

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

2017 • 2

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)
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, 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, M. N. Ermakhanov², 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, myrza1964@mail.ru, timpf_ukgu@mail.ru

STUDY OF THE REACTION AMINATION MECHANISM OF THE DICHLORONAPHTHALENE ON THE BASIS OF THE DENSITY FUNCTIONAL THEORY

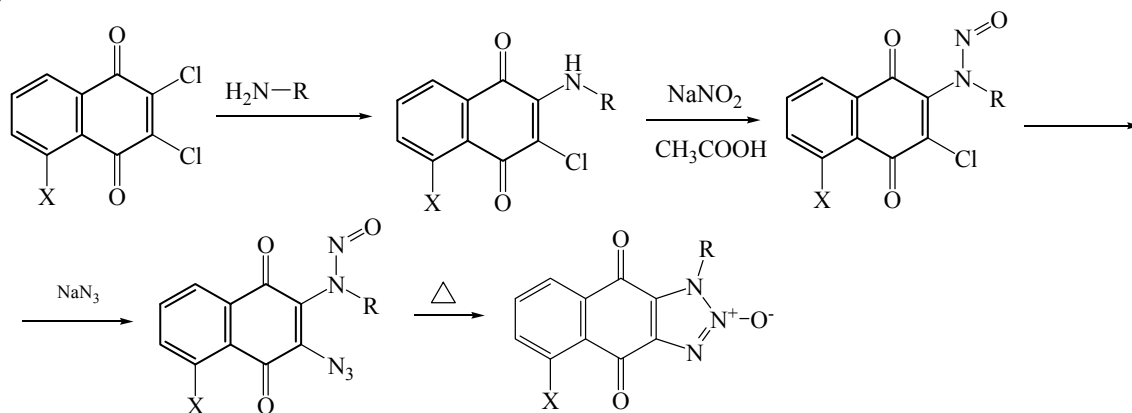
Annotation. The analysis of the thermodynamic parameters of the reaction amination in the gas phase and in solution on the basis of calculations at the density functional methods using the full-electron basis set 6-31G(d) in the GAUSSIAN'03 and TZ2P+ in the "Amsterdam density functional". It is shown that dichlorojuglone and aniline's thermodynamic and kinetic response capability. The calculated transition states, activation energies and analyzed orbital interactions were obtained.

Key words: the density functional theory; B3LYP/6-31G (d); naphthoquinones; reaction mechanism, natural bond orbital.

Introduction

In [1-2] works it was described an experimental approach to the synthesis of condensed triazole oxides. The interest in the compounds of this structure is due to the fact that some of them [3] have antitumor activity.

Given this and the need for amination reactions to obtain condensed triazole oxides, we have reviewed experimental and quantum-chemistry features of their formation, as was shown earlier [2]. Known on the basis of experimental data the simplest way to natural is the following scheme (X = H, OH):



The aim of this work was to use the density functional methods with the different functionals and basis states in the program packages GAUSSIAN and ADF for the use of the mechanism of the first stage

of the condensation reaction of dichloronaphthalene with arylamine and the explanation of the observed experimental data.

Experimental part

The calculations were carried out using standard software package GAUSSIAN'03 [4]. For theoretical studies was used quantum-chemical method functional density (DFT, Density Functional Theory).

The calculations were carried out hybrid density functional method B3LYP, the exchange Beke's functional (B3) [5] and the correlation functional of Lee, Yang and the Pair (LYP) [6]. For all atoms was used fully electronic basis set 6-31G (d). The geometries of all calculated molecules was fully optimized, the lack of imaginary frequencies confirmed their stationary nature. In the study of some molecules was observed up to three imaginary frequencies, but the use in this method is IRC still pointed to the transitional state (Fig. 1).

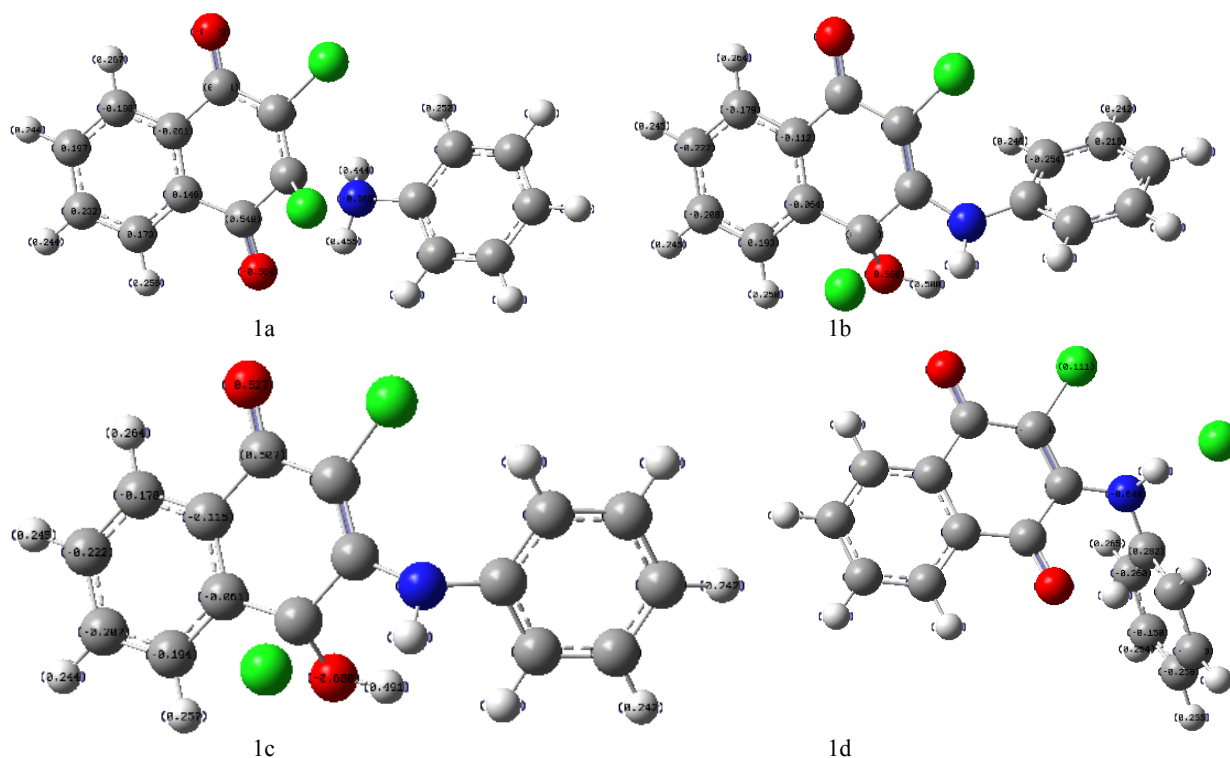


Figure 1 - Optimized at the B3LYP/6-31G(d) structure of the first transition state (a), intermediate (b), second transition state (c), the third transition state (d) with indicating of the natural charges on the atoms

The optimization of the transition states carried out using the STQN method [7], the transition states in most cases had only one imaginary frequency. The calculations in the solution of the ethanol carried out with the same methods using the polarized continuum model (PCM) optimization [8]. Energy of the calculated compounds adjusted to the zero vibration energy (ZPVE) and reduced to standard conditions (298.15 K, 1 ATM.) with the use of the thermal corrections to enthalpy and free energy.

