

ISSN 2710-1185 (Online)

ISSN 1813-1107 (Print)

ЕҢБЕК ҚЫЗЫЛ ТУ ОРДЕНДІ
«Ә. Б. БЕКТҰРОВ АТЫНДАҒЫ
ХИМИЯ ҒЫЛЫМДАРЫ ИНСТИТУТЫ»
АКЦИОНЕРЛІК ҚОҒАМЫ

ҚАЗАҚСТАННЫҢ ХИМИЯ ЖУРНАЛЫ

ХИМИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ КАЗАХСТАНА

CHEMICAL JOURNAL of KAZAKHSTAN

АКЦИОНЕРНОЕ ОБЩЕСТВО
ОРДЕНА ТРУДОВОГО КРАСНОГО ЗНАМЕНИ
«ИНСТИТУТ ХИМИЧЕСКИХ НАУК
им. А. Б. БЕКТУРОВА»

4 (76)

ОКТЯБРЬ – ДЕКАБРЬ 2021 г.

ИЗДАЕТСЯ С ОКТЯБРЯ 2003 ГОДА

ВЫХОДИТ 4 РАЗА В ГОД

АЛМАТЫ
2021

Журналдың бас редакторы

Бас директор
Д. Е. Фишер, х.ғ.к.

Редакция кеңесінің мүшелері:

Ө.Ж. Жүсіпбеков, проф., т.ғ.д., ҚР ҰҒА корр.-мүшесі (Қазақстан Республикасы);
Б.Н. Абсадыков, проф., т.ғ.д., ҚР ҰҒА корр.-мүшесі (Қазақстан Республикасы);
А.Р. Хохлов, проф., ф.-м.ғ.д., РҒА акад. (Ресей); **М.П. Егоров**, проф., х.ғ.д., РҒА акад., (Ресей); **В.С. Солдатов**, проф., х.ғ.д., ҰҒА (Беларусь); **М.Ж. Жұрынов**, проф., х.ғ.д., ҚР ҰҒА академигі (Қазақстан Республикасы); **И.К. Бейсембетов**, проф., э.ғ.д., ҚР ҰҒА академигі (Қазақстан Республикасы); **Қ.Ж. Пірәлиев**, проф., х.ғ.д., ҚР ҰҒА академигі (Қазақстан Республикасы); **Д.Х. Халиков**, проф., х.ғ.д., ТРҒА академигі (Тәжікстан Республикасы); **В.М. Дембицкий**, проф., х.ғ.д., РЖҒА акад. (Канада); **Л.А. Каюкова**, проф., х.ғ.д. (Қазақстан Республикасы); **В.К. Ю**, проф., х.ғ.д. (Қазақстан Республикасы); **Е.Ф. Панарин**, проф., х.ғ.д., РҒА корр.-мүшесі (Ресей); **Э.Б. Зейналов**, проф., х.ғ.д., Әзірбайжан ҰҒА корр.-мүшесі; (Әзірбайжан); **Брахим Елоуди**, PhD, проф., х.ғ.д., Де Ла Рошель университеті (Франция Республикасы); **Х. Темель**, проф., Дикле университеті (Түркия Республикасы); **Б.С. Закиров**, проф., х.ғ.д., Өзбекстан Республикасы ҒА (Өзбекстан Республикасы); **Г.А. Мун**, х.ғ.д., проф. (Қазақстан Республикасы); **К.Б. Ержанов**, х.ғ.д., проф. (Қазақстан Республикасы); **Б.Т. Өтелбаев**, х.ғ.д., проф. (Қазақстан Республикасы); **А.Е. Малмакова**, PhD (Қазақстан Республикасы); **К.Д. Мустафинов** (бас ғылыми хатшысы).

«Қазақстанның химия журналы»

ISSN 2710-1185 (Online); ISSN 1813-1107 (Print)

Құрылтайшы: Еңбек Қызыл Ту орденді Ө.Б. Бектұров атындағы
Химия ғылымдары институты

Тіркеу: Қазақстан Республикасының Мәдениет, ақпарат және қоғамдық келісім
министрлігінде № 3995-Ж 2003 жылғы 25-маусымдағы

2003 жылы құрылған. Жылына 4 рет шығады.

Редакцияның мекен-жайы: 050010 (A26F3Y1), Қазақстан Республикасы, Алматы қ.,
Ш. Уалханов көшесі, 106. тел. 8 (727) 291-24-64, 8 (727) 291-59-31.
ics_rk@mail.ru

© АҚ «Ө.Б. Бектұров атындағы
Химия ғылымдары институты», 2021

«Қазпошта» АҚ-ның газет-журналдар каталогында немесе оның қосымшаларында
жазылу индексі **75241**.

Главный редактор

Генеральный директор

Д. Е. Фишер, к.х.н.

Редакционная коллегия:

У.Ж. Джусипбеков, проф., д.т.н., член-корр. НАН РК (Республика Казахстан);
Б.Н. Абсадыков, проф., д.т.н., член-корр. НАН РК (Республика Казахстан);
А.Р. Хохлов, проф., д.ф.-м.н., акад. РАН (Россия); **М.П. Егоров**, проф., д.х.н., акад. РАН (Россия); **В.С. Солдатов**, проф., д.х.н., акад. НАН Беларуси (Беларусь);
М.Ж. Журинов, проф., д.х.н., акад. НАН РК (Республика Казахстан);
И.К. Бейсембетов, проф., д.э.н., акад. НАН РК (Республика Казахстан);
К.Д. Пралиев, проф., д.х.н., акад. НАН РК (Республика Казахстан); **Д.Х. Халиков**, проф., д.х.н., акад. АН Республики Таджикистан (Таджикистан); **В.М. Дембицкий**, проф., д.х.н., акад. РАЕН (Канада); **Л.А. Каюкова**, проф., д.х.н. (Республика Казахстан); **В.К. Ю**, проф., д.х.н. (Республика Казахстан); **Е.Ф. Панарин**, проф., д.х.н., член-корр. РАН (Россия); **Э.Б. Зейналов**, проф., д.х.н., член-корр. НАН Азербайджана (Азербайджан); **Брахим Елоуди**, проф., д.х.н., Ph.D, Университет Де Ла Рошель (Французская Республика); **Х. Темель**, проф., Университет Дикле (Турецкая Республика); **Б.С. Закиров**, проф., д.х.н., (Республика Узбекистан); **Г.А. Мун**, проф., д.х.н. (Республика Казахстан); **К.Б. Ержанов**, проф., д.х.н. (Республика Казахстан); **Б.Т. Утельбаев**, проф., д.х.н. (Республика Казахстан); **А.Е. Малмакова**, PhD, (Республика Казахстан); **К.Д. Мустафинов** (ответственный секретарь).

«Химический журнал Казахстана».
ISSN 2710-1185 (Online); ISSN 1813-1107 (Print)

Учредитель: Ордена Трудового Красного Знамени Институт химических наук
им. А.Б. Бектурова.

Регистрация: Министерство культуры, информации и общественного согласия Республики
Казахстан № 3995-Ж от 25 июня 2003 г.

Основан в 2003 г. Выходит 4 раза в год.

