

ISSN 2518-1726 (Online),
ISSN 1991-346X (Print)

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ
ҰЛТТЫҚ ҒЫЛЫМ АКАДЕМИЯСЫНЫҢ

Х А Б А Р Л А Р Ы

ИЗВЕСТИЯ

НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК
РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН

NEWS

OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES
OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN

**ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА
СЕРИЯСЫ**



СЕРИЯ

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКАЯ



**PHYSICO-MATHEMATICAL
SERIES**

3 (313)

МАМЫР – МАУСЫМ 2017 Ж.

МАЙ – ИЮНЬ 2017 г.

MAY – JUNE 2017

1963 ЖЫЛДЫҢ ҚАҢТАР АЙЫНАН ШЫҒА БАСТАҒАН
ИЗДАЕТСЯ С ЯНВАРЯ 1963 ГОДА
PUBLISHED SINCE JANUARY 1963

ЖЫЛЫНА 6 РЕТ ШЫҒАДЫ
ВЫХОДИТ 6 РАЗ В ГОД
PUBLISHED 6 TIMES A YEAR

АЛМАТЫ, ҚР ҰҒА
АЛМАТЫ, НАН РК
ALMATY, NAS RK

Б а с р е д а к т о р ы
ф.-м.ғ.д., проф., ҚР ҰҒА академигі **Ғ.М. Мұтанов**

Р е д а к ц и я а л қ а с ы:

Жұмаділдаев А.С. проф., академик (Қазақстан)
Кальменов Т.Ш. проф., академик (Қазақстан)
Жантаев Ж.Ш. проф., корр.-мүшесі (Қазақстан)
Өмірбаев У.У. проф. корр.-мүшесі (Қазақстан)
Жүсіпов М.А. проф. (Қазақстан)
Жұмабаев Д.С. проф. (Қазақстан)
Асанова А.Т. проф. (Қазақстан)
Бошқаев К.А. PhD докторы (Қазақстан)
Сұраған Д. PhD докторы (Қазақстан)
Quevedo Hernando проф. (Мексика),
Джунушалиев В.Д. проф. (Қырғыстан)
Вишневский И.Н. проф., академик (Украина)
Ковалев А.М. проф., академик (Украина)
Михалевич А.А. проф., академик (Белорус)
Пашаев А. проф., академик (Әзірбайжан)
Такибаев Н.Ж. проф., академик (Қазақстан), бас ред. орынбасары
Тигиняну И. проф., академик (Молдова)

«ҚР ҰҒА Хабарлары. Физика-математикалық сериясы».

ISSN 2518-1726 (Online), ISSN 1991-346X (Print)

Меншіктенуші: «Қазақстан Республикасының Ұлттық ғылым академиясы» РҚБ (Алматы қ.)
Қазақстан республикасының Мәдениет пен ақпарат министрлігінің Ақпарат және мұрағат комитетінде
01.06.2006 ж. берілген №5543-Ж мерзімдік басылым тіркеуіне қойылу туралы куәлік

Мерзімділігі: жылына 6 рет.
Тиражы: 300 дана.

Редакцияның мекенжайы: 050010, Алматы қ., Шевченко көш., 28, 219 бөл., 220, тел.: 272-13-19, 272-13-18,
www.nauka-nanrk.kz / physics-mathematics.kz

© Қазақстан Республикасының Ұлттық ғылым академиясы, 2017

Типографияның мекенжайы: «Аруна» ЖК, Алматы қ., Муратбаева көш., 75.

Главный редактор
д.ф.-м.н., проф. академик НАН РК **Г.М. Мутанов**

Редакционная коллегия:

Джумадильдаев А.С. проф., академик (Казахстан)
Кальменов Т.Ш. проф., академик (Казахстан)
Жантаев Ж.Ш. проф., чл.-корр. (Казахстан)
Умирбаев У.У. проф. чл.-корр. (Казахстан)
Жусупов М.А. проф. (Казахстан)
Джумабаев Д.С. проф. (Казахстан)
Асанова А.Т. проф. (Казахстан)
Бошкаев К.А. доктор PhD (Казахстан)
Сураган Д. доктор PhD (Казахстан)
Quevedo Hernando проф. (Мексика),
Джунушалиев В.Д. проф. (Кыргызстан)
Вишневский И.Н. проф., академик (Украина)
Ковалев А.М. проф., академик (Украина)
Михалевич А.А. проф., академик (Беларусь)
Пашаев А. проф., академик (Азербайджан)
Такибаев Н.Ж. проф., академик (Казахстан), зам. гл. ред.
Тигиняну И. проф., академик (Молдова)

«Известия НАН РК. Серия физико-математическая».

ISSN 2518-1726 (Online), ISSN 1991-346X (Print)

Собственник: РОО «Национальная академия наук Республики Казахстан» (г. Алматы)

Свидетельство о постановке на учет периодического печатного издания в Комитете информации и архивов
Министерства культуры и информации Республики Казахстан №5543-Ж, выданное 01.06.2006 г.

Периодичность: 6 раз в год.

Тираж: 300 экземпляров.

Адрес редакции: 050010, г. Алматы, ул. Шевченко, 28, ком. 219, 220, тел.: 272-13-19, 272-13-18,
www.nauka-nanrk.kz / physics-mathematics.kz

© Национальная академия наук Республики Казахстан, 2017

Адрес типографии: ИП «Аруна», г. Алматы, ул. Муратбаева, 75.

E d i t o r i n c h i e f
doctor of physics and mathematics, professor, academician of NAS RK **G.M. Mutanov**

E d i t o r i a l b o a r d:

Dzhumadildayev A.S. prof., academician (Kazakhstan)
Kalmenov T.Sh. prof., academician (Kazakhstan)
Zhantayev Zh.Sh. prof., corr. member. (Kazakhstan)
Umirbayev U.U. prof. corr. member. (Kazakhstan)
Zhusupov M.A. prof. (Kazakhstan)
Dzhumabayev D.S. prof. (Kazakhstan)
Asanova A.T. prof. (Kazakhstan)
Boshkayev K.A. PhD (Kazakhstan)
Suragan D. PhD (Kazakhstan)
Quevedo Hernando prof. (Mexico),
Dzhunushaliyev V.D. prof. (Kyrgyzstan)
Vishnevskiy I.N. prof., academician (Ukraine)
Kovalev A.M. prof., academician (Ukraine)
Mikhalevich A.A. prof., academician (Belarus)
Pashayev A. prof., academician (Azerbaijan)
Takibayev N.Zh. prof., academician (Kazakhstan), deputy editor in chief.
Tiginyanu I. prof., academician (Moldova)

News of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan. Physical-mathematical series.

