

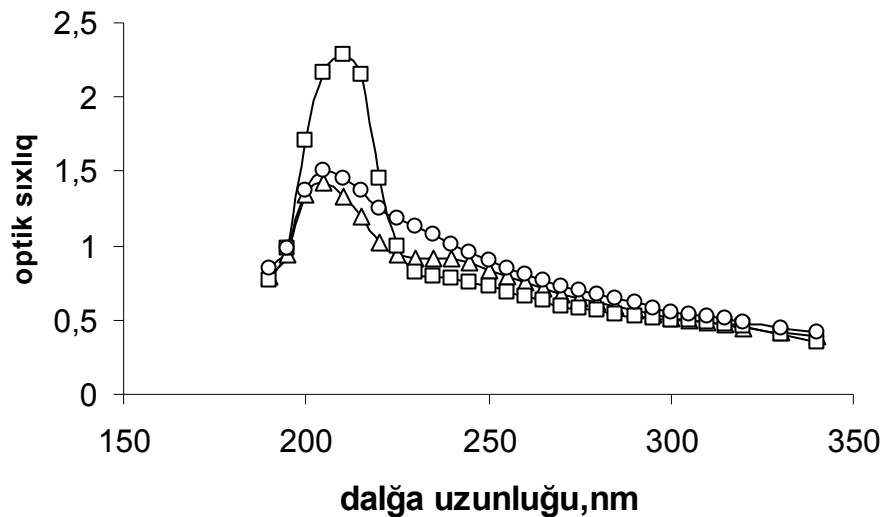
**AQAR GELİNİN SPEKTRAL XASSƏLƏRİNƏ POLIETİLENQLIKOLUN VƏ KALIUM
HİDROKSİDİN TƏSİRİ**

Məsimov E.Ə., Abbasov H.F., Hübətov Ş.Ə.

Fizika Problemləri İnstitutu, Bioloji Sistemlər Fizikası şöbəsi

Aqar gelinin xassələri verilmiş şəraitdə gelə əlavə edilmiş komponentlərin növündən, konsentrasiyasından kəskin asılı olub, əsasən, onların gelin strukturuna təsiri ilə müəyyən edilir [1,2]. Bu işdə polietilenqlikolun (PEQ) timsalında üzvi və kalium hidroksidinin timsalında isə qeyri-üzvi maddələrin gelin spektral xassələrinə təsiri spektrofotometrik üsulla öyrənilmişdir. Bidistillə suyu, 0.5% aqar geli, həmin gelin 0.5% KOH və 1% polietilenqlikol 1500 əlavə edilmiş məhlulları 4 eyni tipli küvetlərə doldurulmuş və SF 46 spektrofotometrində tədqiq edilmişdir.

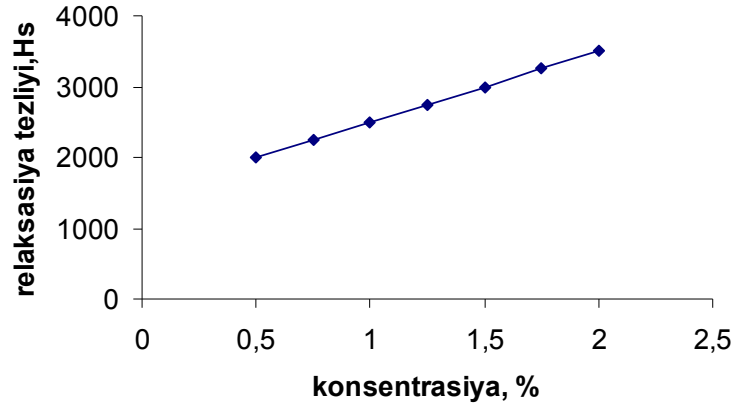
Şəkil 1-də həmin məhlulların nisbi optik sıxlığının nümunənin üzərinə düşən işığın dalğa uzunluğundan asılılıq qrafikləri göstərilmişdir. Nisbi optik sıxlıq bidistillə suyundan keçən işığın intensivliyinin (I_{meh}) gel və onun KOH və PEQ daxil edilmiş məhlullarından keçən işığın intensivliyinə (I_{su}) nisbətinin onluq loqarifmi şəklində hesablanmışdır: $D_n = \lg(I_{su} / I_{meh})$. Məlumdur ki, optik sıxlıq (D) işıqburaxma (T) ilə $D = \lg(1/T)$ düsturu ilə əlaqəlidir.



Şəkil 1. 0,5%-li aqar gelinin - \bigcirc , 0,5%-li aqar geli + 0,5% KOH məhlulunun - \square ,
0,5%-li aqar geli + 1% PEO məhlulunun - \triangle optik sıxlığının spektral asılılığı

Şəkildən görüldüyü kimi gelə PEQ əlavə etdikdə məhlulun nisbi optik sıxlığı çox cüzi artır, lakin gelə KOH daxil etdikdə ultrabənövşəyi oblastda 210 nm dalğa uzunluğunda məhlulun nisbi optik sıxlığı ciddi artır. Yəni, bu dalğa uzunluğunda məhlula daxil edilmiş KOH gelin işıqburaxmasını zəiflədir. Qrafikdən, həmçinin, görünür ki, digər dalğa uzunluqlarında gelə PEQ-in daxil edilməsi gelin optik sıxlığını artırır, KOH daxil etdikdə isə gelin optik sıxlığı azalır. Lakin bu təsirlər 210 nm – dəkinə nisbətən az olur. Bu nəticələri belə izah etmək olar. KOH məhlulda dissosiasiya edərək K^+ və OH^- ionlarına parçalanır və bu ionlar gelə hidrogen rabitələri ilə birləşmiş su molekullarını makromolekullardan qopardaraq özünə birləşdirir, nəticədə gel aqreqatlarının ölçüləri kiçilir və ölçüləri 210nm tərtibində olan aqreqatlar ultabənövşəyi işığı baxılan dalğa uzunluğunda intensiv difraksiyon səpir. Bu qənaətə gəlməyə

