

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



«ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ
ҰЛТТЫҚ ҒЫЛЫМ
АКАДЕМИЯСЫ» РҚБ

«ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ
ҰЛТТЫҚ ҒЫЛЫМ АКАДЕМИЯСЫ» РҚБ

Х А Б А Р Л А Р Ы

ИЗВЕСТИЯ

РОО «НАЦИОНАЛЬНОЙ
АКАДЕМИИ НАУК РЕСПУБЛИКИ
КАЗАХСТАН»

N E W S

OF THE ACADEMY OF SCIENCES
OF THE REPUBLIC OF
KAZAKHSTAN

SERIES
CHEMISTRY AND TECHNOLOGY
1 (462)

JANUARY – MARCH 2025

PUBLISHED SINCE JANUARY 1947

PUBLISHED 4 TIMES A YEAR

ALMATY, NAS RK

Бас редактор:

ЖҰРЫНОВ Мұрат Жұрынұлы, 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 (Окефорд, 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, Қырғызстан) <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 Вағиф 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>

«ҚР ҰҒА Хабарлары. Химия және технология сериясы»

ISSN 2518-1491 (Online),

ISSN 2224-5286 (Print)

Меншіктенуші: «Қазақстан Республикасының Ұлттық ғылым академиясы» РҚБ (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 **28.02.2025 ж.** берген N°KZ63VPY00113743 Күзлік.

Тақырыптық бағыты: *химия және химиялық технология*

Мерзімділігі: жылына 4 рет.

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

© Қазақстан Республикасының Ұлттық ғылым академиясы РҚБ, 2025

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 Мирослав, 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 углекислотной химии (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 Джурабай 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>

«Известия НАН РК. Серия химии и технологии».

ISSN 2518-1491 (Online),

ISSN 2224-5286 (Print)

Собственник: Республиканское общественное объединение «Национальная академия наук Республики Казахстан» (г. Алматы).

Свидетельство №KZ63VPY00113743 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 28.02.2025 г.

Тематическая направленность: химия и химические технологии

Периодичность: 4 раза в год.

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

© РОО Национальная академия наук Республики Казахстан, 2025

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>

News of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan. Series of chemistry and technology.

ISSN 2518-1491 (Online),

ISSN 2224-5286 (Print)

Owner: RPA «National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan» (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 **No. KZ66VPY00025419**, issued **29.07.2020**.

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

Periodicity: 4 times a year.

Editorial address: 28, Shevchenko str., of. 219, Almaty, 050010, tel. 272-13-19

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

© National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan, 2025

NEWS

OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN
SERIES CHEMISTRY AND TECHNOLOGY

ISSN 2224-5286

Volume 1. Number 462 (2025), 33–42

<https://doi.org/10.32014/2025.2518-1491.264>

УДК 541.61/.614

МРНТИ 31.01.05

© N. Bektenov, G. Koszhanova*, 2025.

Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: koszhanova.gulim02@gmail.com

QUANTUM-CHEMICAL MODEL CALCULATION REVIEW OF VERMICULITE AND ITS BASED MODIFIED SORBENT

Bektenov Nesipkhan Abzhaparovich – Doctor of Chemical Science, Abai Kazakh National Pedagogical University, professor of Chemistry department, e-mail: bektanbna@gmail.com <https://orcid.org/0000-0003-1427-438X>;

Koszhanova Gulim – PhD student, Abai Kazakh National Pedagogical University, department of chemistry, e-mail: koszhanova.gulim02@gmail.com <https://orcid.org/0000-0001-8093-3465>.

Abstract. Nowadays, environmental problems are arising from the technological development of the world. Pollution of water and soil with heavy and rare metals is of great concern. The main goal of chemists is to use natural, biodegradable sorbents and synthesize them to solve these problems. Natural, environmentally friendly, biodegradable sorbents are often obtained by modifying natural minerals. This work is based on a review of quantum-chemical calculations to obtain a naturally modified ion exchanger based on vermiculite and study its sorption properties for heavy and rare metals. Quantum-chemical calculations are carried out using the Gaussian W09 and GaussView programs. These programs allow you to build and optimize the structure of the mineral and the modified ion exchanger, obtain detailed information about the elements in it, the bond lengths and bond angles between them. Vermiculite is treated with phosphoric acid, glycidyl methacrylate and acrylonitrile, and an ion exchanger is obtained. Quantum-chemical calculations allow you to study the electronic and spectral properties of the synthesized system. According to the rules of quantum mechanics, the probability density of an electron is calculated relative to the square of the electron wave function. The electron wave function is calculated based on the Schrödinger equation. Quantum calculations were performed using the Gaussian and GaussView 6.0 graphical visualization programs. A piece of graphical vermiculite was built and calculations were performed using the Hartree-Fork 6-311G++** parameters. Brief information on quantum calculations was obtained and the calculation took a total of 104 hours. Theoretical proofs were performed using quantum-chemical calculations.

Key words: vermiculite, sorbent, modified, quantum-chemical calculations, Gaussian W09, GaussView 6.0.

© Н. Бектенов, Г. Қосжанова*, 2025.

Абай атындағы Қазақ Ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан.

E-mail: koszhanova.gulim02@gmail.com

ВЕРМИКУЛИТ ЖӘНЕ ОНЫҢ НЕГІЗІНДЕ МОДИФИКАЦИЯЛАНҒАН СОРБЕНТТІҢ КВАНТТЫ-ХИМИЯЛЫҚ МОДЕЛІН ЕСЕПТЕУГЕ ШОЛУ

Бектенов Несипхан – химия ғылымдарының докторы, Абай атындағы Қазақ Ұлттық педагогикалық университеті, Химия кафедрасының профессоры, e-mail: bektanbna@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1427-438X>;

Қосжанова Гүлім Жеңісқызы – PhD докторант, Абай атындағы Қазақ Ұлттық педагогикалық университеті, Химия кафедрасы, e-mail: koszhanova.gulim02@gmail.com <https://orcid.org/0000-0001-8093-3465>.