ISSN 2518-1726 (Online), ISSN 1991-346X (Print)

Owner: RPA "National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan" (Almaty)

The certificate of registration of a periodic printed publication in the Committee of information and archives of the Ministry of culture and information of the Republic of Kazakhstan N 5543-Ж, issued 01.06.2006

Periodicity: 6 times a year

Circulation: 300 copies

Editorial address: 28, Shevchenko str., of. 219, 220, Almaty, 050010, tel. 272-13-19, 272-13-18,
www.nauka-nanrk.kz/physics-mathematics.kz

© National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan, 2017

Address of printing house: ST "Aruna", 75, Muratbayev str, Almaty

NEWS

OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN

PHYSICO-MATHEMATICAL SERIES

ISSN 1991-346X

Volume 3, Number 313 (2017), 5 – 9

UDC 548.735+548.31+577.112.387.2+ 577.112.37+661.8...35

S.B. Berdibay^{1,2,*}, N.A. Paretskaya², A.N. Sabitov², R.A. Islamov²,
R.A. Tamazyan³, S.Zh. Tokmoldin¹, A.I. Ilin², K.S. Martirosyan⁴

¹K.I. Satpayev Kazakh National Research Technical University, Almaty, Kazakhstan;

²Scientific Center for Anti-Infectious Drugs, Almaty, Kazakhstan;

³The foundation “Research Center for Advanced Technologies”, Yerevan, Armenia;

⁴The University of Texas Rio Grande Valley, Texas, USA

*E-mail: sniper_8888@mail.ru

PHENYLALANINE – IODINE COMPLEX AND ITS STRUCTURE

Abstract. This report describes synthesis and structural characterization of the phenylalanine-iodine complex monocrystal in acetone. Crystals of the substance exhibited a rhombic syngony and were stable at a temperature of 25 °C. As a result, a new compound α,α' -di-amino- β,β' -diphenylpropionic acid monoiodide has been obtained. X-ray diffraction analysis showed that dimers of phenylalanine molecules ($C_{18}H_{23}N_2O_4$) are formed due to hydrogen bonds between the oxygen atoms of carboxyl groups. The hydrogen bonds between the amino groups and iodide form the layers parallel to the (001) plane and these molecular layers are bound to a three-dimensional structure via the van der Waals forces.

Keywords: Phenylalanine, iodine, halogen, hydrogen bonds, amino acid complex with iodine.

Introduction

Iodine, in comparison with other halogens - fluorine, chlorine and bromine, has a number of distinctive properties. First of all, the interatomic distance in the iodine molecule in the solid state is greater than in the gaseous state. This is not observed in either chlorine or bromine. Due to the large size of the iodide anion, the iodide has a small surface charge density, as a result of which the charge distribution can be distorted by the action of certain cations (Li^+ , Mg^{2+} , Fe^{3+} , etc.) and can no longer be regarded as spherically symmetric [1]. In comparison with chlorine and bromine, high iodine polarizability along with low electronegativity makes it possible to form various compounds like charge transfer, donor-acceptor interaction, hydrophobic interaction, hydrogen and halogen bonds [2,3]. These properties of iodine enable to develop a variety of substances and materials, for example, drugs [2], superconductors [4], nonlinear optical crystals [5]. Iodine forms complex compounds with organic substances and interhalogen compounds, including polyiodides [6-9]. Of particular interest are the compounds of iodine with amino acids [10]. The aim of the study was a synthesis of a complex of phenylalanine and iodine and determination its structure by X-ray diffraction analysis.

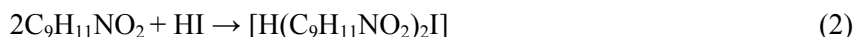
Experimental part

Synthesis of the phenylalanine-iodine complex. Acetone (Sigma, USA) and iodine (Reachim, Russia) were mixed in a molar ratio of 34:1 at a temperature of 60-65°C to produce hydrogen iodide:



Then phenylalanine was added and acetone was slowly evaporated. As the acetone evaporates, crystals of black color form for a long time. The obtained crystals had a rhombic syngony and were stable

at a temperature of 25°C. The chemical formula of this compound can be represented as: $2C_9H_{11}NO_2 \cdot HI$, and the formation reaction:



X-ray diffraction analysis (XRD). A single-crystal needle-shaped sample of 0.02 x 0.08 x 0.28 mm in size was placed in a glass capillary and fixed with a glass rod. To prevent the destruction of crystals under the influence of heat and X-rays, diffraction measurements were carried out at low temperatures. Low temperatures on the samples were maintained by a low temperature prefix of the "Enraf-Nonius" firm in pairs of nitrogen with an accuracy of $\pm 1^\circ C$. Diffraction measurements were carried out at room temperature on an Enraf-Nonius CAD-4 auto-diffractometer (graphite monochromator, Mo- K_α radiation, $\theta/2\theta$ - scanning). The parameters of the rhombic cell are determined and refined by 24 reflections with $12 < \theta < 13$. The absorption was accounted for using the psi-scan method [11]. The structure is deciphered by the direct method. The coordinates of all hydrogen atoms are determined by geometric calculations. The structure is defined by the completely matrix OLS in the anisotropic approximation for non-hydrogen atoms and isotropic for hydrogen atoms. The coordinates of the hydrogen atoms of the NH_3 and OH groups are refined freely, and the coordinates of the remaining hydrogen atoms are refined by the "rider" model with the following conditions: the length of the bonds is C-H=0.98Å, 0.97Å, 0.93Å and $U_{iso}(H)=1.5U_{eq}(C)$ for CH, CH_2 and phenyl groups, respectively. All structural calculations were carried out using the SHELXTL program complex [12].

The main crystallographic data and experimental parameters are given in Table 1, and the full crystallographic information of the investigated compound was deposited at the Cambridge structural data bank under the number CCDC 1036670.