Адрес редакции: 050010 (A26F3Y1), г. Алматы, ул. Ш. Уалиханова, 106,
тел. 8 (727) 291-24-64, 8 (727) 291-59-31.
ics_rk@mail.ru

© АО «Институт химических наук
им. А. Б. Бектурова», 2021

Подписной индекс **75241** в Каталоге газет и журналов АО «Казпочта» или в дополнении к нему.

Editor-in-Chief

General director

D.E. Fischer, Candidate of Chemical Sciences

Editorial board:

U.Zh. Dzhusipbekov, Prof., Doctor of Technical Sciences, Corr. Member of NAS RK (Republic of Kazakhstan); **B.N. Absadykov**, Prof., Doctor of Technical Sciences, Corr. Member of NAS RK (Republic of Kazakhstan); **A.R. Khokhlov**, Prof., Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Academician of RAS (Russia), **M.P. Egorov**, Prof., Doctor of Chemical Sciences, Academician of RAS (Russia), **V.S. Soldatov**, Prof., Doctor of Chemical Sciences, Academician of NAS of Belarus (Belarus); **M.Zh. Zhurinov**, Prof., Doctor of Chemical Sciences, Academician of NAS RK (Republic of Kazakhstan); **I.K. Beisembetov**, Prof., Doctor of Economic Sciences, Academician of NAS RK (Republic of Kazakhstan); **K.D. Praliyev**, Prof., Doctor of Chemical Sciences, Academician of NAS RK (Republic of Kazakhstan); **D.Kh. Khalikov**, Prof., Doctor of Chemical Sciences, Academician of ASRT (Tajikistan); **V.M. Dembitsky**, Prof., Doctor of Chemical Sciences, Academician of the RANS (Canada); **L.A. Kayukova**, Prof., Doctor of Chemical Sciences (Republic of Kazakhstan); **V.K. Yu**, Prof., Doctor of Chemical Sciences (Republic of Kazakhstan); **E.F. Panarin**, Prof., Doctor of Chemical Sciences, Corr. Member of RAS (Russia); **E.B. Zeynalov**, Prof., Doctor of Chemical Sciences, Corr. Member of NAS of Azerbaijan (Azerbaijan); **Brahim Elouadi**, PhD, Prof., De La Rochelle University (French Republic); **H. Temel**, Prof., Dicle University (Republic of Turkey); **B.S. Zakirov**, Prof., Doctor of Chemical Sciences (Republic of Uzbekistan); **G.A. Moon**, Prof., Doctor of Chemical Sciences (Republic of Kazakhstan); **K.B. Erzhanov**, Prof., Doctor of Chemical Sciences (Republic of Kazakhstan); **B.T. Utelbaev**, Prof., Doctor of Chemical Sciences (Republic of Kazakhstan); **A.E. Malmakova**, PhD (Republic of Kazakhstan); **K.D. Mustafinov** (executive secretary).

«Chemical Journal of Kazakhstan»

ISSN 2710-1185 (Online);

ISSN 1813-1107 (Print)

Founder: Order of the Red Banner of Labor Institute of Chemical Sciences named after A.B. Bekturov.

Registration: Ministry of Culture, Information and Public Accord of the Republic of Kazakhstan
No. 3995-Ж dated June 25, 2003 year.

«Chemical Journal of Kazakhstan» was founded in 2003 year, publishes four issues in a year.

Address of the Editorial board: 050010 (A26F3Y1), Republic of Kazakhstan, Almaty,
Sh. Ualikhanov str., 106, A.B. Bekturov Institute of chemical
sciences awarded by the Order of Red Banner of Labor,
Fax: 8(727)291-24-64.
ics_rk@mail.ru

Chemical Journal of Kazakhstan

ISSN 1813-1107, eISSN 2710-1185

<https://doi.org/10.51580/2021-1/2710-1185.46>

Volume 4, Number 76 (2021), 15 – 25

UDC 547.447

DFT STUDIES OF STRUCTURAL PARAMETERS, VIBRATIONAL FREQUENCIES AND NMR SPECTRA OF 3-(1H-BENZO[D]IMIDAZOL-1-YL)-N'-(TOSYLOXY)PROPANIMIDAMIDE

E.M. Yergaliyeva^{1}, L.A. Kayukova¹,
A.V. Vologzhanina², G.P. Baitursynova¹, V.V. Vazhev³*

¹JSC «A.B. Bekturov Institute of Chemical Sciences», Almaty, Kazakhstan

²A.N. Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds RAS, Moscow, Russia

³Kostanay Social Technical University named after the Academician Z. Aldamzhar,

Kostanay, Kazakhstan

E-mail: erg_el@mail.ru

Abstract: Amidoxime derivatives have practically valuable biological properties. We have previously obtained new spiro-pyrazolinium compounds by arylsulfo-chlorination of β -aminopropioamidoximes, but in case of β -(benzimidazol-1-yl)pro-pioamidoxime we have obtained O-substitution product – 3-(1H-benzo[d]imidazol-1-yl)-N'-(tosyloxy)propanimidamide. The aim of the work is predicting of structural parameters (bond lengths, bond angles), vibrational frequencies and NMR spectra of 3-(1H-benzo-[d]imidazol-1-yl)-N'-(tosyloxy)propanimidamide. The calculations were performed using Gaussian 09 package. Structural parameters and vibrational frequencies was calculated using DFT (B3LYP/B3PW91/WB97XD)/6-31G(d,p). ¹H and ¹³C NMR was predicted using DFT B3LYP/6-31G(d,p)-GIAO in DMSO. All calculated values are in good agreement with experimental data. The calculated bond lengths and bond angles were compared with results of X-ray structural analysis. The best correlation coefficient was 0.981 (calculations with B3LYP level). For bond angles, the best result was obtained with B3LYP level (0.990). For vibrational frequencies correlation coefficients between the calculated and experimental values were 0.997 (B3LYP), 0.996 (B3PW91) and 0.995 (WB97XD). The most accurate method was used for predic-ting NMR spectrum. The correlation coefficients between the experimental and calculated ¹H and ¹³C chemical shifts were 0.949 and 0.999 respectively.

Key words: β -aminopropioamidoximes, tosylation, IR spectroscopy, NMR spectroscopy, DFT method, Gaussian 09.

Citation: Yergaliyeva E.M., Kayukova L.A., Vologzhanina A.V., Baitursynova G.P., Vazhev V.V. DFT studies of structural parameters, vibrational frequencies and NMR spectra of 3-(1H-benzo[d]imidazol-1-yl)-N'-(tosyloxy)propanimidamide. *Chem. J. Kaz.*, 2021, 4(76), 15–25. DOI: <https://doi.org/10.51580/2021-1/2710-1185.46>

1. Introduction

Amidoximes can be used as intermediates for the synthesis of heterocyclic compounds [1, 2]. They are usually used for derivatisation biologically active compounds with various functional groups [3–5]. We previously reported [6] on the results of *para*-toluenesulfochlorination of β -aminopropioamidoximes in the presence of DIPEA, as a result of which, in the case of the initial β -aminopropioamidoximes (β -amino group: piperidin-1-yl, morpholin-1-yl, 4-phenylpiperazin-1-yl) toluenesulfonates of the corresponding spiropyrazolinium compounds were obtained. It should be noted that the tosylation of β -(benzimidazol-1-yl)propioamidoxime leads to the formation of O-arylsulfochlorination product – 3-(1H-benzo[d]imidazol-1-yl)-N'-(tosyloxy)propanimidamide.

