

ISSN 2518-1483 (Online),
ISSN 2224-5227 (Print)

**ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES**

**№3
2026**

ISSN 2518-1483 (Online),
ISSN 2224-5227 (Print)

2026 • 3



ACADEMIC JOURNAL OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES

PUBLISHED SINCE JANUARY 1944

ALMATY, NAS RK

Editor-in-Chief:

ZHURINOV Murat Zhurinovich, Doctor of Chemical Sciences, Professor, Academician of IAAS and NAS RK, General Director of the Research Institute of Petroleum Refining and Petrochemicals (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602177960> <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2017489>

Editorial Board:

KALIMOLDAYEV Maksat Nuradilovich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Academician of NAS RK (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=56153126500>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2428551>

ADEKENOV Sergazy Mynzhasarovich, Doctor of Chemical Sciences, Professor, Academician of NAS RK, Director of the JSC "Phytochemistry Research and Production Center", (Karaganda, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7006153118>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/48648658>

RAMAZANOV Tlekkaul Sabitovich, (Deputy Editor-in-Chief), Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Academician of NAS RK (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6701328029>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/13503476>

ABIEV Rufat, Doctor of Technical Sciences (Biochemistry), Professor, Head of the Department of Optimization of Chemical and Biotechnological Equipment, St. Petersburg State Technological Institute (St. Petersburg, Russia), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602431781>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1405661>

OLIVIERO Rossi Cesare, PhD (Chemistry), Professor at the University of Calabria (Calabria, Italy), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57221375979>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/399768>

TIGINYANU Ion Mihailovich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Academician, President of the Academy of Sciences of Moldova, Technical University of Moldova (Chisinau, Moldova), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7006315935>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/524462>

SANG SU Kwak, PhD (Biochemistry, Agricultural Chemistry), Professor, Chief Scientist, Research Center for Plant Systems Engineering, Korea Research Institute of Bioscience and Biotechnology (KRIBB), (Daecheon, Korea), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=59286321700>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/30028581>

BERSIMBAYEV Rakhmetkazhi Iskenderovich, Doctor of Biological Sciences, Professor, Academician of NAS RK, L.N. Gumilyov Eurasian National University (Astana, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7004012398>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/19854255>

CALANDRA Pietro, PhD (Physics), Professor, Institute for the Study of Nanostructured Materials (Rome, Italy), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7004303066>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/616360>

BOSHKAEV Kuantai Avgazyevich, PhD, Associate Professor, Department of Theoretical and Nuclear Physics, Al-Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=54883880400>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2080231>

BURKITBAEV Mukhambetkali, Doctor of Chemical Sciences, Professor, Academician of NAS RK, (Almaty, Kazakhstan) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=8513885600>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/29017135>

QUEVEDO Hernando, Professor, National Autonomous University of Mexico (UNAM), Institute of Nuclear Sciences (Mexico City, Mexico), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=55989741100>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/30353742>

ZHUSUPOV Marat Abzhanovich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor of the Department of Theoretical and Nuclear Physics, Al-Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602166928>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/566>

KOVALEV Alexander Mikhailovich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Academician of NAS of Ukraine, Institute of Applied Mathematics and Mechanics (Donetsk, Ukraine), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7202799321>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/65533963>

TAKIBAEV Nurgali Zhabagaevich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Academician of NAS RK, Al-Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=24077239000>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1671760>

KHARIN Stanislav Nikolaevich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Academician of NAS RK, Kazakh-British Technical University (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6701353063>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2023295>

ABISHEV Medeu Erzhanovich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Corresponding Member of NAS RK, (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=26530759900>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1556025>

ABILMAGZHANOV Arlan Zainutallaevich, PhD in Chemistry, First Deputy Director General of JSC "Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry named after D.V. Sokolsky", (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57197468109>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2024265>

ACADEMIC JOURNAL OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES.

ISSN 2518-1483 (Online), ISSN 2224-5227 (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 № **KZ93VPY00121157** issued **05.06.2025**

Thematic scope: *physics and chemistry*.

Periodicity: 4 times a year.

<http://reports-science.kz/index.php/en/archive>

Бас редактор:

ЖҰРЫНОВ Мұрат Жұрынулы, химия ғылымдарының докторы, профессор, ХҒАҚ және ҚР ҰҒА академигі, Мұнай өңдеу және мұнай-химиясы ғылыми-зерттеу институтының бас директоры (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602177960%2638>; <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2017489>

Редакция ұжымы:

КАЛИМОЛДАЕВ Максат Нұрәділулы, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=56153126500>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2428551>

ӘДЕКЕНОВ Серғазы Мынжасарұлы, химия ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, "Фитохимия" ғылыми-өндірістік орталығы " АҚ директоры (Қарағанды, Қазақстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7006153118>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/48648658>

РАМАЗАНОВ Тілеккабыл Сәбитұлы, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6701328029>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/13503476>

ӘБИЕВ Руфат, техника ғылымдарының докторы (биохимия), профессор, Санкт-Петербург мемлекеттік технологиялық институты «Химиялық және биотехнологиялық аппаратураны оңтайландыру» кафедрасының меңгерушісі, (Санкт-Петербург, Ресей), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602431781>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1405661>

ОЛИВЬЕРО Росси Сесаре, PhD (химия), Калабрия университетінің профессоры (Калабрия, Италия), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57221375979>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/399768>

ТИГІНЯНУ Ион Михайлович, физика-математика ғылымдарының докторы, академик, Молдова Ғылым Академиясының президенті, Молдова техникалық университеті (Кишинев, Молдова), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7006315935>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/524462>

САНГ-СУ Квак, PhD (биохимия, агрохимия), профессор, Корея Биология және биотехнология ғылыми-зерттеу институты (KRIIBV), өсімдіктердің инженерлік жүйелері ғылыми-зерттеу орталығының бас ғылыми қызметкері, (Дэчон, Корея), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=59286321700>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/30028581>

БЕРСІМБАЕВ Рахметқажы Ескендірұлы, биология ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті. (Астана, Қазақстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7004012398>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/19854255>

КАЛАНДРА Пьетро, PhD (физика), нанотехнология материалдары зерттеу институтының профессоры (Рим, Италия), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7004303066>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/616360>

БОШКАЕВ Қуантай Авғазыұлы, Ph.D. Теориялық және ядролық физика кафедрасының доценті, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=54883880400>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2080231>

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/29017135>

QUEVEDO Hernando, профессор, Мексика ұлттық автономиялық университеті (UNAM), Ядролық ғылымдар институты (Мехико, Мексика), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=55989741100>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/30353742>

ЖҮСІПОВ Марат Абжанұлы, физика-математика ғылымдарының докторы, теориялық және ядролық физика кафедрасының профессоры, Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602166928>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/566>

КОВАЛЕВ Александр Михайлович, физика-математика ғылымдарының докторы, Украина ҰҒА академигі, Қолданбалы математика және механика институты (Донецк, Украина), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7202799321>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/65533963>

ТАКИБАЕВ Нұрғали Жабағұлы, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=24077239000>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1671760>

ХАРИН Станислав Николаевич, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6701353063>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2023295>

ӘБІШЕВ Медеу Ержанұлы, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=26530759900>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1556025>

ӘБІЛМАҒЖАНОВ Арлан Зайнуталлайұлы, химия ғылымдарының кандидаты, Д.В. Сокольский атындағы "Отын, катализ және электрохимия институты" АҚ Бас директорының бірінші орынбасары, (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57197468109>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2024265>

ACADEMIC JOURNAL OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES

ISSN 2518-1483 (Online), ISSN 2224-5227 (Print)

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

Ақпарат агенттігінің мерзімді баспасөз басылымын, ақпарат агенттігін және желілік басылымды қайта есепке қою туралы ҚР Мәдениет және Ақпарат министрлігі «Ақпарат комитеті» Республикалық мемлекеттік мекемесі 05.06.2025 ж. берген № KZ93VPY00121157 Куәлік.

Тақырыптық бағыты: физика, химия.

Мерзімділігі: жылына 4 рет.

<http://reports-science.kz/index.php/en/archive>

Главный редактор:

ЖУРИНОВ Мурат Журинович, доктор химических наук, профессор, академик МАН и НАН РК, Генеральный директор НИИ нефтепереработки и нефтехимии (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602177960%3Cbr>https://www.webofscience.com/wos/author/record/2017489>

Редакционная коллегия:

КАЛИМОЛДАЕВ Максат Нурадилович, доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=56153126500>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2428551>

АДЕКЕНОВ Сергезы Мынжасарович, доктор химических наук, профессор, академик НАН РК, директор АО "Научно-производственного центра "Фитохимия" (Караганда, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7006153118>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/48648658>

РАМАЗАНОВ Тлеккабул Сабитович, (заместитель главного редактора), доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6701328029>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/13503476>

АБИЕВ Руфат, доктор технических наук (биохимия), профессор, заведующий кафедрой «Оптимизация химической и биотехнологической аппаратуры», Санкт-Петербургский государственный технологический институт (Санкт-Петербург, Россия), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602431781>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1405661>

ОЛИВЬЕРО Росси Чезаре, доктор философии (PhD, химия), профессор Университета Калабрии (Калабрия, Италия), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57221375979>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/399768>

ТИГИНЯНУ Ион Михайлович, доктор физико-математических наук, академик, президент Академии наук Молдовы, Технический университет Молдовы (Кишинев, Молдова), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7006315935>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/524462>

САНГ-СУ Квак, доктор философии (PhD, биохимия, агрохимия), профессор, главный научный сотрудник, Научно-исследовательский центр инженерных систем растений, Корейский научно-исследовательский институт бионауки и биотехнологии (KRIBB), (Дэжон, Корея), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=59286321700>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/30028581>

БЕРСИМБАЕВ Рахметкажи Искендинович, доктор биологических наук, профессор, академик НАН РК, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева (Астана, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7004012398>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/19854255>

КАЛАНДРА Пьетро, доктор философии (PhD, физика), профессор Института по изучению наноструктурированных материалов (Рим, Италия), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7004303066>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/616360>

БОШКАЕВ Куантай Авгазыевич, PhD, преподаватель, доцент кафедры теоретической и ядерной физики, Казахский национальный университет им. Аль-Фараби (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=54883880400>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2080231>

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/29017135>

QUEVEDO Hernando, профессор, Национальный автономный университет Мексики (UNAM), Институт ядерных наук (Мехико, Мексика), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=55989741100>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/30353742>

ЖУСУПОВ Марат Абжанович, доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической и ядерной физики, Казахский национальный университет им. аль-Фараби (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602166928>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/566>

КОВАЛЕВ Александр Михайлович, доктор физико-математических наук, академик НАН Украины, Институт прикладной математики и механики (Донецк, Украина), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7202799321>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/65533963>

ТАКИБАЕВ Нурғали Жабағәевич, доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК, Казахский национальный университет им. Аль-Фараби (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=24077239000>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1671760>

ХАРИН Станислав Николаевич, доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6701353063>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2023295>

АБИШЕВ Медеу Ержанович, доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК, (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=26530759900>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1556025>

АБИЛМАТЖАНОВ Арлан Зайнуталлаевич, кандидат химических наук, первый заместитель генерального директора АО «Институт топлива, катализа и электрохимии им. Д.В. Сокольского», (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57197468109>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2024265>

ACADEMIC JOURNAL OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES

ISSN 2518-1483 (Online), ISSN 2224-5227 (Print)

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

Свидетельство № KZ93VPY00121157 о повторной регистрации периодического печатного издания информационного агентства, информационного агентства и сетевого издания, выданное Республиканским государственным учреждением «Комитет информации» Министерства культуры и информации Республики Казахстан 05.06.2025

Тематическая направленность: физика, химия.

