

коэффициент подъемной силы достигнет своего минимального значения и дальше уменьшатся не будет.

Таким образом, из сравнения результатов, полученных в процессе моделирования с помощью программы ANSYS FLUENT и экспериментальных данных, полученных при испытаниях двухлопастного ветродвигателя можно увидеть удовлетворительное согласование экспериментальных и численных расчетов по аэродинамическим характеристикам. Максимальная величина расхождений численных и экспериментальных данных не превышает 1–2 %.

#### Литература:

1. Kussaiynov K., Sakipova S.E., Tansykbaeva N.K., Kussaiynova A. // Turbulence, Heat and Mass Transfer. 2012. V.7. P. 577-580.
2. Кусаиынов К., Камбарова Ж.Т., Танашева Н.К., Шаймерденова К.М., Алибекова А.Р. // ИФЖ. 2015. Т. 88. В. 2. С. 23-28.
3. Жиленко Д.Ю., Кривоносова О.Э. // Письма ЖТФ. 2015. Т.41. В. 1. С. 12-19.
4. Исаев С.А., Баранов П.А., Судаков А.Г., Ермаков А.М. // Письма ЖТФ. 2015. Т.41. В. 2. С. 49-57.
5. Патанкар С.В. // Энергоатомиздат. Москва. 1984. 149 с.

**Бөрібаева А.М., Айтан М.Е.,** академик Е.А.Бөкетов атындағы Қарағанды мемлекеттік университеті, химия факультеті, ХЕ-41 тобы, студенттер.  
(*Ғылыми жетекші: х.ғ.к., қауым. проф. Әбулдісова Л.Қ.*)

### СҰЙЫҚ КРИСТАЛДАРДАҒЫ ҚЫСҚА АУҚЫМДЫ ТӘРТІБІН КОМПЬЮТЕРЛІК МОДЕЛЬДЕУ

Ерекше қасиеттерге ие сұйық кристалды материалдар әр түрлі ғылым мен техника салаларында көп қолданылуда: молекулалық биология, медицина, кибернетика, микроэлектроника, оптика және т.б. [1]. Бұл мезоморфты қосылыстардың құрылысын және физика-химиялық қасиеттерін интенсивті зерттеуге қызығушылық тудырады.

Сұйық кристалды қосылыстардың құрылым-қасиет өзара байланысын анықтау, мезоморфизмнің молекулалық табиғатын зерттеу маңызды болып табылады. Сұйық кристалдарды компьютерлік модельдеу тәсілдері – молекулалық механика және динамика [2], Монте-Карло [3], атом-атомдық потенциалдар [4], квантты-химиялық жартылай эмпирикалық және эмпирикалық емес әдістері [5], ұйытқу теориясы [6, 7] тәжірибеге дейінгі кезеңде мезоморфты қасиеттерді болжауға және содан кейін қасиеттері берілген мезоморфты заттардың бағытталған синтезін іске асыруға мүмкіндік береді [8, 9]. Бұл үшін димерлердің әр түрлі конфигурацияларындағы екі мезогенді молекуланың әрекеттесу энергиялары есептелінеді және әр конфигурацияның ықтималдылығы анықталады [6, 7, 10].

Осы жұмыста квантты-химиялық Хартри-Фок әдісі және тығыздық функционалы теориясы Шифф негіздері (азометиндер) мен азобензолдардағы молекулалық тәртібін модельдеу үшін қолданылды. Оқшауланған молекула геометриясын ықшамдау амалы V3LYP/3-21G, V3LYP/6-31G, RHF/6-31G, RHF/6-31G(d,p), RHF/6-31G++(d,p) әдістерімен Gaussian программалық жүктеме негізінде орындалды.

