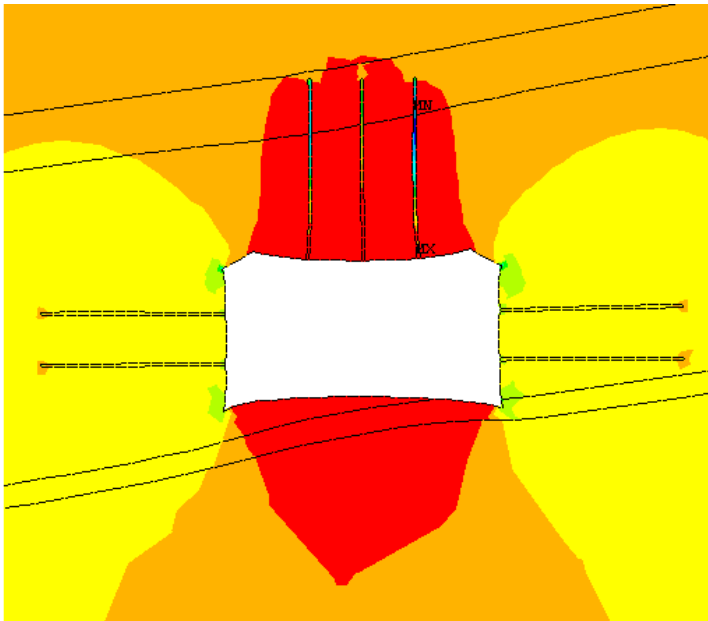
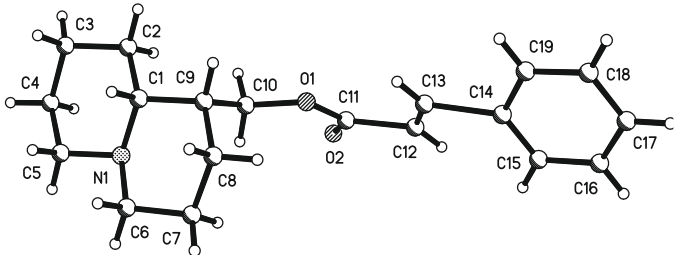
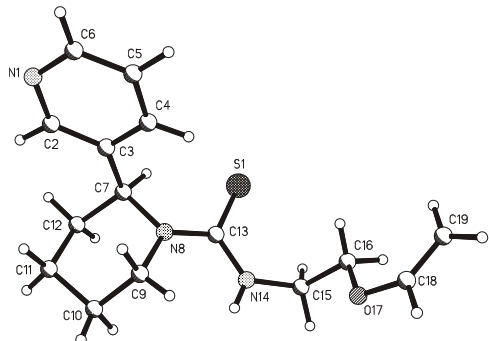
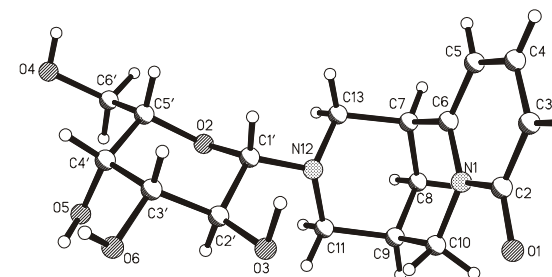


Наименование научной школы (наименование исследовательской группы)	Текущий руководитель научной школы и её состав (исследовательской группы)	Направления исследования
Разработка теоретических основ и методов практического применения компьютерных технологий в горнодобывающей и металлургической промышленности	 Руководитель д.т.н., профессор, Кажикенова С.Ш. - https://orcid.org/0000-0002-6937-1577 Состав: - д.т.н., профессор, Тутанов С.К.- https://orcid.org/0000-0002-4773-6395 - к.ф.-м.н., доцент, Мустафина Л.М.- https://orcid.org/0000-0002-9338-5960 - к.п.н., и.о. доцента, Абаева Н.Ф.- https://orcid.org/0000-0002-2740-7930 - к.т.н., и.о. доцента, Шаихова Г.С. - https://orcid.org/0000-0002-2036-3023 - к.т.н., и.о. доцента, Журов В.В. - https://orcid.org/0000-0002-4413-8584 - к.т.н., ст. преподаватель, Ахметов К.М. - https://orcid.org/0000-0002-2144-5602 - м.е.н., ст. преподаватель, Тулеутаева Ж.М.- https://orcid.org/0000-0003-0532-279X - м.п.н., преподаватель, Мергембаева А.Ж.- https://orcid.org/0000-0001-6271-8913	1. Разработка нормативных положений для выбора материалов и расчета параметров крепления выработок анкерами  Основные результаты: - На основании проведенных исследований, установлено, что основное влияние на характер формирования зон деформации пород оказывает крепость, мощность слоев кровли, контактирующих с крепью, а также тип применяемой крепи. Динамика изменения перемещений при креплении выработки при различной степени нарушенности горного массива показывает целесообразность проходки выработок через нарушенные участки с использованием схемы крепления с усилением дополнительной опережающей крепью для обеспечения повышения устойчивости горных пород. - Разработана инструкция по расчету и применению анкерной крепи на шахтах УД АО «АрселорМиттал Темиртау» Сведения о публикациях: - Журов В.В., Демин В.Ф., Демина Т.В. Техногенный горный массив выработок. Монография. - Saarbrücken: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2018. 132 С. - Журов В.В., Демин В.Ф., Демина Т.В., Халикова Э.Р. Studying coal seam bedding tectonic breach impact on supporting parameters of mine workings with roof bolting.

