

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

2017 • 1

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



Б а с р е д а к т о р ы
х.ғ.д., проф., ҚР ҰҒА академигі **М.Ж. Жұрынов**

Р е д а к ц и я а л қ а с ы:

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://nauka-nanrk.kz_reports-science.kz

© Қазақстан Республикасының Ұлттық ғылым академиясы, 2017

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)
Садьбеков 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, 2017 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)**Ilolov 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, 2017

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

O.Kh. Poleshchuk¹, A.G.Yarkova¹, G.M. Adyrbekova²,
L. A. Zhurhabayeva², P.A. Saidakhmetov²

¹Tomsk State Pedagogical University, Tomsk, Russia;

²M.Auezov South Kazakhstan state University, Shymkent, RK

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

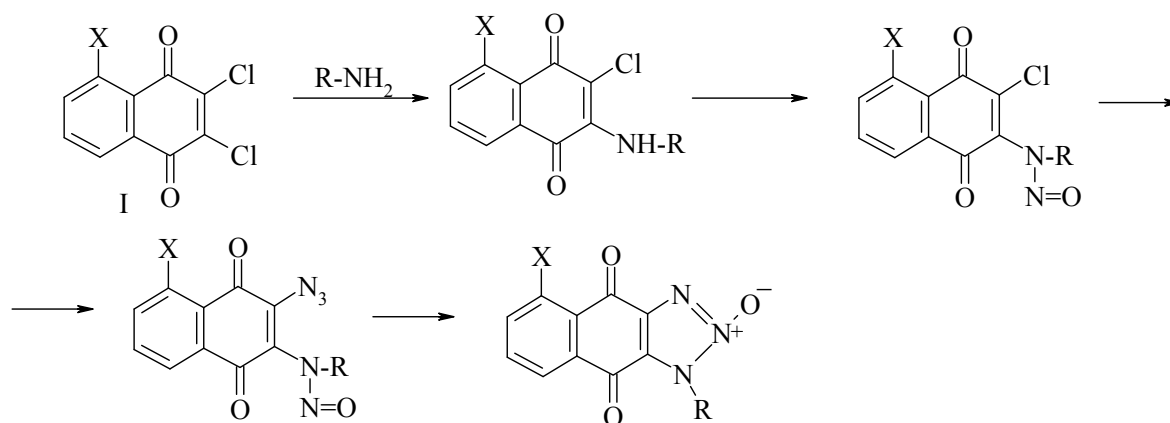
STUDY OF THE MECHANISM OF THE REACTION OF TRIAZOLIDE'S FORMATION OF USING THE DENSITY FUNCTIONAL THEORY

Abstract. We have analyzed the thermodynamic parameters of the reaction of the amination in the gas phase and in solution by calculation by density functional method using fully electronic basis set 6-31G(d). It was shown the dichlorojujone aniline's thermodynamic and kinetic possibility of a reaction of condensation. It was estimated the transition states, activation energies and rate constants for the reaction of condensation.

Keywords: the theory of functional density; B3LYP/6-31G (d); naphthoquinones; the mechanism of the reaction.

Introduction

Works [1-2] have described an experimental approach to triazole oxides. The interest in compounds of this structure is due to the fact that some of them [3] have antitumor activity. Given this and lack of in-depth information about the properties of the condensed triazole oxides we will consider experimental and quantum-chemical peculiarities of their formation, as was shown earlier [2]. It is known that the simplest way to naftatriazole oxides is the following scheme:



X = H, OH

The aim of this work was to study the density functional method of the mechanism of the first reaction stage of condensation dichlorojujone with aniline and the explanation of the observed experimental data. For all calculations there were used fully electronic basis set 6-31G (d) with density functional B3LYP. This calculation method is widely used for analysis of thermodynamic parameters of organic compounds.

Experimental part

All calculations were carried out using standard software package GAUSSIAN'03 [4]. For the theoretical study, we used quantum-chemical density functional method (DFT, density function theory methods). The calculations were performed using the hybrid density functional method B3LYP with a functional exchange Beck (B3) [5] and the correlation functional of Lee, Yang and steam (not LYP) [6]. For all atoms basis set 6 fully electronic-31G (d) was used. The geometries of all calculated molecules were fully optimized, the lack of imaginary frequencies confirmed their stationary. Optimization of transition States was carried out using the STQN method [7], transition states with only one imaginary frequency. The calculations in ethanol solution are carried out by the same methods, using a polarized continuum (PCM) [8]. The energy is calculated compounds adjusted to the zero vibration energy (ZPVE) and reduced to standard conditions (298.15 K, 1 ATM.) using thermal corrections to enthalpy and free energy.

Results and discussion

The accuracy of any quantum-chemical calculations is determined by the agreement of experimental and calculated from molecular geometry. The calculated bond lengths and the bond angles of the studied molecules together with the available experimental data are represented in tables 1-2.

Table 1 - The geometrical parameters of the juglone

Bond	R (exper.), Å	R (calc.), Å	the valence angle	ω (exper.), degree	ω (calc.), degree
C-C	1.35 ± 0.02	1.34	O-C-C	120 ± 1	119.4
C-C	1.51 ± 0.03	1.49	C-C-C	123 ± 2	121.8
C-C	1.44 ± 0.02	1.48	C-C-C	120 ± 2	122
C-O	1.2 ± 0.02	1.23	C-C-O	121 ± 2	120.3
O-H	1.51 ± 0.02	1.49	C-C-C	119 ± 1	117.5
C-C	1.37 ± 0.02	1.42	C-C-C	118 ± 1	120
C-C	1.51 ± 0.02	1.47	C-C-C	122 ± 1	120.7
C-O	1.33 ± 0.02	1.34	C-C-C	118 ± 1	118.2
C-C	1.44 ± 0.02	1.41	C-C-C	122 ± 1	120.1
C-C	1.38 ± 0.02	1.39	O-C-C	115 ± 2	118.2
C-C	1.42 ± 0.03	1.41	C-C-C	122 ± 1	119.4
C-C	1.36 ± 0.02	1.39	C-C-C	119 ± 2	120.2
C-C	1.4 ± 0.02	1.42	C-C-C	120 ± 2	121
			C-C-C	119 ± 2	119.5
			C-C-C	118 ± 1	120.6
			C-C-C	116 ± 1	119.3
			C-C-C	117 ± 1	119.4

Comparison of the calculated geometric parameters with experimental data shows that the calculated lengths of bonds mostly underestimated, and bond have been completed. However the analysis leads to good quality there was a problem with the correlation between the calculated and experimental bond lengths of and valence angles [9-12] for some of the studied molecules:

$$R^{\text{exp.}} = -0.04 + 1.03 R^{\text{calc.}} \quad (r = 0.996; s = 0.02; n = 22) \quad (1)$$

$$\omega^{\text{exp.}} = -17.9 + 1.14 \omega^{\text{calc.}} \quad (r = 0.982; s = 1.5; n = 32) \quad (2)$$

In these and the following correlation equations, r is the correlation coefficient, s is standard deviation and n is the number of compounds included in the correlation.