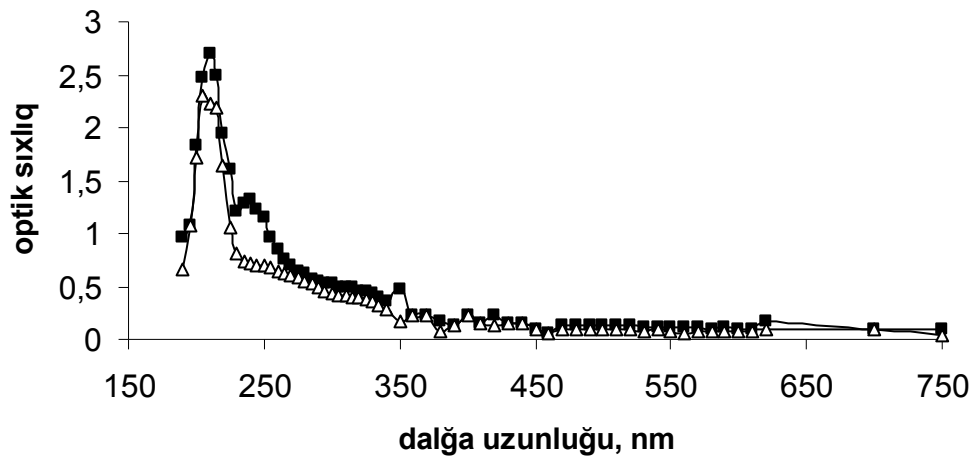
həm də suyun və gəlin strukturuna KOH –ın təsirinin aşağıtezlilikli dielektrik spektroskopiya metodu ilə tədqiqinin nəticələri də əsas verir. Bu metodla göstərilmişdir ki, həm KOH, həm də NaOH suyun strukturuna dağıdıcı təsir göstərir[3]. “Aqar geli + KOH” sisteminin relaksasiya tezliyinin KOH-ın məhluldakı konsentrasiyasından asılılığı həmin metodla tədqiq edilmiş və şəkil 2-də göstərilmişdir. Göründüyü kimi KOH-ın gəldə konsentrasiyası artdıqca məhlulun



Şəkil 2. “Aqar geli + KOH” sisteminin relaksasiya tezliyinin KOH-ın məhluldakı konsentrasiyasından asılılığı

relaksasiya tezliyi artır. Bu məhluldakı aqreqlərin ölçülərinin kiçilməsi, yəni onların dağılması deməkdir.

KOH-ın suyun termodinamik halına – strukturuna təsirini öyrənmək məqsədilə onun 0.5%



Şəkil 3. 0,5% KOH + bidistillə suyu - \(\backslash\) 1% KOH + bidistillə suyu - \(\int\) sistemlərinin işıqburaxmasının spektral asılılığı

- li və 1% - li duru sulu məhlullarının spektral xassələri də tədqiq edilmişdir (şəkil 3). Göründüyü kimi bu halda da 210 nm dalğa uzunluğunda məhlulun optik sıxlığı gələ 0.5% KOH əlavə edilmiş haldakı ilə təxminən bərabər olur. Bu bir daha KOH ın gələ təsirinin birbaşa su ilə əlaqədar olduğunu sübut edir. Suda KOH-ın konsentrasiyasını artırıdıda səpilmə nisbətən zəifləyir. Bu nəticəni su klasterlərinin KOH tərəfindən daha çox dağılması ilə izah etmək olar.

Ədəbiyyat:

1. Yamauchi A. Gels. Introduction. In Ocada Y., Kajiwara K. (eds), Gels Handbook, Volum 1, The Fundamentals. Academic Press, San Diego, 2001, p. 4-12
2. Хохлов А.Р., Кучанов С.И. Лекции по физической химии полимеров, Москва, Мир, 2000, с.81
3. Məsimov E.Ə., Abbasov H.F., Həsənov H.Ş., Paşayev B.G. KOH və NaOH-in duru sulu məhlullarının dielektrik xassələri, AMEA-nın Fizika İnstitutu, "Fizika", 2006, cild 12, N 3, s.11-14.

ПРИМЕНЕНИЕ ОЗОННОЙ ТЕХНОЛОГИИ В ОБЛАСТИ ФИЗИОЛОГИИ ЧЕЛОВЕКА, ЖИВОТНЫХ И РАСТЕНИЙ

Н.А.Мамедов

Институт физических проблем БГУ

Последние несколько лет группа ученых, занимающихся озонной технологией при отделе Физики Биологических систем совместно с учеными Института Физики НАНА и различных кафедр при Биологическом факультете БГУ интенсивно применяют озонную технологию в нижеследующих направлениях:

1. Изучают (совместно с сотрудниками Института Физики НАНА) влияние озона на развитие окислительных реакций в эритроцитах и в самом гемоглобине человека и животных (крыса, морская свинка и кролик), существенно отличающихся метаболизмом селена – одного из важнейших природных антиоксидантов. Изучена кинетика окисления озонном, генерируемым двухбарьерным коронным разрядом с концентрацией 4,6 мкг/л, как выделенного гемоглобина в растворе путём полного гемолиза дистиллированной водой и с последующим доведением 0,1 М буферным раствором фосфата натрия до гематокрита ≈ 1 , так и гемоглобина в эритроцитарной суспензии (гематокрит ≈ 1). Установлено, что накопление метгемоглобина (MetHb) в гемоглобиновых растворах идёт значительно быстрее, чем в суспензии эритроцитов.

Наибольшую устойчивость к окислению в обоих случаях показывает морская свинка, наименьшую – крыса, а человек и кролик занимают промежуточное положение [1].

Исследование индуцированного озонном гемолиза эритроцитов показало, что видовые различия для окислительного гемолиза эритроцитов менее значительны, чем для скоростей накопления MetHb в них. Оказалось, что цельные эритроциты морской свинки устойчивее к перекисному окислению, чем эритроциты крысы. Для тений эритроцитов эти различия менее выражены.

Полученные данные свидетельствуют в пользу того, что окисление гемоглобина (накоплением MetHb) является первичным звеном окислительного повреждения эритроцитов тем больше, чем больше Se- (ГП) глутатионпероксидазная активность. При этом для морской свинки антиоксидантная защита с помощью селена осуществляется преимущественно через защиту от окисления гемоглобина. Для крысы же существенное значение имеет защита мембран ГП механизмом.

2. Как известно из литературы при нормальных физиологических условиях относительная постоянство количества сахара в крови обеспечивается нейрогуморальным путём. Учитывая слабую изученность влияния на циркадный ритм гликемических реакций у животных, содержащихся в озонной среде нами (совместно с сотрудниками кафедры физиологии человека и животных) велись эксперименты с трёх и шести месячными животными при концентрации озона в озон-воздушной среде 2,4 мкг/л и 3,4 мкг/л (время полураспада озона составляет 15 мин). Количество сахара в крови определяли экспресс методом.

Исследования велись в соответствии с ритмом дня, т.е. в 9⁰⁰ утра, в 13⁴², 17⁴², вечером в 21⁴², 1⁴² ночи, 1⁴² и 9⁴² утра. В каждом случае из крайней вены уха животного отбирали кровь для определения уровня сахара в крови животного.

Результаты экспериментов удовлетворительно подтверждают, что при 7 минутном контакте животных с озоном уровень сахара в их крови, также, как у интактных, соответствует ритмам дня, но на 15-й, 30-й и 60-й минутах и в 13⁴², 17⁴² и в 21⁴² уровень сахара в крови несколько завышена. В остальных временных интервалах уровень сахара в крови соответствует прежним значениям.

