тұнбаның растрлық электрондық микроскоптағы микрофотосуреттерімен расталады (4-сурет).

4-суретте 90°C температурада, 60 минут уақыт ішінде алынған жуылмаған тұнбаның құрамы көрсетілген.

Элемент	Салмақтық %	Атомдық %	Қосылыс, %
O	55.11	73.09	
Na	1.69	1.56	Na ₂ SO ₄ -4,75
S	18.68	12.36	
Cl	0.23	0.14	NaCl-0,37
Ca	24.30	12.86	CaSO ₄ -74,84

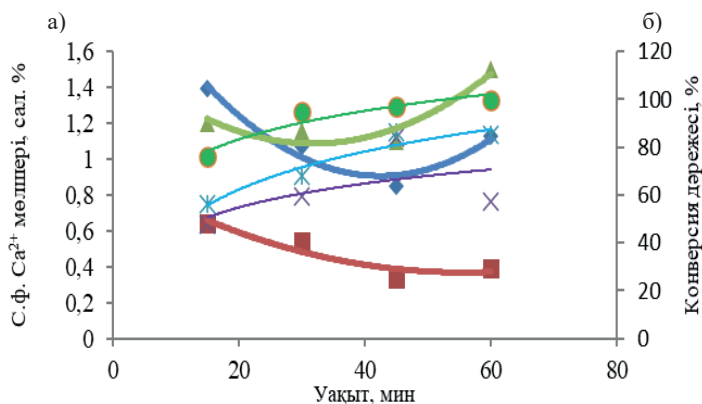


Сурет 4 - 90°C температурада, 60 минут уақыт ішінде алынған жуылмаған тұнбаның құрамы.

Жуылмаған гипсте (4-сурет) Na₂SO₄ мөлшері 4,75%, ал NaCl мөлшері 0,37% құрайды, бұл CaSO₄·Na₂SO₄ қос тұз кристалдарының түзілуін көрсетеді.

Зерттеулерді жүргізу үшін алдын ала Қазақстанның Оңтүстік өңірінен алынған табиғи натрий сульфатының үлгілері пайдаланылды. Бұған дейін дистиллерлі сұйықтықтағы кальций хлоридін әртүрлі натрий сульфаты шығындары кезінде қайта өңдеу бойынша зерттеулер жүргізілген еді. Қолданылған натрий сульфатының құрамы келесідей: Na₂SO₄ – 92.95%; CaSO₄·2H₂O – 4.0%; MgSO₄·H₂O – 0.57%; Fe₂O₃ – 0.09%; Al₂O₃ – 0.40%; ерімейтін қалдық – 1,42; ылғалдылық – 1,0% кем емес.

Эксперимент нәтижелері 5-суретте келтірілген және олар уақытқа байланысты конверсия дәрежесінің өзгерісін көрсетеді. Сонымен қатар, процесс параметрлерінің оңтайлы мәндері (температура, натрий сульфатының шығын нормасы және сұйық фазадағы Ca²⁺ мөлшерінің уақытқа тәуелділігі) анықталды.



а- сұйық фазадағы Ca^{2+} мөлшері:

- процесс 70 °C температурда
- процесс 80 °C температурда
- процесс 90 °C температурда

б-Конверсия дәрежесі:

- натрий сульфатының нормасы -0,84
- натрий сульфатының нормасы -0,92
- натрий сульфатының нормасы -1,00

Сурет 5 - Сұйық фазадағы Ca^{2+} мөлшерінің процесс уақытына тәуелділігі (а) және конверсия дәрежесінің өзгеруі (б)

Кальций хлоридінің конверсиясы процесінде (5-сурет (а)) стехиометриялық мөлшерден төмен (84%) натрий сульфатын пайдалну кезінде, 70°C температурада және 15-45 минут аралығында NaCl ерітіндісіндегі кальций иондарының мөлшері 0,81%-дан 0,2%-ға дейін төмендейді.

5-сурет (б)-ден көрініп тұрғандай, 70°C температурада және натрий сульфатының 0,84 нормасында конверсия уақыты артқан сайын 15-45 минут аралығында конверсия дәрежесі 47,54%-дан 84,04%-ға дейін жетеді, ал 60 минутта 57,27% құрайды. Конверсия дәрежесінің төмендеуі $\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot \text{CaSO}_4$ тұзының түзілуімен және кальций хлоридін ыдыратуға қажетті кальций сульфатының жеткіліксіздігімен байланысты болуы мүмкін.

Натрий сульфатының нормасы 0,92 болғанда, 15-45 минут ішінде конверсия дәрежесі 56,3%-дан 86,1%-ға дейін жетеді. Уақыт 60 минутқа жеткенде, бұл мән 1,0%-ға төмендеп, 85,1% құрайды. Бұл құбылыс кальций тұздарының ерігіштігімен және кальций хлоридін толық ыдыратуға қажетті натрий сульфатының жеткіліксіздігімен түсіндіріледі.

Қорытынды. Сұйық фазадағы Ca^{2+} мөлшерінің процесс уақытына тәуелділігі және CaO конверсиясының дәрежесінің өзгеруін анықтау бойынша натрий сульфатының 1,00 нормасында, 70-90°C температура аралығында эксперименттер орындалды. Ең жоғары конверсия дәрежесі 70°C температурада және 45 минут уақыт ішінде 97,02% көрсеткішінде байқалады; 80°C температурада – 88,37%, 90°C температурада 84,85%. 90°C және одан жоғары температураның жоғарылауымен конверсия дәрежесінің төмендеуі кальций сульфатының дигидратын жартылай гидратқа ауысуымен байланысты, ол натрий сульфатының тұздарымен $\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot \text{CaSO}_4 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ түрінде байланысып, қатты фазаға өтеді. Осылайша, бұл жағдайда

Ca^{2+} иондарының максималды жететін мөлшері 1,05-1,61%-дан аспайды, ал натрий сульфатының стехиометриялық нормасы кезінде 70°C -та ол 0,14-0,18% Ca^{2+} құрайды. Кальций хлоридінің конверсия дәрежесі 96,89-97,02% тең. Бұған қоса, жоғарыда атап өтілгендей, температура натрий сульфатының еруін жеңілдетуде маңызды рөл атқарады, демек реакцияның жүруіне және натрий хлоридінің қаныққан ерітіндісін алу кезінде кальций иондарының көп мөлшерде тұнбаға түсуіне ықпал етеді. Зертханалық қондырғыда жүргізілген кинетикалық зерттеу негізінде температурасы 70 - 90°C және натрий сульфатының мөлшері стехиометрия 100%-ына тең жағдайда фильтраттағы кальций иондарының минималды құрамын қамтамасыз ететін конверсия процесінің ұзақтығы 45 минут екені анықталды.

Осылайша, термодинамикалық есептеулерге және $\text{CaSO}_4\text{-NaCl-H}_2\text{O}$ жүйесіндегі тұздардың ерігіштігін зерттеуге, сондай-ақ алынған эксперименттік деректерге негізделе отырып, дистиллерлі сұйықтықты натрий сульфатымен өндеудің мүмкіндігі дәлелденді. Жүргізілген кешені зерттеулер нәтижесінде кальций хлоридінің натрий сульфатымен өзара әрекеттесу процесінің оңтайлы параметрлері, сондай-ақ натрий хлориді фильтратын және кальцийдің екісулы сульфаты – гипс $\text{CaSO}_4\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ тұнбасын алу шарттары анықталды.

Әдебиеттер

Курбанова А.А., Вафаев О.Ш. (2024) Способы переработки отходов производства кальцинированной соды методом Сольве. *Universum: технические науки: электрон. научн. журн.* 2024. DOI - 10.32743/UniTech.2024.118.1.16661

Орманова Г., Анарбаев А., Қабылбекова Б., Анарбаев Н. Натрий хлориді ерітінділерінен гипсті сүзу жылдамдығын зерттеу. *Academic Scientific Journal of Chemistry*, 2025, (2). — Б. 214–227. <https://doi.org/10.32014/2025.2518-1491.292>

Эшмаматова Д.Ш. (2023) Изучение возможностей технологических возможностей сбросного стока Кунгарадского содового завода. *Innovative Development in Educational Activities*, 2(5). — С. 393–399. <https://doi.org/10.5281/zenodo.7743375>

Zaihua Yang, Yongliang Chen, Quan Wang, Tiejun Chen, Xiaoqing Zhu and Shenxu Bao. (2024) The utilization of ammonia soda residue in building materials: A review *Journal of Building Engineering*, 98, DOI: 10.1016/j.jobbe.2024.111122

Wanling Zhong, Xin Wang, Yanqing Lai, Shenghai Yang, Shengming Jin and Kun Liu. (2024) A new strategy for the comprehensive utilization of wastewater from the production of soda ash by sodium sulfate-based ammonia-soda process. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 12, DOI: 10.1016/j.jece.2024.114198

Yonglan Zong, Jiantao Gong, Jilai Zhang, Youbo Su, Chenglei Hu, Tianguo Li, Yonglin Wua and Ming Jiang. (2023) Research status of soda residue in the field of environmental pollution control. *RSC Adv.*, 13, <https://doi.org/10.1039/D3RA04863B>

Gołub A., Piekutin J. (2020) Removal of inorganic impurities from wastewater after production of soda ash on selected sorbents. *Sci Rep* 10, 4624. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-61429-w>

Wang Q., Huang W., Liang Y., Li C., Lai M., Sun J. (2022) Eco-Sustainable Magnesium Oxychloride Cement Pastes Containing Waste Ammonia Soda Residue and Fly Ash. *Materials*, 15. <https://doi.org/10.3390/ma15175941>

CAO Jun-ya, ZHANG Li-xin, LUO Chen-hui, LIU Meng, TIAN Xing, SONG Shu-zhe. (2024) Research progress in production of soda ash from spent salts under background of "carbon dioxide emissions peaking and carbon neutrality. *Modern Chemical Industry*, Vol. 44 Issue (4) : 40-44. DOI: 10.16606/j.cnki.issn0253-4320.2024.04.008

Анарбаев А., Кабылбекова Б., Хусанов Ж., & Орманова Г. (2025) Күрделі фосфогуматты минералды тыңайтқыш алу процессін зерттеу. *Academic Scientific Journal of Chemistry*, (1), 5–20. <https://doi.org/10.32014/2025.2518-1491.262> (in Kazakh)

Xu W., Cheng H., Li E. et al. (2022) Formation of CaCO_3 hollow microspheres in carbonated distiller waste from Solvay soda ash plants. *Front. Chem. Sci. Eng.* 16. — P. 1659–1671. <https://doi.org/10.1007/s11705-022-2173-z>

Ibrić N., Ahmetović E. & Kravanja Z. (2021) Simultaneous optimisation of heat and power integration of evaporation–crystallisation systems: a case study of distiller waste from Solvay process. *Optim Eng* 22, 1853–1895. <https://doi.org/10.1007/s11081-021-09641-z>

Li Y., Song X., Chen G. et al. (2015) Extraction of hydrogen chloride by a coupled reaction-solvent extraction process. *Front. Chem. Sci. Eng.* 9, 479–487. <https://doi.org/10.1007/s11705-015-1512-8>

Taherdangkoo Reza, Tian Miaomiao, Sadighi Ali, Meng Tao, Yang Huichen, Butscher Christoph (2022) “Experimental data on solubility of the two calcium sulfates gypsum and anhydrite in aqueous solutions”, *Mendeley Data*, V1, doi: 10.17632/phmrfngcxn.1

Bilginer Aykut, Ogulcan, Canbek, Sinan, Turhan Erdogan, (2020) Activation of blast furnace slag with soda production waste. *J. Mater. Civ. Eng.* 32, 04019316 [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)MT.1943-5533.0002987](https://doi.org/10.1061/(ASCE)MT.1943-5533.0002987)

Dai C., Chen H., Song X., & Yu J. (2024) Coupled reaction and solvent extraction process to utilize distiller waste using N235-isoamylol system. *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects*, 46(1). — P. 10185–10198. <https://doi.org/10.1080/15567036.2020.1781299>

Roine A. (2002) Outokumpu HSC Chemistry for Windows. Chemical Reaction and Equilibrium Software with Extensive Thermochemical Database. Outokumpu Research OY: Pori, Finland, 2002. — 268 p.

References

Kurbanova A.A., Vafaev O.Sh. (2024) Sposoby pererabotki otkhodov proizvodstva kal'tsinirovannoy sody metodom Sol'va. [Methods for processing waste from soda ash production by the Solvay method]. *Universum: technical sciences: electronic scientific journal*, 2024. DOI-10.32743/UniTech.2024.118.1.16661 (in Russian)

Ormanova G., Anarbayev A., Kabylbekova B., Anarbayev N. Natrïy xloridi eritindilerinen gïpsti süzw jıldamdıgın zertteu. [Study of the rate of filtration of gypsum from sodium chloride solutions]. *Academic Scientific Journal of Chemistry*, 2025,(2). — P. 214–227. <https://doi.org/10.32014/2025.2518-1491.292> (in Kazakh)

Eshmatova D.Sh. (2023) Izucheniye vozmozhnostey tekhnologicheskikh vozmozhnostey sbrosnogo stoka Kungarskogo sodovogo zavoda. [Study of the technological capabilities of the discharge effluent of the Kungarad soda plant]. *Innovative Development in Educational Activities*, 2(5). — P. 393–399. <https://doi.org/10.5281/zenodo.7743375> (in Russian)

Zaihua Yang, Yongliang Chen, Quan Wang, Tiejun Chen, Xiaoqing Zhu and Shenxu Bao (2024) The utilization of ammonia soda residue in building materials: A review *Journal of Building Engineering*, 98, DOI: 10.1016/j.jobbe.2024.111122 (in English)

Wanling Zhong, Xin Wang, Yanqing Lai, Shenghai Yang, Shengming Jin and Kun Liu. (2024) A new strategy for the comprehensive utilization of wastewater from the production of soda ash by sodium sulfate-based ammonia-soda process. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 12, DOI: 10.1016/j.jece.2024.114198 (in English)

Yonglan Zong, Jiantao Gong, Jilai Zhang, Youbo Su, Chenglei Hu, Tianguo Li, Yonglin Wua and Ming Jiang. (2023) Research status of soda residue in the field of environmental pollution control. *RSC Adv.*, 13, <https://doi.org/10.1039/D3RA04863B> (in English)

Golub A., Piekutin J. (2020) Removal of inorganic impurities from wastewater after production of soda ash on selected sorbents. *Sci Rep* 10. — 4624 p. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-61429-w> (in English)

Wang Q., Huang W., Liang Y., Li C., Lai M., Sun J. (2022) Eco-Sustainable Magnesium Oxychloride Cement Pastes Containing Waste Ammonia Soda Residue and Fly Ash. *Materials*, 15. <https://doi.org/10.3390/ma15175941> (in English)

CAO Jun-ya, ZHANG Li-xin, LUO Chen-hui, LIU Meng, TIAN Xing, SONG Shu-zhe. (2024) Research progress in production of soda ash from spent salts under background of "carbon dioxide emissions peaking and carbon neutrality. *Modern Chemical Industry*, Vol. 44 Issue (4) : 40-44. DOI: 10.16606/j.cnki.issn0253-4320.2024.04.008 (in English)

Anarbayev A., Kabyrbekova B., Khusanov Zh., & Ormanova G. (2025) Kүрделі фосфогуматті минералді тиңайтқыш алw процессін зерттеу [Study of the process of obtaining complex phosphohumate mineral fertilizer. *Academic Scientific Journal of Chemistry*], (1). — P. 5–20. <https://doi.org/10.32014/2025.2518-1491.262> (in Kazakh)

Xu W., Cheng H., Li E. et al. (2022) Formation of CaCO₃ hollow microspheres in carbonated distiller waste from Solvay soda ash plants. *Front. Chem. Sci. Eng.* 16. — P. 1659–1671. <https://doi.org/10.1007/s11705-022-2173-z> (in English)

Ibrić N., Ahmetović E. & Kravanja Z. (2021) Simultaneous optimisation of heat and power integration of evaporation–crystallisation systems: a case study of distiller waste from Solvay process. *Optim Eng* 22. — P. 1853–1895. <https://doi.org/10.1007/s11081-021-09641-z> (in English)

Li Y., Song X., Chen G. et al. (2015) Extraction of hydrogen chloride by a coupled reaction-solvent extraction process. *Front. Chem. Sci. Eng.* 9, 479–487. <https://doi.org/10.1007/s11705-015-1512-8> (in English)

Taherdangkoo Reza, Tian Miaomiao, Sadighi Ali, Meng Tao, Yang Huichen, Butscher Christoph (2022) “Experimental data on solubility of the two calcium sulfates gypsum and anhydrite in aqueous solutions”, *Mendeley Data*, V1, doi: 10.17632/phmrfngcxn.1(in English)

Bilginer Aykut, Ogulcan, Canbek, Sinan, Turhan Erdogan, (2020). Activation of blast furnace slag with soda production waste. *J. Mater. Civ. Eng.* 32, 04019316 [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)MT.1943-5533.0002987](https://doi.org/10.1061/(ASCE)MT.1943-5533.0002987) (in English)

Dai C., Chen H., Song X., & Yu J. (2024) Coupled reaction and solvent extraction process to utilize distiller waste using N235-isoamylol system. *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects*, 46(1). — P. 10185–10198. <https://doi.org/10.1080/15567036.2020.1781299> (in English)

Roine A. (2002) Outokumpu HSC Chemistry for Windows. Chemical Reaction and Equilibrium Software with Extensive Thermochemical Database. Outokumpu Research OY: Pori, Finland, 2002. — 268 p. (in English)

© **Zh.B. Rakhimberlinova¹, A. Zhorabek^{1*}, A. Bailen², M. Kaiyrbaeva²,
A. Mendibayeva³, 2025.**

¹Abylkas Saginov Karaganda technical university, Karaganda, Kazakhstan;

²Karaganda National Research University named after Academician E.A. Buketov,
Karaganda, Kazakhstan;

³ Institute of Organic Synthesis and Coal Chemistry, of the Republic of Kazakhstan,
Karaganda, Kazakhstan.

E-mail: aia86@mail.ru

INVESTIGATION OF THE POSSIBILITIES OF OBTAINING ULTRADISPERSED COPPER PARTICLES IN AQUEOUS SOLUTIONS

Rakhimberlinova Zhanara — Candidate of Chemical Sciences, Karaganda Technical University named after Abylkas Saginov, Karaganda, Kazakhstan,

E-mail: kargtu_tss@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3326-0998>;

Zhorabek Aigul — master of engineering and technology, «Abylkas Saginov Karaganda Technical University», Karaganda, Kazakhstan,

E-mail: aia86@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4309-9720>;

Bailen Aida — master, senior teacher of Karaganda National Research University named after Academician E.A. Buketov, Karaganda, Kazakhstan,

E-mail: aida_bailen@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0007-9024-0065>;

Kaiyrbaeva Marzhan — master, senior teacher of Karaganda National Research University named after Academician E.A. Buketov, Karaganda, Kazakhstan,

E-mail: m_kaiyrbaeva@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1964-9582>;

Mendibayeva Anel — PhD student, Institute of Organic Synthesis and Coal Chemistry of the Republic of Kazakhstan, Karaganda, Kazakhstan,

E-mail: anenyawa@mail.ru; <https://orcid.org/0000-0001-6123-3340>.

Abstract. This scientific article examines the possibilities of obtaining ultradisperse copper particles in aqueous solutions. At the present stage of scientific and technological development, nanotechnology is regarded as one of the most promising fields. In this regard, the state is interested in sustainable development and allocates substantial financial resources to the advancement of this area. In this study, ground samples of plant material—common wormwood (*Artemisia vulgaris* L.) and wheat grains (*Triticum durum*)—were used. The formation of copper nanoparticles was carried out using a phytochemical method, and their optical and catalytic properties, as well as their stability, were investigated. In addition, the effect of alternating electric current frequency (50–25,000 Hz) on the dynamics of particle formation and particle size was

analyzed. The described methods for producing metal nanoparticles in plant materials using alternating electric current demonstrate their potential for the development of technologies for producing metallic ash. Results. It was established that the sizes of the synthesized particles range from 36 to 2500 nm, with the main fraction falling within the 200–250 nm range. Optimal pH values were determined: 8 for wormwood and 11 for wheat. It was proven that the influence of alternating electric current significantly accelerates the nanoparticle formation process and increases their stability. The obtained results confirm the effectiveness of the biological method for synthesizing copper nanoparticles and indicate the possibility of their application in ecology, medicine, and catalysis.

Keywords: copper nanoparticles, aqueous solutions, phytochemical reduction, wormwood (*Artemisia vulgaris* L.), wheat (*Triticum durum*), ultradispersed particles, alternating electric current

© Ж.Б. Рахимберлинова¹, А. Жорабек^{1*}, А. Байлен², М. Қайырбаева²,
Ә. Мендібаева³, 2025.

¹Әбілқас Сағынов атындағы Қарағанды техникалық университеті,
Қарағанды, Қазақстан;

²Академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды ұлттық зерттеу университеті,
Қарағанды, Қазақстан;

³Қазақстан Республикасының органикалық синтез және көмір химиясы
институты, Қарағанды, Қазақстан.
E-mail: aia86@mail.ru

СУЛЫ ЕРІТІНДІЛЕРДЕГІ МЫСТЫҢ УЛЬТРОДИСПЕРСТІ БӨЛШЕКТЕРІН АЛУ МҮМКІНДІКТЕРІН ЗЕРТТЕУ

Рахимберлинова Жанара — химия ғылымдарының кандидаты, Әбілқас Сағынов атындағы Қарағанды техникалық университеті, Қарағанды, Қазақстан,
E-mail: kargtu_tss@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3326-0998>;

Жорабек Айгуль — Әбілқас Сағынов атындағы Қарағанды техникалық университетінің химия және химиялық технология кафедрасының аға оқытушысы, Қарағанды, Қазақстан,
E-mail: aia86@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4309-9720>;

Байлен Аида — магистр, Академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды ұлттық зерттеу университетінің аға оқытушысы, Қарағанды, Қазақстан,
E-mail: aida_bailen@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0007-9024-0065>;

Қайырбаева Маржан — магистр, Академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды ұлттық зерттеу университетінің аға оқытушысы, Қарағанды, Қазақстан,
E-mail: m_kaiyrbaeva@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1964-9582>;

Мендібаева Әнел – PhD студент, Қазақстан Республикасының органикалық синтез және көмір химиясы институты, Қарағанды, Қазақстан,
E-mail: anenyawa@mail.ru; <https://orcid.org/0000-0001-6123-3340>.

