

ISSN 2518-1483 (Online),
ISSN 2224-5227 (Print)

2016 • 5

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ
ҰЛТТЫҚ ҒЫЛЫМ АКАДЕМИЯСЫНЫҢ
БАЯНДАМАЛАРЫ

ДОКЛАДЫ

НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК
РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН

REPORTS

OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES
OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN

ЖУРНАЛ 1944 ЖЫЛДАН ШЫҒА БАСТАҒАН
ЖУРНАЛ ИЗДАЕТСЯ С 1944 г.
PUBLISHED SINCE 1944



Бас редакторы
х.ғ.д., проф., ҚР ҰҒА академигі **М.Ж. Жұрынов**

Редакция алқасы:

Адекенов С.М. проф., академик (Қазақстан) (бас ред. орынбасары)
Боос Э.Г. проф., академик (Қазақстан)
Величкин В.И. проф., корр.-мүшесі (Ресей)
Вольдемар Вуйцик проф. (Польша)
Гончарук В.В. проф., академик (Украина)
Гордиенко А.И. проф., академик (Белорус)
Дука Г. проф., академик (Молдова)
Илолов М.И. проф., академик (Тәжікстан),
Леска Богуслава проф. (Польша),
Локшин В.Н. проф. чл.-корр. (Қазақстан)
Нараев В.Н. проф. (Ресей)
Неклюдов И.М. проф., академик (Украина)
Нур Изура Удзир проф. (Малайзия)
Перни Стефано проф. (Ұлыбритания)
Потапов В.А. проф. (Украина)
Прокопович Полина проф. (Ұлыбритания)
Омбаев А.М. проф. (Қазақстан)
Өтелбаев М.О. проф., академик (Қазақстан)
Садыбеков М.А. проф., корр.-мүшесі (Қазақстан)
Сатаев М.И. проф., корр.-мүшесі (Қазақстан)
Северский И.В. проф., академик (Қазақстан)
Сикорски Марек проф., (Польша)
Рамазанов Т.С. проф., корр.-мүшесі (Қазақстан)
Такибаев Н.Ж. проф., академик (Қазақстан), бас ред. орынбасары
Харин С.Н. проф., академик (Қазақстан)
Чечин Л.М. проф., корр.-мүшесі (Қазақстан)
Харун Парлар проф. (Германия)
Энджун Гао проф. (Қытай)
Эркебаев А.Э. проф., академик (Қырғыстан)

«Қазақстан Республикасы Ұлттық ғылым академиясының баяндамалары»

ISSN 2518-1483 (Online),

ISSN 2224-5227 (Print)

Меншіктенуші: «Қазақстан Республикасының Ұлттық ғылым академиясы» Республикалық қоғамдық бірлестігі (Алматы қ.)
Қазақстан республикасының Мәдениет пен ақпарат министрлігінің Ақпарат және мұрағат комитетінде 01.06.2006 ж.
берілген №5540-Ж мерзімдік басылым тіркеуіне қойылу туралы куәлік

Мерзімділігі: жылына 6 рет.

Тиражы: 2000 дана.

Редакцияның мекенжайы: 050010, Алматы қ., Шевченко көш., 28, 219 бөл., 220, тел.: 272-13-19, 272-13-18,
<http://наука-нанрк.kz>, reports-science.kz

© Қазақстан Республикасының Ұлттық ғылым академиясы, 2016

Типографияның мекенжайы: «Аруна» ЖК, Алматы қ., Муратбаева көш., 75.

Главный редактор
д.х.н., проф., академик НАН РК **М. Ж. Журинов**

Редакционная коллегия:

Адекенов С.М. проф., академик (Казахстан) (зам. гл. ред.)
Боос Э.Г. проф., академик (Казахстан)
Величкин В.И. проф., чл.-корр. (Россия)
Вольдемар Вуйцик проф. (Польша)
Гончарук В.В. проф., академик (Украина)
Гордиенко А.И. проф., академик (Беларусь)
Дука Г. проф., академик (Молдова)
Илолов М.И. проф., академик (Таджикистан),
Леска Богуслава проф. (Польша),
Локшин В.Н. проф. чл.-корр. (Казахстан)
Нараев В.Н. проф. (Россия)
Неклюдов И.М. проф., академик (Украина)
Нур Изура Удзир проф. (Малайзия)
Перни Стефано проф. (Великобритания)
Потапов В.А. проф. (Украина)
Прокопович Полина проф. (Великобритания)
Омбаев А.М. проф. (Казахстан)
Отелбаев М.О. проф., академик (Казахстан)
Садыбеков М.А. проф., чл.-корр. (Казахстан)
Сатаев М.И. проф., чл.-корр. (Казахстан)
Северский И.В. проф., академик (Казахстан)
Сикорски Марек проф., (Польша)
Рамазанов Т.С. проф., чл.-корр. (Казахстан)
Такибаев Н.Ж. проф., академик (Казахстан), зам. гл. ред.
Харин С.Н. проф., академик (Казахстан)
Чечин Л.М. проф., чл.-корр. (Казахстан)
Харун Парлар проф. (Германия)
Энджун Гао проф. (Китай)
Эркебаев А.Э. проф., академик (Кыргызстан)

Доклады Национальной академии наук Республики Казахстан»

ISSN 2518-1483 (Online),

ISSN 2224-5227 (Print)

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

Свидетельство о постановке на учет периодического печатного издания в Комитете информации и архивов Министерства культуры и информации Республики Казахстан №5540-Ж, выданное 01.06.2006 г.

Периодичность: 6 раз в год.

Тираж: 2000 экземпляров

Адрес редакции: 050010, г.Алматы, ул.Шевченко, 28, ком.218-220, тел. 272-13-19, 272-13-18

<http://nauka-nanrk.kz> reports-science.kz

©Национальная академия наук Республики Казахстан, 2016 г.

Адрес типографии: ИП «Аруна», г.Алматы, ул.Муратбаева, 75

E d i t o r i n c h i e fdoctor of chemistry, professor, academician of NAS RK **M.Zh. Zhurinov****E d i t o r i a l b o a r d :****Adekenov S.M.** prof., academician (Kazakhstan) (deputy editor in chief)**Boos E.G.** prof., academician (Kazakhstan)**Velichkin V.I.** prof., corr. member (Russia)**Voitsik Valdemar** prof. (Poland)**Goncharuk V.V.** prof., academician (Ukraine)**Gordiyenko A.I.** prof., academician (Belarus)**Duka G.** prof., academician (Moldova)**Ilov M.I.** prof., academician (Tadjikistan),**Leska Boguslava** prof. (Poland),**Lokshin V.N.** prof., corr. member. (Kazakhstan)**Narayev V.N.** prof. (Russia)**Nekludov I.M.** prof., academician (Ukraine)**Nur Izura Udzir** prof. (Malaysia)**Perni Stephano** prof. (Great Britain)**Potapov V.A.** prof. (Ukraine)**Prokopovich Polina** prof. (Great Britain)**Ombayev A.M.** prof. (Kazakhstan)**Otelbayv M.O.** prof., academician (Kazakhstan)**Sadybekov M.A.** prof., corr. member. (Kazakhstan)**Satayev M.I.** prof., corr. member. (Kazakhstan)**Severskyi I.V.** prof., academician (Kazakhstan)**Sikorski Marek** prof., (Poland)**Ramazanov T.S.** prof., corr. member. (Kazakhstan)**Takibayev N.Zh.** prof., academician (Kazakhstan), deputy editor in chief**Kharin S.N.** prof., academician (Kazakhstan)**Chechin L.M.** prof., corr. member. (Kazakhstan)**Kharun Parlar** prof. (Germany)**Endzhun Gao** prof. (China)**Erkebayev A.Ye.** prof., academician (Kyrgyzstan)**Reports of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan.****ISSN 2224-5227****ISSN 2518-1483 (Online),****ISSN 2224-5227 (Print)**

Owner: RPA "National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan" (Almaty)

The certificate of registration of a periodic printed publication in the Committee of Information and Archives of the Ministry of Culture and Information of the Republic of Kazakhstan N 5540-Ж, issued 01.06.2006

Periodicity: 6 times a year

Circulation: 2000 copies

Editorial address: 28, Shevchenko str., of.219-220, Almaty, 050010, tel. 272-13-19, 272-13-18,

<http://nauka-nanrk.kz/> reports-science.kz

© National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan, 2016

Address of printing house: ST "Aruna", 75, Muratbayev str, Almaty

O. Kh. Poleshchuk¹, A. V. Fateev¹, G.M. Adyrbekova²,
M. N. Ermakhanov², P.A. Saidakhmetov²

¹National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia

²M.Auezov South Kazakhstan State University, Shymkent, Kazakhstan

poleshch@tspu.edu.ru, adyrbekova.gulmira@mail.ru, myrza1964@mail.ru, timpf_ukgu@mail.ru

ANALYSIS OF THE CHEMICAL BOND IN THE METALLOCENE USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY

Abstract. In this work the optimization of metallocene molecular geometry by two different functional density methods has been carried out. Obtained structural and spectral data have been compared with experimental values. The donor-acceptor and dative interactions in the formation of metallocenes have been studied on the basis of the natural valence orbitals method. The ionicity and covalency of bonds between the metal atoms and carbon have been determined with use of energy partitioning analysis.