Differences in the structure of the obtained compounds lead to differences in their physicochemical characteristics, such as melting points, NMR shifts and vibrational frequencies. *The aim of this work* is predicting of structural parameters (bond lengths, bond angles), vibrational frequencies and NMR spectra of 3-(1H-benzo[d]imidazol-1-yl)-N'-(tosyloxy)propanimidamide using DFT method with the B3LYP, B3PW91 and WB97XD functionals and 6-31G(d,p) basis set. DFT (density functional theory) is the modern computational method of quantum chemistry, that shows high predictive abilities when calculating molecular structures and vibrational frequencies [7–9], and allows to use it for analytical purposes. We have presented the results of calculations of structural parameters of 3-(1H-benzo[d]imidazol-1-yl)-N'-(tosyloxy)propanimidamide using DFT B3LYP/6-31G(d,p) method. In this paper, we present a comparison of similar calculations for several functionals (B3LYP, B3PW91 and WB97XD). The DFT method makes it possible to simulate NMR spectra of organic molecules [7, 10–12], which we represent in this work. All calculated values were compared with experimental data.

2. Results and discussion

The bond lengths and bond angles calculated and obtained using X-ray structural analysis are summarized in table 1. The correlation between the experimental and calculated data is characterized by the correlation coefficient (R), root mean square error (rms) and average differences (Av. dif.), given in the table. The computed bond lengths differed from the experimental values by 0.023 Å (1.6%) for B3LYP level, 0.021 Å (1.5%) for B3PW91 level and 0.026 Å (1.8%) for WB97XD level (on the average). The best correlation coefficient between the experimentally found and calculated bond lengths in the case of B3LYP level is 0.981. Using the level B3PW91, the correlation coefficient was 0.979, for the level WB97XD – 0.964. For bond angles, the best result was also obtained at the B3LYP level (0.990). In the case of using both B3PW91 and WB97XD levels, correlation coefficient was 0.988. The calculated angles differ from the experimental angles by 1.036° (0.8%), 1.145° (1%) and 1.152° (1%) at

B3LYP, B3PW91 and WB97XD levels respectively. A comparison of the calculated values and the X-ray data shows that the most accurate level for the calculation of structural parameters is B3LYP level.

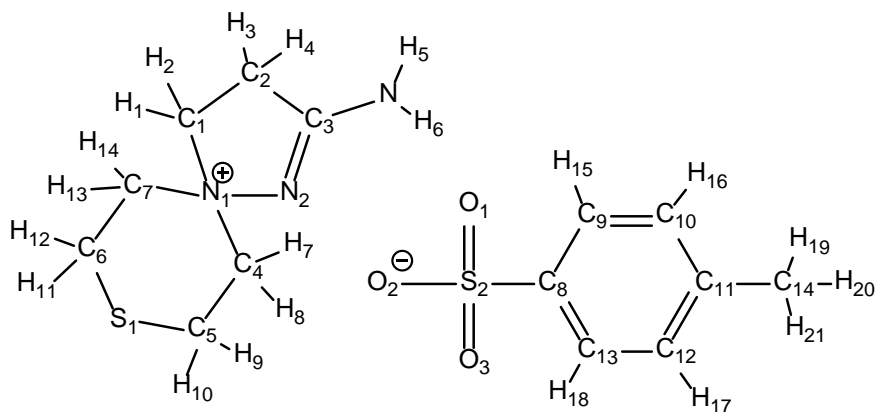
Table 1 – Bond lengths (Å) and bond angles (°) for 3-(1H-benzo[d]imidazol-1-yl)-N'-(tosyloxy) propanimidamide

Bond	X-ray	B3LYP	B3PW91	WB97XD
1	2	3	4	5
Bond lengths (Å)				
C ₂ -C ₃	1.378	1.391	1.389	1.385
C ₂ -C ₇	1.400	1.400	1.399	1.398
C ₃ -C ₄	1.403	1.409	1.407	1.408
C ₄ -C ₅	1.383	1.393	1.390	1.387
C ₅ -C ₆	1.397	1.397	1.396	1.395
C ₆ -C ₇	1.399	1.416	1.414	1.406
N ₁ -C ₁	1.355	1.381	1.375	1.373
N ₁ -C ₆	1.385	1.388	1.383	1.380
N ₁ -C ₈	1.458	1.451	1.448	1.451
N ₂ -C ₁	1.312	1.307	1.306	1.304
N ₂ -C ₇	1.396	1.389	1.384	1.385
C ₈ -C ₉	1.531	1.545	1.531	1.530
C ₉ -C ₁₀	1.511	1.507	1.505	1.507
N ₃ -C ₁₀	1.330	1.366	1.359	1.355
N ₄ -C ₁₀	1.294	1.294	1.292	1.391
O ₁ -N ₄	1.491	1.455	1.435	1.435
S ₁ -O ₁	1.589	1.671	1.661	1.646
S ₁ -O ₂	1.430	1.458	1.453	1.446
S ₁ -O ₃	1.432	1.458	1.453	1.444
S ₁ -C ₁₁	1.751	1.781	1.773	1.777
C ₁₁ -C ₁₂	1.390	1.396	1.394	1.391
C ₁₁ -C ₁₆	1.393	1.396	1.393	1.390
C ₁₂ -C ₁₃	1.384	1.392	1.390	1.389
C ₁₃ -C ₁₄	1.390	1.402	1.401	1.399
C ₁₄ -C ₁₅	1.392	1.403	1.400	1.399
C ₁₄ -C ₁₇	1.505	1.509	1.504	1.506
C ₁₅ -C ₁₆	1.378	1.392	1.391	1.389
N ₃ -C ₁₀	1.330	1.366	1.359	1.355
R	–	0.981	0.979	0.964
rms	–	0.023	0.021	0.026
Av.dif.	–	0.011	-0.006	-0.007
Bond angles (°)				
C ₁ -N ₁ -C ₆	106.5	105.8	105.9	105.7