Optimized geometry was used for calculating the total energy of the molecules within the software package ADF'2004 (Amsterdam density functional) in the gas phase and solution at the COSMO-optimized [9]. We have used the OPTX exchange functional [10] combined with the PBE correlation functional [11], and fully electronic triple- ζ with the given polarization Slater basis set orbitals.

Results and discussion

It is well known that all quantum chemical calculations are determined by the correspondence between the experimental and calculated geometric parameters of the molecules. Comparison of the calculated geometrical parameters with the experimental shows that the calculated lengths of the bonds

mostly underestimated, the valence angles are too high. However, the statistical analysis leads to good quality of the correlation ratios between the calculated and experimental bond lengths and valence angles [12-15] for a number 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 the standard deviation, and n is the number of compounds included in the correlation.

The calculated and experimental [16-18] values of the wavelengths of the UV spectra (λ), IR spectra (ω) spectra and the ^1H and ^{13}C NMR (δ) of some well-known quinones compounds allowed us to obtain the correlation ratios between the experimental and the calculated values. These equations (3-6) show that our calculations allow collected to evaluate the spectral parameters with a sufficient degree of accuracy

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

$$\delta^{\text{exp. } ^1\text{H}} = 0.16 + 1.01 \delta^{\text{calc. } ^1\text{H}} \quad \text{H} \quad (r = 0.983; s = 0,5; n = 50) \quad (4)$$

$$\delta^{\text{exp. } ^{13}\text{C}} = -1.8 + 1.05 \delta^{\text{calc. } ^{13}\text{C}} \quad \text{C} \quad (r = 0.985; s = 4; n = 50) \quad (5)$$

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

The obtained correlation ratios of the geometric and the spectral parameters suggest us that the calculated structure of our molecules, apparently, is close enough to real. In addition, in [19] it was shown that among the methods of the density functional (BLYP, B3LYP, PB86, B3P86, BPW91, B3PW91 and SVWN) B3LYP method most accurately predicts the thermodynamic parameters with an error of 13 kJ/mol, suggesting that the calculated thermodynamic parameters are quite close to experimental values.

Made earlier thermodynamic calculations of a number of organic reactions by the same method resulted in good agreement between the calculated and experimental values [20].

From general considerations of the transition state theory, we can assume a possible reaction mechanism of the naphthoquinones amination through the formation of three transition States (TS1-TS3) and intermediate:



We can see from table 1 the results of quantum-chemical calculations of enthalpies, the free Gibbs energies and activation energies of the amination reactions of various naphthoquinones by aromatic amines. The thermodynamic parameters indicate that all the studied reactions are thermodynamically favorable in the gas phase and in the solvent. However, in solvent the values of the parameters about one and a half times more, apparently due to solvation of the reagents in ethanol.

Table 1 - Calculated at the B3LYP/6-31g(d) level of the theory thermodynamic parameters of the amination reaction, kJ/mol

substrate	amin	ΔH		ΔG		E_a	
		Gas phase	EtOH	Gas phase	EtOH	Gas phase	EtOH
2,3-dichloro-1,4naphthoquinone	aniline	-47	-62	-36	-52	149	81
	p-toluidine	-46	-70	-42	-67	146	93
	m-toluidine	-45	-69	-41	-66	139	87
	p-anisidine	-60	-83	-45	-69	133	81
	p-chloroaniline	-44	-66	-34	-56	163	118
2,3- dichlorojuglone	aniline	-51	-65	-41	-55	149	80
	p-toluidine	-51	-73	-47	-71	146	91
	m-toluidine	-49	-74	-45	-65	139	91
	p-anisidine	-65	-86	-50	-72	133	79
	p-chloroaniline	-48	-43	-37	-34	163	115

To clarify the reaction mechanism it is important to know how adequately the chosen method can predict the activation energy of the amination reactions. To this end, B3LYP/6-31G (d) level of the theory, we have calculated transition states for several reactions (table. 3). For optimization of the transition states, we used two methods: the traditional optimization of the transition state using the algorithm of Berny [21] and the method STQN (Synchronous Transit-Guided Quasi-Newton Methods) [7]. STQN method has proved to be most convenient to optimize transition structures. To check the transitional states were analyzed the vibrations corresponding to the imaginary frequency and direction of the changes in the structure along the reaction path (the IRC calculation [22, 23]).

Using both methods of the calculation, we estimated transition states for several amination reactions and the base of the obtained results was calculated the activation energy of these reactions in the gas phase and in solution, on the basis of approximate equality between the activation energy E_a and enthalpy of the activation ΔH^\ddagger , which was estimated by the enthalpy of the reactant and transition state.

However, it is known that the reaction in reality take place in the solutions [2]. The activation energy in ethanol's solution was calculated as the difference of enthalpy in solution of the reagents and of the third transition state (ΔH^\ddagger), except the reaction of condensation of dichlorophene with m-toluidine, where the activation energy was calculated as the difference between the enthalpies of the reactants and of the first transition state, since the limiting stage of the reaction in this case is the first stage of the transition state formation due to the greater activation energy compared to other transitional states.

The calculated according to transition state values of the activation energy is less in the solvent than in the gas phase and are close to known experimental values for S_NAr reactions [24].

Table 2 - The results of the analysis of natural orbital bonds

Molecule	bond (LP)	The population, e	Hybridization	The Wiberg Index	The interaction of the orbitals	$E_{ij}^{(2)}$, kcal/mol
Dichloro-naphthoquinone	C=O	1.995	$Sp^{2,24}$	1.752	LPO→BD*(C-C)	84
		1.950	P			
	C-Cl	1.987	$Sp^{3,09}$	1.100		
	LPO	1.979	$Sp^{0,72}$			
		1.882	p			
Aniline	C-N	1.992	$Sp^{1,72}$	1.119	LPN→BD*(C-C)	26
	N-H	1.983	$Sp^{2,91}$	0.828		
	LPN	1.854	$Sp^{7,30}$			
TS1	C=O	1.994	$Sp^{2,27}$	1.709	LPO→BD*(C-C)	77
		1.952	P			
	C-Cl	1.984	$Sp^{3,47}$	0.967		
	N-C	1.973	$Sp^{8,3}$	0.525		
		1.876				
	LPO	1.973	$Sp^{0,75}$			
		1.876	P			
Intermediate	C-Cl	1.962	$Sp^{7,44}$	0.781	LPO _H →BD*(C-Cl)	32
	C-O	1.991	$Sp^{3,28}$	1.046	LPO→BD*(C-C)	40
	C-N	1.984	$Sp^{2,41}$	0.759	LPCL→BD*(C-C)	15
	C-Cl	1.985	$Sp^{3,25}$	1.068	LPN→3C*(C-C)	51
	C=O	1.995	$Sp^{2,25}$	1.717		
		1.956	P			
	N-C	1.984	$Sp^{1,71}$	1.029		
	LPO _H	1.970	$Sp^{1,31}$			
		1.851	P			
	LPO	1.979	$Sp^{0,71}$			
		1.885	P			
	1.727	P				

A continuation of Table 2.

