

QUANTUM CHEMICAL STUDY OF HYDROGENATION OF SUNFLOWER OIL OVER NICKEL CATALYSTS

Zh.A. Sailau^{1*}, N.Zh. Almas², K. P. Aimaganbetov², B. A. Kurbanova²,
K. Toshtay¹, A.A. Aldongarov³

¹Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

²International Science Complex Astana, Astana, Kazakhstan

³L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

*E-mail: sailau.online@gmail.com

Abstract. *Introduction.* Vegetable oil hydrogenation is vital in edible margarine production, preventing rapid deterioration caused by double bond oxidation. Hydrogenation preserves vegetable oils by countering double bond oxidation, ensuring product quality. During this process, geometric isomers, notably trans isomers, form, driven by thermodynamic stability. Nickel catalysts are crucial in the oil and ghee industry for efficient hydrogenation. *Purpose.* Our study investigates the hydrogenation of sunflower oil with nickel catalysts, aiming to uncover molecular dynamics and interactions shaping this process. We reveal essential insights into linoleic acid-nickel interactions, elucidating hydrogenation mechanisms and implications for glycerol production. *Methodology.* Quantum chemical calculations and HyperChem software were employed to study the linoleic acid-nickel interaction during hydrogenation. This study delves into the hydrogenation of sunflower oil using nickel catalysts, employing quantum chemical calculations and HyperChem software. *Results.* Our research elucidates robust linoleic acid-nickel interactions through optimized structures, molecular electrostatic maps, molecular orbitals, bond lengths, and energies. These findings enhance our understanding of hydrogenation mechanisms. Additionally, we found that nickel-metal interactions primarily drive glycerol production from biofuels, promising efficiency gains. *Conclusion.* Our study yields insights into vegetable oil hydrogenation with nickel catalysts, optimizing processes in the oil and ghee industry. Furthermore, it has implications for glycerol production from biofuels, offering potential advancements in this area.

Keywords: Vegetable oils, hydrogenation method, nickel catalysts, biofuel, quantum chemical calculations

<i>Sailau Zhassulan Askhatuly</i>	<i>3rd year PhD student. E-mail: sailau.online@gmail.com</i>
<i>Almas Nurlan Zhumabekuly</i>	<i>PhD, Chief Researcher. E-mail: nurlanalmasov@gmail.com</i>
<i>Kazybek Aimaganbetov</i>	<i>PhD candidate, Researcher. E-mail: kazybek012@gmail.com</i>
<i>Bayan Kurbanova</i>	<i>Master, Researcher. E-mail: baran.kurbanova@nu.edu.kz</i>
<i>Toshtay Kainaubek</i>	<i>PhD, Senior Lecturer. E-mail: kainaubek.toshtay@gmail.com</i>
<i>Aldongarov Anuar Akykhanovich</i>	<i>PhD, Associated Professor. E-mail: enu-2010@yandex.kz</i>

Citation: Zh.A.Sailau, N.Zh.Almas, K.P.Aimaganbetov, B.A.Kurbanova, K.Toshtay, A.A.Aldongarov. Quantum chemical study of hydrogenation of sunflower oil over nickel catalysts. *Chem. J. Kaz.*, **2023**, 3(83), 118-126. (In Kaz.). DOI: <https://doi.org/10.51580/2023-3.2710-1185.33>

НИКЕЛЬ КАТАЛИЗАТОРЛАРЫНДА КҮНБАҒЫС МАЙЫН ГИДРЛЕУ ПРОЦЕСІН КВАНТТЫҚ ХИМИЯЛЫҚ ЗЕРТТЕУ

**Ж. А. Сайлау^{1*}, Н. Ж. Алмас², К. П. Аймағанбетов², Б. А. Құрбанова²,
Қ. Тоштай¹, А. А. Алдонгаров³**

¹Әл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық Университеті, Алматы, Қазақстан