Аннотация. Бұл ғылыми мақалада сулы ерітінділерде мыстың ультрадисперсті бөлшектерін алу мүмкіндіктері қарастырылған. Қазіргі таңда ғылым мен техниканың даму сатысы кезінде нанотехнология үлкен үміт күттіретін бағыттың

бірі болып табылады. Сондықтан мемлекетіміз осы саланы дамытуға қаншама қаражат жұмсауда. Микробөлшектердің қозғалысымен байланысты технологиялық үрдістердің орнына, нанобөлшекті материалдармен және өлшемдері бір микроннан кіші заттармен жұмыс істеуге мүмкіндік береді. Нано бөлшектерді биологиялық тестілеу кезінде өсімдік объектері артықшылыққа ие болған, себебі, олар сыртқы әлсіз қарқынды факторларға қарасты жоғары сезімталдылық, ал кейде шамадан тыс шығатын сезімталдылық қатарлары болады. Зерттеуде өсімдік тектес кәдімгі жусанның (*Artemisia vulgaris* L.) және бидай дәндерінің (*Triticum durum*) ұнтақталған үлгінділері алынған. Мыс нанобөлшектерінің түзілуі фитохимиялық әдіспен жүзеге асырылып, олардың оптикалық, каталитикалық қасиеттері мен тұрақтылығы зерттелді. Сонымен қатар айнымалы электр тогының (50–25000 Гц) жиілігінің бөлшектердің түзілу динамикасына және өлшеміне әсері талданды. Электр айнымалы тоқты пайдалану өсімдік жасушаларында нанобөлшектердің түзілу процестерін күшейтеді: коллоидтың металл бөлшектерінің пішіні мен өлшемдері тотықсыздандырығыштың табиғатымен, өңдеу ұзақтығымен, ЕРТ жиілігімен анықталады. Өсімдік материалдарындағы электрлік айнымалы ток арқылы металл нанобөлшектерін алудың жоғарыда сипатталған тәсілдері олардың металл күлін өндіру технологияларын құрудағы перспективаларын көрсетеді. Сулы ерітінділердегі мыстың нанобөлшектерінің ауыспалы электр тогының өрісінде фотохимиялық әдіспен қалпына келтіру синтезі біздің жұмысымыз болып табылады. Нәтижелері. Синтезделген бөлшектердің өлшемдері 36–2500 нм аралығында екені анықталды, ал негізгі үлесі 200–250 нм диапазонына сәйкес келеді. Опти-малды рН мәндері белгіленді: жусан үшін – 8, бидай үшін – 11. Айнымалы электр тогының әсері нанобөлшектердің түзілу процесін едәуір жеделдететіні және олардың тұрақтылығын арттыратыны дәлелденді. Алынған нәтижелер мыстың нанобөлшектерін биологиялық әдіспен синтездеудің тиімділігін растайды және оларды экологияда, медицинада, катализде қолдануға мүмкіндік береді.

Түйін сөздер: мыс нанобөлшектері, сулы ерітінділер, фитохимиялық тотықсыздандыру, жусан (*Artemisia vulgaris* L.), бидай (*Triticum durum*), ультрадисперсті бөлшектер, айнымалы электр тогы

© Ж.Б. Рахимберлинова¹, А. Жорабек^{1*}, А. Байлен², М. Кайырбаева²,
А. Мендибаева³, 2025.

¹Карагандинский технический университет имени Абылкаса Сагинова,
Караганда, Казахстан;

²Карагандинский национальный исследовательский университет имени
академика Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан;

³Институт органического синтеза и углехимии РК, Караганда, Казахстан.
E-mail: aia86@mail.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТЕЙ ПОЛУЧЕНИЯ УЛЬТРАДИСПЕРСНЫХ ЧАСТИЦ МЕДИ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ

Рахимберлинова Жанара — кандидат химических наук, Карагандинский технический университет имени Абылкаса Сагинова, Караганда, Казахстан,
E-mail: kargtu_tss@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3326-0998>;

Жорабек Айгуль — ст. преподаватель кафедры химии и химических технологии Карагандинского технического университета имени Абылкаса Сагинова., Караганда, Казахстан,
E-mail: aia86@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4309-9720>;

Байлен Аида — магистр, старший преподаватель кафедры «Неорганической и технической химии» Карагандинского национального исследовательского университета имени академика Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан,
E-mail: aida_bailen@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0007-9024-0065>;

Кайырбаева Маржан — магистр, старший преподаватель Карагандинского национального исследовательского университета имени академика Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан,
E-mail: m_kaiyrbaeva@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1964-9582>;

Мендибаева Анель — PhD студент, Институт органического синтеза и углехимии РК, Караганда, Казахстан,
E-mail: anenyawa@mail.ru; <https://orcid.org/0000-0001-6123-3340>.

Аннотация. В данной научной статье рассматриваются возможности получения ультрадисперсных частиц меди в водных растворах. На современном этапе развития науки и техники нанотехнологии являются одним из наиболее перспективных направлений, что обусловлено интересом государства к устойчивому развитию и направлением значительных финансовых ресурсов на исследование и внедрение наноматериалов. Переход от традиционных технологических процессов, связанных с движением микрочастиц, к работе с наноструктурированными объектами размером менее одного микрона открывает принципиально новые возможности для получения материалов с уникальными свойствами. В исследовании были использованы измельчённые образцы растительного сырья — полыни обыкновенной (*Artemisia vulgaris* L.) и зерен пшеницы (*Triticum durum*). Формирование наночастиц меди осуществлялось фитохимическим методом, при этом исследованы их оптические и каталитические свойства, а также устойчивость. Дополнительно проанализировано влияние частоты переменного электрического тока (50–25000 Гц) на динамику формирования и размерные характеристики частиц. Показано, что применение переменного электрического тока усиливает процессы образования наночастиц

в растительных биосистемах. Описанные методы получения металлических наночастиц в растительных экстрактах с использованием переменного электрического тока демонстрируют перспективность их применения при разработке технологий получения металлической золы. В рамках настоящей работы выполнен фотохимический восстановительный синтез наночастиц меди в водных растворах в поле переменного электрического тока. Результаты. Установлено, что размеры синтезированных частиц находятся в диапазоне 36–2500 нм, при этом основная их доля соответствует интервалу 200–250 нм. Определены оптимальные значения pH: для полыни — 8, для пшеницы — 11. Доказано, что воздействие переменного электрического тока существенно ускоряет процесс формирования наночастиц и повышает их стабильность. Полученные результаты подтверждают эффективность биологического метода синтеза частиц меди и свидетельствуют о возможности их применения в экологии, медицине и катализе.

Ключевые слова: медные наночастицы, водные растворы, фотохимическое восстановление, полынь (*Artemisia vulgaris* L.), пшеница (*Triticum durum*), ультрадисперсные частицы, переменный электрический ток

Кіріспе. Нанотехнология қазіргі заманда ғылым мен техниканың қарқынды дамып келе жатқан бағыттарының бірі болып табылады. Әсіресе металл нанобөлшектері ерекше қызығушылық тудырып отыр, себебі олардың каталитикалық, оптикалық және биологиялық қасиеттері кең қолдану мүмкіндіктерін береді. Мыс нанобөлшектері қолжетімділігімен, арзан бағасымен және биологиялық белсенділігімен ерекшеленеді. Сондықтан оларды экологиялық таза әрі тиімді әдістермен синтездеу өзекті мәселе болып табылады. Дәстүрлі химиялық әдістерде уытты реагенттердің қолданылуы қоршаған ортаға теріс әсер етеді, сондықтан баламалы экологиялық жолдарды табу маңызды. Соңғы жылдары өсімдік тектес шикізаттардан бөлінетін биологиялық белсенді қосылыстарды пайдалана отырып металл нанобөлшектерін алу тәсілі, яғни фотохимиялық синтез әдісі кеңінен зерттелуде. Бұл әдістің артықшылығы – қарапайымдылығы, экологиялық қауіпсіздігі және шығыны аз болуы. Зерттеуде мыс иондарының сулы ерітінділерінде нанобөлшектердің түзілуін бақылау арқылы олардың тұрақтылығы, түзілу шарттары және қасиеттері айқындалды. Сонымен қатар айнымалы электр тогының әсері қарастырылып, бөлшектердің түзілу динамикасына жиіліктің ықпалы бағаланды. Өсімдіктер өз беттерінде, әрі иондардың ену орындарынан алыс жатқан әр түрлі органдарда да металл иондарын тотықсыздандыра алатындығы бұрыннан белгілі. Осыған орай өсімдіктер дәстүрлі әдістер тиімсіз болған жағдайда кен орындарынан немесе карьерлерден бағалы металдарды алу үшін қолданылады. Қазіргі заманда мұндай процесс фитоөндіру деп аталады. Жиналған металдарды жинақталған өсімдіктерден агломерациялық немесе балкыту әдістерін қолдану арқылы алуға болады. Өсімдіктердегі металдардың биоаккумуляция процесін зерттеудің көрсеткені – металдар көбінесе нанобөлшектер түрінде жинақталады. Мысалы, *Brassica juncea* (жапырақтық қыша) мен *Medicago sativa* (отырғызылған люцерна)

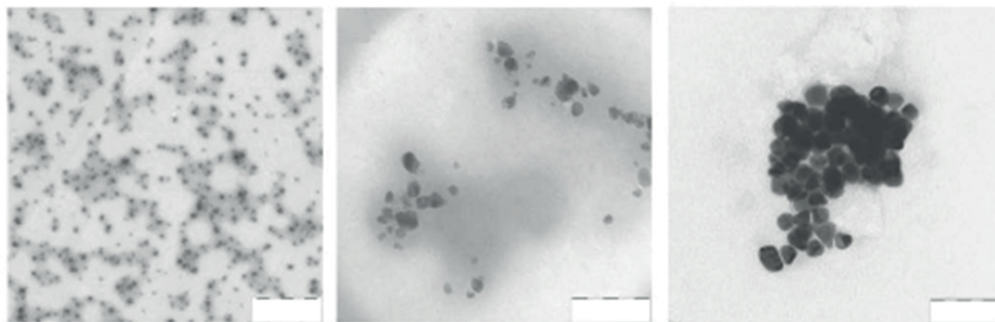
өсімдіктері өлшемі 50 нм болатын және өз салмағынан 13,6% мөлшерінде болатын күміс нанобөлшектерін күміс нитратын субстрат ретінде қолданып өсірген кезде жинақтаған (Anderson et.al., 2013). Өлшемі 4 нм болатын алтын икосаэдрлері *Medicagosativa Medicagosativa* өсімдігінде анықталған, өлшемі 2 нм болатын мыстың жартылай сфералық бөлшектері *Iris pseudocorus* өсімдігінде сәйкес металдардың тұздарынан тұратын субстраттарда өсірілген жағдайда анықталды.

Өсімдік тұтастай металдардың нанобөлшектерін өндіру кезінде қолданылатындығы анық. Сонымен қатар берілген технологияны өнеркәсіпте қолданған кезде есепке алынуы тиіс белгілі бір шектеулер бар. Біріншіден, нанобөлшектердің өлшемдері мен пішіндері олардың өсімдіктердегі орналасу орнына байланысты ерекшеленуі мүмкін, бұл өз кезегінде әр түрлі органдарда металл иондарының құрамындағы айырмашылықтарына және нанобөлшектердің ену мүмкіндігіне тәуелді болуы мүмкін. Өз кезегінде бұл жағдайлар металдың бар болған нанобөлшектердің айналасында біртіндеп тұнбаға түсу жылдамдығына, сонымен қатар нуклеацияның жаңа актілеріне (нанобөлшектердің түзілу инициациялары) де әсер етуі мүмкін (Losfeld et.al., 2012). Нанобөлшектердің өлшемдері мен морфологияларының әртектілігі тұтас бір өсімдікте пайда болып, қажетті өлшемге және пішінге ие болатын бөлшектер белгілі бір мақсатта қажет болғанда олардың қолданысын қиындатуы мүмкін. Екіншіден, өсімдік тектес материалдан нанобөлшектерді ұтымды түрде алу мәселесі орын алады. Және де тағы бір мәселе – тұтас бір өсімдікте синтезделген нанобөлшектер пішіндерінің нарықтық талаптарға сай келе алмауы. Осыған орай соңғы жылдары *in vitro* әдістері белсенді түрде дамуда, онда металл иондарын нанобөлшектер түзілгенше биототықсыздандыру үшін өсімдік тектес экстрактілер қолданылады. Мұндай әдістер нанобөлшектердің өлшемі мен пішінің жақсылап бақылауды қамтамасыз етеді (мысалы, рН ортасының өзгеруі арқылы немесе реакцияны жүргізу температурасының өзгеруі арқылы), сонымен қатар әрі қарай жеңіл түрде тазалануына ықпал етеді. Бұл процесс тұтас бір өсімдіктердегі нанобөлшектердің синтезіне қарағанда әлдеқайда жылдам жүретіндігі маңызды, себебі реакция барлық өсімдік бойымен металл иондарының сіңіріліп таралуына қажет болатын тежеусіз лезде өтеді. Мұндай әдістің тиімділігі көптеген өсімдіктерден алынған экстрактілерді мыс,алтын, күміс, платина, темір және басқа да көптеген металдардың тұздары мен қышқылдарымен қоса қолдану арқылы көрсетіледі.

Мысалы, *Pelargoniumgraveolens* (хошиісті герань) экстрактілері алтын иондарын өлшемі 20-40 нм болатын он қабырғалы икосаэдрлық пішіндегі нанобөлшектерге дейін тотықсыздандырып, оларды тұрақтандырды, ал *Symborogonflexuosus* (лимондық сорго) экстрактілерінде өлшемі 0,05-18 мкм болатын алтын наносфералар мен наноүшбұрыштар синтезделген (Manceau et.al., 2008). *Azadirachta Indica* өсімдігінің экстрактісі тетрахлоралтын қышқылын (HAuCl_4) өлшемі 50-100 нм болатын алтын тегіс үшбұрыштарға және алтыбұрыштарға дейін тотықсыздандыру үшін қолданылады. Бұл жұмыста сонымен қатар *Azadirachta Indica* нәрі күміс нитратын өлшемі 5-25 нм болатын полидисперсті сфералық нанобөлшектерге дейін тотықсыздандыра алады. *Aloe barbadensis*

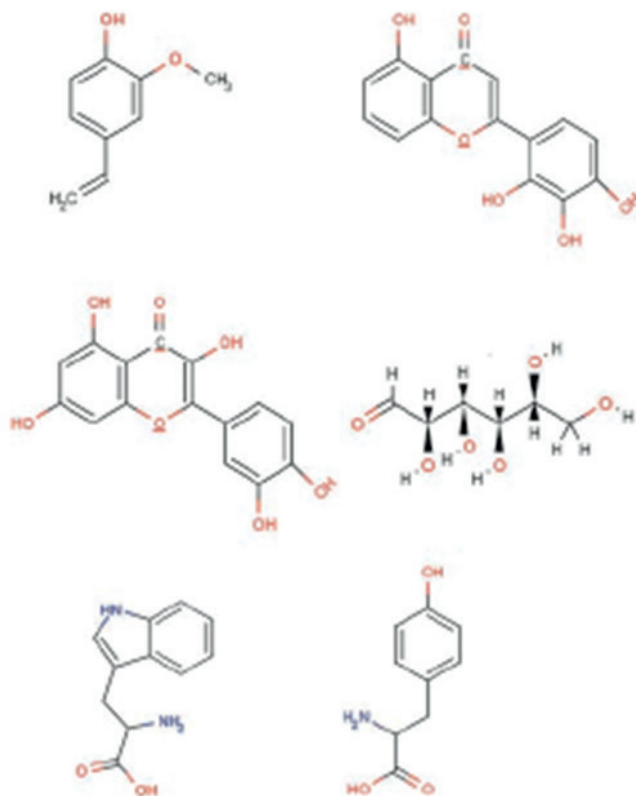
жапырақтарының экстрактісі өлшемі 5-50 нм болатын In_2O_3 кубтық бөлшектерді өндіруде қолданылады (Mirgorod, 2015). ИҚ-Фурьеспектроскопия әдісін қолдана отырып қанттар, терпеноидтар, полифенолдар, алкалоидтар, фенолдық қышқылдар және ақуыздар секілді өсімдік тектес метаболиттер металл иондарын нанобөлшектерге дейін тотықсыздандыруда және олардың тұрақтылығын әрі қарай қамтамасыз етудегі рөлі зор екендігін көрдік. Нанокұрылымдардың өлшемі мен морфологиясын бақылау осы биомолекулалардың металл иондарымен әрекеттесуімен өзара байланысты болуы мүмкін деген тұжырым айтылған (Nemutandani et. Al., 2006). Әр түрлі өсімдіктердің концентрациялары мен осы биологиялық белсенді компоненттердің құрамдары да алуан түрлі болады. Көріп тұрғанымыздай, осылайша сипатталған нанобөлшектердің морфологиялық әртүрлілігін жартылай түсіндіруге болады: үшбұрыштар, алтыбұрыштар, бесбұрыштар, кубтар, сфералар, эллипсоидалар, наножелілер, наностерженьдер. Әр түрлі өсімдіктердің экстрактілеріндегі әр түрлі металдардың иондарынан синтезделетін нанобөлшектердің морфологиялары мен өлшемдерінің әртүрлілігі толықтай шолуларда сипатталып жазылған.

Сурет 1-де мысал ретінде *Nicotianabenthāmiana* экстрактілерінде түзілген күміс, мыс және алтын нанобөлшектерінің суреттері келтірілген.



Сурет 1 — *Nicotiana benthamiana* экстрактілерінде бөлме температурасында синтезделген темір (А), күміс (Б) және алтын (В) нанобөлшектерінің электрондық микрофотографиялары

Жоғарыда айтылып кеткендей, терпеноидтар, полифенолдар, қанттар, алкалоидтар, фенолдық қышқылдар, ақуыздар секілді өсімдіктердің әр түрлі метаболиттері металл иондарынан нанобөлшектер түзіле отырып биототықсыздануында маңызды рөл атқарады. Металл иондарын тотықсыздандыра алатын қосылыстардың негізгі типтерінің мысалдары сурет 2-де көрсетілген.



Сурет 2 — Металл иондарын тотықсыздандыра алатын қосылыстардың негізгі типтерінің мысалдар

Материалдар мен зерттеу әдістері. Зерттеуде мыс иондары бар сулы ерітінділер пайдаланылды. Тотықсыздандырғыш қасиеті бар өсімдік тектес материалдар ретінде кәдімгі жусанның (*Artemisia vulgaris* L.) және бидайдың (*Triticum durum*) ұнтақталған үлгілері алынды. Бұл өсімдіктер құрамында әртүрлі биологиялық белсенді қосылыстар, фенолдар, қышқылдар және флавоноидтар болғандықтан, олар металл иондарын тотықсыздандыруға қабілетті. Эксперимент барысында өсімдік ұнтақтары мыс ерітінділеріне енгізіліп, белгілі уақыт аралығында реакция барысы бақыланды. Алынған үлгілер оптикалық әдістермен талданып, нанобөлшектердің түзілуі олардың ерітіндідегі түсінің өзгеруі арқылы да байқалды (Singaravelu et.al., 2007). Нанобөлшектердің түзілуіне pH мәнінің әсері қарастырылды, бұл үшін әртүрлі ортада тәжірибелер жүргізілді. Сонымен қатар айнымалы электр тогының жиілігі 50-ден 25000 Гц аралығында өзгертіліп, оның бөлшектердің түзілу жылдамдығына және өлшеміне әсері зерттелді. Алынған деректер арнайы кестелерде көрсетіліп, салыстырмалы түрде талданды.

Нәтижелер және талқылаулар. Зерттеу барысында мыс және палладий иондарының сулы ерітінділерінде өсімдік тектес тотықсыздандырғыштардың әсерінен нанобөлшектердің түзілуі байқалды. Алынған мәліметтер өсімдік

шикізатының табиғаты бөлшектердің түзілу процесіне және олардың өлшеміне елеулі әсер ететінін көрсетті.

Алғашқы тәжірибелерде әртүрлі өсімдіктер қолданылып, алынған бөлшектердің өлшемдері Nano-S90 лазерлі анықтауышында лазерлі дифракция әдісімен өлшенді.

Кесте 1. Бөлшектер өлшемдерін Nano-S90 лазерлі анықтауышында лазерлі дифракция әдісімен сулы ерітінділерден палладийдің тотықсызданған бөлшектерінің өлшемін анықтау нәтижелері

Өсімдік түрі	Size, r, nm	% Intensity	Width, r, nm
Пекин	185.2	98.1	56.59
	2683	2.9	165.4
Қызыл	147.5	100	39.85
Түсті	189.8	96.3	84.60
	2670	3.7	181.7
Кәдімгі орамажапырақ	193.3	100	51.93
Брокколе	145.4	96.9	63.85
	2887	3.1	163.3
Жусан	128.8	98.6	54.26
	2385	1.4	368.8
Бидай дәндері	232.8	88.3	76.52
	36.02	7.1	7.031
	2786	6.6	294.8

Бұл кестеден көргеніміздей, ең ұсақ бөлшектер жусан мен бидай дәндері қолданылған кезде түзілді. Бұл олардың құрамында нанобөлшектерді тұрақтандыруға қабілетті биологиялық белсенді қосылыстардың бар екендігін дәлелдейді. Сонымен қатар пішін мен өлшемдердің әркелкі болуы өсімдік экстрактілерінің құрамындағы компоненттердің әртүрлілігіне байланысты.

Өсімдік тектес сорбенттердің сапалық және сандық химиялық құрамы этанолды экстракциялар арқылы анықталды.

Кесте 2. Жусанның этанолды экстрактісінің жеке химиялық құрамы

№	RT	Қосылыстар	Мас. үлесі, %
1	3.495	Oxime-, methoxy-phenyl-, Oxime-, метокси-фенил-	23.08
2	7.487	1-(2,5-Dimethoxyphenyl)-propanol, 1-(2,5-диметоксифенил)пропанол	76.92

Кесте 2-ден көріп отырғанымыздай, жусан экстрактісінде 1-(2,5-диметоксифенил)-пропанол қосылысы басым болып шықты. Бұл қосылыс мыс пен палладий иондарын тотықсыздандыруда негізгі рөл атқарады.