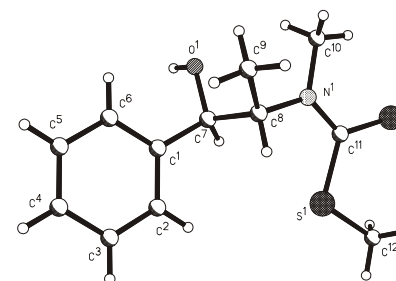
		Научный Вестник НГУ, Днепропетровск, 2019, №5(173), С. 16-21. DOI:10.29202/nvngu/2019-5/5 3. Журов В.В., Демин В.Ф., Двужилова С.Н., Ахматнуров Д.Р., Демина Т.В. Технология крепления выработок на основе оценки напряженно-деформированного состояния горного массива. Журнал «Труды университета», Караганда: КарГТУ, 2019, №1 (74), С.53-58. http://tu.kstu.kz/archive/issue/11 4. Журов В.В., Исабек Т.К., Демин В.Ф., Демина Т.В. Определение области применения способов крепления горных выработок. Свидетельство о государственной регистрации прав на объект авторского права № 2530 02.08.18. 5. Демин В.Ф., Журов В.В., Томилова Н.И., Томилов А.Н. Автоматизированная система проектирования технологических схем проведения горных выработок «Anker.KZ». Свидетельство о государственной регистрации прав на объект авторского права № 224 от 18.10.18. 2. Разработка теоретических основ и методов практического применения информационных технологий в горно-металлургической промышленности Основные результаты: 1. На основе анализа существующих энтропийно-информационных закономерностей, доказательства их математической корректности получены расчетные формулы для оценки технологической неопределенности и завершенности каждого передела и схемы в целом для производства цветных металлов. 2. Разработан итерационный алгоритм решения дифференциальных уравнений гидродинамики, преобразованных с помощью дискретизации исходной математической модели и эффективный алгоритм расчета физико-химических параметров кластерной природы исследуемых расплавленных систем. Сведения о публикациях: 1. Kazhikenova S.Sh., Shaltakov S.N., Belomestny D., Shaikhova G.S. Finite difference method implementation for Numerical integration hydrodynamic equations melts // Eurasian Physical Technical Journal.-2020. - Vol. 17, № 1(33). P.50-56. http://rmebrk.kz/journals/6217/34622.pdf 2. Suleimenov N.V, Shapalov Sh. K, Khodzhaev R.R, Shaikhova G.S. Computerized Analytical System for Assessing Fire and Environmental Safety of Mines in the Karaganla Coal Basin. International Journal of Engineering Research and Technology, Volume 13, Number 6 (2020), 1133-1136 https://up.ksu.kz/phtj/2020_17_1_33/22.pdf 3. Журов В.В., Исагулов А.З., Беломестный Д., Шаихова Г.С., Касымова Л.Ж., Жетимекова Г.Ж. Function of atoms radial distribution and pair potential of some semiconductors melts. Вестник НАН РК, Алматы, 2019, №4, С. 6-14. DOI: 10.32014/2019.2518-1467.86. 4. Шаихова Г.С., Әділбек Н., Ахметов М., Журов В.В., Шегебаева Г.Е. Реттелмеген жүйелердегі корреляция. Комплексное использование минерального сырья. 2020. № 2 (313). С. 19-26. DOI: 10.31643/2020/6445.13 5. Kazhikenova S.Sh. The unique solvability of stationary and non-stationary incompressible melt models in the case of their linearization. Archives of Control Sciences Volume 31(LXVII), №2, 2021 DOI: 10.24425/acs.2021.137420
--	--	--

Строение стереохимия производных алкалоидов анабазина, лупинина, цитизина и эфедрина	 Руководитель: - Турдыбеков Д.М., к.х.н., зав.каф — https://orcid.org/0000-0002-0245-022X Состав: 1. Турдыбеков К.М., Карагандинский университет им.Букетова, профессор, д.х.н., — https://orcid.org/0000-0001-9625-0060 2. Махмутова А.С., Карагандинский медицинский университет, д.ф.-м.н., профессор — https://orcid.org/0000-0002-0194-8739	Строение и стереохимия производных алкалоидов анабазина, лупинина, цитизина и эфедрина Основные результаты: Объекты исследования: алкалоиды и их производные. Цель работы: изучение стереохимии, пространственного строения и реакционной способности алкалоидов и их производных. Проведено рентгеноструктурное исследование пространственного строения алкалоидов и их производных. Квантовохимическими методами изучались стационарные состояния и определялись реакционные центры четырех алкалоидов растительного происхождения. В результате исследования по данным рентгеноструктурного анализа установлено пространственное строение 4 алкалоидов и их производных. На основании расчетных данных определена реакционная способность 4 соединений производных алкалоидов. Информация о пространственном строении соединений, исследованных рентгеноструктурным методом, включена в Кембриджский банк структурных данных и используется для решения различных задач в области химии природных соединений. Полученные данные могут быть использованы при интерпретации спектральных данных, для направленного синтеза новых производных, изучения механизмов реакции с учетом стереохимии реагентов, в базах данных, необходимых для корреляции строения веществ с их биологической активностью.  Пространственное строение молекулы N-циннамоиллупинина 
--	---	---

Строение молекулы
анабазиновинилоксиэтиламинотиомочевины



Строение молекулы *N*-цитизино- β -*D*-галактопиранозиламина



Строение молекулы 1-эфедринил(d-псевдоэфедринил)-дитиокарбаминовой кислоты

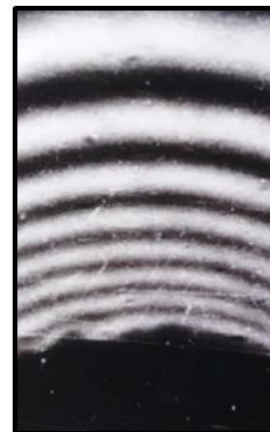
Сведения о публикациях:

1. Тезис : «Кристаллическая структура *N*-циннамоиллупинина» Материалы Республиканской студенческой научной конференции «Вклад молодежной науки в реализацию Стратегии «Казахстан -2050», 8-9 апреля 2021 г., Караганда, КарТУ
2. К.М.Турдыбеков, О.А.Морозова, С.А.Ивасенко, А.С.Махмутова, Д.М.Турдыбеков, С.М.Адекенов. Пространственное строение и абсолютная конфигурация молекул Тартридина А и Татридина В из *Lepidolopha karatavica*. ХПС. 2021.№1 с.68-72
3. Turdybekov K.M, Rakhimova B.B.,Turdybekov D.M.,Adekenov S.M. Sesquiterpene lactones of the eudesman type from *Artemisia semiarida*: isolation and spatial structure *Journal of Structural Chemistry*. V.62, №2, Pages 285 – 291. February 2021
4. Турдыбеков К.М., Нуркенов О.А., Фазылов С.Д., Махмутова А.С., Турдыбеков Д.М., Сейлханов Т.М., Аринова А.Е. Синтез, кристаллическая структура и конформация *N*-изоникотиноилфталимида. ЖСХ, т.62, №8, 2021, стр.1366
5. Турдыбеков К.М., Нуркенов О.А., Турдыбеков Д.М., Сатпаева Ж.Б., Фазылов С.Д. Синтез и кристаллическая структура *N*-этил-*N*-цитизинокарботиоамида. ЖСХ, т.62, №11, 2021, стр.1791

		6. Тезис: «Пространственное строение и конформация N-изоникотиноилфталимида» «Интеграция науки, образования и производства – основа реализации Плана нации» (Сагиновские чтения №13) Труды международной научно-практической конференции 14-15 июня 2021г. Караганда КарТУ. С.1907 7. Тезис: «Синтез и пространственное строение N-этил-N-цитизинокарботиоамида» «Интеграция науки, образования и производства – основа реализации Плана нации» (Сагиновские чтения №13) Труды международной научно-практической конференции 14-15 июня 2021г. Караганда КарТУ.с.1910 8. Nurmaganbetov, Zh.S., Mukusheva, G.K., Minayeva, Ye.V., Turdybekov, D.M., Turdybekov, K.M., Makhmutova, A.S., Zhasymbekova, A.R., Nurkenov O.A.. Synthesis, quantum-chemical calculations of cytosine alkaloid derivatives and their virtual screening. Bulletin of the University of Karaganda – Chemistry, (2021) 103(3)
Компьютерное моделирование электрооптических измерений	Кузнецова Ю.А. и Коробейников С.М. — XI International Symposium on Electrohydrodynamics (ISEIID 2019) June 18-22, 2019 Saint Petersburg, Russia Руководитель: Ясинский В.Б., к.т.н., доцент — https://orcid.org/0000-0003-3323-9010 Состав: 1. Кузнецова Ю.А., магистр естественных наук, ст. преподаватель — https://orcid.org/0000-0002-4512-327X	Расшифровка и моделирование результатов электрооптических измерений предпробивных процессов в жидкости. Основные результаты: В силу высокой трудоёмкости процесса обработки экспериментальных данных (керрограмм) электрооптических исследований и отсутствия адекватных физико-математических моделей процессов, происходящих в приэлектродной зоне, полный анализ очень затруднён. Чтобы получить максимум информации прямую задачу восстановления поля напряжённости с керрограммы мы решали путём решения обратной задачи. Для этого был разработан специальный алгоритм исследований. Для построения математической модели строился 3D-образ реальной измерительной ячейки, и полностью воспроизводились условия эксперимента. Расчёты проводились методом конечных элементов.