²Астана халықаралық ғылыми кеішені, Астана, Қазақстан

³Л. Н. Гумилев атындағы Еуразия Ұлттық Университеті, Астана, Қазақстан

*E-mail: sailau.online@gmail.com

Түйіндеме. *Кіріспе.* Өсімдік майларын гидрлеу тағамдық маргариндерді өндіруде шешуші рөл атқарады. Гидрогенизацияланбаған майлар қос байланыстарының тотығуына байланысты тез нашарлайды, нәтижесінде жағымсыз дәм мен иіс пайда болады. Дегенмен, гидрлеу арқылы бұл жағымсыз процестер жеңілдетіліп, қымбат емес майларды бағалы қатты майларға айналдыруға мүмкіндік береді. Айта кету керек, өсімдік майларының көпшілігінде негізінен cis-конфигурацияланған қос байланыс май қышқылдары бар. Соған қарамастан, гидрлеу процесінде май қышқылдарының cis изомерімен салыстырғанда термодинамикалық тұрақтылығы жоғары болғандықтан геометриялық изомерлер, әсіресе транс изомерлері түзіледі. *Мақсат.* Мұнай және май өнеркәсібінде никель катализаторларын пайдалану гидрлеу процестері үшін үлкен маңызға ие. Никельді катализаторлар өсімдік майларының түрленуін жеңілдетеді, соңғы өнімнің сапасы мен жарамдылығын арттыруға ықпал етеді. *Әдістеме.* Бұл зерттеуде біз никель катализаторларын пайдалана отырып, күнбағыс майының гидрлеу механизміне зерттеу жүргіздік. Молекулалық өзара әрекеттесулер мен динамика туралы түсінік алу үшін біз кванттық химиялық есептеулерді және NucleoChem бағдарламалық құралын қолдандық. *Нәтижелер.* Біздің зерттеуіміз гидрогенизация кезінде линол қышқылы мен никель металы арасындағы күрделі өзара әрекетке жарық түсіріп, маңызды нәтижелер берді. Оңтайландырылған құрылымдарды, молекулалық электростатикалық карталарды, молекулалық орбитальдарды, байланыс ұзындықтарын және энергияларды талдау арқылы біз линол қышқылы мен никель металы арасындағы берік молекулааралық әрекеттесулерді анықтадық. Бұл нәтижелер никель катализаторларының қатысуымен гидрлеу реакцияларын жүргізетін іргелі процестерді түсіндіреді, бұл негізгі механизмдер туралы түсінігімізді арттырады. Сонымен қатар, біздің зерттеуіміз биоотыннан глицерин алу, ең алдымен, никель металының линол қышқылының қос байланыстарымен әрекеттесуінен тұратынын анықтады. Бұл білім өнеркәсіптің әртүрлі салаларындағы құнды құрамдас бөлігі болып табылатын глицерин өндірудің тиімді және тұрақты процестерін дамытуға ықпал етеді. *Қорытынды.* Қорытындылай келе, біздің зерттеуіміз никель катализаторлары арқылы өсімдік майларын гидрлеуге қатысты құнды түсініктер береді. Бұл процеске қатысатын молекулалық өзара әрекеттесулер мен механизмдерді түсіну гидрогенизация процестерін оңтайландыруға, мұнай және май өнеркәсібінде алынған өнімдердің сапасы мен жарамдылығын жақсартуға ықпал етеді. Сонымен қатар, біздің қорытындыларымыз биоотыннан глицерин өндіруге әсер етеді, бұл осы саладағы әлеуетті жетістіктерді ұсынады.

Түйінді сөздер: Өсімдік майлары, гидрлеу әдісі, никель катализаторлары, биоотын, кванттық химиялық есептеулер

<i>Сайлау Жасұлан Асхатұлы</i>	<i>3-ші курс докторанты</i>
<i>Алмас Нұрлан Жұмабекұлы</i>	<i>PhD, бас ғылыми қызметкер</i>
<i>Қазыбек Аймағанбетов</i>	<i>3-ші курс докторанты, ғылыми қызметкер</i>
<i>Баян Құрбанова</i>	<i>магистр, ғылыми қызметкер</i>
<i>Тоштай Қайнаубек</i>	<i>PhD</i>
<i>Алдонгаров Ануар Ақылханович</i>	<i>PhD, доцент</i>