Из полученных результатов вытекает, что у животных, содержащихся в озонной среде, роль эпифизов в нейрогуморальном регулировании циркадного ритма гликемических реакций, несомненна [2, 3].

3. Из-за токсичности озона, его действие на всхожесть однодольных семян пшеницы мало изучено. Объектами исследований были выбраны семена пшеницы (совместно с сотрудниками кафедры физиологии растений). Сначала семена сутки вымачивались, а затем находились в камере с контактным временем от 1 мин до 210 мин. Концентрация озона менялась в пределах от 3,4 мкг/л до 7,2 мкг/л. Результаты экспериментов показали, что озон на всхожесть действует по-разному. В малых концентрациях всхожесть увеличивается на 3%, а в больших концентрациях наблюдается уменьшение всхожести [4].

4. При обработке семян пшеницы гидрохиноном (совместно с сотрудниками кафедры Генетики и дарвинизма) после их обработки в условиях озона при разных экспозициях озон, вёл себя двояко – при малых экспозициях как антимуtagenное, а при больших – мутагенное вещество.

Исследования показали, что при малых экспозициях (до 3 мин) воздействие озона незначительно или в некоторых случаях даже уменьшается всхожесть семян и делимость клеток по сравнению с контрольными зёрнами. Уменьшение всхожести наверняка связано с образованием отрицательных ионов кислорода за пределами клеточной мембраны при распаде озона и изменением мембранного потенциала покоя. Далее, с увеличением времени экспозиции (15-18 мин) наблюдается прямой рост всхожести семян, количества делимых клеток и хромосомных изменений, т.е. изменение активности клеток. Эти опыты показывают, что до определённого значения экспозиции озон ведёт себя как антиоксидант, то есть как антимуtagenное вещество. Озон может взаимодействовать практически со всеми типами органических соединений (с образованием радикалов) [5, 6].

В настоящее время исследования продолжаютя во всех вышеизложенных направлениях.

ЛИТЕРАТУРА

1. Т.М.Гусейнов, Н.А.Мамедов, Р.Т.Гулиева, Ф.Н.Яхьяева. Озон как окислитель в эритроцитах животных, отличающихся метаболизмом селена. Международная научная конференция «Молекулярные, мембранные и клеточные основы функционирования биосистемы». 6-8 октября 2004, Минск, Беларусь, Сборник статей, часть, стр.162-164.
2. Ə.Н.Əliyev, N.Ə.Məmmədov, N.C.Qasimova, Jalə N.Əsədi Kəhər. Ozon qazının 3-aylıq heyvanların qanında şəkərin miqdarının dəyişməsi. «Biologiyada inkişaf və müasirlik» mövzusunda Respublika Elmi Konfransının materialları (28-29 aprel) 2004. BDU, s..110-111.
3. Ə.Н.Əliyev, N.Ə.Məmmədov, N.C.Qasimova, Jalə N.Əsədi Kəhər. Ozon qazının 6-aylıq heyvanlarda postnatal ontogenezdə ozon qazının qlikemik reaksiyaların sirkad ritminin dəyişməsinə təsiri. «Biologiyada inkişaf və müasirlik» mövzusunda Respublika Elmi Konfransının materialları (28-29 aprel) 2004. BDU, s..111-112.
4. N.A.Qasimov, N.Ə.Məmmədov, N.Ö.Əliyeva, S.M.Tahirli, N.F.Abdullayeva.

Ozonun birləpəli bitkilərin toxumlarının cücərməsinə təsiri. «Biologiyada inkişaf və müasirlik» mövzusunda Respublika Elmi Konfransının materialları (28-29 aprel) 2004. BDU, s.126-127.

5. М.Ш.Бабаев, Н.А.Мамедов, Б.Б.Давудов, Ш.Ш.Алекперов, Л.М.Магеррамова. Активность семян пшеницы сорта «ТƏRƏQQİ» в зависимости от времени воздействия озона. Azər.Respub.Təhsil cəmiyyəti, Kimya, Biologiya, Tibb. Bakı, 2005, №1, s.101-105.
6. М.Ш.Бабаев, Н.А.Мамедов, Б.Б.Давудов, Н.З.Бахшалиева, Ш.Ш.Алекперов. Антимутагенная активность гидрохинона у семян пшеницы различных сортов в зависимости от времени воздействия озона. «Biokimyəvi nəzəriyyələrin aktual problemləri» Elmi-praktik konfransın materialları. Gəncə. 2007, səh.73-78.

MAYE TSİKLİK KARBOHİDROGENLƏRİN DİNAMİK ÖZLÜLÜYÜ

E.Ə.Eyvazov, N.C.Məmmədova, Y.M.Abbasov, A.V.İbrahimli

Azərbaycan Dövlət Pedaqoji Universiteti

Kondensə olunmuş hallar fizikanın elmi və praktiki baxımdan ciddi maraq kəsb edən məsələlərindən biri mayələrin özlülüyünün mahiyyətə aşkarlanmasıdır. Çoxsaylı nəzəri və təcrübi tədqiqatların olmasına baxmayaraq, hal-hazırda özlülüyün fiziki mexanizminə dair vahid bir model, yaxud nəzəriyyə mövcud deyil [1]. Son deyilən maye aqreqat halının dinamik xotik quruluşa və statistik yaxın nizama malik olmuşdur. Praktiki məqsədlər üçün, molekullarası qarşılıqlı təsirin növündən və hal parametrlərin yerləşmə intervalından asılı olaraq, bu və ya digər modellərdən istifadə olunur.

Hazırkı tədqiqatda fərz olunur ki, mayenin özlülüyü bilavasitə qonşu təbəqələr arasında molekulların fərdi keçidləri vasitəsi ilə impuls daşınması nəticəsində deyil, lay molekullarının rəqsi hərəkəti vasitəsilə, yəni laylararası enəji mübadiləsi ilə baş verir. Apriori olaraq qəbul edilir ki, stasionar sürət qradienti sahəsində laylararası ilişmə (sürtünmə) qüvvəsi Nyuton düsturu ilə verilir və bu halda dinamik özlülük

$$\eta = F_3 \left[\left(\frac{\partial v}{\partial r} \right) ds \right]^{-1} = B F_s \quad (1)$$

ifadəsi ilə təyin olunur. Burada $B = \left[\left(\frac{\partial v}{\partial r} \right) ds \right]^{-1}$ -qərarlaşmış (lominar) axın üçün sabit

kəmiyyətdir [2]. Göründüyü kimi Nyuton mayesinin dinamik özlülüyü, birqiymətli olaraq, laylararası ilişmə, başqa sözlə, molekullarası cəzətmə qüvvəsi ilə təyin olunur. (1)-ə mayenin fərdiliyini xarakterizə edən heç bir parametr daxil olmadığından o, universal xarakter daşıyır.

