



ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ БІЛІМ ЖӘНЕ ҒЫЛЫМ МИНИСТРЛІГІ
Л.Н. ГУМИЛЕВ АТЫНДАҒЫ ЕУРАЗИЯ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ



Студенттер мен жас ғалымдардың
«ҒЫЛЫМ ЖӘНЕ БІЛІМ - 2014» атты
IX халықаралық ғылыми конференциясы

IX Международная научная конференция
студентов и молодых ученых
«НАУКА И ОБРАЗОВАНИЕ - 2014»

The IX International Scientific Conference for
students and young scholars
«SCIENCE AND EDUCATION-2014»

2014 жыл 11 сәуір
11 апреля 2014 года
April 11, 2014



**ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ БІЛІМ ЖӘНЕ ҒЫЛЫМ МИНИСТРЛІГІ
Л.Н. ГУМИЛЕВ АТЫНДАҒЫ ЕУРАЗИЯ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ**

**Студенттер мен жас ғалымдардың
«Ғылым және білім - 2014»
атты IX Халықаралық ғылыми конференциясының
БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ**

**СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ
IX Международной научной конференции
студентов и молодых ученых
«Наука и образование - 2014»**

**PROCEEDINGS
of the IX International Scientific Conference
for students and young scholars
«Science and education - 2014»**

2014 жыл 11 сәуір

Астана

УДК 001(063)
ББК 72
Ғ 96

Ғ 96

«Ғылым және білім – 2014» атты студенттер мен жас ғалымдардың IX Халықаралық ғылыми конференциясы = IX Международная научная конференция студентов и молодых ученых «Наука и образование - 2014» = The IX International Scientific Conference for students and young scholars «Science and education - 2014». – Астана: <http://www.eni.kz/ru/nauka/nauka-i-obrazovanie/>, 2014. – 5831 стр. (қазақша, орысша, ағылшынша).

ISBN 978-9965-31-610-4

Жинаққа студенттердің, магистранттардың, докторанттардың және жас ғалымдардың жаратылыстану-техникалық және гуманитарлық ғылымдардың өзекті мәселелері бойынша баяндамалары енгізілген.

The proceedings are the papers of students, undergraduates, doctoral students and young researchers on topical issues of natural and technical sciences and humanities.

В сборник вошли доклады студентов, магистрантов, докторантов и молодых ученых по актуальным вопросам естественно-технических и гуманитарных наук.

УДК 001(063)
ББК 72

ISBN 978-9965-31-610-4

©Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, 2014

Все пики на полученных термограммах бентонита относятся к эндотермическим процессам. На термограммах присутствует широкий пик при температуре 70-120⁰С, что связано с удалением связанной воды. Далее начинаются процессы по термической деструкции полимерной сетки. Пики при 220-390⁰С для бентонита соответствуют деструкции той части полимерной сетки, которая не участвует в образовании композитной структуры. Высокотемпературные эндотермические пики при температуре свыше 390⁰С для бентонита, по всей вероятности, отражают процесс термической деструкции композиционных материалов.

По результатам проделанной работы можно сделать следующие выводы:

1. Элементный состав глин, определенный методом масс-спектрометрии с индуктивно-связанной плазмой, представлен железом, кальцием, калием и магнием.
2. Определены размеры коллоидных частиц каолина, бентонита и монтмориллонита. Чем больше размер частиц в воде, тем с большей силой эти частицы отталкиваются друг от друга, а следовательно, больше устойчивость этих частиц в воде.
3. Методом электронной микроскопии исследована поверхность полученных композиционных гидрогелей. Установлено, что все образцы являются крупно – пористыми, с размером пор от 20 до 100 мкм.
4. Методом дифференциальной сканирующей калориметрии показано, что композиты подвергаются термической деструкции при температуре выше 390⁰С.

Список использованных источников:

1. Ибраева Ж., Жумалы А., Благих Е., Кудайбергенов С., Бектуров Е. Получение и свойства композиционных гидрогелевых материалов на основе гидрогеля полиакриламида и природных минералов // V международный научный семинар «Новые материалы и технологии для промышленности, охраны окружающей среды и здоровья человека» (НМТ - 2013), Иссык-Куль, 16-20 сентября 2013 г. – С.141.
2. ИСО 17294-2 «Качество воды - применение масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой. Часть 2: Определение 62 элементов».
3. С.В. Крупин, Ф.А.Трофимова. Коллоидно-химические основы создания глинистых суспензий для нефтепромыслового дела // Монография, - Казань, КГТУ, 2010. – С.43.
4. В.Н.Соколов. Микромир глинистых пород // Соровский образовательный журнал, №3, 1996, стр-56-64.
5. Дифференциальная сканирующая калориметрия / Емелина А.Л. Лаборатория химического факультета, МГУ, 2009. – С.57-64.

