

Состав и строение соединений (2, 4, 5) подтверждены данными ИК-, ЯМР  $^1\text{H}$ - и  $^{13}\text{C}$ -спектроскопии.

#### Литература

1. Сарымзакова Р.К., Абдурашитова Ю.А., Джаманбаев Ж.А. Пути снижения токсичности и повышения избирательности лекарственных препаратов // Вестн. МГУ. Сер. 2. Химия. – 2006. – Т. 47, №3.– С. 242-244.
2. Степаненко Б.Н. Химия и биохимия углеводов: Моносахариды. – М.: Высш. школа, 1977. – 223 с.
3. Grogan M.J., Pratt M.R., Marcaurelle L.A. N-Glycosylamines as a potential source of new medicinal preparations // Ann. Rev. Biochem. – 2002. – V.71, №6. – P.593.
4. Машковский М.Д. Лекарства XX века. – М.: ООО «Изд. Новая Волна», 1998. – 320 с.
5. Солдатенков А.Т., Колядина Н.М., Шендрик И.В. Основы органической химии лекарственных веществ.– М.: Химия, 2001. – 192 с.

### **ГАДОЛИНИЙ ЖАҢА ҚОС ТЕЛЛУРИТТЕРІНІҢ ҚҰРЫЛЫМЫН КВАНТТЫ – ХИМИЯЛЫҚ ЕСЕПТЕУ**

Тойбек А.А., Рустембеков К.Т., Кадырбаева Ж.Ж., Сейлхан Ш.Б.  
Академик Е.А.Бөкетов атындағы Қарағанды университеті

Химиялық құрылымның классикалық теориясы арқылы химиялық қосылыстардың құрылымы қандай бола алады, осы құрылымның және басқа қосылыстарға қарағанда қарастырылып отырған қосылыстың қасиеттерінің ерекшеліктері және бұл қосылыстардың химиялық және физика-химиялық қасиеттері қандай екендігін айтуға болады.

Кванттық теория заттың құрылымы туралы терең мәліметтер бере алады. Химиялық құбылыстар мен үрдістерді атомды-молекулалық деңгейінде зерттеу кезінде квантты-механикалық заңдар қолданылады. Кванттық механика химиялық қосылыстардың көптеген қасиеттерін (осы қасиеттердің пайда болу ерекшеліктерін де), сонымен бірге, классикалық теориямен анықталмайтын қасиеттерін түсіндіру мен алдын-ала болжауға мүмкіндік береді.

Мақалада сирек – жер, сілтілік-жер металдарының жаңа қос теллуридтерінің құрылымын квантты-химиялық есептеу нәтижелері келтірілген.

Тұрақты геометриялы күйіне сәйкес келетін гадолинийдің қос теллуридтерінің квантты-химиялық зерттеулері Gaussian-2009 квантты-химиялық бағдарлама жүйесімен орындалды, ал пиктографикалық анализ графикалық драйвер Gauss View 5.0- 2008 көмегімен жүргізілді. Нәтижелері 1-кестеде және 1-суретте келтірілген.

Кесте 1 -  $GdCaTeO_{4,5}$ ,  $GdSrTeO_{4,5}$  және  $GdBaTeO_{4,5}$  құрылымының квантты-химиялық есептеу нәтижелері

Байланыс	d, Å	Валенттілік бұрыштары	$\omega$ , град.
1	2	3	4
$GdCaTeO_{4,5}$			
O(9)-Gd(6)	1,885	O(9)-Gd(6)-O(2)	88,94
Gd(6)-O(2)	2,226	O(13)-Ca(15)-O(14)	86,73
Te(1)-O(2)	1,985	O(10)-Ca(12)-O(11)	86,97
O(10)-Te(1)	2,006	Gd(6)-O(2)-Te(1)	96,91
O(13)-Te(1)	1,988	Ca(15)-O(13)-Te(1)	108,49
O(13)-Ca(15)	1,919	Ca(12)-O(10)-Te(1)	106,53
Te(1)-O(3)	2,861	O(2)-Te(1)-O(3)	154,91
O(10)-Ca(12)	1,920	O(13)-Te(1)-O(10)	87,68
Ca(15)-O(14)	1,919	O(3)-Te(1)-O(10)	110, 13
Ca(12)-O(11)	1,920	O(13)-Te(1)-O(3)	78,88

