

The largest contribution of conventional hydrogen bonds, as well as carbon-hydrogen and π -alkyl bonding, was shown by analyzing the interactions of the studied compounds with the binding site of the dihydrofolate reductase enzyme.

Overall, Lup-17 and Lup-18 ligands were selected as the most promising dihydrofolate reductase inhibitors by molecular docking. These compounds can be recommended for further study of their pharmacological potential and toxicity.

References

1. Nurkenov O.A., Nurmaganbetov Z.S., Fazylov S.D., Satpaeva Z. B., Turdybekov K. M., Seilkhanov T. M., Talipov S. A. Synthesis, Structure, and Properties of New Lupinine O-Acyl Derivatives // Chemistry of Natural Compounds. – 2019. – Т. 55, № 3. – С. 506-508.
2. Nurmaganbetov Z.S., Fazylov S.D., Turdybekov K.M., Nurkenov O.A., Turdybekov D. M., Mukusheva G. K., Minayeva Y. V., Khabdolda G. Synthesis and Structure of 4-Substituted (1S,9aR)-1- (1,2,3-triazol-1-yl)methyl octahydro-1H-quinolysines of Lupinine // Bulletin of the University of Karaganda-Chemistry. – 2022. № 106. – С. 12-22.
3. Nurmaganbetov Z.S., Savelyev V.A., Gatilov Y.V., Nurkenov O.A., Seidakhmetova R. B., Shulgau Z. T., Mukusheva G. K., Fazylov S. D., Shults E. E. Synthesis and analgesic activity of 1- (1,2,3-triazol-1-yl)methyl quinolizines based on the alkaloid lupinine // Chemistry of Heterocyclic Compounds. – 2021. – Т. 57, № 9. – С. 911-919.
4. AutoDock4 and AutoDockTools4: Automated docking with selective receptor flexibility / G. M. Morris, R. Huey, W. Lindstrom et al. // J. Comput. Chem. - 2009. –Vol. 30. –P.2785-2791.

СОРБЦИОННОЕ РАЗДЕЛЕНИЕ ВОЛЬФРАМА И МОЛИБДЕНА

Рашит Д.Р., Исмаилова А.Г.

Казахский Национальный Университет имени аль-Фараби

Rashit.dilyara@gmail.com

Молибден и вольфрам используются как легирующая добавка в жаропрочных сплавах, контактный элемент в высокоточных приборах, чувствительный элемент в датчиках. Наноразмерные частицы оксида молибдена пользуются большим спросом в медицине: как носитель лекарственных средств, в составе препаратов при дефиците сульфат-оксидазы, он также является составной частью антибактериальных покрытий, обладающих высокой активностью. Покрытия, полученные из оксида молибдена (VI), необходимы для изготовления фильтров, в качестве газовых датчиков двойного оксида азота, для создания электрохромных и фотохромных

дисплеев. Благодаря высокой электропроводности нанопорошков молибдена, позволяет использовать их в электронных устройствах [1-5].

Вольфрам и молибден – рассеянно распространены по земной коре, их получают при комплексной переработке медных, молибденовых и полиметаллических руд на различных технологических стадиях. В Казахстане имеется около пятнадцати месторождений тугоплавких металлов [6-9]. В настоящее время рений, молибден и вольфрам входят в число важных промышленных редких металлов, необходимых для современных технологий. Несмотря на то, что производство этих металлов в промышленно развитых странах постоянно растет, основной задачей проблем молибдена и вольфрама остается необходимость разработки эффективного метода получения металла высокой чистоты [10-17]. При разделении данных элементов методом экстракции используется много экстрагента, который с экологической точки зрения токсичен для окружающей среды [18]. В результате чего, кроме вопроса разделения металлов необходимо будет решить задачу по утилизации токсичных отходов. Для разделения металлов используется и электрохимический метод, но в производственных масштабах использование сорбционного метода является экономически выгодным решением. В последнее время преобладают сорбционные методы, причем вместо природных сорбентов предпочтение отдается синтетическим смолам. Синтетические смолы пригодны к многократному использованию и не теряют своих свойств даже после нескольких стадий сорбции. Это повышает интерес к созданию новых эффективных сорбентов, используемых в анализе и технологии извлечения металлов. Проблема разделения молибдена и вольфрама друг от друга еще не решена, поскольку они схожи по физико-химическим параметрам. Кроме того, в водном растворе они образуют в смешанный полиядерный комплекс, что препятствует разделению металлов. По данной причине необходимо определить эффективный сорбент, оптимальные условия для разделения молибдена и вольфрама.

