

ISSN 2616-6771  
ISSN 2617-9962

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің

# ХАБАРШЫСЫ

---

---

## BULLETIN

of L.N. Gumilyov Eurasian  
National University

## ВЕСТНИК

Евразийского национального  
университета имени Л.Н. Гумилева

**ХИМИЯ. ГЕОГРАФИЯ. ЭКОЛОГИЯ** сериясы

**CHEMISTRY. GEOGRAPHY. ECOLOGY** Series

Серия **ХИМИЯ. ГЕОГРАФИЯ. ЭКОЛОГИЯ**

№1(126)/2019

1995 жылдан бастап шығады

Founded in 1995

Издается с 1995 года

Жылына 4 рет шығады

Published 4 times a year

Выходит 4 раза в год

Астана, 2019  
Astana, 2019

*Бас редакторы*  
г.ғ.д., проф.  
**Джаналеева К.М. (Қазақстан)**

*Бас редактордың орынбасары*  
*Бас редактордың орынбасары*  
*Бас редактордың орынбасары*

**Тәшенов Ә.К.**, х.ғ.д., проф. (Қазақстан)  
**Сапаров Қ.Т.**, г.ғ.д., проф. (Қазақстан)  
**Бейсенова Р.Р.**, б.ғ.д проф. (Қазақстан)

*Редакция алқасы*

<b>Айдарханова Г.С.</b>	б.ғ.д., проф. (Қазақстан)
<b>Амерханова Ш.К.</b>	х.ғ.д., проф. (Қазақстан)
<b>Байсалова Г.Ж.</b>	PhD, доцент (Қазақстан)
<b>Бакибаев А.А.</b>	х.ғ.д., проф. (Ресей)
<b>Барышников Г.Я.</b>	г.ғ.д., проф. (Ресей)
<b>Берденов Ж.Г.</b>	PhD (Қазақстан)
<b>Ян А. Вент</b>	Хабилит. докторы, проф. (Польша)
<b>Жакупова Ж.Е.</b>	х.ғ.к., доцент (Қазақстан)
<b>Досмағамбетова С.С.</b>	х.ғ.д., проф. (Қазақстан)
<b>Еркасов Р.Ш.</b>	х.ғ.д., проф. (Қазақстан)
<b>Жамангара А.К.</b>	б.ғ.к., доцент (Қазақстан)
<b>Иргебаева И.С.</b>	х.ғ.д., проф. (Қазақстан)
<b>Хуторянский В.В.</b>	PhD, проф. (Ұлыбритания)
<b>Копишев Э.Е.</b>	х.ғ.к., доцент м.а. (Қазақстан)
<b>Уәли А.С.</b>	х.ғ.к., доцент (Қазақстан)
<b>Масенов Қ.Б.</b>	т.ғ.к., доцент (Қазақстан)
<b>Мустафин Р.И.</b>	PhD, доцент (Ресей)
<b>Озгелдинова Ж.</b>	PhD (Қазақстан)
<b>Рахмадиева С.Б.</b>	х.ғ.д., проф. (Қазақстан)
<b>Саипов А.А.</b>	п.ғ.д., проф. (Қазақстан)
<b>Саспугаева Г.Е.</b>	PhD (Қазақстан)
<b>Шапекова Н.Л.</b>	м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
<b>Шатрук М.</b>	PhD, проф. (АҚШ)
<b>Эмин А.</b>	PhD, проф. (Түркия)

*Редакцияның мекенжайы:* 010008, Қазақстан, Астана қ., Сәтбаев к-сі, 2, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, 349 б.  
Тел: +7 (7172) 709-500 (ішкі 31-428). E-mail: vest\_chem@enu.kz

*Жауапты хатшы, компьютерде беттеген* А. Нұрболат

**Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің хабаршысы. Химия. География. Экология сериясы**

Меншіктенуші: ҚР БҒМ "Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті" ШЖҚ РМК  
Мерзімділігі: жылына 4 рет.

Қазақстан Республикасының Ақпарат және коммуникациялар министрлігімен тіркелген.  
27.03.2018ж. №16997-ж тіркеу куәлігі. Тиражы: 20 дана

Типографияның мекенжайы: 010008, Қазақстан, Астана қ., Қажымұқан к-сі, 13/1, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті

Тел: +7 (7172)709-500 (ішкі 31-428). Сайт: <http://bulchmed.enu.kz>

© Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті

*Editor-in-Chief*

Doctor of Geographic Sciences, Prof.  
**Dzhanaleyeva K.M.** (Kazakhstan)

*Deputy Editor-in-Chief*

**Tashenov A.K.**, Doctor of Chemical Sciences,  
Prof. (Kazakhstan)

*Deputy Editor-in-Chief*

**Saparov K.T.**, Doctor of Geographic Sciences, Prof.  
(Kazakhstan)

*Deputy Editor-in-Chief*

**Beysenova R.R.**, Doctor of Biological Sciences,  
prof. (Kazakhstan)

*Editorial board*

<b>Aydarkhanova G.S.</b>	Doctor of Biological Sciences, Assoc. Prof. (Kazakhstan)
<b>Amerkhanova Sh. K.</b>	Doctor Chemical Sciences, Prof.(Kazakhstan)
<b>Baysalova G.Zh.</b>	PhD, Assoc.Prof. (Kazakhstan)
<b>Bakibayev A.A.</b>	Doctor of Chemical Sciences, Prof. (Russia)
<b>Baryshnikov G.Ya.</b>	Doctor of Geographic Sciences, Prof. (Russia)
<b>Berdenov Zh.G.</b>	PhD (Kazakhstan)
<b>Jan A. Wendt</b>	Dr.habil., Prof.(Poland)
<b>Dzhakupova Zh.E.</b>	Can. of Chemical Sciences, Assoc. Prof. (Kazakhstan)
<b>Dosmagambetova S.S.</b>	Doctor of Chemical Sciences, Prof. (Kazakhstan)
<b>Erkassov R.Sh.</b>	Doctor of Chemical Sciences, Prof. (Kazakhstan)
<b>Zhamangara A.K.</b>	Can. of Biological Sciences, Assoc. Prof. (Kazakhstan)
<b>Irgibayeva I.S.</b>	Doctor Chemical Sciences, Prof.(Kazakhstan)
<b>Khutoryanskiy V.V.</b>	PhD, Prof. (Great Britain)
<b>Kopishev E.E.</b>	Can. of Chemical Sciences, acting ass.prof.(Kazakhstan)
<b>Uali A.S.</b>	Can. of Chemical Sciences, Assoc. Prof.(Kazakhstan)
<b>Massenov K.B.</b>	Can. of Technical Sciences, Assoc. Prof. (Kazakhstan)
<b>Mustafin R.I.</b>	PhD, Assoc.Prof.(Russia)
<b>Ozgeldinova Zh.</b>	PhD (Kazakhstan)
<b>Rakhmadiyeva S.B.</b>	Doctor. of Chemical Sciences, Prof. (Kazakhstan)
<b>Saipov A.A.</b>	Doctor of Pedagogical Sciences., Prof.(Kazakhstan)
<b>Saspugayeva G. E.</b>	PhD, Assoc. Prof. (Kazakhstan)
<b>Shapekova N.L.</b>	Doctor of Medical Sciences., Prof. (Kazakhstan)
<b>Shatruk M.</b>	PhD, Prof. (USA)
<b>Emin A.</b>	PhD, Prof. (Turkey)

2, Satpayev str., of. 349, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan, 010008  
Tel.: +7 (7172) 709-500 (ext. 31-428), E-mail: vest\_chem@enu.kz

*Responsible secretary, computer layout:* A. Nurbolat

**Bulletin of the L.N. Gumilyov Eurasian National University. Chemistry. Geography. Ecology Series**

Owner: Republican State Enterprise in the capacity of economic conduct "L.N. Gumilyov Eurasian National University" Ministry of Education and Science of the Republic of Kazakhstan

Periodicity: 4 times a year

Registered by the Ministry of Information and Communication of the Republic of Kazakhstan. Registration certificate №16997-ж from 27.03.2018. Circulation: 20 copies Address of Printing Office: 13/1 Kazhimukan str., L.N. Gumilyov Eurasian National