Аннотация. Қазіргі таңда ғаламның технологиялық дамуынан экологиялық мәселелер туындап жатыр. Су және жер қоймаларының ауыр және сирек металдармен ластануы аса алаңдатады. Бұл мәселелерді шешу үшін табиғи, биоыдырағыш сорбенттерді қолдану және оларды синтездеу химия ғылымдарының негізгі мақсаты. Табиғи, экологиялық зиянсыз, биоыдырағыш сорбенттерді көбіне табиғи минералдарды модификациялау арқылы алады. Бұл жұмыста вермикулит негізінде табиғи модификацияланған ион алмастырғыш алу және оның ауыр және сирек металдарды сорбциялау қасиетін зерттеу үшін квантты-химиялық есептеулер жүргізуге шолу жасау негізделген. Квантты-химиялық есептеулер Gaussian W09 және GaussView бағдарламалары арқылы жүзеге асыралады. Бұл бағдарламалар минерал мен модификацияланған ион алмастырғыштың құрылымын салып және оны оптимизация жасау арқылы оның құрамындағы элементтер мен олардың арасындағы байланыс ұзындығы, байланыс бұрыштары туралы толық мәлімет алуға болады. Вермикулитті фосфор қышқылы, глицидил метакрилат және акрилонитрил арқылы өңдеп, ион алмастырғыш алады. Квантты-химиялық есептеулердің негізінде синтездеп алынған системаның электронды және спектрлік қасиеттерін зерттеуге мүмкіншілік береді. Кванттық механиканың ережелеріне сәйкес электронның ықтималды тығыздығы электронның толқындық функциясының квадратына қатысты есептелінеді. Электронның толқындық функциясын Шреденгердің теңдеуі негізінде есептелінеді. Квантты есептеулер Gaussian және графикалық көрініс GaussView 6.0 бағдарламалары арқылы жүргізілді. Графикалық вермикулиттің бір бөлігі салынып, Hartree-Fork 6-311G++** параметрлері бойынша есептеу жүргізілді. Квантты есептеу бойынша қысқаша мәліметтер алынды және есептеуге барлығы 104 сағат кетті. Квантты-химиялық есептеулер арқылы теориялық дәлелдемелер жүргізілді.

Түйін сөздер: вермикулит, сорбент, модификациялау, квантты-химиялық есептеу, Gaussian W09, GaussView 6.0.

© Н. Бектенов, Г. Косжанова*, 2025.

Казахский Национальный педагогический университет имени Абая,
Алматы, Казахстан.

E-mail: koszhanova.gulim02@gmail.com

ОБЗОР КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ РАСЧЕТА ВЕРМИКУЛИТА И МОДИФИЦИРОВАННОГО СОРБЕНТА НА ЕГО ОСНОВЕ

Бектенов Несипхан Абжапарович – доктор химических наук, Казахский национальный педагогический университет имени Абая, профессор кафедры Химии, E-mail: bektanbna@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1427-438X>;

Косжанова Гулим Женискызы – PhD докторант, Казахский национальный педагогический университет имени Абая, кафедра Химии, E-mail: koszhanova.gulim02@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-8093-3465>.

Аннотация. В настоящее время экологические проблемы возникают в результате технологического развития мира. Большую тревогу вызывает загрязнение водных и земельных водоемов тяжелыми и редкими металлами. Для решения этих проблем основная цель ученых-химиков – использовать природные биоразлагаемые сорбенты и синтезировать их. Натуральные, экологически чистые, биоразлагаемые сорбенты чаще всего получают путем модификации природных минералов. В данной работе на основе обзора квантово-химических расчетов получен природный модифицированный ионит на основе вермикулита и изучены его свойства сорбции тяжелых и редких металлов. Квантово-химические расчеты выполнены с использованием программ Gaussian W09 и GaussView. Эти программы позволяют получить подробную информацию об элементах в его составе, длинах связей и валентных углах между ними путем создания и оптимизации структуры минерала и модифицированного ионита. Вермикулит обрабатывают фосфорной кислотой, глицидилметакрилатом и акрилонитрилом для получения ионообменника. Это дает возможность изучить электронные и спектральные свойства синтезированной системы на основе квантово-химических расчетов. По правилам квантовой механики плотность вероятности электрона рассчитывается относительно квадрата волновой функции электрона. Волновая функция электрона рассчитывается на основе уравнения Шрёдингера. Количественные расчеты проводились с использованием метода Гаусса и графической визуализации с использованием программного обеспечения GaussView 6.0. Кусок графитового вермикулита был построен и рассчитан по параметрам Hartree-Fork 6-311G++**. Была получена сводка квантовых вычислений, которые в общей сложности заняли 104 часа. Теоретические доказательства проводились с помощью квантово-химических расчетов.

Ключевые слова: вермикулит, сорбент, модифицированный, квантово-химические расчёты, Gaussian W09, GaussView 6.0.

Кіріспе. Молекулалық динамика (МД) модельдеудің артықшылықтары атомдық деңгейдегі процестерді сипаттауға, алынған нәтижелерді түсіндіруге және термодинамикалық қасиеттерді есептеуге мүмкіндік береді. МД әдісі байланыс ұзындықтары, байланыс бұрыштары және күштер сияқты параметрлерді дәл анықтауға көмектеседі. Алайда, кеуекті және сазды минералдардың кеуектілігін эксперименталды түрде өлшеу қиын, ал пакетаралық құрылымдағы өзгерістерді визуализациялау да күрделі мәселе болып табылады (Mooney, et al., Boek, et al.). Сондықтан молекулалық модельдеу атом деңгейінде саз минералдарының молекулалық құрылымы мен динамикасы туралы түсінік алудың тамаша тәсілі болып табылады.

Сазды минералдардағы пакетаралық катиондардың мөлшері мен заряды олардың ісінуінде маңызды рөл атқарады. Сонымен қатар, теріс зарядтардың саны мен кеңістіктік орналасуы ылғалдану дәрежесін анықтайтын негізгі факторлар болып табылады және олар пакетаралық қабаттардың ісінуіне жауап береді (Lui, 2008). Зерттеулердің көпшілігі таза вермикулит катиондарының бір түріне бағытталған. Вермикулиттің макроскопиялық үлгілеріндегі тәжірибелік көші-қон деректерін түсіндіру сазды агрегаттар, саз бөлшектері және саз пакеттері арасында көптеген тесіктердің болуымен қиындайды. Әдіс Ньютон механикасына негізделген микроскопиялық модельдеуді қолданады. Бұл молекулалық динамиканы модельдеу үшін қозғалыстар мен иондар туралы статикалық және динамикалық ақпарат алуға мүмкіндік береді. Сонымен қатар, балшық пакеттері арасындағы жергілікті кеуекті күшейту арқылы зерттеулер жүргізіледі.

Экологиялық мәселелердің ең ауқымдысы – су және жер қойнауларының ластануы болып келеді. Қазіргі ғалымдардың бұл мәселені шешудегі ең оңтайлы, экологияға зияны жоқ, табиғи материалдардан алынған химия-физикалық модификацияланған сорбенттер деп есептейді. РПГ «КазГидромет»-тің ақпараттық бюллетеніне сүйенсек (2024, ақпан) (КазГидромет, 2024; Жаланқызов, және т.б., 2015), Қазақстанның ірі қалаларында зауыт, фабрикалардың қалдықтарынан су қорларының As, Hg, Cu, Cd, Cr сияқты металлдардың иондарымен ластануын байқаған (Казгидромет, 2024). Бұл металлдардың иондарын сулы ерітіндіден модификацияланған циолит $((\text{MAlO}_2(\text{SiO}_2)_x(\text{H}_2\text{O})_y)$, мұндағы М – H^+ немесе Na^+ иондары), монтмориллонит $(\text{Al}_2(\text{Si}_4\text{O}_{10})(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O})$ вермикулит $((\text{Mg}^{+2}, \text{Fe}^{+2}, \text{Fe}^{+3})_3[(\text{AlSi})_4\text{O}_{10}] \cdot (\text{OH})_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O})$ сияқты сорбенттердің кеуектілігінің және активтендірілген орталықтарының болуына байланысты оларды зерттеу және қолдану қарастырылған (Абдул, және т.б., 2021; Yang, және т.б., 2024). Бұл жұмыста вермикулит негізінде модификацияланған сорбенттің және табиғи вермикулиттің квантты-химиялық моделі зерттелінеді. Вермикулит – қабатты құрылымнан тұратын табиғи сорбент. Алайда, оның сорбциялау мүмкіндігі шектеулі. Сондықтан, оның қабаттарының арасындағы металлдарды қышқылмен жуып, модификациялау арқылы оның кеуектілігімен, активті орталықтар санын арттыруға болады (Бектенов, және т.б., 2024).