1. Кіріспе

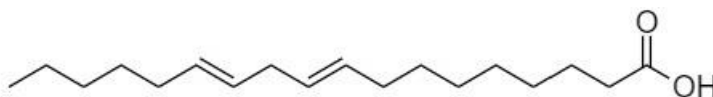
Май өнеркәсібі никель катализаторларын гидрлеу процесіне катализатор ретінде пайдаланады [1-3]. Гидрлеу процесі 0.3–0.5 МПа сутегі қысымында және 160°C-тан 180°C-қа дейінгі температурада жүргізіледі [4,5]. Никель мен оның қосылыстары канцерогенді және аллергенді болғандықтан, оны гидрлеуден кейін бөлу үшін қымбат операциялар қажет. Ең бастысы, никель катализаторларында алынған өнімдерде транс май қышқылы изомерлерінің көп мөлшері (20%-40%) болады [6-9]. Көптеген зерттеушілер транс май қышқылын тұтыну дүние жүзіндегі өлім-жітімнің негізгі бөлігін құрайтын жүрек-қан тамырлары ауруларының, сондай-ақ онкологиялық аурулардың, семіздіктің, II типті қант диабетінің, овуляциялық бедеуліктің, жүйке жүйесі ауруларының жоғары қауіпімен байланысты екенін айтады [10-15]. Дүниежүзілік денсаулық сақтау ұйымы транс май қышқылын тұтынуды тәуліктік энергия қажеттілігінің 1.0% аспауы үшін шектеуді ұсынады [16]. Дания 2003 жылы ішінара гидрленген өсімдік майларын қолдануға тыйым салды, бұл Еуропадағы бірінші ел болды. Еуропалық Одақ май мен мұнай өнімдерінде транс изомерлер шегін белгіледі — 2%-дан аспайды [17]. Кеден одағының 024/2011 техникалық регламентіне сәйкес 2018 жылдың 1 қаңтарынан бастап спредтердегі, сүт майын алмастырғыштардағы, жұмсақ және қатты маргарин түріндегі транс изомерлер нормасы да енгізілді – бұл 2.0%-дан аспайды [18].

Көптеген зерттеулер родий, палладий, рутений және платина сияқты зияндығы төмен катализаторлар никельге балама бола алатынын хабарлады. Платина тобындағы металдар негізіндегі катализаторларды пайдалану гидрогенизация процесін никель жүйелерімен салыстырғанда жұмсақ жағдайларда жүргізуге мүмкіндік береді, ал алынған өнімде транс изомерлерінің мөлшері аз болады [19-20]. Туняратчатанон және т.б. [21] және МакАрдл және т.б. [22] зерттеулері бойынша биметаллдық катализаторды (палладий-магний, платина-магний және платина-никель) генерациялау үшін катализатор құрамын өзгерту белсенді фазалардың электрондық құрылымын өзгертеді, бұл соңғы өнімдегі транс изомерлер құрамының мөлшерін азайтуға көмектеседі. Гидрлеу процесінде транс изомерлер түзілуінің төмендеуіне ықпал ететін жағдайлар анықталды, олар төмен технологиялық температура, жоғары сутегі қысымы, катализатордың төмен концентрациясы, мұнай мен сутегінің қарқынды араласуы болды. Дегенмен, сол никель катализаторлары өнеркәсіптік катализаторлар ретінде әлі де қолданылады. Оның үстіне көптеген батыс елдерінде олар қатты май және мұнай өнімдерін алу үшін өсімдік майын ішінара гидрлеу әдісінен толығымен бас тартып, трансэтерификация процесін артық көрді. Бұл жұмыста күнбағыс майының ішінара гидрленуі коммерциялық никель катализаторы мен төмен пайыздық тірек платина катализаторы арқылы салыстырылды, транс изомерлер мөлшері өте аз гидрленген өнімдерді алу мүмкіндігі көрсетілген [23-35].

Мұнда біз никель катализаторы арқылы күнбағыс майын гидрлеу процесін зерттеп, кванттық химиялық есептеуді қолданамыз. Біз кванттық химиялық есептеулерді, PM3 әдісін және HyperChem бағдарламалық құралын енгіземіз. Атап айтқанда, біз оңтайландырылған құрылымдарды, молекулалық электростатикалық карталарды, молекулалық орбитальдарды және никель катализаторы арқылы күнбағыс майын гидрлеудің энергияларын зерттейміз.

2. Тәжірибелік бөлім

Кванттық химиялық есептеулер HyperChem бағдарламалық жасақтамасымен оңтайландырылған құрылымдарды, молекулалық орбитальдарды, молекулалық электростатикалық карталарды және өзара әрекеттесу энергияларын алу үшін PM3 әдісі арқылы орындалды.