Keywords: density functional theory, metallocenes, donor-acceptor and dative interaction, covalence of bond.

Introduction.

Metallocenes are organic compounds formed mainly by transition metal and cyclopentadiene [1, 2]. The molecules of metallocenes have the form of "sandwich": a metal ion having an oxidation + 2 is situated between two parallel cyclopentadienyl rings at an equal distance from them. In various metallocenes metal-ligand bond may have either covalent or ionic character. The relative positions of the cyclopentadienyl ring depend on the compounds and form a prismatic or antiprismatic configuration.

A perennial metallocenes study showed that they have a wide practical applicability. In this case both practical and theoretical interest directly represent molecular complexes based on ferrocene, derivatives thereof, allowing to obtain chelate compounds, a number of heterometallic derivatives. Along with the metallocene containing polymer, they are used as semiconducting materials in electronics, catalysts in organic synthesis and the etc. Systems containing several metals within a single molecule are of interest and a model for the development of the general theory of exchange interactions. There is information, that chelate transition metal complexes containing ferrocene moiety were catalysts for polymerization of styrene along with other chelates based on π -complex.

The aim of this work is to investigate the nature of chemical bonds in molecules metallocene using quantum chemical density functional calculations.

Materials and methods.

All calculations were performed using GAUSSIAN'03 standard software package [3]. For carrying out the theoretical research, there was used quantum-chemical density functional method (DFT, Density Functional Theory). Calculations performed by the hybrid density functional B3LYP, with the exchange functionality Beke (B3) [4] and correlation functional of Lee, Yang and Couple (LYP) [5]. For all atoms used as a fully electronic basis set 6-31G (d). The structure of the calculations were fully optimized, no imaginary vibrational frequencies confirmed their stationary character. Furthermore, optimization of metallocene the gas phase was performed using the Amsterdam Density Functional (ADF) [6], which uses Slater functions. We used bp86/TZ2P+ method, which usually yields better results than the B3LYP/6-31G(d).

Results and discussion.

Comparison of geometric parameters

We calculated a large number of metallocene molecules with metals in the oxidation state +2. Optimized structures have D_{5d} symmetry and are in the eclipsed conformation, which is consistent with literature data.

We compared the experimental values of lengths of C-C and C - Fe bonds, obtained by gas-phase electron diffraction [7, 8] with calculated by both methods (Table. 1).

The table 1 shows that the structure which optimized at ADF, giving the C-Fe bond length lower than the experimental value at 0,016 E. In the same time structure, resulting in the program Gaussian gives bond length 2,052 E, which corresponds to the experimental value. Besides Gaussian shows all carbon-carbon bonds identical (1,428), while giving ADF spread 1,421-1,434 E, which is inconsistent with the experimental data.

Table 1 – Experimental and calculated by the B3LYP/6-31G(d) and bp86/ TZ2P+ C-C and C-Fe bond lengths in ferrocene, E

	Experiment	ADF bp86/TZ2P+		Gaussian B3LYP/6-31G(d)		
	Fe(C ₅ H ₅) ₂	Cp	Fe(C ₅ H ₅) ₂ S = 0	Cp	Fe(C ₅ H ₅) ₂ S = 0	Fe(C ₅ H ₅) ₂ S = 2
C–C	1,42 ± 0,01	1,383–1,434	1,421–1,434	1,414	1,428	1,421–1,429
C–Fe	2,06 ± 0,01	–	2,044	–	2,052	2,232–2,370
C–H	–	1,092	1,086	1,09	1,082	1,083

It is known that iron atom may be in high- and low-spin state. The calculated energy gap between high- and low-spin states of ferrocene is 19 kcal/mol. According to the literature, this difference greater than 40 kcal/mol. In the high- spin ferrocene symmetry rings are broken, they go out of parallel planes. Thus the Fe-C bond lengths increase and significantly distorted. They were also calculated metallocenes comprising not only the transition metal but and non-transition elements. The calculated by two methods experimental bond lengths are given in the Table 2.

Table 2 – Lengths of metal-carbon bonds and carbon-carbon

The metallocene	Bond	experiment	Gaussian	ADF
Pb(C ₅ H ₅) ₂	Pb–C	2,778	2,777	2,770
	C–C	1,430	1,419	1,415
Sn(C ₅ H ₅) ₂	Sn–C	2,706	2,727	2,646
	C–C	1,431	1,419	1,420
Be(C ₅ H ₅) ₂	Be–C	1,93	2,05	2,04
	C–C		1,418	1,415
Ni(C ₅ H ₅) ₂	Ni–C	2,196	2,132	
	C–C	1,430	1,408	
Co(C ₅ H ₅) ₂	Co–C	2,119	2,130	
	C–C	1,429	1,421	
Ti(C ₅ H ₅) ₂ Cl ₂	Ti–C	2,372	2,394	2,384
	C–C	1,397	1,407	1,407
Mn(C ₅ H ₅) ₂	Mn–C	2,383	2,256	2,056
	C–C	1,429	1,426	1,429
Cr(Bz) ₂	Cr–C	2,150	2,155	2,107
	C–C	1,423	1,418	1,415
Cr(Bz)(CO) ₃	Cr–C	2,208	2,229	2,172
	C–C	1,417	1,413	1,412

For all metallocene observed good the correlation between the experimental and calculated in the programs of Gaussian and ADF bond lengths of the metal - ring (Fig 1, 2.).

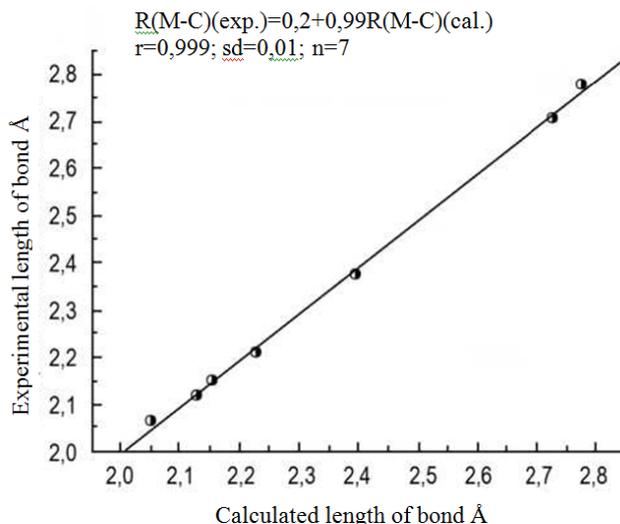


Figure 1 – The relationship between the experimental and calculated by B3LYP/6-31G(d) bond lengths in the metallocene

C-C distances in cyclopentadienyl are approximately the same in all complexes. The difference between C-C bond length from cyclopentadienyl to metallocenes about 0,014 E. This suggests that part of the π -electron density passes from C-C bonds to the C-Fe and the multiplicity of bond decreases.

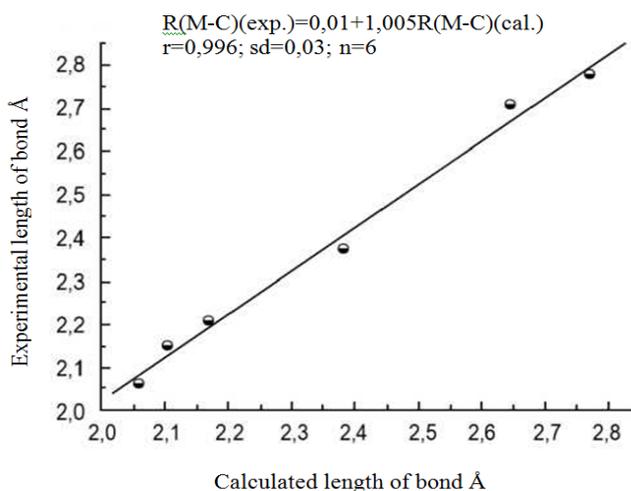


Figure 2 – The relationship between the experimental and calculated by BP86/TZ2P+ bond lengths in the metallocene

Along with changes in bond lengths should change also the effective charges on atoms as a result of electron density transfer from the ligand to the metal and conversely. We have analyzed seven different types of charges in a molecule of ferrocene (Table. 3). We used three Gaussian calculated schemes and four - from ADF. We can see from Table. 3 that the the Mulliken charges from Gaussian have similar values all carbon and hydrogen atoms, respectively, and the charge on the Fe atom is 0.556, which correlates reasonably well with the experimental results.