Молекулааралық әрекеттесу энергиясы сұйық кристалдың әр түрлі қабаттарында (стекинг, St, бүйір) және бір қабатта (Pl, планарлы, жазық; T, терминалды) орналасқан молекулалар димерлерінің тепе-тең геометриялық конфигурациялары үшін есептелген (сурет 1). XYZ ортогоналды координаталық жүйесінің бас нүктесі болып, бірінші молекуланың масса орталығы алынды, X осі оның ұзын осі бойымен бағытталған, XY жазықтығы молекула жазықтығына сай келеді. Стекинг-конфигурациясында оқшауланған молекулалар масса орталықтарының бастапқы аралығы Z осі бойынша, жазық конфигурациясының Y осі

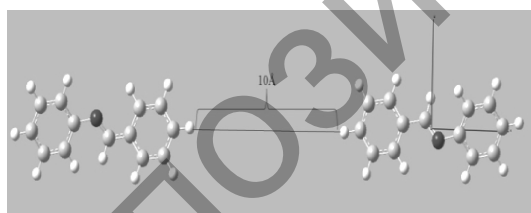
бойынша және терминалды конфигурациясында X осі бойынша 6-10 Å құрайды. Есептеу нәтижелері 1-ші кестеде келтірілген.

1 Кесте. Шифф негізі үшін толық энергия және молекулааралық әрекеттесу энергиясы, диполь моменті және шеткі орбитальдар энергиялары B3LYP/3-21G әдісі бойынша

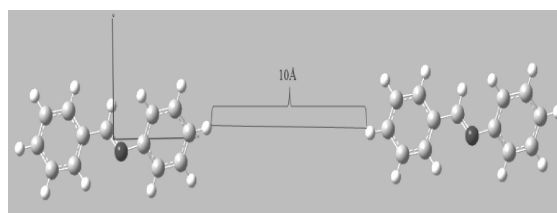
Сипаттама			$E_t$ , а.б.	$\Delta E$ , а.б.	$\mu$ , Д	$E_{ЖТМО}$ , а.б.	$E_{ТЪМО}$ , а.б.	
Молекула			-556.7904204	-	1.515	-0.22786	-0.07095	
Димерлі ассоциат	X	$\bar{b}-\bar{b}^1$	10Å <sup>3</sup>	-1100.0475804	13.533260	0.781	-0.29729	0.06919
		$\bar{b}-c$		-1107.3732333	6.207608	2.724	-0.21968	-0.05696
		$c-c$		-1107.3500070	6.230834	0.664	-0.21686	-0.05661
	Y	$n^2$	8Å	-1107.3734970	6.207344	2.755	-0.21842	-0.05916
		$a$		-1107.2860962	6.294745	0.520	-0.20627	-0.07069
	Z	$n$	10Å	-1107.3731730	6.207668	2.658	-0.21796	-0.05557
		$a$		-1107.3165689	6.264272	2.734	-0.21056	-0.06335

Ескерту. <sup>1</sup>X осі бойынша молекулалардың орналасуы: «басы-басына» ( $\bar{b}-\bar{b}$ ), «басы-соңына» ( $\bar{b}-c$ ) және «соңы-соңына» ( $c-c$ ). <sup>2</sup>Y және Z остері бойынша молекулалардың параллель ( $n$ ) және антипараллель ( $a$ ) орналасуы. <sup>3</sup>Димерлі ассоциаттардағы тиімді арақашықтықтар.

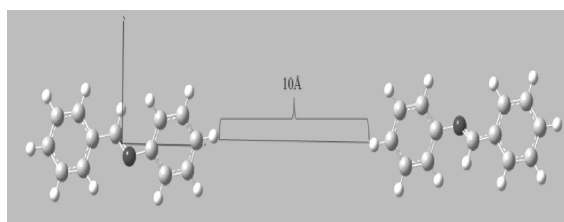
Кестеден көріп тұрғанымыздай, X осі бойынша (терминалды конфигурация) «басы-басына», «басы-соңына» және «соңы-соңына» қарай орналасқан молекулалардың ең тиімді арақашықтығы 10 Å-ге тең. Сәйкесінше, Pl-конфигурациясында - 8 Å, St-конфигурациясында - 10 Å. Молекулааралық әрекеттесу энергиясы  $\bar{b}-\bar{b}$  жағдайында жоғары, себебі екі молекуланың диполь моменттері бір-бірін компенсациялайды. Керісінше, диполь моменттері параллель молекулалардың (сурет 1, ә) жалпы моменті мономер моментіне қарағанда шамасымен екі есе көбейеді.  $c-c$  Жағдайы (сурет 1)  $\bar{b}-\bar{b}$  жағдайына ұқсайды және әрекеттесу энергиясы  $\bar{b}-c$ -мен салыстырсақ жоғарылау болып келеді. Шеткі орбитальдардың (жоғарғы толтырылған және төменгі бос молекулалалық орбитальдар) энергиялары да димер конфигурациясына сәйкес болып өзгереді.