Периодичность: 4 раза в год.

<http://reports-science.kz/index.php/en/archive>

© ТОО «Центрально-азиатский академический научный центр», 2026

CONTENTS

PHYSICS

Aliuly A., Kaltayev A.

Aliuly A., Kaltayev A. Assessment of the Applicability of Similarity Laws for Centrifugal Pump Scaling Based on Hydrodynamic Modeling.....14

Baratov A.G., Sailaubek A., Serik A.S.

Synthesis and Investigation of a Narrow-Bandgap SrTaO₂N-Based Photocatalyst.....33

Nurbayev B., Dmitriyeva E., Kemelbekova A.

Modern Methods of Selective Lithium Leaching from Spent Lithium-Ion Batteries.....45

Seitov A., Amanzholov T.

Comparative Analysis of One-Dimensional Physical-Hydrodynamic Models of Centrifugal Flow in an Impeller for Mineralized Media.....60

Syzdykova A.M., Serikbayev N.S., Kutum B.B.

Local Kodama-Type Transformations and Integrability Limits of the Extended Fifth-Order Korteweg-de Vries Equation.....83

Ualikhanova U.A., Ussipkyzy T., Altayeva G.S., Razina O.V.

Calculation of the Screened $f(T)$ Gravity Model.....101

Zhadyranova A.A., Tsyba P.Yu., Ismail U.K., Yerzhan B.

Divergence-Free Deceleration Parameter, Kinematic Constraints from DESI DR2 and Cosmic Chronometers.....123

Zhenishan K., Bekov S.S., Syzdykova A.M.

The Influence of Gaussian Process Parameters on Reconstructing the Hubble Constant.....146

CHEMISTRY

Amangeldi B., Zhanikulov N., Taimasov B., Aitureev M., Dauletiyarov M.

Research of the Firing Processes and Whiteness of White Cement Clinkers.....155

Baisalova G.Zh., Bauyrzhanova G.B., Niyaz G.A., Taltenov A.A., Ainabayev A.A.

Study of the Chemical Composition of Ethanol Extracts of Lady's Mantle by Gas Chromatography-Mass Spectrometry.....169

Bishimbaev V.K., Kapsalyamov B.A.

Hydrogeochemical Indicators of Sulfuric-Acid Uranium Leaching Impact on Groundwater in Shieli and Zhanakorgan Districts.....183

Darmenbayeva A.S., Aubakirova R.A. Nurgaliyeva D.A., Abylkassova G.E., Abilmazhinova G.A.

Structural and Morphological Features of Polymer-Metal Functional Materials.....205

Dyusebaeva M.A., Berganayeva A.E., Ibragimova N.A., Utaraliev D.M., Berganayeva G.E.

Green synthesis of silver nanoparticles using the n-butanol fraction of Galega officinalis L.....223

Dyussembekova S.B., Utarova D.A., Kuspanov Zh.B., Daulbayev Ch.B., Abdikarimova U.A. Investigation of the Effect of SrTiO ₃ Heat Treatment on the Photocatalytic Efficiency of the \	
Decomposition of an Amphoteric Antibiotic.....	239
Issayeva U.B., Akhmetova G.S., Praliyev K.D., Malmakova A.E., Seilkhanov T.M. 1-Benzyl-4-(p-Fluorobenzoyloxyimino)Piperidine Hydrochloride as a Candidate for	
an Anti-Infective Agent.....	252
Kamunur K., Yskak M., Mussapyrova L. Effect of Chemical Modification of Sodium Lignosulfonate on Flotation Properties in the	
Barite – Calcite System.....	264
Kononov A., Kamunur K., Mussapyrova L., Assylkhanova D., Batkal A. Obtaining and Studying the Inorganic Flocculant Al–Fe–Mn Based on Modified Bentonite.....	276
Kurmangaliyeva A.1, Akhmetova F.2, Kareshova Zh.1, Iskakov R. PDMA-Modified Tagan Bentonite for Hydrogen Production in Catalytic Conversion	
of Hydrocarbons.....	292
Kurtebayeva A.A., Silvia Álvarez-Torrellas., Noor Haida Mohd Kaus., Gomes H.T., Kalmakhanova M.S. Corn-Cob-Derived Fe-Modified Activated Carbons for Paracetamol and Sulfamethoxazole	
Removal by Adsorption and Oxidative Treatment.....	307
Nadirov R.K., Nurtazina N.D., Ryskaliyeva R.G. Response Surface Modelling and Optimisation of Ilmenite Flotation Using a Modified	
Lignosulphonate Reagent.....	334
Nefedov A.N., Taikenova A.T., Imashev B.K., Nurislamov R.M., Leontyeva X. Quantum Computing in the Modeling of Corrosion Processes.....	350
Nurkenov O.A., Fazylov S.D., Syzdykov A.K., Kabiyeva S.K., Zhaslan R.K. Synthesis and Structural Study of 3,5-Dimethylisoxazole Sulfone Derivatives with Secondary	
Amines.....	365
Orazbekova R.S., Tungatarova S.A., Baizhumanova T.S., Kaumenova G.B., Zhumabek M. Influence of Reaction Mixture Composition in Steam Reforming of Bioethanol on a High-Entropy	
Oxide Catalyst.....	382
Ryskaliyeva R.G., L.K. Beisembayeva, Osserov T.B. Hydrocyclone Classification of Balkhash Processing Plant Tailings.....	398
Sass A.S., Torlopov I.I., Rakhmetova K.S., Kenzin E.N., Zhurinov M. Formation and Maturation of Phosphate Coatings on Steel from an Alcohol-Based	
Phosphating Solution.....	418
Sdikova G.Zh., Dalabayeva N.S., Balkembay A.S., Sarova N.B., Zhaltyrbayeva N.K. Effect of Electrolyte Formulation on the Characteristics of Zinc-Based	
Electroplated Coatings.....	435
Seitkaliyeva N., Kussainova G., Zhursumbayeva M., Mohamad Ibrahim M.N., Abdiyev K. Study of the Flocculation Properties of Itaconic Acid-Based Copolymers.....	448

Sergazina S.M., Nurmukhanbetova N.N., Ostretsova I.B., Kamze A.R., Kassenova N.B. Comprehensive Assessment of Natural Drinking Water Quality and Statistical Analysis of Physicochemical Parameters.....	460
Talgatkyzy A., Nazhipkyzy M., Otenov A., Seitkazinova A., Issanbekova A. Wood Waste-Derived Organosolv Lignin-Based Carbon Nanofibers For Energy Storage Applications.....	475
Toktabayeva A.K., Makhayeva D.N., Rakhmetullayeva R.K., Rvaidarova G.O., Issenova G.D. Synthesis, Structure, and Physicochemical Properties of Sulfur-Containing Composites Based on Aniline, p-Phenylenediamine, Phenol, and Formaldehyde.....	498
Yeshmanova G.B., Smagulov D.U. Effect of Silicon-Based Particles on the Formation and Composition of PEO Coatings.....	517
Zhortarova A.A., Kubicek V., Ibrayev M.K., Panshina S.Y., Seidakhmetova R.B. N-Phosphorylation of Amino-thiazoles and Amino-Thiadiazoles with P(III)- and P(V)-Reagents: Synthesis, Structure, and Biological Activity.....	538
Zhussupova A., Tyumentseva O., Antonyuk V. Comparative Study of the Kinetics and Energy Characteristics of Planetary Milling of Copper Smelting Dump Slag and Granulated Lead-Smelting Slag.....	552

МАЗМҰНЫ

ФИЗИКА

Әлиұлы А., Калтаев А.

Гидродинамикалық модельдеу негізінде ортадан тепкіш сорғыларды масштабтауда ұқсастық заңдарының қолданылуын бағалау.....14

Баратов А.Ғ., Сайлаубек А., Серік А.С.

SrTaO_2N негізіндегі тар тыйым салынған аймақты фотокатализаторды алу және зерттеу.....33

Нұрбаев Б., Дмитриева Е., Кемелбекова А.

Пайдаланылған литий-ионды аккумуляторлардан литийді селективті шаймалаудың заманауи әдістері.....45

Сейтов А.Н., Аманжолов Т.Е.

Минералданған орталарға арналған жұмыс дөңгелегіндегі ортадан тепкіш ағыстың бірөлшемді физикалық–гидродинамикалық модельдерін салыстырмалы талдау.....60

Сыздыкова А.М., Серикбаев Н.С., Кутум Б.Б.

Кенетейілген бесінші ретті Кортевег-де Фриз тендеуінің локалды кодам типті түрлендіруі мен интегралдану шектері.....83

Уалиханова У.А., Үсіпқызы Т., Алтаева Г.С., Разина О.В.

Экрандалған $f(T)$ – гравитация моделінің есебі.....101

Жадыранова А.А., Цыба П.Ю., Исмаил Ү.Қ., Ержан Б.

Дивергенциясыз бәсеңдеу параметрі, DESI DR2 және космикалық хронометрлер деректері бойынша кинематикалық шектеулер.....123

Жеңіскан Қ., Беков С.С., Сыздыкова А.М.

Хаббл тұрақтысын реконструкциялауға Гаусстық процестер параметрлерінің әсері.....146

ХИМИЯ

Амангелді Б., Жаникулов Н., Таймасов Б., Айтүреев М., Даулетияров М.

Ақ цемент клинкерлерінің күйдіру процестерін және ақтығын зерттеу.....155

Байсалова Г.Ж., Бауыржанова Г.Б., Нияз Г.А., Талтенов А.А., Айнабаев А.А.

Газ хроматография-масс-спектрометрия әдісімен кәдімгі теңгежапырақ өсімдігінің этанолды сығындыларының химиялық құрамын зерттеу.....169

Бишимбаев В.К., Капсаямов Б.А.

Шиелі және Жаңақорған аудандарындағы уранды күкірт қышқылымен шаймалаудың жер асты суларына әсерінің гидрогеохимиялық көрсеткіштері.....183

Дарменбаева А.С., Аубакирова Р.А., Нурғалиева Д.А., Абылкасова Г.Е., Абильмажинова Г.А.

Полимер-металл функционалдық материалдардың құрылымдық-морфологиялық ерекшеліктері.....205

Дюсебаева М.А., Берганаева А.Е., Ибрагимова Н.А., Утаралиев Д.М., Берганаева Г.Е.