University, Astana, Kazakhstan 010008

Tel: +7 (7172) 709-500 (ext.31-428). Website: <http://bulchmed.enu.kz>

© L.N.Gumilyov Eurasian National University

*Главный редактор*  
д.г.н., проф.  
**Джаналеева К.М.** (Казахстан)

*Зам. главного редактора*  
*Зам. главного редактора*  
*Зам. главного редактора*

**Ташенов А.К.**, д.х.н, проф.(Казахстан)  
**Сапаров Қ.Т.**, д.г.н., проф. (Казахстан)  
**Бейсенова Р.Р.**, д.б.н.,проф. (Казахстан)

*Редакционная коллегия*

<b>Айдарханова Г.С.</b>	д.б.н., доцент (Казахстан)
<b>Амерханова Ш.К.</b>	д.х.н., проф (Казахстан)
<b>Байсалова Г.Ж.</b>	PhD, доцент (Казахстан)
<b>Бакибаев А.А.</b>	д.х.н., проф. (Россия)
<b>Барышников Г.Я.</b>	д.г.н., проф. (Россия)
<b>Берденов Ж.Г.</b>	PhD (Казахстан)
<b>Ян А.Вент</b>	Хабилит. доктор (Польша)
<b>Джакупова Ж.Е.</b>	к.х.н., доцент (Казахстан)
<b>Досмагамбетова С.С.</b>	д.х.н., проф. (Казахстан)
<b>Еркасов Р.Ш.</b>	д.х.н., проф. (Казахстан)
<b>Жамангара А.К.</b>	к.б.н., доцент (Казахстан)
<b>Иргibaева И.С.</b>	д.х.н., проф., доцент (Казахстан)
<b>Хуторянский В.В.</b>	PhD, проф. (Великобритания)
<b>Копишев Э.Е.</b>	к.х.н., и.о. доцент (Казахстан)
<b>Уали А.С.</b>	к.х.н., доцент (Казахстан)
<b>Масенов К.Б.</b>	к.т.н., доцент (Казахстан)
<b>Мустафин Р.И.</b>	PhD, доцент (Ресей)
<b>Озгелдинова Ж.</b>	PhD (Казахстан)
<b>Рахмадиева С.Б.</b>	д.х.н., проф. (Казахстан)
<b>Саипов А.А.</b>	д.п.н., проф. (Казахстан)
<b>Саспугаева Г.Е.</b>	PhD, доцент (Казахстан)
<b>Шапекова Н.Л.</b>	д.м.н., проф. (Казахстан)
<b>Шатрук М.</b>	PhD, проф. (США)
<b>Эмин А.</b>	PhD, проф.(Туркия)

*Адрес редакции:* 010008, Казахстан, г. Астана, ул. Сатпаева, 2, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, каб. 349  
Тел: +7(7172) 709-500 (вн. 31-428). E-mail: vest\_chem@enu.kz

*Ответственный секретарь, компьютерная верстка* А. Нурболат

**Вестник Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева. Серия:**  
**Химия. География. Экология.**

Собственник: РГП на ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева" МОН РК  
Периодичность: 4 раза в год Зарегистрирован Министерством информации и коммуникаций Республики Казахстан.

Регистрационное свидетельство №16997-ж от 27.03.2018г. Тираж: 20 экземпляров Адрес типографии: 010008, Казахстан, г. Астана, ул. Кажимукана, 13/1,

Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева Тел.: +7(7172)709-500 (вн.31-428).  
Сайт: <http://bulchmed.enu.kz>

Л.Н. ГУМИЛЕВ АТЫНДАҒЫ ЕУАЗИЯ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІНІҢ  
ХАБАРШЫСЫ. ХИМИЯ. ГЕОГРАФИЯ. ЭКОЛОГИЯ СЕРИЯСЫ

№1(126)/2019

**ХИМИЯ**

<i>Баешова А.К., Жұмабай Ф.М., Абукасова А.Б., Баешов А.</i> Мыс (I) иодидін алудың жаңа әдісін жасау	8
<i>Байсалова Г.Ж., Көкораева А.К., Еркасов Р.Ш., Амангелді Д.</i> Бруцеллез, пастереллез қоздырғыштарына қатысты микробқа және бактерияға қарсы белсенділікке ие өсімдіктердің екіншілік метаболиттері	16
<i>Белгибаева А.А., Еркасов Р.Ш., Курзина И.А., Каражчиева Н.И., Сачков В.И., Абзаев Ю.А.</i> «Гидридтік» технология бойынша Ti-Al жүйесіндегі беріктігі жоғары құймалардың алынуы	21
<i>Далелова А.М., Фронтасьева М.В., Моржухина С.В., Омарова Н.М.</i> Қазақстан Республикасының батыс аймағында мүк-биомониторингі әдісімен, ауыр металдардың ауаға түсуін зерттеу.	29
<i>Райханова Р.К., Ташенов А.К., Омарова Н.М.</i> Жүзгун тамырының компоненттеріне негізделген қышқыл кешенінің қасиеттерін зерттеу	38
<i>Сугурбекова Г.К., Кудайбергенова Р.М., Мурзакасымова Н.С.</i> Графен оксиді мен тотықсызданған графен оксидінің синтезі және сипаттамасы	48
<i>Смагулова А.К., Машан Т.Т.</i> Полуэмпирикалық әдістерді қолдана отырып, C <sub>20</sub> -дан C <sub>100</sub> -ге дейін фуллерен кластерлерін жұтудың электрондық спектрін теориялық зерттеу	55

**ГЕОГРАФИЯ. ЭКОЛОГИЯ**

<i>Ақбасова А.Ж., Байхамурова М.О., Әбсейт А.С., Әбдікәрім Г.Ғ</i> Күкіртперлитті қалдықтың жоңышқа өнімділігіне және ауыр металдардың (Cd, Pb, Zn) транслокациясына әсері	60
<i>Борислав Г., Ассен А.</i> Кіші Планина маңындағы су объектілеріндегі жерүсті суының экожүйелік қызмет ретінде ұзақ мерзімді өзгеруі	68
<i>Джоан М.</i> Любляна - "Green eu Capital" 2016 жылы. Оқу процесіндегі 2005-2015 жылдары болған өзгерістер. (өңірлік даму)	78
<i>Джаналеева Г.М., Берденов Ж.Г.</i> Физикалық және экономикалық география кафедрасының ғылыми-оқу әрдісі және зерттеу бағыттары	84
<i>Саипов А.А.</i> «Жасыл университет» бағдарламасын жүзеге асыру аясында жоғары географиялық білім мазмұнын экологияландырудың әдістемелік тұрғылары	91

BULLETIN OF L.N. GUMILYOV EURASIAN NATIONAL UNIVERSITY. CHEMISTRY.  
GEOGRAPHY. ECOLOGY SERIES

№1(126)/2019

CONTENTS

**CHEMISTRY**

- Baeshova A.K., Zhymabaj F.M., Abukasova A.B. Baeshov A.* Development of a new method for obtaining copper (I) iodide 8
- Baisalova G.Zh., Kokoraeva A.K., R.Sh. Erkasov, D. Amangeldy* Secondary metabolites of plants possessing antimicrobial and antibacterial activity against pathogens of brucellosis, pasteurellosis 16
- Belgibaeva A.A., Erkasov R.Sh., Kurzina I.A., Karakchieva N.I., Sachkov V.I., Abzaev Yu.A.* Siberian Research Institute of Agriculture and peat is a branch of the Siberian Federal Scientific Center for Agrobiotechnologies of the Russian Academy of Sciences 21
- Dalelova A.M., Frontasyeva M.V., Morzhukhina S.V., Omarova N.M.* Investigation atmospheric deposition of heavy metals in west region of the Republic of Kazakhstan using in the method of moss-biomonitoring 29
- Raikhanova R.K., Tashenov A. K., Omarova N.M.* The study of their properties of complexes of the acids based on the components of the root of Zhuzgun 38
- Sugurbekova G.K., Kudaibergenova R.M., Murzakassymova N.S.* Synthesis and characterization of graphene oxide and reduced graphene oxide 48
- Smagulova A.K., Mashan T.T.* Theoretical research of the electronic absorption spectrum of fullerene clusters from C<sub>20</sub> to C<sub>100</sub> using semi-empirical methods 55

