

## II INTERNATIONAL SCIENTIFIC CONFERENCE ON CHEMICAL SCIENCES

*SPECIAL ISSUE OF THE*

**Nature & Science**

*International Scientific Journal*

## KİMYA ELMLƏRİ ÜZRƏ II BEYNƏLXALQ ELMİ KONFRANS



**II INTERNATIONAL SCIENTIFIC CONFERENCE  
ON CHEMICAL SCIENCES**

*SPECIAL ISSUE OF THE*  
**Nature & Science**  
*International Scientific Journal*

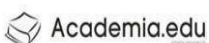
<https://doi.org/10.36719/2707-1146/II/BK/KEBK/NS/2026>

**KİMYA ELMLƏRİ ÜZRƏ  
II BEYNƏLXALQ ELMİ KONFRANS**

**Nature & Science**  
Beynəlxalq Elmi Jurnalının  
*XÜSUSİ BURAXILIŞI*

**17 september 2026**

## Beynəlxalq İndekslər / International Indexing



© The Author(s) 2026. This is an open access journal under the CC BY-NC 4.0 license.

[chemistry.bek@gmail.com](mailto:chemistry.bek@gmail.com)

[info@aem.az](mailto:info@aem.az)

[aem.az/en](http://aem.az/en)

## **TƏŞKİLAT KOMİTƏSİ**

### **Sədr**

**Accos. Prof. Dr. Dünya BABANLI**, Azərbaycan Dövlət Neft və Sənaye  
Universiteti / Azərbaycan

### **Sədr müavirləri**

**Prof. Dr. Vaqif FƏRZƏLİYEV**, Kimya İnstitutu / Azərbaycan  
**Prof. Dr. Georghe DUCA**, Moldova Elmlər Akademiyası / Moldova

### **Məsul katib**

**Dr. Rəna XANKİŞİYEVƏ**, Fizika İnstitutu / Azərbaycan

### **Üzvlər**

**Prof. Dr. Nazim MURADOV**, Mərkəzi Florida Universiteti / ABŞ  
**Prof. Dr. Vaqif ABBASOV**, ARETN Akademik Y. H. Məmmədəliyev adına  
Neft-Kimya Prosesləri İnstitutu / Azərbaycan  
**Prof. Dr. Viktor XRUSTALYOV**, Rusiya Xalqlar Dostluğu Universiteti –  
RUDN Universiteti / Rusiya  
**Prof. Dr. Rinat İSKAKOV**, Satbayev Universiteti / Qazaxıstan  
**Prof. Dr. İbrahim MƏMMƏDOV**, Bakı Dövlət Universiteti / Azərbaycan  
**Prof. Dr. Əli ZALOV**, Azərbaycan Dövlət Pedaqoji Universiteti /  
Azərbaycan  
**Assoc. Prof. Dr. Büşra BİLAL**, Ali Cinnah Universiteti / Pakistan  
**Dr. Baxtiyor QANİYEV**, Buxara Dövlət Universiteti / Özbəkistan

## **THE ORGANIZING COMMITTEE**

### **Chairman**

**Accos. Prof. Dr. Dunya BABANLI**, Azerbaijan State Oil and Industry University / Azerbaijan

### **Vice-Chairmen**

**Prof. Dr. Vagif FARZALIYEV**, Institute of Chemistry / Azerbaijan  
**Prof. Dr. Georghe DUCA**, Academy of Sciences of Moldova / Moldova

### **Executive Secretary**

**Dr. Rana KHANKISHIYEVA**, Institute of Physics / Azerbaijan

### **Members**

**Prof. Dr. Nazim MURADOV**, University of Central Florida / USA  
**Prof. Dr. Vagif ABBASOV**, MSERA Academician Y. H. Mammadaliyev Institute of Petrochemical Processes / Azerbaijan  
**Prof. Dr. Victor KHRUSTALEV**, Peoples' Friendship University of Russia – RUDN University / Russia  
**Prof. Dr. Rinat ISKAKOV**, Satbayev University / Kazakhstan  
**Prof. Dr. Ibrahim MAMMADOV**, Baku State University / Azerbaijan  
**Prof. Dr. Ali ZALOV**, Azerbaijan State Pedagogical University / Azerbaijan  
**Assoc. Prof. Dr. Bushra BILAL**, Ali Jinnah University / Pakistan  
**Dr. Bakhtiyor GANIYEV**, Bukhara State University / Uzbekistan

# Synthesis, Characterization, and Antioxidant Evaluation of Mixed-Ligand Copper(II) Complexes Based on Salicylaldehyde 4-(3-Methoxyphenyl) thiosemicarbazone and Sulfonamide Derivatives

Aliona Cotovaia<sup>1\*</sup> , Victor Tsapkov<sup>1</sup> ,  
Aurelian Gulea<sup>2</sup> 

**Keywords:** *thiosemicarbazone, copper(II) complexes, sulfonamides, antioxidant activity, ABTS<sup>•+</sup> cation radicals*

**Açar sözlər:** *tiosemikarbazon, mis(II) kompleksləri, sulfonamidlər, antioksidant aktivlik, ABTS<sup>•+</sup> kation radikalları*

Oxidative stress plays a crucial role in the development and progression of numerous pathological conditions, including inflammation, neurodegenerative disorders, cardiovascular diseases, and cancer. Therefore, the search for new antioxidant agents capable of effectively neutralizing reactive oxygen species remains an important research area. Sulfonamides represent a versatile class of biologically active compounds with a wide range of pharmacological properties, including antioxidant, antimicrobial, and anti-inflammatory effects.

---

<sup>1</sup>Institute of Chemistry, Moldova State University, PhD in Chemistry, Chisinau, Moldova

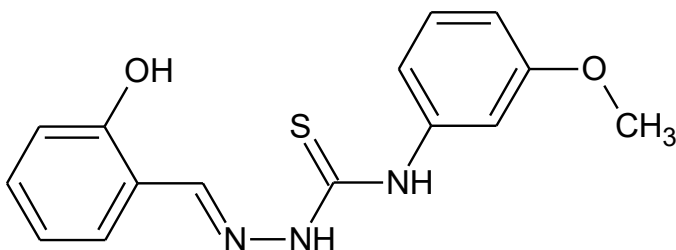
<sup>2</sup>Institute of Chemistry, Moldova State University, Academician, Professor in Chemistry, Chisinau, Moldova

\*Corresponding author. E-mail: [cotovaia@gmail.com](mailto:cotovaia@gmail.com)

Coordination of sulfonamide derivatives with transition metals, particularly copper(II), provides an opportunity to obtain new metal-based compounds with enhanced biological activity due to synergistic interactions between the metal center and organic ligands. Mixed-ligand Cu(II) complexes containing sulfonamide derivatives and additional *N*-donor ligands are of particular interest as potential antioxidant agents, since their structural diversity allows modulation of electronic properties and biological performance.

This study focuses on the synthesis and antioxidant evaluation of novel mixed-ligand Cu(II) complexes incorporating sulfonamide-based ligands, with the aim of exploring their potential as effective antioxidant compounds.

Mixed-ligand Cu(II) complexes were synthesized through the reaction of copper(II) acetate with salicylaldehyde 4-(3-methoxyphenyl)thiosemicarbazone and the corresponding sulfonamide derivatives (Streptocide (Str), Etazol (Etz), Sulfacetamide (Sfc), Sulfadimidine (Sfd), and Norsulfazole (Nor)) in ethanol using a molar ratio of 1:1:1.



**Figure 1**  
*The structure of  $H_2L$*

The obtained complexes were characterized by a combination of physicochemical techniques to confirm their composition: Cu(Str)L, Cu(Etz)L, Cu(Sfc)L, Cu(Sfd)L, Cu(Nor)L.

The antioxidant activity was evaluated using the ABTS<sup>•+</sup> radical cation scavenging assay, with Trolox, a clinically used antioxidant, employed as the reference standard for comparison.

The results demonstrated that the antioxidant activity of the Cu(II) complexes depends on the sulfonamide moiety present in their structures, allowing the following order of activity to be established: Streptocide > Etazol  $\approx$  Sulfacetamide  $\approx$  Sulfadimidine > Norsulfazole. Among the investigated compounds, the Cu(II) complex exhibited the highest antioxidant activity, with an IC<sub>50</sub> value of 27.02  $\mu$ M, surpassing that of Trolox, which was used as the reference antioxidant.

This work was fulfilled with the financial support of the subprogram 010602 of the institutional project.

## $\alpha$ -aminyag turşusunun şiff əsası ilə nikel(II) kompleksinin alınması və quruluşu

Sevinc Qarayeva 

**Açar sözlər:** şiff əsasları,  $\alpha$ -aminyag turşusu, salisil aldehydi, kompleks birləşmələr, nikel kompleksləri

**Keywords:** schiff bases,  $\alpha$ -amino fatty acid, salicyl aldehyde, complex compounds, nickel complexes

Bu tədqiqat işində amin turşularının salisil aldehydi ilə reaksiyasından alınmış şiff əsasları əsasında keçid metallarının kompleks duzları sintez edilmişdir. Şiff əsası almaq üçün  $\alpha$ -aminyag turşusu və salisil aldehydi, kompleks duzun alınmasında Ni duzlarından istifadə olunmuşdur. Kompleks duzların tərkibinin araşdırılmasında element analizi, İQ-elektron spektroskopiya və termoqravimetriya üsullarından istifadə olunmuşdur.

Amin turşularının və onların törəmələrinin keçid metalları ilə kompleks birləşmələri kimyanın müxtəlif sahələrində tətbiq edilmişdir (Beck, 2009; Diane et al., 2004). Bu komplekslərin bəziləri infeksiya xəstəliklərdə, qan azlığında, ürək-damar çatışmazlığında və allergiyalarda istifadə olunan dərman preparatlarının tərkib hissəsini təşkil edir.

Müxtəlif müəlliflər tərəfindən qeyd olunmuşdur ki, uranil ionlarının L-qlisin və L-sistein (Manuel et al., 2010), amin turşularının yan zəncir qruplarının – imidazol, fenol və indol kimi qalıqları (Shimasaki et al., 2009) koordinasiya bidentant liqand kimi iştirak edir. Karboksil qrupunun oksigen və amin qrupunun azot atomu koordinasiyaya daxil olur.

Kalorimetrik tədqiqatların köməyi ilə amin turşularının Pb(II), Cd(II) və Sn(II) komplekslərində metal-liqand rabitələrinin hidratasiya enerjiləri və koordinasiya həndəsələri məlum olmuşdur (Kuliyev, 2024; Garayeva et al., 2012). İşdə potensiometrik titrləmə üsulu ilə Co(II)  $\alpha$ -amin turşusu ilə, qurğuşunun limon və sirkə turşusu ilə kompleks əmələ gətirməsi öyrənilmişdir. Üçnüvəli amin turşularının və onların törəmələrinin şiff əsaslarının Co(III)–Co(II)–Co(III) qarışıq komplekslərinin (Gunter et al., 2007) quruluşu və xassələri tədqiq edilmişdir.

Eksperimental hissədə şiff əsasının alınması üçün ( $L_1H_2$ ) 1:1 nisbətində  $\alpha$ -aminyaq turşusu və salisil aldehidindən istifadə olunmuşdur.  $L_1H_2$  liqand ilə Ni-astat etanol məhlulunda 1:1 nisbətində qarışdırılıb bir qədər saxladıqdan sonra tünd yaşıl rəngli Ni kompleksinin kristalları alınmışdır.

#### *Alınan nəticələrin müzakirəsi*

İQ spektrləri Specord M-80 spektrofotometrində (Carl Zeiss Jena) KBr tabletlərində və vazelin mühitində qeydə alınmışdır. Elektron udma spektrləri Specord M-40 və Specord UV-Vis spektrofotometrlərində (Carl Zeiss Jena) ölçülmüşdür. Termoqravimetrik (TG) ölçmələr MOM deriftoqramında (Macarıstan istehsalı) aparılmışdır. Maqnit həssaslığı Mor və  $Hg[Co(SCN)_4]$  duzlarından istifadə edilərək, Faraday qurğusunda ölçülmüşdür.

Element analizlərinin və TG göstəricilərinə əsasən, Ni(II) kompleksinin tərkibi  $\text{NiL}_1 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$  ifadə olunur. Kompleksin TG ayrılarkən  $100\text{--}250\text{ }^\circ\text{C}$  intervalında kütlənin 16% azaldığı müşahidə olunmuşdur. Bu üç molekul suyun itkisini bildirir.

Liqandın İQ spektrində molekul daxili  $\nu(\text{OH})$  hidrogen rabitəsi,  $\nu(\text{C}=\text{O})$  karbonil,  $\nu(\text{C}=\text{N})$  azometin və  $(\text{C}-\text{O})$  fenol qrupuna uyğun olan  $3100\text{--}3400$ ,  $1703$ ,  $1640$ ,  $1223$  zolaqları müşahidə olunmuşdur. Kompleksə məhləgəlmədən isə  $\nu(\text{C}=\text{N})$  zolaqları daha aşağı tezliyə tərəf yerini dəyişir, bu da liqandın metal ionu ilə koordinasiyaya daxil olmasını göstərir. Ni kompleksində  $3410\text{ cm}^{-1}$  zolağı su molekullarına,  $1644\text{ cm}^{-1}$  zolağı azometin qrupuna,  $1600$  ( $\nu_{\text{ass}}$ ) və  $1390\text{ cm}^{-1}$  ( $\nu_{\text{sim}}$ ) zolaqları karboksil qrupuna aiddir. Zolaqların daha aşağı enerjilərə tərəf yerini dəyişməsi kompleksin əmələ gəlməsini göstərir. ( $\nu_{\text{ass}}$ ) və  $\text{cm}^{-1}$  ( $\nu_{\text{sim}}$ ) karboksil qrupları arasındakı fərq Ni kompleksinin monodentant olduğunu təsdiq edir.