Molecule	bond (NEP)	The population, e	Hybridization	The Wiberg Index	The interaction of orbitals	$E_{ij}^{(2)}$, kcal/mol
TS2	C=O	1.995	$Sp^{2,25}$	1.722	LPO _H →BD*(C-Cl)	30
		1.957	P		LPO→BD*(C-C)	41
	C-Cl	1.985	$Sp^{3,30}$	1.060	LPCL→BD*(C-G)	14
	C...Cl	1.964	$Sp^{7,14}$	0.801	LPN→BD*(C-C)	42
	C-N	1.983	$Sp^{2,38}$	1.098		
	C-O N-	1.991	$Sp^{3,33}$	1.032		
	C	1.980	$Sp^{1,87}$	0.983		
	LPO _H	1.969	$Sp^{1,31}$			
		1.858	P			
	LPO	1.979	$Sp^{0,71}$			
	1.885	P				
	1.786	P				
TS3	C=O _H	1.994	$Sp^{2,51}$	1.499	LPO _H →3C*(C-C-H)	85
		1.970	P		LPO _H →BD*(C-C)	
	C=O	1.995	$Sp^{2,23}$	1.733	LPO→BD*(C-C)	11
		1.942	P		LPCL→BD*(C-C)	42
	C-N	1.975	$Sp^{2,34}$	1.091	LPN→3C*(C-C-H)	18
	N-C	1.983	$Sp^{1,98}$	1.106	LPN→BD*(C-C)	33
	C-Cl	1.986	$Sp^{3,11}$	1.118		23
	N-H	1.952	$Sp^{2,65}$	0.601		
	LPO _H	1.952	$Sp^{1,48}$			
		1.759	$Sp^{4,05}$			
LPO	1.979	$Sp^{0,72}$				
	1.883	P				
	1.737	P				

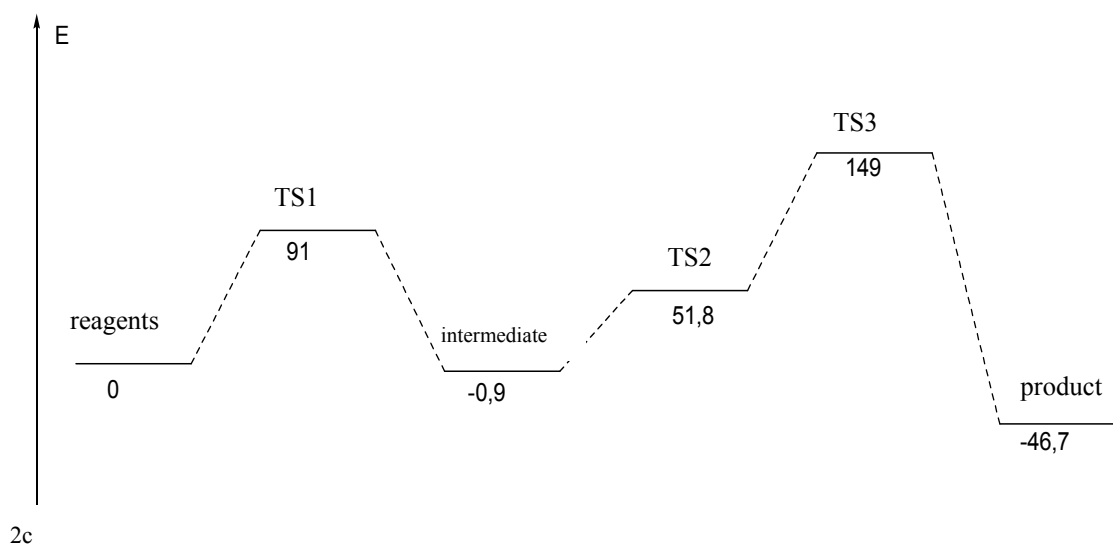
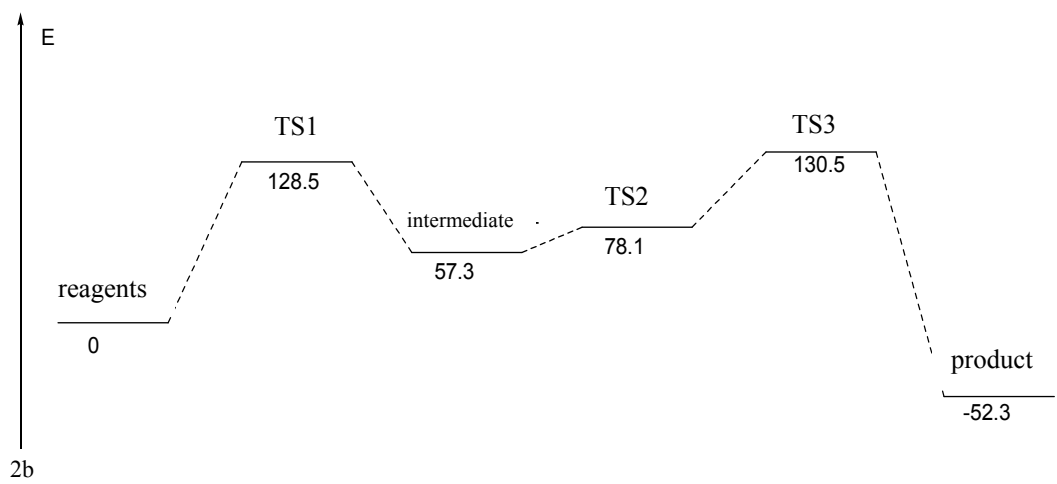
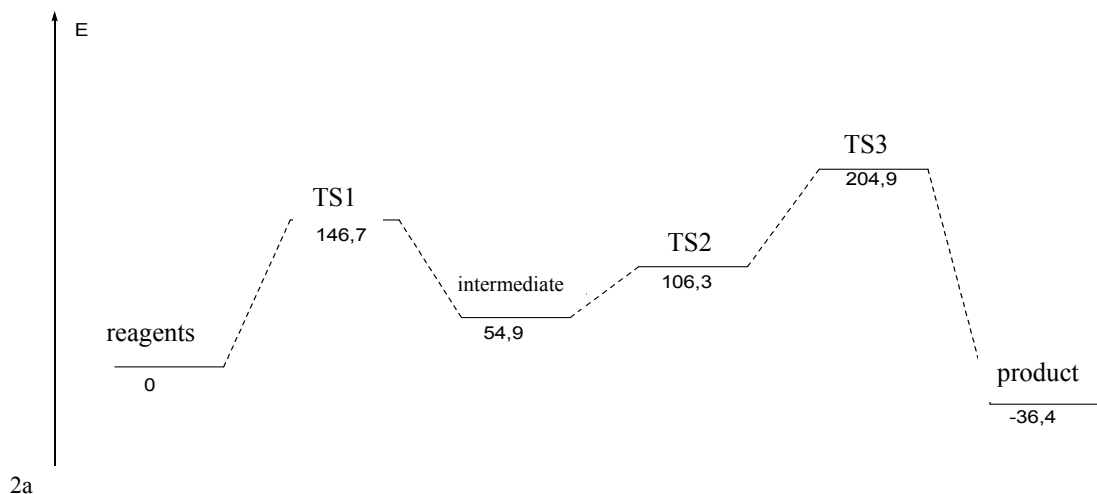
The process of replacement of chlorine in the molecule of naphthoquinones is a multistage and included studying the formation of the intermediate via the first transition state, which then turns into the product through the second and third transition states (Fig. 2).