Continuation table 1

1	2	3	4	5
C ₁ -N ₁ -C ₈	127.8	126.7	126.9	129.4
C ₁ -N ₂ -C ₇	104.3	104.4	104.3	104.2
C ₂ -C ₃ -C ₄	121.6	121.4	121.4	121.4
C ₂ -C ₇ -C ₆	119.8	119.8	119.7	119.7
C ₃ -C ₂ -C ₇	117.7	118.1	118.1	118.0
C ₃ -C ₄ -C ₅	121.8	121.5	121.6	121.5
C ₄ -C ₅ -C ₆	116.1	116.8	116.6	116.6
C ₅ -C ₆ -C ₇	122.9	122.4	122.5	122.8
C ₆ -N ₁ -C ₈	125.5	127.3	127.1	124.9
N ₁ -C ₆ -C ₅	131.8	132.6	132.5	131.9
N ₁ -C ₆ -C ₇	105.3	105.0	104.9	105.3
N ₁ -C ₁ -N ₂	114.1	114.4	114.5	114.5
N ₁ -C ₈ -C ₉	113.6	112.6	111.6	112.2
N ₂ -C ₇ -C ₂	130.3	129.8	129.8	130.0
N ₂ -C ₇ -C ₆	109.8	110.4	110.4	110.3
C ₈ -C ₉ -C ₁₀	113.6	111.7	113.9	110.2
N ₃ -C ₁₀ -C ₉	119.6	118.0	117.4	118.2
N ₄ -C ₁₀ -C ₉	113.0	115.9	116.9	116.1
N ₃ -C ₁₀ -N ₄	127.5	125.9	125.6	125.6
C ₁₀ -N ₄ -O ₁	107.5	108.1	108.3	107.9
N ₄ -O ₁ -S ₁	111.1	111.1	111.0	110.3
O ₁ -S ₁ -O ₂	102.3	101.9	101.7	102.4
O ₁ -S ₁ -O ₃	110.5	108.8	109.0	110.1
O ₁ -S ₁ -C ₁₁	103.4	103.5	103.3	101.4
O ₂ -S ₁ -O ₃	119.3	122.1	122.3	121.8
O ₂ -S ₁ -C ₁₁	109.4	109.5	109.5	110.5
O ₃ -S ₁ -C ₁₁	110.6	109.2	109.2	108.7
S ₁ -C ₁₁ -C ₁₆	119.2	119.6	119.6	119.3
S ₁ -C ₁₁ -C ₁₂	120.0	119.0	119.0	119.5
C ₁₂ -C ₁₁ -C ₁₆	120.8	121.4	121.4	121.3
C ₁₁ -C ₁₆ -C ₁₅	118.9	118.8	118.9	118.9
C ₁₁ -C ₁₂ -C ₁₃	119.0	118.9	118.9	119.0
C ₁₄ -C ₁₅ -C ₁₆	121.7	121.2	121.2	121.2
C ₁₂ -C ₁₃ -C ₁₄	121.5	121.2	121.2	121.1
C ₁₃ -C ₁₄ -C ₁₅	118.2	118.5	118.5	118.5
C ₁₅ -C ₁₄ -C ₁₇	120.8	120.7	120.8	120.5
C ₁₃ -C ₁₄ -C ₁₇	121.0	120.8	120.7	121.0
R	—	0.990	0.988	0.988
rms	—	1.036	1.145	1.152
Av.dif.	—	-0.079	0.045	0.155

Molecular structure of 3-(1H-benzo[d]imidazol-1-yl)-N'-(tosyloxy)propanimidamide with atomic numbering:



As shown by the above calculations, the use of this approximation is a reliable theoretical method for solving molecular modeling problems. High accuracy of molecular modeling and structure parameters prediction is a prerequisite for adequate modeling of the vibrational spectrum. The analysis of the calculated (DFT B3LYP, B3PW91, WB97XD) and experimental vibrational frequencies was carried out. Table 2 shows the characteristic vibrational frequencies of the compound. In the IR spectra of 3-(1H-benzo[d]imidazol-1-yl)-N'-(tosyloxy)propanimidamide, symmetric and asymmetric stretching vibrations of the SO₂ group located in the region 1190 cm⁻¹ and 1358 cm⁻¹. According to calculations using B3LYP level, the corresponding vibrations of this group are displaced in the region 1161 cm⁻¹ and 1365 cm⁻¹. For B3PW91 method the prediction is more accurate: symmetric vibrations 1180 cm⁻¹ and asymmetric ones 1370 cm⁻¹. The least accurate method turned out to be the WB97XD level (1130 cm⁻¹ and 1430 cm⁻¹ respectively).

The C=C stretching band was strongly seen in the region ν 1617 cm⁻¹, whereas the calculated values was displaced in the regions 1634 cm⁻¹, 1640 cm⁻¹, 1663 cm⁻¹ for B3LYP, B3PW91, WB97XD calculations respectively. Experimental stretching vibrational mode of Csp²-H bonds was observed in the region > 3000 cm⁻¹ also was observed in this area for all calculations. Calculated C=N vibration at B3LYP (1671 cm⁻¹) and B3PW91 (1625 cm⁻¹) levels showed slight deviation from the experimental value, while WB97XD calculation (1640 cm⁻¹) was in good agreement with experiment (1648 cm⁻¹). The stretching (N-H)₂ vibrations observed in the region of 3417 cm⁻¹ are significantly shifted in all the calculated spectrum. This significant difference may be attributed to the physical and electronic effect of neighboring atoms.

Table 2 – Most characteristic experimental and vibrational frequencies of 3-(1H-benzo[d]imidazol-1-yl)-N'-(tosyloxy)propanimidamide

Method	Stretching vibrations of bonds, ν , cm^{-1}							R	S
	$\nu_{\text{C=N}}$	$\nu_{\text{C=C}}$	ν_{SO_2}		$\nu_{(\text{N-H})_2}$	$\nu_{\text{Csp}^3\text{-H}}$	$\nu_{\text{Csp}^2\text{-H}}$		
			asym.	sym.					
Experimental	1648	1617	1358	1190	3417	2791, 2920	3110, 3237	–	–
B3LYP	1671	1634	1365	1161	3586	3042, 3061	3181, 3235	0.997	75
B3PW91	1625	1640	1370	1180	3621	3053, 3098	3194, 3243	0.996	80
WB97XD	1640	1663	1430	1130	3657	3070, 3083	3216, 3227	0.995	91

Correlation analysis was studied, and the correlation coefficients between the calculated and experimental vibrational frequencies are 0.997 (B3LYP), 0.996 (B3PW91) and 0.995 (WB97XD). In general, the calculated frequencies are in good agreement with the experimental data, which makes it possible to use them for analytical purposes.

Thus, the most accurate method for predicting the geometry and vibration frequencies of the compound under study is DFT with the B3LYP functional and 6-31G(d,p) basis set. This method was used to calculate the ^1H and ^{13}C NMR spectrum of 3-(1H-benzo[d]imidazol-1-yl)-N'-(tosyloxy)propanimidamide in DMSO. The experimental and calculated ^1H and ^{13}C chemical shift values are presented in table 3.

Table 3 – ^1H and ^{13}C NMR spectra of 3-(1H-benzo[d]imidazol-1-yl)-N'-(tosyloxy)propanimidamide

Chemical shift, δ , ppm					
^1H			^{13}C		
Atoms	Experimental	B3LYP	Atoms	Experimental	B3LYP
1	2	3	4	5	6
H1	7.99	8.28	C1	158.0	158.8
H2	7.64	7.85	C2	119.8	124.2
H3	7.18	7.73	C3	121.9	126.3
H4	7.18	7.78	C4	122.7	126.5
H5	7.64	8.18	C5	110.8	114.4
H6	4.33	4.52	C6	133.5	140.4
H7	4.33	4.35	C7	143.7	147.7
H8	2.50	2.70	C8	31.2	41.5
H9	2.50	3.14	C9	41.6	49.2
H10	6.80	4.54	C10	144.7	153.2

Continuation table 2

1	2	3	4	5	6
H11	6.80	5.56	C11	134.0	142.9
H12	7.36	7.84	C12	128.5	133.4
H13	7.70	8.36	C13	130.0	134.5
H14	7.70	8.37	C14	144.3	149.0
H15	7.36	8.11	C15	128.5	131.8
H16	2.38	2.40	C16	130.0	133.8
H17	2.38	2.85	C17	21.6	30.4
H18	2.38	2.85	–	–	–
R	0.949		R	0.999	
s	0.751		s	2.135	

The calculated ^1H chemical shift values are in good agreement with the experimental values, except those of H10 and H11 (deviation of 2.26 and 1.24 respectively). These deviations can be explained by the peculiarities of the functional and basis set combination used. No significant deviations are observed in ^{13}C shifts. For ^1H and ^{13}C chemical shifts, significant correlation coefficients were obtained between the experimental and calculated values (0,949 and 0,999 respectively).