(a)

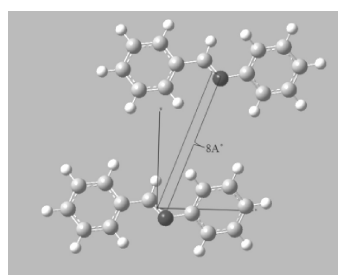


(ә)

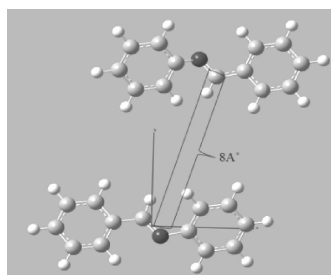


(б)

X осі бойынша молекулалардың «басы-басына» (a), «басы-соңына» (ә) және «соңы-соңына» (б) орналасуындағы димерлі ассоциаттарының оптималды жағдайларының бейнелері

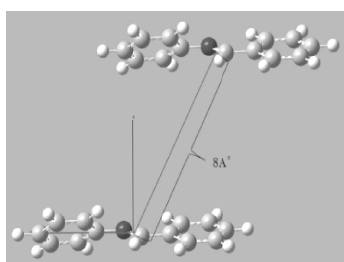


(a)

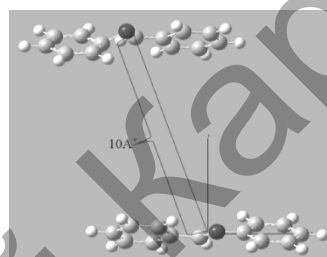


(ә)

Y осі бойынша параллель (a) және антипараллель (ә) димерлі ассоциаттарының оптималды жағдайларының бейнелері



(a)



(ә)

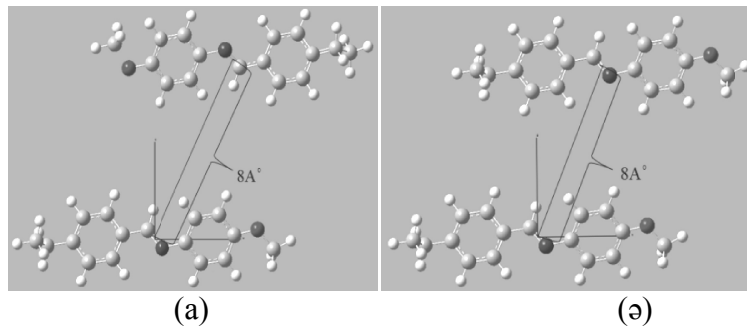
Z осі бойынша параллель (a) және антипараллель (ә) димерлі ассоциаттарының орналасуындағы оптималды жағдайларының бейнелері

Сурет 1. Шифф негізі димерлерінің St-, PI- және T-геометриялық конфигурациялары

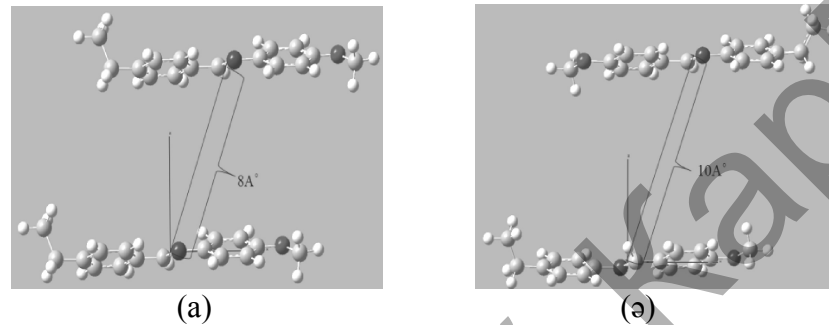
Квантты-химиялық есептеулер орынбасылған азометиндер үшін де жүргізілді. Терминалды орынбасушылар ретінде алкил- және алкоксирадикалдар қарастырылған. Мысал үшін 2-ші кестеде 4-метокси-4-бензилиденэтиланилин мономері мен димерінің физика-химиялық сипаттамалары және 2-ші суретте кейбір димерлі конфигурациялары көрсетілген. Шифф негізінің физика-химиялық сипаттамаларының тенденциялары орынбасылған молекулалар үшін де байқалады.