In Fig. 2 shows the results obtained for the total energy of the reactants, intermediates, transition states and products of the reactions.

From the point of view of perturbation theory to second order [25] that the naphthoquinones in the first transition state, the interaction between bonds is between the lone electron pairs of the oxygen atoms (LP) and anti-bonding C-C orbital (BD*), which seem to indicate mostly electrostatic interaction between components.

The calculations showed that for all reactions the first transition state close to the structures, which is a weakening of the bonds between the chlorine and carbon atoms of the naphthoquinones and the formation of weak bonds between the carbon atom of the naphthoquinones and the nitrogen atom of the amino group of arylamine (~1.8 Å). This condition is really transitional because it has one negative vibration frequency (~ -350 cm⁻¹), characteristic for transition state and representing the valence fluctuation of the C...N bond.

Our analysis method of natural bond orbital [25] (table. 2, Fig. 1) shows that with the approach of the aniline to dichlorojuglone the polarization of the bonds in the past with a significant decrease in the effective negative charge on the nitrogen atom and a slight modification of the Wiberg indices and the hybridization of the orbitals.



A continuation of Fig. 2

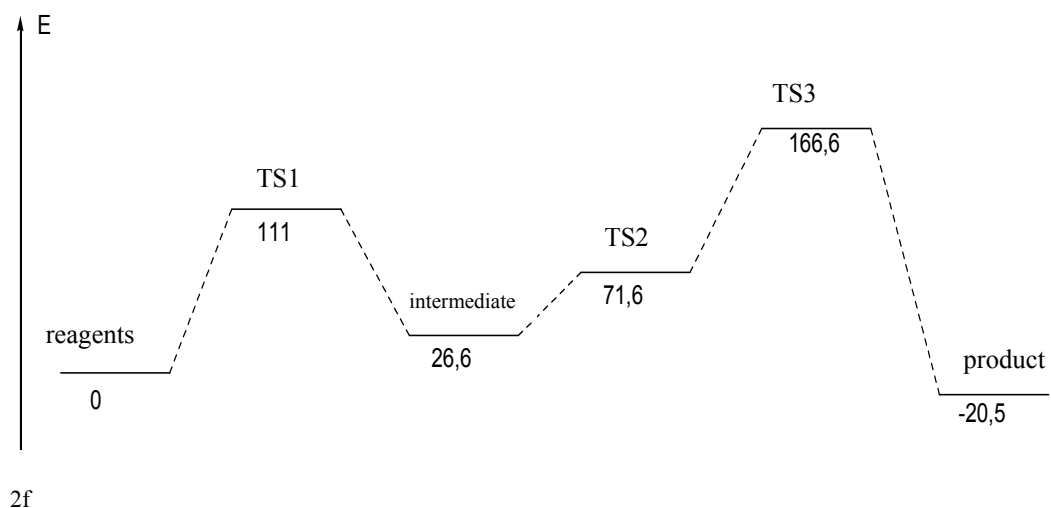
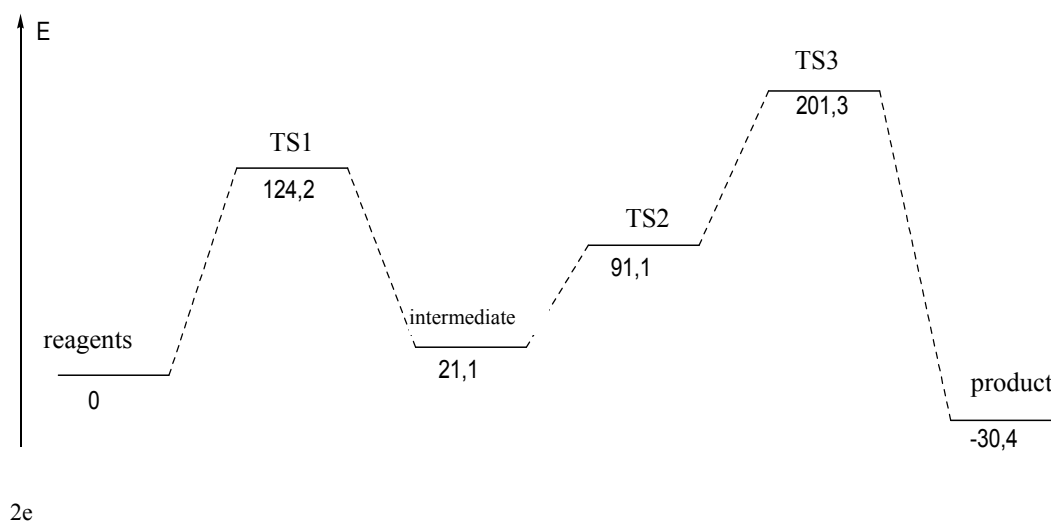
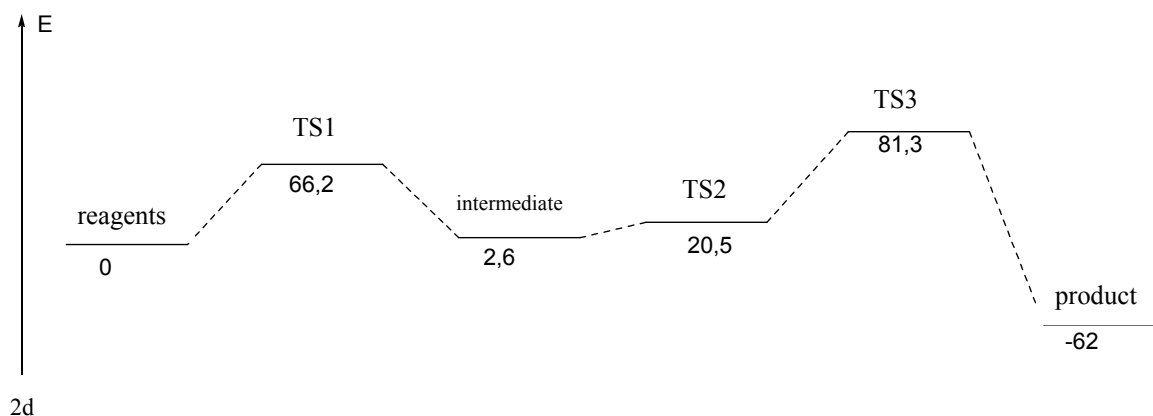