**GEOGRAPHY. ECOLOGY**

- Akbasova A.D., Baikhamurova M.O., Abseyt A.S., Abdikarim G.G.* Effect of sulfur-perlite containing waste on clover productivity and heavy metal translocation (Cd, Pb, Zn). 60
- Grigorov B., Assenov A.* Long-term changes of surface water in water bodies near Mala Planina as an Ecosystem Service 68
- Joan. M.* Ljubljana – Green eu Capital in 2016. Training - what is changed, in the period 2005-2015. (Regional development) 78
- Dzhanaleeva G.M., Berdenov Zh.G.* Scientific - educational process and the research direction of the department of physical and economic geography 84
- Saipov A.A.* Methodological approaches to greening the content of higher geographical education in the framework of the program "Green University» 91

ВЕСТНИК ЕВРАЗИЙСКОГО НАЦИОНАЛЬНОГО УНИВЕРСИТЕТА  
ИМЕНИ Л.Н.ГУМИЛЕВА. СЕРИЯ ХИМИЯ. ГЕОГРАФИЯ. ЭКОЛОГИЯ

№1(126)/2019

**ХИМИЯ**

<i>Баешова А.К., Жұмабай Ф.М., Абукасова А.Б., Баешов А.</i> Разработка нового способа получения иодида меди (I)	8
<i>Байсалова Г.Ж., Кокораева А.К., Еркасов Р.Ш., Амангелді Д.</i> Вторичные метаболиты растений, обладающих антимикробной и антибактериальной активностью в отношении возбудителей бруцеллеза, пастереллеза	16
<i>Белгибаева А.А., Еркасов Р.Ш., Курзина И.А., Каражчиева Н.И., Сачков В.И., Абзаев Ю.А.</i> Получение высокопрочных сплавов системы Ti-Al используя гидриды металлов (I)	21
<i>Далелова А.М., Фронтасьева М.В., Моржухина С.В., Омарова Н.М.</i> Исследование атмосферных выпадений тяжелых металлов в западных районах Республики Казахстан с использованием метода мхов – биомониторов	21
<i>Райханова Р.К., Ташенов А.К., Омарова Н.М.</i> Изучение их свойств комплексов кислот на основе компонентов корня жужгуна	38
<i>Сугурбекова Г.К., Кудайбергенова Р.М., Мурзакасымова Н.С.</i> Синтез и характеристика оксида графена и восстановленного оксида графена	48
<i>Смагулова А.К., Машан Т.Т.</i> Теоретическое исследование электронного спектра поглощения кластеров фуллеренов от C <sub>20</sub> до C <sub>100</sub> с применением полуэмпирических методов	55

**ГЕОГРАФИЯ. ЭКОЛОГИЯ**

<i>Ақбасова А.Ж., Байхамурова М.О., Әбсейт А.С., Әбдікәрім Г.Ғ</i> Влияние сероперлитсодержащего отхода на продуктивность клевера и транслокацию тяжелых металлов (Cd, Pb, Zn).	60
<i>Борислав Г., Ассен А.</i> Долгосрочные изменения поверхностных вод в водоемах у Малой Планины как услуга экосистемы	68
<i>Джоан М.</i> Любляна - Green eu Capital в 2016 году. Какие изменения произошли в процессе обучения в период 2005-2015. (региональное развитие)	78
<i>Джаналеева Г.М., Берденов Ж.Г.</i> Научно – учебный процесс и направление исследований кафедры физической и экономической географии	84
<i>Саипов А.А.</i> Методические подходы к экологизации содержания высшего географического образования в рамках реализации программы «зеленый университет»	91

А.Қ. Смагулова, Т.Т. Машан

*Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан  
(E-mail: smagulova.ak@mail.ru, togzhan-mashan@mail.ru)*

### Теоретическое исследование электронного спектра поглощения кластеров фуллеренов от $C_{20}$ до $C_{100}$ с применением полуэмпирических методов

**Аннотация:** В данной работе предоставлен обзор теоретических исследований электронных спектров и переходов в молекулах фуллеренов различных размеров с максимальной симметрией. Были проведены некоторые корреляции между размером кластеров фуллеренов и энергией молекулы, а также между длиной волны перехода и дипольным моментом молекулы. Для наиболее стабильных кластеров ( $C_{20}$  и  $C_{60}$ ) были проведены соответствия линий электронных переходов и неприведенных представлений групп данных кластеров. Для кластеров с  $C_{20}$  и  $C_{60}$  характерна самая высокая симметрия, что делает их более устойчивыми. Для исследований были использованы полуэмпирические методы расчетов, а именно метод PM6.

Продемонстрированы некоторые закономерности между значением дипольного момента, энергии и положением линии электронного перехода в кластере. Наблюдается высокий пик у кластера с восьмидесятью атомами и двадцатью атомами.

**Ключевые слова:** фуллерены, кластеры, симметрия, моделирование, электронные переходы, спектры.

DOI: <https://doi.org/10.32523/2616-6771-2019-126-1-55-59>

**Введение.** С момента их открытия в середине 1980-х годов [1] фуллерены привлекают большой интерес благодаря своей уникальной структуре и свойствам. Вскоре после открытия стало ясно, что  $C_{60}$ , из-за его высокой симметрии и стабильности, был также уникальным среди экспериментально доступных фуллеренов. Действительно, при переходе от  $C_{60}$  к  $C_{70}$ , второму по распространенности фуллерену, симметрия уменьшается от  $I_h$  до  $D_{5h}$ , а гораздо более низкая симметрия характеризует большинство производных фуллеренов. Среди свойств фуллеренов, которые могут быть связаны с их электронной структурой и их симметрией, оптические свойства имеют особое значение с точки зрения применений, которые могут быть на их основе, таких как производство оптических ограничителей на основе фуллеренов [2]. Большие теоретические усилия были направлены на предсказание электронных состояний и спектроскопию фуллерена  $C_{60}$  [3-4]. Однако опубликованными электронными спектрами были пленка низкого разрешения [5] или раствор гексана [6] видимое ультрафиолетовое поглощение не было проанализировано. В настоящей работе обсуждаются в основном спектры видимого / УФ-поглощения раствора гексана в вакууме. Также теоретически были исследованы два наиболее распространенных фуллеренов,  $C_{60}$  и  $C_{70}$  [7,8], сосредоточив внимание на исследованиях электронной спектроскопии, проводимых в растворах, матрицах благородных газов или в газовой фазе, другими словами, в условиях, когда свойства приблизительно изолированных молекул могут контролироваться. Эти спектроскопические исследования представляют собой важный источник информации о влиянии внутримолекулярных связей, хотя взаимодействия с растворителем также вызовут значительные возмущения, которые появляются в спектрах. С другой стороны, эти спектроскопические данные (единственные данные) прямо сопоставимы с результатами квантово-химических вычислительных исследований, проведенных на изолированных молекулах фуллеренов. В данной работе были проведены исследования оптических свойств фуллеренов с числом атомов от 20 до 100, при этом были взяты молекулы с максимальной симметрией. **Вычислительные детали.** Исследовались кластеры из углерода от  $C_{20}$  до  $C_{100}$  с использованием квантово-химического моделирования методом PM6[9]. Все исследования велись на программе Gaussian09. В первую очередь для изучения электронных состояний и переходов была проведена оптимизация с расчетом колебательных спектров для



проверки на наличие мнимых частот. Оптимизированные структуры были использованы для расчета электронных спектров и соответствующих электронных орбиталей с неприведенными представлениями.

**Результаты и обсуждение.** Все структуры были оптимизированы и их изображение проиллюстрировано на рисунке 1. Соответствующая группа симметрии (по Шенфлису) каждому кластеру показана в таблице 1.

Для изучения стабильности отдельных кластеров построен график зависимости энергии кластера от числа атомов. Можно видеть, как растет энергия молекулы с увеличением количества атомов.