Aydındır ki, hər bir fərdi halda $\eta = \eta(T)$ -nin hesablanması üçün F_s -in analitik ifadəsi özlülüyün iki ixtiyari temperaturda təcrübi qiyməti məlum olmalıdır.

Əvvəllər, psevdopotensiallı mayələr üçün (1)-in səmərəliliyi və ondan alınan nəticələrin təcrübi nəticələrlə 3-5% dəqiqliklə uzlaşması [3]-də geniş şərh olunmuşdur.

Adı və kimyəvi düsturu	$A_2 10^{-4}$	m	Temperatur intervalı,
Tsiklopentan (C_5H_{10})	8,56	3,36	$253 \leq T \leq 323$
Metilsiklopentan (C_6H_{12})	38,7	3,60	$253 \leq T \leq 333$
Etilsiklopentan (C_7H_{14})	21,1	3,47	$253 \leq T \leq 373$
Propilsiklopentan (C_8H_{16})	221	3,85	$253 \leq T \leq 373$
Tsikloheksan (C_6H_{12})	$215 \cdot 10^3$	5,02	$253 \leq T \leq 353$
Metilsikloheksan (C_7H_{14})	3410	4,32	$253 \leq T \leq 353$
Etilsikloheksan (C_8H_{16})	3345	4,29	$253 \leq T \leq 373$

Maye tsiklik karbohidrogenlərdə molekullarası qarşılıqlı təsirin Born potensialı $F_3 = A_1 r^{-n}$, ilə verildiyini qəbul etməklə göstərmək olur ki, dinamik özlülük $\eta = A_2 T^m$ qanununa müvafiq dəyişir. Cədvəl 1-də bir sıra karbohidrogenlər üçün m -in qiymətləri cədvəl 2-də isə, nümunə olaraq, etilsiklopentanın (C_7H_{14}) özlülüynün cədvəl (η_c) və tərəfimizdən hesablanmış (η_h) qiymətləri verilmişdir.

Cədvəl 2

	253	263	273	283	303	323	333	353	373
η_c	960	829	725	637	506	412	376	320	270
η_h	967,1	8453	742.6	$\frac{655}{5}$	517.2	414.3	372.7	304.4	251.1
η_h	1.007	1.019	1.024	1.029	1.022	1.005	0.992	0.951	$\frac{0.93}{1}$

η_c [4]-dən götürülmüşdür. Cədvəl 2 göstərir ki, özlülüynün tərəfimizdən hesablanmış (η_h) və cədvəl (η_c) qiymətləri kifayət qədər kiçik xəta ilə bir-biri ilə uzlaşır.

Beləliklə, hazırki işdə ilk dəfə [3] -də təklif olunan fenomenoloji metoddla, maye tsiklik karbohidrogenlərin geniş temperatur intervalında özlülüynü hesablanmış və götürülən mayelər üçün molekullarası qarşılıqlı təsirin Born potensialı ilə verilməsinin mümkünlüyü müəyyənləşdirilmişdir.

- [1] De Bur. Teoriya jidkoqo sostoyaniya U.F.N.51.1986.
[2] E.Ə.Eyvazov və b. Molekulyar fizika və termodinamikaya giriş. B.2010.
[3] E.A.Eyvazov. Phusics.XV. №1. B. 1009
[4] Reference book under editorshop of acad. I.K. Kikoin. Tables of Physcal values. M.1976.

HÜCEYRƏ MEMBRANLARINDAN PASSİV VƏ AKTİV DAŞINMALAR HAQQINDA

K .M. Budaqov, Q .M. Bayramov, Ç. İ. İbrahimov

BDU, Fizika Problemləri E T İ

Maddələrin membranlardan keçərək passiv daşınmasının üç ən ümumi forması sadə diffuziyadan, məsamələrdən diffuziyadan, xüsusi daşıyıcılar vasitəsi ilə gedən diffuziyadan ibarətdir.

Lipid bitəbədələrindən sadə diffuziya edərək daşınan molekullar Fik tənliyinə: $I = -D \cdot dp/dt$ (burada D -diffuziya əmsalı, dp/dx -isə maddə miqdarının qradiyentidir), ionlar isə Nernst-Plak tənliyinə: $I = -D \cdot dp/dx - U_m ZeF \cdot d\phi/dx$ (burada Ze -ionun yükü, F -yüke təsir edən qüvvə, $d\phi/dx$ -isə potensialın qradiyentidir) tabe olurlar.

Tənliklərdən görüldüyü kimi, birinci tənlik yalnız konsentrasiyanın qradiyenti ilə, ikinci tənlik isə həm konsentrasiya qradiyenti ilə həm də elektrik sahəsinin təsiri ilə xarakterizə olunur

Canlı hüceyrələrdə belə diffuziya oksigen və karbon gazlarının keçidini təmin edir. Bir sıra pilyhəllədiciləri dərman maddələri və zəhərləyiciləri maddələr lipid bitəbəqələrindən keçərək hüceyrə daxilinə daşır. Lipidlərin xüsusi konfigurasiyası membranların eni istiqamətində belə keçidlərin "ilgək" şəkilində getməsinə şərait yaradır. Lakin bu sadə diffuziya olduqca yavaş getdiyindən, hüceyrələrin qida maddələri ilə təmin olunması lazımi dərəcədə getməyir. Ona görə də membranlardan passiv daşınmanın digər mexanizmi sayılan kanallardan (məsamələrdən) diffuziya və xüsusi daşıyıcılar ilə kompleks yaradaraq gedən diffuziyadan istifadə olunur. Son iki diffuziya "yüngülləşmiş" diffuziya adlanır .

Məsamə və kanal membranın elə hissəsinə deyilir ki, orada lipid və ya zülal molekullarının yaratdığı keçidlər mövcud olsun. Bu kanallar membranlardan yalnız kiçik molekullar sayılan; su, oksigen molekullarını yox, həm də daha böyük ionların keçməsinə imkan verir.

Daha bir "yüngülləşmiş" diffuziya – ionların xüsusi molekullar vasitəsi ilə daşınmasıdır. Bu halda daşıyıcı tərənən və ya tərənəmz ola bilər. Məsələn, antibiotik maddə olan, valinomisin molekulları kalium ionu ilə birləşdikdə, lipidlərdə həll ola bilən kompleks yaradaraq, membranlarda eninə istiqamətdə, müvəqqəti xətt (yol) yaradır və natrium ionlarını bir molekuldan digərinə estafet şəklində ötürür. Maddələri bu yolla daşıyan molekullar ionoforlar adlanır.

Membranlardan passiv daşınma ilə yanaşı molekulların böyük konsentrasiyalı oblasta, ionların isə elektrik sahəsinin yaratdığı qüvvələrin əksi istiqamətində daşınması da baş verir. Belə daşınma aktiv daşınma adlanır.

Passiv daşınma istənilən yarımnüfuz membranlarda baş verirsə, aktiv daşınma isə yalnız bioloji membranlarda baş verir.