3. Conclusion

A quantum chemical study of the molecular structure and vibrational frequencies of 3-(1H-benzo[d]imidazol-1-yl)-N'-(tosyloxy)propanimidamide is reported. Computed geometrical and electronic parameters at DFT-B3LYP, -B3PW91, -WB97XD/6-31G(d,p) confirmed by X-ray analysis and IR spectroscopy. Good correlation coefficients between experimental and calculated values make it possible to use the DFT method to predict the molecular structure and interpret the IR spectra of synthesized compound and its analogues. ^1H and ^{13}C NMR chemical shifts was calculated using the DFT-B3LYP/6-31G(d,p)-GIAO in DMSO. Results show very good agreement with experimental data. The correlation coefficients between the experimental and calculated ^1H and ^{13}C chemical shifts are 0.949 and 0.999 respectively. The calculated NMR spectrum can be used for analytical purposes.

4. Experimental part

Methods for obtaining 3-(1H-benzo[d]imidazol-1-yl)-N'-(tosyloxy)propanimidamide, characteristics and identification were published in [6].

The paper uses bond lengths and angles in 3-(1H-benzo[d]imidazol-1-yl)-N'-(tosyloxy)propanimidamide crystal obtained as a result of X-ray analysis. The experimentally established crystal and molecular structure of the compound will be published later.

IR spectra were obtained on a Thermo Scientific Nicolet 5700 FTIR instrument in KBr pellets. ^1H and ^{13}C NMR spectra were recorded on a Bruker Avance III 500 MHz NMR spectrometer (500 and 126 MHz, respectively).

The calculations were performed using Gaussian 09 package. The molecular structure of compounds was fully optimized using density functional theory at the B3LYP, B3PW91 and WB97XD levels with 6-31G(d,p) basis set. The absence of imaginary (negative) frequencies in the calculation results indicates that a local minimum was found. The NMR chemical shifts were calculated at DFT-B3LYP/6-31G(d,p) in DMSO. Gauge-including atomic orbitals (GIAO) approximation was used [13]. Chemical shifts were derived on a δ -scale in relation to the TMS.

Funding: This study was supported by the Committee of Science of the Ministry of Education and Science of the Republic of Kazakhstan (IRN: BR10965255).

Acknowledgments: NMR spectra (^1H and ^{13}C) obtained in National scientific laboratory, S. Amanzholov East Kazakhstan State University by K. Akatan.

Conflicts of Interest: The authors declare no conflict of interest.

Information about authors:

Yergaliyeva E.M. – PhD student, Junior researcher; e-mail: erg_el@mail.ru; ORCID ID: 0000-0001-9615-2575

Kayukova L.A. – Dr. of chemical sciences, Professor, Chief Researcher; e-mail: lkayukova@mail.ru; ORCID ID: 0000-0002-1900-1228

Vologzhanina A.V. – Senior Researcher, PhD in Chemistry; e-mail: vologzhanina@mail.ru; Web of Science Researcher ID: G-2125-2014

Baitursynova G.P. – PhD, Researcher; e-mail: guni-27@mail.ru; ORCID ID: 0000-0002-8883-0695

Vazhev V.V. – Dr. of chemical sciences, Professor; vladimir.vazhev@gmail.com; ORCID ID: 0000-0002-0493-7461

References

1. Tarasenko M.V., Kotlyarova V.D., Baykov S.V. 2-(1,2,4-Oxadiazol-5-yl)anilines based on amidoximes and isatoic anhydrides: synthesis and structure features. *Russ. J. Gen. Chem*, **2021**, *91*, 768-778. DOI: 10.1134/S1070363221050030
2. Camacho C.M., Pizzio M.G., Roces D.L., Boggián D.B., Mata E.G., Bellizzi Y., Roguin L.P. Design, synthesis and cytotoxic evaluation of a library of oxadiazole-containing hybrids. *RSC Advances*, **2021**, *11*(47), 29741-29751. DOI: 10.1039/D1RA05602F
3. Kayukova L., Vologzhanina A., Praliyev K., Dyusembaeva G., Baitursynova G., Uzakova A., Bismilda V., Chingissova L., Akatan K. Boulton-Katritzky rearrangement of 5-substituted phenyl-3-[2-(morpholin-1-yl) ethyl]-1,2,4-oxadiazoles as a synthetic path to spiroprazoline benzoates and chloride with antitubercular properties. *Molecules*, **2021**, *26*(4), 967. DOI: 10.3390/molecules26040967
4. Oliveira R.J., Santos C.S., Caiana R.R.A., Farias K.J.S., de Almeida Júnior R.F., Machado P.R.L., Freitas J.C.R. Design, Synthesis and Antitumoral Activity of New O-Alkylamidoximes. *Chemistry Select*. **2021**, *6*(33), 8774-8778. DOI: 10.1002/slct.202102128
5. Papastergiou A., Perontsis S., Gritzapis P., Koumbis A. E., Koffa M., Psomas G., Fylaktakidou K.C. Evaluation of O-alkyl and aryl sulfonyl aromatic and heteroaromatic amidoximes as

novel potent DNA photo-cleavers. *Photochemical & Photobiological Sciences*, **2016**, *15*(3), 351-360. DOI: 10.1039/x0xx00000x

6. Kayukova L.A., Baitursynova G.P., Yergaliyeva E.M., Zhaksylyk B.A., Yelibayeva N.S. Arylsulphonates of spiropyrazolines and o-tosilate- β -(benzimidazol-1-yl)propioamidoxime as the products of β -aminopropioamidoximes tosylation. *Chem. J. Kaz.*, **2021**, *2*(74), 22-32. DOI: 10.51580/2021-1/2710-1185.25

7. Gummidi L., Kerru N., Ibeji C.U., Singh P. Crystal structure and DFT studies of (E)-1-(4-fluorophenyl)-3-(1H-indol-1-yl)-4-styrylazetid-2-one. *J. Mol. Struct.*, **2019**, *1187*, 50-58. DOI: 10.1016/j.molstruc.2019.03.053

8. Ulahannan R.T., Kannan V., Vidya V., Sreekumar K. Synthesis and DFT studies of the structure-NLO activity evaluation of 2-(4-methoxyphenyl)-1,4,5-triphenyl-2,5-dihydro-1H-imidazole. *J. Mol. Struct.*, **2020**, *1199*, 127004. DOI: 10.1016/j.molstruc.2019.127004

9. Odame F., Hosten E.C. Synthesis, characterization and computational studies of two triazaspiro tetracycles. *Acta Chimica Slovenica*, **2018**, *65*(3), 531-538. DOI: 10.17344/acsi.2017.4084

10. Gao P., Zhang J., Peng Q., Zhang J., Glezakou V.A. General protocol for the accurate prediction of molecular $^{13}\text{C}/^1\text{H}$ NMR chemical shifts via machine learning augmented DFT. *Journal of Chemical Information and Modeling*, **2020**, *60*(8), 3746-3754. DOI: 10.1021/acs.jcim.0c00388

11. Yesiltepe Y., Nuñez J.R., Colby S.M., Thomas D.G., Borkum M.I., Reardon P.N., Renslow R.S. An automated framework for NMR chemical shift calculations of small organic molecules. *Journal of cheminformatics*, **2018**, *10*(1), 1-16. DOI: 10.1016/j.carbpol.2020.115846.