All experimental methods are predicting charge on the iron atom in the range of 0.6 - 1.4 e. The same regularity can also be seen with the natural charges (NBO calculation) for Fe atom charge is 1.023.

The scheme of charge distribution by Voronoi, Hershfield and multiplicity charges show different charges on the hydrogen atoms and, most importantly, carbon atoms, which can not but cause concern. Moreover, the charge on the iron atom in these schemes close to zero (-0.037, 0.049, 0.096 respectively), which do not correspond to experiment.

Table 3 – The charges on the atoms in ferrocene, calculated in the program ADF and Gaussian

Atom	Gaussian			ADF			
	Mulliken atomic charges	APT	NBO Natural charge	Mulliken atomic charges	Hirshfeld charge analysis	Voronoi charges	Multiplet charges
C	-0,205	0,042	-0,358	0,280–0,283	-0,057 – – 0,065	-0,070 – – 0,077	-0,207 – – 0,256
H	0,149	0,029	0,256	-0,292 – – 0,310	0,056–0,057	0,075–0,079	0,218–0,232
Fe	0,557	-0,714	1,023	0,225	0,049	-0,037	0,096

NMR spectra

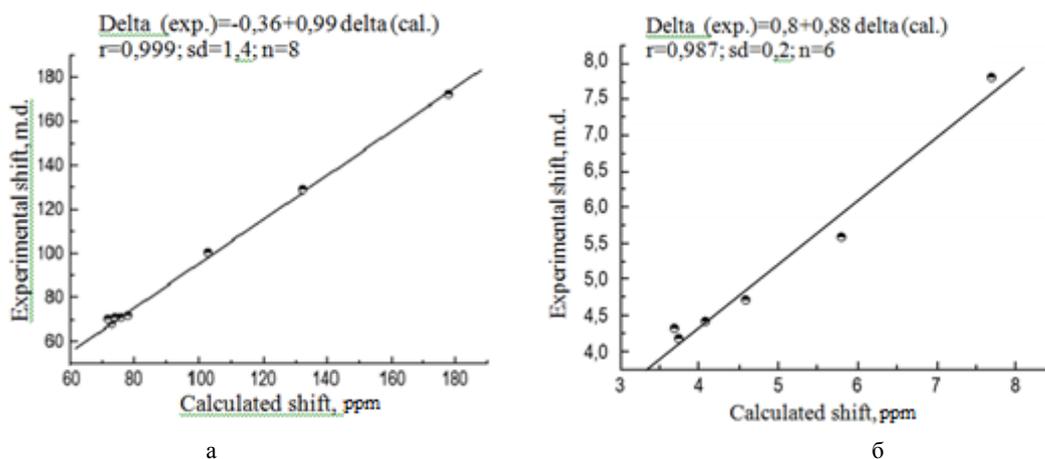
Changing the effective charge on the carbon and hydrogen atoms in the ligands affects the chemical shifts in the NMR spectroscopy.

Table. 4 shows the experimental [9] and calculated in Gaussian's program chemical shifts such ligands as cyclopentadienyl and benzene in the free state and in complexes with iron (ferrocene and ferrocene carboxylic acid).

Table 4 – The chemical shifts in the NMR spectrum

Molecule	Experimental Shift ¹³ C	Calculated Shift ¹³ C	Experimental Shift ¹ H	Calculated Shift ¹ H
Cyclopentadienyl anion	100	103,2; 103,0; 102,9	5,57	5,7; 5,8; 6,0
Ferrocene	67,85	72,6; 73,1	4,15	3,66; 3,76; 3,81
ferrocene carboxylic acid	171,9; 71,7; 70,9; 69,8; 69,4	178; 78; 76; 74; 72	12,2; 4,7; 4,4; 4,3	4,6; 4,1; 3,7
Benzene	128,5	132,6	7,8	7,7
Cr(Bz) ₂		80,2; 79,4; 80,5		4,1; 4,2; 4,3

It can be seen that the interaction of the organic ligand with a metal ion leads to significant reductions of the shear of carbon atoms and protons, while the difference between the experimental and calculated values are close to each other (Fig. 3). Such changes of the chemical shifts associated with a shift of the electron density from carbon and hydrogen atoms.

Figure 3 – The relation between the experimental and calculated chemical shifts in the NMR spectra of (a - ¹³C, b - ¹H)

Comparison of the IR spectra

Using an optimized geometry, we calculated IR spectrum of ferrocene. Most of the 57 frequencies

have zero or very low intensity in the spectrum do not appear. All are grouped into five peaks, since some frequencies are very close and merge on the spectrum. Fig. 4 shows calculated IR spectrum of ferrocene with five peaks clearly visible, which agrees well with the experimental spectrum (Fig. 5).

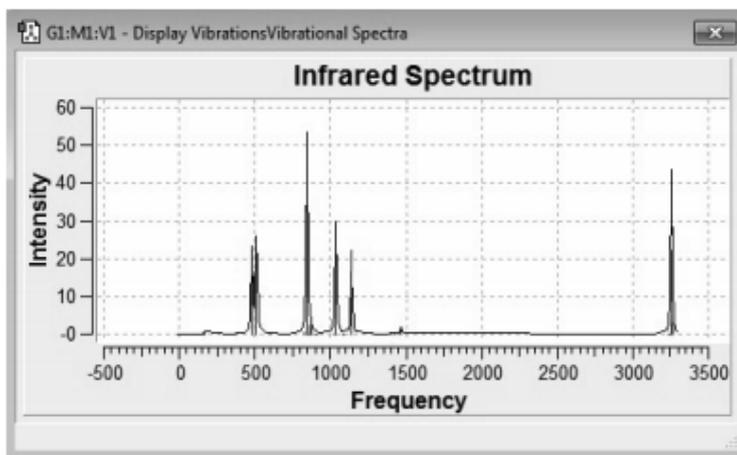


Figure 4 – Calculated by B3LYP / 6-31G * IR ferrocene, cm^{-1}

With Gaussian Viewer program we conducted a frequency assignment. All results are presented in Table. 5.

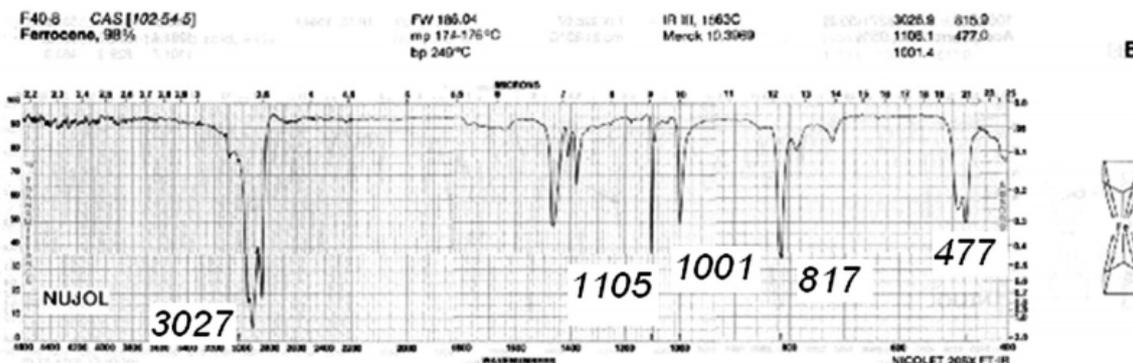


Figure 5 – Experimental IR ferrocene (nonlinear range) [10]

The first peak $\nu = 477 \text{ cm}^{-1}$ corresponds to the movement of the iron atom on the symmetry axis between rings. Close there to peak $\nu = 511 \text{ cm}^{-1}$ corresponds to the movement of the iron atom in a plane parallel to the rings. In the experimental spectrum are two peaks in this area with a maximum at 477 cm^{-1} . In the IR spectrum dibenzenechromium these vibration frequencies are 452 and 488 cm^{-1} .

