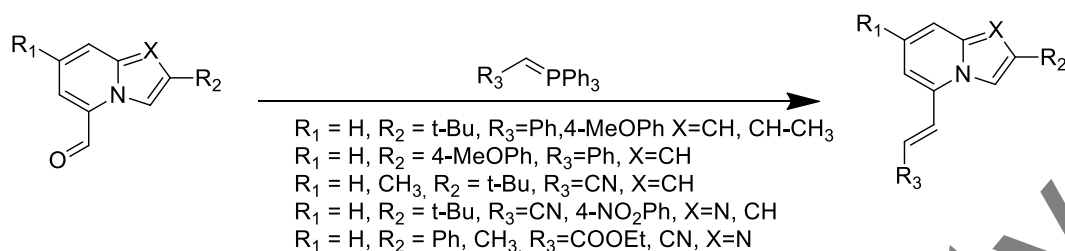


различных функциональных групп на конце сопряженной системы (группы R₃) придает молекулам интересные фотофизические свойства.

Схема 2



1. Sadowski B. et al. Recent advances in the synthesis of indolizines and their π -expanded analogues // *Org. Biomol. Chem.* 2016, 14(33), 7804-7828.
2. Bagdi A. K. et al. Synthesis of imidazo[1,2-a]pyridines: a decade update // *Chem. Comm.* 2015, 51(9), 1555-1575.

АСПАРТАМНЫҢ ЭЛЕКТРОНДЫҚ ҚҰРЫЛЫСЫН КВАНТТЫ-ХИМИЯЛЫҚ МОДЕЛЬДЕУ

Кутжанова К.Ж., Амангелді А.А., Дәуімбай Ж.Т., Жорабеков Р.Н., Есенбекова С.К., Пернебай М.Ә.

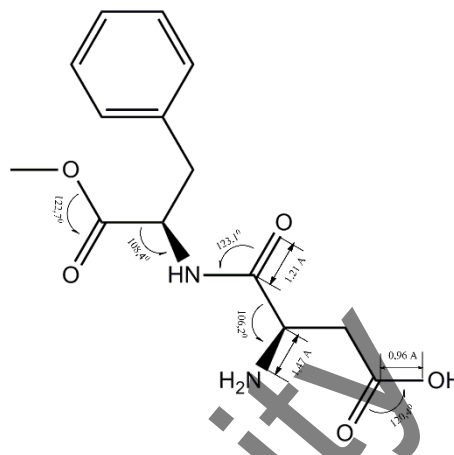
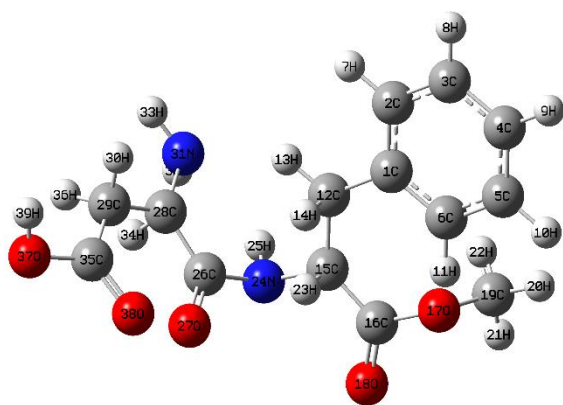
Академик Е.А.Бөкетов атындағы Қарағанды университеті
Қарағанды, Қазақстан

Соңғы жылдары тамақтанудың жақсаруына байланысты қантты шамадан тыс тұтынудан туындаған семіздік және семіздікпен бірге жүретін аурулар кең таралды. Тиісінше, қантты алмастыру үшін төмен калориялы тәттілендіргіш агент (тәттілендіргішті) жасау қажеттілігі туындады. Аспартам (АРМ) қанттан шамамен 160-200 есе тәтті, иісі жоқ, суда жақсы ериді [1]. АРМ тәттілендіргіш ретінде кеңінен қолданылады, ол көбінесе төмен калориялы, қантсыз лимонадтарда, сағыздарда қолданылады [2].

Адам ағзасындағы аспартам екі амин қышқылы мен метанолға бөлінеді. Аминқышқылдары ақуыздардың ажырамас бөлігі болып табылады және қауіпті ғана емес, сонымен қатар ағзаға да қажет [3].

Сондықтан осы жұмыстың мақсаты аспартамның электрондық құрылысын квантты-химиялық модельдеу болып табылады.