Вермикулит пен оның негізінде өзгертілген сорбентті есептеудің кванттық химиялық моделіне шолу материалтану және химия саласындағы маңызды

аспект болып табылады. Вермикулит-жоғары кеуектілік, ион алмасу қабілеті және ыстыққа төзімділік сияқты бірегей физика-химиялық қасиеттері бар минерал. Бұл қасиеттер оны әртүрлі салаларда, соның ішінде ластаушы заттардың адсорбциясы, ауыл шаруашылығы және құрылыс салаларында пайдалану үшін перспективті материал етеді.

Квантты-химиялық есептеулер арқылы химиялық заттың моделін алып қана қоймай, оның құрамындағы элементтер туралы, яғни байланыс ұзындықтары, байланыс бұрышы, қабаттар арасындағы ұзындық сияқты мәліметтерді алуға болады (Sergey, және т.б., 2018). Бұл мәліметтер арқылы модификацияланған вермикулит пен вермикулитті салыстыруға және неге модификацияланған сорбент табиғи сорбенттен гөрі эффективті деген сұрақтарға жауап алуға болады.

Бройльдың гипотезасы бойынша әр бөлшектің өзіндік толқыны болады және толқын бар жерде толқындық теңдеу болады. Сол толқындық теңдеуді (Шреденгер, теңдеуі) кванттық есептеулерге қолданады. Шреденгер теңдеуінен *ab initio* (басынан бастап) модельдеулері Хартри-Фок (ХФ) әдістері мен тығыздық-функционалдық теориясына (ТФТ) негізделіп толқындық теңдеумен математикалық болжам жасалынады (Sergey, және т.б., 2018). Тығыздық-функционалдық теориясы көп денелі жүйелердің электрондық құрылымын есептеуші квантты-механикалық модельдеу әдісі (Sergey, және т.б., 2018). Тығыздық-функционалдық теориясының бірнеше түрі бар. Соның ішінде молекулалардың модельін алуда Хартри-Фок әдісі мен оның базалық жинағы қолданылады. Бұл есептеулер Gaussian09W және GaussView 6.0 бағдарламалары арқылы жүзеге асады. Gaussian 09W бағдарламасы арқылы квантты-химиялық есептеулер жүргізілсе, GaussView 0.6 бағдарламасы графикалық модельдейді (Tomberg) (Frisch, 1996-2009).

Квантты-химиялық мәліметтер арқылы синтездеу процессі кезінде қандай құрылымдық өзгеріс болатындығы туралы теориялық дәлелдемелер ала аламыз. Квантты-химиялық есептеулер теориялық дәлелдеме ретінде қарастырылады.

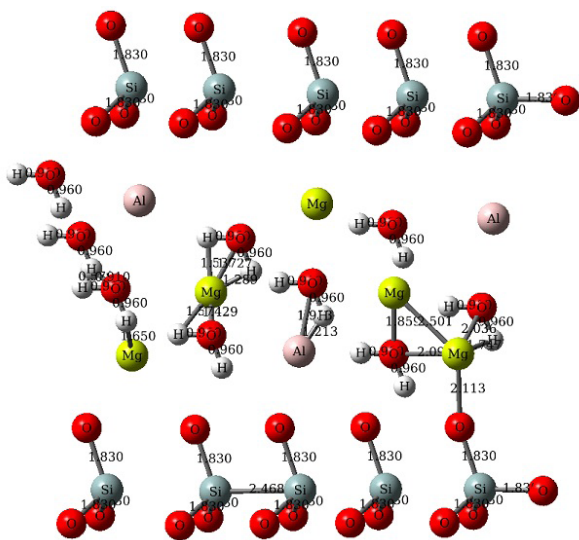
Материалдар мен зерттеу әдістері

Гиричева, Сырбу, Филиппов және Киселевтың еңбегінде үлкен молекулалық химиялық затты тығыздық-функционалдық теориясы (ТФТ-DFT) арқылы, оның ішінде B3LYP/6-311++G** базистік жинағы арқылы квантты-химиялық есептеулер жүргізілген (Giricheva, және т.б., 2021). Квантты-химиялық есептеу кем дегенде 24 сағаттан көп уақытты алады, сол себепті базистік жинақ дұрыс енгізілмесе, квантты-химиялық модельдеу шықпай қалады. Вермикулиттің құрылымының бөлігін Gaussian W09 және GaussView 6.0 арқылы графикалық түрде салынып, есептеу параметрін енгіземіз. Ал, металл ионын сорбцияланған вермикулиттің құрылымын салып, оған басқа есептеу параметрлерін енгіземіз. Мыс (II) ионын сорбциялаған модификацияланған вермикулитті сорбенттің құрылымын Курманалиев пен Жанабаеваның еңбегінен алуға болады (Курманалиев және т.б., 2019). Себебі, сорбенттің құрылымын өзгеріп, металл катионымен комплексті құрылым түзеді. Оны квантты-химиялық есептеу үшін Сингх, Патель, Абхай және тағы басқа ғалымдардың еңбегінде DFT/B3LYP базистік жинағы қолданылады (Singh, және т.б., 2021). Бұл базистік жинақ анионды ескермей,

катионды комплексті есептейді. Сузуки, Яйта, Пакольд, Алтман және тағы басқа ғалымдардың еңбегінде ФТТ-тың негізінде FP-LAPW базистік жинағымен WIEN2k коды арқылы NEXAFS spectra (шеткі рентген сәулелерін сіңірудің жұқа құрылымы спектроскопиясын – ШРССЖҚС) есептеп, моделдеуге болады (Suzuki, және т.б., 2019). Есептеулердің нәтижелері молекуланың тұрақтылығын, реакция механизмдерін және физикалық-химиялық қасиеттерін болжауға мүмкіндік берді. Сонымен қатар, алынған мәліметтер вермикулиттің қолдану салаларын, мысалы, катализаторлар, адсорбенттер және құрылыс материалдары ретінде пайдалану мүмкіндіктерін зерттеуге негіз болды.