2. Коробейников С.М., Новосибирский государственный технический университет, д.ф.-м.н., профессор — <https://orcid.org/0000-0001-7581-5042>

Разработанный алгоритм визуализации позволял сравнивать расчётные керрограммы с экспериментальными.



Экспериментальная



Расчётная

Были рассмотрены различные ситуации, возникающие в приэлектродной зоне. С этой целью в неё вводились воздушные и ионизированные пузырьки,

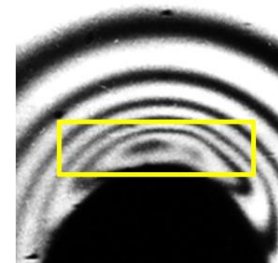
Воздушный
пузырёк
($d = 20$ мкм)



Ионизированный
пузырёк
($d = 20$ мкм)



объёмный заряд, модели стримера.



Экспериментальная керрограмма с анализируемым фрагментом



a)

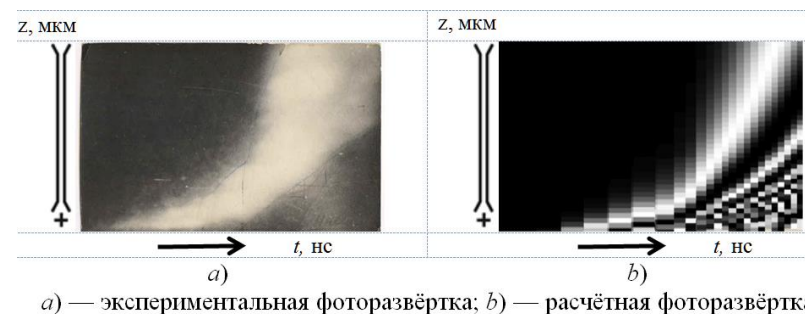


b)

Сравнение фрагментов экспериментальной (*a*) и расчётной (*b*) керрограмм

Геометрию электродной системы, форму и размеры измерительной ячейки, диапазон и закон изменения прикладываемого напряжений, род жидкости и пространственное разрешение при расчётах можно было менять в широких пределах

Этот же алгоритм позволяет проанализировать и фоторазвёртки (хронограммы).



- Разработанный метод моделирования позволяет оценить влияние формы электродов на распределение потенциала в разрядном промежутке и рассмотреть, как меняются предпробивные характеристики при учёте объёмного заряда.
- Увеличение пространственной дискретизации (до долей микрометра) позволит более детально рассмотреть процессы в приэлектродной области.
- На основе построенной математической модели процессов, происходящих в реальной измерительной ячейке, появляется возможность увеличения объёма информации, получаемой с экспериментальных кернограмм. В частности, удаётся уточнить величину, размеры и область расположения объёмного заряда.
- Если известен закон изменения прикладываемого к разрядному промежутку напряжения, можно проследить динамику ЭГД-течений, оценить влияние микропузырьков и частичных разрядов на процесс формирования пробоя, а также воспроизвести экспериментальную фоторазвёртку, полученную в реальном эксперименте.
- По результатам обработки нами были получены численные значения напряжённостей полей, приводящих к появлению предвестников пробоя стримеров в воде. Для анодного стримера $E_A \sim 40\text{--}50$ МВ/см, а для катодного — $E_K \sim 2,4\text{--}3,1$ МВ/см.

Сведения о публикациях:

9. S.M. Korobeynikov, A.G. Ovsyannikov, A.V. Ridel, D.I. Karpov, M.N. Lyutikova, Yu. A. Kuznetsova, V.B. Yassinskiy “Study of partial discharges in liquids” / Journal of Electrostatics 103 (2020) 103412 (Scimago Q2)
10. S.M. Korobeynikov Yu.A. Kuznetsova V.B. Yassinskiy. “Simulation of electrooptical experiments in liquids. Journal of Electrostatics”. Volume 106, July 2020, 103452 <https://doi.org/10.1016/j.elstat.2020.103452> (Scimago Q2)
11. Korobeynikov S.M., Ovsyannikov A.G., Ridel A.V., Karpov D.I., Medvedev D.A., Lyutikova M.N., Kuznetsova Yu.A. and Yassinskiy V.B. Partial discharges in liquids // XI

		International Symposium on Electrohydrodynamics (ISEIID 2019) June 18-22, 2019 Saint Petersburg, Russia 12. Yassinskiy V.B., Kuznetsova Yu.A. “About Kerr’s fringes formation”. / Вестник ЕНУ им. Л.Н. Гумилёва. Физика. Астрономия, 2021, Том 136, №3. С. 35-44. DOI: https://doi.org/10.32523/2616-6836-2021-136-3-35-44 13. Кузнецова Ю.А., Ясинский В.Б., Коробейников С.М. Методика моделирования предпробивных полей в жидкости. / Вопросы Электротехнология. № 3 (32) Сентябрь 2021. Россия. С. 38-47 (БАК РФ) 14. Korobeynikov S.M., Kuznetsova Yu.A. and Yassinskiy V.B “Simulation and analysis of prebreakdown processes in liquids”. // XI International Symposium on Electrohydrodynamics (ISEIID 2019) June 18-22, 2019 Saint Petersburg, Russia . 15. Ясинский В.Б., Кузнецова Ю.А., Ковалёв И.А. «Визуализация результатов электрооптических расчётов аксиальных объектов». / Республика Казахстан. СВИДЕТЕЛЬСТВО о внесении сведений в государственный реестр прав на объекты, охраняемые авторским правом № 19813 от «19» августа 2021 года. Вид объекта авторского права: Программа для ЭВМ. 16. Yassinskiy V.B., Kuznetsova Yu.A., Korobeynikov S.M., and Vagin D.V. Simulation of electrooptical measurements of prebreakdown electric fields in water. Part 1. Electric field near anode streamer. / Transactions on Plasma Science. (Scimago Q2) — <i>находится на рецензировании</i>. Yassinskiy V.B., Kuznetsova Yu.A., Korobeynikov S.M., and Vagin D.V. Simulation of electrooptical measurements of prebreakdown electric fields in water. Part 2. Electric field near cathode streamer. / Transactions on Plasma Science. (Scimago Q2) — <i>находится на рецензировании</i>
Научная школа Маженова Н.А.	   Маженов Нұрлан Зейнегуль Копбалина Қымбат Сыздыкова	1. Влияние кислорода на возбужденные состояние сложных органических молекул Основные результаты: 1. Экспериментальные установки для исследования абсорбционных характеристик и спектрально-кинетических свойств люминесценции Органические красители благодаря своим уникальным фотофизическим свойствам являются важным и широко применяемым в технике классом соединений со сложным молекулярным строением. Красители способны эффективно преобразовывать поглощаемую световую энергию в излучение другой длины волны или в другие формы энергии. Молекулы ароматических углеводородов являются удобными модельными объектами для исследований фотореакций с участием триплетных экситонов. Это связано с тем, что ароматические молекулы имеют высокий квантовый выход в триплетное состояние, а замедленная флуоресценция имеет аннигиляционную природу.