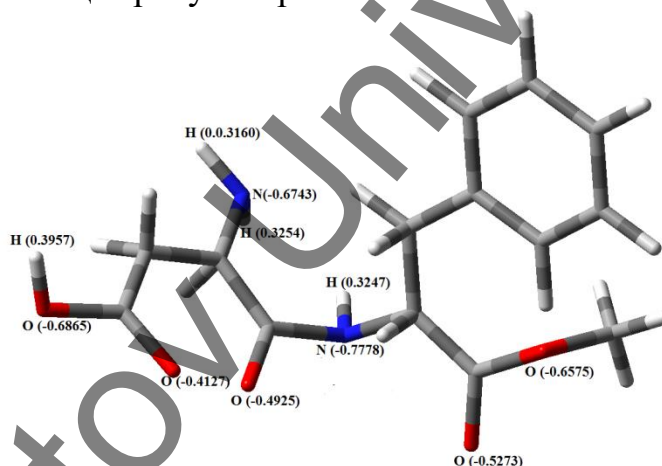
1-ші суретте аспартамның эмпирикалық емес GAUSSIAN-2009 бағдарламасында 3-21G базисінде есептелген электрондық құрылысымен толық энергиясы, атомдар арасындағы арақашықтық, валенттік бұрыш көрсететін модельдер берілген.



$$\Delta E(\text{UHF}) = -1018,18907474 \text{ a.u.}$$

Сурет 1. Аспартамның электрондық құрылысы

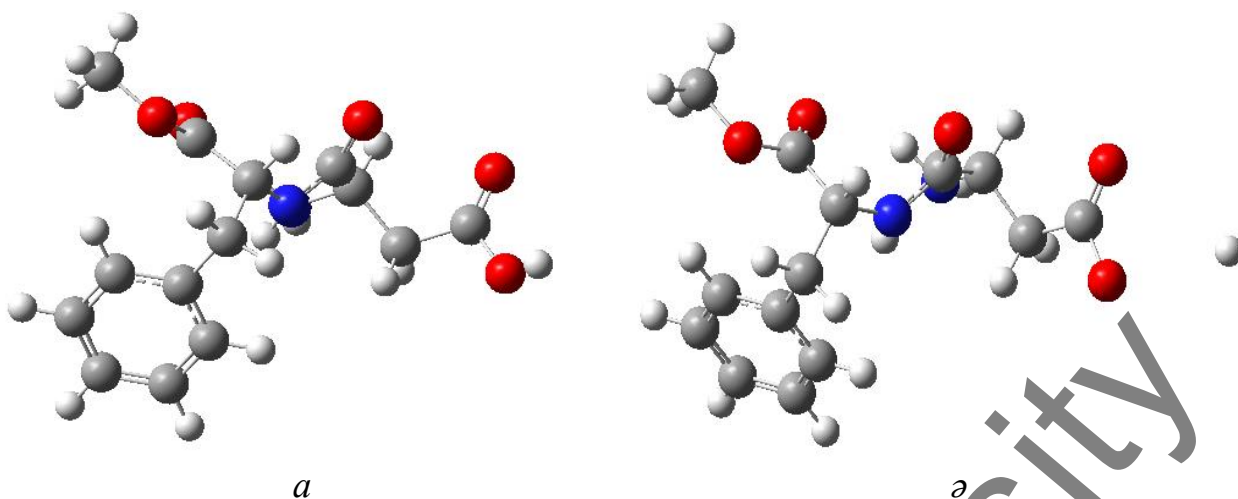
2-ші суретте GAUSSIAN-2009 бағдарламасында 3-21G базисінде есептелініп алынған Малликен бойынша зерттеліп отырған молекуладағы негізгі атом зарядтарының таралуы көрсетілген.



Сурет 2. Малликен бойынша аспартам молекуласындағы атом зарядтарының таралуы

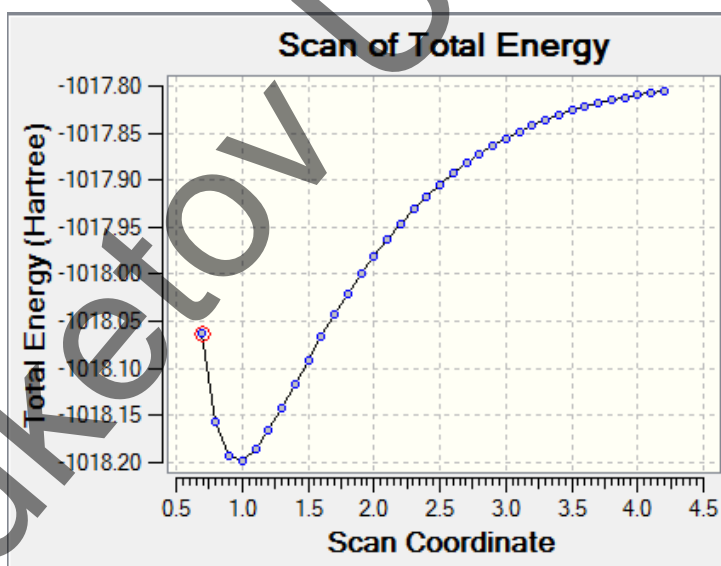
2-ші суретте көрсетілгендей сутегі атомдарының зарядтарының бөлінуі оның молекулада орналасуына байланысты және функционалды тобына тиесілігіне қарай ажыратылады: амин тобындағы сутегі зарядтарымен ($q=0,3247$; $0,3254$; $0,3160$) салыстырғанда, карбоксил тобындағы сутегі заряды жоғары ($q=0,3957$) болады.