Кесте 3. Бидай дәндерінің этанолды экстрактісінің жеке химиялық құрамы

№	RT	Қосылыстар	Мас. үлес, %
1	3.495	4-Ethylbenzoic acid, dodec-9-ynyl, 4-метил-бензойной кислоты, додец-9-инил,	4.15

2	3.859	3H-Pyrazol-3-one, 2,4-dihydro-5-me, 3H-пиразол-3-он, 2,4-дигидро-5-я	2.74
3	4.212	Butane, 2,2'-thiobis-, Бутан, 2,2'-thiobis-,	13.00
4	6.671	Borneol, борнеол	5.47
5	7.476	Silane, dimethoxymethylphenyl-, Силан, диметил метил фенил,	3.39
6	8.027	Thymol , Тимол	16.18
7	8.347	Pyrazine, 2,3-diethyl-5-methyl-, Пиразин, 2,3-диэтил-5-метил-	9.23
8	17.820	Arobidos, аробидос	7.27
		Барлығы	61.43

Бидай дәндерінің экстрактісінде әртүрлі органикалық қосылыстар табылды, олардың ішінде тимол және пиразин қосылыстары айтарлықтай мөлшерде анықталды. Бұл қосылыстардың болуы бидай экстрактісінің тотықсыздандырғыш белсенділігін арттырып, металл иондарын нанобөлшектерге айналдыруда маңызды рөл атқаратынын дәлелдейді.

Келесі тәжірибелерде айнымалы электр тогының жиілігінің әсері қарастырылды.

Кесте 4. Айнымалы ток жиілігінің мыс мысалындағы ерітіндідегі алынған металл бөлшектерінің өлшеміне әсері

v, Гц	Тотықсыздандырғыш	
	Жусан	Бидай
	r (бөлшектер өлшемі), нм	R (бөлшектер өлшемі), нм
50	185	267
500	265	205
5000	129	477
10000	340	212
15000	92	425
20000	134	188
25000	318	265

Бұл кестеден көріп отырғанымыздай, электр тогының жиілігі артқан сайын бөлшектердің түзілу уақыты айтарлықтай қысқарып, олардың өлшемі өзгереді. Жиілігі 500 Гц кезінде гиперхромды эффект байқалып, бұл бөлшектердің концентрациясының күрт өсуін білдіреді. Сонымен қатар, pH көрсеткіштерінің оптималды мәндері де анықталды: жусан үшін pH = 8, бидай үшін pH = 11. Бұл деректер бөлшектердің түзілуіне тек электр тогы ғана емес, сонымен бірге ортаның қышқылдығы да елеулі ықпал ететінін көрсетеді.

Жалпы алғанда, алынған нәтижелер көрсеткендей, өсімдік тектес тотықсыздандырғыштарды қолдану мыс және палладий иондарын нанобөлшектерге айналдырудың тиімді әдісі болып табылады. Жусан мен бидай дәндері ерекше белсенділік танытып, салыстырмалы түрде ұсақ әрі тұрақты бөлшектерді түзді. Айнымалы электр тогының қолданылуы процесті жылдамдатып қана қоймай, алынған бөлшектердің сапасына да оң ықпал етті.

Қорытынды.

1. Зерттеу нәтижелері көрсеткендей, өсімдік тектес тотықсыздандырғыштарды (жусан және бидай дәндері) қолдану мыс және палладий иондарын нанобөлшектерге дейін тотықсыздандырудың тиімді әдісі болып табылады. Жусан мен бидай экстрактілерінің құрамындағы биологиялық белсенді қосылыстар бөлшектердің түзілуін жылдамдатып, олардың тұрақтылығын қамтамасыз етеді.

2. Лазерлік дифракция әдісімен алынған мәліметтер бойынша бөлшектердің өлшемдері 36–2500 нм аралығында болды. Негізгі үлесі 200–250 нм аралығына сәйкес келді. Оптималды орта параметрлері анықталды: жусан үшін $\text{pH} = 8$, бидай үшін $\text{pH} = 11$.

3. Айнымалы электр тогы бөлшектердің түзілу динамикасына айтарлықтай әсер ететіні дәлелденді. Жиілігі 500 Гц кезінде бөлшектердің концентрациясы артып, түзілу уақыты шамамен 15 есе қысқарды. Бұл электр өрісінің өсімдік шикізатындағы органикалық қосылыстардың электрондық донорлық қабілетін күшейтетінімен түсіндіріледі.

4. Алынған нәтижелер биологиялық жолмен синтезделген нанобөлшектердің экологияда, медицинада және катализ процестерінде қолданылу мүмкіндіктерін айқындап берді.

Әдебиеттер

Anderson C.W.N., Bhatti S.M., Gardea-Torresdey J., Parsons J. (2013) In vivo effects of copper and silver on synthesis of gold nanoparticles inside living plants. *ACS Sustainable Chem Eng* 1: 640–648.

Astruc D., Lu F., Aranzas J.R. (2005) Nanoparticles as Recyclable Catalysts: The Frontier between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis. *Angew Chem Int Ed* 44: 7852–7872.

Bennett J.A., Creamer N.J., Deplanche K., Macaskie L.E., Shannon I.J., et al. (2010) Palladium supported on bacterial biomass as a novel heterogeneous catalyst: A comparison of Pd/Al₂O₃ and bio-Pd in the hydrogenation of 2-pentyne. *Chem Eng Sci* 65: 282–290.

Harris A.T., Bali R. (2008) On the formation and extent of uptake of silver nanoparticles by live plants. *J Nanopart Res* 10: 691–695.

Haverkamp R.G., Marshall A.T. (2009) The mechanism of metal nanoparticle formation in plants: limits on accumulation. *J Nanopart Res* 11: 1453–1463.

Iravani S. (2011) Green synthesis of metal nanoparticles using plants. *Green Chem* 13: 2638.

Losfeld G., Escande V., La Blache P.V., L'Huillier L., Grison C. (2012) Design and performance of supported Lewis acid catalysts derived from metal contaminated biomass for Friedel-Crafts alkylation and acylation. *Catal Today* 189: 111–116.

Manceau A., Nagy K.L., Marcus M.A., Lanson M., Geoffroy N., et al. (2008) Formation of metallic copper nanoparticles at the soil-root interface. *Environ Sci Technol* 42: 1766–1772.

Миргород Ю.А. Нанотехнологии и экология. ISBN 978-5-9907514-7-7. — Том 2. — 24–26 ноября 2015 года.

Nemutandani T., Dutertre D., Chimuka L., Cukrowska E., Tutu H. (2006) The potential of *Berkheya coddii* for phytoextraction of nickel, platinum, and palladium contaminated sites. *Toxicol Environ Chem* 88: 175–185.

Помайгайло А. Д., Розенберг А. С., Уфлянд И. Е. Наночастицы металлов в полимерах. — М., 2000.

Singaravelu G., Arockiamary J.S., Ganesh Kumar V., Govindaraju K. (2007) A novel extracellular synthesis of monodisperse gold nanoparticles using marine alga, *Sargassum wightii* Greville. *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces* 57: 97–101.

Tyanakh S., Baikenov M.I., Gulmaliev A.M., Ma, Feng-Yun, Musina G., Khamitova T.O., & Bolatbay A.N. (2022) Kinetics of Thermolysis of a Low-Temperature Tar in the Presence of a Catalyzer Agent with Deposited Metals, *Bulletin of the University of Karaganda Chemistry*. — № 4(108). — P. 89-98. DOI 10.31489/2022Ch4/4-22-19

Tyanakh S., Baikenov M.I., Ma Feng Yun, Khamitova T.O., Balpanova N.Zh., Tulebayeva B., Kyzkenova A., Karimova A.B., Rakhimzhanova N.Zh., Kochegina E.V. (2023) Kinetic of oil sludge thermolysis process in presence of nickel, cobalt and iron-supported microsilicate, Polish Journal of Chemical Technology. — Vol. 23(3). — P.101-109. DOI 10.2478/pjct-2023-0030

Yang X.E., Long X.X., Ye H.B., He Z.L., Calvert D.V., et al. (2004) Cadmium tolerance and hyperaccumulation in a new Zn-hyperaccumulating plant species (*Sedum alfredii* Hance). Plant Soil 259: 181–189.

References

Anderson C.W.N., Bhatti S.M., Gardea-Torresdey J., Parsons J. (2013) In vivo effects of copper and silver on synthesis of gold nanoparticles inside living plants. ACS Sustainable Chemistry & Engineering 1: 640–648. (in English)

Astruc D., Lu F., Aranzaes J.R. (2005) Nanoparticles as Recyclable Catalysts: The Frontier between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis. Angewandte Chemie International Edition 44: 7852–7872. (in English)

Bennett J.A., Creamer N.J., Deplanche K., Macaskie L.E., Shannon I.J., et al. (2010) Palladium supported on bacterial biomass as a novel heterogeneous catalyst: A comparison of Pd/Al₂O₃ and bio-Pd in the hydrogenation of 2-pentyne. Chemical Engineering Science 65: 282–290. (in English)

Harris A.T., Bali R. (2008) On the formation and extent of uptake of silver nanoparticles by live plants. Journal of Nanoparticle Research 10: 691–695. (in English)

Haverkamp R.G., Marshall A.T. (2009) The mechanism of metal nanoparticle formation in plants: limits on accumulation. J Nanopart Res 11: 1453–1463. (in English)

Iravani S. (2011) Green synthesis of metal nanoparticles using plants. Green Chemistry 13: 2638. (in English)

Losfeld G., Escande V., La Blache P.V., L'Huillier L., Grison C. (2012) Design and performance of supported Lewis acid catalysts derived from metal contaminated biomass for Friedel-Crafts alkylation and acylation. Catalysis Today 189: 111–116. (in English)

Manceau A., Nagy K.L., Marcus M.A., Lanson M., Geoffroy N., et al. (2008) Formation of metallic copper nanoparticles at the soil-root interface. Environmental Science & Technology 42: 1766–1772. (in English)

Mirgorod Yu.A. Nanotekhnologii i ekologiya [Nanotechnologies and ecology]. ISBN 978-5-9907514-7-7. — Vol. 2. — November 24–26, 2015. (in Russian)

Nemutandani T., Dutertre D., Chimuka L., Cukrowska E., Tutu H. (2006) The potential of Berkheya coddii for phytoextraction of nickel, platinum, and palladium contaminated sites. Toxicological & Environmental Chemistry 88: 175–185. (in English)

Pomaygailo A.D., Rozenberg A.S., Ufliand I.E. Nanochasticy metallov v polimerah [Metal nanoparticles in polymers]. — Moscow, 2000. (in Russian)

Singaravelu G., Arockiamary J.S., Ganesh Kumar V., Govindaraju K. (2007) A novel extracellular synthesis of monodisperse gold nanoparticles using marine alga *Sargassum wightii* Greville. Colloids and Surfaces B: Biointerfaces 57: 97–101. (in English)

Tyanakh S., Baikenov M.I., Gulmaliev A.M., Ma, Feng-Yun, Musina G., Khamitova T.O., & Bolatbay A.N. (2022) Kinetics of Thermolysis of a Low-Temperature Tar in the Presence of a Catalyzer Agent with Deposited Metals, Bulletin of the University of Karaganda Chemistry. — № 4(108). — P. 89-98. DOI 10.31489/2022Ch4/4-22-19 (in English)

Tyanakh S., Baikenov M.I., Ma Feng Yun, Khamitova T.O., Balpanova N.Zh., Tulebayeva B., Kyzkenova A., Karimova A.B., Rakhimzhanova N.Zh., Kochegina E.V. (2023) Kinetic of oil sludge thermolysis process in presence of nickel, cobalt and iron-supported microsilicate, Polish Journal of Chemical Technology. — Vol. 23(3). — P.101-109. DOI 10.2478/pjct-2023-0030 (in English)

Yang X.E., Long X.X., Ye H.B., He Z.L., Calvert D.V., et al. (2004) Cadmium tolerance and hyperaccumulation in a new Zn-hyperaccumulating plant species (*Sedum alfredii* Hance). Plant and Soil 259: 181–189. (in English)

© A. Takibayeva, L. Sultanova, A. Tussupova, Z. Omar,
A. Amanzholova, 2025.

NJSC «Karaganda Technical University named after Abylkas Saginov»,
Karaganda, Kazakhstan.

E-mail: aidana455.kz@mail.ru

MECHANISM, FEATURES OF THE AMINATION REACTION IN A SERIES OF LUPANE TRITERPENOIDS

Takibayeva Altynaray — Associate Professor, NJSC “Karaganda Technical University named after Abylkas Saginov”, Karaganda, Kazakhstan,

E-mail: altynarai81@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0536-0817>;

Sultanova Liliya — Candidate of Chemical Sciences (CSc), NJSC “Karaganda Technical University named after Abylkas Saginov”, Karaganda, Kazakhstan,

E-mail: sultanova-liliya@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9282-7982>;

Tussupova Akmaral — Senior Lecturer, NJSC “Karaganda Technical University named after Abylkas Saginov”, Karaganda, Kazakhstan,

E-mail: akmaral.tussupova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-6707-1194>;

Omar Zere — Master student, NJSC “Karaganda Technical University named after Abylkas Saginov”, Karaganda, Kazakhstan,

E-mail: zere.ommar@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0006-1370-2345>;

Amanzholova Aidana — Teacher, NJSC “Karaganda Technical University named after Abylkas Saginov”, Karaganda, Kazakhstan,

E-mail: aidana455.kz@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9245-7168>.

Abstract. The article studies effective methods for isolating some natural triterpenoids from domestic plants for subsequent synthesis of new biologically active derivatives based on them. Betulin was identified by TLC on Silufol plates and analyzed using IR spectroscopy, chromatography-mass spectroscopy. Qualitative and quantitative analysis of betulin was carried out by HPLC. From the endemic Kyrgyz birch "Betula Kirghisorum", the natural triterpenoid betulin was isolated for the first time. The synthesis of a phosphorylated derivative of betulin was carried out. Degree of implementation. Development of effective methods for isolation and production of biologically active derivatives based on betulin. Betulin isolated from Betula kirghisorum expands the idea of the inexhaustible possibilities of chemical transformation of triterpenoids and can be used both for large-scale production of new derivatives and chemical synthesis based on it. Application domain. Chemistry, medicine and pharmaceutical industry. Economic efficiency or significance of the work. This topic will allow us to reach the range of organic compounds that can form the basis for the creation of new substances and materials with unique consumer properties for the needs of the chemical industry

and medicine. The study of this compound is of great importance for its further transformations and modifications. The purposeful transformation of such natural biologically active substances leads to the emergence of completely new compounds that will have a wider range of action and be used in different areas.

Keywords: betulin, extraction, alcohol, thin-layer chromatography, IR spectroscopy, HPLC

© А. Такибаева, Л. Султанова, А. Тусупова, З. Омар,
А. Аманжолова, 2025.

«Әбілқас Сағынов атындағы Қарағанды техникалық университеті» КеАҚ,
Қарағанды, Қазақстан.
E-mail: aidana455.kz@mail.ru

ЛУПАН ТРИТЕРПЕНОИДТАР ҚАТАРЫНДАҒЫ АМИНДЕНУ РЕАКЦИЯСЫНЫҢ МЕХАНИЗМІ, ЕРЕКШЕЛІКТЕРІ

Такибаева Алтынарай — қауымдастырылған профессор, «Әбілқас Сағынов атындағы Қарағанды техникалық университеті» КеАҚ, Қарағанды, Қазақстан,
E-mail: altynarai81@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0536-0817>;

Султанова Лилия — химия ғылымдарының кандидаты, «Әбілқас Сағынов атындағы Қарағанды техникалық университеті» КеАҚ, Қарағанды, Қазақстан,
E-mail: sultanova-liliya@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9282-7982>;

Тусупова Ақмарал — аға оқытушы, «Әбілқас Сағынов атындағы Қарағанды техникалық университеті» КеАҚ, Қарағанды, Қазақстан,
E-mail: akmaral.tussupova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-6707-1194>;

Омар Зере — магистрант, «Әбілқас Сағынов атындағы Қарағанды техникалық университеті» КеАҚ, Қарағанды, Қазақстан,
E-mail: zere.ommar@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0006-1370-2345>;

Аманжолова Айдана — оқытушы, «Әбілқас Сағынов атындағы Қарағанды техникалық университеті» КеАҚ, Қарағанды, Қазақстан,
E-mail: aidana455.kz@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9245-7168>.

Аннотация. Мақалада кейбір табиғи тритерпеноидтарды кейінгі биологиялық белсенді туындыларын синтездеу үшін отандық өсімдіктерден тиімді бөлу әдістері зерттелген. Бетулин Silufol тақталары бойынша ТЖҚ арқылы анықталып, ИК спектроскопиясы, хроматография-масс спектроскопиясы арқылы талданған. Бетулиннің сапалық және сандық талдауы ЖСПХ арқылы жүргізілген. Эндемик Қырғыз түбіртектері терек «*Betula kirghisorum*» өсімдігінен табиғи тритерпеноид бетулин алғаш рет бөлініп алынды. Бетулиннің фосфорландырылған туындысын синтездеу жүргізілді. Іске асыру дәрежесі. Бетулин негізінде биологиялық белсенді туындыларын бөліп алу және өндірудің тиімді әдістерін әзірлеу. Лупан туындыларының биологиялық белсенділігін арттырудағы аминденудің рөлі мен қолданбалы маңызы көрсетіліп, алынған аминолупан қосылыстарының құрылымдық ерекшеліктері мен әлеуетті фармакологиялық бағыттары сипатталады. Мақала тритерпеноидтарды химиялық түрлендіру әдістерін жетілдіруге және биологиялық белсенді жаңа молекулалар синтезіне үлес

қосады. *Betula kirghisorum* өсімдігінен бөлінген бетулин тритерпеноидтарды химиялық түрлендірудің шексіз мүмкіндіктері идеясын кеңейтеді және оны жаңа туындыларды көп мөлшерде өндіру үшін де, сонымен қатар оның негізінде химиялық синтез жасау үшін де пайдалануға болады. Қолдану саласы. Химия, медицина және фармацевтика өнеркәсібі. Жұмыстың экономикалық тиімділігі немесе маңызы. Бұл тақырып химия өнеркәсібі мен медицинаның қажеттіліктеріне арналған жаңа заттар мен материалдарды жасауға негіз бола алатын органикалық қосылыстар ауқымына қол жеткізуге мүмкіндік береді. Бұл қосылысты зерттеу оның одан әрі трансформациялары мен модификациялары үшін үлкен маңызға ие. Мұндай табиғи биологиялық белсенді заттарды мақсатты түрде өзгерту мүлде жаңа қосылыстардың пайда болуына әкеледі, олар кеңірек әсер ауқымына ие болып, әртүрлі салаларда қолданылатын болады.

Түйін сөздер: бетулин, экстракция, спирт, жұқа қабатты хроматография, ИК – спектроскопия, ОЖСХ

© А. Такибаева, Л. Султанова, А. Тусупова, З. Омар,
А. Аманжолова, 2025.

НАО «Карагандинский технический университет имени Абылкаса Сагинова»,
Караганда, Казахстан.

E-mail: aidana455.kz@mail.ru

МЕХАНИЗМ, ОСОБЕННОСТИ ПРОТЕКАНИЯ РЕАКЦИИ АМИНИРОВАНИЯ В РЯДУ ЛУПАНОВЫХ ТРИТЕРПЕНОИДОВ

Такибаева Алтынарай — ассоциированный профессор, НАО «Карагандинский технический университет имени Абылкаса Сагинова», Караганда, Казахстан,

E-mail: altynarai81@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0536-0817>;

Султанова Лилия — кандидат химических наук, НАО «Карагандинский технический университет имени Абылкаса Сагинова», Караганда, Казахстан,

E-mail: sultanova-liliya@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9282-7982>;

Тусупова Акмарал — старший преподаватель, НАО «Карагандинский технический университет имени Абылкаса Сагинова», Караганда, Казахстан,

E-mail: akmaral.tussupova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-6707-1194>;

Омар Зере — магистрант, НАО «Карагандинский технический университет имени Абылкаса Сагинова», Караганда, Казахстан,

E-mail: zere.ommar@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0006-1370-2345>;

Аманжолова Айдана — преподаватель, НАО «Карагандинский технический университет имени Абылкаса Сагинова», Караганда, Казахстан,

E-mail: aidana455.kz@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9245-7168>.

Аннотация. В статье изучены эффективные методы выделения некоторых природных тритерпеноидов из отечественных растений для последующего синтеза на их основе новых биологически активных производных. Бетулин идентифицировали методом ТСХ на пластинах Silufol и анализировали с использованием ИК-спектроскопии и хромато-масс-спектроскопии. Методом

ВЭЖХ проведены качественный и количественный анализ бетулина. Из эндемической берёзы киргизской *Betula kirghisorum* природный тритерпеноид бетулин выделен впервые. Проведён синтез фосфорилированного производного бетулина. Практическая значимость работы заключается в разработке эффективных методов выделения и получении биологически активных производных на основе бетулина. Бетулин, выделенный из *Betula kirghisorum*, расширяет представление о неисчерпаемых возможностях химической трансформации тритерпеноидов и может быть использован как для широкомасштабного получения новых производных, так и для химического синтеза соединений на его основе. Показана роль реакции фосфорилирования в целенаправленной модификации лупановых соединений, направленной на повышение их биологической активности. Охарактеризованы структурные особенности полученных аминокислотных производных и их потенциальное применение в фармакологии. Работа способствует углублению знаний о химической трансформации тритерпеноидов и расширяет возможности синтеза биологически активных молекул. Область применения результатов включает химию, медицину и фармацевтическую промышленность. Экономическая значимость исследования обусловлена тем, что разработанные методы позволяют выйти на круг органических соединений, которые могут стать основой для создания новых веществ и материалов с уникальными потребительскими свойствами для нужд химической промышленности и медицины. Большое значение имеет дальнейшее изучение данного соединения, поскольку целенаправленная трансформация таких природных биологически активных веществ приводит к появлению новых соединений с расширенным спектром действия, востребованных в различных областях.

Ключевые слова: бетулин, экстракция, спирт, тонкослойная хроматография, ИК – спектроскопия, ВЭЖХ

Кіріспе. Қазіргі заманғы химия ғылымының басым бағыттарының қатарына жаңа жоғары тиімді биологиялық белсенді құралдарды іздестіруді қарқынды қажеттілігі жатады. Бұл міндетті шешудің бірі молекулалардың құрылысы олардың құрылымына субстраттардың негізгі терапиялық әсерін күшейтетін немесе биологиялық белсенділіктің жаңа, кейде күтпеген түрлеріне әкелетін әртүрлі функционалдық топтардың енгізілуіне ықпал ететін тритерпеноидтардың химиялық модификациясы болып табылады.