Galega officinalis L. өсімдігінің N-бутанолдық фракциясы арқылы күміс нанобөлшектерін жасыл синтездеу.....223



Дюсембекова С.Б., Утарова Д.А., Құспанов Ж.Б., Даулбаев Ч.Б., Әбдікәрімова Ұ.Ә. Термиялық өңделген SrTiO ₃ фотокатализаторларының екідайлы антибиотикті тиімді ыдыратуын зерттеу.....	239
Исаева Ұ.Б., Ахметова Г.С., Пірәлиев Қ.Ж., Малмакова А.Е., Сейлханов Т.М. Жұқпалы ауруларға қарсы кандидат ретінде 1-бензил-4-(П-фторбензоилоксиимино) пиперидин гидрохлориді.....	252
Қамұнұр Қ., Ысқақ М., Мусапирова Л. Барит–кальцит жүйесіндегі натрий лигносульфонатының флотациялық қасиеттеріне химиялық модификацияның әсері.....	264
Кононов А., Қамұнұр Қ., Мусапирова Л., Асылханова Д., Батқал А. Модификацияланған бентонит негізіндегі Al–Fe–Mn бейорганикалық флокулянтын алу және зерттеу.....	276
Қурманғалиева А.1, Ахметова Ф., Карешова Ж., Исаков Р. Көмірсутектердің каталитикалық конверсиясы арқылы сутек алуға арналған ПДМА-модификацияланған таған бентониті.....	292
Қуртебаева А.А., Álvarez-Torrellas S., Noor Haida Mohd Kaus., Gomes H.T., Калмаханова М.С. Жүгері собықтарынан алынған темірмен модификацияланған белсендірілген көмірлермен парацетамол мен сульфаметоксазолды адсорбциялық-тотығу жолымен жою.....	307
Надиров Р.К., Нуртазина Н.Д., Рыскалиева Р.Г. Модификацияланған лигносульфонатты реагентті қолдану арқылы ильменит флотациясының жауап бетін модельдеу және оңтайландыру.....	334
Нефедов А.Н., Тайекенова А.Т., Имашев Б.К., Нурисламов Р.М., Леонтьева К.А. Коррозиялық процестерді модельдеудегі кванттық есептеулер.....	350
Нүркенов О.А., Фазылов С.Д., Сыздықов А.К., Қабиева С.Қ., Жаслан Р.К. Екіншілік аминдермен 3,5-диметилизоксазолдың сульфотуындыларын синтездеу және құрылымдық зерттеу.....	365
Оразбекова Р.С., Тунгатарова С.А., Байжұманова Т.С., Кауменова Г.Б., Жұмабек М. Жоғары энтропиялық оксид катализаторы қатысында биоэтанолдың бу риформингісіне реакциялық қоспа құрамының әсері.....	382
Рыскалиева Р.Г., Бейсембаева Л.К., Осеров Т.Б. Балқаш байыту фабрикасының байыту қалдықтарын гидроциклондық классификациялау.....	398
Сасс А.С., Торлопов И.И., Рахметова К.С., Кензин Э.Н., Жұрынов М. Спирт негізіндегі фосфаттау ерітіндісінен болат бетінде фосфатты жабындардың қалыптасуы және жетілуі.....	418
Сдикова Г.Ж., Далабаева Н.С., Балкембай А.С., Сарова Н.Б., Жалтырбаева Н.К. Мырыш негізіндегі гальваникалық қаптамалардың қасиеттеріне электролит құрамының әсері.....	435

Сейтқалиева Н., Құсаинова Г., Жүрсімбаева М., Мохамад Ибрагим М.Н., Әбдиев Қ. Итакон қышылы негізіндегі сополимерлердің флокуляциялық қасиеттерін зерттеу.....	448
Сергазина С.М., Нұрмұханбетова Н.Н., Острцова И.Б., Камзе А.Р., Касенова Н.Б. Табиғи ауыз су сапасын кешенді бағалау және физика-химиялық көрсеткіштерге статистикалық талдау.....	460
Талгатқызы Ә., Нажи́пқызы М., Өтенов Ә., Сейтқазинаова Ә., Исанбекова А. Ағаш қалдықтарынан алынған органосольв лигнин негізіндегі көміртекті талшықтарды энергия сақтау жүйелерінде қолдану.....	475
Тоқтабаева Ә.Қ., Махаева Д.Н., Рахметуллаева Р.Қ., Рвайдарова Г.О., Исенова Г.Д. Анилин, п-фенилендиамин, фенол және формальдегид негізіндегі күкіртқұрамды композиттердің синтезі, құрылымы және физика-химиялық қасиеттері.....	498
Ешманова Г.Б., Смағұлов Д.У. Кремний негізіндегі бөлшектердің ПЭО жабындарының қалыптасуы мен құрамына әсері.....	517
Жортарова А.А., Kubicek V., Ибраев М.Қ., Паньшина С.Ю., Сейдахметова Р.Б. Р(III) және Р(V) реагенттерімен аминотиазолдар мен аминок-тиадиазолдарды N-фосфорлирлеу: синтезі, құрылымы және биологиялық белсенділігі.....	538
Жусупова А., Тюменцева О., Антонюк В. Үйінді мыс балқыту шлагы мен қорғасын балқытудың түйіршіктелген шлагын планетарлық ұнтақтау кинетикасы мен энергетикасын салыстырмалы зерттеу.....	552

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА

Әлиұлы А., Калтаев А.

Оценка применимости законов подобия при масштабировании центробежных насосов на основе гидродинамического моделирования.....14

Баратов А.Г., Сайлаубек А., Серік А.С.Получение и исследование узкозонного фотокатализатора на основе SrTaO_2N33**Нұрбаев Б., Дмитриева Е., Кемелбекова А.**

Современные методы селективного выщелачивания лития из отработанных литий-ионных аккумуляторов.....45

Сейтов А.Н., Аманжолов Т.Е.

Сравнительный анализ одномерных физико-гидродинамических моделей центробежного течения в рабочем колесе для минерализованных сред.....60

Сыздыкова А.М., Серикбаев Н.С., Кутум Б.Б.

Локальные преобразование типа кодамы и пределы интегрируемости расширенного уравнения Кортевега-де Фриза пятого порядка.....83

Уалиханова У.А., Усипкызы Т., Алтаева Г.С., Разина О.В.Расчёт экранированной модели $f(T)$ -гравитации.....101**Жадыранова А.А., Цыба П.Ю., Исмаил У.Қ., Ержан Б.**

Дивергентно-свободный параметр замедления, кинематические ограничения по данным DESI DR2 и космических хронометров.....123

Женискан К., Беков С.С., Сыздыкова А.М.

Влияние параметров Гауссового процесса на реконструкцию постоянной Хаббла.....146

ХИМИЯ

Амангелди Б., Жаникулов Н., Таймасов Б., Айтурсев М., Даулетияров М.

Исследование процессов обжига и белизны клинкеров белых цементов.....155

Байсалова Г.Ж., Бауыржанова Г.Б., Нияз Г.А., Талтенов А.А., Айнабаев А.А.

Изучение химического состава этанольных экстрактов манжетки обыкновенной методом газ хроматографии-масс-спектрометрии.....169

Бишимбаев В.К., Капсалямов Б.А.

Гидрогеохимические индикаторы воздействия сернокислотного выщелачивания урана на подземные воды районов Шиели и Жанакоргана.....183

Дарменбаева А.С., Аубакирова Р.А., Нургалиева Д.А., Абылкасова Г.Е., Абилямажинова Г.А.

Структурно-морфологические особенности полимер-металлических функциональных материалов.....205

Дюсебаева М.А., Берганаева А.Е., Ибрагимова Н.А., Утаралиев Д.М., Берганаева Г.Е. Зеленый синтез серебряных наночастиц с использованием N-бутанольной фракции Galega Officinalis L.....	223
Дюсембекова С.Б., Утарова Д.А., Куспанов Ж.Б., Даулбаев Ч.Б., Абдикаримова У.А. Исследование влияния термической обработки SrTiO ₃ на фотокаталитической эффективности разложения амфотерного антибиотика.....	239
Исаева У.Б., Ахметова Г.С., Пралиев К.Д., Малмакова А.Е., Сейлханов Т.М. Гидрохлорид 1-бензил-4-(п-фторбензоилоксиимино) пиперидина в качестве кандидата в противомикробное средство.....	252
Қамұнұр Қ., Ысқақ М., Мұсапирова Л. Влияние химической модификации лигносульфоната натрия на его флотационные свойства в системе барит–кальцит.....	264
Кононов А., Қамұнұр Қ., Мұсапирова Л., Асылханова Д., Батқал А. Получение и исследование неорганического флокулянта Al–Fe–Mn на основе модифицированного бентонита.....	276
Курмангалиева А., Ахметова Ф., Карешова Ж., Исаков Р. ПДМА-модифицированный таганский бентонит для получения водорода при каталитической конверсии углеводов.....	292
Куртебаева А.А., Álvarez-Torrellas S., Noor Haida Mohd Kaus., Gomes H.T., Калмаханова М.С. Модифицированные железом активированные угли из кукурузных початков для адсорбционно-окислительного удаления парацетамола и сульфаметоксазола.....	307
Надиров Р.К., Нуртазина Н.Д., Рыскалиева Р.Г. Моделирование поверхности отклика и оптимизация флотации ильменита с использованием модифицированного лигносульфонатного реагента.....	334
Нефедов А.Н., Тайкенова А.Т., Имашев Б.К., Нурисламов Р.М., Леонтьева К.А. Квантовые вычисления в моделировании коррозионных процессов.....	350
Нуркенов О.А., Фазылов С.Д., Сыздыков А.К., Кабиева С.К., Жаслан Р.К. Синтез и структурное исследование сульфопроизводных 3,5-диметилизоксазола совторичными аминами.....	365
Оразбекова Р.С., Тунгатарова С.А., Байжұманова Т.С., Кауменова Г.Б., Жумабек М. Влияние состава реакционной смеси в паровом риформинге биоэтанола на высокоэнтропийном оксидном катализаторе.....	382
Рыскалиева Р.Г., Бейсембаева Л.К., Осеров Т.Б. Гидроциклонная классификация хвостов обогащения Балхашской обогажительной фабрики.....	398
Сасс А.С., Торлопов И.И., Рахметова К.С., Кензин Э.Н., Журинов М. Формирование и созревание фосфатных покрытий на стали из фосфатирующего раствора на основе спирта.....	418

Сдикова Г.Ж., Далабаева Н.С., Балкембай А.С., Сарова Н.Б., Жалтырбаева Н.К. Влияние состава электролита на свойства гальванических покрытий на основе цинка.....	435
Сейткалиева Н., Кусаинова Г., Журсумбаева М., Мохамад Ибрагим М.Н., Абдиев К. Исследование флокулирующих свойств сополимеров на основе итаконовой кислоты.....	448
Сергазина С.М., Нурмуханбетова Н.Н., Острцова Н.Б., Камзе А.Р., Касенова Н.Б. Комплексная оценка качества природной питьевой воды и статистический анализ физико-химических показателей.....	460
Талгаткызы А., Нажибкизы М., Отонов А., Сейтказинова А., Исанбекова А. Углеродные волокна на основе органосольв лигнина, полученного из древесных отходов, для применения в системах хранения энергии.....	475
Токтабаева А.К., Махаева Д.Н., Рахметуллаева Р.К., Рвайдарова Г.О., Исенова Г.Д. Синтез, структура и физико-химические свойства серосодержащих композитов на основе анилина, п-фенилендиамина, фенола и формальдегида.....	498
Ешманова Г.Б., Смагулов Д.У. Влияние частиц на основе кремния на формирование и состав ПЭО покрытий.....	517
Жортарова А.А., Kubicek V., Ибраев М.К., Панышина С.Ю., Сейдахметова Р.Б. N-фосфорилирование аминотиазолов и амино-тиадиазолов с помощью реагентов Р(III) и Р(V): синтез, структура и биологическая активность.....	538
Жусупова А., Тюменцева О., Антонюк В. Сравнительное исследование кинетики и энергетики планетарного измельчения отвального медеплавильного шлака и гранулированного шлака свинцовой плавки.....	553

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 3.
Number 359 (2026), 365-381

<https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.481>

UDC:547.639.7+496.2 +314.2
IRSTI: 31.15.37

©Nurkenov O.A.^{1,2}, Fazylov S.D.^{1*}, Syzdykov A.K.^{1,2}, Kabiyeveva S.K.²,
Zhaslan R.K.², 2026.