Aktiv daşınma hesabına hüceyrələrin fəza qeri-bircinsliliyi saxlanılaraq (hüceyrədaxili mühit hüceyrəxarici mühitdən fərqləndiyi üçün), elektrik potensialının qradiyenti yaranır və saxlanılır. Membranlardan maddələrin aktiv daşınması ATF molekullarının hidroliz olunmasından alınan enerji hesabına baş verir.

Müasir təsəvvürlərə görə bioloji membranlarda xüsusi inteqral zülallar (ATFaza daşıyıcıları) adlanan ion nasoslari mövcuddur. Bunlar Na^+ , K^+ , Ca^{++} və H^+ ionlarının membranlardan daşınması ilə nəticələnən nasoslardır.

Natrium-kalium nasosunun işləməsi Na^+ və K^+ ionlarının daşınması zamanı mövcud ola bilər. Yəni hüceyrə xaricində K^+ ionları olmazsa onda Na^+ ionlarının hüceyrə daxilindən onun xaricinə aktiv daşınması baş verməyəcək. Başqa sözlə Na^+ ionları hüceyrələrin daxilində, K^+ ionları isə hüceyrə xaricində aktivləşdiricidir. Bir akt zamanı üç Na^+ ionu hüceyrə xaricinə, əvəzində isə iki K^+ ionu hüceyrə daxilinə daşınır. Bu keçid üçün bir ATF molekulunun enerjisi sərf olunur ki, onun da hesabına membranda potensiallar fərqi yaranıb, saxlanılır. Nəticədə hüceyrədaxili mühit mənfi hüceyrəxarici mühit isə müsbət yüklənir.

Qeyd etmək lazımdır ki, şəkərlərin, aminturşularının və nukloidlərin də membranlardan aktiv daşınması mövcud olsa da, bu proseslərin kinetikasi kifayət qədər öyrənilməyib.

Canlı toxumaların da, fəaliyyəti elektrik hadisələri ilə tənzim olunur. Hal-hazırda canlı hüceyrələrdə və toxumalarda elektrik potensialının yaranması və paylanması əsas fiziki hadisə kimi hesab olunur.

Hüceyrələrin, toxumaların və orqanların iki nöqtəsi arasında yaranan potensiala biopotensial deyilir. Biopotensial hüceyrələrin və toxumaların funksional vəziyyətini əks etdirir.

Canlı hüceyrələr enerjinin tutulmasını, saxlanmasını və ötürülməsini kimyəvi formada, əsasən də adenozintrifosfat (ATF) molekulalarında mövcud olan enerji şəkilində yerinə yetirir.

Canlı hüceyrələrdə biomolekulların əsas sinfi çox iri molekulardan ibarət olur. Məsələn, E.- coli bakteriyasının hüceyrəsinin ümumi kütləsinin əksər hissəsini digər hüceyrələrdə olduğu kimi, su təşkil edir. Qeyri-üzvi duzların və digər mineralların payına isə az hissə düşür. Praktiki olaraq E.-coli hüceyrəsinin quru hissəsi dörd əsas molekulardan; zülallar, nuklein turşusu, polisaxaridlər və lipidlər kimi üzvi birləşmələrdən ibarətdir.

Bütün canlı orqanizmlərdə zülallar gen məhsullarının daşıyıcısıdır. Hüceyrələrin membranlarında yerləşən bir sıra zülallar bəzi maddələrin hüceyrə daxilinə və xaricinə daşınmasına kömək edir. Biomolekullar bir sıra bioloji funksiyaları yerinə yetirərkən də, zülallar iştirak edir. Nuklein turşuları, DNT və RNT bütün hüceyrələrdə genetik informasiyaları saxlamaq və reallaşdırmaq kimi funksiyaları yerinə yetirir. DNT müxtəlif növ genetik informasiyaları saxlamağa xidmət edirsə, RNT onların reallaşması üçün lazım olan zülalların sintezi prosesində iştirak edir.

Polisaxaridlər əsasən iki funksiyayı yerinə yetirir. Məsələn, onlardan biri olan kraxmal özlüyündə hüceyrələri enerji ilə təmin etmək üçün müxtəlif növ ehtiyat yanacaq rolunu oynayarsa, hüceyrəxarici struktur komponentlərini sellüloza təmin edir.

Lipidlər piy və piyəbənzər maddələrə aid olduğundan, birinci növbədə membranların əsas struktur komponentlərini təşkil edir, ikinci növbədə isə bol ehtiyat enerji mənbəyi olan "yanacaq" rolunu oynayır .

Qeyd etmək lazımdır ki, bu dörd əsas sinif bioolekullar bir ümumi xüsusiyyətə malik olub, yüksək molekulyar kütləli, nisbətən iri strukturlu makromolekullar adlanırlar. Müxtəlif zülalların makromolekul kütləsi əsasən 0,5 - 1 milyon arasına düşür. Bəzi nuklein turşularının molekulyar kütləsi milyarda da çata bilər (kraxmallar, polisaxaridlər). Elə lipidlər də var ki, çox kiçik ölçüyə (mol kütləsi 50-1500) malik olur. Ancaq, adətən lipid molekulaları bir-biri ilə birləşərək (hətta 1000 molekul) çox böyük strukturlu makromolekullar sistemi yaradır. Bu sistem əsasən hüceyrə membranlarının əsasını təşkil edir.

Molekulların membranda mövcud olan yüüklüyünün və hissəciklərin membrandan diffuziyasının ölçülməsi göstərir ki, lipid bitəbəqəsi özünü maye kimi aparır Eyni zamanda membran özünü nizamlı struktur kimi aparır. Bu iki fakt onu göstərir ki, lipidlər membranlarda fəaliyyət göstərdikdə, özünü maye kristal kim aparır. Lipid bitəbəqələrinin özlülüyü suyun özlülüyündən iki tərtib böyük olub, bitgi yağlarının özlülüyünə yaxındır.

Lakin temperaturun azalması ilə faza keçidi baş verərək, lipid bitəbəqəsi gel halına çevrilir. Bu faza keçidi zamanı lipid bitəbəqələrində kanallar əmələ gəlir ki, bunun da nəticəsində membranlardan müxtəlif ionlar və ölçüləri 1-3 nm olan kiçik molekululu birləşmələr keçə bilər.

1. Lodish H, Berk A, Zipursky L.S, et/a 2007. Молекулярная биология клетки. ISBN, 1296.
2. Shana Groescler, Tohu Le, Zara Gonzalez (2002). Структура мембраны. (SWF), Коллеж Davidson, Retrieved, 2007, 01-11

ОЗОННАЯ ТЕХНОЛОГИЯ ОЧИСТКИ ФЕНОЛОСОДЕРЖАЩИХ ВОД

Мамедов Н.А., Алекберов Ш.Ш.