Figure 2 - The full energy profile of the amination reaction of dichloronaphthalene (a) ΔG in gas phase, (b) ΔG in the solution of alcohol, (c) ΔH in gas phase, (d) ΔH in the solution of alcohol, (e) ΔE in gas phase, (f) ΔE in the solution of ethanol (kJ/mol)

Intermediate is a structure where the chlorine atom, in contrast to the first transition state, has a greater distance from the ring of naphthoquinones, and the hydrogen atom of the amino group is transferred to one of the oxygen atoms of the naphthoquinones. A characteristic difference from the first

intermediate transition state from the point of view of interaction between orbital is less of a polarization of relations, and the emergence of additional inter-actions between the unshared electron pairs of chlorine atoms and nitrogen disintegrating orbital of the C-C bonds, indicating a greater contribution of the orbital interactions in comparison with electrostatic.

The second transition state in the reactions of 2,3-dichloro-1,4-naphthoquinones with aniline, p-toluidine, p-chloroaniline, as well as in the reactions of condensation dichlorojuuglone with p-chloroaniline, p-anisidine, m-toluidine are similar in geometry with the appropriate intermediates, has a small negative vibration frequency ($\sim -50 \text{ cm}^{-1}$), and in fact is not transition, as evidenced by the IRC method.

On the basis of the calculated data shows that in all cases, a third transition state formed during the direction of a hydrogen atom from the oxygen atom of the second transition state is indeed a transition, as it has one negative vibration frequency ($\sim -1000 \text{ cm}^{-1}$) and in accordance with the method of the IRC. From the point of view of energy interactions of the second order ($E_{ij}^{(2)}$), unlike the rest of the calculated states, appear very strong orbital interaction, including three center C-C-H bond (3C*), which mainly stabilized this transition state. For comparison, the calculated thermodynamic parameters at the B3LYP/6-31G(d) method we also conducted calculations of the energy profile of the second reaction method BP86/TZ2P+ from the ADF.

We can see that the calculated by ADF energy parameters are close enough to thermodynamic parameters in GAUSSIAN, despite the different functional and basis states. This indicates that the density functional methods, incorporated in both schemes of the calculation works well when we study the mechanism of some organic reactions.

Conclusion

1. It is shown that the used method of calculation B3LYP/6-31G(d) gives adequate results in the prediction of geometrical parameters, IR, UV and NMR spectra of reagent amination reactions of the naphthoquinones. We have found the transition states and calculated their electronic and spatial structure. It is shown that the amination reaction takes place via formation of an intermediate and two transition states.

2. We have calculated the activation energies in the gas phase and solution for the amination reactions of various amines. It is shown that the use of solvent leads to smaller activation energies. The analysis of orbital bond in the investigated structures from the point of view of perturbation theory of the second order was used. We have explained the observed variation of transition states on the basis of orbital interactions.

REFERENCES

- [1] Gornostaev L.M., Timoshkova N.A., Sakilidi V.T. The Fifteenth international congress of Heterocyclic chemistry. *Taipei*. **1995**. PO2-169.
- [2] Radaeva N.Yu., Dolgushina L.V., Sakilidi V.T., Gornostaev L.M. *Journal of Organic Chemistry*. **2005**. Vol.41. P.926.
- [3] Beachy P.A., Chen J.K., Mann R.K. WO 2005/033048. Wnt pathway antagonists. *Chem. Abstrs.* **2005**. Vol.152. P.386022.
- [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] A.D. Becke. *J Chem. Phys.* **1993**. Vol.98. P.5648.
- [6] N.C. Handy, A.J. Cohe. *Mol. Phys.* **2001**. Vol.99. P.403.
- [7] C. Peng, P.Y. Ayala, H.B. Schlegel, M.J. Frisch. *J. Comp. Chem.* **1996**. Vol.17. P.49.
- [8] J. Tomasi, B. Mennucci, R. Cammi. *Chem. Rev.* **2005**. Vol.105. P.2999.
- [9] ADF2004.01, SCM, Theoretical Chemistry, Vrije Universiteit, Amsterdam, The Netherlands. <http://www.scm.com>
- [10] G. te Velde, F. M. Bickelhaupt, T. Ziegler. *J. Comput. Chem.* **2001**. Vol.22. P.931.
- [11] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. *Phys. Rev. Lett.* **1996**. Vol.77. P.3965.
- [12] P. Rubio, F. Florencio, S. Garcia-Blanco, J.G. Rodriguez. *Acta Crystallographica*, Section C. **1985**. Vol.41. P.1797.
- [13] P.D. Cradwick, D. Hall. *Acta Crystallographica*. Section B. **1971**. Vol.27. P.1990.
- [14] P.D. Cradwick, D. Hall. *Acta Crystallographica*. Section B. **1971**. Vol.27. P.1468.
- [15] W. Shiau, E.N. Duesler, I.C. Paul, D.Y. Curtin, W.G. Blann, C.A. Fufe. *Journal of the American Chemical Society*. **1980**. Vol.102. P.4546.
- [16] K.B. Andersen. *Acta Chemica Scandinavica*. **1999**. Vol.53. P.222.
- [17] NIST Chemical Database. Standard Reference Database 17, Version 7.0 (Web Version), Release 1.4.2 Data Version 2009.01.