Қазақтың ұсақ шоқылы аймағы Сарыарқада өсетін қайыңның қырғыз (қазақ) қайыңы (*Betula kirghisorum*) қабығынан Қазақстан фармацевтикасына қажет бетулиннің дәрілік түрлерінің өндірісінің жолға қою үшін тазалығы жоғары бетулин алудың оңтайлы әдістерін іздестіру, бетулин мен оның туындыларын химиялық және биохимиялық трансформациялауды жүзеге асыру, алынған қосылыстардың құрылымын анықтау және оларды практикалық пайдалану мүмкіндігін көрсету болып табылады.

Қойылған мақсаттарды жүзеге асыру үшін келесі міндеттер анықталды:

– Қазақтың ұсақ шоқылы аймағы Сарыарқада өсетін қайыңның қырғыз (қазақ)

қайыңы (*Betula kirghisorum*) қабығынан бетулин және басқа тритерпеноидтарды бөліп алу;

– Бетулиннің құрамында фосфорлы қосылыстармен әр түрлі орталарда реакцияларын зерттеу;

– Физика - химиялық әдістердің көмегімен бетулиннің және оның туындыларының химиялық өзгеруі нәтижесінде алынған қосылыстардың құрылысын анықтау;

– Алынған қосылыстардың биологиялық белсенділіктеріне компьютерлік болжау жүргізу.

Зерттеудің ғылыми – практикалық маңыздылығы.

Қазақтың ұсақ шоқылы аймағы Сарыарқада өсетін қайыңның қырғыз (қазақ) қайыңы (*Betula kirghisorum*) қабығынан Қазақстан фармацевтикасына қажет бетулин туындыларының дәрілік түрлерін бөліп алу, олардың негізінде жаңа биологиялық белсенді заттарды синтездеудің әдістерін зерттеуден тұрады.

Алынған нәтижелер теориялық және практикалық қызығушылық танытады және терпеноидты қосылыстардың қазіргі заманғы органикалық химияның бірқатар өзекті мәселелерін шешуге елеулі үлес қосады.

Зерттеу материалдары мен әдістері. Зерттеу объектісі - Қазақтың ұсақ шоқылы аймағы Сарыарқада өсетін қайыңның қырғыз (қазақ) қайыңының (*Betula kirghisorum*) құрамында кездесетін лупандық тритерпеноидтар. Зерттеу жұмысы Ө. Сағынов атындағы Қарағанды техникалық университеті, «Жаңа материалдар» ғылыми- зерттеу институтында орындалды.

Зерттеу жүргізу кезінде әдіснамалық негіз тритерпеноидтардың тұздары мен тұз кешендерін алу саласындағы отандық және шетелдік ғалымдардың жұмыстарын зерттеу және талдау болды. Жұмыстарды орындау кезінде органикалық синтез, алынған заттарды бөлу және тазартудың заманауи әдістері қолданылды.

Бастапқы заттар мен өнімдердің хроматографиялық және спектральді анализдерін жүргізу үшін органикалық қосылыстардың массалық концентрациясын анықтайтын хромато-масс-спектрометрия әдісімен, жоғарғы эффективті сұйық хроматография әдісімен көмірсутектердің массалық үлестерін өлшеу методикасы, органикалық оттекті қосылыстардың массалық үлестерін өлшеу әдісімен өлшеу арқылы зерттелді.

Эксперименттің негізгі қосылыстары мен өнімдерін хромато-масс-спектроскопия, элементтік талдау, ИҚ-спектроскопия және ЖТСХ әдістерімен толық хроматографиялық анализ жүргізілді (Zhao et al, 2019; Shanmugam et al, 2020; Dzubak et al, 2020) . Заттар идентификациясы масс-спектральді мәліметтер базасында NIST98 жүргізірілді. ЖТСХ әдісімен рефрактометрлік детекторы бар «Shimadzu LC-20 Prominence» приборда полиароматты көмірсутектердің құрамын растады (Жук, 2017).

Бөлініп алынған лупандық тритерпеноидтардың құрамын зерттеу және сандық құрамын анықтау тікелей айдау әдісімен жүзеге асады (Кузнецов ,2014). Тәжірибедегі басты заттар мен өнімдерді зерттеу үшін ЖТСХ «Shimadzu LC-20 Prominence» қолданылады. Органикалық заттарды алу үшін еріткіштермен

олардың қоспасы (гексан, гептан, изооктан, толуол, бензол және этилді спирт) пайдаланылады (Киселев et al, 2009; Петров et al, 2017).

ИК - Фурье спектрлері «ФСМ – 1201» спектрометрінде түсірілді. Негізгі және өнімдердің компоненттік құрамының анализін Agilent 7890 A (АҚШ) газды хромато-масс-спектрометрия әдісімен HP 5890/5972 MSD бағдарламасында жүргізілді (Кузнецов, 2016). Шайырлардағы бастапқы заттар мен өнімдерін өңдеуді былайша жүзеге асырды: 20 мл ацетонда 1 г ерітінді және натрий сульфатымен құрғатты. 1 мл ерітіндіні 10 мл –ге дейін суытты және 10 мкл стандартты о-пиколин мен 40г/л концентрленген флуорантрен қосты. Шайырда стандарттардың концентрациясы 8 г/кг құрады.

Хроматография шарттары:

Колонка: DB-5, 30 м X 0,25 мм X 0,5 мкм

Газ: гелий, 0,8 мл/мин

Термостат: 50 0C – 4 мин

50-150 0C – 10 0C / мин

150-300 0C – 20 0C / мин

300 0C – 4 мин

Буландырғыш: 250 0C

Буландырғыш: 200 0C

Заттар идентификациясын масс-спектральді мәліметтер базасында NIST98 жүргізілді. Заттар концентрациясын флуорантенға қатысты шартты санымен анықталды. ЖЭСХ әдісімен рефрактометрлік детектор «Shimadzu LC-20 Prominence» құралында полиароматты көмірсутектердің құрамын дәлелдеді (Семенов, 2009).

Көміртек, сутек, оттек, азот және күкірт бар болуын жағу арқылы тексерді (Jäger et al, 2009). Үлгідегі көміртекпен сутекті анықтау ГОСТ 24081-95 бойынша жүргізілді: белгілі тоқ жылдамдығында үлгіні оттегі тоғында жандырды. Мыс оксидін жандыруға жеткеннен CO₂ және H₂O бөлінгенге дейін жүргізілді. Олар (CO₂ және H₂O) салмақ қатысымен анықталып отырды.

Нәтижелер мен талқылаулар. Ғылыми-зерттеу жұмыста біз мынадай мақсаттарды көздедік: 1) қырғыз (қазақ) қайыңы (*Betula kirghisorum*) қайыңынан бетулиннің сандық шығуының сілтінің су ерітіндісінің экстракция ұзақтығына және концентрациясына тәуелділігін зерттеу; 2) бөлінген бетулиннің негізінде құрамында фосфорлы тобы бар жаңа туындылар алу; 3) алынған қосылыстардың биологиялық белсенділігін компьютерлік болжау арқылы анықтау (Хлебникова, 2018).

Қырғыз (қазақ) қайыңы (*Betula kirghisorum*) экстракция жолымен этил, изопропил және бутил спирттері пайдаланылып, қайың қабығынан бетулиндік тритерпеноидтар алынады. Бұл үшін қайың қабығы (береста) кептіру пешінде 100⁰C температурада салмағы тұрақты болғанша кептірілді. Кептірілген қайың қабығы әрі қарай қайшымен кесу арқылы 5-8 мм-ге өлшемге дейін ұсақталды (Омарова et al, 2017).

1-2 мм фракцияларға дейін ұсақталып, 105⁰C температурада кептірілген

салбыраңқы қайыңының қабығы (береста) бастапқы шикізат ретінде пайдаланылды. Ылғалдылығы 1% дан төмен. Ұсақталған береста гексан немесе этил спиртінің көмегімен 36- 40 сағат мөлшерінде экстракцияланды. Роторлы буландырғышта гександы буландырып ұшырғаннан кейін қалған гександы экстракт ақ түрлі ұсақ ұнтақ түрінде алынды. Балқу температурасы 246°C, құрғақ берестаға есептелгендегі шығымы 15-20 %. Берестаны этанолмен экстракциялау кезінде балқу температурасы 260°C, құрғақ берестаға есептелгендегі шығымы 34 % сұр түсті ұнтақ алынды.

Ұнтақ түрінде алынған берестада бетулинді бөліп алу үшін кері салқындатқыш орнатылған шыны колбаға 100 г ұнтақ салынды, оған 60 г NaOH және 400 мл су құйылды. Колбаны үнемі араластырып отырып 95-100°C аралығында 3-6 сағат қыздырылды. Бұдан кейін колбаны 70-75°C дейін температураға салқындатып, 1,5 л этил спирті құйылды (3.4,3.5-суреттер). Араластырып отырып 30-40 минут қайнатылған ыстық ерітінді сүзгі арқылы сүзіліп алынды. Реакциялық қоспа (сүзінді) этил спиртінен айдау әдісінің көмегімен тазаланды. Бетулин сүзгіде ыстық сумен бірнеше рет шайылғаннан кейін бөлме температурасында кептірілді.

Қырғыз қайыңының қабығынан лупандық тритерпеноидтарды бөліп алу экстракциядау әдісінің көмегімен жүргізілді. Ол үшін кері тоңазытқышпен жабдықталған 1 л көлемді дөңгелек түпті үш ауызды колбаға 15 г шикізат салынды. Колбаға 20 % 150 мл калий гидроксидінің сулы ерітіндісі және 375 мл спирт (этил, изопропил немесе бутил спирттері) құйылды. Содан кейін реакциялық қоспа 82°C-да 4 сағат сулы моншада қайнатылды.

Қайнау аяқталғаннан кейін колбадағы ыстық ерітінді сулы және спиртті 2 қабатқа бөлінді. Реакциялық масса қайнаған соң, тез арада Бюхнер құйғышы арқылы гидролизденбеген қабық қалдықтарынан сүзілді. Жоғарғы қабаты – лупандық қосылыстардан тұратын спирттік ыстық ерітінді бөліп алынды және еріткіштің толық айдалуына дейін қоюландырылды.

Эксперименттердің екінші сериясы ұқсас болды, бірақ экстракция уақыты 3 сағатқа дейін созылды. Эксперименттердің үшінші сериясында экстракция уақыты 4 сағатты құрады.

Сілтінің концентрациясына және бутанол болған гидролиздің ұзақтығына байланысты натрий гидроксидінің су ерітіндісінде гидролизденген қабықтан бөлінген бетулиннің шығуы кестеде келтірілген.

Кесте 1. Натрий гидроксидінің қатысуымен гидролизденген қырғыз қайыңынан бутанолмен экстракцияланатын бетулиннің уақытқа байланысты шығымы

NaOH концентрациясы, %	Қайың қабығы гидролизінің ұзақтығы, сағ		
	2	3	4
	Бутанолмен экстракциялау кезінде бетулиннің шығуы, % от аб.с.б.		
15	2,9	4,9	2,5
20	6,5	10,9	5,9
25	5,9	7,6	5,5
30	3,9	5,2	2,7

Кесте 1-де көрсетілген деректерден көрініп тұрғандай, бетулиннің максималды шығуы қабық гидролизінде сілтінің 20% ерітіндісінде 3 сағат ішінде байқалады.

Этанолдан қайта кристалданғаннан кейін натрий гидроксидінің қатысуымен гидролизденген қабықтан бутанолмен алынатын бетулиннің ақ түсті ұнтақтардың үлгілерінің балку температурасы 243 °C тең болды. Балку температурасы Stuart SMP-10 приборының көмегімен анықталды. Келесі тәжірибелер қайың құрамынан бетулиннің және басқа заттардың шығымын зерттеуге бағытталды. Ол үшін қайың қабығынан гександық және этанолдық экстрактар алынды (Кесте 2,3).

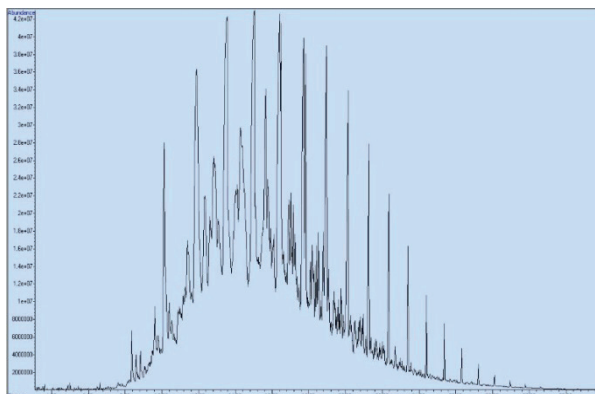
Кесте 2. Гександық экстрактағы компоненттердің мөлшері

Компонент	Салмағы	Жалпы мөлшердегі %
Бетулин	442	59,4
Лупеол	426	31,7
Ситостерин	412	0,6
Лупан қатары	426	1,4
Лупеол альдегиді	424	2,4

Кесте 3. Этанолдық экстрактағы компоненттердің мөлшері

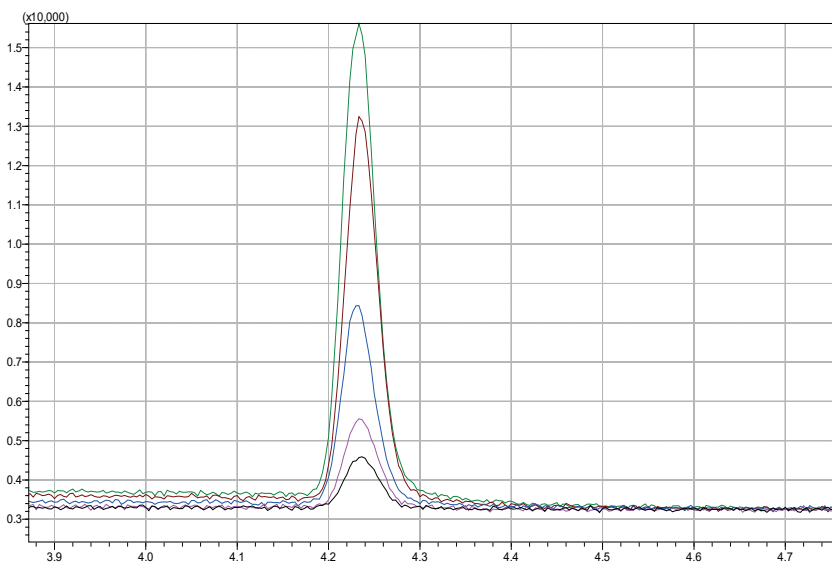
Компонент	Салмағы	Жалпы мөлшердегі %
Бетулин	442	51,08
Лупеол	426	34,37
Пальмитин қышқылы	256	0,4
Лупан қатары	426	0,86
Лупеол альдегиді	424	0,69

Сурет 1-де бетулиннің газды хроматографта түсірілген хроматограммасы берілген.



Сурет 1 – Бетулиннің газдық хроматограммасы

Сурет 2-де бетулиннің сұйықтық хроматографында алынған әр түрлі концентрациялардағы хроматограммалары берілген.



Сурет 2 - Бетулиннің әр түрлі концентрациялардағы сұйықтық хроматограммалары

Қорытынды. Тритерпеноидтарға және оның туындыларына деген қызығушылықтың соңғы уақытта ұдайы өсуі байқалады, бұл қосылыстардың биологиялық белсенділігінің кең спектріне негізделген. Бетулин мен оның бірқатар туындылары антиоксиданттық, қабынуға қарсы, ісікке қарсы, вирусқа қарсы, антисептикалық, гепатопротекторлық қасиеттерге ие екендігі дәлелденген. Жақын және алыс шетелдердің түрлі фармацевтикалық фирмалары әртүрлі аурулардың алдын алу және емдеу үшін экстракт, драже, сироптар және капсулалар түрінде бетулин негізінде препараттар шығарады. Осыған байланысты, осы жұмыстың мақсаты Қазақстанның эндемиялық өсімдігінің қабығынан, кейін оның негізінде жаңа биологиялық белсенді туындыларды синтездеу үшін қырғыз қайыңынан тритерпеноидтарды бөлу алу болып табылады.

Қарқаралы мемлекеттік ұлттық табиғи саябағының Кент орманшылығының аумағында қырғыз қайыңының қабығы өсімдік шикізаты түрінде жиналды. Қырғыз қайыңы Қазақстанның біршама шағын аймағында өседі, ол Қарқаралы мемлекеттік ұлттық табиғи паркінде және Наурызым мемлекеттік табиғи қорығы аумақтарында өседі. Қырғыз қайыңы – ақ-ластау қабығы мен борпылдақ басы бар аса биік емес ағаш. Бұтақтары тік немесе қиғаш жоғары тұрған, төмендемейтін; жас бұтақтары сұр-қызыл – қоңыр немесе қызыл-қоңыр болып келеді.

Алғаш рет Қырғыз қайыңынан табиғи тритерпеноидтар бөлініп алынды. Өнімдер әртүрлі спирттерді пайдаланып алынған қайта кристалдау арқылы тазартылды. “Silufol” пластинкаларында қайта кристалдау нәтижесінде алынған заттың тазалығы тексеріліп отырды. Зат тазалығы ЖТСХ аспабының да көмегімен анықталды. Таза бетулинді алу үшін толық тазарғанға дейін өнім толуолмен 2-4 рет қайта кристалдану жүргізілді.

Обедиттер

Жук В.В. (2017) Исследование влияния природы экстрагентов в процессе тонкопленочной парофазной экстракции на состав, степень извлечения и форму получаемых продуктов. Известия Томского политехнического университета. — Ч. 311. — С. 99 – 101.

Галайко Н.В., Назаров А.В., Толмачева И.А., Слепухин П.А., Вихарев Ю.Б., Майорова О.А., Гришко В.В. (2014) Синтез тритерпеновых А-конденсированных азолов. Химия гетероциклических соединений. — Ч. 1. — С. 72–83.

Кузнецов Б.Н. (2016) Совершенствование методов выделения, изучения состава и свойств экстрактов березовой коры. Химия в интересах устойчивого развития. — Ч. 3. — С. 391 – 400.

Кузнецов Б.Н. (2014) Экстракция бетулина низшими алифатическими спиртами из внешней коры березы *Betula Pendula* Roth., активированной перегретым паром в присутствии щелочи. Химия растительного сырья. — Ч. 2. — С. 21–24.

Киселев О.И., Г.В. Сироткин, Ю.А. Кульгашов, А.Р. Мифтахов, Л.В. Ефимова, Н.Н. Махова. (2009) Патент РФ 2359688. Способ переработки бересты. — № 2008100488/15. — С. 9.

Омарова А.С., Шокпаров М.М. (2017) Методы химической модификации природных соединений. Алматы: Білім. — С. 228.

Петров В., Малков А. (2017) Стереохимические аспекты реакций аминирования в химии терпенов. Журнал органической химии. — Ч. 53(8). — С. 1290–1298.

Семенов, А.А. (2009) Основы химии природных соединений: М.: Научное партнерство. — Ч. 2. — С. 624.

Хлебникова Т.Б. (2018) Каталитическое окисление бетулина и диацетата бетулина с использованием экологически благоприятного окислителя. Journal of Siberian Federal University. Chemistry. — Ч. 3. — С. 277–285.

Dzubak P., Hajdуч M., Vydra D. (2006) Pharmacological Activities of Natural Triterpenoids and Their Therapeutic Implications. Natural Product Reports. — V. 23. — P. 394–411.

Grassmann J., Hippeli S., Elstner E. (2002) Plant Triterpenoids: Structure, Biosynthesis and Biological Activity. Planta Medica. — V. 68. — P. 103–108.

Jäger S., Trojan H., Kopp T. (2009) Distribution of Pentacyclic Triterpenes in Plants: A Comprehensive Review. Phytochemistry. — V. 72. — P. 435–457.

Ngoc T. D., Moons N., Kim Y., Borggraeve W. D., Mashentseva A., Andrei G., Snoeck R., Balzarini J., Dehaen W. (2014) Synthesis of triterpenoid triazine derivatives from allobetulone and betulonic acid with biological activities // Bioorg. Med. Chem. — V. 22. — P. 3292–3300.

Shanmugam M., Narasimhan S., Selvaraj P. (2020) Structural Modification of Betulin and Lupeol Derivatives for Enhanced Bioactivity. Medicinal Chemistry Research. — V. 29. — P. 1507–1520.

Zhao J., Li W., Sun Y. (2019) Chemical Transformations of Lupane-Type Triterpenoids: A Review. Phytochemistry Reviews. — V. 18(4). — P. 1021–1045.

References

Dzubak P., Hajdуч M., Vydra D. (2006) Pharmacological Activities of Natural Triterpenoids and Their Therapeutic Implications. Natural Product Reports. — V. 23. — P. 394–411(in English)

Galayko N.V., Nazarov A.V., Tolmacheva I.A., Slepukhin P.A., Vikharev Yu.B., Mayorova O.A., Grishko V.V. (2014) Sintez triterpenovykh A-kondensirovannykh azolov [Synthesis of triterpenoid A-condensed azoles]. Chemistry of Heterocyclic Compounds. — V. 1. — P. 72–83 (in Russian)

Grassmann J., Hippeli S., Elstner E. (2002) Plant Triterpenoids: Structure, Biosynthesis and Biological Activity. Planta Medica. — V. 68. — P. 103–108 (in English)

Jäger S., Trojan H., Kopp T. (2009) Distribution of Pentacyclic Triterpenes in Plants: A Comprehensive Review. Phytochemistry. — V. 72. — P. 435–457 (in English)

Kiselev O.I., Sirotkin G.V., Kulgashov Yu.A., Miftakhov A.R., Efimova L.V., Makhova N.N. (2009) Sposob pererabotki beresty [Method of processing birch bark]Patent of the RF 2359688. – № 2008100488/15. — P. 9 (in Russian)

Khlebnikova T.B. (2018) Kataliticheskoe okislenie betulina i diatsetata betulina s ispol'zovaniem ekologicheskii blagopriyatnogo okislitelya [Catalytic oxidation of betulin and betulin diacetate using an

environmentally friendly oxidizer]. Journal of Siberian Federal University. Chemistry. — V. 3. — P. 277–285 (in Russian)

Kuznetsov B.N. (2014) Ekstraktsiya betulina nizshimi alifaticheskimi spirtami iz vneshnei kory berezy Betula pendula Roth., aktivirovannoi peregrretim parom v prisutstvii shchelochi [Extraction of betulin by lower aliphatic alcohols from the outer bark of the birch Betula Pendula Roth., activated by overheated steam in the presence of alkali]. Chemistry of plant raw materials. — V. 2. — P. 21–24 (in Russian)

Kuznetsov B.N. (2016) Sovershenstvovanie metodov vydeleniya, izucheniya sostava i svoystv ekstraktov berezovoi kory. [Improvement of methods of isolation, study of the composition and properties of extracts of birch bark]. Chemistry in the interests of sustainable development. — V. 3. — P. 391 – 400 (in Russian)

Ngoc T. D., Moons N., Kim Y., Borggraeve W. D., Mashentseva A., Andrei G., Snoeck R., Balzarini J., Dehaen W. (2014) Synthesis of triterpenoid triazine derivatives from allobetulone and betulonic acid with biological activities // Bioorg. Med. Chem. — V. 22. — P. 3292–3300 (in English)

Omarova A.S., Shokparov M.M. (2017) Metody khimicheskoi modifikatsii prirodnkh soedinenii [Methods of Chemical Modification of Natural Compounds]. Almaty: Bilim. — P. 228 (in Russian)

Petrov V., Malkov A. (2017) Stereokhimicheskie aspekty reaktsii aminirovaniya v khimii terpenov [Stereochemical Aspects of Amination Reactions in Terpene Chemistry]. Journal of Organic Chemistry. — V. 53(8). — P. 1290–1298 (in Russian)

Semenov, A.A. (2009) Osnovy khimii prirodnkh soedinenii [Fundamentals of Chemistry of Natural Compounds]. Moscow: Scientific Partnership. — V. 2. — P. 624 (in Russian)

Shanmugam M., Narasimhan S., Selvaraj P. (2020) Structural Modification of Betulin and Lupeol Derivatives for Enhanced Bioactivity. Medicinal Chemistry Research. — V. 29. — P. 1507–1520 (in English)

Zhao J., Li W., Sun Y. (2019) Chemical Transformations of Lupane-Type Triterpenoids: A Review. Phytochemistry Reviews. — V. 18(4). — P. 1021–1045 (in English)

Zhuk V.V. (2017) Issledovanie vliyaniya prirody ekstragentov v protsesse tonkoplenochnoi parofaznoi ekstraktsii na sostav, stepen' izvlecheniya i formu poluchaemykh produktov [Study of the influence of the nature of extractants in the process of thin-film vapor-phase extraction on the composition, degree of extraction and form of the resulting products]. Izvestiya Tomskogo polytechnicheskogo universiteta — V. 311. — P. 99 – 101 (in Russian)

© G. Toleutay^{1,4}, R.N. Tuleyeva^{1,2,3}, A. Taubatyrova^{1,2}, N.N. Gizatullina^{1,2*}, 2025.