Ахметчанович Бағдатқызы
Рымбековна

Руководитель к.ф.-м.т.н., профессор, Маженов Н.А. -

<https://orcid.org/0000-0001-7071-2300>

Состав:

1. Магистр физики, Копбалина Қ.Б. <https://orcid.org/0000-0001-6378-9756>

2. Магистр физики, Сыздыкова З.Р. <https://orcid.org/0000-0002-7348-8866>

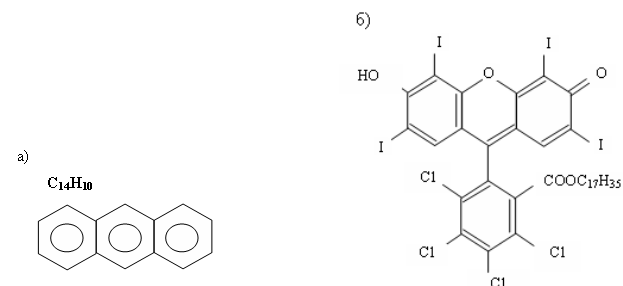


Рисунок 1 - Структурные формулы (а) антрацена и (б) бенгальской розы

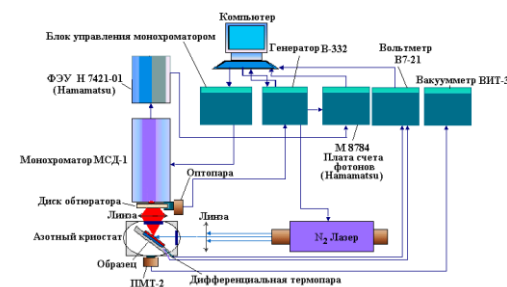


Рисунок 2 - Блок схема экспериментальной установки

Установка отградуирована по спектральной чувствительности с помощью стандартной лампы, работающей при цветовой температуре $T=2200$ К. Общее управление экспериментальной установкой и обработка данных осуществляется персональным компьютером.

Сведения о публикациях:

1. Smirnov M., Mazhenov N., Aliouane N. and Saint-Grégoire P. Novel features of the α - β phase transition in quartz-type FePO_4 as evidenced by x-ray diffraction and lattice dynamics // Journal of Physics. Condens. Matter – 2010. – Vol.22. – P. 225403(1)-225403(2).

https://www.researchgate.net/publication/50364105_Novel_features_of_the_a-b_phase_transition_in_quartz-type_FePO_4_as_evidenced_by_x-ray_diffraction_and_lattice_dynamics

2. Kopbalina K. B., Mazhenov N.A. Effect of oxygen on the excited state of complex organic molecules // Eurasian Phys. Techn. journal. – 2012. - Vol.9, №2(18). – С. 57-60. <https://rep.ksu.kz/handle/data/5896/browse?type=author&value=Kopbalina%2C+K.B.>

Основные результаты: 2. Методы расчета электронной структуры сложных органических молекул

Квантово-химический программный пакет Gaussian предназначен для расчета структуры и свойств молекулярных систем, как в газофазном, так и конденсированном состоянии. Был разработан Дж. Поплом и его исследовательской группой. За разработку вычислительных методов квантовой химии Дж. Попл был награжден Нобелевской

премией в 1998. В плане предоставляемых возможностей пакет Gaussian является одним из самых мощных и позволяет решать широкий круг задач, связанных с химией, физикой конденсированного состояния, квантовой механики. Для эффективного использования пакета пользователю необходимо знать как квантовую механику и квантовую химию, так и структуру, и методы управления этой программой.

Для оптимизированной геометрии молекул антрацена были получены электронные спектры с помощью программы «Gaussian». Получено распределение эффективных зарядов на атомах молекулы антрацена. На рис. 1 приведено распределение эффективных зарядов на атомах молекулы антрацена. Здесь видна нумерация каждого из зарядов на атомах молекулы антрацена.

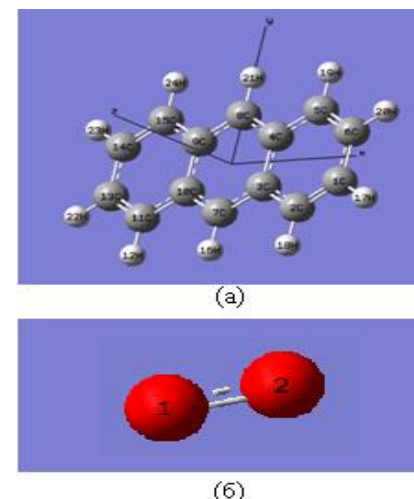


Рис.1. Оптимизированные геометрии молекул антрацена (а) и кислорода (б).

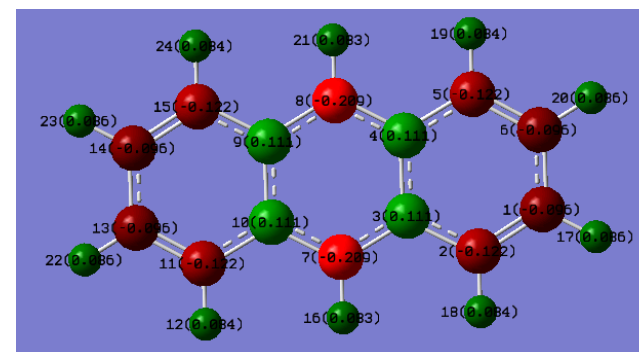


Рис.2. Распределение эффективных зарядов на атомах молекулы антрацена

На основе молекулярных орбиталей молекулы антрацена (φ_n -n-номер МО в основном синглетном состоянии) построены электронные конфигурации (таблица 1) для S_0 состояния.

Таблица1. Рассчитанные энергии и длины волн электронных переходов для молекулы S_0 состояния молекулы антрацена.

Природа перехода	Энергия переход а, эВ	Волновая функция	Длина волны,н м	Сила осциллято ра
$S_1(^1\pi \rightarrow \pi^*)$	3,33	$^1\Phi_1 = -0,16(\varphi_{32} \rightarrow \varphi_{35}) + 0,67(\varphi_{33} \rightarrow \varphi_{34})$	371	0,2224
$T_1(^3\pi \rightarrow \pi^*)$	1,86	$^3\Phi_1 = 0,24(\varphi_{32,A} \rightarrow \varphi_{37,A}) + 0,73(\varphi_{34,A} \rightarrow \varphi_{35,A}) - 0,18(\varphi_{30,B} \rightarrow \varphi_{35,B}) - 0,57(\varphi_{32,B} \rightarrow \varphi_{33,B})$	665	0,0047

Анализ волновой функции возбужденного $S_1(^1\pi \rightarrow \pi^*)$ состояния $^1\Phi_1 = -0,16(\varphi_{32} \rightarrow \varphi_{35}) + 0,67(\varphi_{33} \rightarrow \varphi_{34})$ показывает, что поглощение при 371нм с силой осиллятора 0,2224 (таблица 5) происходит при переходе π -электронов сопряженных связей на π^* вакантную молекулярную орбиталь молекулы антрацена (таблица 1, см. МО $\varphi_{32} \rightarrow \varphi_{35}, \varphi_{33} \rightarrow \varphi_{34}$), что соответствует экспериментально наблюдаемой величине поглощения 370 нм. Таким образом, рассчитанный электронный переход при 371 нм происходит с S_0 состояния молекулы антрацена, находящейся в глобальном минимуме в S_1 возбужденное состояние.