Table 2 - The geometrical parameters of the naphthazarine

Bond	R (exper.), Å	R (calc.), Å	the valence angle	ω (exper.), degree	ω (calc.), degree
C-C	1.431 ± 0.006	1.47612	C-C-H	120 ± 2	122.4
C-C	1.342 ± 0.007	1.34598	C-C-O	118.5 ± 0.4	119.8
C-C	1.413 ± 0.007	1.42717	C-C-H	120 ± 2	115.8
C-C	1.427 ± 0.005	1.4062	C-C-O	122.2 ± 0.4	122.4
C-C	1.436 ± 0.006	1.41946	C-O-H	104 ± 2	106.5
C-C	1.342 ± 0.007	1.37442	O-H-O	152 ± 4	147.3
C-O	1.301 ± 0.004	1.24774	H-O-C	99 ± 2	101.1
C-O	1.288 ± 0.004	1.33758	O-C-C	121.4 ± 0.4	122.4
C-H	0.96 ± 0.005	1.08626	C-C-C	119.7 ± 0.4	119.7
C-H	0.98 ± 0.005	1.08533	C-C-H	117 ± 3	117.9
O-H	1.06 ± 0.05	0.99638	C-C-H	122 ± 3	121.3
H-O	1.59 ± 0.05	1.7001	C-C-C	120.6 ± 0.4	121.8
			C-C-C	119.2 ± 0.3	117.8
			C-C-C	120 ± 0.4	120.3
			C-C-C	119.5 ± 0.4	119.9
			C-C-C	121.9 ± 0.4	120.8
			C-C-C	119 ± 0.4	119.3

The table 3 shows the calculated and experimental [13-15] values of wavelength UV spectra (λ), IR spectra (ω) spectra and the ^1H and ^{13}C NMR (δ) of some quinone molecules.

The correlation equations (3-5) show that our calculations allow to estimate the spectral parameters with a sufficient degree of accuracy.

$$\lambda^{\text{exp.}} = -16 + 1.06 \lambda^{\text{calc.}} \quad (r = 0.998; s = 7; n = 22) \quad (3)$$

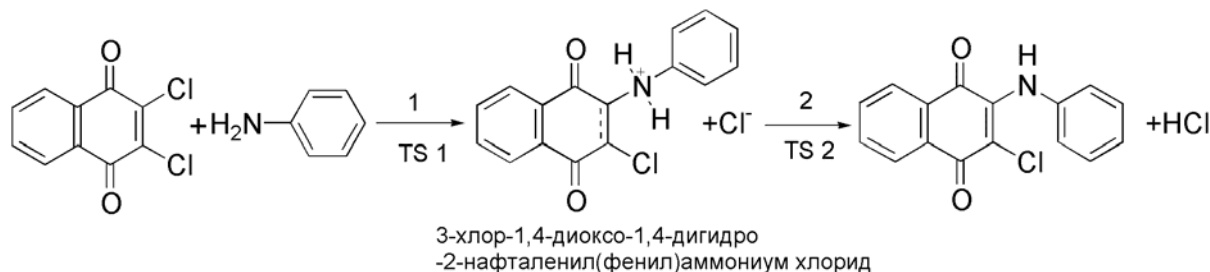
$$\delta^{\text{exp. } ^1\text{H}} = 1.23 + 0.83 \delta^{\text{calc. } ^1\text{H}} \quad (r = 0.995; s = 0.2; n = 19) \quad (4)$$

$$\delta^{\text{exp. } ^{13}\text{C}} = 4.7 + 0.92 \delta^{\text{calc. } ^{13}\text{C}} \quad (r = 0.996; s = 2.2; n = 8) \quad (5)$$

$$\omega^{\text{rcg/}} = 32 + 0.99 \omega^{\text{calc.}} \quad (r = 0.995; s = 30; n = 18) \quad (6)$$

We obtained a correlation ratio suggest that expected thermodynamic parameters are quite close to experimental values. In addition, in [16] it is shown that among the methods of the density functional (BLYP, B3LYP, PB86, B3P86, BPW91, B3PW91 and SVWN) B3LYP method most accurately predicts thermodynamic parameters with an absolute error of 13 kJ/mol.

On the basis of the experiment we can assume the mechanism for the first reaction stage of the formation of intermediate and transition states:



The table 4 shows the results of quantum-chemical calculations of the enthalpies (ΔH) and free Gibbs energies of the amination's reactions for some naphthoquinones with aromatic amines. From table 4 it is shown that all the reactions are thermodynamically favorable in the gas phase and in solvent. However, the solvent Gibbs energy is approximately two times larger value due to the salvation of the reagents in ethanol.