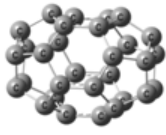
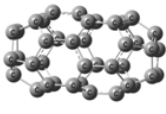
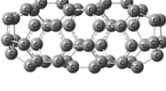

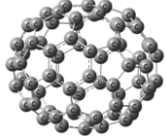
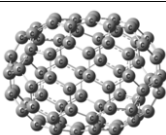
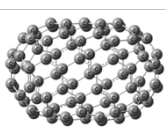

Количество атомов	Рисунок	Группа	Дипольный момент
20		$I_h$	0
30		$D_{5h}$	0,148
40		$D_{5d}$	0,1856
50		$D_{5h}$	5.3284
60		$I_h$	0
70		$D_{5h}$	0
80		$D_{5d}$	0,0002
90		$D_{5h}$	0
100		$D_{5d}$	0

Таблица 1. Результаты расчетов кластеров

Однако можно заметить резкий спад энергии для кластера  $C_{60}$ , который принимает минимальную энергию, также низкой энергией обладает  $C_{70}$ , которые наиболее изучены экспериментально.

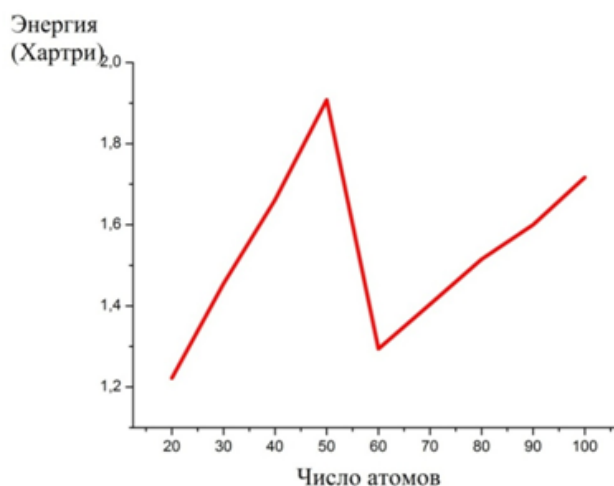


Рисунок 1 – Зависимость энергии кластеров от числа атомов.

Для всех молекул рассчитаны оптические спектры и наложены один на другой и изображены в рисунке 2. Как видно из рисунка наименьшим пиком обладает молекула с  $C_{60}$ , который обладает наименьшей энергией. Кроме того, необходимо заметить, что с увеличением дипольного момента, наблюдается увеличение интенсивности поглощения. Данный факт связан с уравнением, определяющим электронные переходы в молекулах:

$$\mu_{fi} = \langle f | \mu | i \rangle$$

Где  $\mu_{fi}$  - дипольный момент перехода,  $f$  - конечное состояние,  $i$  - Исходное состояние,  $\mu$  - оператор дипольного перехода

Рассмотрим для примера два наиболее стабильных кластера:  $C_{20}$  и  $C_{60}$ . Из результатов расчетов необходимо взять молекулярные орбитали с наибольшими вкладами и их неприведенные представления. В соответствии с правилами отбора и правилом Лапорта, необходимо, чтобы начальные и конечные орбитали обладали различными симметриями (u-d, d-u).

Для кластера  $C_{20}$  основной переход соответствует  $B_1 \rightarrow B_2$ , что хорошо согласуется с правилами отбора. В молекуле  $C_{60}$  основной переход -  $H_u \rightarrow T_{1g}$ . Как видно из данных по рассчитанным не приведенным представлениям все данные переходы соответствуют правилу Лапорта.

**Закключение.** Кластеры фуллеренов с числом атомов углерода от двадцати до ста были исследованы на возможности электронных переходов. Наиболее часто встречаемый кластер фуллерена, который имеет наименьшую энергию, обладает наиболее низкой длиной волны поглощения, при этом при сравнении с другими кластерами, имеет наименьшую интенсивность. Это связано с низким дипольным моментом кластера. Также большой стабильностью обладает кластер с двадцатью атомами, который имеет очень интенсивную линию. При увеличении количества атомов от двадцати до шестидесяти наблюдается падение интенсивности поглощения основной линии. Затем происходит постепенный рост интенсивности.

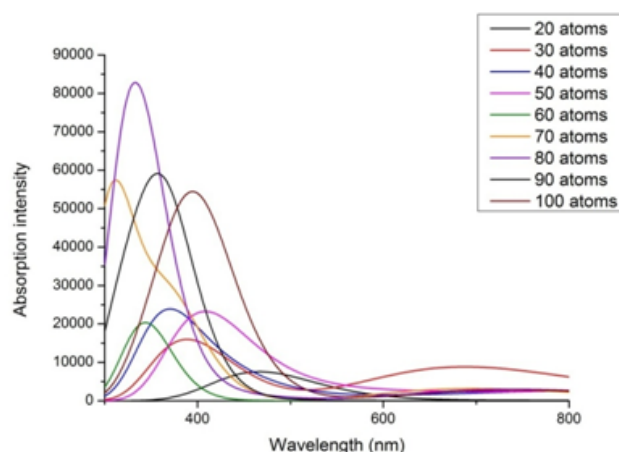


Рисунок 2 – Теоретически рассчитанные спектра поглощения кластеров фуллеренов. Горизонтальная ось – длина волны поглощения в нм, вертикальная – интенсивность поглощения в относительных единицах.

### Список литературы

- 1 H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O' Brien, R. F. Curl and R. E. Smalley,  $C_{60}$ : Buckminsterfullerene//*Nature*, 1985, V 318, P 162.
- 2 N. Mackiewicz, T. Bark, B. Cao, J. A. Delaire, D. Riehl, W. L. Ling, S. Foillard and E. Doris ; Carbon, Fullerene-functionalized carbon nanotubes as improved optical limiting devices// *Carbon*, 2011, 49 (12), 3998-4003
- 3 M. Ozaki and A. Takahashi. Calculated properties of  $C_{60}$  isomers and fragments // *Chem. Phys. Letters*, 1996, V 127, P 242.
- 4 M. G. Giuffreda, F. Negri and G. Orlandi, Quantum-Chemical Modeling and Analysis of the Vibrational Structure in the Phosphorescence Spectrum of  $C_{60}$ , *J. Phys. Chem. A*, 2001, 105, 9123.
- 5 W. KrBtschmer. L.F. Lamb, K. Fostiropoulos and D.R. Huffman. The infrared and ultraviolet absorption spectra of laboratory-produced carbon dust: evidence for the presence of the  $C_{60}$  molecule // *Nature*, 1990, V 347, P 354.
- 6 H. Jie, M.M. Alvarez, S.J. Anz, R.D. Beck, F. Diederich, K. Fostiropoulos, D.R. Huffman. W. titschmer. Y. Rubin. K.E. Schnver. D. Sensharma and R.L. Whetten. Characterization of the soluble all-carbon molecules  $C_{60}$  and  $C_{70}$  // *J. Phys. Chem.*1990, V 94, P 8630.
- 7 J.P. Hare. H.W. Kroto and R. Taylor, Preparation and UV-visible spectra of fullerenes  $C_{60}$  and  $C_{70}$  // *Chem. Phys. Letters*, 1991, V 177, P 394.
- 8 G. Orlandi, F. Negri, Electronic states and transitions in  $C_{60}$  and  $C_{70}$  fullerenes // *Photochem. and Photobiol. Sci.*, 2002, V 1, P 289-308
- 9 James J. P. Stewart (2007). "Optimization of Parameters for Semiempirical Methods V: Modification of NDDO Approximations and Application to 70 Elements". *The Journal of Molecular Modeling*. **13** (12): 1173–1213

A.K. Smagulova, T.T. Mashan

*L.N. Gumilyov Eurasian National University, str. Satpayev 2, Astana, Kazakhstan*

**Theoretical research of the electronic absorption spectrum of fullerene clusters from  $C_{20}$  to  $C_{100}$  using semi-empirical methods**

**Abstract:** This article provides an overview of the theoretical studies of electronic spectra and transitions in fullerene molecules of various sizes with maximum symmetry. Some correlations were made between the size of the fullerene clusters and the energy of the molecule, as well as between the transition wavelength and the dipole moment of the molecule. For the most stable clusters ( $C_{20}$  and  $C_{60}$ ), correspondences of electronic transition lines and unreduced representations of clusters data groups were performed. For clusters with  $C_{20}$  and  $C_{60}$ , the highest symmetry is characteristic, which makes them more stable. For research, semi-empirical calculation methods were used, namely the PM6 method.