2 Кесте. 4-Метокси-4'-бензилиденэтиланилиннің физика-химиялық сипаттамалары B3LYP/3-21G әдісі бойынша

Сипаттама			$E_t$ , а.б.	$\Delta E$ , а.б.	$\mu$ , Д	$E_{ЖТМО}$ , а.б.	$E_{ТБМО}$ , а.б.	
Молекула			-749.9316680	-	0.542	-0.19682	-0.05049	
Димерлі ассоциат	X	$\bar{b}-\bar{b}$	10 Å	-1481.7780023	18.0853339	3.223	-0.29272	0.07226
		$\bar{b}-c$		-1491.5736164	8.2897198	1.236	-0.19840	-0.04930
		$c-c$		-1491.5180864	8.3452498	0.952	-0.19820	-0.04947
	Y	$n$	8 Å	-1491.5733898	8.2899463	1.256	-0.19765	-0.04909
		$a$		-1491.5292969	8.3340392	0.763	-0.19803	-0.04852
	Z	$n$	10 Å	-1491.5731652	8.2901710	1.247	-0.19613	-0.04769
		$a$		-1491.5089110	8.3544252	1.677	-0.19984	-0.05286



Ү осі бойынша параллель (а) және антипараллель (ә) димерлі ассоциаттарының орналасуындағы оптималды жағдайлары



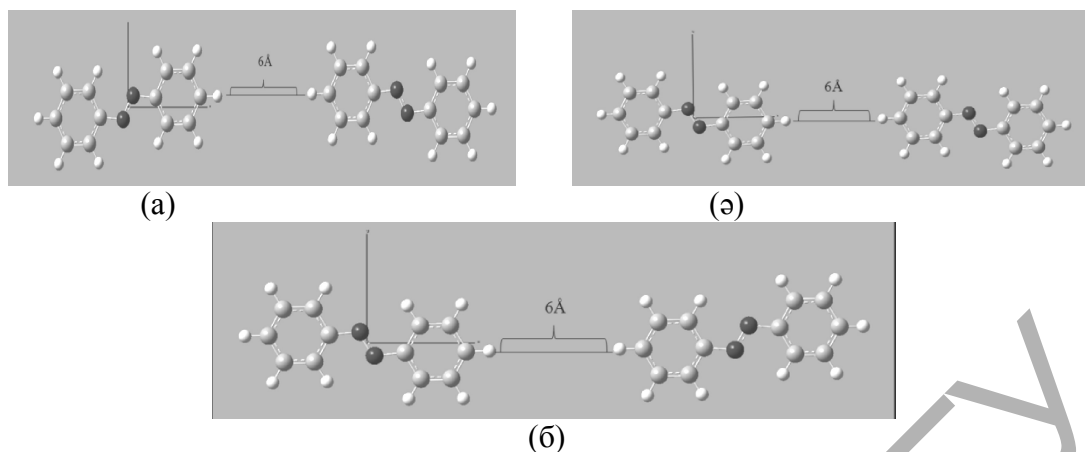
Z осі бойынша параллель (а) және антипараллель (ә) димерлі ассоциаттарының орналасуындағы оптималды жағдайларының бейнелері

Сурет 2. Орынбасылған Шифф негізі димерлерінің P1- және St-геометриялық конфигурациялары

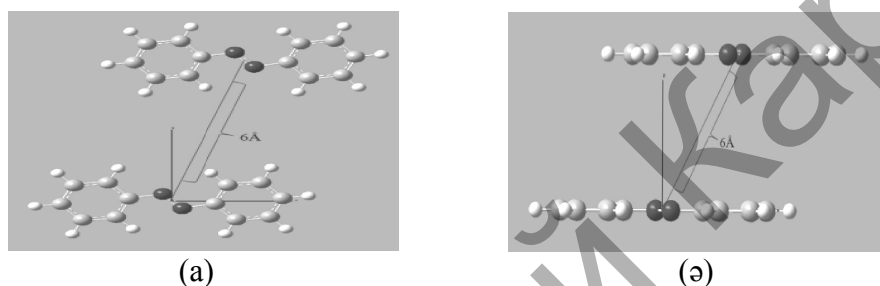
Азометин көпіршесінің орнына азо-көпіршесін қарастыратын болсақ, біраз өзгерістерді байқайтын боламыз. Орынбасылмаған азобензолдың есептеу мәліметтері 3-ші кестеде және 3-суретте берілген.