¹Institute of Organic Synthesis and Coal Chemistry, Karaganda, Kazakhstan;

²Karaganda Industrial University, Temirtau, Kazakhstan.

*E-mail: faz8990@mail.ru

SYNTHESIS AND STRUCTURAL STUDY OF 3,5-DIMETHYLISOXAZOLE SULFONE DERIVATIVES WITH SECONDARY AMINES

Nurkenov Oralgazy — Doctor of Chemical Sciences, Professor, Institute of Organic Synthesis and Coal Chemistry of the Republic of Kazakhstan, Karaganda, Kazakhstan,

E-mail: nurkenov_oral@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1878-2787>;

Fazylov Serik — Doctor of Chemical Sciences, Professor, Academician of NAS RK, Institute of Organic Synthesis and Coal Chemistry of the Republic of Kazakhstan, Karaganda, Kazakhstan,

E-mail: faz8990@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4240-6450>;

Syzdykov Ardak — PhD student, Karaganda Industrial University, Temirtau, Kazakhstan,

E-mail: ardak.syzdykov.96@inbox.ru, <https://orcid.org/0009-0008-9124-7821>;

Kabiyeveva Saule — Candidate of Chemical Sciences, Professor, Karaganda Industrial University, Temirtau, Kazakhstan,

E-mail: kabieva.s@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4868-5278>;

Zhaslan Rymgul — PhD, Senior Lecturer, Karaganda Industrial University, Temirtau, Kazakhstan,

E-mail: rymgul.zhaslan@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1809-896>.

Abstract. This paper presents the results of the synthesis, structural identification, and characterization of new sulfonamide derivatives of 3,5-dimethylisoxazole (3,5-DMI) based on the natural alkaloid cytosine (CN) and N-aminomorpholine (N-AM). The relevance of the study is due to the broad spectrum of biological activity of azole sulfo derivatives and the potential for the development of new carbonic anhydrase inhibitors based on biogenic amines. The compounds were synthesized by sulfochlorination of 3,5-dimethylisoxazole, followed by reaction of the resulting sulfochloride with CN and N-AM. To obtain a vinyl-substituted derivative, condensation with *n*-chlorobenzaldehyde was performed, which allowed us to establish the regioselectivity of the reaction at the methyl group in the 5-position of the isoxazole ring. The structure of the synthesized compounds was confirmed by a combination of modern physico-chemical methods, including NMR spectroscopy (¹H, ¹³C, COSY, HMQC, HMBC), mass spectrometry, and X-ray diffraction analysis. The studies allowed us to establish

the features of the electronic and spatial structure of the obtained compounds, their conformational characteristics, and the nature of intramolecular interactions. It was shown that the introduction of a sulfonamide group significantly affects the reactivity of the isoxazole fragment, ensuring the selective formation of new functionalized derivatives. The obtained results expand the possibilities of targeted modification of molecules of natural compounds and isoxazole systems and create the basis for further searching for biologically active compounds with potential pharmacological activity.

Keywords: 3,5-dimethylisoxazole, cytosine, N-aminomorpholine, sulfonamides, sulfochlorination, NMR spectroscopy, X-ray diffraction analysis

For citations: Nurkenov O.A., Fazylov S.D., Syzdykov A.K., Kabiyeva S.K., Zhaslan R.K. *Synthesis and Structural Study of 3,5-Dimethylisoxazole Sulfone Derivatives with Secondary Amines. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.3. Pp. 365-381. DOI: <https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.481>*

©Нүркенов О.А.^{1,2}, Фазылов С.Д.^{1*}, Сыздыков А.К.^{1,2}, Қабиева С.Қ.²,
Жаслан Р.К.², 2026.

¹Органикалық синтез және көмірхимиясы институты, Қарағанды, Қазақстан;

²Қарағанды индустриялық университеті, Теміртау, Қазақстан.

*E-mail: faz8990@mail.ru

ЕКІНШІЛІК АМИНДЕРМЕН 3,5-ДИМЕТИЛИЗОКСАЗОЛДЫҢ СУЛЬФОТУЫНДЫЛАРЫН СИНТЕЗДЕУ ЖӘНЕ ҚҰРЫЛЫМДЫҚ ЗЕРТТЕУ

Нүркенов Оралғазы —химия ғылымдарының докторы, профессор, Органикалық синтез және көмір химиясы институты, Қарағанды, Қазақстан,

E-mail: nurkenov_oral@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1878-2787>;

Фазылов Серік —химия ғылымдарының докторы, профессор, ҚР Ұлттық ғылым академиясының академигі, Органикалық синтез және көмір химиясы институты, Қарағанды, Қазақстан,

E-mail: faz8990@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4240-6450>;

Сыздыков Ардак —PhD докторант, Қарағанды индустриалды университеті, Теміртау, Қазақстан, E-mail: ardak.syzdykov.96@inbox.ru, <https://orcid.org/0009-0008-9124-7821>;

Қабиева Сәуле —химия ғылымдарының кандидаты, профессор, Қарағанды индустриалды университеті, Теміртау, Қазақстан,

E-mail: kabiyeva.s@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4868-5278>;

Жаслан Рымгүл — PhD, аға оқытушы, Қарағанды индустриалды университеті, Теміртау, Қазақстан, E-mail: rymgul.zhaslan@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1809-8961>.

Аннотация. Бұл мақалада табиғи алкалоид цитизиннің және N-аминоморфоллиннің қатысуында 3,5-диметилизоксазолдың (3,5-ДМИ) жаңа сульфонамидты туындыларын синтездеу, құрылымдық идентификациялау және сипаттау нәтижелері ұсынылған. Зерттеудің өзектілігі азолдың сульфотуындыларының биологиялық белсенділігінің кең шеңберіне және биогенді аминдерге негізделген жаңа көміртегі ангидраза ингибиторларын

әзірлеу мүмкіндігіне байланысты. Жаңа қосылыстар 3,5-диметилизоксазолды сульфохлорлау арқылы синтезделді, содан кейін алынған сульфохлоридты табиғи алкалоид цитизинмен және N-АМ-мен реакцияға түсірілді. Винилмен алмастырылған туынды алу үшін *n*-хлорбензальдегидпен конденсациясы жүргізілді, бұл изоксазол сақинасының 5-орнындағы метил тобы үшін реакцияның региоселективтілігін анықтауға мүмкіндік берді. Синтезделген қосылыстардың құрылымдары заманауи физика-химиялық зерттеу әдістерінің кешенімен, соның ішінде бірөлшемді (^1H және ^{13}C) және екіөлшемді ЯМР-спектроскопиясымен (COSY, HMQC, HMBC), масс-спектрометрия және рентгенқұрылымдық талдау әдістерімен расталды. Алынған нәтижелер синтезделген қосылыстарды толық идентификациялауға, олардың молекулалық құрамы мен құрылысын растауға, құрылымдық фрагменттердің өзара орналасуын және молекулалардың кеңістіктік ұйымдасу ерекшеліктерін анықтауға мүмкіндік берді. Спектроскопиялық және кристаллографиялық әдістерді кешенді қолдану белгіленген құрылымдардың дұрыстығын қамтамасыз етіп, алынған қосылыстардың ұсынылған химиялық формулаларға сәйкестігін растады. Зерттеулер алынған қосылыстардың электрондық және кеңістіктік құрылымының ерекшеліктерін анықтауға, олардың конформациялық сипаттамалары мен молекулаішілік және молекулааралық өзара әрекеттесу сипатын белгілеуге мүмкіндік берді. Спектроскопиялық, масс-спектрометриялық және рентгенқұрылымдық зерттеулердің жиынтық нәтижелері негізінде мақсатты молекулалық құрылымдардың түзілуі расталып, функционалдық және гетероциклдік фрагменттердің өзара орналасу ерекшеліктері анықталды. Сульфонамидтік топтың енгізілуі изоксазол фрагментінің электрондық құрылысы мен реакциялық қабілетіне елеулі әсер ететіні, нәтижесінде жаңа функционалдандырылған туындылардың селективті түзілуін және тұрақты молекулалық құрылымның қалыптасуын қамтамасыз ететіні көрсетілді. Алынған нәтижелер цитизиннің мен изоксазолдың жүйелерін мақсатты түрлендіру мүмкіндіктерін кеңейтеді және әлеуетті фармакологиялық белсенділігі бар биологиялық белсенді қосылыстарды одан әрі іздестіруге негіз қалыптастырады.

Түйін сөздер: 3,5-диметилизоксазол, цитизин, N-аминоморфолин, сульфонамидтер, сульфохлорлау, ЯМР-спектроскопия, рентгенқұрылымдық талдау

©Нуркенов О.А.^{1,2}, Фазылов С.Д.^{1*}, Сыздыков А.К.^{1,2}, Кабиева С.К.²,
Жаслан Р.К.², 2026.

¹Институт органического синтеза и углехимии, Караганда, Казахстан;

²Карагандинский индустриальный университет, Темиртау, Казахстан.

*E-mail: faz8990@mail.ru

СИНТЕЗ И СТРУКТУРНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СУЛЬФОПРОИЗВОДНЫХ 3,5-ДИМЕТИЛИЗОКСАЗОЛА СОВТОРИЧНЫМИ АМИНАМИ

Нуркенов Оралгазы — доктор химических наук, профессор, Институт органического синтеза и углехимии, Караганда, Казахстан,

E-mail: nurkenov_oral@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1878-2787>;

Фазылов Серик — доктор химических наук, профессор, академик НАН РК, Институт органического синтеза и углехимии, Караганда, Казахстан,

E-mail: faz8990@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4240-6450>;

Сыздыков Ардак — PhD докторант, Карагандинский индустриальный университет, Темиртау, Казахстан,

E-mail: ardak.syzdykov.96@inbox.ru, <https://orcid.org/0009-0008-9124-7821>;

Кабиева Сауле — кандидат химических наук, профессор, Карагандинский индустриальный университет, Темиртау, Казахстан,

E-mail: kabieva.s@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4868-5278>;

Жаслан Рымгуль — PhD, старший преподаватель, Карагандинский индустриальный университет, Темиртау, Казахстан,

E-mail: rymgul.zhaslan@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1809-8961>.

Аннотация. В работе представлены результаты синтеза, структурной трансформации и исследования новых сульфонамидных производных 3,5-диметилизоксазола (3,5-ДМИ) с участием молекул природного алкалоида цитизина (ЦН) и N-аминоморфолина (N-АМ). Актуальность исследования обусловлена широким спектром биологической активности сульфопроизводных азолов и перспективностью создания новых ингибиторов карбоангидразы на их основе. Синтез новых соединений осуществлен путем сульфохлорирования 3,5-диметилизоксазола с последующим взаимодействием полученного сульфохлорида с цитизином и N-аминоморфолином. Для получения винилзамещенного производного проведена конденсация с *n*-хлорбензальдегидом, позволившая установить региоселективность реакции по метильной группе в 5-положении изоксазольного цикла. Структуры синтезированных соединений подтверждены комплексом современных физико-химических методов, включающих одномерную (^1H и ^{13}C) и двумерную ЯМР-спектроскопию (COSY, HMQC, HMBC), масс-спектрометрию и рентгеноструктурный анализ. Совокупность полученных спектральных и кристаллографических данных позволила достоверно установить молекулярный состав, идентифицировать основные структурные фрагменты, подтвердить характер их взаимного расположения и особенности пространственного строения исследуемых соединений. Исследования позволили установить особенности электронного и пространственного строения полученных соединений, определить их конформационные характеристики и характер внутримолекулярных и межмолекулярных взаимодействий. На основании совокупности спектроскопических, масс-спектрометрических и рентгеноструктурных данных подтверждено формирование целевых молекулярных структур и определены особенности взаимного расположения функциональных и гетероциклических фрагментов. Показано, что введение сульфонамидной группы существенно влияет на электронное строение и реакционную способность изоксазольного фрагмента, обеспечивая селективное образование новых функционализированных производных и формирование устойчивой молекулярной архитектуры.