Кесте 1-нің жалғасы

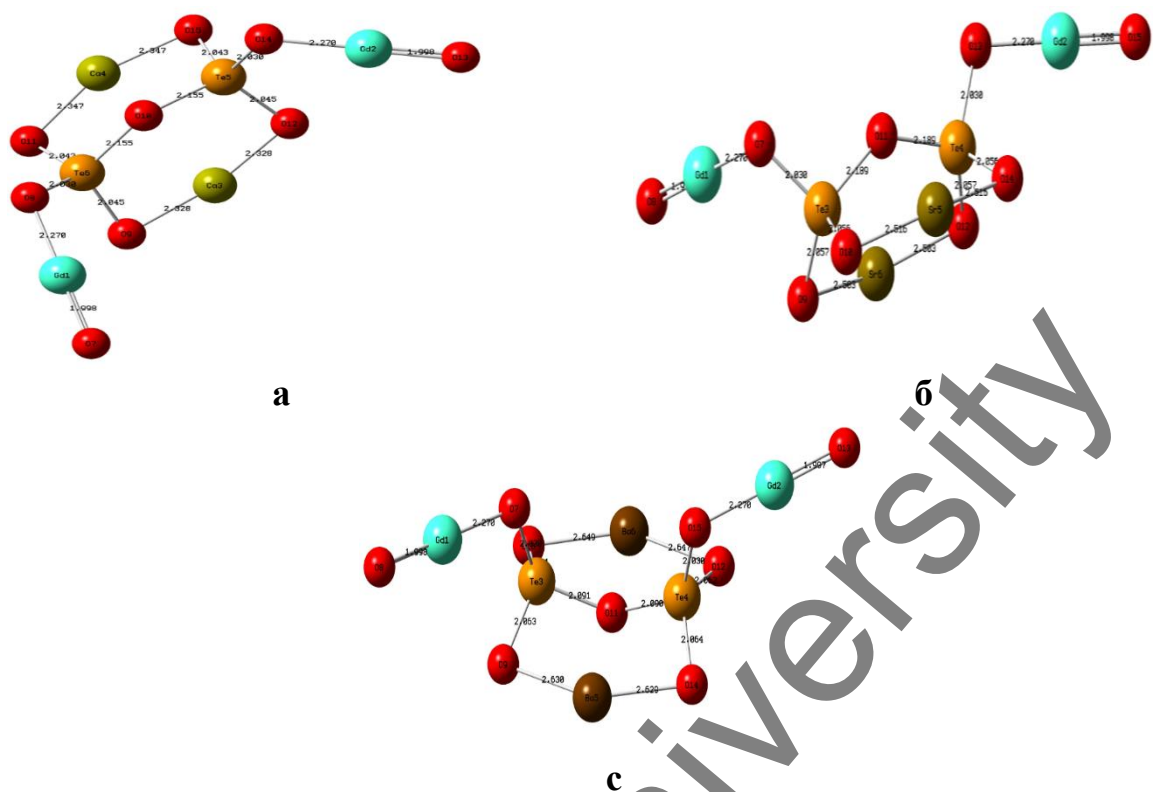
1	2	3	4
O(3)- Te(4)	2,861	O(2)-Te(1)-O(10)	93,93
Te(4)- O(14)	1,988	O(2)-Te(1)-O(13)	95,65
Te(4)- O(11)	2,006	Ca(15)-O(14)-Te(4)	108,49
Te(4)- O(5)	1,985	Ca(12)-O(11)-Te(4)	106,53
O(5)-Gd(7)	2,226	Te(1)-O(3)-Te(4)	93,04
Gd(7)- O(8)	1,885	O(3)-Te(4)-O(5)	154,91
		O(11)-Te(4)-O(14)	87,68
		O(11)-Te(4)-O(5)	93,93
		O(11)-Te(4)-O(3)	110,13
		O(14)-Te(4)-O(3)	78,88
		O(14)-Te(4)-O(5)	95,65
		Gd(7)-O(5)-Te(4)	96,91
		O(5)- Gd(7)-O(8)	88,94
$GdSrTeO_{4,5}$			
O(5)-Gd(4)	1,9	O(5)-Gd(4)-O(2)	89,44
Gd(4)-O(2)	2,114	O(8)- Sr(11)-O(7)	83,68
O(15)-Te(13)	2,409	Gd(4)-O(2)-Te(13)	116,46
O(8)-Te(13)	2,018	Sr (11)-O(8)-Te(13)	109,58
O(8)-Sr(11)	2,538	Sr (12)-O(10)-Te(13)	107,87
Te(13)-O(10)	2,007	O(2)-Te(13)-O(15)	166. 43
O(10)-Sr(12)	2,332	O(8)-Te(13)-O(10)	88,37
Sr (11)-O(7)	2,558	O(8)-Te(13)-O(15)	88,76
Sr (12)-O(9)	2,358	O(15)-Te(13)-O(2)	102,12