12. Alam M.J., Khan A.U., Alam M., Ahmad S. Spectroscopic (FTIR, FT-Raman, ^1H NMR and UV-Vis) and DFT/TD-DFT studies on cholesteno[4,6-b,c]-2',5'-dihydro-1',5'-benzothiazepine. *J. Mol. Struct.*, **2019**, *1178*, 570-582. DOI: 10.1016/j.molstruc.2018.10.063

13. Wolinski K., Hinton J.F., Pulay P. Efficient implementation of the gauge-independent atomic orbital method for NMR chemical shift calculations. *J. Am. Chem. Soc.*, **1990**, *112*(23), 8251-8260. DOI: 10.1021/ja00179a005

Түйіндеме

DFT ӘДІСІМЕН 3-(1H-БЕНЗО[D]ИМИДАЗОЛ-1-ИЛ)-N'-(ТОЗИЛОКСИ)ПРОПАНИМИДАМИДТІҢ ҚҰРЫЛЫМДЫҚ ПАРАМЕТРЛЕРІН, ТЕРБЕЛМЕЛІ ЖИЛІКТЕРІН ЖӘНЕ ЯМР-СПЕКТРІН ЗЕРТТЕУ

Э.М. Ергалиева^{1*}, Л.А. Каюкова¹, А.В. Вологжанина², Г.П. Байтурсынова¹,
В.В. Вазжев³

¹АҚ «Ә.Б. Бектұров атындағы химия ғылымдары институты», Алматы, Қазақстан

²Ресей Ғылым Академиясының А. Н. Несмеянов атындағы элементорганикалық қосылыстар институты, Мәскеу, Ресей

³З. Алдамжар атындағы Қостанай әлеуметтік-техникалық университеті, Қостанай, Қазақстан

E-mail: erg_el@mail.ru

Амидоксим туындылары іс жүзінде құнды биологиялық қасиеттерге ие болып келеді. Осыған дейін β -аминопропιοамидоксимдерді арилсульфохлорлау жолымен жаңа спиропиразолиний қосылыстарын алған болатынбыз, бірақ β -(бен-зимидазол-1-ил)пропιοамидоксим жағдайында 3-(1H-бензо[d]имидазол-1-ил)-N'-(тозилокси)пропанимидамид о-алмастырылған өнімі алынды. Бұл жұмыстың мақсаты 3-(1H-бензо[d]имидазол-1-ил)-N'-(тозилокси)пропанимидамид құрылымдық пара-

метрлерін (байланыс ұзындығы мен бұрыштары), тербелмелі жиіліктерін және ЯМР спектрін болжау болып табылады. Барлық есептеулер Gaussian 09 бағдарламасын қолдана отырып, құрылымдық параметрлер және тербеліс жиіліктері DFT (B3LYP/B3PW91/WB97XD)/6-31g(d,p) көмегімен есептелінді. ^1H және ^{13}C ЯМР спектрлік болжау ДМСО-да DFT B3LYP/6-31G(d,p)-GIAO қолдану арқылы жүргізілді. Барлық есептелінген мәндер тәжірибелік мәліметтерге сәйкес келеді. Есептелінген ұзындықтар мен байланыс бұрыштары рентгендік құрылымдық талдау деректерімен салыстырылды. Байланыс ұзындығының ең жоғары корреляция коэффициенті 0.981 көрсетті (B3LYP функционалдығын қолдану арқылы есептеу). Валенттік бұрыштар үшін ең жоғары корреляция коэффициенті B3LYP деңгейімен (0.990) орындалды. Тербелмелі жиіліктер үшін есептелген және тәжірибелік мәндер арасындағы корреляция коэффициенттері 0.997 (B3LYP), 0.996 (B3PW91) және 0.995 (WB97XD) мәндерін көрсетті. Пайдаланылған әдістердің ең нақтысы ЯМР спектрін болжау үшін таңдалды. ^1H және ^{13}C есептелінген және тәжірибелік химиялық ауысулар арасындағы корреляция коэффициенті сәйкесінше 0.949 және 0.999 мәндерді құрайды.

Түйінді сөздер: β -аминопропиоамидоксимдер, тозилдеу, ИҚ-спектроскопия, ЯМР спектроскопиясы, DFT әдісі, Gaussian 09.

Резюме

ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРНЫХ ПАРАМЕТРОВ, КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ ЧАСТОТ И ЯМР СПЕКТРА 3-(1Н-БЕНЗО[D]ИМИДАЗОЛ-1-ИЛ)-N'-(ТОЗИЛОКСИ)ПРОПАНИМИДАМИДА МЕТОДОМ DFT

Э.М. Ергалиева^{1}, Л.А. Каюкова¹, А.В. Вологжанина², Г.П. Байтурсынова¹, В.В. Вазжев³*

¹АО «Институт химических наук имени А.Б. Бектурова», Алматы, Казахстан

²Институт элементоорганических соединений Российской Академии наук имени А. Н. Несмеянова, Москва, Россия

³Костанайский социально-технический университет имени академика З. Алдамжара, Костанай, Казахстан

E-mail: erg_el@mail.ru

Производные амидоксимов обладают практически ценными биологическими свойствами. Ранее нами были получены новые спиропиразолиновые соединения путем арилсульфохлорирования β -аминопропиоамидоксимов, но в случае β - (бензи-мидазол-1-ил)пропиоамидоксима нами был получен продукт О-замещения – 3-(1Н-бензо[d]имидазол-1-ил)-N'-(тозилокси)пропанимидамид. Цель настоящей работы состоит в прогнозировании структурных параметров (длин и углов связей), колебательных частот и ЯМР спектра 3-(1Н-бензо[d]имидазол-1-ил)-N'-(тозилокси)пропанимидамида. Все расчеты были выполнены с использованием программы Gaussian 09 Структурные параметры и колебательные частоты рассчитаны с использованием DFT (B3LYP/B3PW91/WB97XD)/6-31G(d,p). Прогнозирование ^1H и ^{13}C ЯМР спектра проводилось с применением DFT B3LYP/6-31G(d,p)-GIAO в ДМСО. Все рассчитанные значения хорошо согласуются с экспериментальными данными. Рассчитанные длины и углы связей сравнивались с данными РСА. Лучший

коэффициент корреляции длин связей составил 0.981 (расчет с применением функционала B3LYP). Для валентных углов лучший коэффициент корреляции также достигнут с уровнем B3LYP (0.990). Для колебательных частот коэффициенты корреляции между рассчитанными и экспериментальными значениями составили 0.997 (B3LYP), 0.996 (B3PW91) и 0.995 (WB97XD). Наиболее точный из использованных методов был выбран для прогнозирования спектра ЯМР. Коэффициент корреляции между рассчитанными и экспериментальными химическими сдвигами ^1H и ^{13}C равны 0.949 и 0.999 соответственно.