$\text{NiL}_1 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$  kompleksinin maqnit momenti  $3.25\text{ m.B}$  bərabər olması Ni(II) ionunun yuxarı spinə malik olduğunu göstərir.  $15400$ ,  $19200$ ,  $26600\text{ cm}^{-1}$  görünən sahədə üç udma zolağının elektron spektrində görünməsi  $3\text{A}_2\text{g} \rightarrow 3\text{T}_2\text{g}$ ,  $3\text{A}_2\text{g} \rightarrow 3\text{T}_1\text{g}$ ,  $3\text{A}_2\text{g} \rightarrow 3\text{T}_1\text{g}(\text{P})$  keçidlərinə uyğun gəlir. Aparılan tədqiqatlar  $\text{NiL}_1 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$  kompleksinin oktaedrik quruluşa malik olduğunu təsdiq edir.

## Ədəbiyyat

- Beck, W. (2009). Metal ions and metal complexes as protective groups of amino-acids and peptides—Reactions at coordinated amino acids. *Zeitschrift für Naturforschung B*, 64(12), 1221–1245.
- Diane, L., David, K. S., & Whitwood, A. C. (2004). Copper amino-acid complexes—Towards encapsulated metal centres. *Polyhedron*, 23, 1709–1717.
- Garayeva, S. R., Medjidov, A. A., Beyukgyuger, O., Aydyn, A., Yalchin, B., & Abbasov, M. G. (2012). Trekhyadernye smeshanovarentnye kompleksey kobalta Co(III)-Co(II)-Co(III)sN-β-karboksetilsalitsilaldiminami. *Koordinatsionnaya khimiya*, 38(2), 147–152.
- Gunter, A., Geipel, G., & Bernhard, G. (2007). Complex formation of uranium(IV) with the amino acids L-glycine and L-cysteine: A fluorescence emission and UV-Vis absorption study. *Polyhedron*, 26, 59–65.
- Kuliyev, A. D. (2024). Sintez i issledovanie raznolidandnykh kompleksnykh soedineniy kobalta(II) s glitsinom, glutaminovoy i limonnoy kislotami. *Nauka, obrazovanie i kultura*, 4(70), 15–19.
- Manuel, A. V., Ribeiro da Silva, L. M. N. B. F., Santos, L., et al. (2010). Energetics of lead(II), cadmium(II) and zinc(II) complexes with amino acids. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 100, 475–482.
- Shimasaki, Y., Takani, M., & Yamauchi, O. (2009). Metal complexes of amino acids and amino acid side chain groups: Structures and properties. *Dalton Transactions*, 7854–7869.

## Comparative Synthesis and Structural Characterization of Mn(II)-Memory Effect and Ion-Imprinted PVP-Based Polymers

Chichak Seyidova 

**Keywords:** *polyvinylpyrrolidone, memory-effect, ion-imprinted polymer, manganese(II), polymer network*

**Açar sözlər:** *polivinilpirrolidon, yaddaş effekti, ion izli polimer, manqan(II), polimer şəbəkəsi*

Selective recognition of metal ions by polymeric materials is an important approach for developing efficient sorbents for contaminated aqueous systems. Polyvinylpyrrolidone (PVP) is a promising polymer for this purpose because its pyrrolidone groups contain carbonyl functionalities capable of interacting with metal ions, while its hydrophilic and biocompatible character makes it attractive for different material applications (Bühler, 2005). Template-assisted polymer design can be used to introduce metal-dependent structural organization into polymer networks. In the memory-effect approach, the target metal is first coordinated with an already formed polymer and the resulting conformation is fixed by crosslinking (Kurakula & Rao, 2020). In ion-imprinted polymerization, the target ion is present during polymer formation and is subsequently removed to generate a modified binding environment (Franco & de Marco, 2020).

The aim of this work was to synthesize and compare Mn(II)-MEP and Mn(II)-IIP based on PVP and to evaluate their structural changes following Mn(II) incorporation and template removal.

For the Mn(II)-MEP, PVP was dissolved in water and complexed with  $\text{MnCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ . After equilibration, MBA was introduced as a crosslinking agent and the mixture was subjected to UV-induced crosslinking. The resulting Mn(II)-containing polymer network was subsequently treated with HCl and EDTA to remove the metal template.

The Mn(II)-IIP was prepared by free-radical polymerization of NVP in the presence of Mn(II) ions and MBA. AIBN was used as the initiator, and polymerization was carried out under an inert atmosphere. After polymerization, the Mn(II) template was extracted using HCl/EDTA, followed by washing and drying of the polymer. The synthesized materials were characterized by FTIR-ATR to investigate changes in the chemical environment of the pyrrolidone groups and by SEM-EDX to evaluate morphology and confirm Mn(II) incorporation and removal.

FTIR-ATR analysis confirmed interaction between Mn(II) and the pyrrolidone carbonyl groups. For Mn(II)-MEP, the  $\text{C}=\text{O}$  band shifted from 1651.78 to 1647.76  $\text{cm}^{-1}$  after Mn(II) incorporation, indicating metal–carbonyl interaction. After template removal, the band remained shifted, suggesting retention of Mn(II)-induced structural changes. For Mn(II)-IIP, the carbonyl band shifted from 1631 to 1636  $\text{cm}^{-1}$  after template removal, indicating disruption of Mn–O coordination while retaining a modified local carbonyl environment.

SEM-EDX analysis showed morphological changes after template removal and confirmed substantial reduction of Mn in the extracted materials.

Overall, both approaches produced Mn(II)-templated PVP networks with detectable structural changes after template removal, while differing in their synthesis strategy: MEP uses pre-formed PVP, whereas IIP is formed by polymerization in the presence of Mn(II).

Mn(II)-MEP and Mn(II)-IIP were successfully synthesized using two different template-assisted approaches. FTIR-ATR confirmed Mn(II)-induced changes in the pyrrolidone carbonyl environment, while SEM-EDX demonstrated morphological changes and effective template removal. The results indicate that both approaches can generate structurally modified PVP-based polymer networks suitable for further investigation as Mn(II)-recognition materials. The comparative sorption performance of these materials will be evaluated separately.

## References

- Bühler, V. (2005). *Polyvinylpyrrolidone excipients for pharmaceuticals: Povidone, crospovidone and copovidone*. Springer.
- Franco, P., & de Marco, I. (2020). The use of poly(N-vinyl pyrrolidone) in the delivery of drugs: A review. *Polymers*, 12, 1114.
- Kurakula, M., & Rao, G. S. N. K. (2020). Pharmaceutical assessment of polyvinylpyrrolidone (PVP): From conventional to controlled delivery systems. *Journal of Drug Delivery Science and Technology*, 60, 102046.

## Cold-Pressed Sunflower Press Cake as a Bio-Based Filler for Polyethylene Composites: Preparation, Defatting, Alkaline Treatment, and Processing

Khayala Seyidova<sup>1\*</sup> , Javid Gasimov<sup>2</sup> 

**Keywords:** *sunflower press cake, polyethylene, bio-based filler, alkaline treatment, PE-g-MA, biocomposites*

**Açar sözlər:** *günəbaxan tullantısı presi, polietilen, bioəsaslı doldurucu, qələvi emal, PE-g-MA, biokompozitlər*

The rapid consumption of synthetic plastics and the accumulation of agricultural residues have intensified the search for sustainable polymer composites. Natural fillers are increasingly used to substitute mineral additives due to their low density, renewability, and low cost. Reported that incorporating untreated biomass into thermoplastics remains challenging due to poor interfacial adhesion, high moisture affinity, and structural incompatibilities between hydrophilic bio-fillers and hydrophobic polymer matrices (Ayrilmis et al., 2013; Huang et al., 2025).

Polyethylene (PE) is widely utilized for its processability, chemical resistance, and low cost. Nevertheless, because PE is strictly nonpolar, direct incorporation of polar, plant-derived residues leads to particle agglomeration, micro-voids, and compromised mechanical strength.

<sup>1</sup>Azerbaijan State Oil and Industry University, PhD in Chemistry, Baku, Azerbaijan

<sup>2</sup>Azerbaijan State Oil and Industry University, Master's student, Baku, Azerbaijan

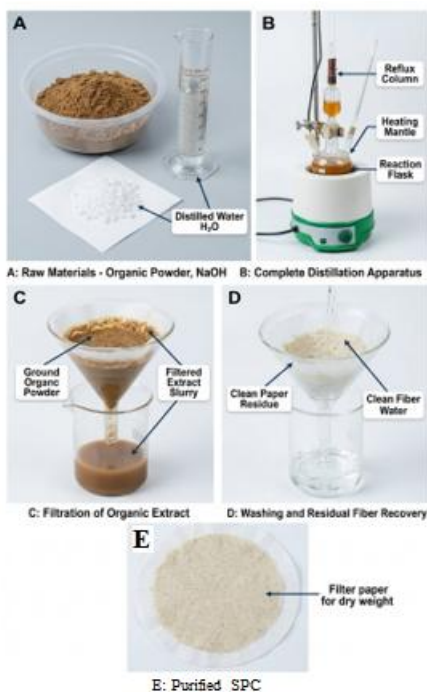
\*Corresponding author. E-mail: [keyale.seyidova.h@asoiu.edu.az](mailto:keyale.seyidova.h@asoiu.edu.az)

Sunflower press cake (SPC) presents an attractive biomass feedstock that retains structural carbohydrates, proteins, and residual lipids (Camargo et al., 2014). While residual oil can act as a processing lubricant, excessive lipid content impairs filler–matrix adhesion. Reported that solvent defatting should be systematically evaluated alongside chemical surface modifications, such as sodium hydroxide (NaOH) treatment, to optimize surface roughness and hydroxyl accessibility without degrading the filler structure (Reifschneider et al., 2013). This study aims to establish a systematic preparation method for cold-pressed SPC and evaluate its feasibility as a bio-filler for Polyethylene matrices.

Biological filler was obtained from the solid residue generated by mechanical cold pressing of dehulled sunflower seeds. Polyethylene was selected as the polymer matrix, and maleic anhydride-grafted polyethylene (PE-g-MA) was utilized as a compatibilizer to bridge the polar-nonpolar interface.

The preparation and chemical modification of SPC were carried out through sequential processing steps. To reduce residual lipids, ground SPC was extracted with *n*-hexane at a 1:5 (w/v) ratio at 40–50 °C for 2 h, followed by vacuum filtration and drying at 60 °C for 12 h, establishing two filler categories for comparison: untreated (SPC-U) and defatted (SPC-D). The biomass was subsequently milled using a laboratory disk mill and fractionated to a target particle size range of 100–200 µm. For alkaline surface modification, the defatted and dried SPC powder was immersed in a 5 wt % aqueous NaOH solution at a 1:10 (w/v) ratio in a three-neck flask equipped with a reflux condenser, mechanical stirrer, and internal thermometer, where the reaction was held at 40–50 °C to remove non-cellulosic constituents and expose reactive hydroxyl groups (fig. 1B).

Following the chemical treatment, the slurry was separated by primary gravimetric filtration (fig. 1C) and repeatedly washed with distilled water (fig. 1D) until reaching a neutral pH (pH~7). Finally, the purified fibers were recovered on filter paper (fig. 1E) and dried under vacuum at 80 °C to a constant mass with a residual moisture content below 1.0 wt %.



**Figure 1**

*Sequential stages of the chemical modification and purification of sunflower press cake (SPC): (A) Raw materials and reagents including ground SPC, KOH/NaOH pellets, and distilled water; (B) Reflux extraction setup equipped with a three-neck flask, heating mantle, overhead mechanical stirrer, and thermometer;*

(C) Primary gravimetric filtration separating the dark liquid extract from the cellulosic residue; (D) Neutralization and washing of the fiber cake with distilled water; (E) Purified and alkali-modified SPC fibers spread on filter paper prior to final vacuum drying.

The prepared SPC filler, PE matrix, and PE-g-MA compatibilizer were dry-blended and fed into a laboratory extruder. Processing was conducted using a temperature profile of 170–18–195 °C from feed zone to die. Extruded strands were pelletized and molded into standardized test specimens for mechanical and morphological characterization.

## References

- Ayrilmis, N., Kaymakci, A., & Ozdemir, F. (2013). Sunflower seed cake as reinforcing filler in thermoplastic composites. *Journal of Applied Polymer Science*, 129(3), 1170–1178.
- Camargo, D., Gomes, S. D., Felipe, M. G. A., & Sene, L. (2014). Response of by-products of sunflower seed processing to dilute-acid hydrolysis. *Journal of Food, Agriculture and Environment*, 12(2), 239–246.
- Li, Z., Huang, X., Hu, Y., et al. (2025). Sunflower seed protein: Defatting, structural characterization and property analysis. *International Journal of Biological Macromolecules*, 310, 143552.
- Reifschneider, L., Tisserat, B., & O'kuru, R. H. (2013). Mechanical properties of high density polyethylene–pennycress press cake composites. *ANTEC Conference Proceedings*, 1, 679–683.