In forming a complex of ferrocene in the cyclopentadienyl fragments only two frequencies are reduced - breathing vibration of the ring and valence vibration of C-C bonds at 17 and 32 cm^{-1} , respectively. Decreasing of the frequency corresponding to the bond, indicating it's weakening and increases its length. Indeed, the length carbon-carbon bond increased to $0,014 \text{ \AA}$. It can be assumed that part of the π -electron density shifted to free orbitals of the iron atom. That is realized donor-acceptor ($\text{Fe} \leftarrow \text{C}_2\text{H}_4$) interaction. On the other hand, is not excluded the transfer of the electrons of lone electron pairs of iron atoms to the π^* -orbital of the cyclopentadienyl, which also weakens the C-C bond. For a deeper understanding of the relationship of nature in the metallocene is necessary to analyze the redistribution of electron density the formation of their initial compounds.

Analysis of chemical bonds in the molecules ferrocene and dibenzenechromium

Calculation of natural orbital bonds (NBO) [11] showed that the ferrocene has 3 three-center bonds between carbon and iron: one bonding (Figure 6) and two antibonding. In the formation of bonding

molecular orbitals take part non-hybrid carbon 2p orbitals and the d-orbitals of the iron atom. The occupancy of bonding orbital is 1.5 e, and non-bonding are 1.2 and 0.2 e. It is not difficult to assume that such interactions may be 5 or even 10. And the symmetric geometry indicates the equivalence of these interactions.

All interaction between the orbitals in the framework theory of excitation of second-order can be divided into several groups. The first group is responsible for the donor-acceptor interaction: $\pi(\text{C-C}) \rightarrow \text{LP}, \text{LP}^*(\text{Fe})$. The total energy is equal to the disturbance 331 kcal/mol. Taking into account the three-center bond C-Fe-C donation energy rises to 371 kcal/mol. It is clear that the bond is formed not between concrete atoms ring and iron, and between the π -bond (C=C fragment) and iron atom. Since the Fe-C₂ fragment represents isosceles triangle, then this bond should be regarded as a predominantly three-center.

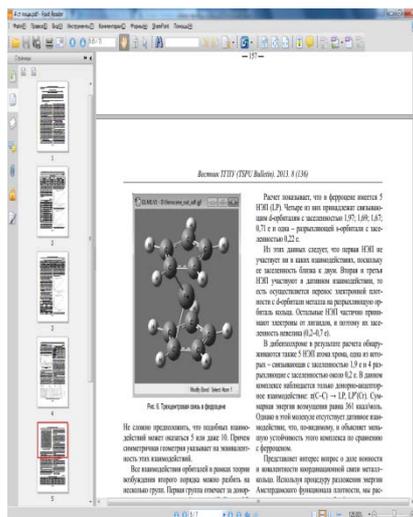


Figure 6 – The three-center bonds in ferrocene

The second group is a dative reacting $\text{LP}(\text{Fe}) \rightarrow \pi^*(\text{C-C})$ with the total perturbation energy 129 kcal/mol, which is about three times less than the donor-acceptor interaction. Thus, the calculation shows that in a molecule of ferrocene dominant interaction exceeds dative.

Our calculations show that in ferrocene are 5 electron lone pairs (LP). Four of them belong to the bonding d-orbitals with occupancy about 1.97; 1.69; 1.67; 0.71 e and one - antibonding s-orbital with occupancy 0.22 e.

From these data it follows that the first LP not involved in any interactions as its occupancy is close to two. The second and third LP involved in dative interaction, that it has carried out the transfer of electron density from the metal d-orbitals to the antibonding orbital. Other LP partially accept electrons from the ligand and therefore their occupancy is small (0.2-0.7 e).

As a result of the calculation dibenzenechromium also found 5 LP of the chromium atom, one of which – bonding with occupancy 1.9 e and 4 non-bonding with occupancy about 0.2 e. This complex shows only the donor-acceptor interaction: $\pi(\text{C-C}) \rightarrow \text{LP}, \text{LP}^*(\text{Cr})$. The total perturbation energy is 361 kcal/mol. However, in this molecule missing dative interaction that appears explains to be less stable this complex the compared to ferrocene.

The question of the proportion of ionic and covalent character and coordination to the metal ring is of interest. Using the procedure of decomposition energy from ADF, we calculated the following contributions (tab. 6).

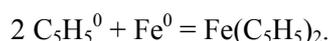
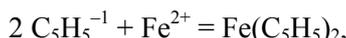
$$E_{\text{tot}} = E_{\text{orb}} + E_{\text{elstat}} + E_{\text{Pauli}},$$

where E_{orb} – energy contribution charge interaction between all the orbitals of the system; E_{Pauli} – the contribution that characterizes the energy of repulsion of fragments; E_{elstat} – an investment that includes the electrostatic attraction of the molecule fragments.

Table 6 – Analysis of the decomposition of the energy, kcal/mol

Energy	Ferrocene	Cp ⁻¹	Fe ²⁺	ΔE	Dibenzolhrom	Benzene	Cr ⁰	ΔE
E _{орб}	-12628	-5896	542	-1388	-15243	-7381	35	-446
E _{эл-стат}	-2817	-1092	0	-633	-3297	-1346	0	-605
E _{Павли}	12331	5573	0	1185	14814	6969	0	876
E _{общ}	-3115	-1415	542	-827	-3726	-1758	35	-210

According to the law of Hess, we can calculate the change in the contribution of each energy contribution upon complex formation. This change of the energy will apply to the new bond Fe atom with rings. Scheme ferrocene molecules forming reaction can occur both by ionic and radical mechanisms:



According to the first mechanism from Table 6, orbital energy (covalent bonds) exceeds the electrostatic energy (ionicity of the bond), with the proportion of covalent bond is 69%.

For dibenzenechromium molecules ($2\text{C}_6\text{H}_6 + \text{Cr}^0 = \text{Cr}(\text{C}_6\text{H}_6)_2$) the calculation leads to other relationships between the orbital and covalent interactions. It can be seen that the change in the electrostatic energy is greater than the orbital, and the proportion of covalent bond is only 42%.

Table 7 shows the average energy bonds with the iron atom, taken from the literature.

Table 7 – Average energy values of some chemical bonds with the Fe atom

	E _{average} , kJ/mol
Fe–O	926
Fe–S	797
Fe–C	376

Using the calculated total energy by ionic mechanism, the total energy of all bonds between the cyclopentadienyl rings and an iron atom is 827 kcal/mol (tab. 6). Dividing this value by the number of bonds (provided that all atoms are bonding, they should be ten) we obtain 82.7 kcal/mol or 346 kJ/mol. That is, the bonding energy between each carbon atom and the iron atom is close to the average, which means that all bonds are full. A detailed calculation in program Gaussian over the Gibbs free energy change it gives the value of 703 kcal/mol. In considering of the radical mechanism the ADF program gives the total energy of 232 kcal/mol, and change of the Gibbs free energy was found 199 kcal/mol. These results agree with the experimental values (635 kcal/mol for ionic process and 158 kcal/mol for the radical [12, 13]).

Dibenzenechromium molecule is somewhat less stable. Considering that there exist 12 equal bonds, the bonding energy between chromium and carbon atoms was 73 kJ/mol, which is less energy π-bond.

Conclusions

Optimize the structure a series of metallocenes. It is shown that the ferrocene is symmetry D_{5d} and is located in the eclipsed conformation (gas phase). Similar structures are designed for other metals.

It is shown that the calculated length of metal-carbon bonds and carbon-carbon frequency in the IR spectrum, chemical shifts of ¹H and ¹³C NMR ferrocene and its acid in good agreement with experimental data.

It is shown that for the ferrocene donor-acceptor interaction π(C-C)→LP, LP*(Fe) about three times exceeds the dative interaction LP(Fe)→π*(C-C). For dibenzenechromium chemical bond is described only the donor-acceptor interaction of π(C-C)→LP, LP*(Cr), but dative interaction is absent.

Decomposition of the energy in the complexes of ferrocene and dibenzenechromium showed that the contribution of Fe-C covalent bond is 69%, in Cr-C - 42%. The energy of each of the ten bonds in ferrocene is 346 kJ/mol, and the energy of each of the 12 bonds in dibenzenechromium is 73 kJ/mol, indicating a much lower stability of the complex.