Some regularities are demonstrated between the value of the dipole moment, energy, and the position of the electron transition line in a cluster. There is a high peak at the cluster with eighty atoms and twenty atoms.

**Keywords:** fullerenes, clusters, symmetry, modeling, electron transfer, spectra.

А.Қ. Смагулова, Т.Т. Машан

*Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан.***Полуэмпирикалық әдістерді қолдана отырып,  $C_{20}$ -дан  $C_{100}$ -ге дейін фуллерен кластерлерін жұтудың электрондық спектрін теориялық зерттеу**

**Аңдатпа:** Осы жұмыста максималды симметриямен әртүрлі өлшемдегі фуллерен молекулаларындағы электронды спектрлер мен өтпелердің теориялық зерттеулеріне шолу жасалған. Фуллерен кластерлерінің өлшемі мен молекуланың энергиясы арасында, сондай-ақ өту толқынының ұзындығы мен молекуланың дипольдік моменті арасында кейбір корреляция жүргізілді. Негұрлым тұрақты кластерлер ( $C_{20}$  және  $C_{60}$ ) үшін электрондық өтпе сызықтарының және осы кластер топтарының келтірілмеген көріністерінің сәйкестігі жүргізілді.  $C_{20}$  және  $C_{60}$  кластерлер үшін ең жоғары симметрия тән, бұл олардың тұрақты болуын қамтамасыз етеді. Зерттеу үшін жартылай эмпирикалық есептеу әдісі пайдаланылды, атап айтқанда PM6 әдісі.

Кейбір заңдылықтар диполь моментінің, энергияның және кластердегі электронды өтпелі сызықтың орнынан көрсетіледі. Жоғары шың сексен атом және жиырма атом бар кластерлерде бар.

**Түйін сөздер:** фуллерендер, кластерлер, симметрия, модельдеу, электронды өтпелер, спектрлер.

**References**

- 1 Kroto H.W., Heath J.R., O' Brien S.C., Curl R.F. and R. E. Smalley,  $C_{60}$ : Buckminsterfullerene, Nature, 318,162.(1985).
- 2 Mackiewicz N., Bark T., Cao B., Delaire J. A., Riehl D., Ling W.L., S. Foillard and E. Doris ; Carbon, Fullerene-functionalized carbon nanotubes as improved optical limiting devices, Carbon, 49 (12), 3998-4003 (2011).
- 3 Ozaki M. and Takahashi A. Calculated properties of  $C_{60}$  isomers and fragments, Chem. Phys. Letters, 127, 242. (1996).
- 4 M. G. Giuffreda, F. Negri and G. Orlandi, Quantum-Chemical Modeling and Analysis of the Vibrational Structure in the Phosphorescence Spectrum of  $C_{60}$ , J. Phys. Chem. A, 105, 9123.(2001).
- 5 W. KrBtschmer. L.F. Lamb, K. Fostiropoulos and D.R. Huffman. The infrared and ultraviolet absorption spectra of laboratory-produced carbon dust: evidence for the presence of the  $C_{60}$  molecule, Nature, 347, 354.(1990).
- 6 H. Jie, M.M. Alvarez, S.J. Anz, R.D. Beck, F. Diederich, K. Fostiropoulos, D.R. Huffman. W. titschmer. Y. Rubin. K.E. Schnver. D. Sensharma and R.L. Whetten. Characterization of the soluble all-carbon molecules  $C_{60}$  and  $C_{70}$ , J. Phys. Chem. 94, 8630.(1990).
- 7 J.P. Hare. H.W. Kroto and R. Taylor, Preparation and UV-visible spectra of fullerenes  $C_{60}$  and  $C_{70}$  // Chem. Phys. Letters, 177, 394. (1991).
- 8 G. Orlandi, F. Negri, Electronic states and transitions in  $C_{60}$  and  $C_{70}$  fullerenes, Photochem. and Photobiol. Sci.,1, 289-308 (2002).
- 9 James J. P. Stewart (2007). "Optimization of Parameters for Semiempirical Methods V: Modification of NDDO Approximations and Application to 70 Elements, . *The Journal of Molecular Modeling*, **13** (12), 1173–1213(2007).

**Сведения об авторах**

*Смагулова А.Қ.* – магистрант 2 курса Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан.

*Машан Т.Т.* - кандидат химических наук, доцент – Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан.

*Smagulova A.K.* – 2nd year master's student of L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.

*Mashan T.T.* - candidate of chemical sciences, docent, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.

«Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің Хабаршысы. Химия. География. Экология сериясы» журналына мақала жариялау ережесі

**1. Журнал мақсаты.** Химия, география, экология салалары бойынша мұқият тексеруден өткен ғылыми құндылығы бар мақалалар жариялау.

**2. Журналда мақала жариялаушы автор мақаланың қол қойылған 1 дана қағаз нұсқасын** Ғылыми басылымдар бөліміне (редакцияға, мекенжайы: 010008, Қазақстан республикасы, Астана қаласы, Қ. Сәтпаев көшесі, 2, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Бас ғимарат, 408 кабинет) және e-mail [vest\\_chem@enu.kz](mailto:vest_chem@enu.kz) электрондық поштасына Word, Tex, PDF форматтарындағы нұсқаларын жіберу қажет. Мақала мәтінінің қағаз нұсқасы мен электронды нұсқалары бірдей болулары қажет. Мақалалар қазақ, орыс, ағылшын тілдерінде қабылданады. Сонымен қатар, автор(лар) ілеспе хат ұсынуы керек.

**3. Автордың қолжазбаны редакцияға жіберуі мақаланың Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің хабаршысында басуға келісін, шетел тіліне аударылып қайта басылуына келісін білдіреді. Автор мақаланы редакцияға жіберу арқылы автор туралы мәліметтің дұрыстығына, мақала көшірілмегендігіне (плагиаттың жоқтығына) және басқа да заңсыз көшірмелердің жоқтығына кепілдеме береді.**

**4. Мақаланың көлемі 18 беттен аспауға тиіс (6 беттен бастап).**

**5. Мақаланың құрылымы**

**ҒТАМРК** <http://grnti.ru/>

**Автор(лар)дың аты-жөні**

**Мекеменің толық атауы, қаласы, мемлекеті** (егер авторлар әртүрлі мекемеде жұмыс жасайтын болса, онда әр автор мен оның жұмыс мекемесі қасында бірдей белгі қойылу керек)

**Автор(лар)дың E-mail-ы**

**Мақала атауы**

**Аннотация** (100-200 сөз; формуласыз, мақаланың атауын мейлінше қайталамауы қажет; әдебиеттерге сілтемелер болмауы қажет; мақаланың құрылысын (кіріспе /мақаланың мақсаты/ міндеттері /қарастырылып отырған сұрақтың тарихы, зерттеу әдістері, нәтижелер/талқылау, қорытынды) сақтай отырып, мақаланың қысқаша мазмұны берілуі қажет).

**Түйін сөздер** (6-8 сөз не сөз тіркесі). Түйін сөздер мақала мазмұнын көрсетіп, мейлінше мақала атауы мен аннотациядағы сөздерді қайталамай, мақала мазмұнындағы сөздерді қолдану қажет. Сонымен қатар, ақпараттық-ізвестіру жүйелерінде мақаланы жеңіл табуға мүмкіндік беретін ғылым салаларының терминдерін қолдану қажет).

**Негізгі мәтін** мақаланың мақсаты/ міндеттері/ қарастырылып отырған сұрақтың тарихы, зерттеу әдістері, нәтижелер/талқылау, қорытынды бөлімдерін қамтуы қажет.

**Таблица, суреттер** – аталғаннан кейін орналастырылады. Әр таблица, сурет қасында оның аталуы болуы қажет. Сурет айқын, сканерден өтпеген болуы керек.

Мақаладағы **формулалар** тек мәтінде оларға сілтеме берілсе ғана номерленеді.

Жалпы қолданыста бар **аббревиатуралар** мен **қысқартулардан** басқалары міндетті түрде алғаш қолданғанда түсіндірілуі берілуі қажет. **Қаржылай көмек туралы** ақпарат бірінші бетте көрсетіледі.

