**ЖАҢАДАН ПАЙДА БОЛҒАН ЕРІТКІШТЕР АРҚЫЛЫ БИОДИЗЕЛЬДІҢ ҚҰРАМЫН ГЛИЦЕРОЛДАН ТАЗАРТУ ПРОЦЕСІН МОЛЕКУЛАЛЫҚ ТЕОРЕТИКАЛЫҚ ДЕҢГЕЙДЕ ЗЕРТТЕУ**

Сайлау Ж.А1

**Ғылыми жетекші:** PhD, Тоштай Қ1

*1Әл-Фараби атындағы ҚазҰУ, Алматы, Қазақстан*

Қазіргі таңда, жаһандық жасыл химия трендіне байланысты еріткіштердің де жаңа түрлері пайда болуда. Дәстүрлі еріткіштерге этанол, метанол сияқты органикалық заттар жатса, қазіргі таңда екі түрлі еріткіштер тобы пайда болды. Олар “Ionic Liquids (қазақша иондық сұйықтықтар)” және де “Deep Eutectic Solvents (қысқаша DES, қазақша эвтектикалық еріткіштер) ” деп аталады. Ең қызығы эвтектикалық еріткіштер биодизельдің құрамын қажетсіз мөлшердегі артық глицеролды тазартуға, экстракция жасауға көмектеседі. Халықаралық стандарттарға сәйкес, глицерол биодизельдің құрамындағы таза емес зат болып саналады, және оны экстракциялау өте маңызды. Көптеген литературалық зерттеулерге сүйенсек, эвтектикалық еріткіштер арқылы биодизельден глицеролды экстракциялап алған. Халықаралық стандарттарға сәйкес, глицерол биодизельдің құрамындағы таза емес зат болып саналады, және оны экстракциялау өте маңызды [1, 2].

Осы орайда, бұл ғылыми жұмыста біріншіден біздер эвтетикалық еріткіштердің интермолекулалық байланысын және де түзілу механизмін зерттейміз, осыдан кейін барып пайда болған биодизель өнімінің құрамындағы керексіз глицерол қалдығын эвтектикалық еріткіш арқылы эксртакциялау процесін молекулалық деңгейде зерттейміз. Осыған орай біздер B3LYP, 6-311 + G(d,p) DFT деген есептік зерттеу методы менен қатар молекулалық динамикалық симуляциясын жасаймыз. Молекулалық моделирование және де симуляция арқылы оптимизацияланған структураларды, термохимиялық энергияларды, молекулалық электростатикалық картаны, орбитальдарды, радиалды таралу функциясын, және де сутектік байланыс санын анықтайтын боламыз.

**Пайдаланылған әдебиеттер:**

1. Zhao, H., & Baker, G. (2012). Ionic Liquids and Deep Eutectic Solvents for Biodiesel synthesis: a review. *Journal of Chemical Technology & Biotechnology*, 3-10.

2. Suthar, K., Dwivedi, A., Joshipure, M. (2019). A review on separation and purification techniques for biodiesel production with special emphasis on Jatropha oil as a feedstock. *Asia-Pacific journal of Chemical Engineering*, *14*(5), 1-10.