Table 1 - Crystallographic data of the complex $2(C_9H_{11}NO_2) \cdot HI$

Formula	$2(C_9H_{11}NO_2) \cdot HI$
Molecular weight	458.28
Singonia; Spatial group	Rhombic; $P2_12_12_1$
Lattice parameters a, b, c [Å]	5.3059(11); 12.265(3); 29.585(6)
alpha, beta, gamma [deg]	90.0; 90.0; 90.0
V [Å] ³ ; Z	1925.3(7); 4
D(calc)[g/cm ³]; F(000)	1.581; 920
Mu(MoKa) [mm ⁻¹]	1.687
Dimensions of the crystal [mm]	0.02 x 0.08 x 0.28
Измерения	
Temperature (K); Radiation [Å]	200; MoKa; $\lambda=0.71073$
$\theta_{min}; \theta_{max}$ [Deg]	1.4, 30.0
Measurement area	0: 7; -17: 17; 0: 41
Number of reflexes changed, independent, R(int)	6498, 5612, 0.048
Observed reflexes [$I > 2.0 \sigma(I)$]	3154
Refinement	
Number of reflexes, Number of parameters	5612, 247
R, wR ² , S	0.0616, 0.1304, 0.81
Max. and Av. Shift/Error	0.00, 0.00
Flack x	0.00(4)
Min. and Max. Resd. Dens. [e/Å ³]	-0.69, 0.85

Results and discussion

The structure of the complex $2(C_9H_{11}NO_2) \cdot HI$, determined by X-ray diffraction analysis, is shown in Fig. 1. The independent part of the unit cell contains two molecules of phenylalanine ($C_9H_{11}NO_2$), and one anion I⁻.

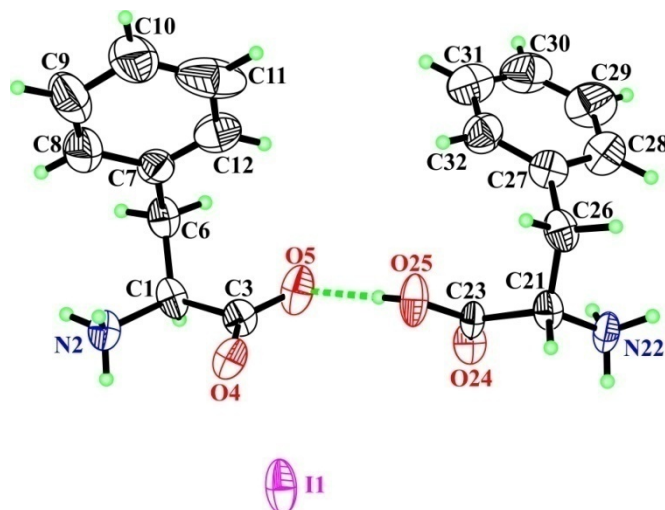


Figure 1 - Atomic model of the structure of $C_{18}H_{23}N_2O_4I$
(ellipsoids of anisotropic thermal oscillations are drawn at the level of 50% probability)

Herewith, two molecules of phenylalanine are bound by the hydrogen bond $O25-H25 \cdots O5$ (Table 2) to form a dimer ($C_{18}H_{23}N_2O_4$) (Figure 1).

Table 2 - Hydrogen bonds in structure $2(C_9H_{11}NO_2) \cdot HI$

D	H	A	D-H	H-A	D-A	D-H-A
N2	H2A	O24	0.92(4)	1.87(4)	2.778(7)	168(5)
N2	H2B	I1	0.92(7)	2.81(8)	3.642(6)	151(7)
N2	H2C	I1	0.92(8)	2.79(8)	3.575(6)	144(8)
N22	H22B	O4	0.93(4)	1.83(4)	2.760(7)	173(3)
N22	H22A	I1	0.93(8)	2.77(8)	3.602(6)	149(7)
N22	H22C	I1	0.93(6)	2.75(8)	3.616(6)	158(7)
O25	H25	O5	0.88(9)	1.66(9)	2.423(6)	144(8)

In the three-dimensional packaging of the crystal structure, the dimers ($C_{18}H_{23}N_2O_4$) form an infinite two-dimensional layer parallel to the plane (001) due to the hydrogen bonds between the amino groups and iodide (Figure 2). In the three-dimensional construction of the crystal structure, the interaction between the layers is mainly described by van der Waals forces.

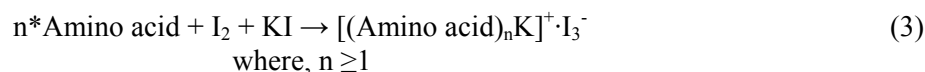
Thus, in the reaction of iodine with phenylalanine in acetone, a complex α, α' -di-amino- β, β' -diphenylpropionic acid monoiodide is formed. Iodine atoms are the acceptors of the hydrogen bond formed with amino groups of phenylalanines of the type:



where, $X = F, Cl, Br$ и I

The average and normalized length of the hydrogen bond $H \cdots X^-$ is 0.83 and, being less than the mean value 0.873 [13], calculated from known structures, indicates a strong hydrogen bond.

The obtained complex differs from other coordination compounds of iodine with amino acids [10] or other biologically active substances [14] with charge transfer by type:



Iodide promotes the dimerization of phenylalanines, initiating the formation of the hydrogen bond between pairs of amino acid molecules. As it is known, multidimensional structures, formed by hydrogen bonds between biological molecules, play an important role - from metabolic transformations to the realization of genetic information encoded in DNA [15, 16]. The role of halogen ions in the stabilization of the action of the reactive center of enzymes is great. For example, the chlorine anion activates the α -

amylase of animals and certain bacteria by forming the hydrogen bond with the amino group of arginine [17]. Similarly, chloride affects cathepsin C [18]. Therefore, interest in halogens as acceptors of the hydrogen bond is very high.