Ключевые слова: β -аминопропиоамидоксими, тозилирование, ИК спектроскопия, спектроскопия ЯМР, DFT метод, Gaussian 09.

Ғылыми жарияланымдардың этикасы

Редакциялық алқа және "Қазақстанның химия журналы" ғылыми журналының (бұдан әрі – Журнал) бас редакторы "Жарияланымдар жөніндегі этика комитеті" (Committee on Publication Ethics – COPE) (<http://publicationethics.org/about>), "Еуропалық ғылыми редакторлар қауымдас­тығы" (European Association of Science Editors – EASE) (<http://www.ease.org.uk>) және "Ғылыми жарияланымдар әдебі жөніндегі комитеттің" (<http://publicet.org/code/>) қабылданған халықаралық стандарттарды ұстанады.

Баспа қызметіндегі әділетсіз тәжірибені болдырмау мақсатында (плагиат, жалған ақпаратты ұсыну және т.б.) және ғылыми жарияланымдардың жоғары сапасын қамтамасыз ету, автордың алған ғылыми нәтижелерін жұртшылықпен тану мақсатында редакциялық кеңестің әрбір мүшесі, автор, рецензент, сондай-ақ баспа процесіне қатысатын мекемелер этикалық стандарттарды, нормалар мен ережелерді сақтауға және олардың бұзылуын болдырмау үшін барлық шараларды қабылдауға міндетті. Осы процеске қатысушылардың барлығының ғылыми жарияланым этикасы ережелерін сақтауы авторлардың зияткерлік меншік құқықтарын қамтамасыз етуге, басылым сапасын арттыруға және авторлық материалдарды жеке тұлғалардың мүддесі үшін заңсыз пайдалану мүмкіндігін болдырмауға ықпал етеді.

Редакцияға келіп түскен барлық ғылыми мақалалар міндетті түрде екі жақты шолудан өтеді. Журнал редакциясы мақаланың журнал профиліне, ресімдеу талаптарына сәйкестігін белгілейді және оны қолжазбаның ғылыми құндылығын айқындайтын және мақала тақырыбына неғұрлым жақын ғылыми мамандандырулары бар екі тәуелсіз рецензент – мамандарды тағайындайтын журналдың жауапты хатшысының бірінші қарауына жібереді. Мақалаларды рецензиялауды редакциялық кеңес және редакциялық алқа мүшелері, сондай-ақ басқа елдердің шақырылған рецензенттері жүзеге асырады. Мақалаға сараптама жүргізу үшін белгілі бір рецензентті таңдау туралы шешімді Бас редактор қабылдайды. Рецензиялау мерзімі 2-4 аптаны құрайды, бірақ рецензенттің өтініші бойынша ол ұзартылуы мүмкін.

Редакция мен рецензент қарауға жіберілген жарияланбаған материалдардың құпиялылығын сақтауға кепілдік береді. Жариялау туралы шешімді журналдың редакциялық алқасы рецензиялаудан кейін қабылдайды. Қажет болған жағдайда қолжазба авторларға рецензенттер мен редакторлардың ескертулері бойынша пысықтауға жіберіледі, содан кейін ол қайта рецензияланады. Редакция этика ережелерін бұзған жағдайда мақаланы жариялаудан бас тартуға құқылы. Егер ақпаратты плагиат деп санауға жеткілікті негіз болса, жауапты редактор жариялауға жол бермеуі керек.

Авторлар редакцияға ұсынылған материалдардың жаңа, бұрын жарияланбаған және түпнұсқа екендігіне кепілдік береді. Авторлар ғылыми нәтижелердің сенімділігі мен маңыздылығына, сондай-ақ ғылыми этика қағидаттарын сақтауға, атап айтқанда, ғылыми этиканы бұзу фактілеріне жол бермеуге (ғылыми деректерді тұжырымдау, зерттеу деректерін бұрмалауға әкелетін бұрмалау, плагиат және жалған тең авторлық, қайталау, басқа адамдардың нәтижелерін иемдену және т. б.) жауапты болады.

Мақаланы редакцияға жіберу авторлардың мақаланы (түпнұсқада немесе басқа тілдерге немесе басқа тілдерге аударылған) басқа журналға(журналдарға) берме-

генін және бұл материал бұрын жарияланбағанын білдіреді. Әйтпесе, мақала авторларға авторлық құқықты бұзғаны үшін мақаланы қабылдамау туралы ұсыныспен дереу қайтарылады. Басқа автор жұмысының 10 пайызынан астамын оның авторлығын және дереккөзге сілтемесіз сөзбе-сөз көшіруге жол берілмейді. Алынған фрагменттер немесе мәлімдемелер автор мен бастапқы көзді міндетті түрде көрсете отырып жасалуы керек. Шамадан тыс көшіру, сондай-ақ кез-келген нысандағы плагиат, оның ішінде рәсімделмеген дәйексөздер, өзгерту немесе басқа адамдардың зерттеулерінің нәтижелеріне құқықтар иемдену этикалық емес және қолайсыз. Зерттеу барысына қандай да бір түрде әсер еткен барлық адамдардың үлесін мойындау қажет, атап айтқанда, мақалада зерттеу жүргізу кезінде маңызды болған жұмыстарға сілтемелер ұсынылуы керек. Қосалқы авторлардың арасында зерттеуге қатыспаған адамдарды көрсету болмайды.

Егер жұмыста қате табылса, редакторға тез арада хабарлау керек және бірге түзету туралы шешім қабылдау керек.

Қолжазбаны жариялаудан бас тарту туралы шешім рецензенттердің ұсынымдарына сәйкес редакциялық алқа отырысында қабылданады. Редакциялық алқаның шешімімен жариялауға ұсынылмаған мақала қайта қарауға қабылданбайды. Жариялаудан бас тарту туралы хабарлама авторға электрондық пошта арқылы жіберіледі.

Редакциялық алқа мақаланы жариялауға жіберу туралы шешім қабылдағаннан кейін редакция бұл туралы авторға хабарлайды және жариялау мерзімін көрсетеді. Рецензиялардың түпнұсқалары журналдың редакциясында 3 жыл бойы сақталады.

Этика научных публикаций

Редакционная коллегия и главный редактор научного журнала «Химический журнал Казахстана» (далее – Журнал) придерживаются принятых международных стандартов «Комитета этики по публикациям» (Committee on Publication Ethics – COPE) (<http://publicationethics.org/about>), «Европейской ассоциации научных редакторов» (European Association of Science Editors – EASE) (<http://www.ease.org.uk>) и «Комитета по этике научных публикаций» (<http://publicet.org/code/>).

Во избежание недобросовестной практики в публикационной деятельности (плагиат, изложение недостоверных сведений и др.) и в целях обеспечения высокого качества научных публикаций, признания общественностью, полученных автором научных результатов, каждый член редакционного совета, автор, рецензент, а также учреждения, участвующие в издательском процессе, обязаны соблюдать этические стандарты, нормы и правила и принимать все меры для предотвращения их нарушений. Соблюдение правил этики научных публикаций всеми участниками этого процесса способствует обеспечению прав авторов на интеллектуальную собственность, повышению качества издания и исключению возможности неправомерного использования авторских материалов в интересах отдельных лиц.