¹ Satbayev University, Almaty, Kazakhstan;

² Research Institute of Advanced Materials, Almaty, Kazakhstan;

³ Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan;

⁴ University of Tennessee, Knoxville, USA.

E-mail: gizatullinanargiz.nz@gmail.com

RECENT ADVANCES IN THE APPLICATION OF LIGNIN FOR BIOBASED PACKAGING MATERIALS

Toleutay Gaukhar — PhD, Department of Chemical and Biochemical Engineering, K. Turyssov Institute of Geology and Oil and Gas Business, Satbayev University, Almaty, Kazakhstan; University of Tennessee, Knoxville, USA,

Email: gaukhar.toleutay@gmail.com; <https://orcid.org/0000-0003-0381-6665>;

Tuleyeva Rysgul — PhD Candidate, Al-Farabi Kazakh National University; Research Scientist, Research Institute of Advanced Materials, Almaty, Kazakhstan,

Email: rysghtuleyeva@gmail.com; <https://orcid.org/0000-0002-9691-4274>;

Taubatyrova Anel — Master of Department of Chemical and Biochemical Engineering, Geology and Oil-Gas Business Institute Named After K. Turyssov, Satbayev University, Almaty, Kazakhstan; Research Scientist, Research Institute of Advanced Materials, Almaty, Kazakhstan,

Email: Oani.lani9@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0001-1329-0372>;

Gizatullina Nargiz — Master of Department of Chemical and Biochemical Engineering, Geology and Oil-Gas Business Institute Named After K. Turyssov, Satbayev University, Republic of Kazakhstan; Research Scientist, Research Institute of Advanced Materials, Almaty, Kazakhstan,

Email: gizatullinanargiz.nz@gmail.com; <https://orcid.org/0000-0003-4230-1031>.

Abstract. The global shift toward environmentally responsible materials has heightened interest in lignin as a sustainable alternative for the development of bio-based packaging systems. As a widely available and renewable biopolymer originating from plant biomass and industrial side streams, lignin offers unique chemical and functional properties that make it a promising component in biodegradable packaging. This review aims to provide a comprehensive analysis of recent advances in the utilization of technical lignin and lignin-based nanostructures for improving the performance of biopolymer packaging materials. The study employs a comparative analysis of scientific literature, focusing on polymer matrices such as PLA, PBAT, PVA, and starch, with particular attention to chemical modification methods including esterification, epoxidation, amidation, glyoxalation, and transamination, and their influence on interfacial compatibility, dispersion, and functional behavior. The results indicate that incorporation

of lignin into biodegradable polymers enhances mechanical strength, thermal stability, barrier characteristics, UV-shielding efficiency, and antioxidant performance, while modified lignin derivatives and lignin nanoparticles contribute to improved composite homogeneity and enable advanced functionalities such as recyclability and self-healing. Key limitations including structural heterogeneity, restricted dispersion, and regulatory considerations are also discussed. Overall, the findings confirm lignin's strong potential as a high-value component for next-generation sustainable packaging materials, providing a scientific basis for the development of optimized lignin-polymer systems aimed at reducing environmental impact while maintaining or enhancing material performance.

Keywords: lignin; biopolymers; biodegradable packaging materials; nanoparticles; sustainable development

Financing. *This research was conducted as part of the targeted funding program for the project IRN BR27199103, titled “Development of Eco-Friendly Packaging Materials from Recyclable Paper and Biomass Waste with Adaptive and Enhanced Protective Properties”.*

© Г. Төлеутай^{1,4}, Р.Н. Тулеева^{1,2,3}, А. Таубатырова^{1,2},
Н.Н. Гизатуллина^{1,2*}, 2025.

¹Сәтбаев Университеті, Алматы, Қазақстан;

²Жетілдірілген Материалдар Ғылыми-Зерттеу Институты, Алматы, Қазақстан;

³Әл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық Университеті, Алматы, Қазақстан;

⁴Теннесси Университеті, Ноксвилл, АҚШ.

E-mail: gizatullinanargiz.nz@gmail.com

ЛИГНИННІҢ БИОНЕГІЗДІ ҚАПТАМА МАТЕРИАЛДАРЫНДА ҚОЛДАНЫЛУЫНЫҢ СОҢҒЫ ЖЕТІСТІКТЕРІ

Төлеутай Гаухар — PhD, химиялық және биохимиялық инженерия кафедрасы, Қ. Тұрсынов атындағы Геология және мұнай-газ бизнесі институты, Сәтбаев университеті, Алматы, Қазақстан; Теннесси университеті, Ноксвилл, АҚШ;

Email: gaukhar.toleutay@gmail.com; <https://orcid.org/0000-0003-0381-6665>;

Тулеева Рысгуль — PhD докторант, Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан; Зерттеуші ғалым, Жетілдірілген материалдар ғылыми-зерттеу институты, Алматы, Қазақстан;

Email: rysgultuleyeva@gmail.com; <https://orcid.org/0000-0002-9691-4274>;

Таубатырова Анель — химиялық және биохимиялық инженерия кафедрасының магистры, Қ. Тұрсынов атындағы Геология және мұнай-газ бизнесі институты, Сәтбаев университеті; Зерттеуші ғалым, Жетілдірілген материалдар ғылыми-зерттеу институты, Алматы, Қазақстан;

Email: 0ani.lani9@gmail.com; <https://orcid.org/0009-0001-1329-0372>;

Гизатуллина Наргиз — химиялық және биохимиялық инженерия кафедрасының магистры, Қ. Тұрсынов атындағы Геология және мұнай-газ бизнесі институты, Сәтбаев Университеті, Алматы, Қазақстан; Зерттеуші ғалым, Жетілдірілген материалдар ғылыми-зерттеу институты, Алматы, Қазақстан;

Email: gizatullinanargiz.nz@gmail.com; <https://orcid.org/0000-0003-4230-1031>.

Аннотация. Экологиялық тұрғыдан жауапты материалдарға жаһандық бетбұрыс биыдырайтын қаптама жүйелерін әзірлеуде лигнинге деген қызығушылықты күшейтті. Өсімдік биомассасынан және өнеркәсіптік өндірістің жанама ағындарынан алынатын кең қолжетімді әрі жаңартылатын биополимер ретінде лигнин ерекше химиялық және функционалдық қасиеттерге ие, бұл оны биополимерлі қаптама материалдарының перспективалы құрамдас бөлігі етеді. Осы шолудың мақсаты — техникалық лигнин мен лигнин негізіндегі нанокұрылымдарды биополимерлі қаптама материалдарының қасиеттерін жетілдіруде қолданудың соңғы ғылыми жетістіктеріне жан-жақты талдау беру. Зерттеу ғылыми әдебиетке салыстырмалы талдау жүргізуге негізделген және PLA, PBAT, PVA және крахмал сияқты полимерлік матрицаларға, сондай-ақ эстерификация, эпоксидтеу, амидтеу, гликокасия және трансаминация сияқты химиялық модификация әдістеріне және олардың композиттердің үйлесімділігіне, дисперсиясына және функционалдық мінез-құлқына әсеріне назар аударады. Нәтижелер лигнинді енгізу биополимерлердің механикалық беріктігін, жылулық тұрақтылығын, тосқауылдық қасиеттерін, УФ-қорғанысын және антиоксиданттық белсенділігін айтарлықтай арттыратынын көрсетеді. Модификацияланған лигнин мен лигнин нанобөлшектері композиттердің біркелкілігін жақсартып, қайта өңдеу немесе өзін-өзі қалпына келтіру сияқты кеңейтілген функцияларды іске асыруға мүмкіндік береді. Сонымен қатар құрылымдық әртектілік, дисперсияның шектелуі, қолданылатын технологиялардың күрделілігі, материалдардың ұзақ мерзімді тұрақтылығы және реттеушілік талаптар сияқты маңызды шектеулер қарастырылады. Бұл шолу лигниннің тек экологиялық таза қаптама материалдарының жаңа буынын дамыту үшін ғана емес, сонымен қатар өнеркәсіптік өндірісте тиімді, функционалды және инновациялық шешімдер ұсынуда да маңызды рөл атқаратынын көрсетеді. Жалпы алғанда, зерттеу нәтижелері лигниннің биополимерлі қаптама технологияларын жетілдіру үшін жоғары әлеуетке ие, экологиялық, функционалды және көпқырлы құнды компонент екенін растайды.

Түйін сөздер: лигнин; биополимерлер; биыдырайтын қаптама материалдары; нанобөлшектер; тұрақты даму

© Г. Толеутай^{1,4}, Р.Н. Тулеева^{1,2,3}, А. Таубатырова^{1,2},
Н.Н. Гизатуллина^{1,2*}, 2025.

¹Сатпаев Университет, Алматы, Казахстан;

² Научно-исследовательский институт передовых материалов,
Алматы, Казахстан;

³ Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан;

⁴ Университет Теннесси, Ноксвилл, США.

E-mail: gizatullinanargiz.nz@gmail.com

ПОСЛЕДНИЕ ДОСТИЖЕНИЯ В ПРИМЕНЕНИИ ЛИГНИНА ДЛЯ БИОПОЛИМЕРНЫХ УПАКОВОЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Толлеутай Гаухар — PhD, кафедра химической и биохимической инженерии, Институт геологии и нефтегазового дела имени К. Турышева, Университет Сатпаева, Алматы, Казахстан; Университет Теннесси, Ноксвилл, США,

Email: gaukhar.toleutay@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-0381-6665>;

Тулеева Рысгуль — аспирант PhD, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан; Научный сотрудник, Научно-исследовательский институт передовых материалов, Алматы, Казахстан,

Email: rysgultuleyeva@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-9691-4274>;

Таубатырова Анель — магистр кафедры химической и биохимической инженерии, Институт геологии и нефтегазового дела имени К. Турышева, Университет Сатпаева, Алматы, Казахстан; Научный сотрудник, Научно-исследовательский институт передовых материалов, Алматы, Казахстан, Email: 0ani.lani9@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0001-1329-0372>;

Гизатуллина Наргиз — магистр кафедры химической и биохимической инженерии, Институт геологии и нефтегазового дела имени К. Турышева, Университет Сатпаева, Алматы, Казахстан; Научный сотрудник, Научно-исследовательский институт передовых материалов, Алматы, Казахстан,

Email: gizatullinanargiz.nz@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-4230-1031>.

Аннотация. Глобальный переход к экологически безопасным материалам значительно усилил интерес к лигнину как устойчивой и многообещающей альтернативе при разработке биоразлагаемых упаковочных систем. Лигнин, являющийся широко доступным и возобновляемым биополимером растительного происхождения, а также побочным продуктом промышленных процессов, обладает уникальными химическими и функциональными свойствами, что делает его перспективным компонентом для создания высокоэффективных биополимерных материалов упаковки. Цель данного обзора — представить всесторонний анализ современных достижений в области использования технического лигнина и лигниновых наноструктур для улучшения эксплуатационных характеристик биополимерных композитов. В исследовании проведён сравнительный анализ научных публикаций, охватывающий полимерные матрицы PLA, PBAT, PVA и крахмала, а также ключевые методы химической модификации лигнина, включая эстерификацию, эпоксидирование, амидирование, гликоксилирование и трансаминирование, и их влияние на совместимость, дисперсию и функциональное поведение композитов. Полученные данные свидетельствуют, что внедрение лигнина способствует повышению механической прочности, термической

стабильности, барьерных свойств, эффективности УФ-защиты и антиоксидантной активности биополимеров. Модифицированный лигнин и лигниновые наночастицы обеспечивают улучшенную однородность композитов и формируют расширенный функциональный потенциал, включая самовосстановление, возможность повторной переработки и адаптивное поведение в различных условиях эксплуатации. Кроме того, обсуждаются ограничения, связанные со структурной неоднородностью, проблемами диспергирования, долговечностью и соблюдением регуляторных требований. В целом, результаты подтверждают высокий потенциал лигнина как ценного, многофункционального и экологически безопасного компонента для создания нового поколения биополимерной упаковки с улучшенными эксплуатационными характеристиками и перспективами промышленного применения.

Ключевые слова: лигнин; биополимеры; биоразлагаемые упаковочные материалы; наночастицы; устойчивое развитие

Introduction. The widespread use of petroleum-derived plastics in packaging has led to significant environmental challenges, including persistent pollution, microplastic accumulation, and growing concerns about resource depletion and waste management (Figueiredo, 2021: 100703). In response, the development of bio-based, environmentally friendly packaging materials is gaining momentum as a strategy to mitigate ecological impact and promote a circular bioeconomy. Among potential alternatives, lignin – the second most abundant natural polymer on Earth – has emerged as a particularly promising candidate.

Each year, millions of tons of technical lignin are generated as a byproduct of the pulp and paper industry and biorefinery processes. However, only a small proportion is currently utilized in value-added applications beyond combustion (Figueiredo, 2021: 100703). Owing to its aromatic backbone, high content of functional groups (e.g., phenolic, hydroxyl, and carboxyl), inherent antioxidant properties, and hydrophobic nature, lignin has recently attracted considerable interest in the field of sustainable packaging. Lignin-based composites have demonstrated distinctive features such as ultraviolet (UV) protection, antimicrobial activity, and improved barrier performance – properties that are typically lacking in conventional fossil-derived polymers (Zubair, 2024: 467–482).

Between 2020 and 2025, research into lignin-based packaging materials has advanced considerably, with a growing body of literature addressing various aspects of their design and functionality. In this context, the work of Zubair et al. provides a comprehensive overview of lignin-based bionanocomposites tailored for active food packaging, with an emphasis on physicochemical optimization and processing strategies (Zubair, 2024: 467–482). Javed et al. demonstrated the feasibility of integrating lignin into cardboard coatings at pilot scale, supporting its industrial applicability (Javed, 2021: 1595). Furthermore, the development of oxypropylated polylactic acid-lignin composites has shown enhanced mechanical, thermal, and UV-resistant properties, indicating a viable route toward scalable production (Liu, 2023: 116552).

This review aims to provide a comprehensive overview of recent advancements in the utilization of lignin for bio-based packaging applications. Particular attention is given to lignin sources, structure-property relationships, functional performance in comparison to synthetic polymers, and chemical modification strategies such as esterification and transamination. In addition, the current limitations are discussed, and future research directions are proposed to support the transition from laboratory-scale innovations to commercially viable packaging solutions.

Materials and Methods. This review was conducted using a systematic literature survey and comparative analysis approach to evaluate recent advancements in lignin-based materials for bio-based packaging applications. Peer-reviewed journal articles, conference proceedings, and authoritative reviews published between 2020 and 2025 were selected to ensure up-to-date coverage of chemical modifications, material properties, and functional performance of lignin composites. The primary databases consulted included Web of Science, Scopus, PubMed, ScienceDirect, and Google Scholar, using keywords such as “lignin,” “biopolymer packaging,” “lignin nanoparticles,” “chemical functionalization,” “esterification,” “epoxidation,” “amidation,” “glyoxalation,” “transamination,” “barrier properties,” and “mechanical performance.”

Inclusion criteria focused on studies reporting structural characterization of lignin, types of lignin used (kraft, organosolv, soda, or lignin nanoparticles), chemical modification strategies, and evaluation of mechanical, thermal, barrier, UV, and antioxidant properties in polymer matrices such as PLA, PBAT, PVA, and starch. Articles were also included if they provided comparative assessments of lignin’s performance relative to conventional petroleum-derived polymers or described potential industrial applicability.

Data extraction involved collecting information on lignin source, molecular structure, functional group content, composite preparation methods, and resulting material properties. Where available, numerical values of tensile strength, Young’s modulus, barrier performance, UV-blocking efficiency, thermal stability, and biodegradability were recorded. Structural–property relationships were summarized in tables to facilitate comparison of modification strategies, polymer compatibility, and performance outcomes. The methodology emphasizes critical evaluation of trends, limitations, and future prospects in the field of lignin-based sustainable packaging materials.

Results and discussions. Sources and Types of Lignin Used in Packaging Applications. Lignin is a structurally complex, heterogeneous aromatic polymer predominantly located in the secondary cell walls of vascular plants. Its composition and properties vary significantly depending on botanical origin. Softwoods (gymnosperms) generally contain 28–32 wt% lignin, which is primarily composed of guaiacyl (G) units. In contrast, hardwoods (angiosperms) contain 18–25 wt% lignin, comprising a mixture of guaiacyl and syringyl (S) units. Grasses (monocotyledons), on the other hand, exhibit a lignin content ranging from 10 to 30 wt%, characterized by the presence of p-hydroxyphenyl (H), guaiacyl, and syringyl units (Li, 2015: 11559–11624). The relative abundance and distribution of these monolignol-derived units (H/G/S ratio) significantly affect the physicochemical characteristics of lignin, including its reactivity,

degree of crosslinking, solubility, and thermal stability. These properties are essential in determining the suitability of lignin for specific packaging applications and influence the design of functional materials based on lignin (Figure 1) (Li, 2015: 11559–11624; Norgren, 2014: 409–416).

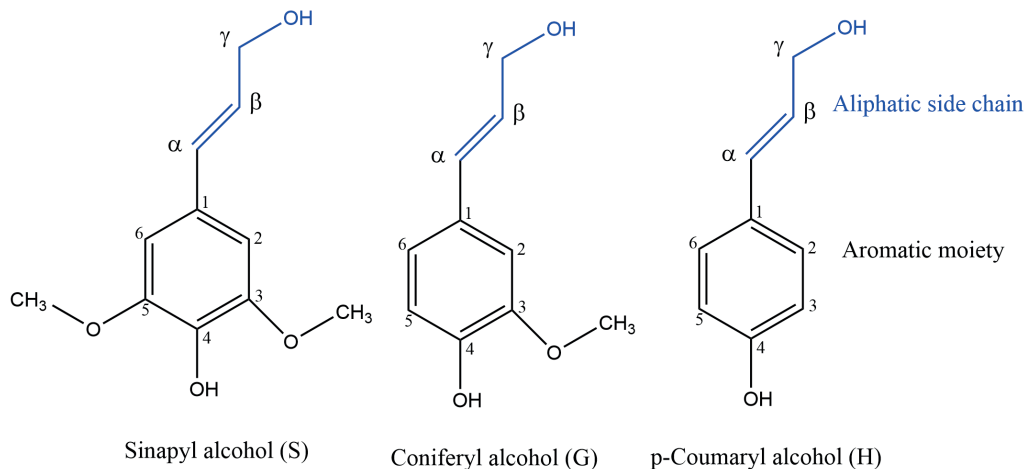


Figure 1 - Chemical structures of monolignols: the primary building blocks of lignin. Adapted from (Li, 2015: 11559–11624)

Industrial lignin fractions are derived through various pulping and biorefinery processes, each yielding materials with distinct structural and chemical characteristics. Kraft lignin is obtained under alkaline conditions in the presence of sulfur-containing compounds. This process promotes extensive cleavage of β -O-4 ether linkages and leads to the formation of condensed, guaiacyl-rich structures. As a result, kraft lignin typically exhibits high molecular weight and a high degree of crosslinking, which can pose challenges for reactivity and dispersion in polymer matrices (Wang, 2019: 449–461). Organosolv lignin is extracted using organic solvents such as ethanol, methanol, or acetone under relatively mild, often acid-catalyzed, conditions. The process yields a sulfur-free lignin with low molecular weight and minimal condensation, resulting in high purity and enhanced functionality – traits that make it particularly attractive for material applications, including packaging (Kai, 2016: 1175–1200; Qian, 2014: 2156–2163). Soda lignin, produced via sulfur-free alkaline pulping (typically from non-wood plants or agricultural residues), is less commonly investigated for packaging purposes. However, it offers a promising sulfur-free alternative, generally characterized by moderate molecular weight and good reactivity (Norgren, 2014: 409–416). The purity, molecular structure, and abundance of functional groups – such as phenolic and carboxylic moieties – differ markedly among these lignin types, thereby influencing their processability, compatibility with polymer matrices, and ultimate performance in composite packaging systems.