## Synthesis and Anticancer Activity of 2-Formylpyridine 4-Allylthiosemicarbazone and Its Copper(II) Dichloroacetate Complex against THP-1 Cells

Vasilii Graur<sup>1\*</sup> , Olga Garbuz<sup>2</sup> ,  
Ianina Graur<sup>1</sup> 

**Keywords:** *thiosemicarbazone, copper(II) complexes, anticancer activity, THP-1 cells, leukemia*

**Açar sözlər:** *tiosemikarbazon, mis(II) kompleksləri, antixərçəng aktivliyi, THP-1 hüceyrələri, leykoz*

Cancer remains a major global health challenge, highlighting the need for new and effective anticancer agents. Thiosemicarbazones have attracted considerable interest due to their diverse biological activities and promising antiproliferative effects. Their coordination with transition metals, particularly copper(II), can significantly enhance their biological properties. Copper(II) complexes of thiosemicarbazones have demonstrated promising anticancer activity which may be related to their ability to interact with cellular targets and participate in redox processes. Therefore, the synthesis and investigation of thiosemicarbazones and their copper(II) complexes represents a promising strategy for the development of new metal-based anticancer agents.

---

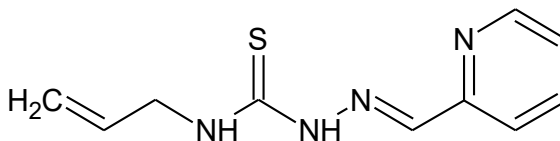
<sup>1</sup>Institute of Chemistry, Moldova State University, PhD in Chemistry, Chisinau, Moldova

<sup>2</sup>Institute of Zoology, Moldova State University, PhD in Biology, Chisinau, Moldova

\*Corresponding author. E-mail: [vasilii.graur@usm.md](mailto:vasilii.graur@usm.md)

The aim of this study was to synthesize and evaluate the anticancer activity of 2-formylpyridine 4-allylthiosemicarbazone and its copper(II) dichloroacetate complex against the human monocytic leukemia cell line THP-1.

2-Formylpyridine 4-allylthiosemicarbazone (HL) (Figure 1) was synthesized by the reaction of 4-allylthiosemicarbazide with 2-formylpyridine in ethanol. The copper(II) complex  $[\text{Cu}(\text{L})(\text{Cl}_2\text{CHCOO})]_2$  was obtained by reaction between the 4-allylthiosemicarbazone and copper(II) dichloroacetate in a 1:1 molar ratio in ethanol. The obtained compounds were investigated and characterized by FTIR spectroscopy, elemental analysis, and single-crystal X-ray diffraction.



**Figure 1**  
*The structure of HL*

The anticancer activity of the compounds was evaluated against the human monocytic leukemia cell line THP-1 using the MTS assay. The results showed  $\text{IC}_{50}$  values of  $0.11 \mu\text{M}$  for the 4-allylthiosemicarbazone and  $0.0075 \mu\text{M}$  for its copper(II) complex. Thus, coordination of the ligand to copper(II) resulted in an approximately 15-fold increase in anticancer activity. Doxorubicin, a clinically used anticancer drug, was included as a reference compound. Both the ligand and its copper(II) complex demonstrated higher activity than doxorubicin, being approximately 4-fold and 56-fold more active, respectively. This work was fulfilled with the financial support of the Bilateral Research Project 26.80013.8007.02MDTR, funded by NARD.

## Investigation of the Optical Properties of $\text{Cd}_3\text{Sb}_2\text{S}_8$ Based on UV–Vis Spectroscopy and Tauc Analysis

Sevda Aliyeva 

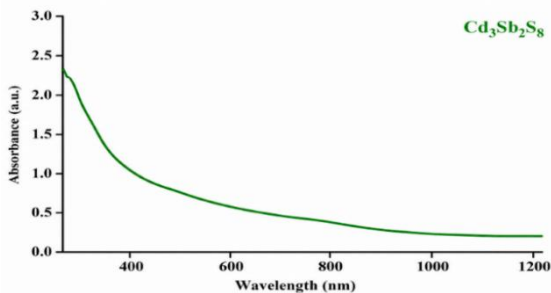
**Keywords:**  $\text{Cd}_3\text{Sb}_2\text{S}_8$ , UV–Vis spectroscopy, optical absorption, Tauc analysis, optical band gap

**Açar sözlər:**  $\text{Cd}_3\text{Sb}_2\text{S}_8$ , UV–Vis spektroskopiyası, optik udma, Tauc analizi, qadağan olunmuş enerji intervalı

Ternary cadmium–antimony–sulfur chalcogenide compounds such as  $\text{Cd}_3\text{Sb}_2\text{S}_8$  have attracted scientific interest as functional semiconductor materials owing to their distinctive electronic and optical characteristics. The  $\text{Cd}_3\text{Sb}_2\text{S}_8$  compound was synthesized using  $\text{Na}_3\text{SbS}_4$  obtained from Darıdağ antimony ore as the antimony-containing precursor. The utilization of Darıdağ-derived  $\text{Na}_3\text{SbS}_4$  (as a precursor demonstrates the potential of local antimony resources for the synth-3) esis of  $\text{Cd}_3\text{Sb}_2\text{S}_8$  and provides a basis for investigating its optical properties by UV–Vis spectroscopy and Tauc analysis. Investigation of the optical absorption behavior of these materials is important for evaluating their electronic structure and their interaction with electromagnetic radiation (Abhijit & Elahipasha, 2011). UV–Vis spectroscopy is an effective analytical technique for examining the optical response of materials over a broad wavelength range and for characterizing their absorption behavior.

Optical analysis based on the Tauc approach is widely employed to determine the nature of optical transitions and to estimate the optical band gap of semiconductor materials. Determination of the optical parameters of  $\text{Cd}_3\text{Sb}_2\text{S}_8$  provides a scientific basis for assessing its potential suitability for optoelectronic, photovoltaic, and other functional applications (Chen et al., 2022).

Figure 1 presents the UV–Vis spectral characteristics of the synthesized  $\text{Cd}_3\text{Sb}_2\text{S}_8$  compound. The spectral measurements were performed to evaluate the absorption behavior of the sample at different wavelengths of electromagnetic radiation. The obtained spectral profile provides important information for assessing the optical response of  $\text{Cd}_3\text{Sb}_2\text{S}_8$  and characterizing its absorption properties.



**Figure 1**

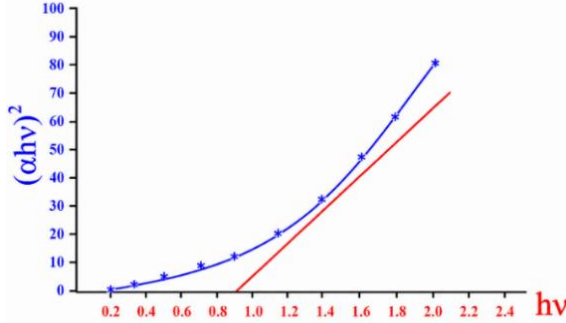
*Optical absorption spectrum of  $\text{Cd}_3\text{Sb}_2\text{S}_8$  as a function of wavelength*

The optical absorption spectrum of the  $\text{Cd}_3\text{Sb}_2\text{S}_8$  compound was investigated over the wavelength range of 200–1200 nm. A high absorption intensity is observed in the initial part of the spectrum, indicating strong optical interaction of the material at shorter wavelengths. As the wavelength increases, the

absorption intensity gradually decreases. A noticeable variation in absorption is particularly evident during the transition from the ultraviolet region to the visible region. Beyond approximately 400 nm, the absorption curve becomes smoother, with the intensity decreasing progressively. The continuous decrease observed throughout the visible region indicates that the  $\text{Cd}_3\text{Sb}_2\text{S}_8$  sample exhibits an optical response over a broad wavelength range. Although the absorption intensity is relatively weak in the 600–800 nm region, the continuous nature of the spectrum is maintained.

At wavelengths above 800 nm, the absorption decreases further and becomes nearly constant within the 1000–1200 nm range. The absence of a sharp and intense maximum in the spectrum suggests that strong optical transitions confined to a specific wavelength do not predominate in the sample (Aliyeva et al., 2026a).

This absorption behavior may be associated with broad spectral transitions related to the electronic structure of  $\text{Cd}_3\text{Sb}_2\text{S}_8$ . The relatively weak absorption at longer wavelengths indicates an increase in the optical transparency of the material in this spectral region. Overall, the obtained UV–Vis spectrum confirms that the optical properties of  $\text{Cd}_3\text{Sb}_2\text{S}_8$  are wavelength-dependent, with stronger absorption at shorter wavelengths and weaker absorption toward longer wavelengths.



**Figure 2**

*Tauc plot and determination of the optical band gap energy*

Figure 2 presents the Tauc plot constructed to evaluate the optical properties of the sample. This relationship is used to determine the nature of the optical transition and to estimate the optical band gap energy of the material. The increasing trend of the experimental data indicates that optical absorption becomes stronger with increasing photon energy. The more pronounced rise of the curve in the higher-energy region suggests that electronic transitions become more significant in this range. A linear portion corresponding to the experimental data was extrapolated toward the energy axis (Aliyeva et al., 2026b).

The point at which the extrapolation line intersects the horizontal axis provides an estimate of the optical band gap energy. As shown in the figure, this intersection occurs at approximately 0.9 eV. This result indicates that the sample exhibits semiconductor-like characteristics with a relatively narrow optical band gap. Such a band gap is important for evaluating the interaction of the material with visible and near-infrared electromagnetic radiation. Determination of the nature of the optical transition provides additional information about the electronic structure of

the material and its potential optoelectronic applications. Thus, Tauc analysis was employed as an effective approach for the quantitative evaluation of the optical parameters of the sample, allowing an approximate value of the optical band gap energy to be determined.

## References

- Abhijit, A. Y., & Elahipasha, M. (2011). Photoelectrochemical investigations of cadmium sulphide (CdS) thin film electrodes prepared by spray pyrolysis. *Journal of Alloys and Compounds*, 509(17), 5394–5399.  
<https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2011.02.061>
- Aliyeva, S., Baghban, A., Ganiev, B., Mammadova, G. A., Jamalova, R. H., et al. (2026a). Controlled aqueous synthesis of  $\text{Ag}_3\text{SbS}_4$  in the  $\text{Na}_3\text{SbS}_4\text{--AgNO}_3\text{--H}_2\text{O}$  precursor system with thermodynamic and physicochemical characterization. *Solid State Sciences*, 179, 108373.  
<https://doi.org/10.1016/j.solidstatesciences.2026.108373>
- Aliyeva, S., Heybatova, A., & Pashayeva, A. (2026b). Synthesis and X-ray phase analysis of  $\text{Cd}_3\text{Sb}_2\text{S}_8$  obtained from Schlippe's salt. *Scientific Researches XXXI International Scientific Conference* (pp. 62–65).
- Chen, Y., Cheng, Y., Zhao, J., Zhang, W., et al. (2022). Construction of  $\text{Sb}_2\text{S}_3/\text{CdS}/\text{CdIn}_2\text{S}_4$  cascaded S-scheme heterojunction for improving photoelectrochemical performance. *Journal of Colloid and Interface Science*, 627, 1047–1060.  
<https://doi.org/10.1016/j.jcis.2022.07.117>

## Bərpa olunan xammallar əsasında ekoloji cəhətdən təhlükəsiz kimyəvi sintez proseslərinin işlənməsi

Bəhrüz Məmmədov 

**Açar sözlər:** *bərpa olunan xammal, yaşıl kimya, liqnosellüloz biokütləsi, heterogen kataliz, ekoloji təhlükəsizlik, davamlı inkişaf*

**Keywords:** *renewable feedstocks, green chemistry, lignocellulosic biomass, heterogeneous catalysis, environmental safety, sustainable development*

Müasir kimya sənayesinin inkişafı uzun illər ərzində əsasən neft, təbii qaz və digər fosil mənşəli resurslardan istifadəyə söykənmişdir. Bu yanaşma sənaye istehsalının genişlənməsinə şərait yaratsa da, ətraf mühitin çirklənməsi, karbon emissiyalarının artması və təbii ehtiyatların tədricən azalması kimi mühüm problemlərin meydana çıxmasına səbəb olmuşdur. Eyni zamanda ənənəvi kimyəvi sintez üsullarında yüksək enerji sərfi, təhlükəli reagentlərin tətbiqi və böyük həcmdə tullantıların yaranması ekoloji və təhlükəsiz texnologiyaların işlənməsini zəruri etmişdir. Bu baxımdan yaşıl kimya prinsiplərinə əsaslanan istehsal yanaşmaları son illərdə xüsusi aktualıq qazanmışdır. Yaşıl kimya kimyəvi məhsulların və texnologiyaların hazırlanmasında ətraf mühitə mənfi təsirin minimuma endirilməsini, resurslardan səmərəli istifadəni və enerji sərfinin azaldılmasını əsas məqsəd kimi müəyyənləşdirir.