Table 3 - The calculated and experimental ¹H-NMR and UV spectra

Molecule	The chemical shift, ppm.		Wavelength, nm		Molecule	The chemical shift, ppm.		Wavelength, nm	
	exp.	calc.	exp.	calc.		exp.	calc.	exp.	calc.
Naphthazarine	12.34	12.96	529	509	2 Anilino-3-harugon	7.18	7.05		
	7.14	7.35	319	333		7.32	7.28		
			279	278		7.34	7.33		
			226	227		7.36	7.41		
			216	222		7.78	7.69		
Dichlorotaurine	11.92	12.87	532	521		9.7	9.97		
	7.18	7.55	360	383		12.16	11.4		
			260	267		12.06	11.3		
			247	255		7.61	6.7		
			223	218		7.38	6.68		
Dichlormethane	7.81	8	341	340	7.09	6.4			
	8.2	8.6	333	333			332	328	
			282	278			258	252	
			252	253			246	242	
			231	228	1.4-Naphtine				
Juglone			214	227	1-Amino-9,10-anthraquinone			480	471.6
	11.9	12.7			2-Amino-9,10-anthraquinone			450	452
	7.54	7.85			1,6-Diamino-9,10-anthraquinone			490	476.7
	7.27	7.5			1,9-Diamino-9,10-anthraquinone			505	483
	7.15	7.05			1-Phenoxy-9,10-anthraquinone			364	336.6
Dichlorophen	11.38	12.4							
	7.77	8.11							
	7.64	7.75							
	7.39	7.47							

Table 4 - Thermodynamic characteristics of the reagents, products and transition states (kJ/mol)

Reagent	Arylamine	ΔH	ΔG		ΔG^\ddagger_{EtOH}	E_a
			gas phase	EtOH		
2,3-Dichlor-1,4-naphthoquinone	Aniline	-46	-36	-45	80	94
	<i>p</i> -Toluidine	-46	-42	-47	78	91
	<i>m</i> -Toluidine	-45	-41	-45	74	94
	Anisidine	-60	-45	-59	64	76
	<i>p</i> -chloraniline	-44	-34	-40	89	100
2,3-Dichlorojuglone	Aniline	-51	-41	-47	75	86
	<i>p</i> -Toluidine	-51	-47	-43	73	85
	<i>m</i> -Toluidine	-49	-45	-41	77	87
	Anisidine	-65	-50	-55	98	68
	<i>m</i> -Toluidine	-45	-41	-45	74	94

To clarify the reaction mechanism it is important to know how adequately the chosen method can predict the activation energy of the reactions of amination. To this point of view, using B3LYP/6-31G(d) level of the theory, we have calculated transition states for several reactions (table. 4). For optimization of transition states, we used two methods: the traditional optimization of the transition state using the algorithm of berny(?) [17] and the method STQN (Synchronous Transit-Guided Quasi-Newton Methods) [7]. STQN method has proved to be most convenient to optimize transition structures. We have used the analyzed vibrations corresponding to the imaginary frequency, direction of changes in the structure along the reaction path (the IRC calculation [18, 19]) for verification of the transitional status.

Using both methods of calculation, we estimated transition states for several amination's reactions and using the resulting data we have calculated the energy of activation of these reactions in the gas phase according to the equation:

$$E_a = \Delta H^\ddagger + nRT, \quad (7)$$

where E_a is the activation energy, ΔH^\ddagger is the activation enthalpy, using the estimated enthalpies of reactant and transition state, n is the reaction order, R is the gas constant, T is the absolute temperature.

However, it is known that the reaction in reality take place in the solutions [2]. We have calculated the activation energy in the ethanol solution as the difference of free Gibbs energies in solution of the reagent and transition states (ΔG^\ddagger). In principle, the route of the reaction of the amination can pass sequentially through the first, the formation of the cat ion and then through the second transition state (Fig. 1a-b).

We calculated the cat ion and both the transition state. However, from the profile of the reaction of the amination (Fig. 2), built according to the energy change of the reactants, transition states, cat ion and the products of the reaction it was shown that the formation of the cat ion and the second transition state is thermodynamically not profitable. This is indicated by negative values of enthalpy and of the Gibbs free energy and activation energy calculated in relation to the second transition state. Apparently, this is due to the fact that the second transition state is a local maximum having a small value of negative-frequency vibrations ($\sim -45 \text{ cm}^{-1}$) and represents the vibration of the deformation of benzene ring in the amine (Fig. 1B). The visualization of the molecular orbitals confirms the findings.

From Fig. 3 a-g we can see that the maximum electron density of the HOMO orbital is located on naphthoquinone ring and under the rules of the Fukui nucleophilic reagent comes closer to the ring carbon atoms forming the first transition state. In the second transition state, the electron density in HOMO orbital is located mainly on the molecule of the amine. In the cat ion the maximum electron density in HOMO is located on the reverse side of the ring, which does not allow obtaining an effective interaction between the naphthoquinones and amine.

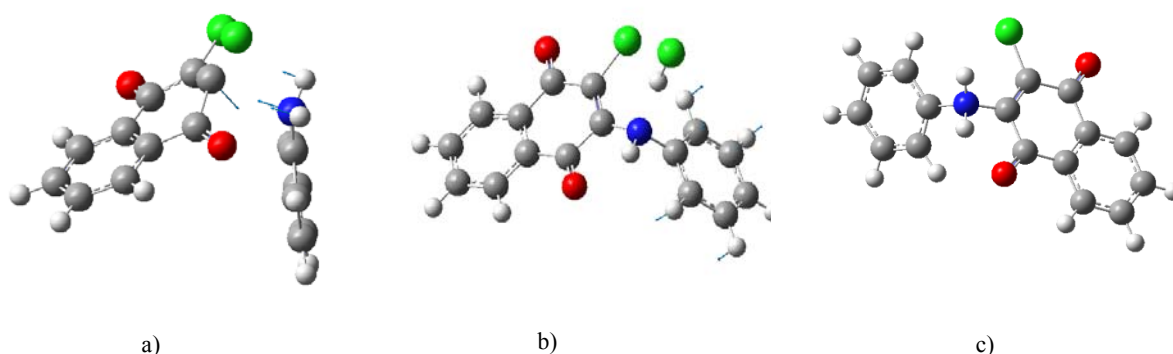


Fig. 1 - The optimized at the B3LYP/6-31G(d) structure of the first transition state (a), second transition state (b), cation (c)