Полученные результаты расширяют возможности направленной модификации изоксазольных систем с участием молекул природных соединений и создают основу для дальнейшего поиска биологически активных соединений с потенциальной фармакологической активностью.

Ключевые слова: 3,5-диметилизоксазол, цитизин, N-аминоморфолин, сульфонамиды, сульфохлорирование, ЯМР-спектроскопия, рентгеноструктурный анализ

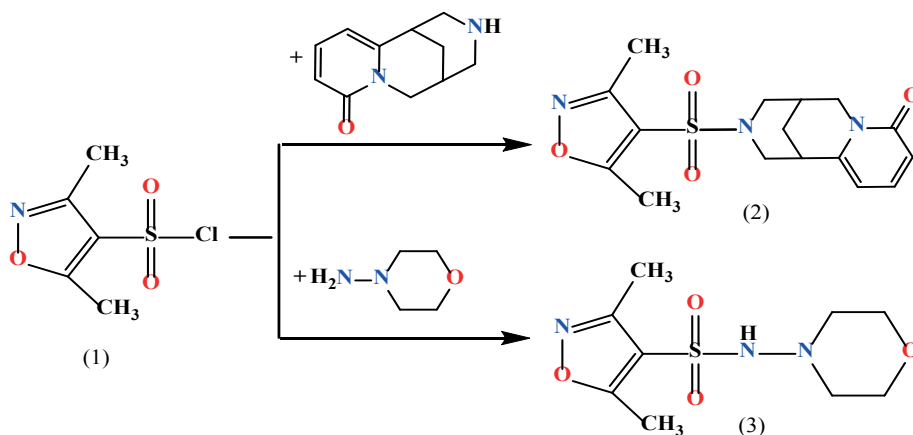
Введение. Сульфопроизводные азолов известны как важный класс соединений, нашедших широкое применение в фармацевтической химии благодаря их выраженной биологической активности (Ragavendra et al., 2016). Особое место среди них занимают коксибы — нестероидные противовоспалительные препараты, реализующие свое действие посредством ингибирования циклооксигеназы. Значительный интерес также представляют азолсодержащие сульфаниламиды, среди которых известны такие сульфонамидные производные фенилизоксазола, как сульфаметоксазол (Linton et al., 1965), сульфафуразол, сульфамоксол (Delfs., 1961), а также применяемый в ветеринарной практике сульфафеназол (Browne., 1961). Все эти препараты относятся к классу антибактериальных средств и проявляют активность в отношении широкого спектра грамположительных и грамотрицательных микроорганизмов.

Введение структурных фрагментов природных соединений, в частности алкалоида цитизина (ЦН) и его структурных аналогов (например, N-аминоморфолина (N-AM), в структуру различных сульфопроизводных, вызывает интерес в плане создания новых био- активных препаратов (Fazylov et al., 2025). Интерес к таким сульфонамидсодержащим соединениям обусловлен также известной способностью данной функциональной группы взаимодействовать с активным центром карбоангидраз и проявлять ингибирующие свойства. Следует отметить, эти ферменты участвуют в регуляции кислотно-основного равновесия, газообмена и других важных биохимических процессов, нарушение которых может быть связано с развитием различных патологических состояний (Husain et al., 2012). Однако в научной литературе мало сведений по исследованиям ингибиторов карбоангидраз и поиск новых биоактивных препаратов в этом направлении является актуальным.

Материалы и методы. В качестве исходного соединения использовали 3,5-диметилизоксазол (3,5-ДМИ), представляющий интерес благодаря наличию изоксазольного фрагмента, характерного для структуры ряда биологически активных соединений (Lee et al., 2009; Balsamo et al., 2004;). Особый интерес представляют его сульфопроизводные, для которых в литературе описан широкий спектр физиологической активности (Barril et al., 2008). Полученные к настоящему времени научные результаты свидетельствуют о перспективности использования сульфопроизводных изоксазола при поиске новых его биоактивных производных (Talley et al., 2000; Korsakov et al., 2004). В связи с этим нам представлял интерес разработка новых подходов к получению биоактивных

сульфонамидных производных 3,5-ДМИ путем его сочетания с молекулой природного алкалоида цитизина. В качестве такого компонента в настоящей работе нами выбраны природный алкалоид ЦН и его структурный аналог N-АМ. Модификация химической структуры выше указанных соединений посредством введения 3,5-ДМИ-ного сульфонамидного фрагмента может способствовать получению новых данных зависимостей "структура-активность".

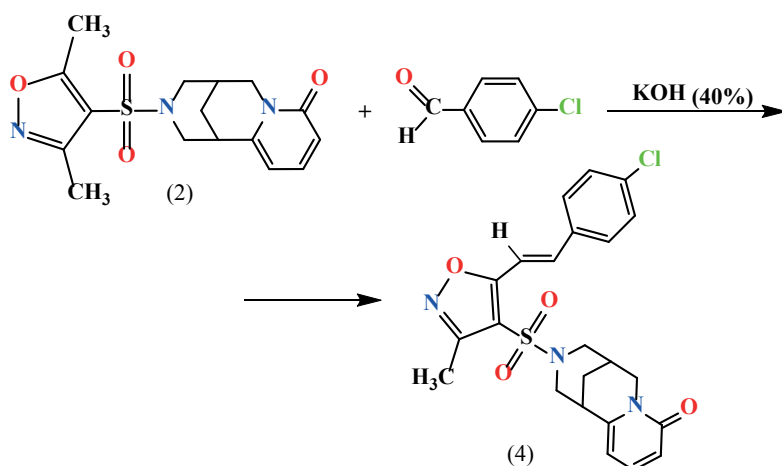
Для синтеза сульфонамидных производных 3-метил-5-винилизоксазола авторами (Korsakov et al., 2018) разработан интересный синтетический подход, основанный на предварительной функционализации 3,5-ДМИ путем сульфохлорирования. Полученный продукт далее подвергался последующему взаимодействию с ЦН-ном и N-АМ-ном (Freer et al., 1987). Сульфохлорирование 3,5-ДМИнами осуществлялось по методике (Parsons et al., 2013). Данная последовательность превращений приводил к повышению реакционной способности метильной группы в 5-положении и способствовал последующее построения винильного фрагмента. Синтез соединения 2 проводили взаимодействием сульфохлорида 1 с молекулой алкалоида цитизина в безводном ацетонитриле в присутствии пиридина в качестве акцептора хлороводорода. Соединение 3 получали взаимодействием сульфохлорида 1 с N-АМ-ном в аналогичных условиях.



Наличие двух метильных групп в изоксазольном цикле повышает электронную плотность ароматической системы и обуславливает преимущественное протекание электрофильного замещения в 4-положении, что приводит к образованию соответствующего сульфохлорида 1. Полученный сульфохлорид 1 использовали в качестве ключевого промежуточного соединения для дальнейшего синтеза сульфонамидных производных. Его взаимодействие с цитизином и N-АМ-ом в присутствии пиридина, выполняющего роль основания и акцептора хлороводорода, позволило получить соответствующие сульфонамидные производные 2 и 3. Можно предположить, что электроноакцепторное влияние сульфонильного заместителя, связанного с атомом углерода в 4-положении

изоксазольного цикла соединения 2, обуславливает повышение реакционной способности соседних метильных групп в положениях 3 и 5.

С целью установления преимущественного направления механизма реакций соединение 2 подвергали конденсации с п-хлорбенальдегидом в щелочной среде. Реакцию проводили в присутствии сильного основания – гидроксида калия (40%-ный раствор) при нагревании реакционной смеси до 60 °С в течение 1 ч.



Согласно анализа полученных, реакция протекает преимущественно по метильной группе в 5-положении изоксазольного кольца с образованием соответствующего 5-(п-хлорстирил) производного 4. Таким образом, полученные результаты указывают на преимущественную реакционную способность метильной группы в 5-положений. Региоселективность реакции и строение образовавшегося продукта 4 были подтверждены совокупностью данных ЯМР-спектроскопии.

Результаты и обсуждение. Строение нового сульфонамидного производного ЦН2 подтверждено методами ЯМР ^1H и масс-спектроскопии, а также рентгеноструктурного анализа. Идентификация нового соединения была основана на анализе совокупности сигналов протонов ЦН-вого и 3,5-ДМИ-ного фрагментов, характеризующихся различными химическими сдвигами и мультиплетностью. В спектре ^1H ЯМР соединения 2 выявлен набор сигналов, характерных для биспиридинового фрагмента ЦН-на. В частности, в области 1,76–1,85 м.д. регистрируется мультиплетный сигнал, соответствующий двум протонам Н-23ах и Н-23еқ. Сигналы протонов Н-9 и Н-13 проявляются в виде синглета при 2,49 м.д. по 4Н. Протоны Н-12ах и Н-12еқ представлены двумя дублетами при 2,83 и 2,92 м.д. соответственно с $^2J = 11,4$ Гц. Сигнал протона Н-21 наблюдается в виде синглета при 3,22 м.д., тогда как протоны Н-22_ах и Н-22_еқ дают дублеты при 3,56 и 3,61 м.д. соответственно ($^2J = 10,8$ Гц). Протоны Н-14ах и Н-14еқ образуют мультиплет в области 3,73–3,83 м.д. (рис.

1). Ароматическая часть ЦН-вого фрагмента характеризуется сигналами при 6,30 уш. с (1H, H-17), 6,36 д (1H, H-19, $^3J = 9,2$ Гц) и 7,43 т (1H, H-18, $^2J = 6,6$ Гц) м.д. В свою очередь, протоны метильных групп изоксазольного фрагмента H-6,6,6 и H-9,9,9 проявляются в виде трехпротонных синглетов при 2,12 и 2,49 м.д. соответственно.

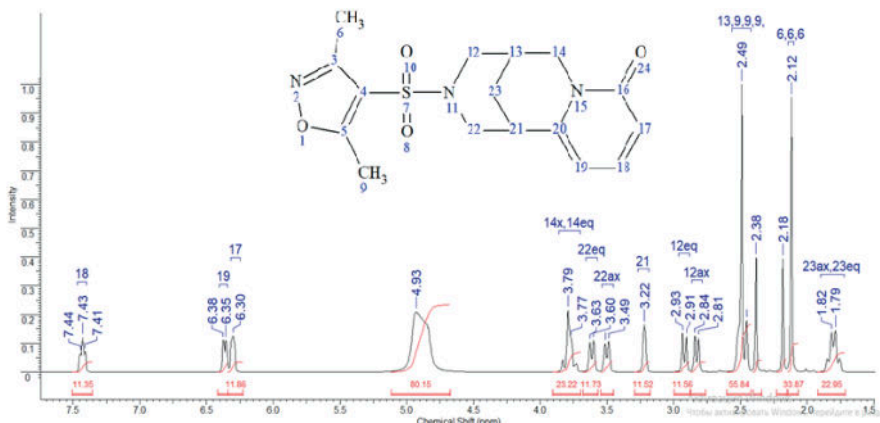


Рисунок 1. ^1H ЯМР-спектр соединения **2** в CDCl_3 .