REFERENCES

- [1] Fischer E., Werner G. π -metal complexes, *M.: Mir*, **1968**, 235 p.
- [2] Pawson AP Chemistry organometallics, *M.: Mir*, **1970**, 350 p.
- [3] Gaussian 03, Revision B.03, Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B., Scuseria G. E., Robb M. A., Cheeseman J. R., Montgomery J. A., Vreven T., Kudin K. N., Burant J. C., Millam J. M., Iyengar S. S., Tomasi J., Barone V., Mennucci B., Cossi M., Scalmani G., Rega N., Petersson G. A., Nakatsuji H., Hada M., Ehara M., Toyota K., Fukuda R., Hasegawa J., Ishida M., Nakajima T., Honda Y., Kitao O., Nakai, Klene M., Li X., Knox J. E., Hratchian H. P., Cross J. B., Adamo C., Jaramillo J., Gomperts R., Stratmann H. E., Yazyev O., Austin A. J., Cammi R., Pomelli C., Ochterski J. W., Ayala P. Y., Morokuma, G. A. Voth, Salvador P., Dannenberg J. J., Zakrzewski V. G., Dapprich S., DaStrain K. C., Farkas O., Malick D. K., Rabuck A. D., Raghavachari K., Foresman J. B., Ortiz J. V., Cui Q., Baboul A. G., Clifford S., Cioslowski J., Stefanov B. B., Liu G., Liashenko A., Piskorz P., Komaromi, Martin R. L., Fox D. J., Keith T., Al-Laham M. A., Peng C. Y., Nanayakkara A., Challacombe M., Gill P. M. W., Johnson B., Chen W., Wong M. W., Gonzalez C. and Pople J. A. *Gaussian, Inc., Pittsburgh PA*, **2003**.
- [4] Becke A. D. *J. Chem. Phys.* **1993**, Vol. 98, P. 5648.
- [5] Lee C., Yang W., Parr R.G. *Phys. Rev. (B)*, **1988**, Vol. 37, P. 785.
- [6] ADF2005.01; SCM. *Theoretical Chemistry*. Vrije Universitat: Amsterdam, The Netherlands, URL: <http://www.scm.com/>
- [7] Vilkov L.V., Mastryukov V.S., Sadova N.I. Determination of the geometric structure of free molecules. L.: *Chemistry*, **1978**, 224 p.
- [8] Batsanov S.S. Structural Chemistry. Facts and dependence. *M.: Dialog, Moscow State University*, **2000**, 2929p.
- [9] URL: <http://www.anchem.ru/forum/read.asp>
- [10] URL: <http://webbook.nist.gov/chemistry>

О.Х. Полещук¹, А.В. Фатеев¹, Г.М. Адырбекова², М.Н. Ермаханов², П.А. Саидахметов²

¹Томск ұлттық зерттеу политехникалық университеті, Томск, Ресей

²М.Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан мемлекеттік университеті, Шымкент қ., Қазақстан Республикасы

ТЫҒЫЗДЫҚ ФУНКЦИОНАЛ ТЕОРИЯСЫНЫҢ ӘДІСТЕРІМЕН МЕТАЛЛОЦЕНДЕРДЕГІ ХИМИЯЛЫҚ БАЙЛАНЫСТЫҢ ТАЛДАУЫ

Аннотация. Жұмыста тығыздықтың екі түрлі функционалдарымен металлоцелдер молекулаларының геометриясын оптималдауы жүргізілген. Алынған құрылымдық және спектралды мәліметтер бар тәжірибелік мәндермен салыстырылды. Табиғи валентті орбитальдар тәсілімен есептеу негізінде металлоцелдердің түзілуі кезіндегі донорлы-акцепторлы және дативті әрекеттесулердің шамасы туралы қорытынды жасалды. Энергияның ыдырау жолымен металл және көміртегі атомдар арасындағы иондылық және коваленттілік мәндері алынды.

Түйін сөздер: тығыздық функционалының теориясы, металлоцелдер, донор-акцепторлы және дативті әрекеттесулер, байланыстың коваленттілігі.

УДК 541.1+530.145

О. Х. Полещук¹, А. В. Фатеев¹, Г.М. Адырбекова², М.Н. Ермаханов², П.А. Саидахметов²

¹Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия

²Южно-Казахстанский государственный университет им. М. Ауезова, Шымкент, РК

АНАЛИЗ ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ В МЕТАЛЛОЦЕНАХ МЕТОДАМИ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

Аннотация. В работе проведена оптимизация геометрии молекул металлоценов двумя различными функционалами плотности. Полученные структурные и спектральные данные сопоставлены с имеющимися экспериментальными значениями. На основании расчета методом натуральных валентных орбиталей сделан вывод о величине донорно-акцепторного и дативного взаимодействий при образовании металлоценов. С использованием процедуры разложения энергии получены значения ионности и ковалентности связи между атомами металла и углерода.

Ключевые слова: теория функционала плотности, металлоцены, донорно-акцепторное и дативное взаимодействие, ковалентность связи.

МАЗМҰНЫ
Астрофизика

<i>Шукиргалиев Б.Т., Панамарев Т.П., Наурызбаева А.Ж., Қаламбай М.Т., Макуков М.А., Вильковиский Э.Я., Омаров Ч.Т., Берцик П.П., Юст А., Шпурцем Р.</i> Аккрециялық газды диск пішінінің аккрецияланушы жұлдыздардың орбиталық сипаттамасына әсері.....	5
<i>Жантаев Ж.Ш., Куратов К.С., Сейтімбетов А.М., Майлыбаев А.Т., Алимгазинова Н.Ш., Манапбаева А.Б., Куратова А.К., Изтлеуов Н.Т.</i> Екі матрицалы фотометрдің басқару жүйесі.....	14

Физика

<i>Буртебаев Н., Керимкулов Ж.К., Мухамеджанов Е.С., Алимов Д.К., Демьянова А.С., Данилов А.Н.</i> 50 және 65 Мэв энергиядағы альфа-бөлшектердің ¹¹ вядроларында шашырау құбылыстарын зерттеу.....	20
<i>Омар Ж.О., Такибаев Н.Ж., Құрманғалиева В.О.</i> Нейтронды жұлдыздардың кристалдық торларындағы фонон-фононды әсерлесулер.....	26

Химия

<i>Полещук О.Х., Фатеев А.В., Адырбекова Г.М., Ермаханов М.Н., Саудахметов П.А.</i> Тығыздық функционал теориясының әдістерімен металоцендердегі химиялық байланыстың талдауы.....	34
<i>Малышев В.П., Зубрина Ю.С., Макашева А.М.</i> Материалдардың бүлінуі кезіндегі механикалық және жылулық энергияның өзара байланысы.....	42

Жер туралы ғылымдар

<i>Бітімбаев М.Ж., Морозов Ю.П., Хамидулин И.Х.</i> Жабық ұсақтау циклда алтынның жиналуының заңдылығын зерттеу.....	50
<i>Бітімбаев М.Ж., Шемякин В.С., Скопов С.В.</i> Қазақстанның мыс және мыс-мырышты кендерін рентгенорадиометриялық байыту.....	55
<i>Ниценко А.В., Требухов С.А., Қасымжанова А.К., Шендяпин А.С.</i> Төмендетілген қысым кезіндегі мышьяқтың диффузия коэффициентін анықтау.....	63

Әлеуметтік ғылымдар

<i>Қурманов Н.А., Рахимбекова А.Е., Бактымбет А.С., Махатова А.Б.</i> Қазақстан республикасындағы кіші және орта бизнестің инновациялық қызметінің дамуы.....	70
<i>Кольбаев М.К., Нурлихина Г.Б., Турабаев Г.К.</i> Шағын инновациялық кәсіпкерлікті венчурлық қаржыландыру.....	80

* * *

Астрофизика

<i>Шукиргалиев Б.Т., Панамарев Т.П., Наурызбаева А.Ж., Қаламбай М.Т., Берцик П.П., Юст А., Шпурцем Р., Макуков М.А., Вильковиский Э.Я., Омаров Ч.Т.</i> аккрециялық газды диск пішінінің аккрецияланушы жұлдыздардың орбиталық сипаттамасына әсері.....	87
<i>Жантаев Ж.Ш., Куратов К.С., Сейтімбетов А.М., Майлыбаев А.Т., Алимгазинова Н.Ш., Манапбаева А.Б., Куратова А.К., Изтлеуов Н.Т.</i> Екі матрицалы фотометрдің басқару жүйесі.....	96

Физика

<i>Буртебаев Н., Керимкулов Ж.К., Мухамеджанов Е.С., Алимов Д.К., Демьянова А.С., Данилов А.Н.</i> 50 және 65 Мэв энергиядағы альфа-бөлшектердің ¹¹ вядроларында шашырау құбылыстарын зерттеу.....	102
<i>Боос Э.Г., Темірәлиев Т., Избасаров М., Самойлов В.В., Федосимова А.И.</i> Импульсі 22,4 ГэВ/С антипротон-протондық аннигиляцияда және протон мен антипротонның зарядынан айырылу реакциясында оқиға құрылымын талдау.....	108
<i>Бетекбаев А. А., Калыгулов Д. А., Скаков Д. М., Мукашев Б. Н.</i> Күн энергиясының фотоэлектрлік түрлендірілуі: KAZPV жобасының жағдайы мен қолдану келешектері.....	113