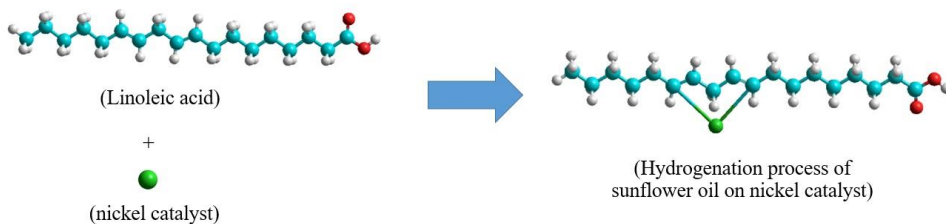
Сурет 1 - Линол қышқылының 2D химиялық құрылымдары

Осыған байланысты линол қышқылы күнбағыс майының май қышқылдарының құрамының есептеу үлгісі ретінде, ал катализатор үшін үлгі ретінде никель (Ni) таңдалды. Бастапқыда кванттық химиялық есептеулер сәйкесінше линол қышқылының және Ni-дің таза түрі үшін жүргізілді. Содан кейін күнбағыс майының Ni катализаторы арқылы гидрлеу процесін имитациялау үшін линол қышқылының Ni-мен қоспасы кванттық химиялық есептеулер арқылы модельденді. Стационарлық нүктелер аналитикалық есептеулер арқылы энергияның екінші туындылары үшін олардың потенциалдық энергия беттері үшін шынайы минимумдар болды.

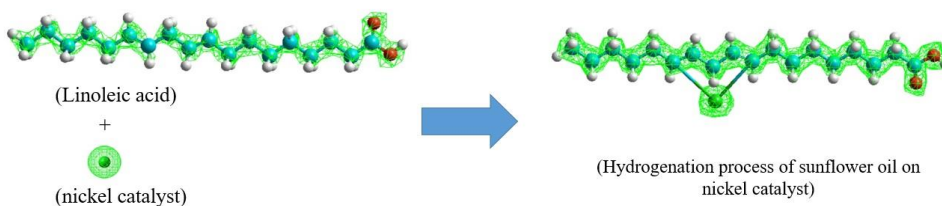
3. Нәтижелер мен талқылау

Кванттық химиялық есептеулер

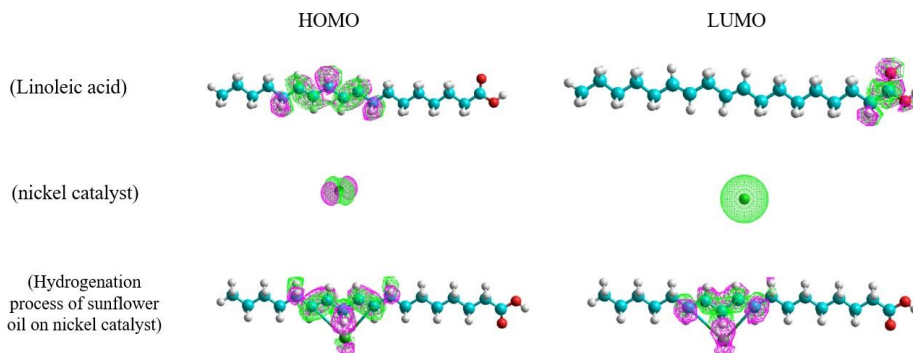
Бұл жұмыста никель катализаторында күнбағыс майының гидрлену процесін кванттық химиялық есептеулер арқылы түсіну үшін линол қышқылы, никель және линол қышқылының никельмен кешені зерттелді. Кванттық химиялық есептеулер арқылы линол қышқылы, никель және линол қышқылының никельмен кешені үшін оңтайландырылған құрылымдар, молекулалық электростатикалық карталар молекулалық орбитальдар мен энергиялар есептелді. Никель металы біздің есептеулерімізде линол қышқылының қанықпаған бөлігі (қос байланыстары бар) арқылы үйлестірілді (2-4 сурет).