3, 4-ші суреттерде аспартам молекуласындағы сутек ионының диссоциациялану реакцияларының беткі потенциалдық энергиясының (БПЭ) профилі көрсетілген.



Сурет 3. Аспартам молекуласындағы сутек ионының диссоциациялану реакциясы: *a* – бастапқы өнім, *ә* – соңғы өнім

Молекуланы есептеу эмпирикалық емес 3-21G базисінде, жүйедегі өлшемдерді толық оңтайландыру нәтижесінде жүргізілді, тек атом аралық қашықтық $R(\text{OH}) = 0,7 - 4,4 \text{ \AA}$ аралығында және осы мәндерге сәйкес қарастырылып отырған молекула модельдерінің геометриялық өлшемдерін толығымен оңтайландыру кезінде валенттік бұрыштары да өзгертіліп отырылды.



Сурет 4. Аспартам молекуласындағы сутек ионының диссоциациялану реакциясының беткі потенциалдық энергиясының (БПЭ) профилі

4-ші суретте көрсетілгендей аспартаммолекуласында 1 \AA маңайында толық энергияның ең жоғарғы мәнін көрсетеді, бұл зерттеліп отырған молекуланың электрондық құрылыстарының тұрақты күйі болып саналады. Одан әрі қарай қисықтың пішінінің өзгерісі OH атомаралық қашықтығына байланысты энергияның да өзгерісімен сипатталады. Атомаралық қашықтықтың

ұлғайуымен комплекстің активтілік энергиясының, яғни протондану энергиясының мәндерінің ұлғаюы көрсетіледі. Диссоциация реакциясы нәтижесінде карбоксил тобынанжұлынып алынған сутек атомының энергиясының, зерттеліп отырған диапазон аралығында (R(OH)_{3,4} дейін) монотонды ұлғаю өзгерісін байқауға болады.

Әдебиеттер

- 1 John Mc. Murry. Organic Chemistry.-6 ed. – Thomsonbooks; 2004.-1176p.
- 2 Черных В.П., Зименковский Б.С., Гриценко И.С. Органическая химия: Учебник для студ. вузов/ Под общ. ред. В.П. Черных.-2-е изд, испр. и доп. – Х.: Изд-во НФаУ, 2007. -776 с.
- 3Тлегенов Р. Синтез, строение и свойства производных алканов и циклоалканов. Автореф. дисс. докт. химич. Наук. – Ташкент. – 2008. – С.54

Ю.К.БАБАНСКИЙ КОНЦЕПЦИЯЛАРЫН ДИАЛОГТЫҚ ОҚЫТУ ӘДІСТЕМЕСІНДЕ ҚОЛДАНУ

Кутжанова К.Ж., Базарбаева Д.А.
Академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды университеті,
Қарағанды, Қазақстан

Оқу үдерісінде диалогтық оқытудың маңызы зор. Себебі студенттерді диалогтық арқылы оқыту олардың өзара тілдесуін, ойларын жүйелеуі мен оны ары қарай дамытуын, оқытушы мен студенттің арасында диалог болуын қамтамасыз етеді. Жаңа тақырыпқа деген қызығушылығын арттырумен қоса, олардың сыни тұрғыдан ойлау деңгейін жоғарылатуды да осы модуль жүзеге асырады. Мерсер мен Литлтон [1] өзеңбектерінде диалог сабақта оқушылардың қызығушылығын арттырумен қатар, олардың білім деңгейінің өсуіне үлес қосатындығын атап көрсетеді.

Выготскийдің оқу моделі оқушы диалог құру нәтижесінде білім, алады деп жорамалдайды. Диалог барысында студенттер келісілген нәтижеге жету үшін күш - жігерін жұмсайтын және Мерсер [2] сипаттағандай, білімді бірлесіп алуда немесе «пікір алмасу» барысында тең құқылы серіктестер болып табылады. Бірлесіп ойлау оқушылармен диалог құру арқылы іске асады, дегенмен оны студенттер бірлескен зерттеу барысында да анықтай алады.

Диалогтық оқыту әдістері студенттердің сұрақ қою, қойылған сұраққа тиімді жауап беру, сөйлеу, тыңдалым сияқты дағдыларын қалыптастырады. Диалогтық оқытуда сұрақ қоя білудің рөлі зор болып келеді. Студенттердің жана тақырыпты меңгеруде түрткі сұрақтар қоя білу, сұрақты керісінше бағыттап білу студенттерді жүйелі түрде сөйлеуге ынталандырады. Оқытушылардың да студенттерінің қандай деңгейде екенін білуге және оны жақсарту мақсатында диалогтық оқытуға қатысты түрлі әдістерді дұрыс тандай