*Бакинский Государственный Университет,
Институт Физических Проблем*

В настоящее время, в связи с ухудшением экологической ситуации, в технологии водоподготовки особое место занимает защита питьевой воды от фенолосодержащих загрязнителей.

Загрязнение фенолами может происходить как за счет природных, так и искусственных, в основном промышленных, источников. Источниками загрязнения в природных водах являются гниющие растительные и животные остатки (содержание фенолов в водоемах может достигать 0,03 мг/л [1]), грунтовые воды (среднее содержание фенолов 1,1 мг/л), артезианские воды (среднее содержание фенолов 1,2 мг/л), подземные воды нефтегазовых месторождений (среднее содержание 0,6 – 3,0 мг/л) [1]. Особое внимание требуют промышленные источники, в сточных водах которых содержится большое количество фенолов (в стоках коксохимических заводов содержание фенолов достигает 270 мг/л, шпалопропиточных заводов – 6,9-16,1 мг/л, в стоках нефтеперерабатывающих заводов – 0,2-20 мг/л, предприятий термической переработки топлива – от 500 до 1500 мг/л, или до 12 г/л, в стоках красnodубного производства до 5 г/л [1]). В таблице 1 приводится количество фенолов в подземных водах нефтегазоносных территорий Азербайджанской Республики [1].

ПДК для фенола составляет 0,001 мг/л, а фенольный индекс – 0,25 мг/л, из чего становится ясно насколько важна очистка загрязненных вод от фенолов [1,2].

Фенолы – ароматические соединения, в которых гидроксильная группа замещает водородный атом бензольного кольца. По количеству гидроксильных групп фенолы разделяются на одноатомные, двухатомные и шестиатомные (для бензола). Некоторые физические и химические свойства нафтолов, фенантролов и других многоядерных ароматических соединений соответствуют фенолам и поэтому их называют многоядерными фенолами [1].

Таблица 1

Количество фенолов в подземных водах нефтегазоносных территорий Азербайджанской Республики

Площадь	Фенолы, мг/л	
	летучие	нелетучие
Карадаг	13,77	0,5
Лок-Батан	2,53	3,37
Ясамальская Долина	7,31	15,69

Смесь фенолов более токсична чем собственно фенол, и обладает синергическим эффектом, а продукты глубокого окисления фенолов озоном практически нетоксичны и некумулятивны [1].

В работе рассматривается процесс разложения фенолов под воздействием озона. Как

известно [1,2] разложение фенола под воздействием озона находится в зависимости от температуры. Оптимальные условия озонирования фенолсодержащих стоков наблюдаются в щелочной среде ($pH \approx 12$) и в области повышенной температуры ($50 - 55^\circ C$).

Поскольку на сегодняшний день одним из самых эффективных методов обеззараживания считается озонирование, с целью изучения очистки загрязненных вод, а также для сопоставления с теоретическими расчетами нами проводились исследования по озонированию водных растворов фенола (C_6H_5OH) [1,2]. Как видно из таблицы 2, увеличение концентрации озона в озono-воздушной смеси уменьшает время процесса озонирования.

Таблица 2

$t, (мин)$	$C_{фенол} (мг/л)$ ($C_{озон}=4 \text{ мг/л}$)	$C_{фенол} (мг/л)$ ($C_{озон}=4,5 \text{ мг/л}$)	$t, (мин)$	$C_{фенол} (мг/л)$ ($C_{озон}=4 \text{ мг/л}$)	$C_{фенол} (мг/л)$ ($C_{озон}=4,5 \text{ мг/л}$)
0	45,5	45,5	45	1,2544	0,01568
5	34,296	32,928	50	0,6272	0,000314
10	27,2832	22,8928	55	0,3136	0
15	21,0112	15,68	60	0,1568	0
20	15,68	10,0352	65	0,09408	0
25	10,6624	6,272	70	0,04704	0
30	7,2128	3,136	75	0,003136	0
35	4,3904	1,568	80	0,001254	0
40	2,5088	0,3136	85	0	0

С другой стороны, при исследовании влияния различных активизирующих факторов на поверхностное натяжение различных вод, нами также обнаружено [4,5] уменьшение поверхностного натяжения при озонировании воды. До озонирования естественная вода имеет $\sigma = 68,9 \cdot 10^{-3}$ н/м, а после озонирования $\sigma = 57,6 \cdot 10^{-3}$ н/м, что приводит к мысли о наличии зависимости скорости разложения фенола от величины σ . А это, в свою очередь, может привести к уменьшению удельного расхода озона.

Из известной таблицы зависимости $\sigma = f(t(^\circ C))$ от температуры видно, что при $t = 55^\circ C$ $\sigma = 66,9 \cdot 10^{-3}$ н/м. В дальнейших экспериментах непременно надо следить за температурой и за величиной σ одновременно. С уменьшением значения σ также ожидается уменьшение расхода озона для разложения одинакового количества фенола.

Л и т е р а т у р а :

1. Алекберов Ш.Ш. О механизме озонной обработки фенолосодержащих вод. Вестник Бакинского Университета. №2, 2007, с. 157 – 164.
2. Алекберов Ш.Ш. Электросинтез озона в барьерных разрядах, исследование его электронной структуры и физических свойств. Диссертация представленная на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. Баку, 2007, 152 с.
3. Алекберов Ш.Ш. Озонная технология на службе нефтяного хозяйства. Актуальные проблемы физики, Материалы IV Республиканской научной конференции.
4. Мамедов Н.А., Гарибов Г.И., Алекберов Ш.Ш. Некоторые аспекты воздействия электрического разряда и озона на воду. Проблемы энергетики, № 4, 2005, с.91-94.
5. Мамедов Н.А., Гарибов Г.И., Алекберов Ш.Ш. Влияние активизирующих факторов на поверхностное натяжение питьевой воды. Вестник Бакинского Университета. №4, 2005, с. 133 – 135.

NİKEL TİOİNDATIN SU MÜHİTİNDƏN ALINMASI

Bayram Zülfüqar oğlu Rzayev, Məftun Eynulla oğlu Əliyev,

Aliyə Bayram qızı Rzayeva

AMEA Naxçıvan Bölməsinin Təbii Ehtiyatlar İnstitutu

İndium birləşmələri elektron texnikasında – yarımkəçiricilər, yüksək və aşağı temperaturlu tranzistorlar, termistorlar, infraqırmızı detektorlar, pezoelektrik датçıklar hazırlanmasında geniş istifadə olunur [1].

Yarımkəçirici birləşmələrin nazik təbəqələrinin alınmasında istifadə olunan üsulların əksərində ilkin material olaraq əsas maddənin narın əzilmiş tozundan istifadə olunur: vakuumda buxarlandırma, elektroforetik çökdürmə, həlledicini buxarlandırmaqla əsas maddənin səthə çökdürülməsi və s.