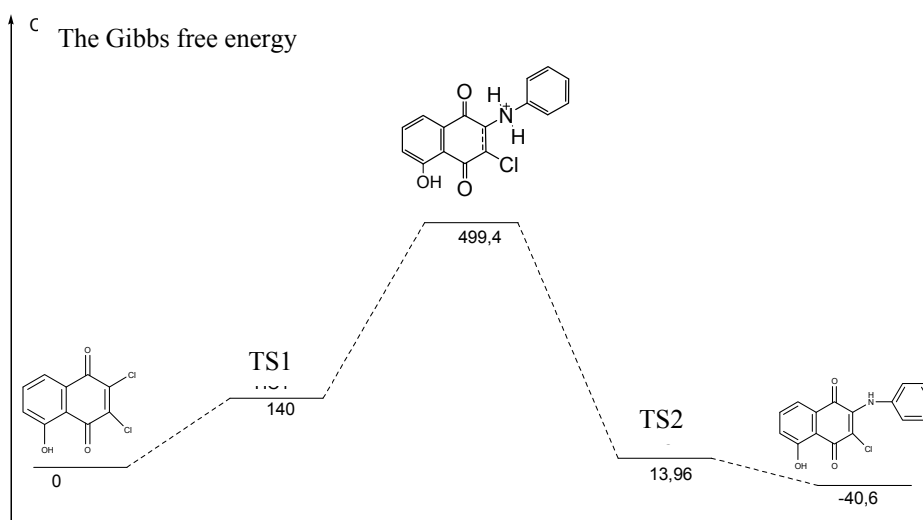


Fig. 2 - The full energy profile of the reaction amination juglone, (kJ/mol)

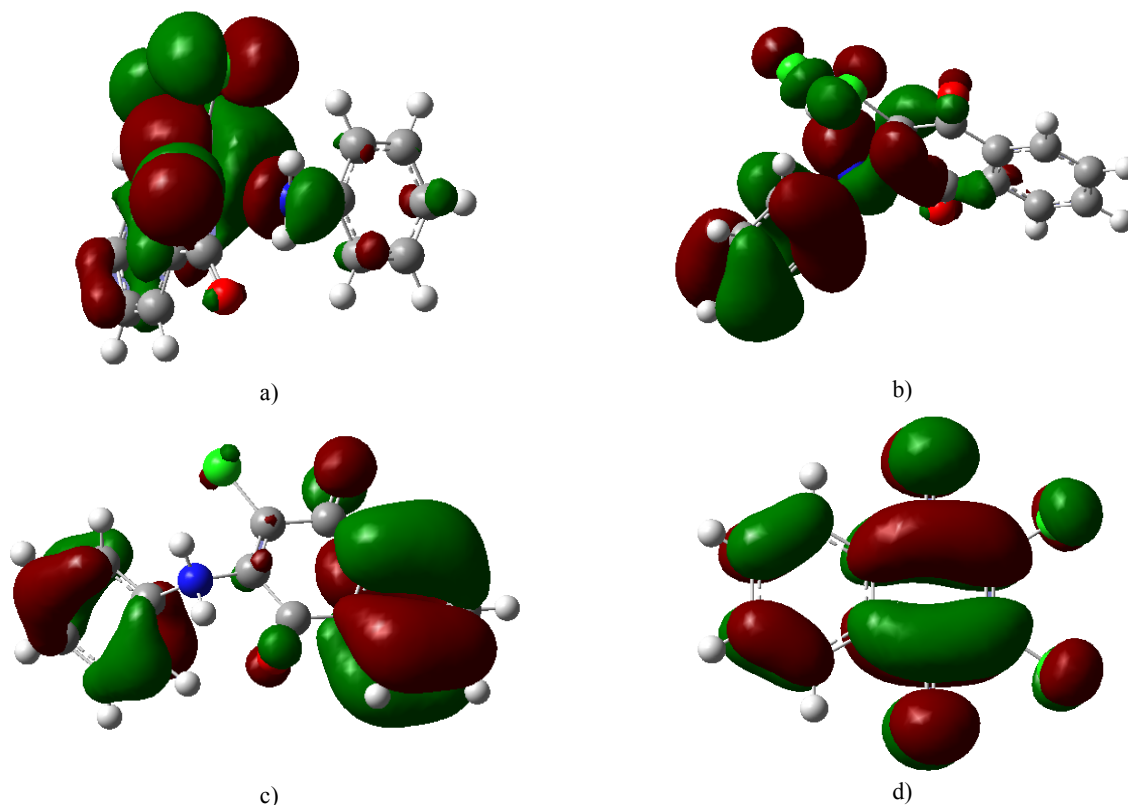


Fig. 3 - The highest occupied molecular orbitals of the first transition state (a), second transition state (b), cat ion (c), the lowest free molecular orbital of juglone (d)

The calculated by the first transition state values of the activation energy is less in the solution than in the gas phase and are close to known experimental values for S_NAr reactions [20]. The results of the calculation in all cases, the first transition states represent intermediates, in which the cleavage of the chlorine atom from the naphthoquinones and the formation of weak bonds between the carbon atoms of naphthoquinones and nitrogen of the amino group (1.8 Å) (Fig. 1A). This condition is really transitional because it has one negative vibrational frequency ($\sim -350 \text{ cm}^{-1}$), characteristic for the transition state and represents the valence vibration of the C-N bond. Considering all the above, we can assume that the reaction amination passes through the first transition state, which leads to significant activation energies.

The obtained values of the activation energy allowed to calculate on the base of the equations (8) and (9) the rate constant of the reactions in the gas phase [21] (tab. 5).

$$k = A e^{-\frac{E_a}{RT}}, \quad (8)$$

where k is the rate constant, A is the pre-exponential factor;

$$A = \left(\frac{k_B T}{h} \right)^{1/C_0} e^2 e^{\Delta S^\ddagger / R}, \quad (9)$$

where k_B is the Boltzmann's constant, h – Planck's constant, ΔS^\ddagger is the entropy of activation. For the calculation of the rate constant in the solution we have used the formula [22]:

$$k = \frac{k_B T}{h} e^{-\Delta G^\ddagger / RT}$$

Table 5 - The rate constants of the reactions amination (s⁻¹)

Reagents	Arylamine	K exp.	K calc. (gas)	K calc. (solution)
2,3-Dichlor-1,4-naphthoquinone	Aniline	0.5 · 10 ⁻³	1.64 · 10 ⁻¹¹	0.68
	<i>n</i> -Toluidine	0.4 · 10 ⁻²	1.89 · 10 ⁻¹⁰	1.65
	<i>n</i> -chloraniline	0.1 · 10 ⁻⁵	3.15 · 10 ⁻¹⁰	0.03
2,3-Dichlorojujglone	Aniline	0.4 · 10 ⁻⁴	1.89 · 10 ⁻¹⁰	4.82
	<i>n</i> -Toluidine	0.1 · 10 ⁻³	5.87 · 10 ⁻⁹	10.32
	<i>m</i> -Toluidine	0.55 · 10 ⁻⁴	2.33 · 10 ⁻⁹	2.01
	<i>p</i> -chloraniline	0.7 · 10 ⁻⁵	2.09 · 10 ⁻¹¹	0.135

From the data of table 5 we can see that calculated in the gas phase rate constants is much less than experimental values, while in solution they are approaching the last. Of course, the absolute values of the calculated rate constants are quite far from the experimental values, but the order changes on a range of substituent in the amine is the similar.