- [18] <http://webbook.nist.gov/chemistry>
[19] T.Yamaji, T.Saito, K.Hayamizu, M.Yanagisawa and O. Yamamoto, Spectral Database for Organic Compounds, SDBS, NMR, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST), Japan.
[20] L.A. Curtiss, K. Raghavachari, P.C. Redfern, J.A. Pople. *J. Chem. Phys.* **1997**. Vol.106. P.1063.
[21] O.Kh. Poleshchuk, A.G. Yureva, V.D. Filimonov, G. Frenking. *J. Mol. Struct. Theochem.* **2009**. Vol.912. P.67.
[22] GAUSSIAN 98W. User's Reference. Editors Fritsch E., Fritsch M. J., Pittsburgh, Gaussian Inc. **1998**. 280p.
[23] C. Gonzalez, H.B. Schlegel. *J. Chem. Phys.* **1989**. Vol.90. P.2154.
[24] C. Gonzalez, H.B. Schlegel. *J. Phys. Chem.*, **1990**. Vol.94. P.5523.
[25] Handbook chemist. V.3. Publishing House of Chemistry. Vol.3. 1964.
[26] E.D. Glendening, A.E. Reed, J.E. Carpenter and F. Weinhold. NBO Version 3.

УДК 541.1+530.145

**О. Х. Полещук¹, А. Г. Яркова¹, 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

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА РЕАКЦИИ АМИНИРОВАНИЯ ДИХЛОРНАФТОХИНОНОВ НА ОСНОВАНИИ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

Аннотация. Проведен анализ термодинамических параметров реакции аминирования в газовой фазе и в растворе на основании расчетов методом функционала плотности с использованием полно-электронного базисного набора 6-31G(d) в программном пакете GAUSSIAN'03 и TZ2P+ в программе «Амстердамский функционал плотности». Показана термодинамическая и кинетическая возможность реакции дихлорюглона с анилином. Рассчитаны переходные состояния, энергии активации и проведен анализ орбитальных взаимодействий.

Ключевые слова: теория функционала плотности; B3LYP/6-31G(d); нафтохиноны; механизм реакции, натуральные орбитали связи.

О. Х. Полещук¹, А. Г. Яркова¹, Г.М. Адырбекова², М.Н. Ермаханов², П.А. Саидахметов²

ТЫҒЫЗДЫҚТЫҢ ФУНКЦИОНАЛ ТЕОРИЯСЫНЫҢ НЕГІЗІНДЕ ДИХЛОРНАФТАХИНОНДАРДЫҢ АМИНДЕУ РЕАКЦИЯСЫНЫҢ МЕХАНИЗМІН ЗЕРТТЕУ

Аннотация. Газды фазада және ерітіндіде аминдеу реакциясының термодинамикалық параметрлері «Амстердамский функционал плотности» бағдарламасында және GAUSSIAN'03 и TZ2P+ бағдарламалық пакетінде толық электронды базисті жинақты 6-31G(d) қолданып тығыздық функционалы тәсілімен есептеу көмегімен талданды. Дихлорюглоның анилинмен конденсациялану реакциясының термодинамикалық және кинетикалық мүмкіндіктері көрсетілді. Конденсирлеу реакциясы үшін ауыспалы күйі, активтендіру энергиясы және жылдамдық константасы есептелді.

Тірек сөздер: тығыздықтың функционал теориясы; B3LYP/6-31G(d); нафтохинондар; реакция механизмі, байланыстың табиғи орбитальдары.

Сведение об авторе:

Олег Хемович Полещук - д.х.н., Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия;

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

Мырзабек Нысанбекулы Ермаханов - к.х.н., Южно-Казахстанский государственный университет имени М.Ауезова, Шымкент, РК;

Пулат Аблатыевич Саидахметов - к.ф.-м.н., зав.кафедрой, Южно-Казахстанский государственный университет им. М.Ауезова, Шымкент, РК;

Александр Владимирович Фатеев - к.х.н., Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия

МАЗМҰНЫ

Техникалық ғылымдар

Полецук О. Х., Яркова А. Г., Адырбекова Г. М., Ермаханов М. Н. Тығыздықтың функционал теориясының негізінде дихлорнафтахинондардың аминдеу реакциясының механизмін зерттеу.....5

Физика

Омар Ж. О., Такибаев Н. Ж., Құрманғалиева В. О. Резерфорд шашырауын есептеу және талдау.....13

Информатика

Ахметов Б. Б., Корченко А. Г., Терейковский И. А., Алибиева Ж. М., Батиев И. М. Ақпараттық жүйенің желілік ресурстарына жасалатын кибершабуылдарды таныпбілудің нейрожелілік құралдарының тиімділігін бағалау параметрлері..... 19

Химия

Фазылов С. Д., Нуркенов О. А., Ибраев М. К., Жұмакаева Б. Д., Жақыпова А. Н., Нұхұлы А., Жұринов М. Ж. 5-меркапто-3-фенил-1,3,4-тиадиазол-2-тионның жаңа туындылары. Синтезі және құрылымы..... 39

Биология

Утеулин К. Р., Байтулин И. О. Көк сағыздың деградацияланған популяцияларын жаңғарту қажеттілігі..... 56

* * *

Техникалық ғылымдар

Машеков С. А., Ақпанбетов Д. Б., Абсадықов Б. Н., Нугман Е. З., Рахматулин М. Л., Полецук А. И., Машекова А. С. Көп қызметті бойлық-сыналы орнақта жолақты ыстықтай және суықтай илемдеудің жылдамдығын автоматты реттейтін жүйе..... 62

Машеков С. А., Абсадықов Б. Н., Акимбекова М. М., Тусупкалиева Э. А., Мауленова М. Р. Бұрандалы пішінбілік пен бойлық-сыналы орнақта табақты-металды серпімді пластикалық деформациялаудың шеткі-элементтік моделі..... 78

Айтчанов Б. Х., Тергеусизова А. С. Автоматтындрылған басқару объектісі ретінде оптикалық өзекшелерді созудың технологиялық процесі..... 91

Волокитин А. В., Қурапов Г. Г., Волокитина И. Е., Панин Е. А. Баспалау-созу аралас процесінің модельдеуі..... 96

Леднев С. Н., Қурапов Г. Г., Волокитин А. В., Волокитина И. Е., Удербаяева А. Е. «Баспалау-созу» бірлескен процесінде икроқұрылымы эволюциясы..... 103

Астрофизика

Шыныбаев М. Д., Даирбеков С. С., Жолдасов С. А., Мырзақасова Г. Е., Алиасқаров Д. Р., Сәдібек А. Ж. Хиллдың екінші есебіндегі делоненің оскуляциялық элементтері..... 110

Химия

Баешов А. Б., Кадирбаева А. С., Баешова А. Қ., Жұрынов М. Ж. Айнымалы тоқпен поляризацияланған алюминий электродтарының сілті қосылған натрий хлориді ерітіндісінде еруі..... 117

Чопабаева Н. Н., Муканов К. Н. In Vitro жағдайында эксперименталды панкреатиты бар егеуқұйрықтардың қан сарысуының көрсеткіштеріне сорбенттің әсері..... 124