The suitability of various lignin types for packaging applications is influenced by multiple interrelated factors, including molecular characteristics, chemical composition,

and end-use requirements. Organosolv lignin typically possesses a lower molecular weight and a higher proportion of cleavable β -O-4 linkages, which facilitates its chemical modification and enhances its miscibility with polymer matrices (Kai, 2016: 1175–1200). Kraft lignin, in contrast, contains a higher concentration of phenolic and aliphatic hydroxyl groups, offering considerable binding potential. However, due to its high degree of structural condensation, it often requires chemical pretreatment to improve its dispersibility and reactivity within composite systems (Wang, 2019: 449–461). The presence of residual sulfur compounds in kraft lignin can be a limiting factor in food-contact applications. In contrast, organosolv lignin is sulfur-free and generally exhibits higher purity, thereby presenting fewer regulatory and sensory concerns (Qian, 2014: 2156–2163). In paper-based systems, coatings incorporating organosolv lignin have been reported to enhance moisture resistance without significantly compromising mechanical strength (Javed, 2021: 1595). Alternatively, kraft lignin-derived nanoparticles demonstrate notable UV-blocking and antioxidant properties, primarily attributed to their phenolic content (Wang, 2019: 449–461).

Structural Features and Functional Properties of Lignin. Lignin is a complex polyphenolic biopolymer composed of three principal monolignol units: *p*-coumaryl alcohol (H), coniferyl alcohol (G), and sinapyl alcohol (S). Its highly heterogeneous and irregular structure gives rise to variable amounts of phenolic, aliphatic hydroxyl, and carboxyl groups, which in turn influence its chemical reactivity and interaction potential with diverse polymer matrices (Javed, 2021: 1595; Wang, 2024: n.p.). For example, lignin fractionated from wheat straw using an alkaline deep eutectic solvent (DES) system exhibited a phenolic hydroxyl content of up to 9.6 mmol/g and carboxyl group content of up to 2.5 mmol/g, significantly enhancing its reactivity and compatibility with polymeric systems (Wang, 2024: n.p.)

In addition to its functional versatility, lignin displays inherent thermal stability, making it a promising additive for improving the heat resistance of biopolymer-based composites. Polylactic acid (PLA)/lignin nanocomposites incorporating kraft lignin have shown enhanced thermal resistance relative to neat PLA, although a slight reduction in the onset temperature of thermal degradation was observed at higher lignin loadings (Ge, 2020: n.p.). The aromatic and phenolic components of lignin also contribute to its barrier properties, enabling it to reduce oxygen permeability and block ultraviolet (UV) radiation. These attributes, combined with its intrinsic antioxidant activity, offer protection against photooxidative degradation and support its application in active and functional packaging systems (Figure 2) (Javed, 2021: 1595). Moreover, the biodegradability of lignin-rich composites is closely influenced by their functional group composition. In particular, the presence of carboxyl and hydroxyl groups increases hydrophilicity and microbial accessibility, thus facilitating more efficient biodegradation.

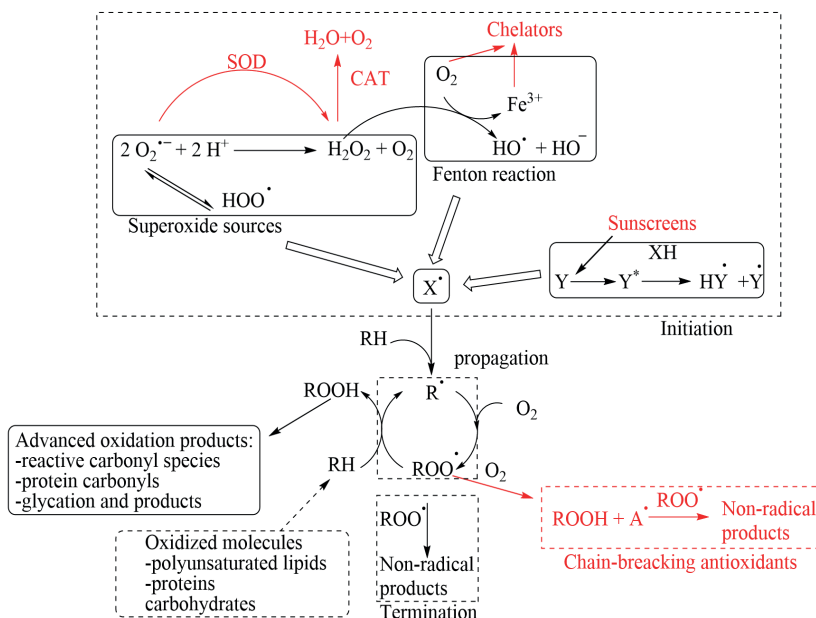


Figure 2 - Representative reactions illustrating the antioxidant mechanisms of lignin. Adapted from (Zubair, 2024: 467–482)

Compared to conventional synthetic polymers, lignin-based composites offer a unique combination of advantages and limitations that are highly dependent on the polymer matrix and modification strategy employed. For instance, polylactic acid (PLA) blends reinforced with lignin have demonstrated improved mechanical strength; however, they often exhibit a reduction in thermal transition temperatures, including the glass transition (T_g) and melting point (T_m), relative to neat PLA (Ge, 2020: n.p.). In the case of biodegradable polyesters such as poly (butylene adipate-co-terephthalate) (PBAT), the incorporation of silane-grafted lignin has been shown to enhance tensile strength, elastic modulus, and biodegradation rate – achieving up to 96% biodegradability compared to unmodified PBAT (Brodin, 2021: n.p.). Furthermore, studies on barrier performance indicate that the hydrophobic aromatic structure of lignin contributes to improved resistance against oxygen permeation and ultraviolet (UV) radiation. However, challenges related to dispersion uniformity and interfacial adhesion within the composite matrix remain significant factors that must be addressed to optimize the overall material properties (Zubair, 2024: 467–482; Boarino, 2023: 1065-1077).

Packaging Applications of Lignin-Based Materials. Lignin is increasingly utilized as a functional additive in paper coatings and biodegradable polymer films due to its capacity to enhance barrier performance and confer bioactive properties. Laboratory-scale investigations have demonstrated that the incorporation of kraft lignin into starch-based coatings significantly reduces water solubility and increases surface hydrophobicity, particularly when used in combination with crosslinking agents such as ammonium zirconium carbonate (AZC). However, certain drawbacks

have been reported, including the formation of pinhole defects that may compromise coating uniformity. To overcome such limitations, hybrid formulations incorporating lignin, tannin, and ZnO nanoparticles have been developed, resulting in paper-based packaging materials with improved mechanical strength, moisture resistance, and air impermeability (Li, 2021: n.p.).

In the context of biodegradable polymer films, lignin and lignin nanoparticles (LNPs) have been successfully integrated into various matrices, including polylactic acid (PLA), polyvinyl alcohol (PVA), starch, and poly (butylene adipate-co-terephthalate) (PBAT). These lignin-based composite films exhibit enhanced mechanical properties and improved resistance to oxygen, moisture, and ultraviolet (UV) radiation, while maintaining their inherent biodegradability (Ruwoldt, 2023: n.p.; Gaikwad, 2023: n.p.).

The functionality of lignin-enriched packaging materials is strongly influenced by the dispersion quality of lignin within the polymer matrix and the nature of interfacial interactions between the components. Uniformly dispersed lignin nanoparticles have been shown to significantly improve mechanical strength, antioxidant capacity, and overall material integrity, whereas poor interfacial compatibility often results in phase separation and a decline in performance efficiency (Gaikwad, 2023: n.p.). Experimental findings suggest that incorporating lignin at moderate concentrations – typically below 10 wt% achieves an optimal balance between ultraviolet (UV) protection and visual transparency. In contrast, higher lignin loadings may adversely affect film clarity and aesthetic quality (Ruwoldt, 2023, n.p.). The antioxidant and UV-shielding properties of lignin are primarily attributed to its conjugated phenolic and carbonyl chromophores, which absorb UV radiation and function as effective radical scavengers, thereby enhancing the oxidative stability of the packaging material (Parit, 2022: n.p.; ACS review, 2023: online first).

Lignin-containing composites generally exhibit improved tensile strength and elastic modulus relative to conventional biopolymers, although these enhancements are largely dependent on the degree of compatibility between lignin and the polymer matrix, as well as on the uniformity of filler dispersion. Notably, lignin-based thermoset films and coatings have been reported to maintain high transparency in the visible spectrum while simultaneously offering effective UV protection and antioxidant functionality (Gaikwad, 2023: n.p.). In polylactic acid (PLA) systems, the grafting of lignin nanoparticles onto compatible polymers has been shown to facilitate more homogeneous dispersion, leading to increased tensile strength and enhanced oxidative stability (Gaikwad, 2023: n.p.). Recent studies consistently indicate that lignin contributes to improved barrier performance, radical scavenging activity, and UV resistance in biodegradable packaging films, provided that appropriate strategies for interfacial compatibility and dispersion are implemented (Ruwoldt, 2023: n.p.).

Chemical Functionalization of Lignin: Esterification, Epoxidation, Amidation, Glyoxalation, Transamination. Chemical modification is essential to enhance the reactivity, compatibility, and functionality of lignin for its use in packaging materials. Among the most widely used strategies are esterification, epoxidation, amidation, glyoxalation, and transamination. These pathways enable structural tailoring of lignin,

facilitating better dispersion, interfacial adhesion, and integration within biodegradable polymer matrices.

Esterification with carboxylic acids, anhydrides, or acid chlorides (e.g., acetic, maleic, and succinic acids) introduces aliphatic fragments linked via ester bonds, thereby increasing hydrophobicity and enhancing polymer-filler interactions (Figure 3) (Libretti, 2024: 1234–1256). This method has been successfully applied to improve UV absorption and thermal stability.

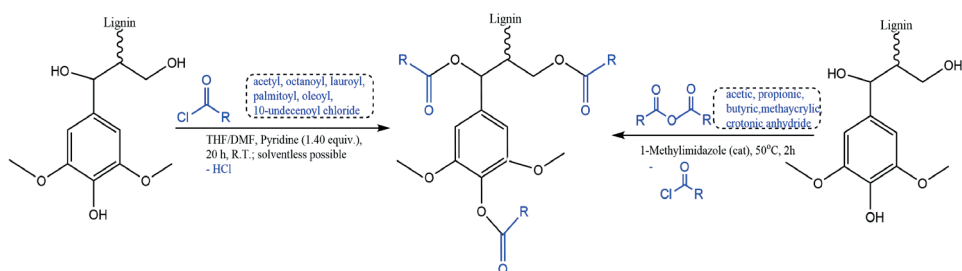


Figure 3 - Schematic representation of lignin esterification with acyl chlorides (left) and acid anhydrides (right). Adapted from (Libretti, 2024: 1234–1256)

Epoxidation, typically achieved through the reaction of lignin with epichlorohydrin under alkaline conditions, incorporates epoxy functionalities that allow lignin to act as a reactive crosslinker in thermosetting systems such as epoxy resins and polyurethanes (Figure 4) (Karoki, 2024: 7075–7096).

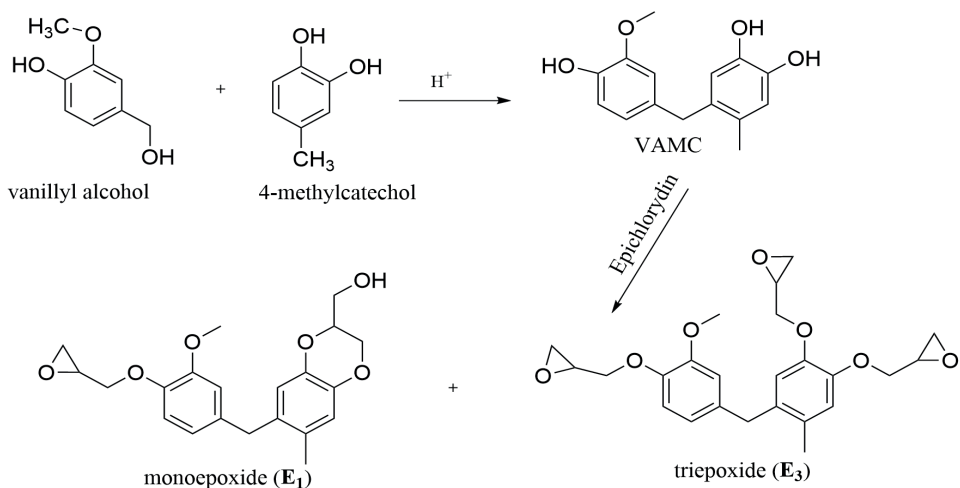


Figure 4. Schematic representation of vanillin-based epoxide synthesis. Adapted from (Karoki, 2024: 7075–7096)

Amidation and related amination strategies, such as transamination, enable the incorporation of nitrogen-containing functional groups into the lignin structure. These modifications enhance interfacial interactions with polymer matrices and enable dynamic

covalent bonding, which is particularly relevant for the design of covalent adaptable networks (CANs). Notably, lignin-based vitrimers incorporating such functionalities exhibit self-healing behavior, recyclability, and thermal reprocessability (Esakkimuthu, 2022: 7075–7096).

Glyoxalation and other aldehyde-based modifications improve the crosslinking potential of lignin by introducing reactive aldehyde groups capable of forming covalent bonds with lignin's hydroxyl functionalities. This results in enhanced mechanical strength and improved adhesion within composite materials (Libretti, 2024: 1234–1256). In particular, transamination reactions involving the dynamic exchange of boronate esters or aminoacetoacetate linkages provide reversible bonding mechanisms, further facilitating the development of reprocessable and thermally re-formable lignin-based vitrimer systems (Esakkimuthu, 2022: 7075–7096).

The chemical functionalization of lignin plays a pivotal role in tailoring its performance within composite materials. Esterification enhances the compatibility of lignin with hydrophobic polymer matrices such as polylactic acid (PLA) and polybutylene succinate (PBS), promoting uniform dispersion and mechanical reinforcement, particularly at low filler loadings (≤ 10 wt.%) (Libretti, 2024: 1234–1256). Epoxidized lignin functions as a reactive compatibilizer and crosslinking agent in epoxy and polyurethane systems, leading to improved tensile strength, thermal stability, and interfacial adhesion (Karoki, 2024: 7075–7096).

Amidated and transamidated lignin derivatives support the formation of dynamic covalent networks, as exemplified by lignin-based vitrimers that exhibit self-healing properties, thermal reprocessability, and enhanced adhesion. These materials demonstrate tensile strengths approaching 17 MPa and efficient stress relaxation behavior, with activation energies ranging from 50 to 110 kJ/mol due to transamination-based exchange mechanisms (Esakkimuthu, 2022: 7075–7096). Glyoxylated lignin, enriched in aldehyde functionalities, facilitates covalent crosslinking with hydroxyl groups, thereby improving film cohesion and water resistance – attributes that are particularly beneficial in coating formulations and flexible packaging applications (Libretti, 2024: 1234–1256).

Future Prospects and Industrial Challenges. Despite considerable progress at the laboratory scale, the industrial-scale production of lignin-based packaging materials remains constrained by several technical and regulatory challenges. One of the primary limitations is the variability in lignin composition, which depends on the botanical source and isolation method, leading to inconsistencies in physicochemical properties and impeding standardization. Moreover, the inherent polarity and limited compatibility of lignin with hydrophobic polymer matrices often result in phase separation and poor dispersion, unless compatibilizers or surface modification strategies are applied – thereby increasing process complexity and cost. Regulatory ambiguity, particularly in relation to the safety of food-contact materials and the potential migration of lignin-derived compounds, further hinders commercialization efforts (Boarino, 2023: 1065–1077).

Nonetheless, lignin holds substantial promise as a multifunctional additive in

sustainable packaging systems. Its incorporation into biodegradable polymers such as polylactic acid (PLA), polyhydroxyalkanoates (PHA), and polyvinyl alcohol (PVA) can significantly enhance oxygen barrier properties, ultraviolet resistance, and antioxidant activity. Particularly, lignin nanoparticles (LNPs) have demonstrated effectiveness at low loadings (typically 3-10 wt.%), offering performance improvements without sacrificing optical transparency or biodegradability. However, the prevention of nanoparticle aggregation remains a key technical hurdle. With optimized formulation and improved interfacial compatibility, lignin-based composites may emerge as viable alternatives to conventional plastics in targeted applications such as active food packaging and fully biodegradable film technologies (Zubair, 2024: 467–482).

From an economic standpoint, lignin represents a cost-effective raw material, as it is abundantly available as a by-product of the pulp and paper industry and emerging biorefinery processes. Its valorization offers the potential to enhance the overall profitability of biomass processing chains. However, to achieve economic competitiveness with petroleum-derived polymers, it is essential to reduce the costs associated with lignin upgrading, including fractionation, purification, and chemical functionalization. Technologically, the integration of lignin valorization pathways into existing pulp mills and biorefineries offers synergistic benefits, such as improved resource efficiency and reduced greenhouse gas emissions, thereby supporting the principles of the circular bioeconomy (Boarino, 2023: 1065-1077).

Nevertheless, regulatory considerations present additional barriers. The limited availability of comprehensive data on the migration behavior and toxicological safety of lignin and its derivatives complicates their approval for food-contact applications. Achieving regulatory compliance demands extensive safety testing and the generation of detailed toxicological and analytical documentation, which often requires significant financial and institutional investment (Gaikwad, 2023: n.p.).

To provide a comparative overview of lignin-based composites, Table 1 summarizes the key structural features, modification strategies, and resulting changes in mechanical and barrier properties. It highlights how chemical and physicochemical modifications—such as oxypropylation, nanoparticle formation, silane grafting, esterification, epoxidation, transamination, glyoxalation, and hybridization with tannins or metal oxides—affect tensile strength, Young’s modulus, and functional performance, including UV-shielding, water resistance, and oxygen permeability. The table facilitates identification of structure–property relationships and guides the evaluation of lignin-derived materials for sustainable biopolymer packaging applications.

Table 1. Structure–property relationships in modified lignin-based composites

Structure	Type of modification	Mechanical properties	Barrier / functional properties	Notes / Source
PLA/lignin blends	Unmodified lignin; reactive extrusion	Tensile strength at low loading increases; slight thermal transitions decreases	Oxygen permeability decreases; UV-blocking increases	Ge et al., 2020; experimental, low lignin loading

Oxypropylated lignin (PLA)	Oxypropylation (etherification)	Tensile strength increases, Young's modulus decreases; improved ductility	UV-shielding increases; moderate water vapor resistance decreases	Liu et al., 2023; confirmed at low to moderate loading
Kraft lignin nanoparticles (PLA, PBAT matrices)	Nanoparticle formation (self-assembly)	Tensile strength 10-40% depending on loading increases; improved stiffness	Strong UV-blocking; O ₂ transmission decreases; moderate water barrier	Zubair et al., 2024; experimentally verified
PBAT/lignin composites with silane grafting	Silane grafting	Young's modulus and tensile strength increase; biodegradability up to 96%	Water resistance increases; gas permeability decreases	Brodin et al., 2021; experimentally verified
Organosolv lignin (paper coatings)	Unmodified; coating formulation	Improved stiffness; enhanced surface hardness	Moisture resistance increases; wettability decreases	Javed et al., 2021; confirmed for paper coatings
Kraft lignin–starch hybrid coatings	Blending; partial crosslinking	Minor in mechanical strength increases	Hydrophobicity increases; possible pinholes affecting barrier uniformity	Javed et al., 2021; data limited
Lignin/tannin/ ZnO nanoparticle coatings	Hybrid modification	Not quantified	Strong UV-blocking; water absorption decreases; air permeability decreases	Li et al., 2021; prospective / experimental data limited
Epoxidized lignin (thermoset systems)	Epoxidation	Tensile strength increases; improved crosslink density; enhanced thermal stability	Barrier properties not reported	Karoki et al., 2024; data limited to thermosets
Esterified lignin (PLA, PBS systems)	Esterification (acylation, anhydrides)	Young's modulus increases; improved dispersion; better toughness at ≤10 wt%	Hydrophobicity reported; gas barrier data limited	Libretti et al., 2024; partial data
Amidated / transaminated lignin (vitrimers)	Amidation & transamination	Tensile strength up to ±17 MPa; self-healing	Barrier properties not classical; moisture resistance improved	Esakkimuthu et al., 2022; data limited to vitrimers
Glyoxalated lignin	Glyoxalation (aldehyde crosslinking)	Cohesion increases; mechanical strength in coatings increases	Water resistance increases; film durability data limited	Libretti et al., 2024; data mainly for adhesive/ coating systems
Lignin nanoparticles (PVA-based films)	Grafting onto cellulose nanofibers	Tensile strength increases; modulus increases; improved flexibility	Strong UV protection; oxygen permeability increases	Parit et al., 2022; experimentally verified
Functional lignin coatings (LNPs + functionalization)	LNPs + functionalization	Mechanical reinforcement depends on substrate	UV-blocking; oxygen scavenging; antimicrobial	Ruwoldt et al., 2023; data limited, substrate dependent

Conclusion. Lignin is a promising component for the development of sustainable packaging materials due to its natural abundance, biodegradability, and multifunctional properties. Incorporation of lignin into biopolymer matrices improves mechanical strength, water and gas barrier performance, and provides antioxidant and UV-shielding effects. The use of lignin nanoparticles and chemically modified derivatives allows for better dispersion and enhanced compatibility with polymers such as PLA, PBAT, starch, and PVA.

Esterification, epoxidation, amidation, and other chemical functionalization methods improve interfacial interactions and enable the design of advanced material systems, including recyclable networks and self-healing composites. Despite considerable progress, challenges remain related to the heterogeneity of lignin sources, phase separation in composite systems, and limited regulatory data for food-contact applications.

Further research is needed to standardize lignin feedstocks, optimize modification techniques, and ensure compliance with safety regulations. With proper dispersion and functionalization strategies, lignin-based composites can serve as efficient, environmentally responsible alternatives to fossil-derived polymers in various packaging applications.