Сурет 2 - Линол қышқылының, никельдің және линол қышқылының никельмен кешенінің оңтайландырылған құрылымдары. Түс кілгі: сұр: сутегі; көк: көміртегі; қызыл: оттегі; жасыл: никель



Сурет 3 - Линол қышқылының, никельдің және никельмен линол қышқылының кешенінің молекулалық электростатикалық карталары



Сурет 4 - Линол қышқылының, никель катализаторының және никель катализаторы бар линол қышқылының кешенінің ең жоғары орналасқан молекулалық орбитальдары (HOMO) және ең төменгі бос молекулалық орбитальдары (LUMO)

Бастапқыда линол қышқылы, никель және никель катализаторы бар линол қышқылы кешені үшін оңтайландырылған құрылымдар 2-суретте бейнеленген. Никель линол қышқылының қанықпаған (қосбайланыс) жағымен үйлестіруші агент ретінде әрекет ететінін анық көруге болады. Сонымен қатар, никельмен линол қышқылының арасындағы қысқа қашықтық тиісінше 3.74 Å және 3.49 Å болды.

Екіншіден, таза линол қышқылының, никельдің және линол қышқылының никельмен кешенінің оңтайландырылған геометриялық

құрылымдарының молекулалық электростатикалық карталары егжей-тегжейлі зерттелді. 3-суретте линол қышқылының, никельдің және линол қышқылының никельмен кешенінің молекулалық электростатикалық карталарының нәтижелері көрсетілген. Зарядтар линол қышқылымен никельдің айналасында локализацияланғанын атап өтуге болады.

Үшіншіден, НОМО және LUMO молекулалық орбитальдары линол қышқылының, никельдің және линол қышқылымен никель кешенінің оңтайландырылған құрылымдары үшін суреттелді. 4-суретте линол қышқылының, никельдің және линол қышқылының никельмен кешенінің НОМО-LUMO нәтижелері бейнеленген. 4-суретте ең жоғары орналасқан молекулалық орбиталь (НОМО) және ең төменгі бос молекулалық орбиталь (LUMO) никельмен байланысқан линол қышқылының қанықпаған қос байланыс тобының айналасында орналасқанын атап өтуге болады. Сонымен қатар, НОМО энергиясы -9.42 эВ болса, LUMO энергиясы 0.66 эВ болды. Демек, НОМО энергиясымен LUMO энергиясы арасындағы айырмашылық жоғары, бұл катализатордың химиялық реакцияға түспейтінін және күнбағыс майының гидрогенизация реакциясының жылдамдығын арттыруы мүмкін.

Төртіншіден, линол қышқылының жалпы энергиясы -74160.5 ккал/моль, ал никельдің жалпы энергиясы -23810.1 ккал/моль, ал линол қышқылының никельмен кешенінің жалпы энергиясы -98014.2 ккал/моль болды. Мұнда осы каталитикалық процестің байланыс энергиясын ($E_{\text{байланыс}}$) төмендегідей есептеуге болады:

$$E_{\text{байланыс}} = -98014.2 \text{ ккал/моль} - (-23810.1 \text{ ккал/моль} - 74160.5 \text{ ккал/моль}) = -43.6 \text{ ккал/моль}$$

Осыған байланысты, жоғарыда келтірілген есептеуде байқалғандай $E_{\text{байланыс}}$ мәні төмен, күнбағыс майын гидрлеу үшін никель катализаторының артықшылықты каталитикалық белсенділігін көрсетеді.

4. Қорытынды

Бұл жұмыста кванттық химиялық есептеулер мен HyperChem бағдарламалық құралын енгізу арқылы никель катализаторының қатысуымен күнбағыс майының гидрлеу механизмін зерттедік.

Қорытындылай келе, никель катализаторы арқылы күнбағыс майын гидрлеу процесі кванттық химиялық есептеулер арқылы модельденді. Күнбағыс майын гидрлеу процесінің есептеу моделі ретінде линол қышқылының никельмен комплексі таңдалды. Кванттық химиялық есептеу нәтижесі никель линол қышқылының қанықпаған қос байланыс жағымен координатасы төмен байланыс энергиясы және НОМО-LUMO энергия айырмашылығы жоғары екенін көрсетті. Есептік зерттеудің қазіргі жұмысы никель катализаторы арқылы күнбағыс майының гидрлену реакциясын жобалауға және жақсартуға көмектесуі мүмкін.