В спектре ^{13}C ЯМР соединения **2** сигналы атомов углерода ЦН-го фрагмента зафиксированы при 24,07 (C-23), 26,59 (C-13), 33,60 (C-21), 49,70 (C-14), 51,20 (C-22), 52,61 (C-12), 106,91 (C-19), 115,90 (C-17), 140,37 (C-18), 150,60 (C-20) и 162,45 (C-16) м.д. Сигналы углеродных атомов 3,5-диметилизоксазольного фрагмента наблюдаются при 11,04 (C-6), 12,95 (C-9), 113,30 (C-4), 158,21 (C-3) и 174,45 (C-5) м.д.

Структура соединения **2** дополнительно подтверждена с применением двумерных методов ЯМР-спектроскопии COSY (^1H - ^1H), HMQC (^1H - ^{13}C) и HMBC (^1H - ^{13}C), позволяющих идентифицировать гомо- и гетероядерные спин-спиновые взаимодействия. Выявленные корреляционные взаимодействия в спектрах COSY (^1H - ^1H) и HMQC (^1H - ^{13}C) для соединения **2** представлены на рисунке 2.

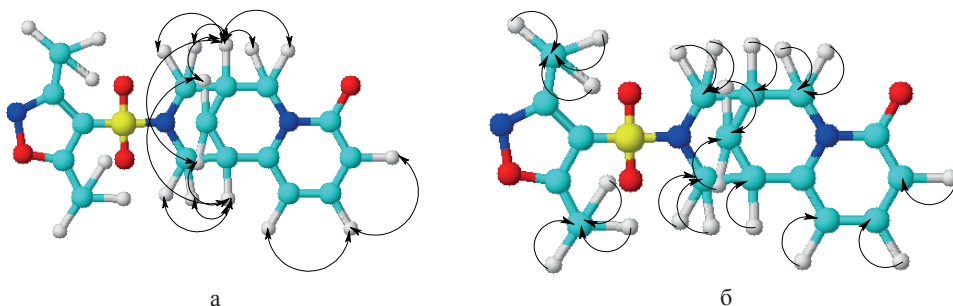


Рисунок 2. Корреляции, выявленные в спектрах COSY (а) и HMQC (б) соединения **2**.

В двумерном спектре ^1H - ^1H COSY соединения 2 выявлены корреляционные взаимодействия между протонами, связанными через три связи, характерные для соседних метилен-метиленовых, метин-метиленовых и метин-метиновых фрагментов. В частности, наблюдаются корреляции Н-23–Н-21 (1,80; 3,21 и 3,21; 1,80 м.д.), Н-13–Н-14 (2,50; 3,76 и 3,76; 2,50 м.д.), Н-12_ах–Н-22_еқ (2,81; 3,60 и 3,60; 2,81 м.д.), Н-12_еқ–Н-22_ах (2,90; 3,49 и 3,49 м.д.), а также между ароматическими протонами Н-19–Н-18 (6,28; 7,42 и 7,42; 6,28 м.д.) и Н-17–Н-18 (6,31; 7,41 и 7,41; 6,31 м.д.).

Односвязные гетероядерные корреляции ^1H - ^{13}C были установлены методом НМРС. В спектре наблюдаются кросс-пики, соответствующие следующим парам протон–углерод: Н-6–С-6 (2,10; 11,37 м.д.), Н-9–С-9 (2,47; 12,85 м.д.), Н-23–С-23 (1,79; 24,74 м.д.), Н-13–С-13 (2,50; 26,87 м.д.), Н-21–С-21 (3,20; 33,83 м.д.), Н-12_ах–С-12 (2,81; 52,89 м.д.), Н-12_еқ–С-12 (2,93; 52,44 м.д.), Н-22_ах–С-22 (3,46; 51,14 м.д.), Н-22_еқ–С-22 (3,60; 51,38 м.д.), Н-14–С-14 (3,76; 50,01 м.д.), Н-19–С-19 (6,28; 107,35 м.д.), Н-17–С-17 (6,34; 116,27 м.д.) и Н-18–С-18 (7,42; 140,69 м.д.). Строение соединения 2 получено по данным спектроскопии НМРС, которая позволила установить дальние гетероядерные корреляции ^1H - ^{13}C через две и более связи. Например, для ароматического фрагмента выявлены корреляции Н-19–С-17 (6,28; 116,38 м.д.) и Н-19–С-20 (6,28; 150,54 м.д.). Для 3,5-диметилизоксазольного фрагмента установлены взаимодействия Н-9–С-4 (2,47; 114,10 м.д.), Н-9–С-3 (2,47; 157,09 м.д.), Н-9–С-5 (2,47; 175,02 м.д.), Н-6–С-4 (2,10; 114,11 м.д.) и Н-6–С-3 (2,10; 158,22 м.д.). Нами отмечено также дальняя корреляция Н-23–С-20 (1,78; 150,54 м.д.). Выявленные корреляционные взаимодействия подтверждают предложенное нами строение соединения 2 (рис. 3).

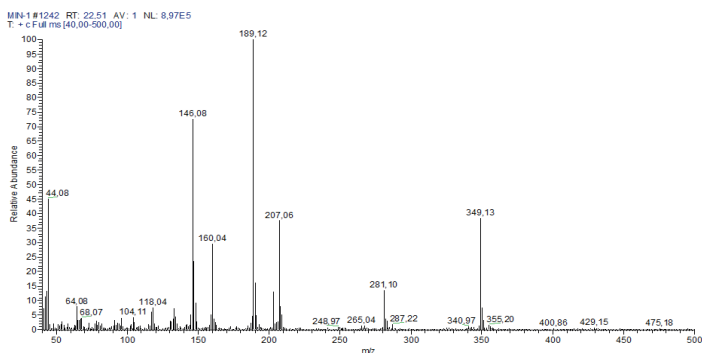


Рисунок 3. Масс-спектр соединения (2; MIN-1, $t=22.51$).

Дополнительно пространственное строение синтезированного 4-[(3,5-диметил-1,2-оксазол-4-ил)сульфонил]цитизина 2 исследовано методом рентгеноструктурного анализа (рис. 4).

Полученные данные позволяют достоверно установить абсолютную конфигурацию соединения 2. Конфигурация хиральных центров C-7 и C-9 согласуется с абсолютной конфигурацией, известной для молекулы (-)-ЦН. Значение параметра Флека составляет 0,01(9), что подтверждает надежность определения абсолютной конфигурации. Пятичленный цикл характеризуется разупорядоченностью, обусловленной поворотом на 180° вокруг связи C–S; соотношение заселенностей двух ориентаций составляет 0,72:0,28. Длины связей (табл. 1) и валентные углы (табл. 2) в ЦН-вом остоле структуры 2 соответствуют известным стандартным значениям (Allen et al., 1987), за исключением валентных углов при атоме N-12 (табл. 2).

Таблица 1. Длины связей (d, Å) для соединения 2.

Связь	d	Связь	d
S(1)-O(3)	1.424(2)	C(9)-C(13)	1.523(4)
S(1)-O(2)	1.427(2)	C(9)-H(9A)	0.9800

Таблица 2. Значения валентных углов (ω , град) в молекуле соединения 2

Угол	w		
O(3)-S(1)-O(2)	120.01(14)	N(1)-C(10)-H(10A)	108.6
O(3)-S(1)-N(12)	107.74(13)	C(9)-C(10)-H(10A)	108.6

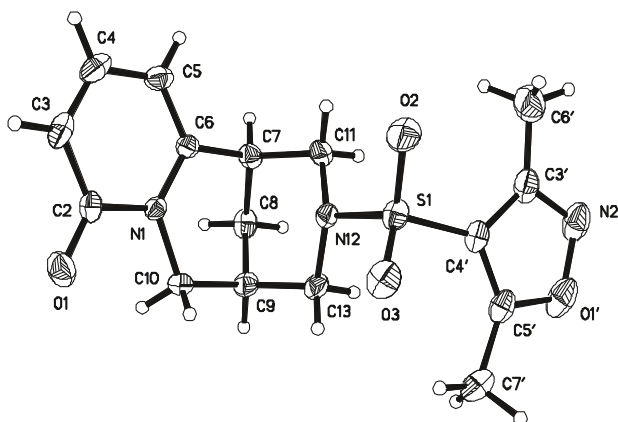


Рисунок 4. Общий вид молекулы 2.

Дигидропиридиновый циклмолекулы 2 имеет практически плоскую геометрию с отклонением атомов от средней плоскости не более $\pm 0,007$ Å. Атом кислорода O1 находится практически в плоскости данного цикла, отклоняясь от неё на 0,03 Å. Тетрагидропиридиновый цикл N1C6C7C8C9C10 принимает конформацию искаженной 8α -софы ($\Delta C_s^8 = 3.02^\circ$), при этом атом C8 выходит

из средней плоскости остальных атомов цикла на 0,73 Å. Пиперидиновый цикл характеризуется искаженной кресельной конформацией ($\Delta C_s^8=0.99^\circ$, $C_2^{7,8}=1.67^\circ$). В структуре молекулы 2 изоксазольный цикл практически плоский ($\pm 0,002$ Å), а его метильные группы расположены почти в плоскости пятичленного цикла. Соответствующие торсионные углы вещества 2 представлены в таблице 3.

Таблица 3. Значения торсионных углов (τ , °) в молекуле соединения 2.

Угол	τ	Угол	τ
C(6)-N(1)-C(2)-O(1)	179.4(2)	O(3)-S(1)-N(12)-C(11)	168.7(2)
C(10)-N(1)-C(2)-O(1)	1.6(4)	O(2)-S(1)-N(12)-C(11)	38.1(2)

Нами отмечено также, что атом азота N12 в молекуле соединения 2 имеет конфигурацию, промежуточную между пирамидальной и плоской тригональной, так как сумма валентных углов при атоме N12 составляет $345,9^\circ$. Такая геометрия обусловлена частичной делокализацией неподелённой электронной пары атома N12 с участием π -электронной системы сульфонильной группы $S=O$, что приводит к уменьшению пирамидальности атома азота. Для сравнения, в N-производных цитизина, в которых отсутствует эффективное сопряжение неподелённой электронной пары атома N12 с электронами заместителя, атом азота сохраняет преимущественно пирамидальную конфигурацию. Так, в молекулах нитрометилцитизина (Smol'yakov et al., 2017) и цитизина (Owczarzak et al., 2017) сумма валентных углов при атоме N12 составляет $333,7$ и $338,3^\circ$ соответственно, что соответствует пирамидальной конфигурации. Полученные в настоящей работе результаты подтверждаются с данными квантово-химических расчётов, согласно которым введение сульфонильного фрагмента приводит к перераспределению электронной плотности атома N12 и способствует частичной планаризации его геометрии. Данные о кристаллических структурах ЦН и его производных приведены по Кембриджскому банку структурных данных (CambridgeCrystallographicDatabase., 2021).

При наличии в структуре производных ЦН заместителей, способных к сопряжению с НЭП атома азота, конфигурация последнего изменяется в сторону плоской тригональной формы. Согласно литературных данных, подобная геометрия наблюдается, например, в молекулах кристаллогидрата N-цитизинодитиокарбамата аммония (Kulakov et al., 2009) и N-формилцитизина (Turdybekov et al., 2017). Изменение конфигурации атома азота связано с мезомерным эффектом, возникающим вследствие сопряжения его неподелённой электронной пары с системой связей $S-C-S$ и $C=O$ соответственно. В соединении 2 аналогичное изменение геометрии атома N12, характеризующееся уменьшением степени его пирамидальности, может быть связано с делокализацией электронной плотности в направлении сульфонильного фрагмента, что согласуется с результатами проведённых квантово-химических расчётов. В таблице 4 приведены координаты атомов структуры соединения 2 в долях элементарной ячейки.