References

- Boarino A., Klok H.-A. (2023) Opportunities and Challenges for Lignin Valorization in Food Packaging, Antimicrobial, and Agricultural Applications. *Biomacromolecules*. — Vol. 24, No. 3. — P. 1065–1077. DOI: 10.1021/acs.biomac.2c01385. (in English)
- Brodin M., Vallejos M.E., Opedal M.T., Area M.C., Chinga-Carrasco G. (2021) Enhanced mechanical and biodegradable properties of PBAT/lignin composites via silane grafting and reactive extrusion. *Composites Part B: Engineering*. — Vol. 220. — Art. No. 108980. DOI: 10.1016/j.compositesb.2021.108980. (in English)
- Esakkimuthu E.S., Pylypchuk I., Moreno A., Sipponen M.H. (2022) Multifunctional lignin-poly(lactic acid) biocomposites for packaging applications via etherification and transamination chemistries. *Frontiers in Bioengineering and Biotechnology*. — Vol. 10. — Article ID 102507. DOI: 10.3389/fbioe.2022.102507. (in English)
- Figueiredo P., Lintinen K., Hirvonen J.T., Kostianen M.A., Santos H.A. (2021) Properties and chemical modifications of lignin: Towards lignin-based nanomaterials for biomedical applications. *Progress in Materials Science*. — Vol. 112. — P. 100703. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2020.100703. (in English)
- Gaikwad K.K., Anushikha. (2023) Lignin as UV blocking, antioxidant, and antimicrobial agent for food packaging applications. *Biomass Conversion and Biorefinery*. — Vol. 14, No. 15. — Article ID 03707-3. DOI: 10.1007/s13399-022-03707-3. (in English)
- Ge X., Chang M., Jiang W., Zhang B., Xing R., Bulin C. (2020) Investigation on two modification strategies for the reinforcement of biodegradable lignin/poly(lactic acid) blends. *Journal of Applied Polymer Science*. — Vol. 137, No. 44. — Art. No. 49354. DOI: 10.1002/app.49354. (in English)
- Javed A., Rättö P., Järnström L., Ullsten H. (2021) Pilot-scale coating of paperboard with kraft lignin–starch blends: water stability and defect analysis. *Polymers*. — Vol. 13, No. 10. — Art. No. 1595. DOI: 10.3390/polym13101595. (in English)
- Kai D., Tan M.J., Chee P.L., Chua Y.K., Yap Y.L., Loh X.J. (2016) Towards lignin-based functional materials in a sustainable world. *Green Chemistry*. — Vol. 18, No. 5. — P. 1175–1200. DOI: 10.1039/C5GC02616D. (in English)
- Karoki P.K., Zhang S., Pu Y., Ragauskas A.J. (2024) Lignin-based vitrimers: valorization and utilization in high-value applications. *Materials Advances*. — Vol. 5. — P. 7075–7096. DOI: 10.1039/D4MA00281D. (in English)
- Li C., Zhao X., Wang A., Huber G.W., Zhang T. (2015) Catalytic transformation of lignin for the

production of chemicals and fuels. *Chemical Reviews*. — Vol. 115, No. 21. — P. 11559–11624. DOI: 10.1021/acs.chemrev.5b00155. (in English)

Li X.X., et al. (2021) Multifunctional composite coatings (lignin/tannin/ZnO NPs) for enhanced packaging properties. *Biomacromolecules*. — (online first). DOI: 10.1021/acs.biomac.1c00340. (in English)

Libretti C., Correa L.S., Meier M.A.R. (2024) Advancements in sustainable lignin modification: esterification, glyoxalation and their applications. *Green Chemistry*. — Vol. 26. — P. 1234–1256. DOI: 10.1039/D4GC00745J. (in English)

Liu R., Dai L., Xu J., Zeng Y., Yu H. (2023) Fully bio-based composites of polylactic acid and oxypropylated lignin with improved mechanical and UV-shielding performance. *Industrial Crops and Products*. — Vol. 196. — P. 116552. DOI: 10.1016/j.indcrop.2022.116552. (in English)

Norgren M., Edlund H. (2014) Lignin: Recent advances and emerging applications. *Current Opinion in Colloid & Interface Science*. — Vol. 19, No. 5. — P. 409–416. DOI: 10.1016/j.cocis.2014.07.003. (in English)

Parit M., Zhang X., Jiang Z., Du H. (2022) Flexible transparent UV-protective nanocomposite films based on PVA and kraft-lignin grafted cellulose nanofibers. *Advanced Functional Materials*. — Vol. 32. — Article ID 202201*. DOI: 10.1002/adfm.202201*. (in English)

Qian Y., Deng Y., Qiu X., Li H., Yang D. (2014) Formation of uniform colloidal spheres from lignin, a renewable resource recovered from pulping spent liquor. *Green Chemistry*. — Vol. 16, No. 4. — P. 2156–2163. DOI: 10.1039/C3GC42662J. (in English)

Ruwoldt J., Blindheim F.H., Chinga-Carrasco G. (2023) Functional surfaces, films and coatings with lignin: UV-blocking, oxygen scavenging, antimicrobial functions. *RSC Advances*. — Vol. 13. — Article ID d2ra08179b. DOI: 10.1039/D2RA08179B. (in English)

Wang H., Pu Y., Ragauskas A., Yang B. (2019) From lignin to valuable products – strategies, challenges, and prospects. *Bioresource Technology*. — Vol. 271. — P. 449–461. DOI: 10.1016/j.biortech.2018.09.072. (in English)

Wang X., Gao K., Zhang X., Zhang Z., Jiang J. (2024) Mild condition lignin modification enabled high-performance anticorrosive polyurethane coating. *International Journal of Biological Macromolecules*. — Vol. 280. — Art. No. 135719. DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2024.135719. (in English)

Zubair M., Javaid M.A., Ahmed F. (2024) Recent advances in lignin-derived nanocomposites for active food packaging. *Food & Function*. — Vol. 15, No. 3. — P. 467–482. DOI: 10.1039/D4FB00105B. (in English)

© Kh. Khimersen*, T.K. Jumadilov, A. Imangazy, G.T. Dyusseмбаева,
B. Totkhuskyzy, 2025.

A.B. Bekturov Institute of Chemical Sciences JSC, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: huana88@mail.ru

FEATURES OF THE INTERACTION OF POLYELECTROLYTES WITH GALLIUM IONS IN AQUEOUS MEDIA

Khimersen Khuangul — PhD, Scientific Researcher, A.B. Bekturov Institute of Chemical Sciences JSC, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: huana88@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5138-5997>;

Jumadilov Talkybek — Doctor of Chemical Sciences, Professor, A.B. Bekturov Institute of Chemical Sciences JSC, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: jumadilov@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9505-3719>;

Imangazy Aldan — Scientific Researcher, A.B. Bekturov Institute of Chemical Sciences JSC, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: kazpetrochem@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-7834-1022>;

Dyusseмбаева Gulnur — PhD student, A.B. Bekturov Institute of Chemical Sciences JSC, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: g_gazinovna@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2721-997X>;

Totkhuskyzy Bakytgul — PhD, Scientific Researcher, Odesa A.B. Bekturov Institute of Chemical Sciences JSC, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: bakytgul.sakenova@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8119-668X>.

Abstract. This research focuses on the comparative assessment of the sorption properties of cation exchange resins that are capable of absorbing gallium ions. Since gallium is a rare and strategically important metal, developing technologies for its efficient extraction and purification is a pressing issue in modern chemistry and metallurgy. Accordingly, we analyzed the sorption properties of weak and strong acid polyelectrolytes with respect to gallium ions using Atomic Emission Spectroscopy and Infrared Spectroscopic Analysis methods. The study revealed that the sorption capacity of all sorbents increases with prolonged reaction time. The PAA hydrogel and strongly acidic microporous cationite KU-2-8 (Na⁺) were found to possess a high exchange capacity for gallium (III) cations. The degree of sorption for macroporous weakly acidic resin Lewatit CNP LF (H⁺) is 34.79%, for hydrogel PAA it is 54.49%, and for microporous gel KU-2-8 (Na⁺) it is 53.93%. After 48 hours of interaction, the maximum degree of binding between the polymer chain and gallium ions in the hydrogel PAA was 2.79%. The analysis of ion-exchange materials has shown that the ion exchangers PAA, Lewatit CNP LF (H⁺) and KU-2-8 (Na⁺) exhibit the highest effective dynamic exchange

capacity for gallium ions among the tested samples. The distribution of gallium ions among the considered ion exchange resins increases in the order: PAAg > KU-2-8 (Na⁺) > Amberlite IR-120 > KU-8-2 (H⁺) > Lewatit CPN (H⁺). According to the results of the study, PAA hydrogel and microporous cationite KU-2-8 (Na⁺) can be recommended as efficient sorbents for Ga (III) ions.

Key words: gallium; cation exchange resins; PAA hydrogel; lewatis CNPLF; KU-2-8; Amberlite IR120; sorption degree

Funding: This research was funded by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (Grant No. AP26195783)

© Х. Химэрсэн, Т.К. Джумадилов, А. Имангазы, Г.Т. Дюсембаева,
Б. Тотхусқызы, 2025.

«Ө.Б. Бектұров атындағы химия ғылымдары институты» АҚ, Алматы, Қазақстан.
E-mail: huana88@mail.ru

ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТТЕРДІҢ ГАЛЛИЙ ИОНДАРЫМЕН СУ ОРТАСЫНДА ӘРЕКЕТТЕСУ ЕРЕКШЕЛІКТЕРІ

Химэрсэн Хуангул — PhD, ғылыми қызметкер, «Ө.Б. Бектұров атындағы химия ғылымдары институты» АҚ, Алматы, Қазақстан,
E-mail: huana88@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5138-5997>;

Джумадилов Талқыбек — химия ғылымдарының докторы, профессор, «Ө.Б. Бектұров атындағы химия ғылымдары институты» АҚ, Алматы, Қазақстан,
E-mail: jumadilov@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9505-3719>;

Имангазы Алдан — ғылыми қызметкер, «Ө.Б. Бектұров атындағы химия ғылымдары институты» АҚ, Алматы, Қазақстан,
E-mail: kazpetrochem@gmail.com; <https://orcid.org/0000-0001-7834-1022>;

Дюсембаева Гульнур — PhD докторант, кіші ғылыми қызметкер, «Ө.Б. Бектұров атындағы химия ғылымдары институты» АҚ, Алматы, Қазақстан,
E-mail: g_gazinovna@mail.ru; <https://orcid.org/0000-0003-2721-997X>;

Тотхусқызы Бақытгул — PhD, ғылыми қызметкер, «Ө.Б. Бектұров атындағы химия ғылымдары институты» АҚ, Алматы, Қазақстан,
E-mail: bakytgul.sakenova@mail.ru; <https://orcid.org/0000-0001-8119-668X>.

Аннотация: Бұл зерттеу галлий иондарын сіңіруге қабілетті катионал-мастырғыш шайырлардың сорбциялық қасиеттерін салыстырмалы бағалауға арналады. Галлий сирек әрі стратегиялық маңызды металл болғандықтан, оны тиімді бөліп алу мен тазарту технологияларын дамыту қазіргі химия мен металлургиядағы өзекті мәселе. Осыған орай атомдық эмиссиялық спектроскопия және инфрақызыл спектроскопиялық талдау әдістерімен әлсіз және күшті қышқылды полиэлектролиттердің галлий иондарына қатысты сорбциялық қасиеттеріне талдау жүргіздік. Алынған зерттеу нәтижелерінен әрекеттесу уақытының артуымен барлық сорбенттерде сорбция дәрежесі артатыны анықталды. Гель түріндегі полиакрил қышқылы гидрогелінің және күшті қышқылды микрокеуекті КУ-2-8 (Na⁺) катионалмастырғышының галлий (III) катиондарына қатысты

айтарлықтай жоғары алмасу қабілеті бар екені белгілі болды. Сору дәрежесі әлсіз қышқылды, макрокеуекті Леватит CNP LF (H^+) үшін 34.79%, ал гель түріндегі ПАҚГ үшін 54.49% және гель түріндегі микрокеуекті КУ-2-8 (Na^+) үшін 53,93%. Полимер тізбегінің галлий иондарымен байланысу дәрежесінің ең жоғары мәні 48 сағат әрекеттесуден кейін ПАҚ гидрогелінде 2.79% құрады. Тиімді динамикалық алмасу сыйымдылығы ПАҚГ, Леватит CNP LF (H^+) және КУ-2-8 (Na^+) ионалмастырғыштарында жоғары екені анықталды. Талдау нәтижелері бойынша қарастырылған ионалмастырғыштардың галлий иондарын сору дәрежесі мына қатар бойынша артатыны белгілі болды: ПАҚГ > КУ-2-8 (Na^+) > Amberlite IR120 > КУ-2-8 (H^+) > Леватит CNP (H^+). Зерттеу нәтижесі бойынша Ga (III) ионына тиімді сорбенттер ретінде полиакрил қышқылының гидрогелін және гель түріндегі микрокеуекті КУ-2-8 (Na^+) катионалмастырғышын ұсынуға болады.

Түйін сөздер: галлий, катионалмастырғыш шайырлар, ПАҚ гидрогелі, леватит CNPLF, КУ-2-8, Amberlite IR120, сорбция дәрежесі

***Қаржыландыру:** Зерттеу жұмысын Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігінің Ғылым комитеті (грант № AP26195783) қаржыландырды.*

© Х. Химэрсэн, Т.К. Джумадилов, А. Имангазы, Г.Т. Дюсембаева,
Б. Тотхусқызы, 2025.

АО «Институт химических наук имени А.Б. Бектурова», Алматы, Казахстан.
E-mail: huana88@mail.ru

ОСОБЕННОСТИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТОВ С ИОНАМИ ГАЛЛИЯ В ВОДНОЙ СРЕДЕ

Химэрсэн Хуангул — PhD, научный сотрудник, АО «Институт химических наук имени А.Б. Бектурова», Алматы, Казахстан,

E-mail: huana88@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5138-5997>;

Джумадилов Талқыбек — доктор химических наук, профессор, АО «Институт химических наук имени А.Б. Бектурова», Алматы, Казахстан,

E-mail: jumadilov@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9505-3719>;

Имангазы Алдан — научный сотрудник, АО «Институт химических наук имени А.Б. Бектурова», Алматы, Казахстан,

E-mail: kazpetrochem@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-7834-1022>;

Дюсембаева Гульнур — PhD докторант, младший научный сотрудник, АО «Институт химических наук имени А.Б. Бектурова», Алматы, Казахстан,

E-mail: g_gazinovna@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2721-997X>;

Тотхусқызы Бақытгул — PhD, научный сотрудник, АО «Институт химических наук имени А.Б. Бектурова», Алматы, Казахстан,

E-mail: bakytgul.sakenova@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8119-668X>.

Аннотация: Данное исследование посвящено сравнительной оценке сорбционных свойств катионообменных смол, способных поглощать ионы галлия. Поскольку галлий относится к числу редких и стратегически важных

металлов, разработка эффективных технологий его извлечения и очистки является актуальной задачей современной химии и гидрометаллургии. В связи с этим были проанализированы сорбционные характеристики слабокислотных и сильнокислотных полиэлектролитов по отношению к ионам галлия с использованием методов атомно-эмиссионной спектроскопии и инфракрасного спектроскопического анализа. Полученные данные показали, что степень сорбции возрастает с увеличением времени контакта для всех исследованных сорбентов. Установлено, что гидрогель полиакриловой кислоты (ПАК) и сильнокислотный микропористый катионит КУ-2-8 (Na^+) обладают существенно более высокой обменной ёмкостью по ионам галлия(III). Степень сорбции для слабокислотного макропористого ионита Lewatit CNPLF (H^+) составляет 34,79%, для гидрогеля ПАК — 54,49%, а для микропористого КУ-2-8 (Na^+) — 53,93%. Максимальная степень комплексообразования полимерной матрицы с ионами галлия в гидрогеле ПАК достигла 2,79% после 48 часов взаимодействия. Анализ ионообменных материалов показал, что сорбенты ПАК, Lewatit CNP LF (H^+) и КУ-2-8 (Na^+) демонстрируют наиболее высокую динамическую обменную ёмкость по ионам галлия среди исследованных образцов. Степень поглощения ионов Ga(III) увеличивается в следующем порядке: гидрогель ПАК > КУ-2-8 (Na^+) > Amberlite IR120 > КУ-2-8 (H^+) > Lewatit CNP (H^+). На основании результатов исследования гидрогель ПАК и микропористый катионит КУ-2-8 (Na^+) могут быть рекомендованы как эффективные сорбенты для извлечения ионов галлия(III) из водных растворов.

Ключевые слова: галлий, катионообменные смолы, гидрогель ПАК, леватит CNPLF, КУ-2-8, Amberlite IR120, степень сорбции

Финансирование: Работа выполнена при финансовой поддержке Комитета науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (грант № AP26195783)

Кіріспе. Галлий (Ga) – периодтық жүйенің 13-тобында (бұрынғы классификация бойынша – үшінші топтың негізгі топшасы, IIIA) орналасқан стратегиялық маңызды элемент. Иондық радиусы шамамен 0,62 Å. Табиғатта қоспа түрінде алюминий (боксит), мырыш (мырыш қоспалары) және германий (германит) кендерінде кездеседі (<https://www.examples.com/chemistry/gallium.html#:~:text=Gallium%20is%20utilized%20in%20various,the%20development%20of%20innovative%20technologies>). Галлийдің қорытпалары мен қосылыстары радиоэлектроника, шыны және керамика өнеркәсібі үшін өте маңызды. Мысалы, галлий арсениді (GaAs) және галлий нитриді (GaN) ұялы телефондар, суперкомпьютерлер және талшықты-оптикалық байланыс желілерінде қолданылатын жартылай өткізгіш материалдарды өндіруде қолданылады (Pechishcheva et al., 2020; Ji Gu, 2025; Popa et al., 2013; Shi et al., 2024)

Галлийді алу әдістеріне байланысты оны тікелей технологиялық ерітінділерден немесе құрамында Ga бар концентраттардан алу мүмкін. Шығу тегі әртүрлі технологиялық ерітінділерден Ga қосылыстарының бастапқы концентрациясын

қалпына келтіру және тазарту мәселесін шешуде ион алмасу процестері қолданылады (Chirkst et al., 2013; Cheremisina et al., 2013). Көптеген табиғи және жасанды қосылыстар ион алмасу қасиетіне ие. Бірақ практикалық маңыздылығы бойынша синтетикалық ион алмастырғыш шайырлардың алатын орны ерекше. Мұндай иониттердің ионогендік топтары сулы ерітінділерде диссоциацияланып ғана қоймайды, сонымен қатар белгілі бір жағдайларда ион алмастырғыш және комплекс түзуші қасиетке ие. Ион алмастырғыш шайырлардың сорбциялық қасиеттерін зерттеу нәтижесі өндірістік ағынды сулардан бағалы микроэлементтерді бөлуге септігін тигізеді (Pimneva, 2011; Hesamoddin et al., 2025; Nguyen et al., 2019; Jumadilov et al., 2017; Jumadilov et al., 2025). Галлий иондарына селективті катионалмастырғышты анықтау мақсатында галлийдің әртүрлі ион алмастырғыш шайырлардағы сорбциясы зерттелді: әлсіз қышқылды ПАҚГ, Леватит CNP LF (H^+), күшті қышқылды КУ-2-8 (H^+), КУ-2-8 (Na^+), Amberlite IR120.

Зерттеу материалдары мен әдістері. Зерттеу объектісі ретінде зертханада синтезделген полиакрилқышқылының гидрогелі (ПАҚГ) және өндірістік катионалмастырғыш шайырлар Леватит CNP LF (H^+) (Lanxess Deutschland GmbH, Кельн, Германия), Amberlite IR120 (Sigma-Oldrich, Германия), КУ-2-8 (H^+) және КУ-2-8 (Na^+) (Токем, Ресей) алынды.

ПАҚГ – полиакрилқышқылының гидрогелі стандартты әдіспен синтезделді (Jumadilov et al., 2024). Ісіну коэффициенті $K_i = 12.24$. Арнайы функционалдық топтардың болуына байланысты ион алмасу реакцияларына түсу қабілеті бар. Леватит CNP (H^+) – матрицасы тігілген полиакрилатқа негізделген әлсіз қышқылды макрокеуекті катион алмастырғыш.

КУ-2-8 H^+/Na^+ – стирол мен дивинилбензолдың сульфондалған сополимеріне негізделген гель түріндегі макрокеуекті құрылымы бар синтетикалық ионалмастырғыш шайыр. Жоғары осмостық тұрақтылықпен және агрессивті реагенттерге химиялық тұрақтылығымен сипатталады. Amberlite IR120 – стирол мен дивинилбензолдың сульфондалған сополимеріне негізделген күшті қышқылды гель типті катионалмастырғыш. КУ-2-8 (H^+) катионитінің аналогы. Ерітіндідегі галлий иондарының көзі ретінде галлий (III) нитраты гидраты $Ga(NO_3)_3 \cdot H_2O$ (Sigma-Oldrich, Германия) қолданылды. Галлий иондарының қалдық концентрациясы плазмамен индуктивті байланысқан атомды-эмиссионды спектрометрінде (ICAPPRO) анықталды. Зерттеу әдістер. Индуктивті байланысқан плазмалық атомдық эмиссиялық спектрометр (Thermo Fisher Scientific, АҚШ), NICOLET 5700 инфрақызыл спектрометр (Thermo Fischer Scientific, АҚШ).

Сорбция параметрлерін есептеу. Ионалмастырғыштардың галлий иондарын бөліп алу дәрежесі мына теңдеумен есептелді:

$$\eta = \frac{C_o - C_e}{C_o} * 100\%, \quad (1)$$

мұндағы C_o – ерітіндідегі галлий иондарының бастапқы концентрациясы, мг/л; C_e – ерітіндіде қалған галлий иондарының концентрациясы, мг/л.

Полимер тізбегінің байланысу дәрежесі мына формула бойынша есептелді:

$$\theta = \frac{v_{\text{сорб}}}{v_{\text{пол}}} * 100\%, \quad (2)$$

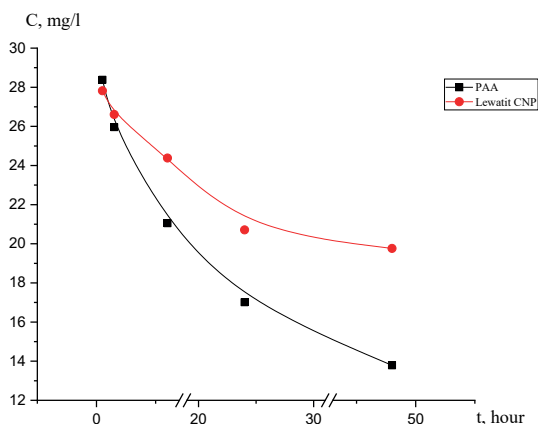
мұндағы $v_{\text{сорб}}$ – полимерге сорбцияланған галлий иондарының мөлшері, моль;
 $v_{\text{пол}}$ – полимер массасының мөлшері, моль.

Ионалмастырғыш шайырлардың тиімді динамикалық алмасу қабілеті мына формула бойынша есептелді:

$$Q = \frac{v_{\text{сорб}}}{m_{\text{пол}}}, \quad (3)$$

Мұндағы $v_{\text{сорб}}$ – полимерге сорбцияланған галлий иондарының мөлшері, моль;
 m – катиониттің массасы, г.