Bu yanaşma tullantıların qarşısının alınması, atom iqtisadiyyatının yüksəldilməsi, katalitik proseslərə üstünlük verilməsi, təhlükəsiz həlledicilərdən istifadə və bərpa olunan xammal mənbələrinin tətbiqini özündə birləşdirir (Məmmədov və Məmmədəliyeva, 2024).

Bərpa olunan xammallar arasında liqnosellüloz əsaslı biokütlə xüsusi əhəmiyyət kəsb edir. Kənd təsərrüfatı və meşə sənayesi tullantıları, müxtəlif bitki mənşəli qalıqlar sellüloza, hemisellüloza və liqnin kimi komponentlərdən ibarət olmaqla, qiymətli kimyəvi məhsulların alınması üçün əlverişli xammal hesab olunur (Yılmaz & Demirbaş, 2020). Müasir katalitik və biokatalitik üsullar bu materialların daha yüksək səmərəliliklə emal edilməsinə imkan yaradır, yaşıl həlledici sistemlərin tətbiqi isə proseslərin ekoloji göstəricilərini yaxşılaşdırır.

Tədqiqatın məqsədi bərpa olunan xammallardan istifadə etməklə həyata keçirilən ekoloji təhlükəsiz sintez yanaşmalarını ümumiləşdirmək, onların texnoloji üstünlüklərini qiymətləndirmək və davamlı kimya sənayesində tətbiq imkanlarını təhlil etməkdən ibarətdir.

Araşdırma elmi ədəbiyyatın sistemli təhlili əsasında aparılmışdır. Təhlil zamanı liqnosellüloz biokütləsinin emal üsulları, heterogen katalizatorların tətbiqi, fermentativ çevrilmə prosesləri, alternativ həlledici sistemlər və enerji qənaətini təmin edən müasir texnologiyalar müqayisəli şəkildə qiymətləndirilmişdir. Həmçinin proseslərin ekoloji səmərəliliyi atom iqtisadiyyatı, E-faktor, enerji sərfi və karbon emissiyası kimi göstəricilər əsasında təhlil edilmişdir.

Aparılmış qiymətləndirmələr göstərir ki, bərpa olunan xammalların istifadəsi kimyəvi istehsalın davamlı inkişafına

mühüm töhfə verir (Sheldon, 2018). Liqnosellüloz əsaslı biokütlənin çevrilməsi nəticəsində yüksək əlavə dəyərə malik platform kimyəvi maddələrin alınması mümkün olur ki, bu da fosil resurslardan asılılığın azaldılması baxımından mühüm üstünlük hesab edilir.

Heterogen katalizatorlardan istifadə prosesin həm iqtisadi, həm də ekoloji səmərəliliyini artırır. Belə katalizatorların reaksiya mühitindən asan ayrılması, regenerasiya olunaraq dəfələrlə istifadə edilməsi və əlavə təmizləmə mərhələlərinin azalması tullantıların həcmi minimuma endirir. Nanoölçülü katalizatorların inkişafı isə yüksək aktiv səth sahəsi hesabına reaksiyaların sürətini və məhsulun selektivliyini artırır.

Alternativ həlledici sistemlər də yaşıl sintez texnologiyalarının vacib elementlərindən biridir. İon mayeləri, dərin eutektik həlledicilər və superkritik karbon qazı ənənəvi üzvi həlledicilərlə müqayisədə daha aşağı toksiklik nümayiş etdirir, uçucu üzvi birləşmələrin emissiyasını azaldır və həlledicinin təkrar istifadəsinə imkan yaradır. Bu xüsusiyyətlər proseslərin həm ekoloji təhlükəsizliyini, həm də iqtisadi səmərəliliyini artırır.

Effektiv texnologiyaların tətbiqi də mühüm nəticələr verir. Mikrodalğalı qızdırma və ultrasəs aktivləşdirmə reaksiyaların gedişini sürətləndirir, enerji sərfini azaldır və məhsuldarlığın yüksəlməsinə şərait yaradır. Axın tipli reaktor sistemləri isə istilik və kütlə ötürülməsinin daha səmərəli idarə edilməsini təmin etməklə proseslərin sənaye miqyasında tətbiq imkanlarını genişləndirir.

Təhlil olunan məlumatlar göstərir ki, yaşıl sintez yanaşmalarının tətbiqi ənənəvi texnologiyalarla müqayisədə enerji sərfinin və

karbon emissiyalarının əhəmiyyətli dərəcədə azalmasına şərait yaradır. Bununla yanaşı, atom iqtisadiyyatının yüksəlməsi və E-faktorun aşağı düşməsi xammaldan daha rəasional istifadəni təmin edir və tullantıların miqdarını minimuma endirir.

Nəticə etibarilə bərpa olunan xammallara əsaslanan yaşıl sintez texnologiyaları ekoloji təhlükəsizlik, resurs səmərəliliyi və iqtisadi baxımdan mühüm üstünlüklərə malikdir. Bu yanaşmalar davamlı kimya sənayesinin inkişafı, ətraf mühitə mənfi təsirin azaldılması və gələcəkdə sənaye proseslərinin daha təhlükəsiz təşkil olunması üçün perspektivli istiqamətlərdən biri hesab edilə bilər.

## Ədəbiyyat

- Məmmədov, N. və Məmmədəliyeva, S. (2024). *Ekoloji sivilizasiyanın astanasında: Yaşıl enerjiyə keçid*. ADPU nəşriyyatı.
- Sheldon, R. A. (2018). Green chemistry and resource efficiency: Towards a green economy. *Green Chemistry*, 20, 195–207.
- Yılmaz, O., & Demirbaş, A. (2020). Sustainable chemical production from biomass resources. *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects*, 42(15), 1856–1872.

## Density Functional Theory Comparison of Methyl Iodide and Benzyl Chloride in 4-Vinylpyridine Dimer Quaternization

Hajar Aslanova<sup>1\*</sup> , Nizami Zeynalov<sup>2</sup> 

**Keywords:** 4-vinylpyridine, quaternization, benzyl chloride, methyl iodide, density functional theory

**Açar sözlər:** 4-vinilpiridin, kvaternizasiya, benzilxlorid, metilyodid, sıxlıq funksional nəzəriyyəsi

Quaternization is one of the common approaches used to modify pyridine-containing polymers. Introduction of a positive charge at the pyridine nitrogen changes the chemical environment of the polymer and can affect its interaction with other molecules and metal species. Poly(4-vinylpyridine) (P4VP) is particularly suitable for this type of modification because of the pyridine groups present along its polymer chain. Both methyl iodide and benzyl chloride have been used to quaternize P4VP, although they introduce different substituents at the pyridine nitrogen (Mavronasou et al., 2022; Tagiev et al., 2020). The nature of the substituent introduced during quaternization can influence the structure and electronic properties of the resulting pyridinium unit.

---

<sup>1</sup>Institute of Chemistry, Ministry of Science and Education of the Republic of Azerbaijan, PhD student, Baku, Azerbaijan

<sup>2</sup>Institute of Chemistry, Ministry of Science and Education of the Republic of Azerbaijan, Doctor of Chemical Science, Baku, Azerbaijan

\*Corresponding author. E-mail: [hajar.aslanova@kqki.science.az](mailto:hajar.aslanova@kqki.science.az)

Methyl and benzyl groups differ in their size and molecular structure, which may lead to differences in the geometry and electronic characteristics of the quaternized system.

A direct comparison of these two quaternization approaches at the molecular level can therefore provide useful information for understanding their effects on 4-vinylpyridine (4VP)-based systems. Such differences can be difficult to assess from the chemical structure alone, particularly when changes in molecular geometry and electronic properties are considered.

Density functional theory (DFT) provides a useful computational approach for relating molecular structure to electronic properties through quantum chemical descriptors. Parameters such as frontier orbital energies, the HOMO-LUMO energy gap, and dipole moment provide useful descriptors for comparing changes in the electronic characteristics of molecular systems (Chakraborty & Chattaraj, 2021). Using the same computational approach for different quaternization systems allows direct comparison of their structural and electronic properties.

In this work, methyl iodide and benzyl chloride were compared as quaternization agents using a 4VP dimer as a molecular model. Density functional theory calculations were used to optimize the structures and examine their electronic properties. The comparison was aimed at identifying the differences between the two quaternization systems and providing computational support for their use in further experimental studies.

All calculations were performed using Gaussian 09 rev. D.01 with GaussView 6.0 (Frisch et al., 2009). The structures were

optimized using the B3LYP density functional. The 6-31G(d,p) basis set was used for the 4-vinylpyridine dimer, while LANL2DZ was applied to the heavier halogen-containing systems. No symmetry constraints were imposed during geometry optimization.

For the quaternized systems, solvent effects were considered using the IEFPCM model with ethanol as the solvent. Frequency calculations were performed for the optimized structures to confirm the absence of imaginary frequencies. The optimized geometries were then used to compare the structural and electronic properties of the methyl- and benzyl-quaternized dimers.

The calculated descriptors provide a direct comparison of the electronic and molecular changes associated with quaternization of the 4VP dimer. The dimer, methyl iodide-quaternized dimer (MeI-quaternized dimer), and benzyl chloride-quaternized dimer (BnCl-quaternized dimer) were considered under the same computational framework. The main calculated parameters are summarized in Table 1.

**Table 1**

*Calculated electronic descriptors of the 4-vinylpyridine dimer and its quaternized derivatives*

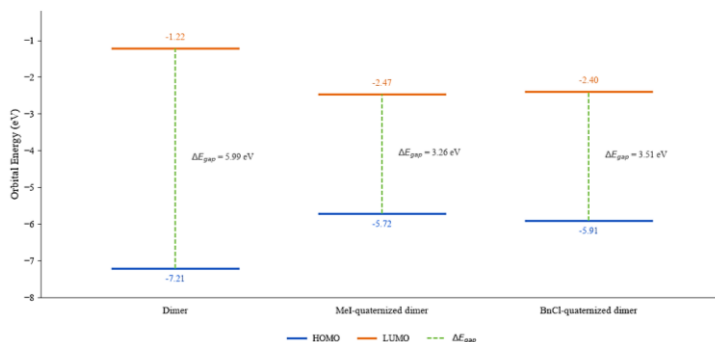
| System                       | $-E/10^6$<br>(kJ/mol) | Dipole<br>moment<br>(D) | IP<br>(eV) | EA<br>(eV) | $\eta$<br>(eV) | $\omega$<br>(eV) |
|------------------------------|-----------------------|-------------------------|------------|------------|----------------|------------------|
| Dimer                        | 1.817                 | 7.54                    | 7.21       | 1.22       | 3.00           | 2.96             |
| MeI-<br>quaternized<br>dimer | 1.951                 | 25.31                   | 5.72       | 2.47       | 1.63           | 5.15             |

|                        |       |       |      |      |      |      |
|------------------------|-------|-------|------|------|------|------|
| BnCl-quaternized dimer | 2.567 | 20.70 | 5.91 | 2.40 | 1.76 | 4.92 |
|------------------------|-------|-------|------|------|------|------|

*Note.* MeI, methyl iodide; BnCl, benzyl chloride.

Quaternization resulted in a clear increase in dipole moment. The dimer has a dipole moment of 7.54 D, which increases to 25.31 D for the MeI-quaternized dimer and 20.70 D for the BnCl-quaternized dimer. This change reflects the altered charge distribution after formation of the positively charged pyridinium nitrogen. The larger dipole moment obtained for the MeI-quaternized dimer indicates a more pronounced overall charge separation in this model, whereas the BnCl-quaternized dimer shows a somewhat lower but still substantial polarization.

The frontier molecular orbital results also show a marked effect of quaternization. The dimer has a calculated HOMO-LUMO gap of 5.99 eV, while the gap decreases to 3.26 eV for the MeI-quaternized dimer and 3.51 eV for the BnCl-quaternized dimer. Thus, both quaternization models lead to a substantial reduction in the energy gap, indicating a pronounced change in the electronic structure of the 4VP dimer (Chakraborty & Chattaraj, 2021). The slightly smaller gap of the MeI-quaternized dimer indicates a somewhat greater change in its frontier-orbital separation compared with the BnCl-quaternized system.

**Figure 1**

*HOMO and LUMO energy levels of the dimer, MeI-quaternized dimer, and BnCl-quaternized dimer, with the corresponding energy gaps ( $\Delta E_{\text{gap}}$ )*

The differences in the frontier orbital energies are illustrated by the HOMO and LUMO energy levels shown in Figure 1. In both quaternized systems, the frontier orbital energies differ considerably from those of the dimer, consistent with the calculated reduction in the HOMO-LUMO gap. The comparison of the two quaternization models therefore indicates that the nature of the substituent introduced at the pyridine nitrogen influences the electronic response of the 4VP dimer.