**Әдебиеттер тізімі**

Мәтінде әдебиеттерге сілтемелер тікжақшаға алынады. Мәтіндегі әдебиеттер тізіміне сілтемелердің номерленуі мәтінде қолданылуына қатысты жүргізіледі: мәтінде кездескен әдебиетке алғашқы сілтеме [1] арқылы, екінші сілтеме [2] арқылы т.с.с. жүргізіледі. Кітапқа жасалатын сілтемелерде қолданылған беттері де көрсетілуі керек (мысалы, [1, 45 бет]). Жарияланбаған еңбектерге сілтемелер жасалмайды. Сонымен қатар, рецензиядан өтпейтін басылымдарға да сілтемелер жасалмайды (әдебиеттер тізімін, әдебиеттер тізімінің ағылшынша эзірлеу үлгілерін төмендегі мақаланы рәсімдеу үлгісінен қараңыз).

Мақала соңындағы әдебиеттер тізімінен кейін **библиографиялық мәліметтер** орыс және ағылшын тілінде (егер мақала қазақ тілінде жазылса), қазақ және ағылшын тілінде (егер мақала орыс тілінде жазылса), орыс және қазақ тілінде (егер мақала ағылшын тілінде жазылған болса) беріледі.

**Авторлар туралы мәлімет:** автордың аты-жөні, ғылыми атағы, қызметі, жұмыс орны, жұмыс орнының мекен-жайы, телефон, e-mail – қазақ, орыс және ағылшын тілдерінде толтырылады.

**6. Қолжазба мұқият тексерілген болуы қажет. Техникалық талаптарға сай келмеген қолжазбалар қайта өңдеуге қайтарылады. Қолжазбаның қайтарылуы оның журналда басылуына жіберілуін білдірмейді.**

**7. Редакцияға түскен мақала жабық (анонимді) тексеруге жіберіледі. Барлық рецензиялар авторларға жіберіледі. Автор (рецензент мақаланы түзетуге ұсыныс берген жағдайда) үш күн аралығында қайта қарап, қолжазбаның түзетілген нұсқасын редакцияға қайта жіберуі керек. Рецензент жарамсыз деп таныған мақала қайтара қарастырылмайды. Мақаланың түзетілген нұсқасы мен автордың рецензентке жауабы редакцияға жіберіледі.**

**8. Төлемақы.** Басылымға рұқсат етілген мақала авторларына төлем жасау туралы ескертіледі. Төлем көлемі 2018 жылы 4500 тенге – ЕҰУ қызметкерлері үшін және 5500 тенге басқа ұйым қызметкерлеріне.

Реквизиты:

РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК

АО "Банк Центр Кредит"

БИК банка: КСЖВКЗКХ

ИИК: KZ978562203105747338

Кбе 16

Кшп 859- за статьи

РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК АО "Bank RBK"

Бик банка: KINCKZKA

ИИК: KZ498210439858161073

Кбе 16

Кшп 859 - за статьи

РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК АО "ForteBank"

БИК Банка: IRTYKZKA

ИИК: KZ599650000040502847

Кбе 16

Кшп 859 - за статьи

РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК АО "Народный Банк Казахстан"

БИК Банка: HSBKKZKX

ИИК: KZ946010111000382181

Кбе 16

Кшп 859.

Для сотрудников ЕНУ - 4500 тенге, для сторонних организаций - 5500 тенге

"За публикацию в Вестнике ЕНУ ФИО автора"

**Provision on articles submitted to the journal "Bulletin of L.N. Gumilyov Eurasian National University. Chemistry. Geography. Ecology Series"**

**1. Purpose of the journal.** Publication of carefully selected original scientific works in the fields of chemistry, geography, ecology.

**2.** An author who wishes to publish an article in a journal must submit the article in hard copy (printed version) in one copy, signed by the author to the scientific publication office (at the address: 010008, Republic of Kazakhstan, Astana, Satpayev St., 2. L.N. Gumilyov Eurasian National University, Main Building, room 408) and by e-mail [vest\\_chem@enu.kz](mailto:vest_chem@enu.kz) in Word, PDF and Tex format. At the same time, the correspondence between Tex-version, Word-version, PDF-version and the hard copy must be strictly maintained. And you also need to provide the cover letter of the author(s).

**Language of publications:** Kazakh, Russian, English.

**3. Submission of articles to the scientific publication office means the authors' consent to the right of the Publisher, L.N. Gumilyov Eurasian National University, to publish articles in the journal and the re-publication of it in any foreign language. Submitting the text of the work for publication in the journal, the author guarantees the correctness of all information about himself, the lack of plagiarism and other forms of improper borrowing in the article, the proper formulation of all borrowings of text, tables, diagrams, illustrations.**

**4.** The volume of the article should not exceed 18 pages (from 6 pages).

**5. Structure of the article**

*GRNTI* <http://grnti.ru/>

*Initials and Surname of the author (s)*

*Full name of the organization, city, country* (if the authors work in different organizations, you need to put the same icon next to the name of the author and the corresponding organization)

*Author's e-mail (s)*

*Article title*

**Abstract** (100-200 words, it should not contain a formula, the article title should not repeat in the content, it should not contain bibliographic references, it should reflect the summary of the article, preserving the structure of the article - introduction/ problem statement /goals/ history, research methods, results /discussion, conclusion).

**Keywords** (6-8 words/word combination. Keywords should reflect the main content of the article, use terms from the article, as well as terms that define the subject area and include other important concepts that make it easier and more convenient to find the article using the information retrieval system).

**The main text of the article** should contain an introduction/ problem statement/ goals/ history, research methods, results / discussion, conclusion. Tables, figures should be placed after the mention. Each illustration should be followed by an inscription. Figures should be clear, clean, not scanned.

In the article, only those **formulas** are numbered, to which the text has references.

All **abbreviations**, with the exception of those known to be generally known, must be deciphered when first used in the text.

Information on **the financial support** of the article is indicated on the first page in the form of a footnote.

**References**

In the text references are indicated in square brackets. References should be numbered strictly in the order of the mention in the text. The first reference in the text to the literature should have the number [1], the second - [2], etc. The reference to the book in the main text of the article should be accompanied by an indication of the pages used (for example, [1, 45 p.]). References to unpublished works are not allowed. Unreasonable references to unreviewed publications (examples of the description of the list of literature, descriptions of the list of literature in English, see below in the sample of article design).

At the end of the article, after the list of references, it is necessary to indicate bibliographic data in Russian and English (if the article is in Kazakh), in Kazakh and English (if the article is in Russian) and in Russian and Kazakh languages (if the article is English language).

**Information about authors:** surname, name, patronymic, scientific degree, position, place of work, full work address, telephone, e-mail - in Kazakh, Russian and English.

**6.** The article must be **carefully verified**. Articles that do not meet technical requirements will be returned for revision. Returning for revision does not mean that the article has been accepted for publication.

**7. Work with electronic proofreading.** Articles received by the Department of Scientific Publications (editorial office) are sent to anonymous review. All reviews of the article are sent to the author. The authors must send the proof of the article within three days. Articles that receive a negative review for a second review are not accepted. Corrected versions of articles and the author's response to the reviewer are sent to the editorial office. Articles that have positive reviews are submitted to the editorial boards of the journal for discussion and approval for publication.

**Periodicity of the journal:** 4 times a year.

**8. Payment.** Authors who have received a positive conclusion for publication should make payment on the following requisites (for ENU employees - 4,500 tenge, for outside organizations - 5,500 tenge):

Реквизиты:

РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК

АО "Банк ЦентрКредит"

БИК банка: КСЖВКЗКХ

ИИК: KZ978562203105747338

Кбе 16

Кшп 859- за статьи

РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК АО "Bank RBK"

Бик банка: KINCKZKA

ИИК: KZ498210439858161073

Кбе 16

Кшп 859 - за статьи

РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК АО "ForteBank"

БИК Банка: IRTYKZKA

ИИК: KZ599650000040502847

Кбе 16

Кшп 859 - за статьи

РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК

АО "НародныйБанкКазахстан"

БИК Банка: HSBKKZKX

ИИК: KZ946010111000382181

Кбе 16

Кшп 859.