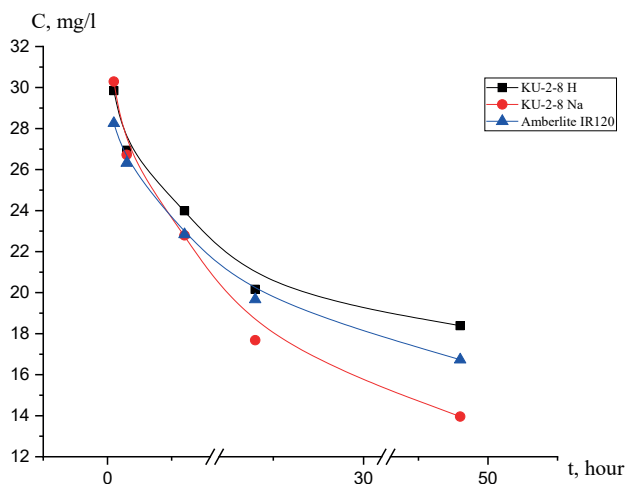
Зерттеу нәтижелері және оларды талқылау. Функционалды топтары ұқсас ПАҚ гидрогелі және Леватит CNP (H^+) катионалмастырғышы бойынша алынған сорбция қисықтары 1-суретте көрсетілген. Полимер мен металл арасындағы 48 сағат әрекеттесуден кейін галлийдің қалдық концентрациясы айтарлықтай төмендеген. Катионалмастырғыштың сорбциялық қасиетіне көптеген факторлар әсер ететіні белгілі: комплекстүзуші заттың табиғаты мен концентрациясы, иондық түрі, ерітіндінің қышқылдығы, температура, ерітіндіде басқада комплекстүзуші заттардың және металл иондарының кездесуі, катионалмастырғыштағы тігуші агенттің концентрациясы, және т.б. (Ehrlich et al., 2017). Ерітіндімен шайыр арасындағы тепе-теңдік Леватит CNP (H^+) үшін 24 сағаттан кейін орнаған. Мұнда галлидің қалдық концентрациясы 20.71 мг/л. 48 сағаттан кейін - 19.76 мг/л. Ал ПАҚ гидрогелі үшін сорбция 48 сағатта максималды жүрген - 13.79 мг/л. Катионалмастырғыштағы тігуші агенттің концентрациясы полимердің құрылымына әсер ететіндіктен, бұл жағдайда полиакрилқышқылды гидрогелінің сорбциялық сымдылығы жоғары екені байқалады.



Сурет 1 - Уақытқа байланысты Ga (III) концентрациясының өзгерісі

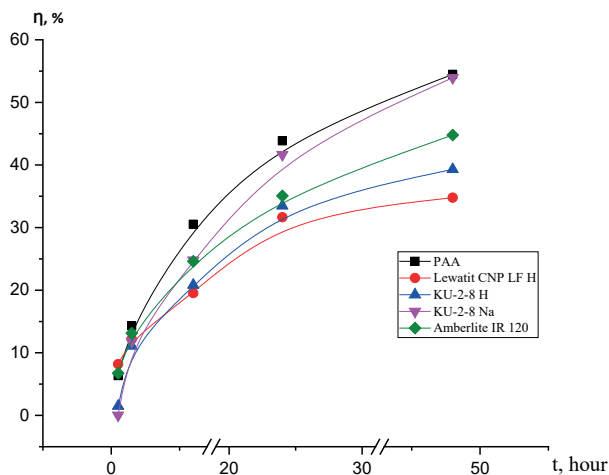
Келесі 2-суретте күшті қышқылды сульфокатиониттердің сорбциясы барысындағы Ga (III) иондарының концентрациясының өзгерісі берілген. Сульфокатиониттер қарапайым және химиялық инертті матрицаға ие, біртекті мономер бірліктері бар дивинилбензолмен стиролдың сополимері. Бұл ион алмастырғыштардың функционалды сульфотоптары спецификалы және көптеген катиондармен әрекеттеседі.

Зерттеу нәтижелерінен әрекеттесу уақытының артуымен барлық сорбенттерде сорбция дәрежесі артқаны байқалады. Ga (III) иондарының жоғары сорбциясы КУ-2-8 (Na^+) ион алмастырғышында басқа аналогтармен салыстырғанда айтарлықтай жоғары жүрген. Әдебиеттердегі мәліметтерге сүйене отырып, мұны катиониттің иондық түрі мен табиғатына және конформациялық өзгерісіне байланысты түсіндіруге болады (Nesterov, 2007). Полимердің сулы ортада ісінуі құрылымындағы функционалды топқа және противоионға байланысты. Себебі катиониттің ісіну дәрежесі H^+ иондық түрінде гидратациялану санына қарай салыстырмалы түрде төмен болса, Na^+ түріне ауысқанда жоғарылайды. Сондай-ақ гидратталған күйдегі радиусы үлкен иондарға жоғары ісіну құбылысы тән болғандықтан, бұл катионалмастырғыштың конформациялық өзгерісіне әкеледі.



Сурет 2 - Уақытқа байланысты Ga (III) концентрациясының өзгерісі

Функционалды тобымен иондық түрі әртүрлі ионалмастырғыштардың галлий иондарын сору дәрежесі 3-суретте берілген. Алынған қисықтардан гель түріндегі ПАҚ гидрогелінің және күшті қышқылды микрокеуекті КУ-2-8 (Na^+) катионалмастырғышының галлий (III) катиондарына қатысты айтарлықтай жоғары алмасу қабілеті бар екені байқалады. Әлсіз қышқылды, макрокеуекті Леватит CNP LF (H^+) үшін сору дәрежесі 34.79%, ал гель түріндегі ПАҚг сору дәрежесі 54.49%.



Сурет 3 - Катионалмастырғыштардың Ga (III) иондарын сору дәрежесінің уақытқа байланысты өзгерісі

Полимер тізбегінің байланысу дәрежесі (2) теңдеу арқылы есептелді. Полимер тізбегінің галлий иондарымен байланысу дәрежесінің ең жоғары мәні 48 сағат әрекеттесуден кейін ПАҚ гидрогелінде 2.79% құрады (1-кесте). Тиімді динамикалық алмасу сыйымдылығы ПАҚГ, Леватит CNP LF (H^+) және КУ-2-8 (Na^+) ионалмастырғыштарында жоғары екені анықталды (2-кесте).

Кесте 1. Полимер тізбегінің байланысу дәрежесі, θ %

Әрекет.уақыты, сағ.	0.5	1.5	6	24	48
ПАҚГ	0.28	0.70	1.54	2.24	2.79
Леватит CNP LF (H^+)	0.38	0.58	0.97	1.60	1.76
КУ-2-8 (H^+)	-	0.53	1.04	1.70	2.00
КУ-2-8 (Na^+)	-	0.57	1.25	2.13	2.77
Amberlite IR120	0.30	0.63	1.23	1.78	2.29

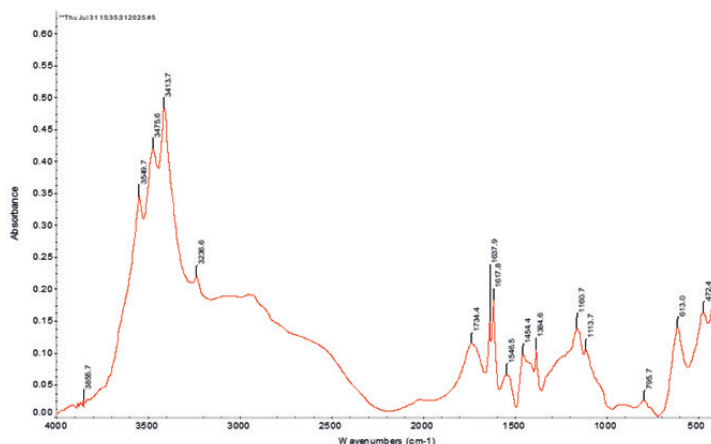
Кесте 2. Тиімді динамикалық алмасу сыйымдылығы, Q моль/г

Әрекет.уақыты, сағ.	0.5	1.5	6	24	48
ПАҚГ	0.000194	0.000483	0.00107	0.001553	0.001937
Леватит CNP LF (H^+)	0.000261	0.000405	0.000672	0.00111	0.001224
КУ-2-8 (H^+)	-	0.000147	0.000288	0.000472	0.000557
КУ-2-8 (Na^+)	-	0.000141	0.000309	0.000528	0.000687
Amberlite IR120	8.35E-05	0.000177	0.000343	0.000496	0.000637

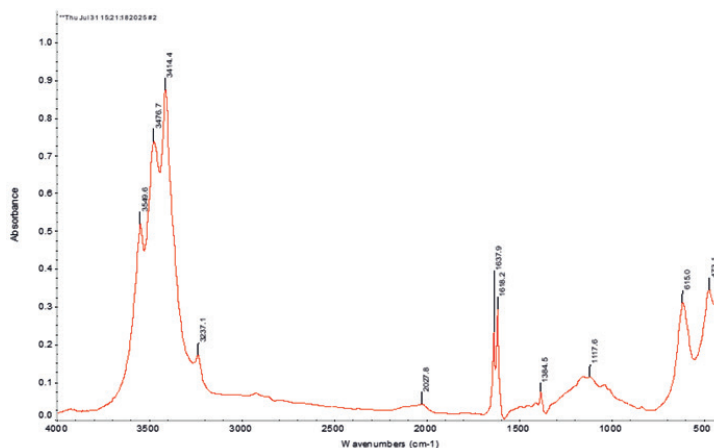
Галлий иондарына қаныққан полимерлердің (ПАҚ гидрогелі, КУ-2-8 (Na^+) ИҚ спектрлері алынды. ИҚ-спектрлік талдау галлий иондарының сорбциясы ПАҚ гидрогелінің функционалдық топтарындағы айқын құрылымдық өзгерістермен расталады (4-сурет). Сорбциядан кейін спектрде иондалмаған қышқылдың $C=O$

шыңының 1749.1 см^{-1} аймағында айтарлықтай әлсіреуі оның депротондалғанын білдіреді. Сондай-ақ, иондалған карбоксилаттың (COO^-) жолақтары күшейіп, ығысуы нәтижесінде 1617.8 см^{-1} және 1577.8 см^{-1} маңайында интенсивті асимметриялық тербеліс шыңдары пайда болады, бұл Ga (III) иондарының полимерлік матрицамен комплекс түзуін дәлелдейді.

5-суретте КУ-2-8 катионоалмастырғыш шайырының галлий иондарын сорбциялағаннан кейінгі ИҚ-спектрі көрсетілген. Спектрдегі өзгерістер КУ-2-8 (Na^+) шайырымен Ga (III) иондарының сорбциясы екі негізгі механизм бойынша жүргенін көрсетеді: 1. Ион алмасу: Ga (III) ионының шайырдағы H^+ ионын алмастыруына байланысты сульфотоптардың басты жолақтарының ығысуы (мысалы, $1037.6\text{ см}^{-1} \rightarrow 1117.6\text{ см}^{-1}$). 2. Координациялық байланыс: Төменгі жиілік аймағындағы 473.1 см^{-1} жолақтың пайда болуы галлий-оттек (Ga-O) координациялық байланыстарының түзілгенін растайды.



Сурет 4 - Галлий иондарының сорбциясынан кейін ПАҚ гидрогелінің ИҚ спектрі



Сурет 5 - Галлий иондарының сорбциясынан кейін КУ-2-8 ионоалмастырғыш шайырының ИҚ спектрі

Қорытынды. Қарастырылған ионалмастырғыштарды сорбциялық сипаттамаларына қарай (Ga (III) ионына қатысты) мына қатарға орналастыруға болады: ПАҚГ > КУ-2-8 (Na⁺) > Amberlite IR120 > КУ-2-8 (H⁺) > Леватит CNP (H⁺). Су ерітінділерінен Ga (III) катиондарын сорбциялауға тиімді сорбенттер ретінде ПАҚ гидрогелін және гель түріндегі микрокеукті КУ-2-8 (Na⁺) катионалмастырғышын ұсынуға болады.

Әдебиеттер

<https://www.examples.com/chemistry/gallium.html#:~:text=Gallium%20is%20utilized%20in%20various,the%20development%20of%20innovative%20technologies>

Печищева Н.В., Коробицына А.Д. & Мельчакова О.В. (2020) Особенности сорбции галлия на механоактивированном диоксиде титана. Труды Кольского научного центра РАН. — 11(3-4). — С.97-103.

Ji Gu. (2025) Integration and performance optimization of gallium nitride barrier micro nano electromechanical systems in intelligent agricultural sensor networks. *Measurement: Sensors*. — Vol. 38. <https://doi.org/10.1016/j.measen.2025.101814>

Popa L. & Weinstein D. (2013) 2DEG electrodes for piezoelectric transduction of AlGaIn/GaN MEMS resonators. Joint European Frequency and Time Forum and International Frequency Control Symposium, EFTF/IFC 2013. — P.922-925. <https://doi.org/10.1109/EFTF-IFC.2013.6702242>.

Shi J., Shao H., Wang K., Zhang T., Gong Y. & He Y. (2024) 3D-printed gallium-doped calcium silicate bioceramic scaffolds with high strength and osteogenesis-promoting properties. *Ceramics International*. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2024.12.533>.

Чиркст Д.Э., Черемисина О.В., Черемисина Е.А. & Пономарева М.А. (2013) Сорбция галлия из щелочных растворов на анионитах. Известия высших учебных заведений. Цветная металлургия. — 22. — С.14-22.

Cheremisinina O., Chirkst D. & Ponomareva M. (2013) Thermodynamic study of cerium sorption onto anionite from sulfate media. *Russian Journal of Physical Chemistry A*. — 87 (2). — P.294-300. <https://doi.org/10.1134/S0036024413020349>.

Пимнева Л.А. (2011) Ионообменный способ очистки галлия от примесей. Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. — 10 (1). — С.82-83.

Hesamoddin G., Mohadeseh B. L., Mojtaba D., Mehrdad M. & Salman M. (2025) Optimized gallium extraction from Bayer liquor using ion exchange: Experimental modeling in batch mode and demonstration in continuous columns. *Results in Engineering*. — 27, 106753. <https://doi.org/10.1016/j.rineng.2025.106753>.

Nguyen T. H. & Lee M. S. (2019) A Review on Separation of Gallium and Indium from Leach Liquors by Solvent Extraction and Ion Exchange. *Mineral Processing and Extractive Metallurgy Review*. — 40(4). — P. 278–291. <https://doi.org/10.1080/08827508.2018.1538987>.

Jumadilov T.K., Kondaurav R.G., Abilov Z.A., Grazulevicius J.V. & Akimov A.A. (2017) Influence of polyacrylic acid and poly-4-vinylpyridine hydrogels mutual activation in intergel system on their sorption properties in relation to lanthanum (III) ions. *Polymer Bulletin*. — 74 (11). — P. 4701-4713. <https://doi.org/10.1007/s00289-017-1985-3>.

Jumadilov T.K., Suleimenova M.T. & Gražulevicius J.V. Selective Sorption of Gold Ions from Iron-Rich Solutions Using a Dual-Phase Interpolymer System. *Engineered Science*. — 35 (1482). <https://doi.org/10.30919/es1482>

Jumadilov T.K., Khimersen K., Haponiuk J.T. & Totkhuskyzy B. (2024) Enhanced Lutetium Ion Sorption from Aqueous Solutions Using Activated Ion Exchangers. *Polymers*. — 16. 220. <https://doi.org/10.3390/polym16020220>.

Эрлих Г.В. & Лисичкин Г.В. (2017) Сорбция в химии редкоземельных элементов. Журнал общей химии. — 6. — С.1001-1027.

Нестеров Ю. В. (2007) Иониты и ионообмен. Сорбционная технология при добыче урана и других металлов методом подземного выщелачивания. Москва: Юникор-Издат. — 480 с.

References

<https://www.examples.com/chemistry/gallium.html#:~:text=Gallium%20is%20utilized%20in%20various,the%20development%20of%20innovative%20technologies> (in English)

Pechishcheva N.V., Korobitsyna A.D. & Melchakova O.V. (2020). Osobennosti sorbtsii galliya na mekhanoaktivirovannom dioksidi titana [Features of gallium sorption on mechanically activated titanium dioxide]. Proceedings of the Kola Science Center of the RAS. — 11(3-4). — P.97-103. (in Russian)

Ji Gu. (2025) Integration and performance optimization of gallium nitride barrier micro nano electromechanical systems in intelligent agricultural sensor networks. *Measurement: Sensors*. — Vol. 38. <https://doi.org/10.1016/j.measen.2025.101814> (in English)

Popa L. & Weinstein D. (2013). 2DEG electrodes for piezoelectric transduction of AlGaIn/GaN MEMS resonators. Joint European Frequency and Time Forum and International Frequency Control Symposium, EFTF/IFC 2013. — P. 922-925. <https://doi.org/10.1109/EFTF-IFC.2013.6702242> (in English)

Shi J., Shao H., Wang K., Zhang T., Gong Y. & He Y. (2024) 3D-printed gallium-doped calcium silicate bioceramic scaffolds with high strength and osteogenesis-promoting properties. *Ceramics International*. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2024.12.533>. (in English)

Chirkst D.E., Cheremisina O.V., Cheremisina E.A. & Ponomareva M.A. (2013) Sorbtsiya galliya iz shchelochnykh rastvorov na anionitakh [Gallium sorption from alkaline solutions on anion exchangers]. News of higher educational institutions. Non-ferrous metallurgy. — 22. — P. 14-22. (in Russian)

Cheremisina O., Chirkst D. & Ponomareva M. (2013) Thermodynamic study of cerium sorption onto anionite from sulfate media. *Russian Journal of Physical Chemistry A*. — 87 (2). — P.294-300. <https://doi.org/10.1134/S0036024413020349> (in English)

Pimneva L.A. (2011). Ionoobmennyy sposob ochistki galliya ot primesey [Ion-exchange method for purifying gallium from impurities]. *International Journal of Applied and Fundamental Research*. — 10 (1). — P.82-83. (in Russian)

Hesamoddin G., Mohadeseh B. L., Mojtaba D., Mehrdad M. & Salman M. (2025). Optimized gallium extraction from Bayer liquor using ion exchange: Experimental modeling in batch mode and demonstration in continuous columns. *Results in Engineering*, 27, 106753. <https://doi.org/10.1016/j.rineng.2025.106753> (in English)

Nguyen T.H. & Lee M.S. (2019) A Review on Separation of Gallium and Indium from Leach Liquors by Solvent Extraction and Ion Exchange. *Mineral Processing and Extractive Metallurgy Review*. — 40(4). — P. 278–291. <https://doi.org/10.1080/08827508.2018.1538987> (in English)

Jumadilov T.K., Kondaurov R.G., Abilov Z.A., Gražulevicius J.V. & Akimov A.A. (2017) Influence of polyacrylic acid and poly-4-vinylpyridine hydrogels mutual activation in intergel system on their sorption properties in relation to lanthanum (III) ions. *Polymer Bulletin*. — 74 (11). — P. 4701–4713. <https://doi.org/10.1007/s00289-017-1985-3> (in English)

Jumadilov T.K., Suleimenova M.T. & Gražulevicius J.V. (2025) Selective Sorption of Gold Ions from Iron-Rich Solutions Using a Dual-Phase Interpolymer System. *Engineered Science*. — 35 (1482). <https://doi.org/10.30919/es1482> (in English)

Jumadilov T.K., Khimersen K., Haponiuk J.T. & Totkhuskyzy B. (2024). Enhanced Lutetium Ion Sorption from Aqueous Solutions Using Activated Ion Exchangers. *Polymers*. — 16. 220. <https://doi.org/10.3390/polym16020220> (in English)

Erlich G.V. & Lisichkin G.V. (2017) Sorbtsiya v khimii redkozemel'nykh elementov [Sorption in the chemistry of rare earth elements]. *Russian Journal of General Chemistry*. — 6. — P.1001-1027. (in Russian)

Nesterov Yu.V. (2007) Ionity i ionoobmen. Sorbtsionnaya tekhnologiya pri dobyche urana i drugikh metallov metodom podzemnogo vyshchelachivaniya [Ion exchangers and ion exchange. Sorption technology in the extraction of uranium and other metals by underground leaching]. Moscow: Unicor-Izdat. — 480 p. (in Russian)

Publication Ethics and Publication Malpractice in the journals of the Central Asian Academic Research Center LLP

For information on Ethics in publishing and Ethical guidelines for journal publication see <http://www.elsevier.com/publishingethics> and <http://www.elsevier.com/journal-authors/ethics>.

Submission of an article to the journals of the Central Asian Academic Research Center LLP implies that the described work has not been published previously (except in the form of an abstract or as part of a published lecture or academic thesis or as an electronic preprint, see <http://www.elsevier.com/postingpolicy>), that it is not under consideration for publication elsewhere, that its publication is approved by all authors and tacitly or explicitly by the responsible authorities where the work was carried out, and that, if accepted, it will not be published elsewhere in the same form, in English or in any other language, including electronically without the written consent of the copyright-holder. In particular, translations into English of papers already published in another language are not accepted.

No other forms of scientific misconduct are allowed, such as plagiarism, falsification, fraudulent data, incorrect interpretation of other works, incorrect citations, etc. The Central Asian Academic Research Center LLP follows the Code of Conduct of the Committee on Publication Ethics (COPE), and follows the COPE Flowcharts for Resolving Cases of Suspected Misconduct (http://publicationethics.org/files/u2/New_Code.pdf). To verify originality, your article may be checked by the Cross Check originality detection service <http://www.elsevier.com/editors/plagdetect>.

The authors are obliged to participate in peer review process and be ready to provide corrections, clarifications, retractions and apologies when needed. All authors of a paper should have significantly contributed to the research.

The reviewers should provide objective judgments and should point out relevant published works which are not yet cited. Reviewed articles should be treated confidentially. The reviewers will be chosen in such a way that there is no conflict of interests with respect to the research, the authors and/or the research funders.

The editors have complete responsibility and authority to reject or accept a paper, and they will only accept a paper when reasonably certain. They will preserve anonymity of reviewers and promote publication of corrections, clarifications, retractions and apologies when needed. The acceptance of a paper automatically implies the copyright transfer to the Central Asian Academic Research Center LLP.

The Editorial Board of the Central Asian Academic Research Center LLP will monitor and safeguard publishing ethics.

Правила оформления статьи для публикации в журнале смотреть на сайтах:

www.nauka-nanrk.kz

<http://chemistry-technology.kz/index.php/en/arhiv>

ISSN 2518-1491 (Online), ISSN 2224-5286 (Print)

Ответственный редактор *А. Ботанқызы*

Редакторы: *Д.С. Аленов, Т. Апендиев*

Верстка на компьютере *Г.Д. Жадырановой*

Подписано в печать 23.12.2025.

Формат 60х88¹/₈. Бумага офсетная. Печать – ризограф.

13,5 п.л. Заказ 4.

«Central Asian Academic Research Center» LLP

Алматы, Қонаев к-сі, 142