Conclusion

1. It is shown that the density functional method to calculate the spatial and electronic structure of the reactants of the reactions amination of naphthoquinones gives adequate results in the prediction of geometrical parameters, ultraviolet and NMR spectra.

2. It was suggested the possible existence of the transition states in the reaction of amination of the naphthoquinones. We have calculated their electronic and spatial structure and shown that the reaction takes place only via the first transition state.

3. It was calculated the activation energies and rate constants for the reactions of amination of various other amines. It is shown that the lower activation energy in solution provide an acceptable rate constants compared to reactions in the gas phase.

REFERENCES

- [1] Churakov A.M., Ioffe S.L., Strelenko Yu.A., Tartakovsky V.A. *Tetrahedron Letters*. **1996**. Vol.37. P.8577.
- [2] Radaeva N.YU., Dolgushina L.V., Sakilidi V.T., Gornostaev L.M. *Journal of Organic Chemistry*. 2005. Vol.41. P.926.
- [3] WO 2005/033048. Wnt pathway antagonists. Beachy P.A., Chen J.K., Mann R.K. Заявлено 29.09.2003; опублик. 14.04.2005
- [4] Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Gill P.M.W., Johnson B.G., Robb M.A., Cheeseman J.R., Keith T., Petersson G.A., Montgomery J.A., Raghavachari K., Al-Laham M.A., Zakrzewski V., Ortiz J.V., Foresman J.B., Cioslowski J., Stefanov B.B., Nanayakkara A., Challacombe M., Peng C.Y., Ayala P.Y., Chen W., Wong N.W., Andres J.L., Replogle E.S., Gomperts R., Martin R.L., Fox D.J., Binkley J.S., Defress D.J., Baker J., Stewart J.P., Head-Gordon, C. Gonzales, Pople J.A. *GAUSSIAN'03, Version 6.1, Gaussian Inc., Pittsburg, PA*, **2004**.
- [5] Becke A.D. *J Chem. Phys.* **1993**. Vol.98. P.5648.
- [6] Handy N.C., Cohe A. J., *Mol. Phys.* **2001**. Vol. 99. P.403.
- [7] Peng C., Ayala P.Y., Schlegel H. B, Frisch M. J. *J. Comp. Chem.* **1996**. Vol.17. P.49.
- [8] Tomasi J., Mennucci B., Cammi R. *Chem. Rev.* **2005**. Vol.105. P.2999.
- [9] Rubio P., Florencio F., Garcia-Blanco S., Rodriguez J.G. *Acta Crystallographica. Section C.* **1985**. C.41. P.1797.
- [10] Cradwick P. D., Hall D. *Acta Crystallographica. Section B.* **1971**. C.27. P.1990.
- [11] Cradwick P. D., Hall D. *Acta Crystallographica, Section B.* **1971**. C.27. P.1468.
- [12] Shiau W., Duesler E.N., Paul I.C., Curtin D.Y., Blann W.G., Fufe C.A. *Journal of the American Chemical Society*. **1980**. Vol.102. P.4546.
- [13] Andersen K.B. *Acta Chemica Scandinavica*. **1999**. Vol.53. P.222.
- [14] NIST Chemical Database. Standard Reference Database 17, Version 7.0 (Web Version), Release 1.4.2 Data Version 2009.01. <http://webbook.nist.gov/chemistry>
- [15] Yamaji T., Saito T., Hayamizu K., Yanagisawa M. and Yamamoto O., Spectral Database for Organic Compounds, SDBS. NMR, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST), Japan.
- [16] Curtiss L. A., Raghavachari K., Redfern P. C., Pople J. A. *J. Chem. Phys.* **1997**. Vol.106. P.1063.
- [17] GAUSSIAN 98W. User's Reference. Editors Fritsch E., Fritsch M.J. *Pittsburgh. Gaussian Inc.* **1998**. 280p.
- [18] Gonzalez C., Schlegel H.B. *J. Chem. Phys.* **1989**. Vol.90. P.2154.

- [19] Gonzalez C., Schlegel H.B. *J. Phys. Chem.* **1990**. Vol. 94. P.5523.
[20] Handbook chemist. V.3. Publishing House of Chemistry. 1964.
[21] Cramer C.J. *Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models. John Wiley&Sons, LTD.* **2002**. P.542.
[22] *Computational Organic Chemistry*: Ed. Bachrach S.M. *Wiley&Sons John. Inc.* **2007**. 478p.

ӘОЖ: 541.1+530.145

О.Х. Полещук¹, А.Г. Яркова¹, Г.М. Адырбекова², Л.А. Журхабаева², П.А. Саидахметов²

¹Томск ұлттық зерттеу политехникалық университеті, Томск қ., Ресей;

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

ТЫҒЫЗДЫҚТЫҢ ФУНКЦИОНАЛ ТЕОРИЯСЫН ҚОЛДАНЫП ТРИАЗОЛОКСИДТЕРДІҢ ТҮЗІЛУ РЕАКЦИЯСЫНЫҢ МЕХАНИЗМІН ЗЕРТТЕУ

Аннотация. Газды фазада және ерітіндіде аминдеу реакциясының термодинамикалық параметрлері толық электронды базисті жинақты 6-31G (d) қолданып тығыздық функционалы тәсілімен есептеу көмегімен талданды. Дихлорюглонның анилинмен конденсациялану реакциясының термодинамикалық және кинетикалық мүмкіндіктері көрсетілді. Конденсирлеу реакциясы үшін ауыспалы күйі, активтендіру энергиясы және жылдамдық константасы есептелді.

Түйін сөздер: тығыздықтың функционал теориясы; B3LYP/6-31G(d); нафтохинондар; реакция механизмі.