Қаржыландыру: Бұл зерттеуге Қазақстан Республикасы Білім және ғылым министрлігі Ғылым комитетінің №АР14871389, №АР14871087 және №АР08052504 гранты қолдау көрсетті.

Мүдделер қақтығысы: Авторлар осы мақалада келтірілген деректерде авторлар арасында мүдделер қақтығысының жоқтығын мәлімдейді.

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОЧИСТКИ БИОТОПЛИВА ОТ СВОБОДНЫХ ЖИРНЫХ КИСЛОТ ИОННЫМИ ЖИДКОСТЯМИ НА МОЛЕКУЛЯРНОМ УРОВНЕ

Ж.А. Сайлау^{1}, Н.Ж. Алмас², К. П. Аймаганбетов², Б. А. Курбанова²,
К. Тоштай¹, А.А. Алдонгаров³*

¹Казхский Национальный Университет имени Аль-Фараби, Алматы, Казахстан

²Международный научный комплекс Астана, Астана, Казахстан

³Евразийский Национальный Университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

*E-mail: sailau.online@gmail.com

Резюме. *Введение.* Гидрогенизация растительных масел играет решающую роль в производстве пищевых маргаринов. Негидрированные масла быстро портятся из-за окисления их двойных связей, что приводит к неприятному вкусу и запаху. Однако с помощью гидрирования эти нежелательные процессы смягчаются, что позволяет превращать дорогие масла в ценные твердые масла. Стоит отметить, что большинство растительных масел содержат преимущественно цис-конфигурированные жирные кислоты с двойными связями. Тем не менее, в процессе гидрирования образуются геометрические изомеры, особенно транс-изомер, благодаря его превосходной термодинамической стабильности по сравнению с цис-изомером жирных кислот. *Цель.* Использование никелевых катализаторов в производстве масла и топленого масла имеет огромное значение для процессов гидрогенизации. Никелевые катализаторы облегчают преобразование растительных масел, способствуя повышению качества и удобства использования конечных продуктов. *Методология.* В данном исследовании мы провели исследование механизма гидрирования подсолнечного масла с использованием никелевых катализаторов. Чтобы получить представление о молекулярных взаимодействиях и динамике, мы использовали квантово-химические расчеты и программное обеспечение HyperChem. *Результаты.* Наше исследование дало важные результаты, проливая свет на сложное взаимодействие между линолевой кислотой и металлическим никелем во время гидрирования. Благодаря анализу оптимизированных структур, молекулярных электростатических карт, молекулярных орбиталей, длина связей и энергий мы выявили надежные межмолекулярные взаимодействия между линолевой кислотой и металлическим никелем. Эти результаты проливают свет на фундаментальные процессы, которые управляют реакциями гидрирования в присутствии никелевых катализаторов, улучшая наше понимание лежащих в их основе механизмов. Более того, наше исследование показало, что производство глицерина из биотоплива в первую очередь связано с взаимодействием металлического никеля с двойными связями линолевой кислоты. Эти знания способствуют разработке более эффективных и устойчивых процессов производства глицерина, ценного компонента в различных отраслях промышленности. *Заключение.* Таким образом, наше исследование дает ценную информацию о гидрировании растительных масел с использованием никелевых катализаторов. Понимание молекулярных взаимодействий и механизмов, вовлеченных в этот процесс, может способствовать оптимизации процессов гидрирования, повышению качества и удобства использования получаемых продуктов в производстве масла и гхи. Кроме того, наши результаты имеют значение для производства глицерина из биотоплива, предлагая потенциальные достижения в этой области.

Ключевые слова. растительные масла, метод гидрирования, никелевые катализаторы, биотопливо, квантово-химические расчеты

<i>Сайлау Жасулан Асхатулы</i>	<i>докторант 3-го курса</i>
<i>Алмас Нурлан Жумабекович</i>	<i>PhD, главный научный сотрудник</i>
<i>Тоштай Кайнаубек</i>	<i>PhD</i>
<i>Казыбек Аймаганбетов</i>	<i>докторант 3-го курса, научный сотрудник</i>
<i>Баян Курбанова</i>	<i>магистр, научный сотрудник</i>
<i>Алдонгаров Ануар Акылханович</i>	<i>PhD, доцент</i>