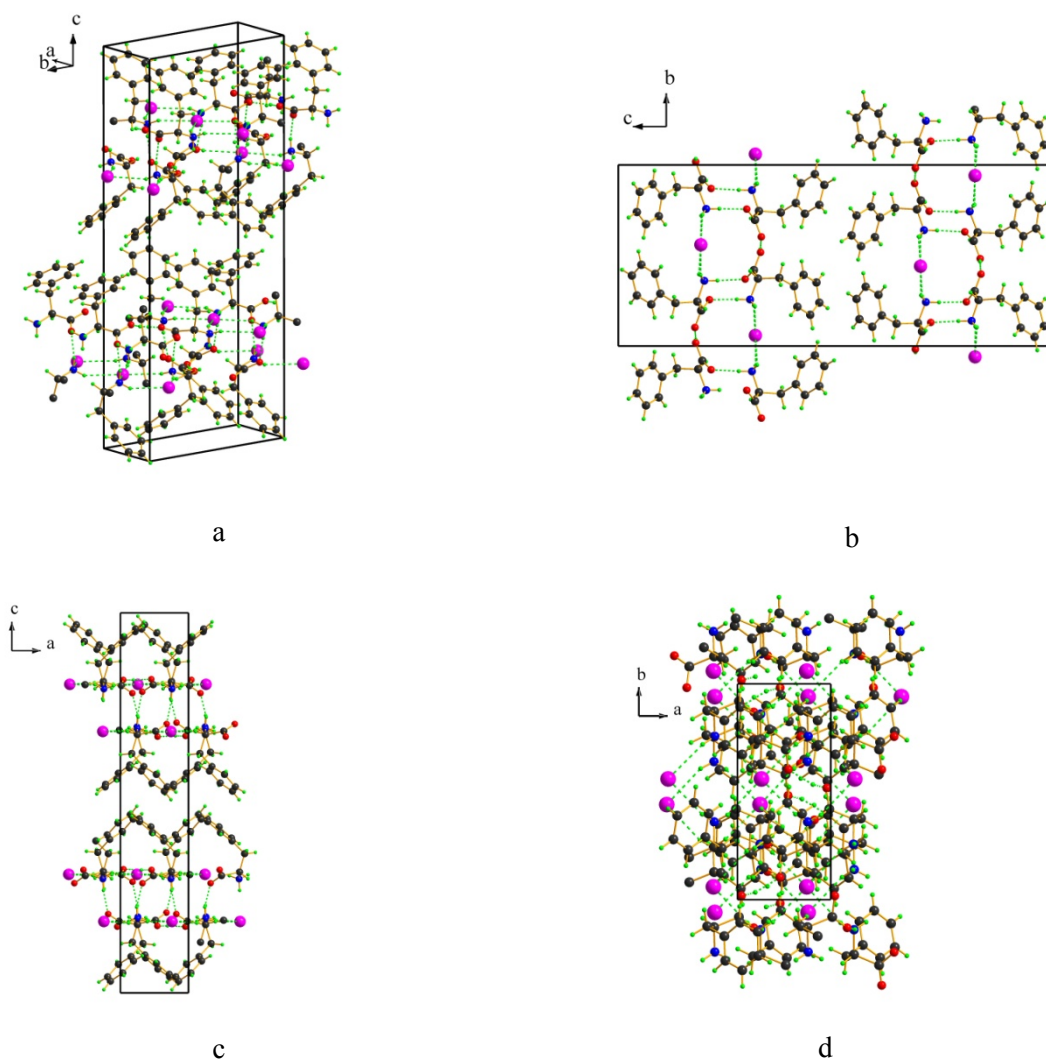


Figure 2 - Crystalline structure $C_{18}H_{23}N_2O_4I$, iodine atoms of magenta colour, carbon - gray, nitrogen - blue, oxygen - red and hydrogen - green, hydrogen bonds are shown in green broken lines: (a) - a perspective view of the structure; (b) - the projection of the structure on (100); (c) - the projection of the structure on (010); (d) - the projection of the structure on (001)

REFERENCES

- [1] Hauskroft K, Konstel J. (2002) *Sovremennyy kurs obshchey himii*. Mir, Rossija. ISBN 5-03-003310-6. (In Russian)
- [2] Küpper FC, Feiters MC, Olofsson B, Kaiho T, Yanagida S, Zimmermann MB, Carpenter LJ, Luther GW 3rd, Lu Z, Jonsson M, Kloo L. (2011) Commemorating two centuries of iodine research: an interdisciplinary overview of current research, *Angew Chem Int Ed Engl*, 50:11598-11620. DOI: 10.1002/anie.201100028
- [3] Bartashevich EV, Cirel'son VG. (2014) *Vzaimnoe vliyanie nekovalentnykh vzaimodejstvij v kompleksah i kristallah s galogennymi svjazjami*, *Uspehi himii*, 83:1181-1203. DOI: 10/RCR4440. (In Russian)
- [4] Mihalache V, Aldica GV, Miu D. (2007) Superconducting properties of iodine-intercalated $Bi_2Sr_2Ca_2Cu_3O_{10+x}$, *J Supercond Nov Magn*, 20:261-272. DOI: 10.1007/s10948-006-0199-y
- [5] Yin Z, Wang QX, Zeng MH. (2012) Iodine release and recovery influence of polyiodide anions on electrical conductivity and nonlinear optical activity in an interdigitated and interpenetrated bipillared-bilayer metal-organic framework, *J Am Chem Soc*, 134:4857-4863. DOI: 10.1021/ja211381e
- [6] Refat MS, Al Didamony H, Abou El-Nour KM, El-Zayat L. (2010) Synthesis and spectroscopic characterization on the tri-iodide charge transfer complex resulted from the interaction between morpholine as donor and iodine sigma-acceptor, *J Saudi Chem Soc*, 14:232-330. DOI: 10.1016/j.jscs.2010.04.004
- [7] Blake AJ, Li WS, Lippolis V, Parsons S, Schröder M. (2007) Extended structures of polyiodide salts of transition metal macrocyclic complexes, *Acta Crystallogr B*, 63:81-92. DOI: 10.1107/S0108768106041668

- [8] Walbaum C, Pantenburg I, Junk P, Deacon GB, Meyer G. (2010) Bulky Cations and Four different Polyiodide Anions in [Lu(Db18c6)(H₂O)₃(thf)₆]₄(I₃)₂(I₅)₆(I₈)(I₁₂), *Z Anorg Allg Chem*, 636:1444-1446. DOI: 10.1002/zaac.201000112
- [9] Madhu S, Evans HA, Doan-Nguyen VV, Labram JG, Wu G, Chabinye ML, Seshadri R, Wudl F. (2016) Infinite polyiodide chains in the pyrroloperylene-iodine complex: insights into the starch-iodine and perylene-iodine complexes, *Angew Chem Int Ed Engl*, 55:8032-8035. DOI: 10.1002/anie.201601585
- [10] Mahmoud KR, Refat MS, Sharshar T, Adam MA, Manaaa El-SA. (2016) Synthesis of amino acid iodine charge transfer complexes in situ methanolic medium: Chemical and physical investigations, *J Mol Liq*, 222:1061-1067. DOI: 10.1016/j.molliq.2016.07.138
- [11] North ACT, Phillips DC, Mathews FS. (1968) *Acta Cryst*, A24:351-359.
- [12] Sheldrick GM. (2008) All programs beginning with SHELX, *Acta Cryst*, A64:112-122
- [13] Brammer L, Bruton EA, Sherwood P. (2001) Understanding the behavior of halogens as hydrogen bond acceptors, *Crystal Growth & Design*, 1:277-290. DOI: 10.1021/cg015522k
- [14] Solanki GK, Amin A, Padhiyar A, Ray AK, Oza AT. (2008) Polaron hopping in some biomolecular solids and their charge transfer complexes, *Indian J Biochem Biophys*, 45:421-429
- [15] Bissantz C, Kuhn B, Stahl M. (2010) A Medicinal Chemist's Guide to Molecular Interactions, *J Med Chem*, 53:5061-5084. DOI: 10.1021/jm100112j
- [16] Scholfield MR, Zanden CMV, Carter M, Ho PS. (2013) Halogen bonding (X-bonding): A biological perspective, *Protein Sci*, 22:139-152. DOI: 10.1002/pro.2201
- [17] Aghajari N, Feller G, Gerday C, Haser R. (2002) Structural basis of α -amylase activation by chloride, *Protein Sci*, 11:1435-1441. DOI: 10.1110/ps.0202602
- [18] Cigic B, Pain RH. (1999) Location of the binding site for chloride ion activation of cathepsin C, *Eur J Biochem*, 264:944-951