На рис.3 представлен электронный спектр молекулы антрацена $S_0 \rightarrow S_1$, полученный из расчета посредством программы «Gaussian». Как видно, из рисунка максимум спектра приходится на длину волны $\lambda=371,96$ нм и соответствует переходу из основного в первое возбужденное синглетное состояние. Сила осциллятора составляет 0,2224.

На рис. 4 показан рассчитанный электронный спектр молекулы антрацена для перехода $S_0 \rightarrow T_1$. Максимум спектра приходится на длину волны $\lambda=665,64$ нм. Сила осциллятора 0,0047. Полученные данные согласуются с экспериментальным.

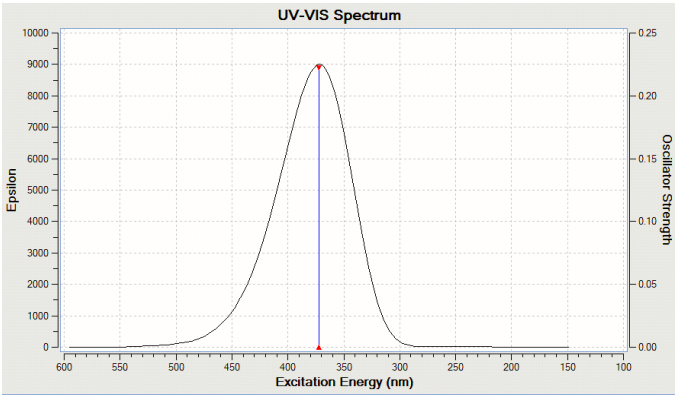


Рис. 3. Электронный спектр молекулы антрацена $S_0 \rightarrow S_1$ (расчет)

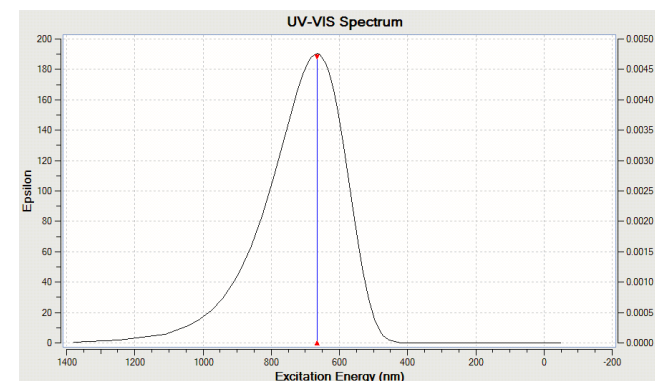


Рис. 4. Электронный спектр молекулы антрацена $S_0 \rightarrow T_1$ (расчет)

В настоящее время для оптимизации геометрии больших молекул (большее нафталина) применяется метод теории функционала плотности (DFT). Наиболее популярным является обменно-корреляционный функционал B3LYP (гибридное функционал). Поэтому для решения данной задачи был выбран метод DFT/B3LYP. При этом был выбран тремя экспонентами TZVP. Оптимизация геометрии основного и возбужденного электронного состояния было произведено в программе GAUSSIAN-09 на суперкомпьютере «СКИФ CYBERIA». На рисунке 24 приведено геометрии основного и возбужденного электронного состояния антрацена.

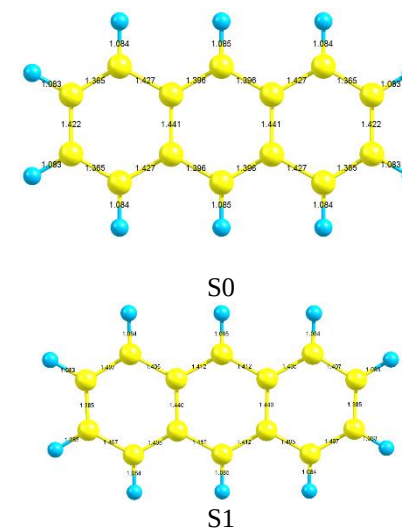


Рисунок 5 - Равновесные геометрии основного и первого возбужденного электронных состояний молекулы антрацена, определенные методом DFT/B3LYP/TZVP (длины связей указаны в ангстремах)

Как показывают, современные расчёты и эксперименты существует 4 вида димера антрацена рисунок 6.

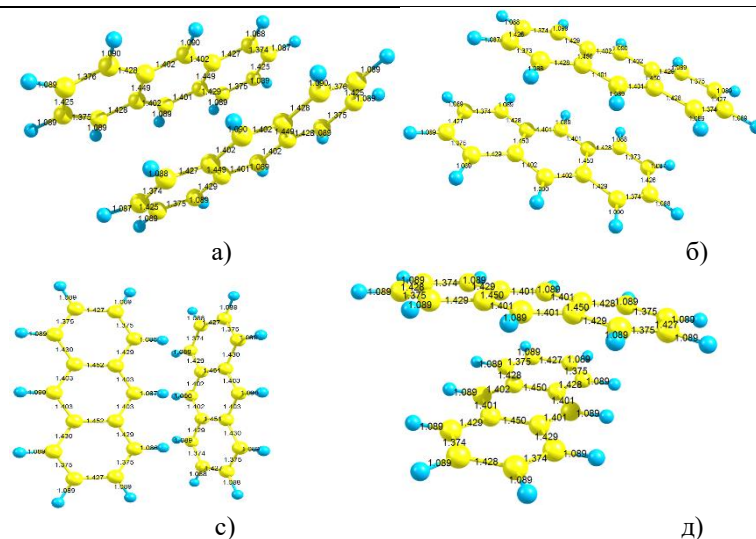


Рисунок 6 - Равновесные геометрии основных электронных состояний димеров антрацена. Антрацены: (a) Slipped-parallel, symmetry C_{2h}. (b) Graphitetype, symmetry C_i. (c) T-shape, symmetry C_{2v}. (d) Crossed, symmetry D_{2d}

Сведения о публикациях:

1. Валиев Р.Р., Копбалина К.Б., Черепанов В.Н., Ибраев Н.Х., Маженов Н.А. Теоретическое исследование структурных и спектроскопических свойств димеров антрацена // Изв. Высш. учебных зав. Физика – 2014. – Т.57, №1 – С. 97-91 <https://elibrary.ru/item.asp?id=21370873>

Основные результаты 3. Моделирование взаимодействия молекулярного кислорода с антраценами

Динамическое и статическое тушение флуоресценции происходит при контакте взаимодействии молекул кислорода. Поэтому на первом этапе исследования необходимо получить равновесную геометрию комплекса кислорода и антрацена. Из наиболее простых моделей комплекса кислорода и антрацена предлагается комплекс, состоящий из одной молекулы кислорода и антрацена. Результаты расчетов электростатического потенциала для молекул антрацена, показывают, что окружающие его молекулы могут взаимодействовать в основном с центральным кольцом. Поэтому справедливо разместить молекулы кислорода на центральном кольце антрацена. Как это показано рисунок 1.