References

- Flexer V., Brun N., Courjean O., Backov R., Mano, N. Porous mediator-free enzyme carbonaceous electrodes obtained through integrative chemistry for biofuel cells. *Energy & Environmental Science*, **2011**, 4(6), 2097-2106.
- Wen D., Liu W., Herrmann A. K., Eychmüller A. A membraneless glucose/O₂ biofuel cell based on Pd aerogels. *Chemistry—A European Journal*, **2014**, 20(15), 4380-4385.
- Gude V. G. (Ed.). *Green chemistry for sustainable biofuel production*. CRC Press, **2018**, 614 p.
- Lucassen A., Labbe N., Westmoreland P. R., Kohse-Höinghaus K. Combustion chemistry and fuel-nitrogen conversion in a laminar premixed flame of morpholine as a model biofuel. *Combustion and flame*, **2011**, 158(9), 1647-1666.
- Labbe N. J., Seshadri V., Kasper T., Hansen N., Oswald P., Westmoreland P. R. Flame chemistry of tetrahydropyran as a model heteroatomic biofuel. *Proceedings of the Combustion Institute*, **2013**, 34(1), 259-267.
- Cooney M. J., Svoboda V., Lau C., Martin G., Minter S. D. Enzyme catalysed biofuel cells. *Energy & Environmental Science*, **2008**, 1(3), 320-337.
- Bhosale M. V. K., Kulkarni S. G., & Kulkarni P. S. Ionic liquid and biofuel blend: a low-cost and high performance hypergolic fuel for propulsion application. *Chemistry Select*, **2016**, 1(9), 1921-1925.
- Vaz S. A renewable chemistry linked to the Brazilian biofuel production. *Chemical and Biological Technologies in Agriculture*, **2014**, 1(1), 1-6.
- Liu T., Khosla C. Genetic engineering of *Escherichia coli* for biofuel production. *Annual review of genetics*, **2010**, 44, 53-69.
- Liu Y., Wang M., Zhao F., Liu B., & Dong S. A low-cost biofuel cell with pH-dependent power output based on porous carbon as matrix. *Chemistry—A European Journal*, **2005**, 11(17), 4970-4974.
- Gunstone F. *The Chemistry of Oils and Fats: Sources, Composition, Properties and Uses*. John Wiley & Sons, Hoboken, New Jersey, **2009**. 304 p.
- List G.R., King J.W. *Hydrogenation of Fats and Oils: Theory and Practice*. Elsevier, Netherlands, **2016**. 419 p.
- World Health Organization. Diet, nutrition and the prevention of chronic disease. Report of Joint WHO/FAO Expert Consultation, WHO Technical Report Series 916, Geneva, **2003**.
- L'Abbé M.R., Stender S., Skeaff C.M., Tavella M. Approaches to removing trans fats from the food supply in industrialized and developing countries, *Eur. J. Clin. Nutr.* 63, **2009**, 50-67. <https://doi.org/10.1038/ejcn.2009.14>
- Russia. Trans fat legislation in Republic of Russia, **2018**. <http://www.pravsky.com/russiacontent-trans-isomers-food-must-not-exceed-2-total-fat-content> (accessed February 2020).
- Veldsink J.W., Bouma M.J., Schöön N.H., Beenackers A.A. Heterogeneous hydrogenation of vegetable oils: a literature review, *Cat. Rev.*, **1997**, 39, 253-318. <https://doi.org/10.1080/01614949709353778>
- Guo S., Liew K.Y., Li J. Catalytic activity of ruthenium nanoparticles supported on carbon nanotubes for hydrogenation of soybean oil, *J. Am. Oil Chem. Soc.*, **2009**, 86, 1141. <https://doi.org/10.1007/s11746-009-1457-5>
- Iida H., Itoh D., Minowa S., Yanagisawa A., Igarashi A. Hydrogenation of soybean oil over various platinum catalysts: Effects of support materials on trans fatty acid levels, *Cat. Commun.*, **2015**, 62, 1-5. <https://doi.org/10.1016/j.catcom.2014.12.025>