ӨОЖ: 548.735+548.31+577.112.387.2+ 577.112.37+661.8...35

С.Б. Бердібай^{1,2}, Н.А. Парецкая², А.Н. Сабитов², Р.А. Исламов²,
Р.А. Тамазян³, С.Ж. Токмолдин¹, А.И. Ильин², К.С. Мартиросян⁴

¹Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ Ұлттық техникалық зерттеу университеті, Алматы қ., Қазақстан;

²Инфекцияға қарсы препараттар ғылыми орталығы, Алматы қ., Қазақстан;

³Перспективалық технологиялар зерттеу орталығы фонды, Ереван қ., Армения;

⁴The University of Texas Rio Grande Valley, Texas, USA

ИОД ЖӘНЕ ОНЫҢ ҚҰРЫЛЫМЫМЕН ФЕНИЛАЛАЛИННІҢ КЕШЕНДІ КОМПЛЕКСІ

Аннотация. Мақалада ацетонда фенилаланин-иод кешенінің монокристаллды алу және синтезі сипатталады. Заттың кристаллы ромбылық сингониясы болды және 25 °С температурада тұрақты болды. Нәтижесінде α, α' -ди-амино- β, β' -моноиодид дифенилпропионды қышқылының жаңа қосылысы алынды. Рентгендік құрылымдық зерттеулерімен фенилаланиннің молекула диметрлері (C₁₈H₂₃N₂O₄) карбоксил топтарының оттегі атомдар арасындағы сутектік байланыс салдарынан пайда болатынын көрсетті. Амин топтары мен иодид арасындағы сутектік байланыс параллель жазықтық қатпары пайда болып, осы молекулалар қатпарлары Ван-дер-Ваальс арқылы үш өлшемді құрылысын байланыстырады.

Түйін сөздер: фенилаланин, иод, галоген, сутектік байланыстар, иодпен амин қышқылы кешені.

УДК 548.735+548.31+577.112.387.2+ 577.112.37+661.8...35

С.Б. Бердібай^{1,2,*}, Н.А. Парецкая², А.Н. Сабитов², Р.А. Исламов²,
Р.А. Тамазян³, С.Ж. Токмолдин¹, А.И. Ильин², К.С. Мартиросян⁴

¹Казахский национальный исследовательский технический университет им. К.И. Сәтбаева, Алматы, Казахстан;

²Научный центр противоинфекционных препаратов, Алматы, Казахстан;

³Фонд «Центр исследования перспективных технологий», Ереван, Армения;

⁴The University of Texas Rio Grande Valley, USA

КОМПЛЕКС ФЕНИЛАЛАНИНА С ИОДОМ И ЕГО СТРУКТУРА

Аннотация. В статье описывается синтез и структурный анализ монокристалла комплекса фенилаланин-иод в ацетоне. Кристаллы вещества имели ромбическую сингонию и были стабильны при температуре 25 °С. В результате получено новое соединение α, α' -ди-амино- β, β' -дифенилпропионой кислоты моноиодид. Рентгенструктурными исследованиями показано, что димеры молекулы фенилаланина (C₁₈H₂₃N₂O₄) образуются за счёт водородных связей между атомами кислорода карбоксильных групп. Водородные связи между аминогруппами и иодидом образуют слою параллельно плоскости (001) и эти слою молекул связываются в трехмерную постройку силами Ван-дер-Ваальса.

Ключевые слова. Фенилаланин, иод, галоген, водородные связи, комплекс аминокислоты с иодом.