Таблица 4. Координаты атомов ($\times 10^3$) в долях элементарной ячейки для соединения 2.

Атом	x	y	z
S(1)	1570(1)	6334(1)	2084(1)
O(1)	3784(4)	4085(3)	6024(2)

Более подробно было также изучено строение соединения - 3,5-диметил-N-морфолиноизоксазола-4-сульфонамида 3. Так, в спектре ЯМР ^1H соединения 3 метильные протоны H-16,16,16 и H-17,17,17 при изоксазольном фрагменте проявились двумя трехпротонными синглетами 2.38 и 2.62 м.д. соответственно. Метиленовые протоны H-3_{ax},5_{ax},3_{eq},5_{eq} и H-2_{ax},6_{ax},2_{eq},6_{eq} морфолинового фрагмента регистрировались двумя двухпротонными мультиплетами при 2.68-2.70 и 3.59-3.60 м.д. соответственно. Сульфаниламидный протон H-7 проявился однопротонными синглетами при 6.10 м.д.

В спектре ЯМР ^{13}C соединения 3 сигналы углеродных атомов метильных групп изоксазольного фрагмента наблюдаются при 10,80 (C-16) и 12,71 (C-17) м.д., тогда как сигналы атомов углерода морфолинового фрагмента — при 56,75 (C-3,5) и 66,79 (C-2,6) м.д. Сигналы углеродных атомов изоксазольного фрагмента регистрируются при 114,69 (C-11), 158,00 (C-15) и 174,82 (C-12) м.д.

Молекулярная структура соединения 3 также доказано по данным двумерных спектров ЯМР COSY (^1H - ^1H) и HMQC (^1H - ^{13}C) и HMBC (^1H - ^{13}C), позволяющими установить гомо- и гетероядерные спин-спиновые корреляции. Наблюдаемые корреляции в спектрах COSY (^1H - ^1H) и HMQC (^1H - ^{13}C) для соединения 3 представлены на рисунке 5. По данным спектра ^1H - ^1H COSY соединения 3 установлены трехсвязевые спин-спиновые корреляции между протонами соседних метиленовых групп: H^{3_{ax},5_{ax},3_{eq},5_{eq}}-H^{2_{ax},6_{ax},2_{eq},6_{eq}} (2.67, 3.58 и 3.58, 2.67) м.д.

В спектре ^1H - ^{13}C HMQC выявлены гетероядерные корреляции через одну связь между протонами и атомами углерода для следующих пар: H16-C16 (2.37, 10.97), H17-C17 (2.61, 12.76), H^{3_{ax},5_{ax},3_{eq},5_{eq}}-C3,5 (2.67, 56.84), H^{2_{ax},6_{ax},2_{eq},6_{eq}}-C2,6 (3.58, 66.91) м.д. Гетероядерные взаимодействия протонов с атомами углерода через две и более связи были установлены с помощью спектроскопии ^1H - ^{13}C HMBC для следующих присутствующих в соединении пар: H16-C11 (2.37, 114.67), H16-C15 (2.37, 158.37); H17-C11 (2.61, 114.67), H17-C12 (2.61, 175.29); H7-C3,5 (6.10, 56.88), H7-C11 (6.10, 114.39) м.д.

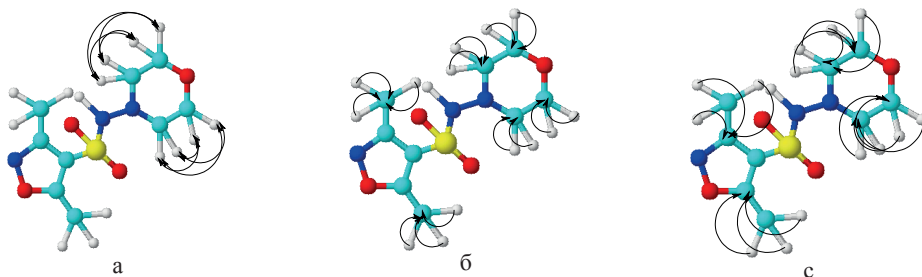


Рисунок 5. Корреляционная схема соединения 3 по данным спектров COSY (а), HMQC (б) и HMBC (с).

С целью уточнения пространственной структуры молекулы 3,5-диметил-N-морфолиноизоксазола-4-сульфонамида **3** нами проведён рентгеноструктурный анализ. Молекулярная структура соединения **3**, установленная по данным рентгеноструктурного анализа, представлена на рисунке 6.

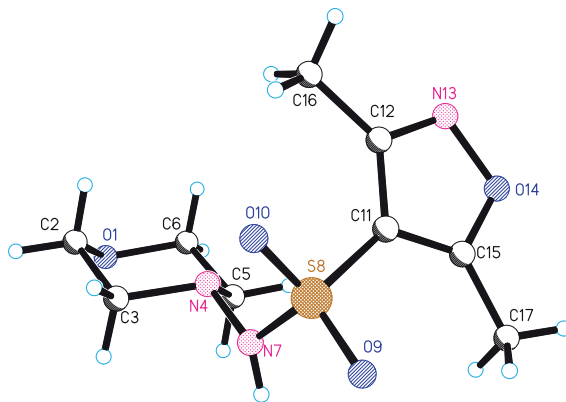


Рисунок 6. Строение молекулы **3**.

Длины связей и валентные углы в соединении **3** близки к стандартным значениям. Морфолиновый цикл O1–C2–C3–N4–C5–C6 принимает конформацию, близкую к идеальной кресловидной, что подтверждается значениями параметров асимметрии $\Delta C_{2,3} = 1,01$ и $\Delta C_{s4} = 0,70$. Оксазольный пятичленный цикл C11–C12–N13–O14–C15 является практически плоским; максимальное отклонение атомов от среднеквадратичной плоскости составляет $0,0034 \text{ \AA}$. Метильные группы C16 и C17 расположены практически в плоскости оксазольного цикла. Атом S8 также находится в этой плоскости, отклоняясь от неё на $0,04 \text{ \AA}$. В то же время атомы O9 и O10 отклонены от плоскости остальных атомов на $0,50$ и $0,70 \text{ \AA}$ соответственно. Метильные и сульфонамидная группы ориентированы экваториально относительно оксазольного цикла, что подтверждается значениями торсионных углов $C15-C11-C12-C16 = 178,55^\circ$, $C12-C11-C15-C17 = 178,78^\circ$ и $S8-C11-C12-N13 = 177,76^\circ$. Положение атома N7 стабилизируется межмолекулярной водородной связью $O1 \cdots H7-N7$, для которой расстояния $N7-H7$, $H7 \cdots O1$ и $N7 \cdots O1$ составляют $0,88$, $2,05$ и $2,93 \text{ \AA}$ соответственно. Данная водородная связь, реализующаяся при симметричном преобразовании $(x, y, z) \rightarrow (-x, -0,5-y, -z)$, приводит к формированию бесконечной спиральной цепи вдоль оси с кристаллической решётки (рис. 7).

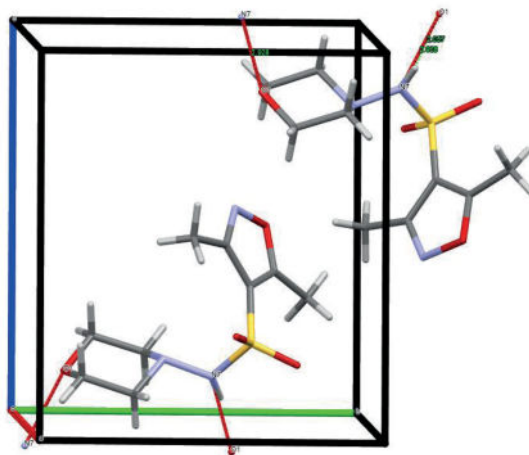


Рисунок 7. Кристаллическая упаковка молекулы3.

Спектр ЯМР ^1H соединения 4 характеризуется сигналами протонов биспидинового фрагмента цитизина в области 1,74–1,77 м.д. (2H, H-31_{ax}, H-31_{eq}), 2,45 с (1H, H-21), 2,81 д (1H, H-20_{ax}, $^2J = 11,6$ Гц), 2,91 д (1H, H-20_{eq}, $^2J = 11,6$ Гц), 3,17 с (1H, H-29) и 3,29–3,83 м.д. (H-22_{ax}, H-22_{eq}, H-30_{ax}, H-30_{eq}). Сигналы ароматических протонов цитизинового фрагмента наблюдаются при 6,15–6,17 м.д. (1H, H-27), 6,22–6,24 м.д. (1H, H-25) и 7,30–7,33 м.д. (1H, H-26). Сигнал протонов метильной группы H-16 оксазольного фрагмента наблюдается в виде трёхпротонного синглета при 2,50 м.д. Положение данного сигнала соответствует метильной группе, находящейся в 5-положении изоксазольного цикла. Ароматические протоны хлорфенильного фрагмента H-10,12 и H-9,13 резонируют в виде двухпротонных мультиплетов при 7,46–7,49 и 7,69–7,71 м.д. соответственно. В спектре также наблюдаются два дублетных сигнала винильных протонов H-6 и H-7 при 7,19 и 7,63 м.д. соответственно с большим значением константы спин-спиновой взаимодействия ($^3J = 16,5$ Гц). Высокое значение КССВ свидетельствует о транс-расположении протонов относительно двойной связи, что позволяет отнести конфигурацию винильного фрагмента к E-диастереомеру.

Согласно данным ^{13}C ЯМР-спектроскопии соединения 4, сигналы атомов углерода ЦН-го фрагмента наблюдаются при следующих значениях химических сдвигов: 24.12 (C-31), 26.75 (C-21), 33.87 (C-29), 49.27 (C-30), 51.07 (C-22), 52.80 (C-20), 105.65 (C-27), 117.13 (C-25), 140.08 (C-26), 150.11 (C-28) и 162.62 (C-24) м.д. Сигналы атомов углерода метилхлорфенилоксазольного фрагмента зарегистрированы при следующих значениях химических сдвигов: 13.01 (C-16), 112.57 (C-4), 129.58 (C-6), 130.28 и 131.64 (C-9,10,12,13), 133.96 (C-11), 138.52 (C-7,8), 150.11 (C-5), 158.52 (C-3) м.д.

Структура соединения 4 дополнительно установлена на основании данных двумерной ЯМР-спектроскопии COSY (^1H - ^1H) и HMQC(^1H - ^{13}C)и HMBC

(^1H - ^{13}C), позволивших идентифицировать гомо- и гетероядерные спин-спиновые корреляции. Корреляционные взаимодействия, выявленные в спектрах COSY (^1H - ^1H) и HMQC (^1H - ^{13}C), представлены на рисунке 8.

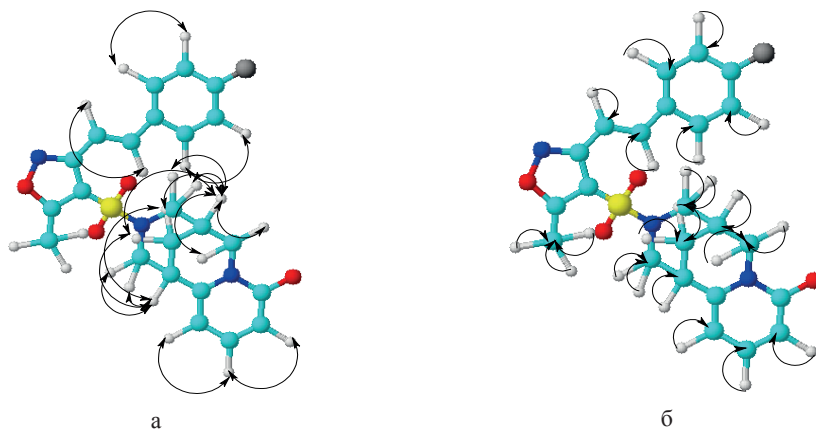


Рисунок 8. Схема гомо- и гетероядерных корреляций соединения 4 по данным спектров COSY (а) и HMQC (б).