The calculated global reactivity descriptors further support this difference. The chemical hardness decreases from 3.00 eV for the dimer to 1.63 eV for the MeI-quaternized dimer and 1.76 eV for the BnCl-quaternized dimer, while the corresponding softness values increase from 0.17 to 0.31 and 0.28 eV<sup>-1</sup>, respectively. The lower hardness and higher softness of the quaternized systems indicate a lower resistance to electronic redistribution, consistent with the conceptual density functional theory interpretation of these descriptors (Chakraborty &

Chattaraj, 2021). The electrophilicity index also increases from 2.96 eV for the dimer to 5.15 eV for the MeI-quaternized dimer and 4.92 eV for the BnCl-quaternized dimer, indicating an enhanced electrophilic character of the quaternized systems (Chakraborty & Chattaraj, 2021; Miranda-Quintana et al., 2022).

Overall, these descriptors indicate that both quaternization agents substantially modify the electronic properties of the 4VP dimer, with MeI producing a slightly stronger effect in the present model.

## References

- Chakraborty, D., & Chattaraj, P. K. (2021). Conceptual density functional theory based electronic structure principles. *Chemical Science*, 12(18), 6264–6279.  
<https://doi.org/10.1039/D0SC07017C>
- Frisch, M. J., Trucks, G. W., Schlegel, H. B., Scuseria, G. E., Robb, M. A., Cheeseman, J. R., Scalmani, G., Barone, V., Petersson, G. A., Nakatsuji, H., et al. (2009). *Gaussian 09, Revision D.01*. Gaussian, Inc.
- Mavronasou, K., Zamboulis, A., Klonos, P., Kyritsis, A., Bikiaris, D. N., Papadakis, R., & Deligkiozi, I. (2022). Poly(vinyl pyridine) and its quaternized derivatives: Understanding their solvation and solid state properties. *Polymers*, 14(4), 804.  
<https://doi.org/10.3390/polym14040804>
- Miranda-Quintana, R. A., Heidar-Zadeh, F., Fias, S., Chapman, A. E. A., Liu, S., Morell, C., Gómez, T., Cárdenas, C., & Ayers, P. W. (2022). Molecular interactions from the density functional theory for chemical reactivity: Interaction chemical potential, hardness, and reactivity

principles. *Frontiers in Chemistry*, 10, 929464.  
<https://doi.org/10.3389/fchem.2022.929464>

Tagiev, D., Mammadova, U., Isazade, A., Zeynalov, N., Badalova, O., Shixverdieva, N., Seidova, C., & Aslanova, H. (2020). Immobilization of a quaternized polymer with immobilized transition metal ions. *Digest Journal of Nanomaterials and Biostructures*, 15(1), 275–280.  
<https://doi.org/10.15251/DJNB.2020.151.275>

## Preparation of a Nickel-Containing Chitosan/PVA Hybrid Nanocomposite for Benzene Hydrogenation

Nigar Shikhverdiyeva<sup>1\*</sup> , Ulviyya Mammadova<sup>2</sup> 

**Keywords:** *chitosan, poly(vinyl alcohol), nickel, hybrid nanocomposite, metal-containing polymer, XRD*

**Açar sözlər:** *xitozan, polivinil spirti, nikel, hibrid nanokompozit, metal tərkibli polimer, RFA*

Polymer–metal hybrid materials offer an attractive approach for combining the functional properties of polymers with the chemical activity of transition metals. In this study, a nickel-containing hybrid nanocomposite based on chitosan (CS) and poly(vinyl alcohol) (PVA) was prepared and investigated as a potential material for benzene hydrogenation. Chitosan was selected because its amino and hydroxyl groups can interact with nickel species, while PVA provides additional hydroxyl groups and contributes to the formation of a stable polymer matrix. Nickel was introduced using  $\text{NiCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  as the precursor. The prepared material was characterized by X-ray diffraction (XRD) to evaluate changes in the structural organization of the polymer matrix and the formation of the nickel-containing phase.

---

<sup>1</sup>Institute of Chemistry, Ministry of Science and Education of the Republic of Azerbaijan, PhD student, Baku, Azerbaijan

<sup>2</sup>Institute of Chemistry, Ministry of Science and Education of the Republic of Azerbaijan, PhD in Chemistry, Baku, Azerbaijan. \*Corresponding author. E-mail: [nigar.shikhverdiyeva@kqki.science.az](mailto:nigar.shikhverdiyeva@kqki.science.az)

The diffraction pattern of the CS/PVA matrix showed characteristic reflections at approximately  $20^\circ$  ( $2\theta$ ), while additional reflections associated with nickel-containing species were observed at  $44.5^\circ$ . The obtained results indicate the formation of a distinct nickel-containing CS/PVA hybrid structure. The combination of a functional polymer matrix and nickel makes the prepared material promising for further investigation in benzene hydrogenation.

Polymer–metal hybrid materials have attracted attention because polymer matrices can provide a specific chemical environment for the immobilization and stabilization of metal-containing species (Nipu et al., 2025). The properties of such systems depend on the interaction between the metal and functional groups of the polymer, as well as on the structural organization of the polymer matrix. Chitosan is a suitable polymer for this purpose because it contains amino and hydroxyl groups capable of interacting with transition-metal species (Liu et al., 2002). The incorporation of PVA can modify the polymer environment through intermolecular interactions and provide additional hydroxyl-containing sites. Therefore, the CS/PVA combination represents a promising matrix for the preparation of metal-containing hybrid materials.

Nickel is widely investigated in hydrogenation chemistry because of its ability to participate in hydrogen activation and hydrogenation reactions (Leone et al., 2025). Benzene hydrogenation is particularly interesting because complete hydrogenation produces cyclohexane, whereas controlled partial hydrogenation can lead to cyclohexene.

The aim of this work was to prepare a nickel-containing CS/PVA hybrid nanocomposite and evaluate its structural

characteristics by XRD. The obtained material is intended for further investigation in benzene hydrogenation, with particular attention to the relationship between its structure and hydrogenation selectivity.

Chitosan and PVA were used as the polymeric components, while nickel(II) chloride hexahydrate ( $\text{NiCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ) was used as the nickel precursor. Chitosan was dissolved in an acidic aqueous medium under continuous stirring, followed by the addition of a predetermined amount of PVA. The CS/PVA ratio was (1:1).

A calculated amount of  $\text{NiCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  was subsequently introduced into the polymer mixture under continuous stirring. The mixtures were stirred for 4 h at  $25^\circ\text{C}$  to allow coordination of  $\text{Ni}^{2+}$  ions with the functional groups of the polymer matrix.

X-ray diffraction measurements were performed over the  $2\theta$  range of  $7^\circ$ – $70^\circ$  using a Bruker D2 PHASER diffractometer with  $\text{Cu K}\alpha$  radiation ( $\lambda = 0.15406\text{ nm}$ ). The diffraction patterns were analyzed to determine changes in the polymer structure and to identify crystalline phases associated with nickel. The incorporation of nickel modified the structural organization of the polymer matrix, as demonstrated by the XRD analysis.

The diffraction pattern of the initial CS/PVA material exhibited broad reflections at approximately  $20^\circ$  ( $2\theta$ ). After nickel incorporation, changes in the intensity and/or position of these reflections were observed. In addition, new diffraction peak appeared at approximately  $2\theta = 44.5^\circ$ . This reflection is assigned to the (111) crystallographic plane of face-centered cubic (FCC) metallic nickel ( $\text{Ni}^\circ$ ) (JCPDS card No. 04-0850), (Shahzad et al., 2023). The observed changes indicate that incorporation of

nickel affects the ordering of the polymer chains and introduces an additional crystalline phase into the CS/PVA matrix.

The obtained hybrid material is of particular interest for benzene hydrogenation. In this reaction, nickel-containing sites can participate in hydrogen activation and interaction with the aromatic substrate. The CS/PVA matrix may influence the local environment and accessibility of these sites, potentially affecting both benzene conversion and product distribution. Thus, the prepared CS/PVA/Ni material provides a basis for subsequent catalytic and kinetic investigations.

## References

- Leone, M. S., Mastrorilli, P., Mesto, E., Schingaro, E., Comparelli, R., Porfido, C., & Dell'Anna, M. M. (2025). Partial Hydrogenation of Waste Cooking Oil Biodiesel Catalyzed by Iron Oxide/Nickel Nanoparticles Supported on Steel Slags. *ACS omega*, 10(45), 54070.
- Liu, X. D., Tokura, S., Haruki, M., Nishi, N., & Sakairi, N. (2002). Surface modification of nonporous glass beads with chitosan and their adsorption property for transition metal ions. *Carbohydrate Polymers*, 49(2), 103–108.
- Nipu, S. M. A., Tang, T., Joralmon, D., Liu, T., Li, R., Yoo, M., & Li, X. (2025). Advances and perspectives in multi-material additive manufacturing of heterogenous metal-polymer components. *Npj Advanced Manufacturing*, 2(1), 31.
- Shahzad, A., Khan, I. A., Manzoor, A., Kashif, M., Ahsan, M., He, M., & Razzokov, J. (2023). Synthesis of nickel nanowires (Ni-NWs) as high ferromagnetic material by electrodeposition technique. *Heliyon*, 9(1).

## Synthesis, Physicochemical Characterization, and Electrical Conductivity of Poly(*m*-phenylenediamine) and Its Cu(II) Coordination Complex

Telli Novruzova<sup>1\*</sup> , Sabina Ismayilova<sup>2</sup> 

**Keywords:** *poly(m-phenylenediamine), conductive polymer, copper(II) complex, electrical transport properties, electrical conductivity*

**Açar sözlər:** *poli(m-fenilendiamin), elektrik keçirici polimer, mis(II) kompleksi, elektrik daşınma xüsusiyyətləri, elektrik keçiriciliyi*

Electrically conductive polymers (ECPs) represent one of the most important classes of advanced functional materials developed during the last few decades. Unlike conventional polymers, which are electrical insulators because of their localized electronic structure, conductive polymers possess extended  $\pi$ -conjugated systems that enable the movement of charge carriers along the polymer backbone.

---

<sup>1</sup>Baku State University, Master's student, Baku, Azerbaijan

<sup>2</sup>"Institute of Chemistry" Public Legal Private, PhD in Chemistry, Baku, Azerbaijan

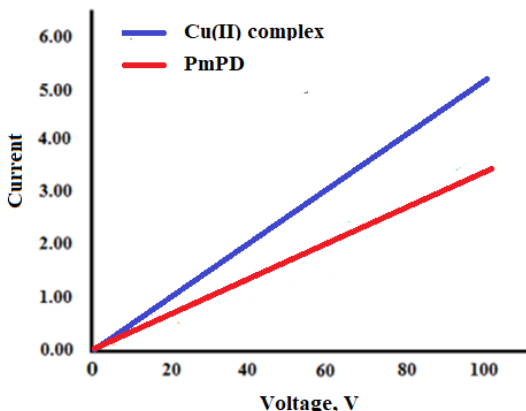
\*Corresponding author. E-mail: [tellinuriyeva8@gmail.com](mailto:tellinuriyeva8@gmail.com)

Their unique combination of electrical conductivity, lightweight nature, corrosion resistance, mechanical flexibility, ease of synthesis, and tunable physicochemical properties has led to widespread applications in electronics, electrochemical devices, sensors, energy storage systems, electromagnetic interference (EMI) shielding, antistatic coatings, corrosion protection, and biomedical engineering.

Poly(*m*-phenylenediamine) has attracted increasing research interest because of its multifunctional properties. The polymer contains numerous nitrogen donor atoms capable of coordinating with metal ions through lone-pair electrons, making it an excellent ligand for preparing polymer–metal complexes. Such complexes combine the electronic properties of conjugated polymers with the catalytic, magnetic, optical, and electrochemical characteristics of transition metals.

The present study focuses on the synthesis of electrically conductive poly(*m*-phenylenediamine) through oxidative polymerization and the subsequent preparation of its Cu(II) coordination complex. The synthesized polymer and metal complex are characterized using a range of physicochemical techniques to investigate their structural, optical, thermal, morphological, and electrical properties.

Electrical conductivity measurements were performed using a Keithley 6517A Electrometer employing the four-probe technique. Four equally spaced electrical contacts were attached to the surface of the pelletized samples. A constant current was passed through the two outer probes, while the voltage drop was measured across the two inner probes to eliminate the influence of contact resistance. The electrical conductivity was determined from the measured current–voltage data at room temperature.



**Figure 1**  
*Current–voltage ( $I$ – $V$ ) characteristics of PmPD and its Cu(II) complex*

Figure 1 presents the current–voltage ( $I$ – $V$ ) characteristics of poly(*m*-phenylenediamine) (PmPD) and its Cu(II) coordination complex. Both samples exhibit a linear dependence of current on applied voltage, indicating ohmic conduction behavior. However, the Cu(II) complex displays a significantly higher current throughout the investigated voltage range, corresponding to a steeper slope of the  $I$ – $V$  curve and lower electrical resistance. At 100 V, the current of the Cu(II) complex ( $\approx 5.2$  A) exceeds that of PmPD ( $\approx 3.3$  A) by approximately 58%, demonstrating a substantial enhancement in electrical conductivity following Cu(II) coordination. This improvement is attributed to increased charge-carrier mobility and more efficient electron delocalization resulting from coordination of Cu(II) ions with the nitrogen donor sites of the polymer backbone. These findings confirm that metal complexation is an effective strategy for improving the electrical performance of poly(*m*-phenylenediamine).