Квантты-химиялық модельдеу нәтижелері мен визуализациялары ғылыми зерттеулерде, сондай-ақ өнеркәсіптік қолдануда маңызды рөл атқарады, себебі олар молекулалық деңгейде материалдардың қасиеттерін түсінуге және жаңа материалдарды жобалауға мүмкіндік береді. **Нәтижелер мен талқылаулар**

Вермикулиттің құрылымдық бөлігін Gaussian W09 бағдармасымен есептеуге шамамен 70 сағаттан көп уақыт кетті.



1-сурет. Есептеуші Gaussian W09 және графикалық GaussView 6.0 бағдарламалары арқылы алынған вермикулиттің құрылымдық бөлігінің моделі (ұзындықтары нм өлшемде)

Атомдар арасындағы ұзындықтар кванттық-математикалық есептеулерден кейін алынған вермикулит моделі бойынша алынды. Вермикулиттің графикалық құрылымына қарасақ (1-сурет), орталық кешенде үш алюминий атомын және бес магний атомын көруге болады. Гидрослюдағы вермикулитті қышқылмен жуу арқылы орталық металл атомдарын, яғни темір мен магний атомдарын жою арқылы оның кеуектілігін арттыруға болады. Алюминий және магний иондарының бос белсенді орындары вермикулиттің мыс, никель, қорғасын, кадмий, хром және марганец иондарын сулы ерітінділерден сорып алатынының дәлелі. 1-суретте көрсетілгендей, магний мен алюминий иондары арасындағы

байланыстар 0,15-0,18 нм диапазонында және кремний мен оттегі арасындағы байланыстардан (0,09-0,18 нм диапазонында) әлдеқайда үлкен екені көрінеді. Сондықтан алюминий, магний иондарынан босатылған белсенді орталық 0,09-0,18 нм аралығында болатыны белгілі. 1-суреттегі құрылымға сәйкес Al және Mg иондары ағынды сулардағы ауыр металл иондарымен алмасуы мүмкін және ол -7689 кДж/моль энергияны алады, бұл сорбцияның өздігінен жүретінін білдіреді. Модификацияланған вермикулит берілген құрылымында алюминий және магний иондарын жоғалтқан орталық кешен арқылы ластанған су көздерінен металл иондарымен катиондық комплекстер құра алады деп болжай аламыз. Сондықтан гидрослюдады қабатты құрылымы бар модификацияланған ион алмастырғыштар қолданылады. Бос комплексі бар кеуекті вермикулит ластанған су көздерінен металл иондарын комплекс түзуші катион ретінде осы бос орталыққа сорбциялайды деп болжанады.

Вермикулиттің ядроаралық қашықтығы арқылы коваленттіктен иондыққа дейінгі әртүрлі байланыс типтерін анықтауға болады. Күшті коваленттік байланыс SiO_4 және AlO_4 тетраэдрлерінде, сондай-ақ MgO_6 , AlO_6 және FeO_6 октаэдрлерінде байқалады. Бұл құрылымдардың арасында вермикулит қабаттарының құрылымын анықтайтын әлсіз иондық байланыстар түзіледі. Вермикулиттің қасиеттерін қабат аралық судың болуы шешуші рөл атқарады. Су молекулалары вермикулит қабаттарында оттегі атомдарымен сутектік басланыстар түзеді және ол вермикулиттің пластикалық және ион алмастырғыштық қасиетін көрсетеді. Октаэдрлік қабаттардағы Mg, Al және Fe катиондарының радиустарының айырмашылығы қабаттар арасындағы қашықтыққа және вермикулиттің гидрофильді/гидрофобты қасиеттеріне әсер етеді.

Ауыр металдармен ластанған ортада адсорбциялану қабілетін арттырады. Вермикулиттің кеуектілігін арттыру арқылы оның адсорбциялық қасиеттері жақсарады, бұл оны экологиялық тазарту, суды және топырақты ластанудан қорғау үшін тиімді материал ретінде пайдалануға мүмкіндік береді. Вермикулиттің құрылымындағы алюминий және магний иондарының бос белсенді орындары ауыр металдарды адсорбциялау үшін маңызды рөл атқарады. Бұл иондармен байланысқан ауыр металдар вермикулиттің бетінде тұрақты түрде ұсталып, қоршаған ортадан шығарылмайды. Сонымен қатар, вермикулиттің кеуектілігі мен адсорбциялық қасиеттері оны құрылыс материалдары, тыңайтқыштар, және агрономияда да қолдануға мүмкіндік береді.

Вермикулиттің құрылымы катиондардан тұратынын суреттен көруге болады (1-сурет). Катиондардың ішкі қабаты, әдетте саздың бетіне тікелей іргелес, әдетте қозғалмайтын қабат (Стерн қабаты), ал катиондар мен аниондардың диффузиялық кластері диффузиялық қабат деп аталады. Сыртқы қабатта негізгі ерітіндімен диффузиялық алмасу жүреді. Бекітілген қабаттағы адсорбаттар қоршаған судың бір немесе бірнеше молекулаларын жоғалтады және минерал пакетінің бетімен ішкі сфераның беткі кешені деп аталатын формада тікелей байланыс түзеді. Гидратталған қабықшаларын сақтайтын иондар электростатикалық күштердің әсерінен бетімен әрекеттеседі, сыртқы сфераның беттік кешендері ішкі және

сыртқы сфераның түзілген кешендері бірінші адсорбциялық позицияны алады, ал артық заряд диффузды қабатта катиондардың басым жиналуымен теңестіріледі. Ішкі сфера кешенінің минерал бетімен берік байланысуы сыртқы сфераның кешен түзілуіне қарағанда десорбцияның қайтымдылығы мен кинетикасына айқын әсер етеді. Сфераішілік кешендердің түзілуіне әсер етеді: иондық күш, электролит ерітіндісінің құрамы, бәсекелес катиондардың, күрделі тұзуші лигандтардың болуы, температура.

Әлсіз электростатикалық күштер арқылы саз минералдарының беткі кабаттарымен иондардың өзара әрекеттесуі сенімді емес және басқа катиондармен бәсекелес болған кезде ион алмасу ретінде көрінеді. Балшық бетіндегі протондар пакетаралық иондар жүзеге асыратын бұл механикалық реакцияға қатыспайды. Вермикулиттің экологиялық таза және тиімді адсорбент ретінде қолданылуы, оның құрылымдық ерекшеліктері мен химиялық қасиеттеріне байланысты. Бұл материалдың зерттеулері мен қолданулары экология, химия және материалтану салаларында маңызды болып табылады.