Son on ildə nazik təbəqələrin alınmasında su məhlulundan kimyəvi üsulla altlıq üzərinə çökdürmə metodlarına geniş rast gəlinir. Yerinə yetiriləcək işə uyğunluğunu nəzərə alıb o metodlardan birinin qısa məzmununu veririk.

İşin tədqiqatçıları [2] $CdIn_2S_4$ yarımkəçirici birləşməsinin şüşə altlıq üzərində nazik təbəqəsini almışlar. Bunun üçün altlıq ardıcıl olaraq $CdSO_4$, Na_2S , $InCl_3$ və Na_2S məhlullarına salınmış və müəyyən müddət saxlanmışdır. Təbəqənin qalınlığı 0,44 mkm, quruluşu nanokristallıqdır. Qadağan olunmuş zonanın optiki eni 2,12 eV, xüsusi müqaviməti $10^4 \text{ Om} \cdot \text{sm}$ -dir.

İşdə qarşıya qoyulan məqsəd indium(III)xlorid məhlulundan indiumu natrium sulfidlə indium(III)sulfid şəklində çökdürmək, natrium sulfidin artığını əlavə etməklə natrium tioindatı almaq və onun nikel sulfatla qarşılıqlı təsirdən nikel tioindatın alınma şəraitini araşdırmaqdır.

10 ml 0,1M $InCl_3$ məhlulu götürüb 100 ml-lik stəkana tökülür və 40 – 50°C-ə qədər qızdırılır üzərinə az hissələrlə 0,1M Na_2S məhlulu əlavə edilir. Dərhal narıncı rəngli In_2S_3 çökür. Çöküntü ayrıldıqdan sonra Na_2S məhlulunun əlavə edilməsi davam etdirilir. Tam çökmə alındıqdan sonra əlavə olunan natrium sulfid məhlulunun yeni miqdarı indium(III)sulfidin narıncı rəngini bozuntul ağ rəngə çevirir. Deməli, In_2S_3 natrium sulfidin artıq miqdarında həll olaraq natrium tioindata keçir. Çöküb ayrılmış In_2S_3 -ə Na_2S əlavə etdikdə reaksiyanın qurtarmasını mühitin pH-nın neytraldan qələviyə doğru kəskin dəyişməsi ilə də müəyyən etmək olar. Buna baxmayaraq çevrilmənin tamlığını Na_2S məhlulu əlavə etməklə yoxladıqdan sonra çöküntü süzgec kağızından süzülür və sulfid ionlarının qurtarmasına qədər distillə suyu ilə yuyulur. Çöküntülər əvvəlki çöktürülmə stəkanlarına miqdarən keçirilir və üzərinə müxtəlif miqdarlarda 0,1 M $NiSO_4$ məhlulu əlavə edilir. Çöküntülərin solğun bozuntul rəngi tünd qəhvəyi rəngə çevrilir. Çöküntülər nikel ionu qurtaranadək distillə suyu ilə yuyulur (dimetilqlioksimlə sınaq). Şüşə putə №3-dən süzülərək 105°C-də sabit kütləyə gətirilir. Nəticələr cədvəl 1-də verilir.

Cədvəl 1

Nikel tioindatın alınmasına nikel sulfatın altlığının təsiri

0,1M $InCl_3$, ml	0,1M $NiSO_4$, ml	Nikel tioindat		
		q		%
		hesabl.	tapılm.	
10	5,0	0,466	0,4104	98,52
---	5,2	---	0,4151	99,65
---	5,4	---	0,4140	99,42
---	5,8	---	0,4145	99,49

Cədvəldəki rəqəmlərdən aydın görünür ki, indium(III)xloriddən ara reaksiyaları aparmaqla nikel tioindatı miqdarən almaq olar. Eyni zamanda nikel sulfat məhlulunun 0,10 M artığının götürülməsi nikel tioindatın alınmasına mane olmur.

Nikel tioindatın çökmə və süzülmə sürətləri təyin edilmiş və müəyyən olmuşdur ki, 50°C-də çökdürülmüş nikel tioindat asan çöküb ayrılan və asan süzülən birləşmədir.

Nikel tioindatın elementar analizi aparılmışdır. Bunun üçün quruducu şkafda 105°C-də sabit kütləyə gətirilmiş 0,5410 q nikel tioindat nümunəsi 100 ml-lik stəkana tökülür üzərinə az hissələrlə qatı nitrat turşusu əlavə edilir. Çöküntü parçalanıb qurtarıqdan sonra turşu əlavə edilməsi dayandırılır. Bu zaman indium və nikel nitrat duzlarına keçir. Ayrılan kükürd çətin həll olduqda məhlul süzülür və 200 ml-lik ölçülü kolbaya keçirilir. Kolbadan 20 ml-lərlə götürüb 100 ml-lik stəkanlara tökülür. İndiumu təyin etmək üçün məhlula ammoniyak əlavə edilir. Məhlulda olan nikel ammoniyakla $[\text{Ni}(\text{NH}_3)_4](\text{NO}_3)_2$ tərkibli kompleks əmələ gətirərək çökmür, məhlulda qalır. İndium isə $\text{In}(\text{OH})_3$ tərkibli ağ rəngli çöküntü əmələ gətirərək (hidroksidin həllolma hasilı $1,41 \cdot 10^{-33}$) məhluldan asanlıqla ayrılır. Süzgəc kağızından süzüb qurutduqdan sonra platin putədə 400°C-də közərdildikdən sonra indium(III)oksid şəklində çəkilir.

İndiumun süzüntüsündə nikel dimetilqlioksimlə təyin edilir. Kükürd, barium xloridlə çökdürülərək barium sulfat şəklində çəkilir. Analizlərin nəticələri cədvəl 2-də verilir.

Cədvəl 2

Nikel tioindatın elementar analizi

Nikel tioindat, q	Tərkibdə %.					
	Ni		In		S	
	nəzəri	praktiki	nəzəri	praktiki	nəzəri	praktiki
0,5410	14,093	14,081	55,124	55,03	30,783	30,66

Analiz nəticələrindən aydın olur ki, elementlərin təcrübədə tapılan miqdarları onların formula görə hesablanmış miqdarına müvafiq gəlir. Bu da bir daha nikel tioindatın formulunun $\text{Ni}(\text{InS}_2)_2$, yaxud NiIn_2S_4 -ə uyğun gəldiyini təsdiq edir.

Sonda onu qeyd etmək istərdik ki, məqalədə işlədilən reaktivlərdən istifadə edərək NiIn_2S_4 birləşməsinin nazik təbəqəsinin alınması istiqamətində də təcrübələr aparılmışdır. Şüşə altlıq ardıcıl olaraq müəyyən müddətə və müəyyən fasilə ilə NiSO_4 , Na_2S , InCl_3 və Na_2S -in duru məhlullarına salınaraq nazik təbəqə alınmışdır. Bu sahədə tədqiqatlar davam etdiriləcəkdir.