## Neftçixarmada AQP çöküntülərinin qarşısının alınması üçün effektiv kompozit sistem

Tərlan İbadzadə 

**Açar sözlər:** *AQP çöküntüləri, kimyəvi təsir, inhibitor, deemulqator, soyuq barmaqciqlar*

**Keywords:** *ARP deposits, chemical treatment, inhibitor, demulsifier, cold fingers*

Təqdim olunan tədqiqat işi asfalten-qatran-parafin (AQP) çöküntülərinin formalaşmasına qarşı kimyəvi modifikasiya üsullarının tətbiqinə həsr olunmuşdur. İşdə deemulqator, metil spirti və qələvi tullantı fraksiyalarının sinergik kombinasiyasından ibarət yeni «NQ-AP-1» reagentinin effektivliyi araşdırılır. Məlumdur ki, təbii yataq şəraitində xam neft müxtəlif molekullu yüngül və ağır karbohidrogenlərin termodinamik tarazlıqda olan çoxkomponentli mürəkkəb sistemidir. Quyuların istismarı prosesində bu tarazlığın pozulması nəticəsində ağır üzvi makromolekulların kütləvi şəkildə çökməsi baş verir ki, bu da texnoloji fəsadların yaranmasına və hasilatın kəskin azalmasına səbəb olur (Huiyuan et al., 2020; Tileuberdi et al., 2025).

Hazırda sənayedə müxtəlif təyinatlı reagentlərin geniş çeşidinin mövcudluğuna baxmayaraq (Campen et al., 2019; Xu & Bao, 2020; Moradi et al., 2019), AQP formalaşması ilə mübarizədə iqtisadi cəhətdən rentabelli, texnoloji cəhətdən əlçatan və yüksək effektivliyə malik yeni metodologiyaların işlənilməsi aktuallığını qoruyur. Tədqiqat çərçivəsində inhibitor sərfinin optimallaşdırılması və sistemin qoruyucu təsir müddətinin artırılması məqsədilə çoxfunksiyalı «NQ-AP-1» kompozisiyası sintez edilmişdir. Təklif olunan kompozisiya yüksək effektivliyi və xammal bazasının iqtisadi səmərəliliyi ilə fərqlənir. Reagentin optimal tərkibini müəyyən etmək üçün əsas deemuqator matrisinə dizel yanacağının təmizlənməsi prosesindən ayrılan metanol və qələvi tullantı komponentləri cədvəl 1-də göstərilən kütlə payı (%) nisbətlərində daxil edilmişdir.

### Cədvəl 1

#### *Reagentin tərkibi*

| Deemuqator, % | Metanol, % | Qələvi tullantılar, % |
|---------------|------------|-----------------------|
| 0,45–1,0      | 3,5–5,5    | geri qalanı           |

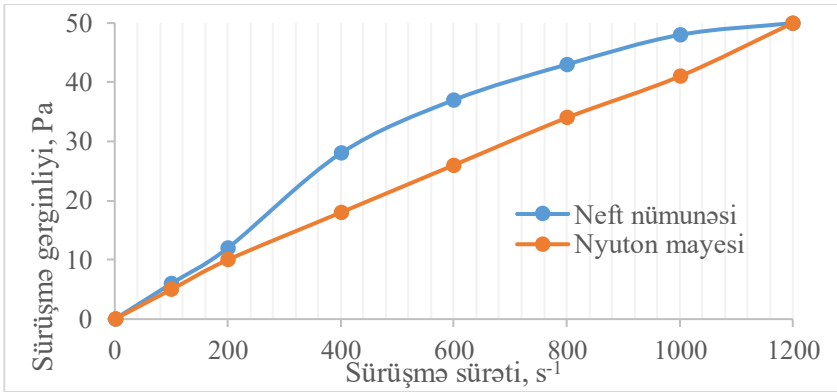
Sintez olunmuş kompozisiyanın AQP formalaşmasına qarşı qoruyucu xassələri laboratoriya şəraitində “Soyuq barmaqçılar” metodologiyası əsasında realizə edilmişdir. Tətbiq olunan bu üsul tədqiq edilən reagentin parafin çökmə prosesinə inhibitor təsirini həm kəmiyyət, həm də keyfiyyət meyarları üzrə kompleks şəkildə qiymətləndirməyə imkan verir (Səmədov və b., 2017). Eksperimental sınaqlar N. Nərimanov adına NQÇİ-nin 411 sayılı qazlift quyusundan hasil olunan və yüksək AQP komponentləri ilə xarakterizə edilən neft nümunəsi üzərində aparılmışdır. Təcrübələrin yekun nəticələri sistematik şəkildə cədvəl 2-də ümumiləşdirilmişdir.

**Cədvəl 2**

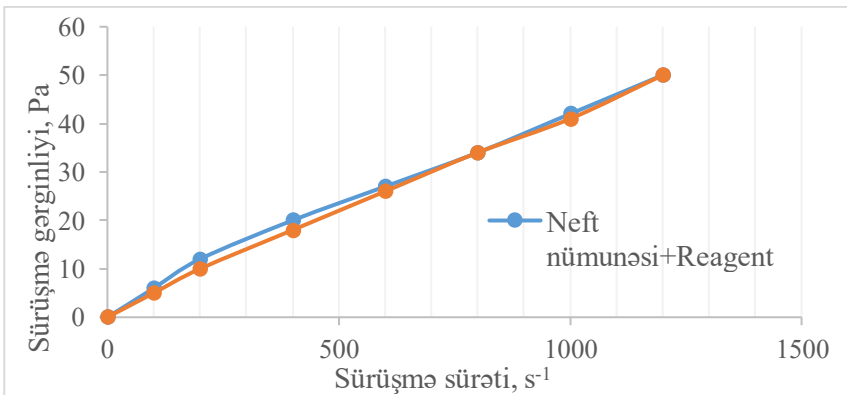
*Tərkibin komponentlərinin optimal nisbətinin təyini üçün laboratoriya sınaqlarının nəticələri*

| № | Komponent nisbəti, %                                                                | Kompozisi-<br>yanın sərfi,<br>q/t | AQP-nin<br>miqdarı,<br>% | Donma<br>temperaturu,<br>°C |
|---|-------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------|--------------------------|-----------------------------|
| 1 | N. Nərimanov adına NQÇİ-<br>dən götürülmüş nümunə                                   | –                                 | 5,9                      | 24                          |
| 2 | 1. Deemulqator – 0,45;<br>2. Metil spirti – 2,0;<br>3. Qələvi tullantıları – 97,55; | 500                               | 5,5                      | 16                          |
| 3 | 1. Deemulqator – 0,45;<br>2. Metil spirti – 3,0;<br>3. Qələvi tullantıları – 96,45; | 600                               | 2,8                      | 9                           |
| 4 | 1. Deemulqator – 0,45;<br>2. Metil spirti – 2,0;<br>3. Qələvi tullantıları – 97,45; | 600                               | 4,5                      | 7                           |
| 5 | 1. Deemulqator – 0,8;<br>2. Metil spirti – 5,2;<br>3. Qələvi tullantıları – 94,0;   | 800                               | 0,4                      | -5                          |
| 6 | 1. Deemulqator – 0,8;<br>2. Metil spirti – 5,2;<br>3. Qələvi tullantıları – 94;     | 1000                              | 0,4                      | -5                          |

Cədvəl 2-dən göründüyü kimi, optimal nisbət tərkibi deemulqator – 0,8%, metil spirti – 5,2%, qələvi tullantıları – 94,0% olan nümunədədir. Hazırlanmış bu reagentin AQP-li neftlərin reoloji xassələrinə təsirinin tədqiqinin nəticələri şəkil 1 və 2-də göstərilmişdir.

**Şəkil 1**

*Adi halda neft nümunəsinin sürüşmə gərginliyi ilə sürüşmə sürəti arasındakı asılılığı*

**Şəkil 2**

*“NQ-AP-1” reagenti əlavə edildikdə neft nümunəsinin sürüşmə gərginliyi ilə sürüşmə sürəti arasındakı asılılığı*

Deemulqatordan, dizel yanacağının təmizlənməsindən əldə edilən qələvi tullantıları və metanoldan ibarət inhibitor kompozisiyasının ümumi sərf norması 500–800 q/t təşkil edir və

bu tərkib neftin donma temperaturunu  $-5^{\circ}\text{C}$ -yə kimi aşağı salır. AQP çöküntülərinə qarşı istifadə olunacaq kompozisiyanın tərkibində deemulqatorla yanaşı, əlavə olaraq metil spirti və dizel yanacağının təmizlənməsindən əldə edilən qələvi tullantılarının komponentlərinin optimal miqdarı, deemulqator – 0,8%, metanol – 5,2%, qələvi tullantıları – 94%-dir. Hazırlanmış “NQ-AP-1” reagentinin AQP-li neftlərin reoloji xassələrinə təsirinin tədqiqi aparılmış və reagentin təsiri nəticəsində neft reoloji xüsusiyyətini dəyişərək Nyuton neftlərinin xassələrini göstərmişdir. Reagentin optimal sərf norması “Soyuq barmaqciqlar” üsulu ilə təyin olunmuşdur. Burada da xam neft və 1 t-a 600, 800, 1000 q reagent əlavə olunmuş neftdə soyuq barmaqciqlar üzərində toplanmış parafinin miqdarı müqayisə edilmişdir. Reagentsiz neftdə soyuq barmaqciqlar üzərində toplanmış AQP-nin miqdarı maksimum 10,41 q olduğu halda, sistemə 800 q/t reagent əlavə edildikdə bu göstərici 7 q təşkil etmişdir. «NQ-AP-1» kompozisiyanın istifadəsi iqtisadi cəhətdən yüksək səmərə əldə etməyə imkan verir. Kompozisiya AQP çöküntülərinə qarşı kifayət qədər yüksək effektivliyi təmin edir, neftin çıxarılması və nəqli zamanı AQP çöküntüləri ilə mübarizə üçün nəzərdə tutulub.

Kompozisiya kompleks şəkildə təsir göstərir. Tərkibindəki qələvi tullantıları ətraf mühitin pH-nı artırır və bununla da deemulqatorun təsirini artırır. Asfalten-qatranla müqayisədə bərk süxurun səthinə daha tez adsorbsiya olunur və bununla da asfalten-qatran hissəciklərinin çökməsinin qarşısını alır. Qarışıqın komponentləri ümumilikdə bütün kompozisiya kimi ətraf mühitə təhlükə yaratmayan və ekoloji cəhətdən təmiz məhsullardır. Komponentlərin istehsalı üçün zəruri olan xammal mənbələri respublika ərazisində mövcuddur, asanlıqla əldə edilə bilər və kəmiyyət baxımından kifayət qədərdir.

Beləliklə, tədqiqatın nəticələri göstərir ki, «NQ-AP-1» reagenti AQP çöküntülərinə qarşı effektiv vasitə kimi istifadə oluna bilər. Digər tərəfdən, bu reagentin 1 t-nun 1300 manat dəyərində olması və respublikamızda istehsal edilən kimyəvi xammal əsasında hazırlanması onun geniş tətbiqinə zəmin yaradır.

## Ədəbiyyat

- Campan, S. M., Moorhouse, S. J., & Wong, J. S. S. (2019). Effect of aging on the removal of asphaltene deposits with aromatic solvent. *Langmuir*, 35, 11995–12008.
- Huiyuan, L., Jinjun, Z., Qinggong, X., Chengyu, H., Yadong, S., Yu, Z., Shanpeng, H., & Changchun, W. (2020). Influence of asphaltene on wax deposition: Deposition inhibition and sloughing. *Fuel*, 266, 117047.
- Moradi, S., Amirjahadi, S., Danaee, I., & Soltani, B. (2019). Experimental investigation on application of industrial coatings for prevention of asphaltene deposition in the well-string. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 181, 106095.
- Səmədov, A. M., Ağazadə, Ə. D., Əkbərova, A. F. və b. (2017). NDP tipli yeni reagentlərin depressor və parafinçökməyə qarşı inhibitor xassələrinin tədqiqi. *Azərbaycan neft təsərrüfatı*, 6, 43–47.
- Tileuberdi, Y., Kuoshiken, U., Ongarbayev, Y., Tulepov, M., Shadin, N., Sadirbekova, D., Zhussupova, L., Imanbayev, Y., & Zhambolova, A. (2025). A review of asphaltenes: Composition, structure, properties, behavior, and applications. *Engineered Science*, 35, 1547. <https://doi.org/10.30919/es1547>
- Xu, X., & Bao, T. (2020). Research on the removal of near-well blockage caused by asphaltene deposition using sonochemical method. *Ultrasonics Sonochemistry*, 64, 104918.