O(15)- Te(14)	2,06	O(10)-Te(13)-O(2)	85,07
Te(14)- O(7)	2,370	O(2)-Te(13)-O(8)	79,88
Te(14)- O(9)	2,450	Sr (11)-O(7)-Te(14)	96,83
Te(14)- O(1)	1,952	Sr (12)-O(9)-Te(14)	96,95
O(1)-Gd(3)	2,178	Te(13)-O(15)-Te(14)	135,73
Gd(3)- O(6)	1,903	O(7)-Te(14)-O(9)	167,50
		O(11)-Te(4)-O(14)	64,72
		O(9)-Te(14)-O(1)	83,48
		O(7)-Te(14)-O(1)	80,15
		O(7)-Te(14)-O(15)	88,15
		O(9)-Te(14)-O(15)	95,54
<b>GdBaTeO<sub>4,5</sub></b>			
O(14)-Gd(12)	2,15	O(14)- Gd (12)-O(9)	88,26
Ba(10)-O(8)	2,72	O(15)- Gd (13)-O(5)	98,71
Ba(10)-O(6)	2,70	Gd (12)-O(9)-Te(3)	104,75
O(9)- Gd (12)	2,25	Gd (13)-O(5)-Te(2)	71,37
O(15)- Gd (13)	2,14	O(8)-Ba(10)-O(6)	94,53

Кесте 1-нің жалғасы

1	2	3	4
O(5)- Gd (13)	2,52	Ba(10)-O(8)-Te(3)	97,95
Te(3)- O(1)	2,00	Ba(10)-O(6)-Te(2)	101,27
O(1)- Te (2)	1,99	Ba(11)-O(7)-Te(3)	104,33
Te(3)-O(7)	2,05	Ba(11)-O(4)-Te(2)	102,08
Te(3)-O(9)	2,02	O(10)-Te(3)-O(6)	123
Te(3)-O(7)	2,95	O(8)-Te(3)-O(7)	81,59
Te(3)-O(8)	2,00	O(9)-Te(3)-O(1)	123,23
Te(2)-O(6)	2,00	O(9)-Te(3)-O(8)	101,32
O(4)-Te(2)	2,04	O(9)-Te(3)-O(7)	64,89
O(5)-Te(2)	2,03	Te(3)-O(1)-Te(2)	108,52
Ba(11)-O(7)	2,41	O(6)-Te(2)-O(4)	92,68
Ba(11)-O(4)	2,74	O(1)-Te(2)-O(5)	116,22
		O(6)-Te(2)-O(1)	64,39
		O(4)-Te(2)-O(1)	82,53
		O(4)-Te(2)-O(5)	69,38
		O(5)-Te(2)-O(6)	61,34

Теллурдың синтезделген жаңа қосылыстарының құрылысы әдеби мәліметтерге және квантты-химиялық есептеулерге негізделе отырып жасалды және оның 3D үлгілерін келесі түрде келтіруге болады (1 - сурет).



Сурет 1 – Гадолиний қос теллурииттерінің құрылымдық модельдері  
 а –  $\text{GdCaTeO}_{4,5}$ , б –  $\text{GdSrTeO}_{4,5}$ , с –  $\text{GdBaTeO}_{4,5}$

Қорыта келе,  $\text{GdMe}^{\text{II}}\text{TeO}_{4,5}$  ( $\text{Me}^{\text{II}}$  - Ca, Sr, Ba) құрамды теллурдың жаңа оксоқосылыстарының кристалындағы байланыс ұзындығы мен валенттік бұрышы бойынша жүргізілген квантты-химиялық есептеулер жаңадан алынған қос теллурииттердің құрылымдық модельдерін ұсынуға мүмкіндік берді.

## КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НОВЫХ ДВОЙНЫХ ТЕЛЛУРИТОВ САМАРИЯ

Тойбек А.А., Рустембеков К.Т., Рустембекова Г.К., Атыгаева А.Б., Камза М.Т.

Карагандинский университет имени академика Е.А. Букетова

Большинство открытий в области естественных наук связано с развитием представлений о строении и динамике окружающего нас мира. Важное место в этом процессе занимает квантовая теория материи. Квантовая химия - один из частных аспектов этой теории. Эта фундаментальная дисциплина рассматривает приложение квантово-механических законов к изучению химических явлений и процессов на атомно-молекулярном уровне.

Анализ электронного строения молекул позволил интерпретировать различные типы химических связей, многие понятия классической теории