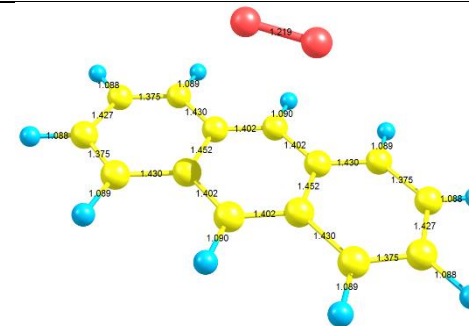


Рисунок 1 - Равновесная геометрия основного электронного состояния комплекса молекулы кислорода с молекулой антрацена

Сведения о публикациях:

1. Valiev, R.R., Kopbalina, K.B., Cherepanov, V.N., Ibraev, N.K., Mazhenov, N.A. Theoretical Investigation of the Structural and Spectroscopic Properties of Anthracene Dimers/Russian Physics Journalthis link is disabled, 2014, 57(1), crp. 95–99
<https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2014RuPhJ..57...95V/abstract>
2. Quantum-chemical calculations of the structure and electron transitions of multimolecular films Kopbalina K.B., Mazhenov N.A., Bimbetova G.M.) Eurasian Physical Technical Journal, 2019, Vol.16, No.1(31) <https://phjt.ksu.kz/>

**Научная школа,
руководитель
доктор
химических
наук, профессор
Ибраев М.К.**

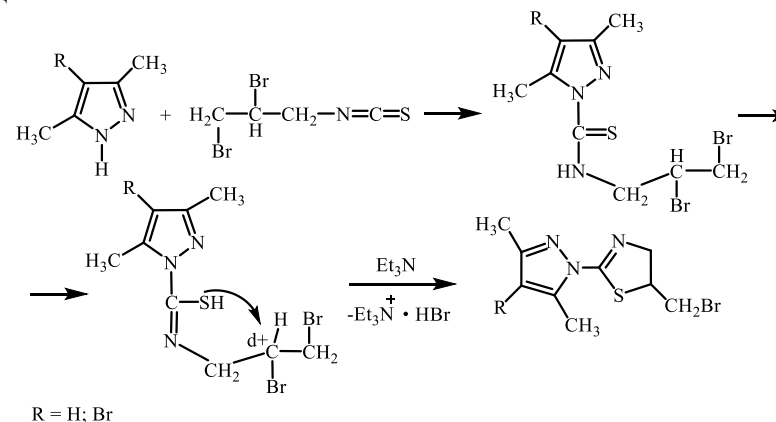


Руководитель д.х.н., профессор Ибраев М.К.

<https://orcid.org/0000-0003-0798-5562>

Состав:

1. «Разработка эффективных методов синтеза новых полифункциональных азоловых соединений с целью поиска на их основе потенциальных биологически активных веществ для медицины»



Основные результаты: В результате проведенных исследований разработаны эффективные методы синтеза новых полифункциональных азоловых соединений. Синтезирован ряд новых производных, содержащих в своем составе гетероциклические азоловые циклы и молекулы природных соединений. Полученные вещества прошли и проходят исследования на различные виды биологической активности. Ряд веществ показал

	1. к.х.н., зав. кафедрой ХиХТ Такибаева А.Т. ORCID iD https://orcid.org/0000-0003-0536-0817 2. к.х.н., и.о. доцента каф. ХиХТ Рахимберлинова Ж.Б. https://orcid.org/0000-0002-3326-0998 3. Ст. преподаватель каф. ХиХТ Карилхан А. https://orcid.org/0000-0002-1568-7904 4. Ст. преподаватель каф. ХиХТ Жорабек А.А. https://orcid.org/0000-0002-4309-9720 5. Ст. преподаватель каф. ХиХТ Алиева М.Р. https://orcid.org/0000-0002-4046-311X	различные виды активности. По результатам исследований опубликован ряд статей и патентов. Сведения о публикациях: 1. Nurkenov O.A., Ibraev M.K., Schepetkin I.A., Khlebnikov A.I., Seilkhanov T.M., Arinova A.E., Isabaeva M.B. Synthesis, Structure, and Anti-Inflammatory Activity of Functionally Substituted Chalcones and Their Derivatives // Russian Journal of General Chemistry. - 2019. - Vol. 89, No.7. - P. 995–1003. DOI: 10.1134/S1070363219070028. IF (2019)=0,643 (Q3) 2. Nurkenov O.A., Fazylov S.D., Arinova A.E., Seilkhanov T.M., Ibraev M.K., Tazhbaev E.M. Synthesis of New Chromene-Containing Pyrrolofullerenes // Russian Journal of General Chemistry, 2020. Том 90, Вып. 7, С. 1362 – 1364. 3. Gazaliev A.M., Nurkenov O.A., Kabieva S.K., Dauletzhanova Z.T., Seilkhanov T.M., Fazylov S.D., Ibraev M.K., Isaeva A.Z. Synthesis, Structure, and Antioxidant Activity of (4S,5S)-2-(1'-Bromo-2'-Phenylvinyl)-3,4-Dimethyl-5-Phenyl-1,3-Oxazolidine // Chemistry of Natural Compounds, 2017. Том 53, Вып. 5, С. 1005 – 1007. 4. Takibayeva A.T., Ibraev M.K., Kabieva S.K. // Synthesis of new 3-substituted 1,3-oxazolidine-2-thiones // Russian Journal of General Chemistry, 2017. Том 87, Вып. 6, С. 1310 – 1312. 5. Патент РК № 34267 на изобретение по заявке № 2018/0811.1 от 01.11.2018 3-(2,4-дигидроксифени)-5-(4-метоксифенил)-N-фенил-4,5-1Н-пи-разол-1-карботиоамид, обладающий антиоксидантным (антирадикальным) действием / Нуркенов О.А., Ибраев М.К., Такибаева А.Т., Шульгау З.Т., Исабаева М.Б.; опубли. 07.04.2020 г. 6. Патент РК № 34917 на изобретение по заявке № 2019/0777.1 от 22.10.2019 6-Метил-3-((4S,5S)-3,4-диметил-5-фенилоксазолидин-2-ил)-4Н--4-он, обладающий антибактериальной и антимикотической активностью / Ибраев М.К., Нуркенов О.А., Исабаева М.Б., Касенов Р.З., Сейдахметова Р.Б., Байлен А.С., Сұлтанмахмұт А., Нурмаганбетов Ж.С.; опубли. 22.10.2019 г. 7. Патент РК № 34916 на изобретение по заявке № 2019/0773.1 от 21.10.2019 3-((4S,5S)-3,4-диметил-5-фенилоксазолидин-2-ил)-4Н-хромен-4-он, обладающий антибактериальной и антимикотической активностью / Ибраев М.К., Такибаева А.Т., Нуркенов О.А., Исабаева М.Б., Нурмаганбетов Ж.С., Шульгау З.Т., Рахимберлинова Ж.Б., Алиева М.Р.; опубли. 21.10.2019 г. 8. Патент РК № 34914 на изобретение по заявке № 2019/0778.1 от 22.10.2019 3-((Пиридин-2-ил-метил)имино)метил)-4Н-хромен-4-он, обладающий антибактериальной и антимикотической активностью / Ибраев М.К., Такибаева А.Т., Нуркенов О.А., Шульгау З.Т., Нурмаганбетов Ж.С., Акимбекова Б., Оралова А.Т., Жорабек А.А.; опубли. 22.10.2019 г. 9. Патент РК № 5851 на полезную модель по заявке № 2020/1021.2 от 11.11.2020 3-((2S)-1-(5-Фенил-4,5-дигидро-1Н-пиразол-3-ил)анабазина, обладающий антимикробным действием / Ибраев М.К., Нуркенов О.А., Нурмаганбетов Ж.С.; опубли. 11.11.2020 г. 10. Патент РК № 5852 на полезную модель по заявке № 2020/1023.2 от 11.11.2020 N-Липоиланабазин, обладающий антимикробным (антибак-териальным) действием / Такибаева А.Т., Ибраев М.К., Нуркенов О.А., Сейдахметова Р.Б., Нурмаганбетов Ж.С.; опубли. 11.11.2020 г.
--	--	---