3 Кесте. Азобензол молекуласы мен ассоциатының физика-химиялық сипаттамалары B3LYP/3-21G әдісі негізінде

Сипаттама			$E_t$ , а.б.	$\Delta E$ , а.б.	$\mu$ , Д	$E_{ЖТМО}$ , а.б.	$E_{ТБМО}$ , а.б.
Молекула			-572.6108588	-	0.0005	-0.21933	-0.08322
Димерлі ассоциат	X	<i>b-b</i>	-1139.1953174	6.026400	0.0121	-0.21332	-0.08099
		<i>b-c</i>	-1139.1953196	6.026398	0.0000	-0.21332	-0.08099
		<i>c-c</i>	-1139.1953297	6.026388	0.0067	-0.21332	-0.08099
	Y	<i>n</i>	-1139.1952779	6.026440	0.0010	-0.21316	-0.08080
		<i>a</i>	-1139.1953213	6.026396	0.0277	-0.21303	-0.08095
	Z	<i>n</i>	-1139.1948584	6.026859	0.0009	-0.20971	-0.07739
		<i>a</i>	-1139.1947637	6.026954	0.0250	-0.20962	-0.07736



X осі бойынша «басы-басына» (а), «басы-соңына» (ә) және «соңы-соңына» (б) димерлі ассоциаттарының оптималды орналасуы



Димерлі ассоциаттардың Y (а) және Z осі бойынша (ә) орналасуы

Сурет 3. Орынбасылмаған азобензол димерлерінің T-, P1- және St-геометриялық конфигурациялары

Біріншіден, байқап отырғанымыздай, димерлі ассоциаттағы молекулалар арасындағы қашықтық барлық конфигурациялар үшін бірдей (6 Å). Аталған азобензол полюссіз, сондықтан молекулалары өзара қалай орналасса да, жалпы диполь моментіне әсер етпейді. Дегенмен, екі антипараллель жағдайда Y және Z осі бойынша диполь моменті сәл жоғарлайды. Толық энергия, молекулааралық әрекеттесу энергиясы, ЖТМО, ТБМО энергияларының мәндері өз қатарларының ішінде бір-біріне жақын болып келеді. Келесі 4-ші кестеден орынбасылған азобензол үшін диполь моментінің кенет өзгергенін байқауға болады. 4-Пропил-4'-цианазобензолдың белсенді орынбасушы циан топшасы бар болғандықтан, ол күшті полюсті болып келеді. Сол себептен димердегі молекулалардың орналасуы диполь моментіне қатты әсер етеді. Екі жағдайда – *b-c* (T-конфигурациясы) және параллель P1-конфигурациясында бұл шама екі есе жоғарлайды, басқа жағдайларда, керісінше, азая түседі.

4 Кесте. 4-пропил-4'-цианазобензол үшін B3LYP/3-21G әдісі негізінде есептелген мәліметтер

Сипаттама			$E_T$ , а.б.	$\Delta E$ , а.б.	$\mu$ , Д	$E_{ЖТМО}$ , а.б.	$E_{ТБМО}$ , а.б.
Молекула			-782.7389345	-	6.498	-0.23259	-0.10193
Димерлі ассоциат	X	<i>b-b</i>	-1557.2497760	8.228092938	0.407	-0.22588	-0.09714
		<i>b-c</i>	-1557.2502215	8.227647448	12.494	-0.22187	-0.09758
		<i>c-c</i>	-1557.2485747	8.229294228	0.349	-0.22178	-0.09290
	Y	<i>n</i>	-1557.2496299	8.228239068	11.903	-0.22506	-0.09811
		<i>A</i>	-1557.2500899	8.227779058	0.399	-0.22496	-0.09653
	Z	<i>n</i>	-1557.2500927	8.227776268	0.011	-0.22188	-0.09316
		<i>a</i>	-1557.2500997	8.227769298	0.389	-0.22204	-0.09349

Сонымен, квантты-химиялық эмпирикалық емес әдістер негізінде азометиндер мен азобензолдар үшін қысқа ауқымды тәртібін димерлі ассоциаттар арқылы компьютер көмегімен модельдеп, ең тиімділерін анықтадық.