## Meyvə bitkilərinin yarpaqlarında makro və mikroelementlərin disbalansının diaqnostikası mineral qidalanmanın optimallaşdırılmasının əsası kimi

Gülnarə Abbasova 

**Açar sözlər:** *yarpaq diaqnostikası, kimyəvi tərkib, makroelementlər, mikroelementlər, elementlərin antaqonizmi, fertiqasiya*

**Keywords:** *leaf diagnostics, chemical composition, macroelements, microelements, antagonism of elements, fertigation*

Tədqiqatda Xaçmaz rayonunun intensiv şaftalı və giləs bağlarında yetişdirilən bitkilərin yarpaqlarının kimyəvi tərkibi öyrənilmişdir. Yarpaqların kimyəvi analizi göstərmişdir ki, tədqiq olunan bağlarda mineral qidalanmanın əsas problemi qida elementlərinin ümumi çatışmazlığı deyil, onların balansının pozulmasıdır (Hüseynov və b., 2018). Göstərilmişdir ki, gizli qida çatışmazlıqlarının əsas səbəbi elementlər arasında mövcud olan antaqonist qarşılıqlı təsirlərdir. Yarpaq analizinin nəticələrinə əsasən, fertiqasiya sisteminin optimallaşdırılması üçün tövsiyələr hazırlanmışdır. Bütün analiz olunan nümunələrdə fosfor və kalsiumun yüksək miqdarı müşahidə edilmiş, əksər variantlarda azot və misin də normadan artıq olduğu müəyyən edilmişdir (Məmmədov, 2005).

Bununla yanaşı, kalium, dəmir, maqnezium və borun çatışmazlığı qeydə alınmışdır. Bu vəziyyət elementlərin torpaqda kifayət qədər olmaması ilə deyil, onların qarşılıqlı antaqonist təsiri nəticəsində bitki tərəfindən fizioloji mənimsənilməsinin zəifləməsi ilə əlaqədardır (Mineev, 2006).

### Cədvəl 1

*Yarpaqların element tərkibinin qiymətləndirilməsi və tövsiyə olunan tədbirlər*

| Element | Qiymətləndirmə | Mümkün nəticə                                                                | Tövsiyə                                                                                 |
|---------|----------------|------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------|
| N       | ↑ yüksək       | Həddindən artıq vegetativ inkişaf<br>Fe və B                                 | Azot gübrələrinin normasını azaltmaq<br>Fosfor gübrələrinin verilməsini məhdudlaşdırmaq |
| P       | ↑ yüksək       | mənimsənilməsinin zəifləməsi<br>Meyvənin keyfiyyətinin pisləşməsi<br>K və Mg | Kalium gübrələrinin normasını artırmaq                                                  |
| K       | ↓ aşağı        | mənimsənilməsinin azalması                                                   | Kalsium tərkibli gübrələri müvəqqəti dayandırmaq                                        |
| Ca      | ↑ yüksək       | Fotosintezin zəifləməsi                                                      | Maqnezium sulfat tətbiq etmək                                                           |
| Mg      | ↓ aşağı        | Dəmir xlorozu                                                                | Dəmir xelatlarından istifadə etmək                                                      |
| Fe      | ↓ aşağı        | Meyvə əmələgəlməsinin zəifləməsi                                             | Bor tərkibli yarpaq gübrələri tətbiq etmək                                              |
| B       | ↓ aşağı        | Yığılma və fitotoksiklik riski                                               | Mis tərkibli preparatların istifadəsini azaltmaq                                        |
| Cu      | ↑ yüksək       |                                                                              |                                                                                         |

Alınmış nəticələr göstərir ki, bitkilərin mineral qidalanmasına ayrı-ayrı elementlərin konsentrasiyasından daha çox onların qarşılıqlı nisbəti təsir göstərir.

## Cədvəl 2

*Müəyyən edilmiş əsas antaqonist qarşılıqlı təsirlər*

| Artıq olan element | Mənimsənilməsini məhdudlaşdırdığı element |
|--------------------|-------------------------------------------|
| P                  | Fe, B                                     |
| Ca                 | K, Mg                                     |
| Cu                 | Fe                                        |

Aparılmış tədqiqatlar göstərmişdir ki, intensiv meyvə bağlarında mineral qidalanmanın əsas problemi onların kimyəvi balansının pozulmasıdır (Peterburgskiy, 1989). Yarpaq nümunələrində fosfor (P), kalsium (Ca), azot (N) və misin (Cu) yüksək, kalium (K), dəmir (Fe), maqnezium (Mg) və borun (B) isə aşağı səviyyədə olduğu müəyyən edilmişdir (Kaçar & Katkat, 2023, s. 17).

Müəyyən edilmiş element antaqonizmi fertiqasiya proqramının yenidən tənzimlənməsini tələb edir. Yarpaq diaqnostikasının müntəzəm aparılması gübrələrin daha səmərəli istifadəsinə, element balansının bərpaşına və meyvə bağlarında məhsuldarlıqla yanaşı, məhsulun keyfiyyətinin yüksəldilməsinə imkan verir (Kaçar, 2016).

## Ədəbiyyat

- Hüseynov, A. M., Hüseynov, N. V. və Məmmədova, K. Y. (2018). *Aqrokimya*. Qanun Nəşriyyatı.
- Kaçar, B. (2016). *Fiziki və kimyasal toprak analizləri* (Bitki, toprak və gübrə analizləri–III). Nobel Akademik Yayıncılık.
- Kaçar, B., & Katkat, A. V. (2023). *Bitki besleme* (7. baskı). Nobel Akademik Yayıncılık.
- Məmmədov, Q. Ş. (2005). *Torpaqşünaslıq və torpaq coğrafiyası*.

- Mineev, V. G. (2006). *Agrokhimiya*. Izdatel'stvo Moskovskogo Gosudarstvennogo Universiteta.
- Peterburgskiy, A. V. (1989). *Agrokhimiya i sistema udobreniya sel'skokhozyaystvennykh kul'tur*. Agropromizdat.

## Benzol nüvəsində iki müxtəlif əvəzləyici olduqda elektrofil əvəzlənmə reaksiyalarının mexanizmi

Səbuhi Turabzadə 

**Açar sözlər:** *benzol nüvəsi, elektrofil əvəzlənmə reaksiyası, əvəzləyici qruplar, orto-meta-para istiqamətlənməsi, induktiv effekt, mezomer effekti,  $\sigma$ -kompleks, reaksiya mexanizmi*

**Keywords:** *benzene ring, electrophilic substitution reaction, substituent groups, ortho-meta-para orientation, inductive effect, mesomeric effect,  $\sigma$ -complex, reaction mechanism*

Benzol və onun törəmələrində elektrofil əvəzlənmə ( $S_EAr$ ) reaksiyaları üzvi kimyanın fundamental proseslərindən biri olmaqla, müxtəlif funksional qruplu aromatik birləşmələrin sintezində əsas yer tutur. Benzol halqasında artıq bir əvəzləyici olduqda, ikinci əvəzləyicinin daxil olması prosesi ciddi qanunauyğunluqlara tabedir. Bu istiqamətlənmə mövcud əvəzləyicilərin halqadakı elektron sıxlığına təsirindən (induktiv və mezon effektləri) və fəza amillərindən birbaşa asılıdır. Benzol nüvəsində iki müxtəlif əvəzləyici mövcud olduqda, reaksiyanın istiqaməti daha mürəkkəb xarakter daşıyır. Bu halda sistemdəki hər iki qrup halqanın reaktivliyinə və elektrofilin hücum edəcəyi mərkəzə öz təsirini göstərir.

Belə sistemlərdə elektrofilin oriyentasiyası iki faktorun qarşılıqlı təsiri ilə müəyyən edilir: birinci, əvəzləyicilərin aktivləşdirici və ya deaktivləşdirici qabiliyyətlərinin müqayisəsi; ikinci isə, fəza maneələri (sterik faktorlar) nəticəsində yaranan sterik gərginlik. Araşdırmada iki əvəzləyicili sistemlərdə  $S_EAr$  mexanizminin kinetik və termodinamik əsasları, arenium ionunun davamlılığı və əvəzləyicilərin elektron effektlərinin sinerjisi təhlil edilir. Bu tədqiqat spesifik kimyəvi sintezlərdə izomerlərin nisbətini proqnozlaşdırmaq və yüksək çıxımla məhsul əldə etmək üçün elmi əsaslar yaratmağı hədəfləyir.

### Nəzəri əsaslar

Benzol nüvəsində elektrofil əvəzlənmə reaksiyalarının sürəti və istiqaməti halqaya əvvəlcədən birləşmiş əvəzləyicilərin elektron donor və ya akseptor xassələri ilə müəyyən edilir. Bu təsir iki əsas mexanizm – induktiv (I) və mezon (M) effektləri vasitəsilə reallaşır.

1. İnduktiv effekt (I): Siqma rabitəsi boyunca elektron sıxlığının elektroneqativlik fərqiə görə yerdəyişməsidir. Elektron akseptor qruplar (məsələn,  $-NO_2$ ,  $-CN$ ) halqadan elektron sıxlığını özlərinə cəkməkə onu deaktivləşdirir, elektron donor qruplar (məsələn, alkil qrupları) isə induktiv effektlə elektron sıxlığını artırır.

2. Mezon (Rezonans) effekti (M): Benzol halqasındakı pi-elektron sistemi ilə əvəzləyicinin p- və ya d- orbitalları arasındakı qarşılıqlı təsirdir. Müsbət mezon effekti (+M) göstərən qruplar (məsələn,  $-OH$ ,  $-NH_2$ ,  $-OR$ ) halqaya elektron sıxlığını ötürərək onu aktivləşdirir və orto/para mövqelərində elektron sıxlığını artırır. Mənfi mezon effekti (-M) göstərən qruplar (məsələn,  $-CHO$ ,  $-COOH$ ,  $-NO_2$ ) isə halqadakı elektron sıxlığını azaldır və metafaza yönəldir.

### Əvəzləyicilərin təsnifatı

I növ əvəzləyicilər (aktivləşdiricilər): Halqanı aktivləşdirir və elektrofilin əsasən *orto*- və *para*- mövqələrinə hücumuna səbəb olur. Bura -OH, -NH<sub>2</sub>, -NHR, -OR, -CH<sub>3</sub> kimi qruplar daxildir (İstisna: Halogenlər aktivliyi azaltsa da, *orto/para*-istiqamətləndiricidir).

II növ əvəzləyicilər (deaktivləşdiricilər): Halqanın elektron sıxlığını kəskin azaldır və elektrofilin əsasən *meta*- mövqeyinə hücumunu şərtləndirir. Bura -NO<sub>2</sub>, -SO<sub>3</sub>H, -CHO, -COOH, -CN kimi qruplar aiddir.

Bu effektlərin cəmi (I+M) əvəzləyicinin ümumi təsirini və aralıq məhsul olan arenium ionunun (sigma-kompleks) enerjisini müəyyən edir. İki əvəzləyicili sistemlərdə bu qüvvələrin vektorial cəmi reaksiyanın hansı mövqedə daha sürətlə gedəcəyini göstərən əsas meyardır. Benzol nüvəsində iki əvəzləyici mövcud olduqda, elektrofilin (E<sup>+</sup>) hücum edəcəyi mövqe bu iki qrupun birgə təsirinin nəticəsidir. Bu halda "rəqabət" prinsipi işə düşür və aşağıdakı fundamental qaydalarla müəyyən edilir:

1. Aktivləşdirici qrupun üstünlüyü: Əgər əvəzləyicilərdən biri I növ (aktivləşdirici), digəri II növ (deaktivləşdirici) qrupdursa, istiqamətlənməni əsasən *I növ əvəzləyici* müəyyən edir. I növ qruplar halqadakı elektron sıxlığını artıraraq keçid halının (sigma-kompleks) enerjisini aşağı salır və reaksiyanı sürətləndirir. Bu halda elektrofilin hücumu I növ qrupun *orto*- və *para*- mövqələrinə yönəlir.

2. Əvəzləyicilərin gücü və sinerjisi: İki eyni növ əvəzləyici (məsələn, hər ikisi I növ) halqada olduqda, istiqamətlənmə *daha güclü aktivləşdirici qrup* tərəfindən idarə olunur. Məsələn, fenol törəmələrində -OH qrupu, -CH<sub>3</sub> qrupuna nisbətən daha güclü

aktivləşdiricidir və elektrofilin hücumunu öz mövqelərinə (orto və para) istiqamətləndirir.

3. Sterik amillərin (fəza maneələrinin) təsiri: İstiqamətlənmə zamanı təkcə elektron effektləri deyil, həm də fəza amilləri mühüm rol oynayır. Əgər aktivləşdirici qrupun *orto*- mövqeyi böyük həcmli bir əvəzləyici ilə tutulubsa və ya yaxınlıqdadırsa, elektrofilin buraya hücumu çətinləşir. Bu halda reaksiya sterik cəhətdən daha əlverişli olan *para*- mövqeyinə doğru sürüşür.

4. "Meta" istiqamətlənmənin xüsusi halları: Əgər hər iki əvəzləyici II növ (deaktivləşdirici) qrupdursa, onların aktivləşdirmə gücləri çox aşağıdır. Bu zaman elektrofil daha az deaktivə olunmuş mövqeyə hücum edir. İki əvəzləyicinin qarşılıqlı *meta*- mövqeləri elektron sıxlığının ən yüksək olduğu (və ya deaktivləşmənin ən az olduğu) nöqtələr kimi elektrofil üçün əsas hədəfə çevrilir.

Bu rəqabət mühiti sintez strategiyasında çox vacibdir: əgər hər iki qrup əvəzlənməni eyni mövqeyə yönəldirsə (kooperativ təsir), məhsulun çıxımı yüksək olur; əks halda, izomer qarışıqlarının alınması qaçılmazdır və bu, məhsulun saflaşdırılmasını çətinləşdirir.