Қорытынды. Квантты-химиялық есептеулерді жүргізуде Gaussian W09 және графикалық көрінісін алу үшін GaussView 6.0 бағдарламаларын қолдануға болатындығы анықталды. Компьютерлік бағдарламалар арқылы вермикулиттің құрылымдық және графикалық моделін және оның құрамындағы атомдардың арасындағы байланыстардың ұзындығы туралы анықтамалар алдық. Алынған мәліметтер арқылы вермикулиттің қасиеті туралы болжам жасалынды. Негізгі ойларымыз минералдың құрылымдық формуласын салу, есептеу арқылы оның адсорбциялау қасиетін дәлелдеу. Вермикулит табиғи сорбент ретінде оның модификациялау арқылы оның сорбциялау қасиеті қалай өзгеретінін болжауға болады. Болашақта модификацияланған вермикулитті салып, есептеу көруге болады. Оның құрылымдық өзгерісін теориялық тұрғыда болжап, практикалық тұрғыда дәлелдеуге болады.

Әдебиеттер

Mooney R. W., Keenan L.A., Wood A.G. (2004). Adsorption of water vapor by montmorillonite. II. Effect of exchangeable ions and lattice swelling as measured by X-ray diffraction. *Journal of the American Chemical Society*. – V. 74, № 6. – P. 1371-1374.

Boek E.S., Coveney P.V., Skipper N.T. (2003). Monte Carlo molecular modeling studies of hydrated Li-, Na-, and K-smectites: Understanding the role of potassium as a clay swelling inhibitor. *Journal of the American Chemical Society*. – V. 117, № 50. – P. 12608-12617.

Liu X., Lu X., Wang R. (2008) Effects of layer-charge distribution on the thermodynamic and microscopic properties of Cs-smectite *Geochimica et Cosmochimica Acta*. – V. 72, № 7. – P. 1837-1847

Қазақстан Республикасының Экология және табиғи ресурстар министрлігі «ҚазГидромед» РМК (2024). Қазақстан Республикасының қоршаған ортасының жай-күйі туралы ақпараттық бюллетень. Ақпан.

Жанқұлов Т., Абдыхалыков С. (2015). Қазақстан Республикасының топырақтарының ластану жағдайлары туралы. Топырақтану және агрономия. – 65-71 б.

Abdul G., Dhanasekar, Sathees K., Sankaran (2021). Elimination of nickel (II) ions using various natural/modified clay minerals: A review. *Materials today: Proceedings*. Vol.37, Part2. – P.2033-2040. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.07.500> (in Eng.)

J. Yang, J. Nie, L. Bian, J. Zhang (2024). Clay minerals/sodium alginate/polyethylene hydrogel adsorbents control the selective adsorption and reduction of uranium: Experimental optimization and Monte

Carlo simulation study. // Journal of Hazardous Materials. Vol.468. – 133725. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2024.133725>

Қосжанова Г.Ж., Бектенов Н.А. (2024). Ауыр және сирек металдардың ионын сорбциялайтын вермикулит негізінде модификацияланған сорбенттерге қысқаша шолу. Абай атындағы ҚазҰПУ Хабаршысы, «Жаратылыстану-география ғылымдары» сериясы. №1(79). 163-169 беттер. <https://doi.org/10.51889/3005-6217.2024.79.1.015>

Sergey V., Churakov, Xiandong L. (2018). 3 – Quantum-chemical modelling of clay mineral surfaces and clay mineral-surface-adsorbate interactions. *Developments in Clay Science*. Vol.9. – P.49-87 <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-102432-4.00003-2>

Суханов Л.П. (2017). Кванттық-механика бойынша дәріс. Мәскеу физика-техникалық институт.

A. Tomberg. An introduction to Computational Chemistry using G09W and Avogadro software. Gaussian 09W Tutorial.

A.E. Frisch (1996-2009). Gaussian 09W Reference. Gaussian Inc. ISBN: 978-0-9727187-7-6

Giricheva N.I., Syrбу S.A., Belova E.A., Filipov I.A., Kiselev M.R. (2021). New supramolecular hydrogen-bonded liquid crystals based on 4-alkylbenzenesulfonic acids and 4-pyridyl 4'-alkylbenzoates: Quantum chemical modeling and mesomorphic properties. *Journal of Molecular Structure*. Vol.1244. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.130890>

Singh Y., Patel N.R., Patel S.K., Jadeja., Patel A.K., Patel N., Roy H., Kumar P., Butcher R.J., Jasinski J.P., Cortijo M., Herrero S. (2021). Non-covalent interactions governing the supramolecular assembly of copper (II) complexes with hydrazone-type ligand: Experimental and quantum chemical study. // *Polyhedron*. Vol.200. <https://doi.org/10.1016/j.poly.2021.115142>

Suzuki C., Yaita T., Suzuki S., Pacold J., Altman B.A., Minasian S.G., Tyliszczak T., Shuh D.K., Yoshida H., Osaka M. (2019). Evaluation of electronic state of Cs-adsorbed clay minerals by NEXAFS analysis using DFT calculations. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. Vol.127. – p.169-177. <https://doi.org/10.1016/j.jpcs.2018.11.011>

Қурманалиева М.К., Жанабаева Ж.Т. (2019). Сорбция ионов меди (II) из водных растворов на модифицированном вермикулите. *Вестник Науки и образования*. - №12 (66). – Часть 3 – S. 10-13

References

Mooney R.W., Keenan L.A., Wood A.G. (2004). Adsorption of water vapor by montmorillonite. II. Effect of exchangeable ions and lattice swelling as measured by X-ray diffraction. *Journal of the American Chemical Society*. – V. 74, № 6. – P. 1371-1374. (in Eng.)

Boek E.S., Coveney P.V., Skipper N.T. (2003). Monte Carlo molecular modeling studies of hydrated Li-, Na-, and K-smectites: Understanding the role of potassium as a clay swelling inhibitor. *Journal of the American Chemical Society*. – V. 117, № 50. – P. 12608-12617. (in Eng.)

Liu X., Lu X., Wang R. (2008) Effects of layer-charge distribution on the thermodynamic and microscopic properties of Cs-smectite. *Geochimica et Cosmochimica Acta*. – V. 72, № 7. – P. 1837-1847 (in Eng.) (2024).

Qazaqstan Respýblıkasynyń Ekologia jáne tabıǵı resýrstar ministrliǵı “Qazǵıdromet” RMK. [RSE “Kazhydromet” Ministry of Ecology and natural resources of the Republic of Kazakhstan]. Qazaqstan Respýblıkasynyń qorshaǵan ortasynyń jai-kúii týraly aqparattyq búleten. Aqpan. (in Kaz.)

T. Jalankýzov, S. Ábdıhalyqov. Qazaqstan Respýblıkasynyń topyraqtarynyń lastaný jáǵdary týraly. [On the state of soil pollution of the Republic of Kazakhstan]. Topyraqtaný jáne agrohımıa. – 2015. - B. 65-71. (In Kaz.)

Abdul G., Dhanasekar, Sathees K., Sankaran (2021). Elimination of nickel (II) ions using various natural/modified clay minerals: A review. *Materials today: Proceedings*. Vol.37, Part2. – P.2033-2040. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.07.500> (in Eng.)