УДК 541.1+530.145

О. Х. Полещук¹, А. Г. Яркова¹, Г.М. Адырбекова², Л.А. Журхабаева², П.А. Саидахметов²

¹Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия;

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

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА РЕАКЦИИ ОБРАЗОВАНИЯ ТРИАЗОЛОКСИДОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

Аннотация. Проанализированы термодинамические параметры реакции аминирования в газовой фазе и в растворе с помощью расчетов методом функционала плотности с использованием полноэлектронного базисного набора 6-31G(d). Показана термодинамическая и кинетическая возможность реакции конденсирования дихлорюглона с анилином. Рассчитаны переходные состояния, энергии активации и константы скорости для реакции конденсирования.

Ключевые слова: теория функционала плотности; B3LYP/6-1G(d); нафтохиноны; механизм реакции.

Сведения об авторах:

Олег Хемович Полещук д.х.н., Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия, poleshch@tspu.edu.ru;

Гульмира Менлибаевна Адырбекова - к.х.н., доцент, Южно-Казахстанский государственный университет имени М.Ауезова, Шымкент, РК, adyrbekova.gulmira@mail.ru;

Журхабаева Лира Ашимовна - к.х.н., доцент, Южно-Казахстанский государственный университет имени М.Ауезова, Шымкент, РК;

Пулат Аблатыевич Саидахметов - к.ф.-м.н., зав.кафедрой, Южно-Казахстанский государственный университет имени М.Ауезова, Шымкент, РК, timpf_ukgu@mail.ru

МАЗМҰНЫ

Астрофизика

Буртебаев Н., Зазулин Д.М., Керимкулов Ж.К., Бактыбаев М., Буртебаева Дж., Алимов Д.К., Насурлла М. Астрофизикалық энергияларда $^{16}\text{O}(\text{p},\text{p})^{16}\text{O}$ серпімді шашырау процесінің дифференциалдық қималары бойынша жаңа өлшеулер..... 5

Техникалық ғылымдар

Полецук О.Х., Яркова А.Г., Адырбекова Г.М., Журхабаева Л.А., Саидахметов П.А. Тығыздықтың функционал теориясын қолданып триазолоксидтердің түзілу реакциясының механизмін зерттеу..... 11

Қартбаев Т.С. Тұлғаның аутентификациясы аясындағы есептерді шешудегі нейрожелілік технологияларды қолдану..... 19

Биология

Өсікбаева С.Ө., Орынбаева З.С., Төлеуханов С.Т. Қатерлі қуық асты ісігіне табиғи полифенолдар қосылыстарының әсер ету механизмдері..... 23

Медицина

Ожикенова А.К., Құрақбаев Қ.Қ., Қаратаев М., Ожикенов Қ.А. Күндізгі стационардағы төсек орындарының пайдалануды бақылау және талдау..... 31

Қоғамдық ғылымдар

Абдралимов Т.Қ., Қалдыбай Қ.Қ. Буддизмнің философиялық және этикалық құндылықтары..... 35

Техникалық ғылымдар

Удербаета А.Е., Машеков С.А., Абсадықов Б.Н. Алюминий қорытпаларының профильдер өндірісіне талдау..... 42

Высоцкая Н.А., Кабылбекова Б.Н., Курбанбеков К.Т., Джаксылықова Р.Б., Аманбаева К.Б., Шапалов Ш.К. Жылумен камту жүйелерінің құбырларындағы шөккен қақтардың құрамы және олардың жуғыш ерітінділер тандаудағы рөлі..... 47

Қартбаев Т.С. Тұлғаның аутентификациясы аясындағы есептерді шешудегі нейрожелілік технологияларды қолдану..... 52

Касимов Б.С., Тайсариева Қ.Н. Радиэлектрондық құрылғылардың баспа платаларының сенімділігін аппараттық түрде жүзеге асыру..... 57

Сахметова Г.Е., Бренер А.М., Балабеков О.С. Сулы типті тазалайтын бағаналарда ауқымды әсерінің математикалық модельдеу..... 62

Химия

Нүркенов О.А., Фазылов С.Д., Ғазалиев А.М., Сәтбаева Ж.Б., Амерханова Ш.К., Кәріпова Г.Ж. Изоникотин қышқылы гидразиді туындыларының синтезі мен қасиеттері..... 68

Малышев В.П., Зубрина Ю.С., Макашева А.М. ф саны және сандардың дағдылы қатары 79

Мусабекова Л.М., Қалбаева А.Т., Балабеков О.С., Құрақбаева С.Ж., Ельбергеннова Ф.Ж. Химиялық реакторлардағы концентрациялық осцилляциялар және жылжымалы фронттар. Математикалық үлгілер және оларды талдау..... 86

Мусабекова Л.М., Қалбаева А.Т., Балабеков О.С., Құрақбаева С.Ж., Усенова А.Ж. Химиялық реакторлардағы концентрациялық осцилляциялар және жылжымалы фронттар. Сандық эксперимент..... 96

Насиров Р. Д.И. Менделеевтің периодтық системасындағы IV - периодының байланыстырушы d - элементтері... 107

Биология

Мырқасымова А.С. Қырыққабаттың күн көбелектің жапырақты ағаштар үшін зиянкестігі (*Mamestra Brassicae* (Linnaeus, 1758) 112

Бахтиярова Ш.К., Қалекешов А.М., Макашев Е.К., Жақсымов Б.И., Қорғанбаева А.А., Капышева У.Н. Маңғыстау облысы тұрғындарының қалқанша безінің функционалдық ерекшеліктері..... 118

Махан А.Ж., Анарбекова А.І., Абидаева Р.А., Дауылбай А.Д., Рысбаева Г.С. Цианобактерия *Spirulina*-ның биологиялық сипаттамасы мен биотехнологиядағы рөлі..... 124

Өсікбаева С.Ө., Орынбаева З.С., Төлеуханов С.Т. Қатерлі қуық асты ісігіне табиғи полифенолдар қосылыстарының әсер ету механизмдері..... 130

Скиба Ю.А., Исмагулова Г.А., Чиркин А.П., Жидкеева Р.Е., Мальцева Э.Р., Бисенбай А.О., Березовский Д.В., Кузнецов А.Н., Сыздықов М.С., Айтхожина Н.А. Бруцеллез қоздырушыларының эпидемиологиялық бақылауын жетілдіруге арналған Қазақстан аумағында айналымда жүрген *Brucella SPP* штамдарының молекулалық-генетикалық типтелуі..... 141

