

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

Қорыта келе, $\text{GdMe}^{\text{II}}\text{TeO}_{4,5}$ (Me^{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.

Қарагандинский 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

химического строения и химической кинетики, такие как валентность, сопряжение и сверхсопряжение, энергия активации химической реакции и др.

Квантовая химия позволяет рассчитывать с высокой точностью равновесные межъядерные расстояния и валентные углы, энергии химических связей, барьеры внутреннего вращения и барьеры перехода между различными конформациями молекул, а также энергии активации простейших химических реакций.

Квантовая химия применяется в материаловедении для направленного создания материалов с заданными электрическими и магнитными свойствами.

Квантовохимические расчеты устойчивой геометрии синтезированных веществ были проведены с помощью пакета программ ChemBioOffice - 2014, пиктографический анализ был проведен с помощью графического драйвера ChemBio3D Ultra. В таблице 1 представлены результаты квантово-химических расчетов синтезированных соединений, которые соответствуют устойчивому структурному состоянию соединений.

Таблица 1 – Основные геометрические данные синтезированных веществ по данным квантово-химических расчетов

Связь	d, Å	Валентный угол	ω, градус
1	2	3	4
CaSmTeO_{4.5}			
O(1)-Sm(2)	1.420	O(1)-Te(4)-O(5)	110
O(1)-Te(4)	1.417	Sm(2)-O(1)-Te(4)	108
Se(2)-O(3)	1.508	O(3)-Sm(2)-O(1)	108
Te(4)-O(9)	1.356	Ca(6)-O(5)-Te(4)	110
Te(4)-O(10)	1.447	O(7)-Te(8)-O(9)	96
O(5)-Te(4)	1.447	Te(8)-O(9)-Te(4)	97
Ca(6)-O(5)	1.482	O(9)-Te(4)-O(5)	103
Ca(6)-O(7)	1.483	O(10)-Te(4)-O(5)	119
O(7)-Te(8)	1.390	Ca(11)-O(10)-Te(4)	110
Te(8)-O(9)	1.428	O(12)-Te(8)-O(7)	137
Te(8)-O(12)	1.391	O(13)-Te(8)-O(7)	101
Te(8)-O(13)	1.456	Sm(14)-O(13)-Te(8)	108
O(10)-Ca(11)	1.482	O(15)-Sm(14)-O(13)	107
O(12)-Ca(11)	1.483		
O(13)-Sm(14)	1.425		
Se(14)-O(15)	1.508		
SrSmTeO_{4.5}			
O(1)-Sm(2)	1.420	O(3)-Sm(2)-O(1)	108
O(1)-Te(4)	1.431	Te(4)-O(1)-Sm(2)	109
Sm(2)-O(3)	1.508	O(5)-Te(4)-O(1)	104
Te(4)-O(5)	1.418	Sr(6)-O(5)-Te(4)	110

Te(4)-O(10)	1.417	O(7)-Sr(6)-O(5)	113
Sr(6)-O(3)	1.403	Te(8)-O(9)-Te(4)	105
O(7)-Sr(6)	1.404	O(9)-Te(4)-O(1)	107
Te(8)-O(7)	1.418	O(10)-Te(4)-O(1)	107
Te(8)-O(13)	1.431	Sr(11)-O(10)-Te(4)	110
O(9)-Te(4)	1.398	O(12)-Te(8)-O(7)	113
O(9)-Te(8)	1.398	O(13)-Te(8)-O(7)	107
O(10)-Sr(11)	1,404	Sm(14)-O(13)-Te(8)	109
Sr(11)-O(12)	1.403	O(15)-Sm(14)-O(13)	108
O(12)-Te(8)	1.418		
O(13)-Sm(14)	1.420		
Sm(14)-O(15)	1.508		
BaSmTeO _{4.5}			
O(1)-Sm(2)	1.419	O(1)-Te(4)-O(5)	110
O(1)-Te(4)	1.417	Sm(2)-O(1)-Te(4)	108
Sm(2)-O(3)	1.508	O(3)-Sm(2)-O(1)	108
Te(4)-O(9)	1.356	Ba(6)-O(5)-Te(4)	110
Te(4)-O(10)	1.447	O(7)-Sm(8)-O(9)	96
O(5)-Te(4)	1.448	Te(8)-O(9)-Te(4)	97
Ba(6)-O(5)	1.482	O(9)-Te(4)-O(5)	103
Ba(6)-O(7)	1.483	O(10)-Te(4)-O(5)	119
O(7)-Te(8)	1.391	Ba(11)-O(10)-Te(4)	110
Te(8)-O(9)	1.428	O(12)-Te(8)-O(7)	137
Te(8)-O(12)	1.390	O(13)-Te(8)-O(7)	101
Te(8)-O(13)	1.456	Sm(14)-O(13)-Te(8)	108
O(10)-Ba(11)	1.483	O(15)-Sm(14)-O(13)	107
O(12)-Ba(11)	1.483		
O(13)-Sm(14)	1.424		
Sm(14)-O(15)	1.508		

На основании результатов ИК-спектроскопии и кванто-химических расчетов были представлены модели строения новых двойных теллуридов. Теллурид-ионы имеют тетрагональную схему, их схемы строения можно представить таким образом (рис 1-3).