Техникалық ғылымдар

<i>Бакранова Д.И., Кукушкин С.А., Бейсембетов И.К., Осипов А.В., Нусупов К.Х., Бейсенханов Н.Б., Кенжалиев Б.К., Мить К.А.</i> Атомдардың орнын басу әдісімен синтезделген эпитаксиалды SiC қабыршақтарының құрылымы.....	118
<i>Мусабеков Н.Р., Ибраев А. Х., Адильбеков М. Ж.</i> Жылуалмасу процестерін басқару мысалындағы технологиялық процесті басқарудың гибридік жүйесін әзірлеу туралы мәселелер.....	125
<i>Дайрабай Д.Д., Голубев В.Г., Балабеков О.С., Бренер А.М.</i> Нуклеаттардың жоғары концентрациясы жағдайларында кластерлік дисперсиялар түзілуінің ерекшеліктері.....	132
<i>Генбач А.А., Джаманкулова Н.О.</i> Жылу энергетикалық қондырғылардың капиллярлық-кеуектік жаңа класты салқындату жүйелеріндегі жылумассаалмасуды зерттеу.....	139
<i>Машеков С.А., Абсадыков Б.Н., Алимкулов М.М.</i> ТМД елдерінде рельстерді қолдану тәжірибесі және оның мемлекетаралық стандартты өндіру үшін қолдануы.....	146
<i>Телтаев Б. Б., Айтбаев Қ.А., Аблалиев С.А.</i> Жол құрылымының кернеулі-деформациялық күйіне жерасты коллекторының әсері.....	162
<i>Бахтаев Ш.А., Бочкарева Г.В., Мусатирова Г.Д., Авхадиева Ф.Р.</i> Тәжделуші электрод бетінің қисықтық радиусын анықтау тәсілі.....	173

Механика

<i>Жолдасбеков С.Ө., Ибраев С.М., Сакенова А.М., Иманбаева Н.С., Нұрмағанбетова А.Т.</i> Жүк көтергіш иіптіректі механизмді Арм winmachine компьютерлік жүйесі көмегімен жобалау.....	180
---	-----

Химия

<i>Фазылов С.Д., Животова Т.С., Нүркенов О.А., Абдыкалыков М.А., Сатпаева Ж.Б., Мұқашев А.Б., Жақыпова А.Н., Молдахметов М.З.</i> Көмір қалдықтары мен көмір қоқыстары негізінде брикетті отын алудың тиімді көрсеткіштерін жасау.....	186
<i>Малышев В.П., Зубрина Ю.С., Макашева А.М.</i> Материалдардың бүлінуі кезіндегі механикалық және жылулық энергияның өзара байланысы.....	193
<i>Айдарова С.Б., Тлеуова А.Б., Исаева А., Шарипова А.А., Григорьев Д.О., Миллер Р.</i> Гидрофобты агенттерді инкапсуляциялауда пикеринг эмульсиясын қолдану.....	200
<i>Мамырбекова А., Баешов А.Б., Мамырбекова А.</i> Әр түрлі орталарда стационарлы емес токпен поляризациялау кезіндегі күкірттің электрохимиялық қасиеті.....	209
<i>Қоңурбаев А.Е., Баешов А.Б.</i> Композициялы күкірт- графит электродын қолдану арқылы мырыш сульфидін электрохимиялық жолмен алу.....	214
<i>Баешов А.Б., Қоңурбаев А.Е., Адайбекова А.А., Баешова А.К.</i> Совместное восстановление ионов цинка и сульфит-ионов на в стеклографитовом электроде.....	222

Жер туралы ғылымдар

<i>Бітімбаев М.Ж., Морозов Ю.П., Хамидулин И.Х.</i> Жабық ұсақтау циклда алтынның жиналуының заңдылығын зерттеу	231
<i>Ниценко А.В., Требухов С.А., Қасымжанова А.К., Шендятин А.С.</i> Төмендетілген қысым кезіндегі мышьяқтың диффузия коэффициентін анықтау.....	245
<i>Метакса Г.П., Буктуков Н.С.</i> Йеллоустон Жанартауы. Ғылыми аңыз бен шындық.....	252

Медицина

<i>Рахимов Қ.Д., Адекенов С.М.</i> Дәріге тұрақты метастаздардың өсуіне жаңа табиғи препараттардың цитостатиктермен біріктірген кездегі фармакологиялық әсері.....	257
<i>Рахимов Қ.Д.</i> Клиникаға дейінгі зерттеулерде дәрілерге тұрақты метастаздардың пайда болуын анықтау.....	262

Аграрлық ғылым

<i>Аубакиров Х.А., Баймуханов Д.А., Рахманов С.С.</i> Жамбыл облысы «Бапшы-Сейсенбай» шаруа қожалығында өсірілетін жылқы популяциясындағы түстердің таралу ерекшеліктері.....	268
<i>Асембаева Э.Қ., Сейдахметова З.Ж., Велямов Т.М., Лесова Ж.Т., Нурмуханбетова Д.Е.</i> Функционалдық тағамдық өнімдер. Түйе сүтінен алынатын сүтқышқылды өнімдер.....	275

Қоғамдық ғылымдар

<i>Пилипчук Я.В.</i> XVII–XVIIIғғ. Моғолстан және ұйғыр мемлекеттерінің құлауы.....	285
<i>Есенбекова А.Б.</i> Экономиканың тұрақты дамуы мәселелері және оның климаттың ғаламдық өзгеруіне тәуелділігі жайлы.....	302
<i>Жакипов Б. М.</i> Шет елдердегі көрме қызметінің даму үрдістерін талдау.....	309
<i>Насимов М. Ө.</i> Саяси менеджмент: түсінігі, құрылымы және негізгі түрлері.....	316
<i>Панзабекова А.Ж., Турабаев Г.К.</i> Экономиканың нақты секторындағы еңбекті ынталандыру: қағидалары мен әдістері.....	324
<i>Сейтахметова Н.Л., Жандосова Ш.М., Смағұлов Қ.Е.</i> Діни экстремизм мәселесінің саясаттанулық қыры.....	332