Для сотрудников ЕНУ - 4500 тенге, для сторонних организаций - 5500 тенге

"За публикацию в Вестнике ЕНУ ФИО автора"



**Положение о рукописях, представляемых в журнал «Вестник Евразийского национального университета имени Л.Н.Гумилева. Серия: Химия. География. Экология»**

**1. Цель журнала.** Публикация тщательно отобранных оригинальных научных работ в области химии, географии, экологии.

**2.** Автору, желающему опубликовать статью в журнале необходимо представить рукопись в твердой копии (распечатанном варианте) в одном экземпляре, подписанном автором в Отдел научных изданий (по адресу: 010008, Казахстан, г.Астана, ул. Сатпаева, 2, Евразийский национальный университет им. Л.Н.Гумилева, Учебно-административный корпус, каб. 408) и по e-mail [vest\\_chem@enu.kz](mailto:vest_chem@enu.kz) в формате Tex, PDF и Word. При этом должно быть строго выдержано соответствие между Tex-файлом, Word-файлом, PDF-файлом и твердой копией. Автор А также автору(ам) необходимо предоставить сопроводительное письмо.

**Язык публикаций:** Казахский, русский, английский.

**3. Отправление статей в редакцию означает согласие авторов на право Издателя, Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева, издания статей в журнале и переиздания их на любом иностранном языке. Представляя текст работы для публикации в журнале, автор гарантирует правильность всех сведений о себе, отсутствие плагиата и других форм неправомерного заимствования в рукописи, надлежащее оформление всех заимствований текста, таблиц, схем, иллюстраций.**

**4.** Объем статьи не должен превышать 18 страниц (от 6 страниц).

**5. Схема построения статьи**

**ГРНТИ** <http://grnti.ru/>

**Инициалы и Фамилию автора(ов)**

**Полное наименование организации, город, страна** (если авторы работают в разных организациях, необходимо поставить одинаковый значок около фамилии автора и соответствующей организации)

**E-mail** автора(ов)

**Название статьи**

**Аннотация** (100-200 слов; не должна содержать формулы, по содержанию повторять название статьи; не должна содержать библиографические ссылки; должна отражать краткое содержание статьи, сохраняя структуру статьи – введение/ постановка задачи/ цели/ история, методы исследования, результаты/обсуждения, заключение/выводы).

**Ключевые слова** (6-8 слов/словосочетаний). Ключевые слова должны отражать основное содержание статьи, использовать термины из текста статьи, а также термины, определяющие предметную область и включающие другие важные понятия, позволяющие облегчить и расширить возможности нахождения статьи средствами информационно-поисковой системы).

**Основной текст статьи** должен содержать введение/ постановку задачи/ цели/ историю, методы исследования, результаты/обсуждение, заключение/выводы.

**Таблицы, рисунки** необходимо располагать после упоминания. С каждой иллюстрацией должна следовать надпись. Рисунки должны быть четкими, чистыми, несканированными.

В статье нумеруются лишь те **формулы**, на которые по тексту есть ссылки.

Все **аббревиатуры и сокращения**, за исключением заведомо общеизвестных, должны быть расшифрованы при первом употреблении в тексте.

Сведения о **финансовой поддержке** работы указываются на первой странице в виде сноски.

**Список литературы**

В тексте ссылки обозначаются в квадратных скобках. Ссылки должны быть пронумерованы строго по порядку упоминания в тексте. Первая ссылка в тексте на литературу должна иметь номер [1], вторая - [2] и т.д. Ссылка на книгу в основном тексте статьи должна сопровождаться указанием использованных страниц (например, [1, 45 стр.]). Ссылки на неопубликованные работы не допускаются. Нежелательны ссылки на нецензурируемые издания (примеры описания списка литературы, описания списка литературы на английском языке см. ниже в образце оформления статьи).

В конце статьи, после списка литературы, необходимо указать **библиографические данные** на русском и английском языках (если статья оформлена на казахском языке), на казахском и английском языках (если статья оформлена на русском языке) и на русском и казахском языках (если статья оформлена на английском языке).

**Сведения об авторах:** фамилия, имя, отчество, научная степен, должность, место работы, полный служебный адрес, телефон, e-mail – на казахском, русском и английском языках.

**6.** Рукопись должна быть **тщательно выверена**. Рукописи, не соответствующие техническим требованиям, будут возвращены на доработку. Возвращение на доработку не означает, что рукопись принята к опубликованию.

**7. Работа с электронной корректурой.** Статьи, поступившие в Отдел научных изданий (редакция), отправляются на анонимное рецензирование. Все рецензии по статье отправляются автору. Авторам в течение трех дней необходимо отправить корректуру статьи. Статьи, получившие отрицательную рецензию к повторному рассмотрению не принимаются. Исправленные варианты статей и ответ автора рецензенту присылаются в редакцию. Статьи, имеющие положительные рецензии, представляются редколлегии журнала для обсуждения и утверждения для публикации.

**Периодичность журнала:** 4 раза в год.

**8.Оплата.** Авторам, получившим положительное заключение к опубликованию необходимо произвести оплату по следующим реквизитам (для сотрудников ЕНУ – 4500 тенге, для сторонних организаций – 5500 тенге):

Реквизиты:

РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК

АО "Банк ЦентрКредит"

БИК банка: КСЖВКЗКХ

ИИК: KZ978562203105747338

Кбе 16

Кпн 859- за статьи

РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК

АО "Bank RBK"

Бик банка: KINCKZKA

ИИК: KZ498210439858161073

Кбе 16

Кпн 859 - за статьи

РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК

АО "ForteBank"

БИК Банка: IRTYKZKAИИК: KZ599650000040502847

Кбе 16

Кпн 859 - за статьи

РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК

АО "НародныйБанкКазахстан"

БИК Банка: HSBKKZKX

ИИК: KZ946010111000382181

Кбе 16

Кпн 859.

Для сотрудников ЕНУ - 4500 тенге, для сторонних организаций - 5500 тенге

"За публикацию в Вестнике ЕНУ ФИО автора"

## Мақаланы рәсімдеу үлгісі

МРНТИ 27.25.19

А.Ж. Жубанышева<sup>1</sup>, Н. Темиргалиев<sup>2</sup>, А.Б. Утесов<sup>3</sup>

<sup>2</sup> Институт теоретической математики и научных вычислений Евразийского национального университета имени Л.Н.Гумилева, Астана, Казахстан

<sup>3</sup> Актюбинский региональный государственный университет имени К. Жубанова,

<sup>1</sup> Актюбе, Казахстан

(Email: <sup>1</sup> axaulezh@mail.ru, <sup>2</sup> ntmath10@mail.ru, <sup>3</sup> adilzhan\_71@mail.ru)

### Численное дифференцирование функций в контексте Компьютерного (вычислительного) перечника

**Аннотация** В рамках компьютерного (вычислительного) перечника полностью решена задача приближенного дифференцирования функций, принадлежащих классам Соболева по неточной информации, полученной от произвольного конечного множества тригонометрических коэффициентов Фурье-Лебега дифференцируемой функции... [100-200 слов]

**Ключевые слова** приближенное дифференцирование, восстановление по неточной информации, предельная погрешность, компьютерный (вычислительный) перечник. [6-8 слов/словосочетаний]

#### Введение

Текст введения...

Авторам не следует использовать нестандартные пакеты LaTeX (используйте их лишь в случае крайней необходимости)

#### 2. Заголовок секции

Окружения.

**Теорема 1.** ...

**Лемма 1.** ...

**Предложение 1.** ...

**Определение 1.** ...

**Следствие 1.** ...

**Замечание 1.** ...

**Теорема 2** (Темиргалиев Н. [2]). *Текст теоремы.*

**Доказательство.** Текст доказательства.

#### 2. Формулы, таблицы, рисунки

$$\delta_N(\varepsilon_N; D_N)_Y \equiv \delta_N(\varepsilon_N; T; F; D_N)_Y \equiv \inf_{(l^{(N)}, \varphi_N) \in D_N} \delta_N\left(\varepsilon_N; \left(l^{(N)}, \varphi_N\right)\right)_Y, \quad (1)$$

где  $\delta_N(\varepsilon_N; (l^{(N)}, \varphi_N))_Y \equiv \delta_N(\varepsilon_N; T; F; (l^{(N)}, \varphi_N))_Y \equiv$

$$\equiv \sup_{\substack{f \in F \\ |\gamma_N^{(\tau)}| \leq 1 (\tau=1, \dots, N)}} \left\| Tf(\cdot) - \varphi_N \left( l_N^{(1)}(f) + \gamma_N^{(1)} \varepsilon_N^{(1)}, \dots, l_N^{(N)}(f) + \gamma_N^{(N)} \varepsilon_N^{(N)}; \cdot \right) \right\|_Y.$$

Таблицы, рисунки необходимо располагать после упоминания. С каждой иллюстрацией должна следовать надпись.