Биология

Саятов М. Х., Жұматов Қ. Х., Қыдырманов А. И., Карамендин К. Ә., Даулбаева К. Д., Асанова С. Е., Қасымбеков Е. Т., Хан Е. Я., Сүлейменова С. А. Қазақстанның жабайы орнитофаунасындағы тұмау а вирусына мониторинг (2002-2015 жж.)...130

Бостанова А. М., Әбдімүтәліп Н. Ә., Ибрагимова Д. И. Өсімдік тұқымдарының өсімділерін әртүрлі микроағзалармен зақымданудың ерекшеліктері..... 137

Лаханова К. М., Кедельбаев Б. Ш. Қара түсті қаракөл қозыларының жүн талшығының қабыршақ қабатындағы жасушаларында меланиннің таралуын жарық микроскопиялық зерттеу..... 141

Бостанова А. М., Сержанова А. Е., Тойчибекова Г. Б. Өсімдік тұқымдарындағы зен саңырауқұлақтарының дамуын және олардың әсер ету жағдайларын зерттеу..... 146

Қоғамдық ғылымдар

Козловский В., Нарбаев Қ. А. Қазақстан республикасындағы төтенше жағдайлар зардаптарын бағалаудың ұйымдастыру құқықтық негіздері мәселелеріне..... 151

Сатылмыш Й. Мазмұнға негізделген оқыту әдісін пайдалана отырып жаратылыстану пәндерін шет тілінде үйрету..... 161

Аюпова З. К., Құсайынов Д. Ә. Қазақстан республикасы құқықтық жүйесіндегі ана мен бала құқықтарын қорғау механизмдері..... 167

Азатбек Т. А., Рамазанов А. А. Қазақстан ғылымындағы экономиканың дамуы..... 174

Панзабекова А. Ж., Турабаев Г. К., Жунисбекова Т. А. Қазақстан республикасындағы еңбек өнімділікке еңбекақының әсері..... 184

Цеховой А. Ф., Жақыпбеков Ж. Н. Компанияны дамыту және Қазақстанның бәсекеге жарамдылығын арттыру үшін басқару консалтингінің ықпалы..... 191

Атыгаев Н. Ә. Моғұлдардың исламды қабылдауы (мырза Мұхаммед Хайдардың «Тарих-и рашиди» мәліметтері бойынша)..... 196

Цай В. М. Ұйымдық өзгерістерді басқару: жаңа тұжырымдаманың нобайлары..... 202

Андреева Г. М. Мемлекеттік-жеке меншік серіктестік: әлемдік тәжірибеде қолданылатын қағидалары мен формалары..... 207

Смаилова Ж. П. Тәуелсіздік жылдарында қазақстанда кәсіпкерлікті дамыту: мәселелері, перспективалары мен басымдықтары туралы..... 214

Абдимомынова А. Ш., Берикболова У. Д., Темирова А. Б. Инвестициялық және инновациялық қызметтің өңірлік Механизмі..... 227

Тлеужанова М. А., Алиев У. Ж., Герасимова Ю. Н. Жоғары білімнің басқару жүйесінің талдауы мен бағалауы..... 237

СОДЕРЖАНИЕ

Технические науки

Полецук О. Х., Яркова А. Г., Адырбекова Г.М., Ермаханов М.Н., Саидахметов П.А. Исследование механизма реакции аминирования дихлорнафтохинонов на основании теории функционала плотности..... 5

Физика

Омар Ж.О., Такибаев Н.Ж., Құрманғалиева В.О. Расчет и анализ рассеяния резерфорда..... 13

Информатика

Ахметов Б.Б., Корченко А.Г., Терейковский И.А., Алибиева Ж.М., Батиев И.М. Параметры оценки эффективности нейросетевых средств распознавания кибератак на сетевые ресурсы информационных систем..... 19

Химия

Фазылов С.Д., Нуркенов О.А., Ибраев М.К., Жумакаева Б. Д., Жакупова А.Н., Нухулы А., Журинов М.Ж. Новые производные 5-меркапто-3-фенил-1,3,4-тиадиазол -2-тиона. Синтез и строение..... 39

Биология

Утеулин К.Р., Байтулин И.О. О необходимости восстановления деградированных популяций Кок-Сагыза..... 56

* * *

Технические науки

Машеков С.А., Акпанбетов Д.Б., Абсадыков Б.Н., Нугман Е.З., Рахматулин М.Л., Полецук А.И., Машекова А.С. Система автоматического регулирования скорости прокатки полос на многофункциональном продольно-клиновом стане горячей и холодной прокатки..... 62

Машеков С.А., Абсадыков Б.Н., Акимбекова М.М., Тусупкалиева Э.А., Мауленова М.Р. Конечно-элементная модель упругопластического деформирования листового металла в волнистых валках и продольно-клиновом стане..... 78

Айтчанов Б.Х., Тергеусизова А.С. Технологический процесс вытяжки оптических стержней как объект автоматизированного управления..... 91

Волокитин А.В., Курапов Г.Г., Волокитина И.Е., Панин Е.А. Моделирование совмещенного процесса прессования-волоочение..... 96

Лежнев С.Н., Курапов Г.Г., Волокитин А.В., Волокитина И.Е., Удербаяева А.Е. Эволюция микроструктуры стали при совмещенном процессе «прессование-волоочение»..... 103

Астрофизика

Шинибаев М.Д., Даирбеков С.С., Жолдасов С.А., Мырзакасова Г.Е., Алиаскаров Д.Р., Садыбек А.Ж. Оскулирующие элементы делоне во второй задаче Хилла..... 110

Химия

Башев А.Б., Кадирбаева А.С., Башева А.К., Журинов М.Ж. Растворение алюминиевых электродов в растворе хлорида натрия с добавлением щелочи при поляризации переменным током..... 117

Чопабаева Н.Н., Муқанов К.Н. Влияние сорбента на показатели сыворотки крови крыс с экспериментальным острым панкреатитом в условиях In Vitro..... 124

Биология

Саятов М.Х., Жуматов К.Х., Кыдырманов А.И., Карамендин К.О., Даулбаева К.Д., Асанова С.Е., Касымбеков Е.Т., Хан Е.Я., Сулейменова С. А. Мониторинг вирусов гриппа а в дикой орнитофауне Казахстана (2002-2015 гг.)..... 130

Бостанова А.М., Абдимуталип Н.А., Ибрагимова Д.И. Особенности заражения проростков семян растений различными микроорганизмами..... 137

Лаханова К.М., Кедельбаев Б.Ш. Светомикроскопические исследования распределения меланина в корковых клетках волоса каракульских ягнят черной окраски..... 141

Бостанова А.М., Сержанова А.Е., Тойчибекова Г.Б. Изучение развития плесневых грибов в семенной массе растений и условия их дальнейшего воздействия..... 146