Әдебиет:

1. Америк Ю.Б., Кренцель Б.А. Химия жидких кристаллов и мезоморфных полимерных систем. М.: Наука, 1981. – 288 с.
2. Wilson M.R., Allen M.P. // Mol. Cryst. Liq. Cryst. - 1992. – 12, N 1. - P. 157.
3. Яйлоян С.М., Бежанова Л.С., Абрамян Э.Б. // ЖСХ. - 2001. – 42, № 2. – С. 222.
4. Sarkar P., Paul S., Mandal P. // Mol. Cryst. Liq. Cryst. - 2001. - 365. - P. 535.
5. Сизова О.В., Соколова Е.П., Барановский В.И., Розманов Д.А., Томашенко О.А. // ЖСХ. - 2004. – 45, № 5. – С. 807.
6. Ajeetha N., Ojha D.P., Pisipati V.G.K.M. // J. Mol. Model. - 2006. – 12. - P. 152.
7. Ojha D.P. // Z. Naturforsch. (a). - 2002. – 57. - P. 194.
8. Зоркий П.М., Тимофеева Т.В., Полищук А.П. // Усп. хим. – 1989. – 58, № 12. – С. 1971.
9. Кулешова Л.Н., Антипин М.Ю. // Усп. хим. – 1999. – 68, № 1. – С. 3.
10. Ojha D.P. // J. Struct. Chem. – 2006. – 47, N 3. – P. 443.

**Ембергенова А.Р.**, Карагандинский государственный университет имени академика Е.А. Букетова, биолого-географический факультет, гр. БО-43п/я, студент  
(*Научный руководитель – ст.преподаватель, магистр биологии Шайбек А.Ж.*)

#### **ХАРАКТЕРИСТИКА КЛЕТОК ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ ПАНКРЕАТИЧЕСКИХ ОСТРОВКОВ В УСЛОВИЯХ ДЕЙСТВИЯ АЛЛОКСАНА**

Аллоксан (мезоксалилмочевина,  $C_4H_2N_2O_4$ ) продукт распада мочевой кислоты, является первым из химических веществ, у которого была выявлена способность вызывать в течение короткого времени избирательную гибель панкреатических В-клеток и быстрое развитие экспериментального сахарного диабета. Наряду с другими химическими соединениями, аналогичная способность у которых была обнаружена в последующие годы, аллоксан в течение многих десятилетий использовался в качестве весьма удобной модели для воспроизведения экспериментального диабета у животных. Характер гистологических изменений, развивающихся в панкреатических островках при аллоксановом диабете хорошо изучен [1].

Считается, что аллоксан может синтезироваться при определенных условиях в организме животных и человека. Между тем, механизмы его диабетогенного действия до конца не исследованы. Не известно также, оказывает ли он действие на поверхностный слой панкреатических островков, сформированный А-клетками. Цель исследования: изучить с помощью растровой электронной микроскопии состояние поверхностного слоя панкреатических островков в условиях прямого воздействия аллоксана [2-7].

#### **Материал и методы.**

Опыты проведены на 22-х 6-8-дневных крысах линии Wistar и 8 белых крысах массой 152-174 г. Изолированные с помощью 2%-ного раствора коллагеназы при pH = 7,34-7,39 панкреатические островки после очистки помещались в питательную среду RPMI-1640, куда затем добавлялся водный раствор аллоксана (SERVA, Germany) из расчета 20-22 мг /100 мл. на 20 мин. По окончании питательную среду заменяли свежей в которой островки инкубировались при температуре +37 °С с добавлением  $O_2$  в течение 2 часов, после чего их высушивали с помощью углекислоты, напыляли золотом и исследовали в сканирующем электронном микроскопе S-570 «Hitachi» при ускоряющем напряжении 15 кв. Контрольным животным внутривенно вводился внутривенного введения аллоксана, разведенного в 0,85 % водном растворе NaCl, в дозе 20 мг/100 г массы тела.