Чиркин А.П., Есімбекова М.А., Мукин К.Б., Исмагулова Г.А. Оңтүстік және оңтүстік-шығыс қазақстандық *Aegilops Cylindrica* және *Aegilops Tauschii* популяцияларының филогенетикалық талдауы..... 150

Аграрлық ғылым

Салихов Т.Қ. Астана қаласының маңындағы геоэкожүйелеріндегі топырақ жамылғысының физикалық қасиеттері..... 156

Қоғамдық ғылымдар

Куртджемпе И., Дервиш Л. Триполиға итальян әскерлерінің шабуылы, Мұстафа Кемаль және оның жауынгерлерінің жаумен күреске шығуы..... 161

Аюпова З.К., Құсайынов Д.Ө. Мемлекет және құқық теориясы методологиясы және пәні мәселесіне..... 172

Картаева Т.Е. Түйенің қазақтардың тіршілікқашы жүйесіндегі рөлі..... 179

Кокұмбаева Б., Сағиқызы А. «Мәңгілік ел» – рухани эволюцияның жаңа сатысы 193

Пралиев Б.С. Қазақстанның монокалаларындағы инновациялық кәсіпкерліктің даму мәселелері..... 199

СОДЕРЖАНИЕ

Астрофизика	
<i>Буртебаев Н., Зазулин Д.М., Керимкулов Ж.К., Бактыбаев М., Буртебаева Дж., Алимов Д.К., Насурлла М.</i> Новые измерения дифференциальных сечений процесса упругого рассеяния $^{16}\text{O}(p,p)^{16}\text{O}$ при астрофизических энергиях.....	5
Технические науки	
<i>Полещук О. Х., Яркова А. Г., Адырбекова Г.М., Журхабаева Л.А., Саидахметов П.А.</i> Исследование механизма реакции образования триазолоксидов с использованием теории функционала плотности.....	11
<i>Картбаев Т.С.</i> Использование нейросетевых технологий при решении задач в области аутентификации личности.....	19
Биология	
<i>Осикбаева С.О., Орынбаева З.С., Тулеуханов С.Т.</i> Механизмы действия полифенольных соединений на раковые клетки простаты.....	23
Медицина	
<i>Ожикенова А.К., Куракбаев К.К., Каратаев М., Ожикенов К.А.</i> Мониторинг и анализ использования коечного фонда дневных стационаров.....	31
Общественные науки	
<i>Абдрасилов Т.К., Калдыбай К. К.</i> Философский и этические ценности буддизма.....	35

Технические науки	
<i>Удербаяева А.Е., Машеков С.А., Абсадыков Б.Н.</i> Анализ производства профилей из алюминиевых сплавов.....	42
<i>Высоцкая Н.А., Кабылбекова Б.Н., Курбанбеков К.Т., Джаксылыкова Р.Б., Аманбаева К.Б., Шапалов Ш.К.</i> Состав накипных отложений в трубах систем теплоснабжения, их роль в подборе промывных растворов.....	47
<i>Картбаев Т.С.</i> Использование нейросетевых технологий при решении задач в области аутентификации личности.....	52
<i>Касимов Б. С., Тайсариева К.Н.</i> Аппаратная реализация надежности печатных плат радиоэлектронных средств	57
<i>Сахметова Г.Е., Бренер А.М., Балабеков О.С.</i> Математическое моделирование масштабного эффекта в очистных колоннах мокрого типа.....	62
Химия	
<i>Нуркенов О.А., Фазылов С.Д., Газалиев А.М., Сатпаева Ж.Б., Амерханова Ш.К., Карипова Г.Ж.</i> Синтез и свойства производных гидразида изоникотиновой кислоты.....	68
<i>Мальшиев В.П., Зубрина Ю.С., Макашева А.М.</i> Число ϕ и натуральный ряд чисел.....	79
<i>Мусабекова Л.М., Калбаева А.Т., Балабеков О.С., Куракбаева С.Д., Ельбергеннова Г.Ж.</i> Концентрационные осцилляции и подвижные фронты в химических реакторах. Математические модели и их анализ.....	86
<i>Мусабекова Л.М., Калбаева А.Т., Балабеков О.С., Куракбаева С.Д., Усенова А.Ж.</i> Концентрационные осцилляции и подвижные фронты в химических реакторах. Численный эксперимент.....	96
<i>Насиров Р.</i> О связывающих d-элементах I-VIII групп 4-го периода периодической системы Д.И. Менделеев.....	107
Биология	
<i>Мыркасимова А.</i> Вредононость капустной совки (<i>Mamestra Brassicae</i> (Linnaeus, 1758) для лиственных деревьев..	112
<i>Бахтиярова Ш.К., Калекешов А.М., Макашев Е.К., Жаксымов Б.И., Корганбаева А.А., Капышева У.Н.</i> Функциональные особенности щитовидной железы у населения мангистауской области.....	118
<i>Махан А.Ж., Анарбекова А.И., Абидаева Р.А., Дауылбай А.Д., Рысбаева Г.С.</i> Цианобактерии <i>Spirulina</i> биологическое описание и роль в биотехнологии.....	124
<i>Осикбаева С.О., Орынбаева З.С., Тулеуханов С.Т.</i> Механизмы действия полифенольных соединений на раковые клетки простаты	130
<i>Скиба Ю.А., Исмагулова Г.А., Чиркин А.П., Жидкеева Р.Е., Мальцева Э.Р., Бисенбай А.О., Березовский Д.В., Кузнецов А.Н., Сыздыков М.С., Айтхожина Н.А.</i> Молекулярно-генетическое типирование штаммов <i>Brucella</i> SPP., циркулирующих в Казахстане для усовершенствования эпидемиологического мониторинга возбудителей бруцеллеза.....	141
<i>Чиркин А.П., Есимбекова М.А., Мукин К.Б., Исмагулова Г.А.</i> Филогенетический анализ популяций <i>Aegilops cylindrica</i> и <i>Aegilops Tauschii</i> южного и юго-восточного Казахстана.....	150
Аграрные науки	
<i>Салихов Т.К.</i> Физические свойства почвенного покрова геозкосистем пригорода Астаны.....	156
Общественные науки	
<i>Куртджемпе И., Дервиш Л.</i> Нападение итальянцев на Триполи, участие Мустафы Кемаля и его соратников в борьбе с врагом.....	161
<i>Аюпова З.К., Кусаинов Д.У.</i> К вопросу о предмете и методологии теории государства и права	172
<i>Картаева Т. Е.</i> Роль верблюда в системе жизнеобеспечения казахов	179
<i>Кокумбаева Б.Д., Сагикызы А.</i> «Мәңгілік Ел» как новая ступень духовной эволюции	193
<i>Прашев Б.С.</i> Проблемы развития инновационного предпринимательства в моногородах Казахстана.....	199