СОДЕРЖАНИЕ

Астрофизика	
<i>Шукиргалиев Б.Т., Панамарев Т.П., Наурызбаева А.Ж., Қаламбай М.Т., Макуков М.А., Вильковиский Э.Я., Омаров Ч.Т., Берцик П.П., Юст А., Шпурцем Р.</i> Влияние профиля аккреционного газового диска на орбитальные параметры аккрецируемых звезд.....	5
<i>Жантаев Ж.Ш., Куратов К.С., Сейтимбетов А.М., Майлыбаев А.Т., Алимгазинова Н.Ш., Манапбаева А.Б., Куратова А.К., Изтлеуов Н.Т.</i> Система управления двухматричным фотометром.....	14
Физика	
<i>Буртебаев Н., Керимкулов Ж.К., Мухамеджанов Е.С., Алимов Д.К., Демьянова А.С., Данилов А.Н.</i> Исследование процессов рассеяния альфа-частиц на ядрах ¹¹ в при энергиях 50 и 65 Мэв.....	20
<i>Омар Ж.О., Такибаев Н.Ж., Құрманғалиева В.О.</i> Фонон-фононное взаимодействие в кристаллических решетках нейтронных звезд.....	26
Химия	
<i>Полещук О. Х., Фатеев А. В., Адырбекова Г.М., Ермаханов М.Н., Саидахметов П.А.</i> Анализ химической связи в металлоценах методами теории функционала плотности.....	34
<i>Малышев В.П., Зубрина Ю.С., Макашева А.М.</i> Взаимосвязь тепловой и механической энергии при разрушении материалов.....	42
Жер туралы ғылым	
<i>Битимбаев М.Ж., Морозов Ю.П., Хамидулин И.Х.</i> Исследование закономерности накопления золота в замкнутых циклах измельчения.....	50
<i>Битимбаев М.Ж., Шемякин В.С., Скопов С.В.</i> Рентгенорадиометрическое обогащение медных и медно-цинковых руд Казахстана.....	55
<i>Ниценко А. В., Требухов С. А., Касымжанова А. К., Шендятин А. С.</i> Определение коэффициента диффузии мышьяка при пониженном давлении.....	63
Социальные науки	
<i>Қурманов Н.А., Рахимбекова А.Е., Бактымбет А.С., Махатова А.Б.</i> Развитие инновационной деятельности предприятий малого и среднего бизнеса в Казахстане.....	70
<i>Kolbayev M. K., Нурлихина Г.Б., Турабаев Г.К.</i> Венчурное финансирование малого инновационного предпринимательства.....	80
* * *	
Астрофизика	
<i>Шукиргалиев Б.Т., Панамарев Т.П., Наурызбаева А.Ж., Қаламбай М.Т., Берцик П.П., Юст А., Шпурцем Р., Макуков М.А., Вильковиский Э.Я., Омаров Ч.Т.</i> Влияние профиля аккреционного газового диска на орбитальные параметры аккрецируемых звезд.....	87
<i>Жантаев Ж.Ш., Куратов К.С., Сейтимбетов А.М., Майлыбаев А.Т., Алимгазинова Н.Ш., Манапбаева А.Б., Куратова А.К., Изтлеуов Н.Т.</i> Система управления двухматричным фотометром.....	96
Физика	
<i>Буртебаев Н., Керимкулов Ж.К., Мухамеджанов Е.С., Алимов Д.К., Демьянова А.С., Данилов А.Н.</i> Исследование процессов рассеяния альфа-частиц на ядрах ¹¹ в при энергиях 50 и 65 Мэв.....	102
<i>Боос Э.Г., Темиралшев Т., Избасаров М., Самойлов В.В., Федосимова А.И.</i> Анализ структуры событий в антипротон - протонной аннигиляции и реакции перезарядки протона и антипротона при импульсе 22,4 ГэВ/с.....	108
<i>Бетекбаев А. А., Калыгулов Д. А., Скаков Д. М., Мукашев Б. Н.</i> Фотоэлектрическое преобразование солнечной энергии: состояние и перспективы использования проекта KAZPV.....	113
Технические науки	
<i>Бакранова Д.И., Кукушкин С.А., Бейсембетов И.К., Осипов А.В., Нусупов К.Х., Бейсенханов Н.Б., Кенжалиев Б.К., Мить К.А.</i> Структура эпитаксиальных пленок SiC, синтезированных методом замещения атомов.....	118
<i>Мусабеков Н.Р., Ибраев А.Х., Адильбеков М. Ж.</i> О вопросах разработки гибридной системы управления технологическим процессом на примере управления процессами теплообмена.....	125
<i>Дайрабай Д.Д., Голубев В.Г., Балабеков О.С., Бренер А.М.</i> Особенности образования кластерных дисперсий в условиях высокой концентрации нуклеатов.....	132
<i>Генбач А.А., Джаманкулова Н.О.</i> Исследование теплообмена в капиллярно-пористых системах охлаждения нового класса тепловых энергоустановок.....	139
<i>Машеков С.А., Абсадыков Б.Н., Алимкулов М.М.</i> Опыт применения рельсов в странах СНГ и использование его для разработки межгосударственного стандарта.....	146
<i>Телтаев Б. Б., Айтбаев К.А., Абляев С.А.</i> Влияние подземного коллектора на напряженно-деформированное состояние дорожной конструкции.....	162
<i>Бахтаев Ш.А., Бочкарева Г.В., Мусатирова Г.Д., Авхадиева Ф.Р.</i> Способ определения радиуса кривизны поверхности коронирующего электрода.....	173
Механика	
<i>Джолдасбеков С.У., Ибраев С.М., Сакенова А.М., Иманбаева Н.С., Нурмаганбетова А.Т.</i> Проектирование грузоподъемного рычажного механизма с помощью компьютерной системы Arm winmachine.....	180

Химия

Фазылов С.Д., Животова Т.С., Нуркенов О.А., Сатпаева Ж.Б., Абдыкалыков М.А., Мукашев А.Б., Жакупова А.Н., Мулдахметов М.З. Разработка оптимальных параметров получения брикетного топлива на основе угольных отсеков и угольного шлама..... 186

Мальшиев В.П., Зубрина Ю.С., Макашева А.М. Взаимосвязь тепловой и механической энергии при разрушении материалов..... 193

Айдарова С.Б., Тлеуова А.Б., Исаева А.Б., Шарипова А.А., Григорьев Д.О., Миллер Р. Применение эмульсии пикеринга для инкапсуляции гидрофобных агентов..... 200

Мамырбекова А., Баешов А.Б., Мамырбекова А. Электрохимическое поведение серы в различных средах при поляризации нестационарными токами..... 209

Коңурбаев А.Е., Баешов А.Б. Электрохимический способ получения сульфида цинка с применением композиционного сера-графитового электрода..... 214

Баешов А.Б., Коңырбаев А.Е., Адайбекова А.А., Баешова А.К. Мырыш және сульфит иондарының шыныграфит электродында бірге тотықсыздануы..... 222

Науки о Земле

Битимбаев М.Ж., Морозов Ю.П., Хамидулин И.Х. Исследование закономерности накопления золота в замкнутых циклах измельчения..... 231

Ниценко А. В., Требухов С. А., Касымжанова А. К., Шендяпин А. С. Определение коэффициента диффузии мышьяка при пониженном давлении..... 245

Метакса Г.П., Буктуков Н.С. Вулкан Йеллоустон. Научные мифы и реальность..... 252

Медицина

Рахимов К.Д., Адекенов С.М. Фармакологическое влияние новых природных препаратов в комбинации с цитостатиками на рост лекарственно резистентных метастазов..... 257

Рахимов К.Д. Индуцирование лекарственной резистентности метастазов перевиваемых опухолей в условиях доклиники..... 262

Аграрные науки

Аубакиров Х.А., Баймуканов Д.А., Рахманов С.С. Особенности распространения мастей в популяции лошадей, разводимых в крестьянском хозяйстве «Бапыш-Сейсенбай» Жамбылской области..... 268

Асембаева Э.К., Сейдахметова З.Ж., Велямов Т.М., Лесова Ж.Т., Нурмуханбетова Д.Е. Функциональные пищевые продукты. Кисломолочные продукты из верблюжьего молока..... 275

Общественные науки

Пилипчук Я.В. Падение Моголистана и уйгурских государств в XVII-XVIII вв..... 285

Есенбекова А.Б. К проблеме устойчивого развития экономики и ее зависимости от глобального изменения климата..... 302

Жакипов Б. М. Анализ тенденций развития выставочной деятельности за рубежом..... 309

Насимов М.О. Политический менеджмент: понятие, структура и основные виды..... 316

Панзабекова А.Ж., Турабаев Г.К. Стимулирование труда в реальном секторе экономики: принципы и подходы... 324

Сейтахметова Н.Л., Жандосова Ш.М., Смагулов К.Е. Политический аспект проблемы религиозного экстремизма..... 332

CONTENT

Astrophysics

- Shukirgaliyev B.T., Panamarev T.P., Naurzbaeva A.Zh., Kalambay M.T., Makukov M.A., Vilkoviskij E.Y., Omarov Ch.T., Berczik P.P., Just A., Spurzem R.* Effect of gas accretion disc profile on orbital parameters of the accreted stars... 5
Zhantayev Zh.Sh., Kuratov K.S., Seytimbetov A.M., Mailybayev A.T., Alimgazinova N.Sh., Manapbayeva A.B., Kuratova A.K., Itleuov N.T. Two-matrix photometer control system..... 14

Physics

- Burtebayev N., Kerimkulov Zh.K., Mukhamejanov Y.S., Alimov D.K., Demyanova A.S., Danilov A.N.* Study of scattering of alpha particles from ^{11}B nuclei at 50 and 65 mev.....20
Omar Zh., Takibayev N.Zh., Kurmangaliyeva V.O. Phonon-phonon interaction in the crystal lattice of neutron star.....26

Chemistry

- Poleshchuk O. Kh., Fateev A. V., Adyrbekova G.M., Ermakhanov M. N., Saidakhmetov P.A.* Analysis of the chemical bond in the metallocene using density functional theory.....34
Malyshev V.P., Zubrina Y.S., Makasheva A.M. Interconnection of heat and mechanical energy in the destruction of materials..... 42

Earth sciences

- Bitimbayev M.Z., Morozov Y.P., Khamidullin I.H.* Study of gold accumulation regularities in closed grinding cycles..... 50
Bitimbayev M.Z., Shemyakin V.S., Skopov S.V. X-ray radiometric enrichment of copper and copper zinc ores of Kazakhstan..... 55
Nitsenko A. V., Trebukhov S. A., Kasymzhanova A. K., Shendyapin A. S. Determination of arsenic diffusion coefficient under reduced pressure..... 63

Social sciences

- Kurmanov N., Rakhimbekova A., Baktymbet A., Makhatova A.* Development of innovative activity in small and medium enterprises in Kazakhstan..... 70
Kolbayev M.K., Nyurlikhina G.B., Tyurabayev G.K. Venture financing of small innovative entrepreneurship..... 80