**Научная школа
Нуркенова О.А.**



Руководитель д.х.н., профессор, Нуркенов О.А. -

<https://orcid.org/0000-0003-1878-2787>

Состав:

1. д.х.н., профессор – Ибраев М.К. <https://orcid.org/0000-0002-1171-7416>
2. к.х.н., зав. кафедры ХиХТ Такибаева А.Т. ORCID iD 0000-0003-0536-0817
3. д.х.н., проф. Кулаков И.В. (г. Тюмень) <https://orcid.org/0000-0002-0327-4416>
4. к.х.н., доцент Жакина А.Х. <https://orcid.org/0000-0001-5724-2279>
5. к.х.н., ассоциир. проф. Нурмаганбетов Ж.С. <https://orcid.org/0000-0002-0978-5663>.
6. к.м.н., ассоциир. проф. Шульгау З.Т. <https://orcid.org/0000-0001-8148-0816>

1. «Разработка научных основ и эффективных методов синтеза новых полифункциональных пиридиновых соединений с целью поиска на их основе потенциальных биологически активных веществ для медицины»



Основные результаты: Актуальность выполнения проекта связана, во-первых, с общенаучной необходимостью поиска и получения новых противовирусных соединений, и, во-вторых, с потребностью развития фармацевтической промышленности. Проект имеет высокую долю казахстанского содержания и результаты являются высококонкурентными. Все это указывает на то, что исследования в области поиска новых подходов в синтезе функциональных противовирусных и антибактериальных конъюгатов на основе полифункциональных пиридиновых соединений являются перспективными и представляют несомненный теоретический и практический интерес.

Сведения о публикациях:

1. Nurkenov O.A., Nurmaganbetov Zh.S., Fazylov S.D., Satpaeva Zh.B., Turdybekov K.M., Seilkhanov T.M., Talipov S.A. Synthesis, structure, and properties of new lupinine O-acyl derivatives // Chemistry of Natural Compounds. - 2019. - Vol. 55. - №3. - P. 506-508. DOI: 10.1007/s10600-019-02726-3. **IF (2019)=0,643 (Q3)**
2. Nurkenov O.A. , Karipova G.Zh., Seilkhanov T.M., Satpayeva Zh.B., Fazylov S.D., Nukhuly A. Synthesis and Intramolecular Heterocyclization of Selected Isonicotinic Acid Thiocarbazides // Russian Journal of General Chemistry. - 2019.- Vol. 89, No.9. - P. 1457–1461. DOI: 10.1134/S1070363219090299. **IF (2019)=0,643 (Q3)**
3. Nurkenov O.A. , Ibraev M.K., Schepetkin I.A., Khlebnikov A.I., Seilkhanov T.M., Arinova A.E., Isabaeva M.B. Synthesis, Structure, and Anti-Inflammatory Activity of Functionally Substituted Chalcones and Their Derivatives // Russian Journal of General Chemistry. - 2019. - Vol. 89, No.7. - P. 995–1003. DOI: 10.1134/S1070363219070028. **IF (2019)=0,643 (Q3)**
4. Nurkenov O.A. , Nurmaganbetov Zh.S., Seilkhanov T.M., Fazylov S.D., Satpayeva Zh.B., Turdybekov K.M., Talipov S.A., Seydakhmetova R.B. Synthesis, Structure, and Biological Activity of Cinnamoyl-Containing Cytisine and Anabasine Alkaloids Derivatives //