CONTENT

Astrophysics	
<i>Burtebayev N., Zazulin D.M., Kerimkulov Zh.K., Baktybayev M., Burtebayeva J., Alimov D.K., Nassurilla M.</i> New measurements of differential cross section for elastic scattering process of $^{16}\text{O}(p,p)^{16}\text{O}$ at astrophysical energies.....	5
Technical sciences	
<i>Poleshchuk O.Kh., Yarkova A.G., Adyrbekova G.M., Zhurhabayeva L. A., Saidakhmetov P.A.</i> Study of the mechanism of the reaction of triazolide's formation of using the density functional theory.....	11
<i>Kartbayev T.S.</i> Using the neural network technology in solving the tasks of personal identification	19
Biology	
<i>Ossikbayeva S.O., Orynbayeva Z.S., Tuleukhanov S.T.</i> The mechanism of polyphenolic compounds on prostate cancer.....	23
Medicine	
<i>Ozhikenova A.K., Kurakbayev K.K., Karataev M., Ozhikenov K.A.</i> Monitoring and analysis of bedspace use in day hospitals.....	31
Social sciences	
<i>Abdrasilov T.K., Kaldybay K.K.</i> Philosophical and ethical values of buddhism.....	35

Technical sciences	
<i>Uderbaeva A.E., Mashekov S.A., Absadykov B.N.</i> Analysis of the production of aluminum alloy.....	42
<i>Vysotskaya N. A., Kabylbekovab.N., Kurbanbekov K. T., Dzhaksylykova R. B., Amanbayev K. B., Shapalov Sh.K.</i> Structure of furring deposits in pipes of systems heat supply systems, its role in selection of washing solutions.....	47
<i>Kartbayev T.S.</i> Using the neural network technology in solving the tasks of personal identification	52
<i>Kassimov B. S., Taissariyeva K. N.</i> Apparatus realized reliability of radio electronic facilities' print boards.....	57
<i>Sakhmetova G.E., Brener A.M., Balabekov O.S.</i> Mathematical modelling of the scale-up phenomenon in purification of wet tyre towers	62
Chemistry	
<i>Nurkenov O.A., Fazylov S.D., Gazaliev, A.M. Satpaeva Zh.B., Amerkhanova Zh.K., Karipova G.Zh.</i> Synthesis and properties derivatives of hydrazide isonicotinic acid.....	68
<i>Malyshev V.P., Zubrina Y.S., Makasheva A.M.</i> Number ϕ and natural series of numbers.....	79
<i>Musabekova L.M., Kalbayeva A.T., Balabekov O.S., Kurakbayeva S.D., Elbergenova G.Zh.</i> Concentration oscillations and moving fronts in the chemical reactors. Mathematical models and their analysis.....	86
<i>Musabekova L.M., Kalbayeva A.T., Balabekov O.S., Kurakbayeva S.D., Usenova A.Zh.</i> Concentration oscillations and moving fronts in the chemical reactors. Numerical experiment.....	96
<i>Nasirov R.</i> Binding d-elements of the 4th period I-VIII groups of the periodic system.....	107
Biology	
<i>Myrkasimova A.C.</i> Deleterious of cabbage moth (<i>Mamestra Brassicae</i> (Linnaeus, 1758) for deciduous trees.....	112
<i>Бахтиярова Ш.К., Қалекешов А.М., Макашев Е.К., Жақсымов Б.И., Қорғанбаева А.А., Капышева У.Н.</i> Маңғыстау облысы тұрғындарының қалқанша безінің функционалдық ерекшеліктері.....	118
<i>Makhan A.Zh., Anarbekova A.I., Abildaeva R.A., Dauilbai A.D., Rysbayeva G.S.</i> Cyanobacteria <i>Spirulina</i> : biological characteristics and the role in biotechnology.....	124
<i>Ossikbayeva S.O., Orynbayeva Z.S., Tuleukhanov S.T.</i> The mechanism of polyphenolic compounds on prostate cancer.....	130
<i>Skiba Y. A., Ismagulova G. A., Chirkin A. P., Zhidkeeva R.E., Maltseva E. R., Bissenbay A.O., Berezovsky D.V., Kuznetsov A. N., Syzdykov M. S., Aitkhozhina N.A.</i> Molecular-genetic typing of <i>brucella</i> SPP. strains circulating in Kazakhstan for the improvement of epidemiological monitoring of brucellosis causative agents.....	141
<i>Chirkin A.P., Yessimbekova M.A., Mukin K.B., Ismagulova G.A.</i> Phylogenetic analysis of <i>Aegilops cylindrica</i> and <i>Aegilops Tauschii</i> populations inhabiting the territory of southern and south-eastern Kazakhstan.....	150
Agricultural sciences	
<i>Salikhov T.K.</i> The physical properties of soil geoecosystems of Astana suburb	156
Social Sciences	
<i>Kurtcephe İ., Dervish L.</i> The italian attack on Tripoli, the part of Mustafa Kemal and his associates in the fight with the Enemy.....	161
<i>Ayupova Z.K., Kussaino D.U.</i> To the question of the subject and methodology of the theory of the state and the law.....	172
<i>Kartaeva T.E.</i> The role of camel in the life of the Kazakhs.....	179
<i>Kokumbayeva B.D., Sagikyzy A.</i> Маңғілік Ел (Мәңгілік Ел) as a new stage of spirit evolution.....	193
<i>Praliev B.S.</i> Problems of development of innovative business in monocities of Kazakhstan.....	199

**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](http://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, А.Е. Бейсебаева*
Верстка на компьютере *А.М. Кульгинбаевой*

Подписано в печать 10.02.2017.
Формат 60x881/8. Бумага офсетная. Печать – ризограф.
13 п.л. Тираж 2000. Заказ 1.

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