#### 3. Ссылки и библиография

Для ссылок на утверждения, формулы и т. п. можно использовать метки. Например, теорема 2, Формула (1)

Таблица 1 – Название таблицы

Простые	Не простые
2, 3, 5, 7, 11, 13, 17, 19, 23, 29	4, 6, 8, 9, 10, 12, 14



Рисунок 1 – Название рисунка

Для руководства по  $\LaTeX$  и в качестве примера оформления ссылок, см., например, *Львовский С.М.* Набор и верстка в пакете  $\LaTeX$ . Москва: Космосинформ, 1994.  
Список литературы оформляется следующим образом.

### Список литературы

- 1 Локуциевский О.М., Гавриков М.Б. Начала численного анализа. –М.: ТОО "Янус", 1995. –581 с. - **книга**
- 2 Темиргалиев Н. Компьютерный (вычислительный) поперечник как синтез известного и нового в численном анализе // Вестник Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева –2014. –Т.4. №101. –С. 16-33. doi: ... (при наличии) - **статья**
- 3 Жубанышева А.Ж., Абикенова Ш. О нормах производных функций с нулевыми значениями заданного набора линейных функционалов и их применения к поперечниковым задачам // Функциональные пространства и теория приближения функций: Тезисы докладов Международной конференции, посвященная 110-летию со дня рождения академика С.М.Никольского, Москва, Россия, 2015. – Москва, 2015. –С.141-142. - **труды конференций**
- 4 Курмуков А.А. Ангиопротекторная и гипополипидемическая активность леукомизина. –Алматы: Бастау, 2007. –С. 3-5 - **газетные статьи**
- 5 Кыров В.А., Михайличенко Г.Г. Аналитический метод вложения симплектической геометрии // Сибирские электронные математические известия –2017. –Т.14. –С.657-672. doi: 10.17377/semi.2017.14.057. – URL: <http://semr.math.nsc.ru/v14/p657-672.pdf>. (дата обращения: 08.01.2017). - **электронный журнал**

А.Ж. Жұбанышева<sup>1</sup>, Н. Теміргалиев<sup>1</sup>, А.Б. Утесов<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің теориялық математика және ғылыми есептеулер институты, Астана, Қазақстан

<sup>2</sup> Қ.Жұбанов атындағы. Ақтөбе өңірлік мемлекеттік университеті, Ақтөбе, Қазақстан

**Компьютерлік (есептеуіш) диаметр мәнмәтінінде функцияларды сандық дифференциалдау**

**Аннотация:** Компьютерлік (есептеуіш) диаметр мәнмәтінінде Соболев класында жататын функцияларды олардың тригонометриялық Фурье-Лебега коэффициенттерінің ақырлы жиынынан алынған дәл емес ақпарат бойынша жуықтау есебі толығымен шешілді [100-200 сөздер].

**Түйін сөздер:** жуықтап дифференциалдау, дәл емес ақпарат бойынша жуықтау, шектік қателік, Компьютерлік (есептеуіш) диаметр [6-8 сөз/сөз тіркестері].

A.Zh.Zhubanysheva<sup>1</sup>, N. Temirgaliyev<sup>1</sup>, A.B. Utesov<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Institute of theoretical mathematics and scientific computations of L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

<sup>2</sup> K.Zhubanov Aktobe Regional State University, Aktobe, Kazakhstan

**Numerical differentiation of functions in the context of Computational (numerical) diameter**

**Abstract:** The computational (numerical) diameter is used to completely solve the problem of approximate differentiation of a function given inexact information in the form of an arbitrary finite set of trigonometric Fourier coefficients. [100-200 words]

**Keywords:** approximate differentiation, recovery from inexact information, limiting error, computational (numerical) diameter, massive limiting error. [6-8 words/word combinations]

## References

- 1 Lokucievskij O.M., Gavrikov M.B. Nachala chislenogo analiza [Elements of numerical analysis] (Yanus, Moscow, 1995). [in Russian]
- 2 Temirgaliyev N. Komp'yuternyj (vychislitel'nyj) poperechnik kak sintez izvestnogo i novogo v chislenom analize [Computational (numerical) diameter as a synthesis of the known and the new in numerical analysis], Vestnik Evrazijskogo nacional'nogo universiteta imeni L.N. Gumileva [Bulletin of L.N. Gumilyov Eurasian National University], 4 (101), 16-33 (2014). [in Russian]
- 3 Zhubanysheva A.Zh., AbikenovaSh.K. O normah proizvodnyh funkcionov s nulevymi znachenijami zadannogo nabora linejnyh funkcionalov i ih primenenija k poperechnikovym zadacham [About the norms of the derivatives of functions with zero values of a given set of linear functionals and their application to the width problems]. Tezisy dokladov Mezhdunarodnoj konferencii, posvjashhennaja 110-letiju so dnja rozhdenija akademika S.M.Nikol'skogo "Funkcional'nye prostranstva i teorija priblizhenija funkcionov" [International conference on Function Spaces and Approximation Theory dedicated to the 110th anniversary of S. M. Nikol'skii]. Moscow, 2015, pp. 141-142. [in Russian]
- 4 Kurmukov A. A. Angioprotekturnaja i gipolipidemicheskaja aktivnost' leukomizina [Angioprotective and lipid-lowering activity of leukomycin] (Bastau, Almaty, 2007, P. 3-5). [in Russian]
- 5 Kyrov V.A., Mihajlichenko G.G. Analiticheskij metod vložhenija simplekticheskoj geometrii [The analytic method of embedding symplectic geometry], Sibirskie jelektronnye matematicheskie izvestija [Siberian Electronic Mathematical Reports], 14, 657-672 (2017). doi: 10.17377/semi.2017.14.057. Available at: <http://semr.math.nsc.ru/v14/p657-672.pdf>. [in Russian]. (accessed 08.01.2017).

### Сведения об авторах:

*Жубангышева А.Ж.* - Старший научный сотрудник Института теоретической математики и научных вычислений, Евразийский национальный университет имени Л.Н.Гумилева, ул. Сәтапаева 2, Астана, Казахстан.

*Теміргалиев Н.* - Директор Института теоретической математики и научных вычислений, Евразийский национальный университет имени Л.Н.Гумилева, ул. Сәтапаева 2, Астана, Казахстан.

*Утесов А.Б.* - кандидат физико-математических наук, доцент кафедры Математики, Актобинский региональный государственный университет имени К. Жубанова, пр. А.Молдагуловой 34, Актобе, Казахстан.

*Zhubanysheva A.Zh.* - Senior researcher of the Institute of theoretical mathematics and scientific computations, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Satpayev str., Astana, Kazakhstan.

*Temirgaliyev N.* - Head of the Institute of theoretical mathematics and scientific computations, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Satpayev str., Astana, Kazakhstan.

*Utesov A.B.* - candidate of physical and mathematical sciences, Associate Professor of the Department of Mathematics, K.Zhubanov Aktobe Regional State University, A.Moldagulova Prospect, 34, Aktobe, Kazakhstan.

*Поступила в редакцию 15.05.2017*

Редакторы: К. М. Джаналеева

Шығарушы редактор, дизайн А. Нұрболат

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің  
Хабаршысы. Химия. География. Экология сериясы.  
№1(126)/2018 - Астана: ЕҰУ. 109-б.  
Шартты б.т. - 12,12. Таралымы - 25 дана.  
Мазмұнына типография жауап бермейді

Редакция мекен-жайы: 010008, Астана қ.,  
Сәтпаев көшесі, 13.  
Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті  
Тел.: (8-717-2) 70-95-42(ішкі)31-428

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің баспасында басылды