#### *Elmi-praktiki nəticələri əks etdirən yekun hissə*

Benzol törəmələrində elektrofil əvəzlənmə reaksiyalarının istiqamətlənmə qanunauyğunluqlarının dərinlən dərəcədə edilməsi sintez strategiyasının uğurla planlaşdırılması üçün həlledici əhəmiyyət kəsb edir. Xüsusilə də çoxfunksiyalı aromatik sistemlərin sintezində əvəzləyicilərin ardıcılığı və onların elektron-fəza təsirləri nəzərə alınmalıdır.

*Ardıcılıq seçimi:* Sintez zamanı əvvəlcə halqanı aktivləşdirən, daha sonra isə lazım olan digər qrupların daxil edilməsi strategiyası izomer təmizliyi baxımından ən effektiv yanaşmadır.

*Analitik nəzarət:* Sintez edilmiş məhsulların quruluşunun təsdiqində NMR spektroskopiyası (məsələn, 2-merkaptonaftol kimi müasir sintezlərdə olduğu kimi) və İR spektroskopiya kimi fiziki-kimyəvi üsullardan istifadə alınan izomerin (orto, meta, yoxsa para) dəqiq müəyyən edilməsinə imkan verir.

*Texnoloji optimallaşdırma:* Müxtəlif sənaye qurğularında (məsələn, absorbsion qurğular) istifadə olunan aromatik reagentlərin sintezi zamanı reaksiyanın temperatur rejimi və həlledici mühiti elektrofilin hücum istiqamətini dəyişərək məhsulun çıxımını tənzimləməyə kömək edir.

İki əvəzləyicili benzol sistemlərində elektrofil əvəzlənmə sadəcə elektron donor-akseptor rəqabəti deyil, həm də fəza maneələri və keçid hallarının enerjisi ilə idarə olunan kompleks bir mexanizmdir. Bu mexanizmin riyazi və struktur cəhətdən proqnozlaşdırılması, müasir kimya elminin, o cümlədən petrokimya və üzvi sintez sahələrinin qarşısında duran əsas vəzifələrdəndir. Aparılan tədqiqatlar göstərir ki, əvəzləyicilərin təsirini düzgün qiymətləndirməklə daha yüksək seçiciliyə malik və yan məhsullardan təmizlənmiş sintez metodikalarının işlənməsi mümkündür.

## Bitki yağlarının oksidləşmə prosesində antioksidantların təsirinin (C vitamini) yodometrik üsulla tədqiqi

Rüqayyə Həsənova 

**Açar sözlər:** bitki yağı, oksidləşmə, askorbin turşusu, antioksidant, peroksid, yodometriya

**Keywords:** vegetable oil, oxidation, ascorbic acid, antioxidant, peroxide, iodometry

Bitki yağlarının saxlanması zamanı baş verən oksidləşmə prosesi onların qida keyfiyyətinin və bioloji dəyərinin azalmasına səbəb olur. Bu tədqiqatda rafinə olunmuş günəbaxan yağının fotooksidləşməsi laboratoriya şəraitində modelləşdirilmiş və askorbin turşusunun (C vitamini) antioksidant təsiri yodometrik üsulla keyfiyyət baxımından qiymətləndirilmişdir. Müqayisəli müşahidələr göstərmişdir ki, C vitamini əlavə edilmiş nümunələrdə oksidləşmə əlamətləri nəzarət nümunəsi ilə müqayisədə daha zəif olmuşdur. Əldə olunan nəticələr askorbin turşusunun sərbəst radikal reaksiyalarını ləngitdiyini və lipidlərin oksidləşməsinə qarşı qoruyucu təsir göstərdiyini təsdiq edir.

Bitki yağlarının tərkibində yüksək miqdarda doymamış yağ turşuları olduğundan, onlar oksigen, işıq və temperaturun təsiri altında asanlıqla oksidləşirlər (Abbasov, 2020).

Bu proses nəticəsində hidroperoksidlər və digər ikinci dərəcəli oksidləşmə məhsulları əmələ gəlir ki, bu da yağların dadına, qoxusuna və qida dəyərinə mənfi təsir göstərir. Oksidləşmə sürətinin azaldılması üçün təbii və sintetik antioksidantlardan istifadə olunur. Təbii antioksidantlardan biri olan askorbin turşusu sərbəst radikallarla reaksiyaya girərək zəncirvari oksidləşmə reaksiyalarını zəiflədə bilir (Əliyev, 2018). Buna görə də C vitamininin bitki yağlarının oksidləşməsinə təsirinin öyrənilməsi həm qida kimyası, həm də qida məhsullarının saxlanması baxımından əhəmiyyətlidir (Frankel, 2016).

Tədqiqatda rafinə olunmuş günəbaxan yağı, təbii C vitamini mənbəyi kimi limon şirəsi, buzlu sirkə turşusu, xloroform, kalium yodid (KI), 0,01 N natrium tiosulfat ( $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ ) məhlulu və nişasta indikatorundan istifadə edilmişdir.

İki nümunə hazırlanmışdır: birinci nümunə nəzarət qrupu kimi yalnız günəbaxan yağından, ikinci nümunə isə günəbaxan yağına limon şirəsi əlavə edilməklə hazırlanmışdır. Hər iki nümunə 72 saat ərzində birbaşa günəş işığında saxlanılmışdır. Sonra yağ nümunələrində əmələ gəlmiş peroksidlərin miqdarı yodometrik üsulla keyfiyyət baxımından qiymətləndirilmişdir. Analiz zamanı yağ nümunəsi sirkə turşusu–xloroform qarışığında həll edilmiş, kalium yodid əlavə edilərək ayrılan sərbəst yod natrium tiosulfat məhlulu ilə nişasta indikatorunun iştirakı ilə titrlənmişdir.

Aparılmış müşahidələr göstərmişdir ki, nəzarət nümunəsində yodun ayrılması daha intensiv olmuş və titrləmə zamanı rəng dəyişməsi daha aydın müşahidə edilmişdir. Bu hal yağın oksidləşməsi nəticəsində daha çox peroksid birləşmələrinin əmələ gəldiyini göstərir.

C vitamini əlavə edilmiş nümunədə isə rəng dəyişməsi zəif olmuş, sərbəst yodun ayrılması daha az müşahidə edilmişdir. Bu nəticə askorbin turşusunun sərbəst radikalları neytrallaşdıraraq lipidlərin oksidləşmə prosesini ləngitməsi ilə izah olunur. Beləliklə, C vitamininin antioksidant təsiri nəticəsində yağın oksidləşmə dərəcəsi azalmışdır.

Keyfiyyət müşahidələri göstərir ki, yodometrik üsul bitki yağlarında oksidləşmə prosesinin müqayisəli qiymətləndirilməsi üçün sadə və etibarlı laboratoriya metodlarından biri hesab edilə bilər. Aparılan tədqiqat nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, askorbin turşusu bitki yağlarının oksidləşmə prosesini zəiflədən effektiv təbii antioksidantdır. C vitamini əlavə edilmiş nümunələrdə oksidləşmə əlamətlərinin azalması onun sərbəst radikalların aktivliyini aşağı saldığını göstərmişdir. Yodometrik üsul isə oksidləşmə prosesinin keyfiyyətə qiymətləndirilməsi üçün sadə, praktik və etibarlı metod kimi özünü doğrultmuşdur. Gələcək tədqiqatlarda müxtəlif antioksidantların və onların müxtəlif qatılıqlarının yağların oksidləşmə sabitliyinə təsirinin kəmiyyət baxımından öyrənilməsi məqsədəuyğun hesab edilir.

## Ədəbiyyat

- Abbasov, V. (2020). *Qida kimyası*. Elm nəşriyyatı.  
Əliyev, V. (2018). *Üzvi kimya*.  
Frankel, E. N. (2016). *Lipid Oxidation*.

# CONTENTS

## İÇİNDƏKİLƏR

|                                                                                                                                                                                                                                                                  |    |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <b>Aliona Cotovaia, Victor Tsapkov, Aurelian Gulea</b><br>Synthesis, Characterization, and Antioxidant Evaluation<br>of Mixed-Ligand Copper(II) Complexes Based<br>on Salicylaldehyde 4-(3-Methoxyphenyl)<br>thiosemicarbazone and Sulfonamide Derivatives ..... | 5  |
| <b>Sevinc Qarayeva</b><br>$\alpha$ -aminyag turşusunun şiff əsası ilə nikel(II)<br>kompleksinin alınması və quruluşu.....                                                                                                                                        | 8  |
| <b>Chichak Seyidova</b><br>Comparative Synthesis and Structural Characterization of<br>Mn(II)-Memory Effect and Ion-Imprinted PVP-Based<br>Polymers .....                                                                                                        | 12 |
| <b>Khayala Seyidova, Javid Gasimov</b><br>Cold-Pressed Sunflower Press Cake as a Bio-Based<br>Filler for Polyethylene Composites: Preparation,<br>Defatting, Alkaline Treatment, and Processing .....                                                            | 15 |
| <b>Vasiliï Graur, Olga Garbuz, Ianina Graur</b><br>Synthesis and Anticancer Activity of 2-Formylpyridine<br>4-Allylthiosemicarbazone and Its Copper(II)<br>Dichloroacetate Complex against THP-1 Cells .....                                                     | 19 |
| <b>Sevda Aliyeva</b><br>Investigation of the Optical Properties of Cd <sub>3</sub> Sb <sub>2</sub> S <sub>8</sub> Based<br>on UV–Vis Spectroscopy and Tauc Analysis .....                                                                                        | 21 |
| <b>Bəhrüz Məmmədov</b><br>Bərpa olunan xammallar əsasında ekoloji cəhətdən<br>təhlükəsiz kimyəvi sintez proseslərinin işlənməsi .....                                                                                                                            | 26 |
| <b>Hajar Aslanova, Nizami Zeynalov</b><br>Density Functional Theory Comparison of Methyl<br>Iodide and Benzyl Chloride in 4-Vinylpyridine Dimer<br>Quaternization .....                                                                                          | 30 |

|                                                                  |    |
|------------------------------------------------------------------|----|
| <b>Nigar Shikhverdiyeva, Ulviyya Mammadova</b>                   |    |
| Preparation of a Nickel-Containing Chitosan/PVA                  |    |
| Hybrid Nanocomposite for Benzene Hydrogenation.....              | 37 |
| <b>Telli Novruzova, Sabina Ismayilova</b>                        |    |
| Synthesis, Physicochemical Characterization, and Electrical      |    |
| Conductivity of Poly( <i>m</i> -phenylenediamine) and Its Cu(II) |    |
| Coordination Complex.....                                        | 41 |
| <b>Tərlan İbadzadə</b>                                           |    |
| Neftçixarmada AQP çöküntülərinin qarşısının alınması             |    |
| üçün effektiv kompozit sistem .....                              | 44 |
| <b>Gülnarə Abbasova</b>                                          |    |
| Meyvə bitkilərinin yarpaqlarında makro və                        |    |
| mikroelementlərin disbalansının diaqnostikası mineral            |    |
| qidalanmanın optimallaşdırılmasının əsası kimi.....              | 50 |
| <b>Səbuhi Turabzadə</b>                                          |    |
| Benzol nüvəsində iki müxtəlif əvəzləyici olduqda elektrofil      |    |
| əvəzlənmə reaksiyalarının mexanizmi.....                         | 54 |
| <b>Rüqayyə Həsənova</b>                                          |    |
| Bitki yağlarının oksidləşmə prosesində                           |    |
| antioksidantların təsirinin (C vitamini) yodometrik              |    |
| üsulla tədqiqi .....                                             | 59 |

**Redaksiyanın ünvanı**

AZ1073

Ünvan: A.M.Şərifzadə 19,  
Yasamal r-nu, Bakı, Azərbaycan  
Tel.: +994 99 805 67 68  
+994 99 808 67 68  
e-poçt: [chemistry.bek@gmail.com](mailto:chemistry.bek@gmail.com)

**Editorial address**

AZ1073

Address: 19 A. M. Sharifzade St.,  
Yasamal Dist., Baku, Azerbaijan  
Phone: +994 99 805 67 68  
+994 99 808 67 68  
e-mail: [chemistry.bek@gmail.com](mailto:chemistry.bek@gmail.com)

İmzalandı: 13.09.2026  
Onlayn çap: 17.09.2026  
Kağız formatı: 60x84, 1/16  
H/n həcmi: 4 ç.v.  
Sifariş: 222

Signed: 13.09.2026  
Online publication: 17.09.2026  
Format: 60x84, 1/16  
Stock issuance: 4 p.s.  
Order: 222

---

aem.az saytında çap edilmişdir.  
Ünvan: A.M.Şərifzadə 19,  
Yasamal r-nu, Bakı, Azərbaycan  
Tel.: +994 50 209 59 68  
e-poçt: [info@aem.az](mailto:info@aem.az)

---

It has been published on aem.az  
Address: 19 A. M. Sharifzade St.,  
Yasamal Dist., Baku, Azerbaijan  
Phone: +994 50 209 59 68  
e-mail: [info@aem.az](mailto:info@aem.az)