J. Yang, J. Nie, L. Bian, J.Zhang (2024). Clay minerals/sodium alginate/polyethylene hydrogel adsorbents control the selective adsorption and reduction of uranium: Experimental optimization and Monte Carlo simulation study. *Journal of Hazardous Materials*. Vol.468. – 133725. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2024.133725> (in Eng.)

Qosjanova G.J., Bektenov N.A. (2024). Áýyr jáne sired metaldardıń ionyn sorbsıalıtın vermıkýlıt

negizinde modifikasialangan sorbentterge qysqasha sholý [A brief overview of modified sorbents based on vermiculite with Ion sorption of heavy and rare metals]. Abai atyndaǵy Qazupý Habarshysy, “jaratylystany-geografia gylymdary” seriasy. №1(79). 163-169 better. <https://doi.org/10.51889/3005-6217.2024.79.1.015> (in Kaz.)

Sergey V., Churakov, Xiandong L. (2018). 3 – Quantum-chemical modelling of clay mineral surfaces and clay mineral-surface-adsorbate interactions. *Developments in Clay Science*. Vol.9. – P.49-87 <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-102432-4.00003-2> (in Eng.)

L.P. Sýhanov. (2017). Kvanttyq mehanika boıynsha dáris [Lecture on quantum mechanics]. Máskeý fizika-tehnikalıq instıtúty. (in Kaz.)

A. Tomberg. An introduction to Computational Chemistry using G09W and Avogadro software. *Gaussian 09W Tutorial*. (in Eng.)

A.E. Frisch (1996-2009). *Gaussian 09W Reference*. Gaussian Inc. ISBN: 978-0-9727187-7-6 (in Eng.)

Giricheva N.I., Syrbu S.A., Belova E.A., Filipov I.A., Kiselev M.R. (2021). New supramolecular hydrogen-bonded liquid crystals based on 4-alkylbenzenesulfonic acids and 4-pyridyl 4'-alkylbenzoates: Quantum chemical modeling and mesomorphic properties. *Journal of Molecular Structure*. Vol.1244. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.130890> (in Eng.)

Singh Y., Patel N.R., Patel S.K., Jadeja., Patel A.K., Patel N., Roy H., Kumar P., Butcher R.J., Jasinski J.P., Cortijo M., Herrero S. (2021). Non-covalent interactions governing the supramolecular assembly of copper (II) complexes with hydrazone-type ligand: Experimental and quantum chemical study. *Polyhedron*. Vol.200. <https://doi.org/10.1016/j.poly.2021.115142> (in Eng.)

Suzuki C., Yaita T., Suzuki S., Pacold J., Altman B.A., Minasian S.G., Tyliczszak T., Shuh D.K., Yoshida H., Osaka M. (2019). Evaluation of electronic state of Cs-adsorbed clay minerals by NEXAFS analysis using DFT calculations. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. Vol.127. – p.169-177. <https://doi.org/10.1016/j.jpcs.2018.11.011> (in Eng.)

Kurmanaliev M.K., Zhanabaeva Zh.T. Sorbciya ionov medi(II) iz vodnyh rastvorov na modifitsirovannom vermiculite [Sorption of copper (II) ions from aqueous solutions on modified vermiculite]. *Vest. Nauki i obrazovaniya* -2019. №12 (66). – Chast' 3 – S. 10-13 (in Rus.)

CONTENTS

A.A. Anarbayev, B.N. Kabylbekova, J.E. Khusanov, G. M. Ormanova INVESTIGATION OF THE PROCESS OF OBTAINING A COMPLEX PHOSPHOHUMATE MINERAL FERTILIZER.....	5
G.Zh. Baisalova, A.A. Zhanybekova, A.B. Shukirbekova, B.B. Torsykbaeva, Sh.K. Utzhanova QUANTITATIVE DETERMINATION OF FLAVONOIDS IN ULMUS PUMILA LEAVES BY SPECTROPHOTOMETRIC METHOD.....	21
N. Bektenov, G. Koszhanova QUANTUM-CHEMICAL MODEL CALCULATION REVIEW OF VERMICULITE AND ITS BASED MODIFIED SORBENT.....	33
G.M. Zhusipnazarova, R. Reshmy, A.S. Darmenbayeva, Zh.B. Mukazhanova, G.B. Aubakirova PRODUCTION AND STUDY OF PROPERTIES OF BIOLOGICAL COATINGS BASED ON CELLULOSE OBTAINED FROM BARLEY AND FLAX STEMS.....	43
M. Ibrayeva, E. Sagindykova, Zh. Mukazhanova ISOLATION OF IRIDOIDS FROM <i>VERBASCUM MARSCHALLIANUM</i>	57
L.K. Kazhygeldiyeva, B.Kh. Mussabayeva, A.N. Sabitova, L.K. Orazzhanova, A.S. Seitkan DETERMINATION OF THE CHEMICAL COMPOSITION AND ANTIOXIDANT ACTIVITY OF FRUIT EXTRACTS FROM <i>HIPPOPHAE RHAMNOIDES</i> L. AND <i>CRATAEGUS SANGUINEA</i> L.	68
M.B. Kambatyrov, P.A. Abdurazova, U.B. Nazarbek, Y.B. Raiymbekov FTIR SPECTROSCOPIC STUDY OF HUMIC ACIDS PRECIPITATION.....	79
N.B. Kassenova, R. Sh. Erkasov, N.N. Nurmukhanbetova, S.K. Makhanova, G.K. Bekishova THE INVESTIGATION OF SPIN-CROSSOVER IN TETRANUCLEAR IRON (II) COMPLEXES BY MAGNETIC MEASUREMENTS.....	94
B.K. Massalimova, A.S. Darmenbayeva, Zh. Mukazhanova, K.A. Shorayeva, N.V. Ostafeychuk DEVELOPMENT AND STUDY OF CATALYSTS FOR DEHYDROGENATION OF SATURATED HYDROCARBONS TO OLEFINS.....	104

D.N. Makhayeva, Sh. Zhetesbayeva, G.S. Irmukhametova, Z.A. Kenessova PREPARATION AND CHARACTERIZATION OF POLYMER FILMS BASED ON IODINE COMPLEXED WITH POLY(2-ETHYL-2-OXAZOLINE).....	121
N. Merkhatuliy, S.B. Abeuova, S.K. Zhokizhanova, A. Sviderskiy, S.A. Kairoldin INCLUSION OF AZULENE INTO THE BACKBONE OF CONJUGATED OLIGOMERS: IMPROVEMENT OF PROTON SENSITIVITY AND ELECTRONIC ABSORPTION.....	133
A.N. Nurlybayeva, A.E. Tulegen, K.B. Bulekbayeva, D.A. Kulbayeva, G.K. Matniyazova DETERMINATION OF COAGULATION THRESHOLDS OF MOLYBDENUM-VANADIUM BLUE SOLS.....	144
E.T. Talgatov, A.A. Naizabaev, A.M. Tynyshbay, A.S. Auezkhanova, A.Z. Abilmagzhanov INVESTIGATION OF COMPLEXATION OF RUTHENIUM (III) IONS WITH POLYMERS.....	157
A.A. Tolepbergen, U. Amzeyeva, Ye. Shybyray, A. Baiseitova, J. Jenis PHYTOCHEMICAL PROFILE OF UNDERGROUND PART OF CICHORIUM INTUBYS L.	170
T.S. Khosnutdinova, A.O. Sapieva, N.A. Sultanova, Sh.A. Madieva DEVELOPMENT OF A METHOD FOR OBTAINING A FLAVONOID COMPLEX FROM THE AERIAL PART OF <i>FERULA SONGARICA</i> PALL. EX SPRENG. WITH ANTIOXIDANT ACTIVITY.....	183
D.Y. Shoganbek, S.A. Tungatarova, D.Yu. Murzin, T.S. Baizhumanova, M. Zhumabek DRY REFORMING OF METHANE ON Co-La-Al AND Co-Ce-Al CATALYSTS PREPARED BY THE SCS METHOD.....	195