Общественные науки

Козловский В., Нарбаев К.А. К вопросу об организационно-правовых основах оценки последствий чрезвычайных ситуаций в республике Казахстан..... 151

Йылмаз С. Преподавание предметов по естественным наукам на иностранном языке с помощью инструкции на основе контента..... 161

Аюпова З.К., Кусаинов Д.У. Механизм защиты прав женщин и детей в правовой системе республики Казахстан..... 167

Азатбек Т.А., Рамазанов А.А. Научность экономического развития Казахстана..... 174

Панзабекова А.Ж., Турабаев Г.К., Жунисбекова Т.А. Влияние заработной платы на производительность труда в республике Казахстан..... 184

Цеховой А.Ф., Жакипбеков Ж.Н. Управленческий консалтинг как фактор развития компании и повышения конкурентоспособности Казахстана..... 191

Атыгаев Н.А. Исламизация моголов (по сведениям «Тарих-и рашиди» мирза Мухаммед Хайдара)..... 196

Цай В.М. Управление организационными изменениями: контуры новой концепции..... 202

Андреева Г.М. Государственно-частное партнерство: принципы и формы, используемые в мировой практике..... 207

Смалова Ж.П. Развитие предпринимательства в казахстане за годы независимости: проблемы, перспективы и приоритеты развития..... 214

Абдимомынова А.Ш., Берикболова У.Д., Темирова А.Б. Региональный механизм инвестиционной и инновационной деятельности..... 227

Тлеужанова М.А., Алиев У.Ж., Герасимова Ю.Н. Анализ и оценка системы управления высшего образования в современных условиях в Казахстане..... 237

CONTENT

Technical sciences

Poleshchuk O.Kh., Yarkova A.G., Adyrbekova G.M., Ermakhanov M.N., Saidakhmetov P.A. Study of the reaction amination mechanism of the dichloronaphthalene on the basis of the density functional theory..... 5

Physics

Omar ZH.O., Takibayev N.ZH., Kurmangalieva V.O. Calculation and analysis of rutherford scattering.....13

Informatics

Akhmetov B. B., Korchenko A.G., Tereykovsky I.A., Alibiyeva Zh.M., Bapiyev I.M. Parameters of efficiency estimation of neural networks of cyber attacks recognition on network resources of information systems 19

Chemistry

Fazylov S.D., Nurkenov O.A., Ibraev M.K., Zhumakaeva B.D., Zhakupova A.N., Нухулы А., Zhurinov M.Zh. New derivatives of 5-mercapto-3-phenyl-1,3,4-thiadiazol-2-tione. Synthesis and structure.....39

Biology

Uteulin K. R., Baitulin I.O. On necessity of restoration of the degraded Kok Saghyz population.....56

* * *

Technical sciences

Mashekov S.A., Akpanbetov D.B., Absadykov B.N., Nugman Ye.Z., Rakhmatulin M.L., Poleshchuk A.I., Mashekova A.S. System of automatic control of the speed of rolling strips on a multifunctional longitudinal-wedge mill for hot and cold rolling..... 62

Mashekov S.A., Absadykov B.N., Akimbekova M.M., Tusupkaliyeva E.A., Maulenova M.R. Finite element model of elasto-plastic deformation of sheet metal in corrugated rolls and longitudinal-wedge mill..... 78

Aitchanov B.H., Tergeussizova A.S. Technological process of exhausting optical rods as an object of automated control..... 91

Volokitin A.V., Kurapov G.G., Volokitina I.E., Panin E.A. Simulation of the combined process of pressing-drawing..... 96

Lezhnev S.N., Kurapov G.G., Volokitin A.V., Volokitina I.E., Uderbaeva A.E. The evolution of the microstructure of steel at the combined process of "pressing-drawing"..... 103

Astrophysics

Shinibaev M.D., Dairbekov S.S., Zholdasov S.A., Myrzakasova G.E., Aliaskarov D.R., Sadybek A.G. Delaunay osculating elements in thesecond Hill task 110

Chemistry

Bayeshov A.B., Kadirbayeva A.S., Bayeshova A.K., Zhurinov M.Zh. Dissolution of aluminum electrodes in sodium chloride solution with addition of alkalinebypolarization of alternating current..... 117

Chopabayeva N.N., Mukanov K.N. In Vitro effect of sorbent on parameters of blood serum of laboratory rats with experimental acute pancreatitis 124

Biology

Sayatov M.Kh., Zhumatov K. Kh., Kydyrmanov A.I., Karamendin K.O., Daulbaeva K.D., Asanova S.E., Kasymbekov E. T., Khan E.Ya., Suleymenova S. A. Monitoring of influenza a viruses in the wild avifauna of Kazakhstan (2002-2015)..... 130

Bostanova A. M., Abdimutalip N.A., Ibragimova D. I. Features of infection of sprouts of seeds of plants with different microorganisms..... 137

Lakhanova K.M., Kedelbayev B. The light microscopic research into distribution of melanin in crust cells of the hair from karakul lambs of black color..... 141

Bostanova A. M., Serzhanova A.E., Toychibekova G.B. Studying of development of mould mushrooms in the seed mass of plants and conditions of their further influence..... 146

Social Sciences

Kozlowski W., Narbayev K.A. To the question of organizational-legal bases of assessment of consequences of emergency situations in the republic of Kazakhstan..... 151

Yilmaz S. Teaching of natural science subjects in foreign language by using content based instruction..... 161

Ayupova Z.K., Kussainov D.U. Mechanism of defence of women and children's rights in the legal system of the republic of Kazakhstan..... 167

Azatbek T.A., Ramazanov A. Science Economy Development in Kazakhstan..... 174

Panzabekova A.ZH., Turabaev G.K., Zhumisbekova T.A. Salary influence on labour productivity in the republic of Kazakhstan 184

Tshevovoy A., Zhakipbekov Zh. Management consulting as a factor of development of the company and the foundation for improving the competitiveness of Kazakhstan..... 191

Atygaev N.A. The islamization of moghuls (according to mirza muhammad Haidar's «Tarikh-I rashidi») 196

Tsay V.M. Change of organizational management: new concept outlines..... 202

Andreeva G.M. Public-private partnerships: principles and forms used in the world practice 207

Smailova Zh.P. The development of entrepreneurship in kazakhstan for years of independence: problems, prospects and development priorities..... 214

Abdimomynova A.Sh., Berikbolova U.D., Temirova A.B. Regional mechanism of investment and innovation activity..... 227

Tleuzhanova M.A., Aliyev U. Zh., Gerassimova Y.N. Analysis and evaluation of control system of higher education in modern conditions in Kazakhstan..... 237

**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*
Верстка на компьютере *А.М. Кульгинбаевой*

Подписано в печать 15.04.2017.
Формат 60x881/8. Бумага офсетная. Печать – ризограф.
7,5 п.л. Тираж 2000. Заказ 2.

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