МАЗМУНЫ

<i>Бердібай С.Б., Парецкая Н.А., Сабитов А.Н., Исламов Р.А., Тамазян Р.А., Токмолдин С.Ж., Ильин А.И., Мартиросян К.С.</i> Иод және оның құрылымымен фенилалалиннің кешенді комплексі	5
<i>Кабышев А.М., Кутербеков К.А., Пенионжкевич Ю.Э., Маслов В.А., Мендибаев К., Соболев Ю.Г., Лукьянов С.М., Кабдрахимова Г.Д., Азнабаев Д., Курманжанов А.Т.</i> Өлшеу кезіндегі модификацияланған трансмиссионды әдіс негізінде – реакциялардың толық өлшемдерінің кателіктерін және ұшып келуші бөлшектердің энергиясы анықтау.....	10
<i>Бердібай С.Б., Парецкая Н.А., Сабитов А.Н., Исламов Р.А., Тамазян Р.А., Токмолдин С.Ж., Ильин А.И., Мартиросян К.С.</i> Иод және оның құрылымымен фенилалалиннің кешені комплекс фенилаланина с иодом и его структура.....	19
<i>Жұмағұлова Қ.Н., Рамазанов Т.С., Машеева Р.У., Донко З.</i> Үш өлшемді Юкава жүйесінің диффузия коэффициентіне сыртқы магнит өрісінің әсері.....	25
<i>Грушевская Е.А., Лебедев И.А., Темиралиев А.Т., Федосимова А.И.</i> Асимметриялы ядролардың өзара әрекеттерінде снарядтың ядросының толық талқандану жағдайларының сипаттамаларын зерттеу.....	30
<i>Асқарова А., Жұмаханова А.С., Құдайкұлов А., Ташев А.А., Қалиева Г.С.</i> Айнымалы жылу ағынының қатысуымен көлденең қимасының жылу және жылу окшаулаумен бөлек тұрақты жылуфизикалық жай-күйін зерттеу энергиясының әдісі.....	38
<i>Абишев М., Кенжебаев Н., Кенжебаева С., Джанибеков А.</i> Реакторлық нейтрондармен әсерлесудегі катализдық қоспаның изотоптық құрамын және энергия шығаруын есептеу.....	48
<i>Абишев М., Хасанов Н.</i> Жылулық нейтрондардың катализдық қоспамен (Pb, Bi, Po) әсерлесуін "IBUS" компьютерлік бағдарламалау кешенімен жобалау.....	53
<i>Алдабергенова Т.М., Ганеев Г.З., Кислицын С.Б., Досболаев М.К.</i> Графит бетінің термиялық эрозиясы мен құрылымына импульстік плазмалық сәулелендірудің ықпалы.....	57
<i>Жақып К.Б.</i> Стокса және Навье теңдеулерінің генеалогиялары. Дәрежелік реологиялық заңдар және теңдеулер.....	64
<i>Жаугашева С.А., Валиолда Д.С., Джансейтов Д.М., Жусупова Н.К., Сериков Ж., Айтжан Ф.</i> Теоретическое исследование кулоновского развала гало ядер ¹¹ Be, ¹⁵ C.....	81
<i>Жаугашева С.А., Сайдуллаева Г.Г., Нурбакова Г.С., Хабыл Н., Турарбекова М.М.</i> В(Bs) Мезонның ауыр мезондарға ыдырау қасиетін релятивистік әсерлесуін ескере отырып анықтау	86
<i>Қошанов Б.Д., Нұрыкенова Ж.С.</i> Жоғарғы ретті эллиптикалық теңдеулер үшін жалпылаған Дирихле - Нейман есебінің шешілімі туралы.....	95
<i>Құралбаев З.К., Оразаева А.Р., Рахимжанова З.М.</i> Жоғары көтерілген магма заттарының әсерінен болатын астеносферадағы қозғалыстың механика-математикалық моделі.....	103
<i>Мұқашев К.М., Казаченок В.В., Алиева М.Е.</i> Ғарыштық бөлшектер тұрғысынан физиканың іргелі проблемаларын оқытудың парадигмасы туралы жаңа көзқарастар.....	112
<i>Мырзақұл Т.Р., Таушинова А.С., Белисарова Ф.Б., Мырзақұл Ш.Р.</i> Гаусс-Бонн инвариантымен минималды емес байланыс кезіндегі <i>k</i> - эссенцияның инфляциялық моделі.....	120
<i>Омашова Г.Ш., Спабекова Р.С., Қабылбеков К.А., Саудахметов П.А., Абдрахманова Х.К., Арысбаева А.С.</i> Изохоралық процесті зерттеуге арналған компьютерлік зертханалық жұмысты ұйымдастырудың бланкі үлгісінің тапсырмаларын өз бетінше құрастыру.....	127
<i>Рябкин Ю.А., Рақыметов Б.А., Айтмукан Т.</i> Көміртек қабықшасының ЭПР-мәліметі негізінде қатты отын жалынының парамагниттік қасиетін анықтау мүмкіндігі.....	134
<i>Спабекова Р.С., Омашова Г.Ш., Қабылбеков К.А., Саудахметов П.А., Серикбаева Г.С., Актурева Г.К.</i> Тоқ көзін қосқанда және ажыратқанда тізбектегі токкүшінің өзгеруін зерттеуге арналған компьютерлік зертханалық жұмысты ұйымдастыруда матлав бағдарламасын қолдану.....	139
<i>Ташенова Ж.М., Калдарова М., Мусайф М.</i> Жылу ағыны, жылу алмасу және жылу изоляциясы бар үшөлшемді есептің тұрақты температуралы күйіндегі сандық сипаттамасы.....	148
<i>Ташенова Ж.М., Мусайф М., Калдарова М.</i> Термосерпімділікті есептеудегі энергетикалық әдісі.....	155
<i>Тұрғанбай Қ.Е., Қалдыбекова С.У.</i> Жоғарғы мектепте информатика пән мұғалімнің ойлау қабілетін жетілдіру ерекшеліктері.....	163
<i>Шоманов А.С., Ахмед-Заки Д.Ж., Амирғалиев Е.Н., Мансурова М.Е.</i> Кілттерді Mapreduce үлгісінде тарату есебі туралы	167
<i>Бакирова Э.А., Исакова Н.Б., Уаисов Б.</i> Параметрі бар фредгольм интегралдық- дифференциалдық теңдеуі үшін сызықты шеттік есепті шешудің бір алгоритмі туралы	173
<i>Ақылбаев М.И., Сапрыгина М.Б., Шалданбаев А.Ш.</i> Коэффициенті тұрақты, бірінші ретті кәдімгі дифференциалдық теңдеудің сингуляр әсерленген Коши есебін аргументтің ауытқыту әдісі арқылы шешу.....	181
<i>Рустемова К.Ж., Шалданбаев А.Ш., Ақылбаев М.И.</i> Коэффициенттері тұрақты, екінші ретті кәдімгі дифференциалдық теңдеудің сингуляр әсерленген Коши есебін аргументтің ауытқыту әдісі арқылы шешу.....	193
<i>Аширбаев Х.К., Қабылбеков К.А., Абдрахманова Х.А., Джумағалиева А.И., Кыдырбекова Ж.Б.</i> MATLAB бағдарлама пакетін қолданып электр және магнит өрістерін зерттеуге арналған компьютерлік зертханалық жұмыстарды ұйымдастыру.....	206