Все научные статьи, поступившие в редакцию, подлежат обязательному двойному слепому рецензированию. Редакция Журнала устанавливает соответствие статьи профилю Журнала, требованиям к оформлению и направляет ее на первое рассмотрение ответственному секретарю Журнала, который определяет научную ценность рукописи и назначает двух независимых рецензентов – специалистов, имеющих наиболее близкие к теме статьи научные специализации. Рецензирование статей осуществляется членами редакционного совета и редакционной коллегии, а также приглашенными рецензентами других стран. Решение о выборе того или иного рецензента для проведения экспертизы статьи принимает главный редактор. Срок рецензирования составляет 2-4 недели, но по просьбе рецензента он может быть продлен.

Редакция и рецензент гарантируют сохранение конфиденциальности неопубликованных материалов присланных на рассмотрение работ. Решение о публикации принимается редакционной коллегией Журнала после рецензирования. В случае необходимости рукопись направляется авторам на доработку по замечаниям рецензентов и редакторов, после чего она повторно рецензируется. Редакция оставляет за собой право отклонить публикацию статьи в случае нарушения правил этики. Ответственный редактор не должен допускать к публикации информацию, если имеется достаточно оснований полагать, что она является плагиатом.

Авторы гарантируют, что представленные в редакцию материалы являются новыми, ранее неопубликованными и оригинальными. Авторы несут ответственность за достоверность и значимость научных результатов, а также соблюдение принципов научной этики, в частности, недопущение фактов нарушения научной этики (фабрикация научных данных, фальсификация, ведущая к искажению исследовательских данных, плагиат и ложное соавторство, дублирование, присвоение чужих результатов и др.)

Направление статьи в редакцию означает, что авторы не передавали статью (в оригинале или в переводе на другие языки или с других языков) в другой журнал(ы)

и что этот материал не был ранее опубликован. В противном случае статья немедленно возвращается авторам с рекомендацией отклонить статью за нарушение авторских прав. Не допускается дословное копирование более 10 процентов работы другого автора без указания его авторства и ссылок на источник. Заимствованные фрагменты или утверждения должны быть оформлены с обязательным указанием автора и первоисточника. Чрезмерные заимствования, а также плагиат в любых формах, включая неоформленные цитаты, перефразирование или присвоение прав на результаты чужих исследований, неэтичны и неприемлемы. Необходимо признавать вклад всех лиц, так или иначе повлиявших на ход исследования, в частности, в статье должны быть представлены ссылки на работы, которые имели значение при проведении исследования. Среди соавторов недопустимо указывать лиц, не участвовавших в исследовании.

Если обнаружена ошибка в работе, необходимо срочно уведомить редактора и вместе принять решение об исправлении.

Решение об отказе в публикации рукописи принимается на заседании редакционной коллегии в соответствии с рекомендациями рецензентов. Статья, не рекомендованная решением редакционной коллегии к публикации, к повторному рассмотрению не принимается. Сообщение об отказе в публикации направляется автору по электронной почте.

После принятия редколлегией Журнала решения о допуске статьи к публикации редакция информирует об этом автора и указывает сроки публикации. Оригиналы рецензий хранятся в редакции Журнала в течение 3 лет.

Ethics of scientific publications

The editorial board and editor-in-chief of the scientific journal “Chemical Journal of Kazakhstan” (hereinafter - the Journal) adhere to the accepted international standards of “the Committee on Publication Ethics” (COPE) (<http://publicationethics.org/about>), “European Association of Science Editors – EASE” (<http://www.ease.org.uk>) and “Committee on the Ethics of Scientific Publications” (<http://publicet.org/code/>).

Public recognition of the scientific results obtained by the author, each member of the editorial board, author, reviewer, as well as institutions involved in the publishing process is obliged to comply with ethical standards, norms, and rules and take all measures to prevent violations thereof. This is needed to avoid unfair practice in publishing activities (plagiarism, presentation of false information, etc.) and to ensure the high quality of scientific publications. Compliance with the rules of ethics of scientific publications by all participants in this process contributes to ensuring the rights of authors to intellectual property, improving the quality of the publication, and excluding the possibility of illegal use of copyright materials in the interests of individuals.

All scientific articles submitted to the editorial office are subject to mandatory double-blind review. The editorial board of the Journal establishes the correspondence of the article to the profile of the Journal, the requirements for registration and sends it for the first consideration to the executive secretary of the Journal, who determines the scientific value of the manuscript and appoints two independent reviewers - specialists who have scientific specializations closest to the topic of the article. Reviewing of articles is carried out by members of the editorial board and editorial board, as well as invited reviewers from other countries. The decision on choosing a reviewer for the examination of the article is made by the editor-in-chief. The review period is 2-4 weeks, but it can be extended at the request of the reviewer.

The editorial board and the reviewer guarantee the confidentiality of unpublished materials sent for consideration. The decision on publication is made by the editorial board of the Journal after reviewing. The manuscript is sent to the authors for revision based on the comments of reviewers and editors if necessary. After which, it is re-reviewed. The editors reserve the right to reject the publication of an article in case of a violation of the rules of ethics. The executive editor should not allow information to be published if there are sufficient grounds to believe that it is plagiarism.

The authors guarantee that the submitted materials to the editorial office are new, previously unpublished, and original. Authors are responsible for the reliability and significance of scientific results, as well as adherence to the principles of scientific ethics, in particular, the prevention of violations of scientific ethics (fabrication of scientific data, falsification leading to distortion of research data, plagiarism, and false co-authorship, duplication, appropriation of other people's results, etc.).

The submission of an article to the Editorial Board means that the authors did not transmit the article (in original or translation into other languages or from other languages) to another journal (s), and this material has not been previously published. Otherwise, the article is immediately returned to the authors with a recommendation to reject the article for copyright infringement. Verbatim copying of more than 10 percent of another author's work is not allowed without indicating his authorship and links to the source. Borrowed fragments or statements must be made with the obligatory indication of

the author and the source. Excessive borrowing as well as plagiarism in any form, including unofficial quotations, paraphrasing, or appropriation of rights to the results of other people's research, is unethical and unacceptable. It is necessary to recognize the contribution of all persons, who in one way or another influenced the course of the research in particular the article, should contain references to works that were of importance in the conduct of the research. Among the co-authors, it is inadmissible to indicate persons who did not participate in the study.

If an error is found in work, it is necessary to notify the editor and together make a decision on the correction.

The decision to refuse publication of the manuscript is made at a meeting of the editorial board by the recommendations of the reviewers. An article not recommended for publication by the decision of the editorial board is not accepted for reconsideration. The refusal to publish is sent to the author by e-mail.

After the editorial board of the Journal decides on the admission of the article for publication, the editorial board informs the author about it and indicates the terms of publication. The originals of the reviews are kept in the editorial office for three years.

Технический секретарь: *К. Д. Мустафинов*

Верстка на компьютере: *Д. Н. Калкабекова*

Подписано в печать 27.12.2021.
Формат 70x100¹/₁₆. 7,4 п.л. Бумага офсетная. Тираж 500.