В работе были использованы сорбенты ЭДЭ-10П, Amberjet 4400Cl, AU-3, AU-5, AU-7 и определены оптимальные параметры сорбции металлов в динамическом и статическом режиме. После определения эффективных параметров сорбции по отдельности для каждого металла, были проведены эксперименты по разделению при их совместном присутствии в растворе. В соответствии с данными по соотношению концентраций металлов в составе: руды, промышленных растворов, выбраны соотношения для приготовления модельных растворов и проведены исследования по определению оптимальных условий. В результате чего выяснены наиболее эффективное соотношение при котором эффективность разделения металлов принимает наибольшее значение. Проведены анализы структуры сорбента до и после сорбции методом FT/IR 4700 и на сканирующем электронном микроскопе Hitachi TM4000Plus, а для определения концентрации металлов были использованы приборы ICPMS, LEKI SS CF 1207 UV [19].

Литература

1. Abdullaev M.U. ugli, Lee S., Kim T.-W., Kim C.-U., Tungsten Oxide-Modified SSZ-13 Zeolite as an Efficient Catalyst for Ethylene-To-Propylene Reaction // *Catalysts*. 11 (2021) 553. <https://doi.org/10.3390/catal11050553>
2. Koohsaryan E., Anbia M., Heydar K.T., Mo-modified hierarchical FAU zeolite: A catalyst-adsorbent for oxidative desulfurization of fuel oil // *J. Solid State Chem.* 312 (2022) 123218. <https://doi.org/10.1016/j.jssc.2022.123218>
3. Zhang Y., Cui Y., Sun M., Wang T., Liu T., Dai X., Zou P., Zhao Y., Wang X., Wang Y., Zhou M., Su G., Wu C., Yin H., Rao H., Lu Z., Deep learning-assisted smartphone-based molecularly imprinted electrochemiluminescence detection sensing platform: Portable device and visual monitoring furosemide // *Biosens. Bioelectron.* 209 (2022) 114262. <https://doi.org/10.1016/j.bios.2022.114262>
4. Fu J., Xu Q., Low J., Jiang C., Yu J., Ultrathin 2D/2D WO₃/g-C₃N₄ step-scheme H₂-production photocatalyst // *Appl. Catal. B Environ.* 243 (2019) 556–565. <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2018.11.011>
5. Huang Z., Yang Z., Hussain M.Z., Jia Q., Zhu Y., Xia Y., Bimetallic Fe-Mo sulfide/carbon nanocomposites derived from phosphomolybdic acid encapsulated MOF for efficient hydrogen generation, *J. Mater. Sci. Technol.* 84 (2021) 76–85. <https://doi.org/10.1016/j.jmst.2020.12.057>
6. QIN, Thematic Articles “Porphyry Cu-Au-Mo deposits in Tibet and Kazakhstan,” *Resour. Geol.* 62 (2012) 1–3. <https://doi.org/10.1111/j.1751-3928.2011.00183.x>
7. M. CAO, G. LI, K. QIN, E.Y. SEITMURATOVA, Y. LIU, Major and Trace Element Characteristics of Apatites in Granitoids from Central Kazakhstan: Implications for Petrogenesis and Mineralization, *Resour. Geol.* 62 (2012) 63–83. <https://doi.org/10.1111/j.1751-3928.2011.00180.x>
8. Werner E.B., A.B.T., Sinclair, W.D., and Amey, International strategic mineral issues summary report—Tungsten (ver. 1.1, November 2014): U.S. Geological Survey Circular, 930 (2014) 74.
9. Аяган Б.Г., ed., Вольфрамовые руды, in: Казахстан. Национальная Энциклопедия., Казак энциклопедиясы, Алматы, 2004: p. 513.
10. Baldina A.S., Titova S.M., Skripchenko S.Y., Skachkov G.A., Tungsten sorption by anion-exchange resin purolite A830, in: 2022: p. 050004. <https://doi.org/10.1063/5.0089754>
11. Guo F., Xi X., Ma L., Nie Z., Novel Styrene-Based Polyamine Sorbent for Efficient Selective Separation of Molybdenum, *ACS Omega*. 7 (2022) 18229–18237. <https://doi.org/10.1021/acsomega.1c06257>
12. Zhang J., V.S. Coker, J.F.W. Mosselmans, S. Shaw, Adsorption of octahedral mono-molybdate and poly-molybdate onto hematite: A multi-technique approach, *J. Hazard. Mater.* 431 (2022) 128564. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2022.128564>
13. Batueva T., Scherban M., Kondrashova N., Chekanova L.G., Sorption of rhenium (VII) and molybdenum (VI) by modified mesoporous silicas, *Sep. Sci. Technol.* 57 (2022) 532–541. <https://doi.org/10.1080/01496395.2021.1921801>