МАЗМҰНЫ

А.А. Анарбаев, Б.Н. Кабылбекова, Ж.Е. Хусанов, Г.М. Орманова КҮРДЕЛІ ФОСФОГУМАТТЫ МИНЕРАЛДЫ ТЫҢАЙТҚЫШ АЛУ ПРОЦЕССИН ЗЕРТТЕУ.....	5
Г.Ж. Байсалова, А.А. Жаныбекова, А.Б. Шукирбекова, Б.Б. Торсыкбаева, Ш.К. Утжанова ULMUS PUMILA ЖАПЫРАҚТАРЫНДАҒЫ ФЛАВОНОИДТАР МӨЛШЕРІН СПЕКТРОФОТОМЕТРЛІК ӘДІСПЕН АНЫҚТАУ.....	21
Н. Бектенов, Г. Қосжанова ВЕРМИКУЛИТ ЖӘНЕ ОНЫҢ НЕГІЗІНДЕ МОДИФИКАЦИЯЛАНҒАН СОРБЕНТТІҢ КВАНТТЫ-ХИМИЯЛЫҚ МОДЕЛІН ЕСЕПТЕУГЕ ШОЛУ.....	33
Г.М. Жүсіпназарова, Р. Решми, А.С. Дарменбаева, Ж.Б. Мукажанова, Г.Б. Аубакирова. АРПА МЕН ЗЫҒЫР САБАҒЫНАН АЛЫНҒАН ЦЕЛЛЮЛОЗА НЕГІЗІНДЕГІ БИОЛОГИЯЛЫҚ ЖАБЫНДАРДЫҢ ДАЙЫНДАЛУЫ ЖӘНЕ ҚАСИЕТТЕРІН ЗЕРТТЕУ.....	43
М. Ибраева, Э. Сагиндыкова, Ж. Мукажанова VERBASCUM MARSCHALLIANUM-НАН ИРИДОИДТАРДЫ БӨЛУ.....	57
Л.К. Қажыгелдиева, Б.Х. Мұсабаева, А.Н. Сабитова, Л.К. Оразжанова, А.С. Сейткан. HIPPOPHAE RHAMNOIDES L. ЖӘНЕ CRATAEGUS SANGUINEA L. ӨСІМДІК ЖЕМІСТЕРІНІҢ ЭКСТРАКТТАРЫНЫҢ ХИМИЯЛЫҚ ҚҰРАМЫН ЖӘНЕ АНТИОКСИДАНТТЫҚ БЕЛСЕНДІЛІГІН АНЫҚТАУ.....	68
М.Б. Камбатыров, П.А. Абдуразова, У.Б. Назарбек, Е.Б. Райымбеков ГУМИН ҚЫШҚЫЛДАРЫН ТҮНДЫРУ ҮРДІСІН ИҚ-СПЕКТРОСКОПИЯЛЫҚ ЗЕРТТЕУ.....	79
Н.Б. Касенова, Р.Ш. Еркасов, Н.Н. Нурмуханбетова, С.К. Маханова, Г.К. Бекишова МАГНИТТІК ӨЛШЕУЛЕР ӘДІСІМЕН ТЕМІРДІҢ (II) ТӨРТЯДРОЛЫ КЕШЕНДЕРІНДЕ СПИН-КРОССОВЕРДІ ЗЕРТТЕУ.....	94

Б.К. Масалимова, А.С. Дарменбаева, Ж.Б. Мукажанова, К.А. Шораева, Н.В. Остафейчук КӨМІРСУТЕКТЕРДІ ОЛЕФИНДЕРГЕ ДЕГИДРЛЕУ ҮШІН КАТАЛИЗАТОРЛАРДЫ ҚҰРУ ЖӘНЕ ЗЕРТТЕУ.....	104
Д.Н. Махаева, Ш. Жетесбаева, Ғ.С. Ирмухаметова, З.А. Кенесова ЙОДТЫҢ ПОЛИ(2-ЭТИЛ-2-ОКСАЗОЛИНМЕН) КЕШЕНІ НЕГІЗІНДЕ ПОЛИМЕРЛІ ҮЛДІРЛЕРДІ АЛУ ЖӘНЕ СИПАТТАУ.....	121
Н. Мерхатұлы, С.Б. Абеуова, С.К. Жокижанова, А. Свидерский, С.А. Қайролдин ҚОСАРЛАНҒАН ОЛИГОМЕРЛЕР НЕГІЗІНЕ АЗУЛЕНДІЕНГІЗУ: ПРОТОНҒА СЕЗІМТАЛДЫҚ ПЕН ЭЛЕКТРОНДЫҚ СІңІРУДІ ЖАҚСARTU.....	133
А.Н. Нұрлыбаева, А.Е. Төлеген, Қ.Б. Бөлекбаева, Д.А. Құлбаева, Ғ.Қ. Матниязова МОЛИБДЕН-ВАНАДИЙ КӨК ҚОСЫЛЫСЫНЫҢ ҚОЙЫЛУ ШЕКТЕРІН АНЫҚТАУ.....	144
Э.Т. Талғатов, А.А. Найзабаев, А.М. Тынышбай, А.С. Ауезханова, А.З. Абильмағжанов РУТЕНИЙ (III) ИОНДАРЫМЕН ПОЛИМЕРЛЕРДІҢ КЕШЕН ТҮЗУІН ЗЕРТТЕУ.....	157
А.А. Төлепберген, Ұ. Әмзеева, Е. Шыбырай, А. Байсеитова, Ж. Жеңіс <i>CICHORIUM INTYBUS</i> L. ӨСІМДІГІНІҢ ЖЕР АСТЫ БӨЛІГІНІҢ ФИТОХИМИЯЛЫҚ ПРОФИЛІ.....	170
Т.С. Хоснутдинова, А.О. Сәпиева, Н.А. Сұлтанова, Ш.А. Мадиева АНТИОКСИДАНТТЫҚ БЕЛСЕНДІЛІККЕ ИЕ <i>FERULA SONGARICA</i> PALL. EX SPRENG. ЖЕР ҮСТІ БӨЛІГІНЕН ФЛАВОНОИДТЫ КЕШЕНДІ АЛУ ӘДІСІН ӨЗІРЛЕУ.....	183
Д.Е. Шоғанбек, С.А. Тунгатарова, Д.Ю. Мурзин, Т.С. Байжуманова, М. Жұмабек ЖТС ӘДІСІМЕН ДАЙЫНДАЛҒАН Co-La-Al ЖӘНЕ Co-Ce-Al КАТАЛИЗАТОРЛАРЫНДА МЕТАНДЫ ҚҰРҒАҚ РИФОРМАЛАУ.....	194