19. Simakova I. L., Simakova O. A., Romanenko A.V., Murzin D. Hydrogenation of vegetable oils over Pd on nanocomposite carbon catalysts, *Ind. Eng. Chem. Res.*, **2008**, 47.19, 7219-7225. <https://doi.org/10.1021/ie800663j>
20. Milano-Brusco J.S., Schomäcker R. Catalytic hydrogenations in microemulsion systems with Rh-TPPTS: Partial hydrogenation of sunflower oil, *Cat. Lett.*, **2009**, 133, 273-279. <https://doi.org/10.1007/s10562-009-0187-5>
21. Thunyaratchatanon C., Jitjamnong J., Luengnaruemitchai A., Numwong N., Chollacoop N., Yoshimura Y. Influence of Mg modifier on cis-trans selectivity in partial hydrogenation of biodiesel using different metal types, *Appl. Cat. A.*, **2016**, 520,170-177. <https://doi.org/10.1016/j.apcata.2016.04.019>
22. McArdle S., Leahy J.J., Curtin T., Tanner D. Hydrogenation of sunflower oil over Pt–Ni bimetallic supported catalysts: preparation, characterization and catalytic activity, *Appl. Cat. A.*, **2014**, 474, 78-86. <https://doi.org/10.1016/j.apcata.2013.08.033>
23. Chu Y.H., Lin L.H. An evaluation of commercial nickel catalysts during hydrogenation of soybean oil, *J. Am. Oil Chem. Soc.*, **1991**, 68, 680-683. <https://doi.org/10.1007/BF02662296>
24. Babaee Z., Nikoopour H., Safafar H. A comparison of commercial nickel catalysts effect on hydrogenation of soybean oil, *World Appl. Sci. J.*, **2007**, 2, 621-626. ISSN: 1818-4952.
25. List G. R., Jackson M., Eller F., Adlof R. O. Low trans spread and shortening oils via hydrogenation of soybean oil. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, **2007**, 84(6), 609-612.
26. Mena F., Mena A., Tréton J., Mena B. Technological approaches to minimize industrial trans fatty acids in foods, *J. Food Sci.*, **2013**, 78, 377-386. <https://doi.org/10.1111/1750-3841.12055>
27. Mozaffarian D., Katan M.B., Ascherio A., Stampfer M.J., Willett W.C. Trans fatty acids and cardiovascular disease, *N. Engl. J. Med.*, **2006**, 354, 1601-1613. <https://doi.org/10.1056/NEJMra054035>
28. Smith B.K., Robinson L.E., Nam R., Ma D.W. Trans-fatty acids and cancer: a mini-review // *British journal of nutrition*, *Br. J. Nutr.*, **2009**, 102, 1254-1266. <https://doi.org/10.1017/S0007114509991437>
29. Salmeron J., Hu F.B., Manson J.E., Stampfer M.J., Colditz G.A., Rimm E.B., Willett W.C. Dietary fat intake and risk of type 2 diabetes in women, *Am. J. Clin. Nutr.*, **2001**, 73, 1019-1026. <https://doi.org/10.1093/ajcn/73.6.1019>
30. Oteng A.B., Kersten S. Mechanisms of action of trans fatty acids, *Adv. Nutr.*, **2020**, 11, 697-708. <https://doi.org/10.1093/advances/nmz125>
31. Bray G.A., Lovejoy J.C., Smith S.R., DeLany J.P., Lefevre M., Hwang D., York D.A. The influence of different fats and fatty acids on obesity, insulin resistance and inflammation, *J. Nutr.*, **2002**, 132, 2488-2491. <https://doi.org/10.1093/jn/132.9.2488>
32. Dai Y., Rozema E., Verpoorte R., Choi Y.H. Application of natural deep eutectic solvents to the extraction of anthocyanins from *Catharanthus roseus* with high extractability and stability replacing conventional organic solvents. *Journal of Chromatography A*, **2016**, 1434, 50-56.
33. Bajkacz S., Adamek J. Development of a method based on natural deep eutectic solvents for extraction of flavonoids from food samples. *Food analytical methods*, **2018**, 11(5), 1330-1344.
34. Aroso I. M., Paiva A., Reis R. L., & Duarte A. R. C. (2017). Natural deep eutectic solvents from choline chloride and betaine–Physicochemical properties. *Journal of Molecular Liquids*, **2017**, 241, 654-661.
35. Yang T. X., Zhao L. Q., Wang J., Song G. L., Liu H. M., Cheng H., Yang Z. Improving whole-cell biocatalysis by addition of deep eutectic solvents and natural deep eutectic solvents. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, **2017**, 5(7), 5713-5722.