14. Guo F., Xi X., Ma L., Nie Z., Nie Z., Highly efficient sorption of molybdenum from tungstate solution with modified D301 resin, RSC Adv. 11 (2021) 29939–29947. <https://doi.org/10.1039/D1RA04458C>
15. Chappell M., LeMonte J., McGrath C., Karna R., Styles R., Miller C., Miller L., Waites M., Middleton M., Price C., Chappell C., Dozier H., Abraham A., Henslee A., Strelzoff A., Predicting Langmuir model parameters for tungsten adsorption in heterogeneous soils using compositional signatures, Geoderma. 422 (2022) 115924. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2022.115924>
16. Guo F., Xi X., Ma L., Nie Z., Property and mechanism on sorption of molybdenum from tungstate solution with a porous amine resin, J. Clean. Prod. 335 (2022) 130304. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2021.130304>
17. Hamza M.F., K.A.M. Salih, Zhou K., Wei Y., Abu Khoziem H.A., Alotaibi S.H., Guibal E., Effect of bi-functionalization of algal/polyethyleneimine composite beads on the enhancement of tungstate sorption: Application to metal recovery from ore leachate, Sep. Purif. Technol. 290 (2022) 120893. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2022.120893>
18. Аканова Г.Ж., Исмаилова Д.Х., Камысбаев А.Г., Сирек жер металдарын бөліп алу тәсілдері, Вестник КазНИТУ. 141 (2020) 695–700.
19. Джекшембекызы А., Исмаилова А.Г., Сравнительный анализ характеристик фотометрического определения молибдена, Вестник КБТУ. (2019) 31–38.

ПАРАМАГНЕТИЗМ И ДИАМАГНЕТИЗМ СОЕДИНЕНИЙ SrRECuSe_3 ($\text{RE} = \text{Sm, Gd, Tb, Ho, Er, Tm, Yb, Lu, Y}$) В ИНТЕРВАЛЕ 4-300 К

Русейкина А.В.^a, Гармонов А.А.^a, Великанов Д.А.^b, Остапчук Е.А.^a,
Кислицина А.А.^a, Алексеева Н.А.^a

^aТюменский государственный университет

^bИнститут физики им. Л.В. Киренского СО РАН

Снятые при комнатной температуре зависимости магнитных моментов образцов SrLnCuSe_3 от величины магнитного поля линейны (Рис. 1,2). Они отличаются только величиной и знаком наклона. Для соединений с $\text{Ln} = \text{Y, Lu}$ наклон отрицательный и небольшой, что говорит об их диамагнетизме. Молярная восприимчивость χ , рассчитанная из этих зависимостей равна $-4.2 \cdot 10^{-4}$ и $-4.9 \cdot 10^{-4} \text{ emu mol}^{-1}$ соответственно. Для соединений с $\text{Ln} = \text{Sm, Gd, Tb, Ho, Er, Tm, Yb}$ наклон графиков положительный и намного больший. Это значит, что при комнатной температуре они парамагнитны. Их параметры, рассчитанные по этим графикам, приведены в Таблице 1 с индексом 296 К. Здесь же даны значения констант Кюри C и соответствующих им эффективных магнитных моментов μ , рассчитанные в модели свободных ионов Ln^{3+} . Соответствие экспериментальных данных с расчётными хорошее и удовлетворительное (за исключением SrSmCuSe_3 , для которого C и μ завышены в 2,2 и 1,5 раза соответственно).