СОДЕРЖАНИЕ

А.А. Анарбаев, Б.Н. Кабылбекова, Ж.Е. Хусанов, Г.М. Орманова ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ КОМПЛЕКСНОГО ФОСФОГУМАТНОГО МИНЕРАЛЬНОГО УДОБРЕНИЯ.....	5
Г.Ж. Байсалова, А.А. Жаныбекова, А.Б. Шукирбекова, Б.Б. Торсыкбаева, Ш.К. Утжанова КОЛИЧЕСТВЕННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ФЛАВОНОИДОВ В ЛИСТЬЯХ ULMUS PUMILA СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКИМ МЕТОДОМ.....	21
Н. Бектенов, Г. Косжанова ОБЗОР КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ РАСЧЕТА ВЕРМИКУЛИТА И МОДИФИЦИРОВАННОГО СОРБЕНТА НА ЕГО ОСНОВЕ.....	33
Г.М. Жусипназарова, Р. Решми, А.С. Дарменбаева, Ж.Б. Мукажанова, Г.Б. Аубакирова СИНТЕЗ И ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ БИОЛОГИЧЕСКИХ ПОКРЫТИЙ НА ОСНОВЕ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ, ПОЛУЧЕННОЙ ИЗ СТЕБЕЛЕЙ ЯЧМЕНЯ И ЛЬНА.....	43
М. Ибраева, Э. Сагиндыкова, Ж. Мукажанова ВЫДЕЛЕНИЕ ИРИДОИДОВ ИЗ VERBASCUM MARSCHALLIANUM.....	57
Л.К. Кажыгелдиева, Б.Х. Мусабаева, А.Н. Сабитова, Л.К. Оразжанова, А.С. Сейткан ОПРЕДЕЛЕНИЕ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА И АНТИОКСИДАНТНОЙ АКТИВНОСТИ ЭКСТРАКТОВ ПЛОДОВ РАСТЕНИЙ HIPPOPHAE RHAMNOIDES L. И CRATAEGUS SANGUINEA L	68
М.Б. Камбатыров, П.А. Абдуразова, У.Б. Назарбек, Е.Б. Райымбеков ИК-СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ОСАЖДЕНИЯ ГУМИНОВЫХ КИСЛОТ.....	79
Н.Б. Касенова, Р.Ш. Еркасов, Н.Н. Нурмуханбетова, С.К. Маханова, Г.К. Бекишова ИССЛЕДОВАНИЕ СПИН-КРОССОВЕРА В ТЕТРАЯДЕРНЫХ КОМПЛЕКСАХ ЖЕЛЕЗА (II) МЕТОДОМ МАГНИТНЫХ ИЗМЕРЕНИЙ.....	94

Б.К. Масалимова, А.С. Дарменбаева, Ж.Б. Мукажанова, К.А. Шораева, Н.В. Остафейчук РАЗРАБОТКА И ИЗУЧЕНИЕ КАТАЛИЗАТОРОВ ДЛЯ ДЕГИДРИРОВАНИЯ УГЛЕВОДОРОДОВ ДО ОЛЕФИНОВ.....	104
Д.Н. Махаева, Ш. Жетесбаева, Г.С. Ирмухаметова, З.А. Кенесова ПОЛУЧЕНИЕ И ХАРАКТЕРИСТИКА ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНОК НА ОСНОВЕ КОМПЛЕКСА ЙОДА С ПОЛИ (2-ЭТИЛ-2-ОКСАЗОЛИНОМ).....	121
Н. Мерхатулы, С.Б. Абеуова, С.К. Жокижанова, А. Свидерский, С.А. Кайролдин ВВЕДЕНИЕ АЗУЛЕНА В ОСНОВУ СОПРЯЖЕННЫХ ОЛИГОМЕРОВ: УЛУЧШЕНИЕ ПРОТОННОЙ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ И ЭЛЕКТРОННОГО ПОГЛОЩЕНИЯ.....	133
А.Н. Нурлыбаева, А.Е. Толеген, К.Б. Боекбаева, Д.А. Кульбаева, Г.К. Матниязова ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОРОГОВ КОАГУЛЯЦИИ ЗОЛЕЙ МОЛИБДЕН-ВАНАДИЕВЫХ СИНЕЙ.....	144
Э.Т. Талгатов, А.А. Найзабаев, А.М. Тынышбай, А.С. Аuezханова, А.З. Абильмагжанов ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ ИОНОВ РУТЕНИЯ (III) С ПОЛИМЕРАМИ.....	157
А.А. Толепберген, У. Амзеева, Е. Шыбырай, А. Байсеитова, Ж. Женис ФИТОХИМИЧЕСКИЙ ПРОФИЛЬ ПОДЗЕМНОЙ ЧАСТИ CICHORIUM INTYBUS L.	170
Т.С. Хоснутдинова, А.О. Сапиева, Н.А. Султанова, Ш.А. Мадиева РАЗРАБОТКА СПОСОБА ПОЛУЧЕНИЯ ФЛАВОНОИДНОГО КОМПЛЕКСА ИЗ НАДЗЕМНОЙ МАССЫ FERULA SONGARICA PALL. EX SPRENG., ОБЛАДАЮЩЕГО АНТИОКСИДАНТНОЙ АКТИВНОСТЬЮ.....	183
Д.Е. Шоганбек, С.А. Тунгатарова, Д.Ю. Мурзин, Т.С. Байжуманова, М. Жумабек СУХОЙ РИФОРМИНГ МЕТАНА НА КАТАЛИЗАТОРАХ CO-LA-AL И CO-SE-AL ПРИГОТОВЛЕННЫХ МЕТОДОМ СВС.....	194

Publication Ethics and Publication Malpractice in the journals of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan

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 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 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 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 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.

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)

Директор отдела издания научных журналов НАН РК *А. Ботанқызы*

Редакторы: *Д.С. Аленов, Ж.Ш. Әден*

Верстка на компьютере *Г.Д. Жадырановой*

Подписано в печать 26.03.2025.

Формат 60x88¹/₈. Бумага офсетная. Печать – ризограф.

13,5 п.л. Заказ 1.

*Национальная академия наук РК
050010, Алматы, ул. Шевченко, 28, т. 272-13-19*