		Russian Journal of General Chemistry.- 2019.- Vol. 89, No.10. - P. 2044–2051. DOI: 10.1134/S1070363219100098. IF (2019)=0,643 (Q3) 5. Nurkenov O.A. , Satpaeva Zh.B., Schepetkin I.A., Fazylov S.D., Seilkhanov T.M., Akhmetova S.B. Synthesis of New Hydrazones Based on o- and p-Hydroxybenzohydrazides // Russian Journal of General Chemistry. - 2017. - Vol. 87, No.8. - P. 1707–1710. DOI: 10.1134/S1070363217080114. IF (2017)=0,643 (Q3) 6. Nurkenov O.A. , Satpaeva Zh.B., Schepetkin I.A., Khlebnikov A.I., Turdybekov K.M., Seilkhanov T.M., Fazylov S.D. Synthesis and Biological Activity of Hydrazones of o- and p-Hydroxybenzoic Acids. Spatial Structure of 5-Bromo-2-hydroxybenzylidene-4-hydroxybenzohydrazide // Russian Journal of General Chemistry. - 2017. - Vol. 87, No.10. - P. 2299–2306. DOI: 10.1134/S1070363217100097. IF (2017)=0,643 (Q3) 7. Nurkenov O.A., Satpaeva Zh.B., Fazylov S.D., Seilkhanov T.M., Turdybekov K.M., Turdybekov D.M., Akhmetova S.B., Makhmutova A.S., Gazaliev A.M. Synthesis of thiourea derivatives of the alkaloids anabasine, cytisine and d-pseudoephedrine. Crystal structure of N-ethyl-N-anabasinocarbothioamide // Chemistry of Natural Compounds. - 2016. - Vol. 52. - №2. - P. 276-279. DOI: 10.1007/s10600-016-1613-8. IF (2016)=0,643 (Q3) 8. Nurkenov O.A., Fazylov S.D., Satpaeva Zh.B., Turdybekov K.M., Karipova G.Zh., Isaeva A.Zh., Talipov S.A., Ibragimov B.T. Synthesis and Structure of New 1,2,4-Triazoles Derived from p-Hydroxybenzoic Acid Hydrazide // Russian Journal of General Chemistry. - 2017. - Vol. 87, No.10. - P. 2299–2306. DOI: 10.1134/S1070363217100097. IF (2017)=0,643 (Q3) 9. Нуркенов О.А., Фазылов С.Д., Карипова Г.Ж. Гидразид изоникотиновой кислоты и его производные. – Караганда: Гласир, 2019. – 156 с. 10. Патент РК № 33049 на изобретение по заявке № 2016/0607.1 от 11.07.2016 4-(5-(4-Метоксифенил)-1Н-пиразол-3-ил)бензол-1,3-диол, обладающий антиоксидантным (антирадикальным) действием / Газалиев А.М., Нуркенов О.А., Аринова А.Е., Шульгау З.Т., Такибаева А.Т., Кабиева С.К.; опубл. 03.09.2018, бюл. №33. 11. Патент РК № 32855 на изобретение по заявке № 2016/0782.1 от 05.09.2016 N-Фенил-2-(2-гидроксibenзоил)гидразинкарботиоамид, обладающий выраженной антиоксидантной активностью / Нуркенов О.А., Газалиев А.М., Сатпаева Ж.Б., Шульгау З.Т., Фазылов С.Д., Кабиева С.К.; опубл. 11.06.2018, бюл. №21. 12. Патент 32855 РК. N-Фенил-2-(2-гидроксibenзоил)гидразинкарботиоамид, обладающий выраженной антиоксидантной активностью. Нуркенов О.А., Газалиев А.М., Сатпаева Ж.Б., Шульгау З.Т., Фазылов С.Д., Кабиева С.К.; опубл. 14 мая 2018 г. 13. Патент РК № 34267 на изобретение по заявке № 2018/0811.1 от 01.11.2018 3-(2,4-дигидроксифени)-5-(4-метоксифенил)-N-фенил-4,5-1Н-пиразол-1-карботиоамид, обладающий антиоксидантным (антирадикальным) действием / Нуркенов О.А., Ибраев М.К., Такибаева А.Т., Шульгау З.Т., Исабаева М.Б.; опубл. 07.04.2020 г. 14. Патент РК № 4397 на полезную модель по заявке 2019/0189.2 от 26.02.2019 N-((5-Нитрофуран-2-ил)метил)изоникотиногидразид, обладающий выраженной антимикробной и противогрибковой активностью / Нуркенов О.А., Сатпаева Ж.Б., Карипова Г.Ж., Ахметова С.Б., Фазылов С.Д.; опубл. 29.10.2019 г. 15. Патент РК № 4514 на полезную модель по заявке № 2019/0203.2 от 04.03.2019 3-(3-Фенилакроил)-3,4,5,6-тетрагидро-1Н-1,5-метанопиридо-[1,2-а][1,5]диазоцин-8(2H)-он, являющийся синтоном в синтезе фармакологически активных соединений / Нуркенов О.А., Нурмаганбетов Ж.С., Фазылов С.Д., Сатпаева Ж.Б.; опубл. 26.11.2019 г.
--	--	--

		16. Патент РК № 4696 на полезную модель по заявке 2018/0733.2 от 15.10.2018 Этилтиосемикарбазидные производные гидразидов 2- и 4-гидрок-сibenзойных кислот, обладающие выраженной антиоксидантной активностью (варианты) / Сатпаева Ж.Б., Нуркенов О.А., Шульгау З.Т., Фазылов С.Д., Буркеев М.Ж.; опубл. 19.02.2020 г. 17. Патент РК № 34917 на изобретение по заявке № 2019/0777.1 от 22.10.2019 6-Метил-3-((4S,5S)-3,4-диметил-5-фенилоксазолидин-2-ил)-4Н--4-он, обладающий антибактериальной и антимикотической активностью / Ибраев М.К., Нуркенов О.А., Исабаева М.Б., Касенов Р.З., Сейдахметова Р.Б., Байлен А.С., Сұлтанмахмұт А., Нурмаганбетов Ж.С.; опубл. 22.10.2019 г. 18. Патент РК № 34916 на изобретение по заявке № 2019/0773.1 от 21.10.2019 3-((4S,5S)-3,4-диметил-5-фенилоксазолидин-2-ил)-4Н-хромен-4-он, обладающий антибактериальной и антимикотической активностью / Ибраев М.К., Такибаева А.Т., Нуркенов О.А., Исабаева М.Б., Нурмаганбетов Ж.С., Шульгау З.Т., Рахимберлинова Ж.Б., Алиева М.Р.; опубл. 21.10.2019 г. 19. Патент РК № 34914 на изобретение по заявке № 2019/0778.1 от 22.10.2019 3-((Пиридин-2-ил-метил)имино)метил)-4Н-хромен-4-он, обладающий антибактериальной и антимикотической активностью / Ибраев М.К., Такибаева А.Т., Нуркенов О.А., Шульгау З.Т., Нурмаганбетов Ж.С., Акимбекова Б., Оралова А.Т., Жорабек А.А.; опубл. 22.10.2019 г. 20. Патент РК № 5851 на полезную модель по заявке № 2020/1021.2 от 11.11.2020 3-((2S)-1-(5-Фенил-4,5-дигидро-1Н-пиразол-3-ил)анабазина, обладающий антимикробным действием / Ибраев М.К., Нуркенов О.А., Нурмаганбетов Ж.С.; опубл. 11.11.2020 г. 21. Патент РК № 5852 на полезную модель по заявке № 2020/1023.2 от 11.11.2020 N-Липоиланабазин, обладающий антимикробным (антибактериальным) действием / Такибаева А.Т., Ибраев М.К., Нуркенов О.А., Сейдахметова Р.Б., Нурмаганбетов Ж.С.; опубл. 11.11.2020 г. 22 . Патент РК № 4514 на полезную модель по заявке № 2019/0203.2 от 04.03.2019 3-(3-Фенилакроил)-3,4,5,6-тетрагидро-1Н-1,5-метанопиридо[1,2-<i>a</i>][1,5]диазоцин-8(2<i>H</i>)-он, являющийся синтоном в синтезе фармакологически активных соединений / Нуркенов О.А., Нурмаганбетов Ж.С., Фазылов С.Д., Сатпаева Ж.Б.; опубл. 26.11.2019 г. 23 . Патент РК № 6178 на полезную модель по заявке № 2021/0144.2 от 16.02.2021 1-((4-(3-Метилфенил)-1Н-1,2,3-триазол-1-ил)метил)октагидро-1Н-хинолизин, 1Н-1,5-метанопиридо[1,2-<i>a</i>][1,5]диазоцин-8(2<i>H</i>)-он, обладающий цитотоксической активностью / Нурмаганбетов Ж.С., Нуркенов О.А., Фазылов С.Д.; опубл. 16.02.2021 г. 24. Патент РК № 6178 на полезную модель по заявке № 2021/0144.2 от 16.02.2021. 1-((4-(3-Метилфенил)-1Н-1,2,3-триазол-1-ил)метил)октагидро-1Н-хинолизин, обладающий цитотоксической активностью / Нурмаганбетов Ж.С., Нуркенов О.А., Фазылов С.Д., Сейдахметова Р.Б., Мукушева Г.К., Кишкентаева А.С.
--	--	---