ӘОЖ 541.49

ПРОТОНДАЛҒАН АЦЕТАМИДПЕН НИКЕЛЬ ЙОДИДІ ТҰЗДАРЫНЫҢ КВАНТХИМИЯЛЫҚ СИПАТТАМАЛАРЫ

Жолданова Зарина Жарылкасыновна

zarina90_10@mail.ru

Л. Н. Гумилев атындағы ЕҰУ Жаратылыстану ғылымдары факультетінің «6М060600 –Химия»
мамандығының 2-курс магистранты Астана, Қазақстан
Ғылыми жетекшісі –Р. Еркасов

Қазіргі заман химиясы мен химиялық технологияның өзекті бағытының бірі –органикалық лигандтармен кешенді қосылыстардың химиясы болып табылады. Олардың ішінде биометалдар мен амидтер негізіндегі кешенді қосылыстар маңызды орын алады. Осыған байланысты, бірнеше пайдалы қасиеттерге ие органикалық лигандтармен кешенді қосылыстар –химиялық өндірісте, медицинада кең қолданыс табуына орай, олардың түрлерін көбейту керектігін қажет етеді. Осыдан ертеде протондалған ацетамидпен s-d металдар тұздарының (магний, бериллий, кальций, кобальт) катарының әрекеттесуінің үрдісі мен өнімдері зерттелген [1].

Химияның өзекті бағыты –алдын-ала берілген қасиеттерге ие жаңа қосылыстар синтезі болып табылады. s- және d-метал тұздары мен амидтердің кешенді қосылыстары маңызды. Осы себеппен протондалған ацетамидпен никель йодиді тұздарының квантхимиялық сипаттамаларын анықтау

қажеттілігі туындады.

Есептеулар HyperChemPro 6.0 программалық пакетінің құрамына кіретін жартылайэмпирикалық квантхимиялық есептеулерінің PM3 әдісінің көмегімен жүргізілді.

Зерттелетін никельдің ацетамидті комплекстері қосылыстарының протондалған йодсутек қышқылы үшін электрондық және энергетикалық параметрлерінің талдауы төмендегі нәтижелерді көрсетеді (кесте 1).

Алынған нәтижелерді талдай отырып, ең алдымен электрондық сипаттамалардың ішінен атомдағы эффективті зарядқа (q) тоқталған жөн [2,3].

Карбонил тобындағы оттегі атомының ең үлкен эффективті теріс заряды никельдің тетраацетамид йодиді молекуласының карбонил тобындағы оттегі атомында көрінеді және ол -0,414 з.б. тең, ал ең кішкентай эффективті заряд ацетамидникель йодиді молекуласындағы оттегіде -0,189 з.б.

Кесте 1. Протондалған ацетамид молекулалары мен никель йодидтерінің ацетамидті комплекстерінің электрондық және энергетикалық сипаттамалары

Қосылыстың параметрі	$\text{NiI}_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{HI}$	$\text{NiI}_2 \cdot 2\text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{HI}$	$\text{NiI}_2 \cdot 4\text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{HI}$
$-E_{\text{ТОЛ}}$, эВ	2697,14	3470,95	5012,65
$\Delta fH_{\text{ТҮЗ}}$, кДж/моль	1205,76	2104,92	3767,16
μ , D	3,82	12,84	10,66
q O, з.б.	-0,189	-0,206 -0,253	-0,289 -0,305 -0,306 -0,414
q N, з.б.	0,998	0,729 0,848	0,645 0,647 0,727 0,841
q Ni, з.б.	-0,695	-0,787	-1,173
q C, з.б.	-0,047 -0,308	-0,198 -0,063 0,151 -0,143	-0,151 0,134 -0,359 0,020 -0,203 0,065 -0,197 0,153

Никельдің ди- және тетраацетамид йодидінің протондалған комплексінің ацетамидтегі аминді азот атомының протондалған моделдерінде оң зарядтың жоғары концентрациясы байқалады. Оны карбонилді оттегі атомы мен бейорганикалық қышқыл протоны арасындағы химиялық байланыстың түзілуімен түсіндіруге болады. Ең жоғары оң эффективті заряд $\text{NiI}_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{HI}$ молекуласындағы аминотоптағы азот атомында байқалады, ол $qN=+0,998$ з.б. тең.