СОДЕРЖАНИЕ

<i>Бердибай С.Б., Парецкая Н.А., Сабитов А.Н., Исламов Р.А., Тамазян Р.А., Токмолдин С.Ж., Ильин А.И., Мартиросян К.С.</i> Комплекс фенилаланина с иодом и его структура.....	5
<i>Кабышев А.М., Кутербекоев К.А., Пенионжкевич Ю.Э., Маслов В.А., Мендибаев К., Соболев Ю.Г., Лукьянов С.М., Кабдрахимова Г.Д., Азнабаев Д., Курманжанов А.Т.</i> Статистические и систематические погрешности, полное сечение реакции, γ -спектрометр.....	10
<i>Бердибай С.Б., Парецкая Н.А., Сабитов А.Н., Исламов Р.А., Тамазян Р.А., Токмолдин С.Ж., Ильин А.И., Мартиросян К.С.</i> Комплекс фенилаланина с иодом и его структура.....	19
<i>Джумагулова К.Н., Рамазанов Т.С., Машеева Р.У., Донко З.</i> Влияние внешнего магнитного поля на коэффициент диффузии трехмерной Юкава системы.....	25
<i>Грушевская Е.А., Лебедев И.А., Темиралиев А.Т., Федосимова А.И.</i> Исследование событий полного разрушения ядра снаряда во взаимодействиях асимметрических ядер.....	30
<i>Аскарова А., Жумаханова А.С., Кудайкулов А., Ташев А.А., Калиева Г.С.</i> Энергетический метод в исследовании установившегося теплофизического состояния стержня переменного сечения при наличии теплового потока, теплообмена и теплоизоляции.....	38
<i>Абишев М., Кенжебаев Н., Кенжебаева С., Джанибеков А.</i> Расчет изотопного состава каталитического материала при облучении реакторными нейтронами.....	48
<i>Абишев М., Хасанов М.</i> Моделирование взаимодействия тепловых нейтронов каталитическим составом (Pb,Bi,Po) с помощью программного комплекса "IBUS".....	53
<i>Алдабергенова Т.М., Ганеев Г.З., Кислицин С.Б., Досболаев М.К.</i> Влияние импульсного плазменного облучения на термическую эрозию и структуру поверхности графита.....	57
<i>Джакупов К.Б.</i> Генезис уравнений Стокса и Навье. Степенные реологические законы и уравнения.....	64
<i>Жаугашева С.А., Валиолда Д.С., Джансейтов Д.М., Жусупова Н.К., Сериков Ж., Айтжан Ф.</i> ^{11}Be , ^{15}C Гало ядроларының кулондық күйреуін теориялық зерттеу.....	81
<i>Жаугашева С.А., Сайддуллаева Г.Г., Нурбакова Г.С., Хабыл Н., Турарбекова М.М.</i> Определение свойств тяжелого V(Bs)-мезона в рамках релятивистского характера взаимодействия.....	86
<i>Кошанов Б.Д., Нурикунова Ж.С.</i> О разрешимости обобщенной задачи Дирихле - Неймана для эллиптического уравнения высокого порядка.....	95
<i>Куралбаев З.К., Оразаева А.Р., Рахимжанова З.М.</i> Механико-математическая модель движений в астеносфере под воздействием поднимающихся мантийных веществ.....	103
<i>Мукашев К.М., Казаченок В.В., Алиева М.Е.</i> О новых взглядах на парадигму обучения фундаментальным проблемам физики на примере частиц космического происхождения.....	112
<i>Мырзақұл Т.Р., Таукенова А.С., Белисарова Ф.Б., Мырзақұл Ш.Р.</i> Инфляционная модель k -эссенции при неминимальной связи с инвариантом Гаусса-Бонне.....	120
<i>Омашова Г.Ш., Саббекова Р.С., Кабылбеков К.А., Саидахметов П.А., Абдрахманова Х.К., Арысбаева А.С.</i> Самостоятельное конструирование заданий для выполнения компьютерной лабораторной работы по исследованию изохорного процесса.....	127
<i>Рябкин Ю.А., Ракыметов Б.А., Айтмуқан Т.</i> О возможности определения парамагнитных характеристик пламени твердого топлива на основе ЭПР-данных углеродных пленок.....	134
<i>Саббекова Р.С., Омашова Г.Ш., Кабылбеков К.А., Саидахметов П.А., Серикбаева Г.С., Актуреева Г.К.</i> Организация компьютерных лабораторных работ по исследованию тока включения и выключения с использованием пакета программ MATLAB.....	139
<i>Ташенова Ж.М., Калдарова М., Мусайф М.</i> Численное обоснование одномерности некоторой трехмерной задачи установившегося температурного состояния при наличии теплового потока, теплообмена и теплоизоляции.....	148
<i>Ташенова Ж.М., Мусайф М., Калдарова М.</i> Энергетический метод в решении задач термоупругости.....	155
<i>Турганбай К.Е., Қалдыбекова С.У.</i> Особенности развития мышления учителя информатики в высшей школе.....	163
<i>Шоманов А.С., Ахмед-Заки Д.Ж., Амирғалиев Е.Н., Мансурова М.Е.</i> О задаче оптимизации распределения ключей в Mapreduce модели.....	167
<i>Бакирова Э.А., Искакова Н.Б., Уайсов Б.</i> Об одном алгоритме решения линейной краевой задачи для интегро-дифференциального уравнения Фредгольма с параметром.....	173
<i>Ақылбаев М.И., Сапрыгина М.Б., Шалданбаев А.Ш.</i> Решение сингулярно возмущенной задачи Коши для обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка с постоянным коэффициентом методом отклоняющегося аргумента.....	181
<i>Рустемова К.Ж., Шалданбаев А.Ш., Ақылбаев М.И.</i> Решение сингулярно возмущенной задачи Коши, для обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка с постоянными коэффициентами, методом отклоняющегося аргумента.....	193
<i>Аширбаев Х.К., Кабылбеков К.А., Абдрахманова Х.А., Джумағалиева А.И., Кыдырбекова Ж.Б.</i> Организация компьютерной лабораторной работы по исследованию электрического и магнитного полей с использованием пакета программ MATLAB.....	206