* * *

Astrophysics

- Shukirgaliyev B.T., Panamarev T.P., Naurzbaeva A.Zh., Kalambay M.T., Berczik P.P., Just A., Spurzem R., Makukov M.A., Vilkoviskij E.Y., Omarov Ch.T.* Effect of gas accretion disc profile on orbital parameters of the accreted stars..... 87
Zhantayev Zh.Sh., Kuratov K.S., Seytimbetov A.M., Mailybayev A.T., Alimgazinova N.Sh., Manapbayeva A.B., Kuratova A.K., Itleuov N.T. Two-matrix photometer control system..... 96

Physics

- Burtebayev N., Kerimkulov Zh.K., Mukhamejanov Y.S., Alimov D.K., Demyanova A.S., Danilov A.N.* Study of scattering of alpha particles from ^{11}B nuclei at 50 and 65 mev.....102
Boos E.G., Temiraliyev T., Izbasarov M., Samoilov V.V., Fedosimova A.I. Analysis of events structure in antiproton-Proton annihilation reaction and reaction of proton and antiproton recharging at 22.4 GeV/c..... 108
Betekbayev A.A., Kalygulov D.A., Skakov D.M., Mukashev B.N. Photovoltaic conversion of solar energy: state and perspectives of KAZPV project..... 113

Technical sciences

- Bakranova D.I., Kukushkin S.A., Beisembetov I.K., Osipov A.V., Nussupov K.Kh., Beisenkhanov N.B., Kenzhaliev B.K., Mit' K.A.* The structure of SiC epitaxial films, synthesized by substitution of atoms.....118
Mussabekov N.R., Ibraev A.K., Adilbekov M.J. On the issues of development the hybrid control system by technological process on the example of the control heat exchange processes.....125
Dairabay D. D., Golubev V.G., Balabekov O.S., Brener A.M. Peculiarities of formation of the cluster dispersions at a high concentration of nuclides..... 132
Genbach A.A., Jamankulova N.O. Study of heat and mass transfer in capillary-porous cooling systems of a new class of energy thermal installations.....139
Mashekov S.A., Absadykov B.N., Alimkulov M.M. Case history of tracks in CIS countries and their application in developing interstate standard 146
Teltayev B.B., Aitbayev K.A., Ablaliev S.A. Impact of underground collector on stress strain behaviour of pavement structure..... 162
Bahtaev Sh.A., Bochkareva G.V., Musapirova G.D., Avhadieva F.R. Method for determining the radius of curvature of the discharge electrodes surface.....173

Mechanics

- Dzholdasbekov S.W., Ibraev S.M., Sakenova A.M., Imanbaeva N.S., Nurmaganbetova A.T.* Design of hoisting bar mechanism with *Apm winmachine* computer system..... 180

Chemistry

- Fazylov S.D., Zhivotova T.S., Nurkenov O.A., Abdykalykov M.A., Satpaeva Zh.B., Mukashev A.B., Zhakupova A.N., Muldakhmetov M.Z.* Development of optimal parameters for production of fuel briquettes on the basis of the coal screening leftovers and coal slurries.....186
Malyshev V.P., Zubrina Y.S., Makasheva A.M. Interconnection of heat and mechanical energy in the destruction of materials 193

<i>Aidarova S., Tleuova A., Issayeva A., Sharipova A., Grigoriev D., Miller R.</i> Application of the pickering emulsion for encapsulation of hydrophobic agents.....	200
<i>Mamyrbekova A., Bayeshov A.B., Mamyrbekova A.</i> Electrochemical behaviour of sulphur in various environments at polarization by non-stationary currents.....	209
<i>Konurbaev A.E., Baeshov A.B.</i> Electrochemical method for producing of zinc sulphide by using sulfur- graphite composite electrode.....	214
<i>Baeshov A.B., Konurbaev A.E., Adaybekova A.A., Baeshova A.K.</i> Joint restoration of zinc and sulfite ions on glass graphite electrodes.....	222
Earth Sciences	
<i>Bitimbayev M.Z., Morozov Y.P., Khamidullin I.H.</i> Study of gold accumulation regularities in closed grinding cycles....	231
<i>Nitsenko A. V., Trebukhov S. A., Kasymzhanova A. K., Shendyapin A. S.</i> Determination of arsenic diffusion coefficient under reduced pressure.....	245
<i>Metaksa G.P., Buktukov N.S.</i> Yellowstone volcano. Scientific myths and reality.....	252
Medicine	
<i>Rakhimov K.D., Adekenov S.M.</i> Pharmacological effect of new natural drugs in combination with cytostatics on the growth of drug-resistant metastases.....	257
<i>Rakhimov K.D.</i> The induction of drug resistance metastasis of transplantable tumors in preclinical conditions.....	262
Agricultural sciences	
<i>Aubakirov Kh.A., Baimukhanov D.A., Rachmanov S.S.</i> Peculiarities of color types dispersion in population of horses bred at the farm «Bapysh-Seisenbay» IN Zhambyl region.....	268
<i>Asembaeva E.K., Seydakhmetova Z.Zh., Velyamov T.M., Lesova Zh.T., Nurmuhambetova D.E.</i> Functional foods. Fermented dairy products from camel milk.....	275
Social Sciences	
<i>Pylycphuk Ya.V.</i> Fall of Mogolistan and Uighur states in XVII-XVIII centuries.....	285
<i>Esenbekova A.B.</i> To the problems of the sustainable development of the economy and its dependence on global climate change.....	302
<i>Zhakupov B.</i> Analysis of trends exhibition activities abroad.....	309
<i>Nassimov M.O.</i> Political management: concept, structure and main types.....	316
<i>Panzabekov A.Zh., Tyurabayev G.K.</i> Stimulation of labor in the real sector of the economy: principles and approaches..	324
<i>Seitakhmetova N.L., Zhandossova Sh.M., Smagulov K.E.</i> Political aspect of problem of religious extremism	
<i>Seitakhmetova N.L., Zhandossova Sh.M., Smagulov K.E.</i> Political aspect of problem of religious extremism.....	332

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

For information on Ethics in publishing and Ethical guidelines for journal publication see <http://www.elsevier.com/publishingethics> and <http://www.elsevier.com/journal-authors/ethics>.

Submission of an article to the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan implies that the work described has not been published previously (except in the form of an abstract or as part of a published lecture or academic thesis or as an electronic preprint, see <http://www.elsevier.com/postingpolicy>), that it is not under consideration for publication elsewhere, that its publication is approved by all authors and tacitly or explicitly by the responsible authorities where the work was carried out, and that, if accepted, it will not be published elsewhere in the same form, in English or in any other language, including electronically without the written consent of the copyright-holder. In particular, translations into English of papers already published in another language are not accepted.

No other forms of scientific misconduct are allowed, such as plagiarism, falsification, fraudulent data, incorrect interpretation of other works, incorrect citations, etc. The National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan follows the Code of Conduct of the Committee on Publication Ethics (COPE), and follows the COPE Flowcharts for Resolving Cases of Suspected Misconduct (http://publicationethics.org/files/u2/New_Code.pdf). To verify originality, your article may be checked by the originality detection service Cross Check <http://www.elsevier.com/editors/plagdetect>.

The authors are obliged to participate in peer review process and be ready to provide corrections, clarifications, retractions and apologies when needed. All authors of a paper should have significantly contributed to the research.

The reviewers should provide objective judgments and should point out relevant published works which are not yet cited. Reviewed articles should be treated confidentially. The reviewers will be chosen in such a way that there is no conflict of interests with respect to the research, the authors and/or the research funders.

The editors have complete responsibility and authority to reject or accept a paper, and they will only accept a paper when reasonably certain. They will preserve anonymity of reviewers and promote publication of corrections, clarifications, retractions and apologies when needed. The acceptance of a paper automatically implies the copyright transfer to the National Academy of sciences of the Republic of Kazakhstan.

The Editorial Board of the National Academy of sciences of the Republic of Kazakhstan will monitor and safeguard publishing ethics.

Правила оформления статьи для публикации в журнале смотреть на сайте:

www.nauka-nanrk.kz

ISSN 2518-1483 (Online), ISSN 2224-5227 (Print)

<http://www.reports-science.kz/index.php/ru/>

Редакторы *М. С. Ахметова, Д. С. Аленов, Т.А. Апендиев*
Верстка на компьютере *А.М. Кульгинбаевой*

Подписано в печать 10.10.2016.
Формат 60x881/8. Бумага офсетная. Печать – ризограф.
п.л. Тираж 2000. Заказ 5.

Национальная академия наук РК
050010, Алматы, ул. Шевченко, 28, т. 272-13-18, 272-13-19