В спектре ^1H - ^1H COSY соединения 4 выявлены трехсвязевые спин-спиновые корреляции между протонами соседних метилен-метиленовых, метин-метиленовых и метин-метиновых фрагментов. В частности, установлены корреляции Н-31–Н-29 (1,76; 3,16 и 3,16; 1,76 м.д.), Н-20eq–Н-30eq (2,90; 3,58 и 3,58; 2,90 м.д.), Н-20eq–Н-30ax (2,88; 3,49 и 3,49; 2,88 м.д.), Н-25–Н-26 (6,21; 7,33 и 7,33; 6,21 м.д.), Н-27–Н-26 (6,16; 7,32 и 7,32; 6,16 м.д.), Н-6–Н-7 (7,20; 7,63 и 7,63; 7,20 м.д.), а также Н-10,12–Н-9,13 (7,46; 7,70 и 7,70; 7,46 м.д.).

По данным спектроскопии ^1H - ^{13}C HMQC соединения 4 установлены односвязевые гетероядерные корреляции между протонами и непосредственно связанными с ними атомами углерода. Идентифицированы следующие пары Н-С: Н-31–С-31 (1,76; 24,48 м.д.), Н-21–С-21 (2,80; 26,78 м.д.), Н-16–С-16 (2,49; 13,01 м.д.), Н-20ax–С-20 (2,78; 52,03 м.д.), Н-20eq–С-20 (2,90; 51,61 м.д.), Н-22ax–С-22 (3,53; 51,61 м.д.), Н-22eq–С-22 (3,70; 51,61 м.д.), Н-29–С-29 (3,16; 33,87 м.д.), Н-30ax–С-30 (3,49; 49,81 м.д.), Н-30eq–С-30 (3,60; 50,20 м.д.), Н-26–С-26 (7,31; 140,08 м.д.), Н-7–С-7 (7,63; 138,62 м.д.), Н-6–С-6 (7,20; 128,82 м.д.), Н-25–С-25 (6,22; 117,13 м.д.), Н-27–С-27 (6,16; 105,65 м.д.), Н-10,12–С-10,12 (7,45; 130,07 м.д.) и Н-9,13–С-9,13 (7,69; 130,28 м.д.).

В спектре ^1H - ^{13}C HMBC наблюдается гетероядерная корреляция между протоном Н-16 метильной группы и атомом углерода С-4 при (Н 2,49, С 113,39) м.д. Наличие данной корреляции подтверждает пространственную близость Н-16 к С-4 и свидетельствует о расположении соответствующей метильной группы при атоме С-5 изоксазольного кольца.

Заключение. Таким образом, получен ряд новых сульфонамидных производных 3,5-ДМИ-ла с участием молекул ЦН и N-АМ-на. Установлено,

что введение сульфонамидного фрагмента в молекулу 3,5-диметилизоксазола способствует повышению реакционной способности изоксазольного цикла. Взаимодействие 4-[(3,5-диметил-1,2-оксазол-4-ил)сульфонил]цитизина 2 с *n*-хлорбензальдегидом протекает преимущественно по метильному заместителю в положении С-5 изоксазольного цикла. Строение синтезированных соединений подтверждено комплексом спектроскопических методов, включая одномерную и двумерную ЯМР-спектроскопию, а также методом рентгеноструктурного анализа. Полученные результаты свидетельствуют о перспективности дальнейшей функционализации сульфонамидных производных 3,5-ДМИ ла и их использования в качестве основы для поиска и создания новых ингибиторов карбоангидразы.

References

- Allen F.H., Kennard O., Watson D.G., Brammer L., Orpen A.G., Taylor R. (1987). *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2.* – P. S1-S19. <https://doi.org/10.1039/P298700000S1> (in Eng.).
- Balsamo A., Lapucci A., Minutolo F. (2004). Synthesis and COX-2 inhibitory properties of N-phenyl- and N-benzylsubstituted amides of 2-(4-methylsulfonylphenyl)cyclopent-1-ene-1-carboxylic acid and of their pyrazole, thiophene and isoxazole analogs. *Farmaco.* – Vol. 59. – No. 1. – P. 25-31. <https://doi.org/10.1016/j.farmac.2003.09.003> (in Eng.).
- Barril X., Borgognoni J., Brough P.A. (2008). 4,5-Diarylisoxazole Hsp90 chaperone inhibitors: Potential therapeutic agents for the treatment of cancer. *Journal of Medicinal Chemistry.* – Vol. 51. – P. 196-218. <https://doi.org/10.1021/jm701018h> (in Eng.).
- Browne S.G. (1961). Trial of a long-acting sulfonamide sulfaphenazole (Orisul, Ciba), in the treatment of leprosy. *International Journal of Leprosy.* – Vol. 29. – P. 502-505 (in Eng.).
- Cambridge Crystallographic Database, Release. (2021). Cambridge: Cambridge Crystallographic Data Centre. <https://www.ccdc.cam.ac.uk/solutions/csd-system/components/csd/> (in Eng.).
- Delfs L. (1961). Solubility and acidity of 2-sulfanilamido-4,5-dimethylisoxazole. *Arzneimittel-Forschung.* – Vol. 11. – P. 402-403 (in Eng.).
- Fazylov S.D., Nurkenov O.A., Nurmaganbetov Z.S., Sarsenbekova A.Zh., Bakirova R.Ye., Seilkhanov O.T., Sviderskiy A.K., Syzdykov A.K., Mendibayeva A.Zh. (2025). Synthesis of β -Cyclodextrin-Functionalized Silver Nanoparticles and Their Application for Loading Cytisine and Its Phosphorus Derivative. *Molecules.* – Vol. 30. – P. 1337. <https://doi.org/10.3390/molecules30061337> (in Eng.).
- Freer A.A., Robins D.J., Sheldrake G.N. (1987). Structures of (–)-cytisine and (–)-N-methylcytisine: tricyclic quinolizidine alkaloids. *Acta Crystallographica.* – Vol. C43. – P. 1119-1122. <https://doi.org/10.1107/S0108270187092813> (in Eng.).
- Husain A., Madhesia D. (2012). Heterocyclic compounds as carbonic anhydrase inhibitor. *J. Enzyme Inhib. Med. Chem.* – Vol. 27. – No. 6. – P. 773-782. <https://doi.org/10.3109/14756366.2011.617882> (in Eng.).
- Korsakov M.K. (2018). Sulfonamide Derivatives of Binuclear Azole-Containing Systems: Synthesis and Properties: Diss. ... Dr. Sci. (Chem.): 02.00.03. Moscow: Moscow State University. – 453 p. (in Eng.).
- Korsakov M.K., Filimonov S.I., Dorogov M.V. (2004). Synthesis and Properties of Sulfamide Derivatives of 3,5-Dimethylisoxazole. *Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii. Khimiyai Khimicheskaya Tekhnologiya.* – Vol. 47. – No. 10. – P. 114-117 (in Eng.).
- Kulakov I.V., Nurkenov O.A., Ainabaev A.A., Turdybekov D.M., Turdybekov K.M. (2009). Synthesis of Dithiocarbamate Derivatives on the Matrix of Cytisine, Anabasine and d-Pseudoephedrine Alkaloids. Crystalline Structure of N-Cytisine Dithiocarbamate Ammonium Salt. *Russian Journal of General Chemistry.* – Vol. 79. – P. 1716-1719. <https://doi.org/10.1134/S1070363209080234> (in Eng.).
- Lee C.C., Fitzmaurice R.J., Caddick S. (2009). 3,5-Isoxazoles from α -bromopentafluorophenylvinylsulfonates: Synthesis of sulfonates and sulfonamides. *Organic and Biomolecular Chemistry.* – Vol. 7. – P. 4349-4351. <https://doi.org/10.1039/B911098D> (in Eng.).

Linton A.L., Chatfield W.R. (1965). A clinical trial of sulphamethoxazole in pyelonephritis with simplified methods of assessment. *British Journal of Urology*. – Vol. 37. – No. 5. – P. 515-517. <https://doi.org/10.1111/j.1464-410x.1965.tb09639.x> (in Eng.).

Owczarzak A., Grzeskiewicz A.M., Kubicki M. (2017). Experimental studies of charge density distribution in the crystals of cytosine and N-methylcytosine. *Inside the Fake Tobacco. Structural Chemistry*. – Vol. 28. – P. 1359-1367. <https://doi.org/10.1007/s11224-017-0972-5> (in Eng.).

Parsons S., Flack H.D., Wagner T. (2013). *Acta Crystallographica, Section B*. – Vol. 69. – P. 249-259. <https://doi.org/10.1107/S2052519213010014> (in Eng.).

Ragavendra B., Divya K.G., Padmaja A., Padmavathi V. (2016). Synthesis and antimicrobial activity of bisazolylsulfonyl amines. *Indian Journal of Chemistry – Section B Organic and Medicinal Chemistry*. – Vol. 55B. – No. 11. – P. 1376-1383 (in Eng.).

Smol'yakov A.F., Karnoukhova V.A., Osintseva S.V., Petrova P.R., Koval'skaya A.V., Tsypysheva I.P. (2017). Crystal and Molecular Structures of Methylcytosine Nitro-Derivatives. *Pharmaceutical Chemistry Journal*. – Vol. 50. – No. 12. – P. 826-832. <https://doi.org/10.1007/s11094-017-1541-3> (in Eng.).

Talley J.J., Brown D.L., Carter J.S. (2000). 4-[5-Methyl-3-phenylisoxazol-4-yl]-benzenesulfonamide, valdecoxib: A potent and selective inhibitor of COX-2. *J. Med. Chem.* – Vol. 43. – No. 5. – P. 775-777. <https://doi.org/10.1021/jm990577v> (in Eng.).

Turdybekov K.M., Kulakov I.V., Turdybekov D.M., Mahmutova A.S. (2017). Conformational states and crystal structure of N-formylcytosine. *Russian Journal of General Chemistry*. – Vol. 87. – No. 10. – P. 2493-2496. <https://doi.org/10.1134/S107036321710036X> (in Eng.).

Publication Ethics and Publication Malpractice in the journals of the «Central Asian Academic Research Center» LLP (Almaty)

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 National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan implies that the work described 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 National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan 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 originality detection service Cross Check <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 National Academy of sciences of the Republic of Kazakhstan.

The Editorial Board of the National Academy of sciences of the Republic of Kazakhstan will monitor and safeguard publishing ethics.

Requirements for articles design for publication in the journal are available on the websites:

www.nauka-nanrk.kz

ISSN 2518-1483 (Online), ISSN 2224-5227 (Print)

<http://reports-science.kz/index.php/en/archive>

Managing Editor: T. Apendiev
Editors: D.S. Alenov, A. Shormakova
Computer layout: G.D. Zhadyranova

Signed for print: September 29, 2026
Format: 70×90 1/16. 34.5 printed sheets. Order No. 3.

*«Central Asian Academic Research Center» LLP
Almaty, Shevchenko Street, 28*