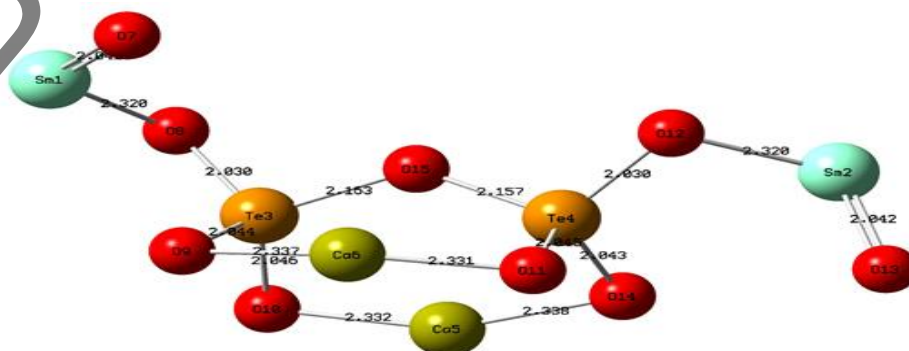


Рисунок 1- Модели строения CaSmTeO_{4.5}

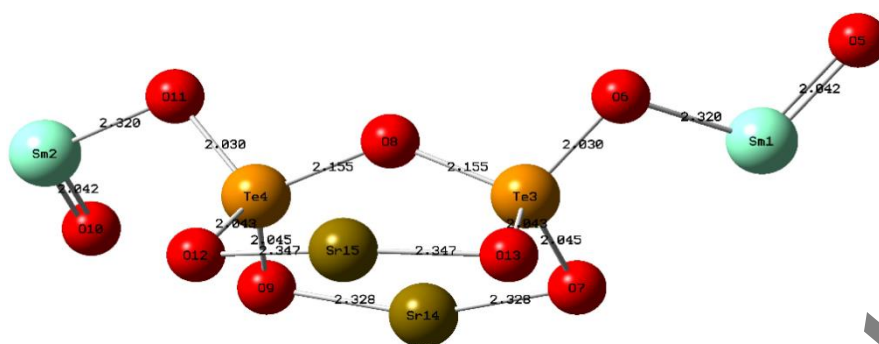


Рисунок 3- Модели строения SrSmTeO_{4.5}

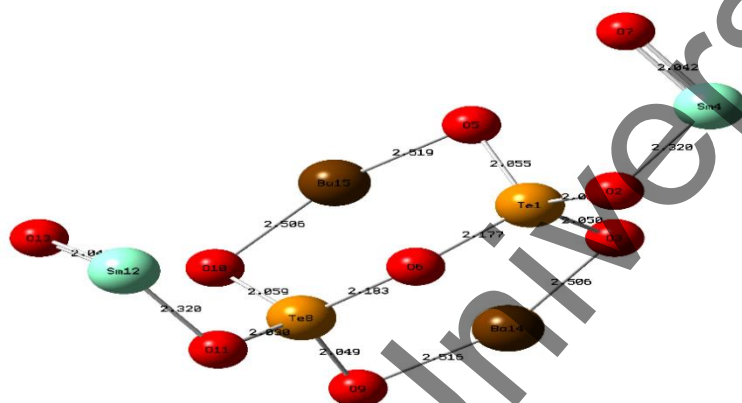


Рисунок 2 -Модели строения BaSmTeO_{4.5}

Таким образом, проведенные квантово-химические расчеты по длине связи и валентному углу в структурах исследуемых соединений позволили предложить модели геометрического строения новых двойных теллуридов самария.

(1R)-6-МЕТОКСИХИНОЛИН-4-ИЛ[(2S,4S,5R)-5-ВИНИЛХИНУКЛИДИН-2-ИЛ]МЕТИЛ 4,5-ДИХЛОРИЗОТИАЗОЛ-3-КАРБОКСИЛАТТЫҢ СИНТЕЗІ ЖӘНЕ МИКРОБҚА ҚАРСЫ БЕЛСЕНДІЛІК

Н.Н. Тойгамбекова, М.Р. Алиева, М.Ж. Кайырбаева, Г.К. Мукушева
КБАҚ «Академик Е. А. Бөкетов атындағы Қарағанды университеті»,
100026, Қазақстан Республикасы, Қарағанды қ.

Соңғы жылдары хинин туындыларының биологиялық белсенділігінің кең қолданылуына байланысты оның химиялық модификациясына көп көңіл бөлінді. Сондай-ақ, хининнің пероксидазды липидке қарсы, рак клеткаларына антиоксиданттық әсері бар екендігі анықталды [1]. Сондықтан, алкалоид