Зерттеліп отырған қосылыс пен йодсутек қышқылының әрекеттесуінің квантхимиялық есептеулардың нәтижесінде түзілген никельдің ди- және тетраацетамид йодидінің протондалған ацетамид молекуласының тұрақталуына алып келеді. Осыған орай барлық зерттелген протондалған модельдердің әртүрлі мольдік қатынасы никель ацетамид йодиді: қышқыл келесі қатарда артады:



Келтірілген модельдердің түзілу энтальпиясында осы бағытта артады.

Зерттелген моделдердің геометриялық оптимизация талдауы ацетамид молекуласындағы карбонил топтағы C=O байланыс ұзындығы протондау кезінде ұлғаяды. Протондалған никель комплексында -0,1207-0,3693 аралығында (кесте 2).

Кесте 2. Никельдің ди-, тетра- ацетамид йодидінің және ацетамидті кешенді қосылыстарының геометриялық параметрлері

Қосылыс Параметр	$\text{NiI}_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{HI}$	$\text{NiI}_2 \cdot 2\text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{HI}$	$\text{NiI}_2 \cdot 4\text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{HI}$
$r \text{ C=O, нм}$	0,1382	0,1355 0,1207	0,1217 0,1218 0,1407 0,3693
$r \text{ C-C, нм}$	0,1500	0,1502 0,1506	0,1500 0,1493 0,1492 0,1335
$r \text{ C-N, нм}$	0,1435	0,1482 0,1523	0,1519 0,1513 0,1521 0,1467
$r \text{ N-H, нм}$	0,1000 0,1000	0,1005 0,0999 0,0997 0,1001	0,1008 0,1004 0,1003 0,0999 0,1005 0,1007 0,1004 0,1002
$r \text{ C-H, нм}$	0,1099 0,1099 0,1099	0,1102 0,1125 0,1148 0,1099 0,1098 0,1100	0,1100 0,1103 0,1105 0,1101 0,1099 0,1099 0,1085 0,1084 0,4158 0,2425 0,1091 0,1088
$r \text{ O-HI, нм}$	0,0949	0,0958	0,0956
$r \text{ N-Ni, нм}$	0,1898	0,1847 0,1850	0,1906 0,1909 0,1889 0,1881
$r \text{ Ni-I, нм}$	0,3786 0,3782 0,3777	0,8386 0,6156	0,9040 0,2823
$\angle \text{N-Ni-N, град}$	-	179,94	89,60 177,99 89,27 178,25 90,24 90,91
$\angle \text{O-C-N, град}$	113,42	119,47 120,49	115,95 116,93 102,07

			103,28
∠O-C-C, град	115,34	129,36	124,17
		111,06	110,97
			123,44
			77,458
∠C-N-H, град	112,22	111,77	105,89
	110,82	109,45	107,29
		110,58	108,79
		111,84	109,38
			107,25
			108,98
			108,09
			106,15
∠C-C-H, град	113,45	112,33	111,09
	111,67	111,85	112,57
	109,04	109,91	110,81
		113,38	111,06
		111,98	113,33
		108,89	112,30
			120,55
			121,24
			114,34
			123,95
			120,88
			75,22
∠C-N-Ni, град	99,20	99,44	113,29
		95,41	114,48
			99,40
			108,38
∠I-Ni-N, град	138,65	58,27	106,10
	123,88	126,12	73,02
	110,518	121,31	108,68
		56,02	73,00
			94,18
			91,43
			87,18
			86,61

Никель йодиді тұздарының протондалған комплексіндегі $O-H^+$ минималды арақашықтығы $NiI_2 \cdot CH_3CONH_2 \cdot HI$ (0,0949 нм), ал максималды $-NiI_2 \cdot 2CH_3CONH_2 \cdot HI$ (0,0958 нм). Негізінде протондалған ацетамидпен никель йодиді тұздарында $O-H^+$ байланыс ұзындығы қысқа. Осыған байланысты шамамен протон ацетамидтегі карбонилді оттекке ауысады.

Квантхимиялық есептеулер әдісі арқылы алынған толық энергия, түзілу энтальпиясы, шамаларын салыстыру нәтижесінде келесі қорытынды жасауға болады, яғни барлық есептелген моделдердің толық энергиясы олардың сапалық құрамы мен құрылысына байланысты және таңдалып алынған зерттеу әдісінің есебінің дұрыстығының дәлелі.

Қолданылған әдебиеттер:

1. Масакбаева С.Р. Координационные соединения галогенидов марганца и кобальта с протонированным ацетамидом: Автореф. дисс.кан хим. Наук: 02.00.01. -Караганда, 2010. –16с.
2. Жидомиров Г.М., Багатурьяц А.А., Абропин И.А. Прикладная квантовая химия. –М.: Химия, 1979. –296с.
3. Берсукер И.Б. Электронное строение и свойства координационных соединений. –Л.: Химия, 1976. –352с.