CONTENTS

<i>Berdibay S.B., Paretskaya N.A., Sabitov A.N., Islamov R.A., Tamazyan R.A., Tokmoldin S.Zh., Ilin A.I., Martirosyan K.S.</i> Phenylalanine - iodine complex and its structure.....	5
<i>Kabyshv A.M., Kuterbekov K.A., Penionzhkevich Yu.E., Maslov V.A., Mendibayev K., Sobolev Yu.G., Lukyanov S.M., Kabdrakhimova G. D., Aznabayev D. T., Kurmanzhanov A. T.</i> Errors in the total reaction cross sections and energies of incident particles measured using modified transmission technique	10
<i>Berdibay S.B., Paretskaya N.A., Sabitov A.N., Islamov R.A., Tamazyan R.A., Tokmoldin S.Zh., Ilin A.I., Martirosyan K.S.</i> Phenylalanine complex with iodine and its structure.....	19
<i>Dzhumagulova K.N., Ramazanov T.S., Masheyeva R.U., Donkó Z.</i> Effect of magnetic field on diffusion coefficients of the three-dimensional yukawa systems.....	25
<i>Grushevskaya E.A., Lebedev I.A., Temiraliev A.T., Fedosimova A.I.</i> Study on events with complete destruction of projectile nucleus in interactions of asymmetric nuclei	30
<i>Askarova A., Zhumakhanova A.S., Kudaykulov A., Tashev A.A., Kaliyeva G.S.</i> The energy method in the study of steady-state thermophysical condition of a rod of variable cross section in the presence of heat flow, heat exchange and thermal insulation.....	38
<i>Abishev M., Kenzhebayev N., Kenzhebayeva S., Dzhanbekov A.</i> Calculation of isotopic composition of catalytic material under radiation by reactor neutrons.....	48
<i>Abishev M., Khassanov M.</i> Simulation of the thermal neutrons interaction with catalytic composition (Pb, Bi, Po) by "IBUS" software.....	53
<i>Aldabergenova T.M., Ganeyev G.Z., Kislitsin S.B., Dosbolaev M.K.</i> Effect of pulsed plasma irradiation on thermal erosion and structure of graphite surface.....	57
<i>Jakupov K.B.</i> Genealogy of the Stokes and Navier equations. Degree rheological laws and equations.....	64
<i>Zhaugasheva S.A., Valiolda D.S., Janseitov D.M., Zhussupova N.K., Serikov Zh., Aitzhan F.</i> Theoretical study of the coulomb breakup of the halo nuclei ^{11}Be , ^{15}C	81
<i>Zhaugasheva S.A., Saidullaeva G.G., Nurbakova G.S., Khabyl N., Turarbekova M.M.</i> Determination properties of heavy decay in the B(Bs) meson in the framework of the relativistic character of the interaction.....	86
<i>Koshanov B.D., Nurikenova J.</i> On solvability of the generalized Dirichlet-Neiman problem for a high order elliptic equation.....	95
<i>Kuralbaev Z.K., Orazaeva A.R., Rahimzhanova Z.M.</i> Mechanical-mathematical model of kinematics in the asthenosphere under the influence of rising mental substances.....	103
<i>Mukashev K.M., Kazachenok V.V., Alieva M.E.</i> About new look at the paradigm of study fundamental problems of physics of cosmic the example of origin.....	112
<i>Myrzakul T.R., Taukenova A.S., Belisarova F.B., Myrzakul S.R.</i> Inflation model of k -essence for non minimally coupled Gauss-Bonnet invariant.....	120
<i>Omashova G. Sh., Spabekova R.S., Kabylbekov K.A., Saidakhmetov P.A., Abdrakhmanova KH.K., Arysbaeva A.S.</i> Independent designing of tasks for performance of computer laboratory work on the investigation of the isophoric process...	127
<i>Ryabikin Yu.A., Rakymetov B.A., Aitmukan T.</i> On the possibility of determination of paramagnetic characteristics of flame of solid fuel on the basis of epr-data carbon films.....	134
<i>Spabekova R. S., Omashova G.SH., Kabylbekov K. A., Saidakhmetov P. A., Serikbaeva G.S., Aktureeva G.K.</i> Organization of computer laboratory works on the research of turnonand turnoff current with the use of matlab program package	139
<i>Tashenova Zh., Kaldarova M., Mussaif M.</i> One-dimensional numerical substantiation of some three-dimensional problem steady state temperature in the presence of heat flow, heat exchange and thermal insulation.....	148
<i>Tashenova Z., Mussaif M., Kaldarova M.</i> Energy method in decision problems thermoelasticity.....	155
<i>Turganbay K.E., Kaldibekoba S.U.</i> Features of thinking of the teacher of Informatics in high school.....	163
<i>Shomanov A.S., Akhmed-Zaki D.Zh., Amirgaliyev E.N., Mansurova M.E.</i> About the problem of key distribution in Mapreduce model	167
<i>Bakirova E.A., Iskakova N.B., Uaisov B.</i> On the algorithm for solving of a linear boundary value problem for fredholm integro-differential equation with parameter.....	173
<i>Akylbaev M.I., Saprigina M.B., Shaldanbaeva A.Sh.</i> Solution of a singularly perturbed Cauchy problem, for an ordinary differential equation of the first order with a constant coefficient, by the method of a deviating argument.....	181
<i>Rustemova K.Zh., Shaldanbaeva A.Sh., Akylbaev M.I.</i> Solution of a singularly perturbed Cauchy problem for an ordinary second-order differential equation with constant coefficients by the method of a deviating argument.....	193
<i>Ashirbaev H.A., Kabylbekov K. A., Abdrakhmanova H. K., Dzhumagalieva A.I., Kydyrbekova Zh.B.</i> Organization of computer laboratory works to study electric and magnetic fields using the software package matlab.....	206

**Publication Ethics and Publication Malpractice
in the journals of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan**

For information on Ethics in publishing and Ethical guidelines for journal publication see <http://www.elsevier.com/publishingethics> and <http://www.elsevier.com/journal-authors/ethics>.

Submission of an article to the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan implies that the described work has not been published previously (except in the form of an abstract or as part of a published lecture or academic thesis or as an electronic preprint, see <http://www.elsevier.com/postingpolicy>), that it is not under consideration for publication elsewhere, that its publication is approved by all authors and tacitly or explicitly by the responsible authorities where the work was carried out, and that, if accepted, it will not be published elsewhere in the same form, in English or in any other language, including electronically without the written consent of the copyright-holder. In particular, translations into English of papers already published in another language are not accepted.

No other forms of scientific misconduct are allowed, such as plagiarism, falsification, fraudulent data, incorrect interpretation of other works, incorrect citations, etc. The National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan follows the Code of Conduct of the Committee on Publication Ethics (COPE), and follows the COPE Flowcharts for Resolving Cases of Suspected Misconduct (http://publicationethics.org/files/u2/New_Code.pdf). To verify originality, your article may be checked by the Cross Check originality detection service <http://www.elsevier.com/editors/plagdetect>.

The authors are obliged to participate in peer review process and be ready to provide corrections, clarifications, retractions and apologies when needed. All authors of a paper should have significantly contributed to the research.

The reviewers should provide objective judgments and should point out relevant published works which are not yet cited. Reviewed articles should be treated confidentially. The reviewers will be chosen in such a way that there is no conflict of interests with respect to the research, the authors and/or the research funders.

The editors have complete responsibility and authority to reject or accept a paper, and they will only accept a paper when reasonably certain. They will preserve anonymity of reviewers and promote publication of corrections, clarifications, retractions and apologies when needed. The acceptance of a paper automatically implies the copyright transfer to the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan.

The Editorial Board of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan will monitor and safeguard publishing ethics.

Правила оформления статьи для публикации в журнале смотреть на сайтах:

www.nauka-nanrk.kz

<http://www.physics-mathematics.kz>

ISSN 2518-1726 (Online), ISSN 1991-346X (Print)

Редакторы *М. С. Ахметова, Д.С. Аленов, Т.А. Апендиев*
Верстка на компьютере *А.М. Кульгинбаевой*

Подписано в печать 10.04.2017.
Формат 60x88¹/₈. Бумага офсетная. Печать – ризограф.
6,5 п.л. Тираж 300. Заказ 3.

Национальная академия наук РК
050010, Алматы, ул. Шевченко, 28, т. 272-13-18, 272-13-19