ƏDƏBİYYAT

1. Яценко С.П. Индий свойства и применение. М.: «Наука», 1987, 256 с.
2. Pathan H.M., Sankapal B.R., Lokhande C.D. Preparation of CdIn_2S_4 thin films by chemical method. // Indian J.Eng. and Mater. Sci. 2001 8, № 5 с. 271 – 274.

«ИЗУЧЕНИЕ ДИНАМИКИ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК КОНЦЕНТРИРОВАННЫХ БИНАРНЫХ РАСТВОРОВ ЦИКЛОПЕНТАНОЛА В АЦЕТОНЕ»

Усейнова С.М.

Бакинский Государственный Университет

Для измерения диэлектрической проницаемости ϵ_0 чистого циклопентанола и его бинарных растворов для различной концентрации в ацетоне, а также изучения температурной зависимости ϵ_0 использован вне дисперсии электромагнитных волн был использован резонансный метод принцип которого заключался в измерении

емкости пустого измерительного конденсатора, и емкости того же конденсатора, но заполненного испытуемой жидкостью.

Если C_0 – емкость пустого конденсатора, то емкость конденсатора, заполненного жидкостью, будет равно ε_0 где ε_0 – статическая диэлектрическая проницаемость жидкости.

Была разработана новая конструкция измерительного конденсатора позволившая существенно расширить температурный интервал ε_0 . Конденсатор был снабжен маломощной обогревательной печью, а сама ячейка погружалась в сосуд Дюара с жидким азотом. Незначительным изменением тока обогревательной печи, можно было регулировать температурный режим измерительного конденсатора от -50°C до $+50^{\circ}\text{C}$. При этом точность отсчета температуры конденсатора не превышала $\pm 0,05^{\circ}\text{C}$. В установке измерения ε_0 , используемой в данной работе в качестве генератора был применен куметр производства германии. Измерения собственной частоты настройки контура, составленного из эталонной индуктивности, постоянной эталонной емкости и емкости измерительного конденсатора, производились с помощью специального гетеродинного волномера.

Измерения выполнялись в диапазоне частот $4 \div 6$ мгц.

Если f_0 - собственная частота колебательного контура когда в контур включен пустой измерительный конденсатор, обладающий емкостью C_0 , а f -собственная частота контура, когда в контур включен измерительный конденсатор, заполненный исследуемой жидкостью, то диэлектрическая проницаемость жидкости ε_0 определялось с помощью следующего соотношения:

$$\varepsilon_0 = \left(\frac{f_0}{f}\right)^2 + B \left[\left(\frac{f_0}{f}\right)^2 - 1 \right] \quad (1)$$

где $B = \frac{C}{C_0}$, C - емкость постоянного, эталонного конденсатора, включенного в

контур параллельно с измерительным конденсатором. Постоянный по величине коэффициент B вычислялся при тарировке измерительного конденсатора.

Сравнение экспериментальных и литературных данных измерения коэффициента преломления n_D^{20} , температуры кипения $t_k^{\circ}\text{C}$ и статической диэлектрической проницаемости ε_0 ацетона $(\text{CH}_3)_2\text{CO}$ и циклопентанола $\text{C}_5\text{H}_9\text{OH}$.

Таблица 1.

Вещество	Экспериментальные данные			Литературные данные		
	n_D^{20}	$t_k^{\circ}\text{C}$	ε_0^{20}	n_D^{20}	$t_k^{\circ}\text{C}$	ε_0^{20}
$(\text{CH}_3)_2\text{CO}$	1,3610	56,55	20,93	1,3591	56,50	20,84
$\text{C}_5\text{H}_9\text{OH}$	1,4529	120,95	17,88	1,4529	121	18,0

Для тарировки были использованы следующие жидкости: бензол, вода, этиловый спирт четыреххлористый углерод, статическая диэлектрическая проницаемости которых были известны с высокой степенью точности (<0,1%) по литературным источникам: таблица 1.

По данным тарировки: $B = 11,71 \cdot 110,95 \cdot 10^{-3} \cdot (t_0 - t)$, где $t_0 = 20^\circ\text{C}$ и t - температура измерительного конденсатора.

Как видно из таблице 1, между этими данными имеет хорошее согласие. Разница, как правило, не превышает 0,5%.

Так как, относительная ошибка в измерении частоты, как правило, лежит в пределах $0,5 \div 1,0 \cdot 10^{-12}\%$, применение данного метода позволило существенно улучшить точность измерения величины статической диэлектрической проницаемости ϵ_0 по сравнению с обычными резонансными методами.

В наших измерениях относительная ошибка в определении статической диэлектрической проницаемости ϵ_0 составляла в среднем 0,2%. Результаты измерений приведены в таблица 2.

Таблица 2.

**Статическая диэлектрическая проницаемость ϵ_0 растворов
циклопентанол – ацетон.**

Температура $t^\circ\text{C}$	Концентрация циклопентанола в мольных долях					
	0	0,1443	0,3101	0,5028	0,7300	1,0
- 40	29,26	27,90	27,30	26,95	-	-
- 30	27,58	26,36	25,50	25,14	-	-
- 20	26,09	24,84	23,98	24,40	23,85	25,45
- 10	24, 64	23,48	22,50	21,75	21,81	22,92
0	23,23	22,04	21,05	20,35	20,19	20,92
10	22,08	20,84	19,78	18,92	18,63	18,87
20	21,03	19,62	18,60	17,70	17,13	17,38
30	20,09	18,56	17,24	16,38	15,34	16,21
40	19,13	17,36	16,01	15,25	14,48	14,90

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ СИСТЕМ ПОЛИЭТИЛЕНГЛИКОЛЬ-ВОДА

Э.А. Масимов, В.В.Прудько, Т.О.Багиров, Г.Ф.Мехтиеv, С.М.Ахмедова

БГУ, кафедра «Строение вещества», baghirov-t@mail.ru

В данной работе исследованы водные растворы широко известных полимеров – полиэтиленгликолей (ПЭГ). Полиэтиленгликоль – нейтральный водорастворимый полимер, строение молекулы которого имеет следующий вид: $\text{H} - [\text{OCH}_2\text{CH}_2]_n - \text{OH}$. Полиэтиленгликоли относятся к полимерам широко применяемых в молекулярной

биологии, биохимии, медицине, фармацевтической и текстильной промышленности, косметике и многих других отраслях промышленности [1]. Кроме того, имеется ряд исследований по влиянию ПЭГ на некоторые процессы, протекающие в живых объектах.

ПЭГ обладает свойством скрывать эпитопы антигенов мембраны клеток от соответствующих паратопов антител без существенного нанесения ущерба функции данного антигена, в связи с чем его использовали в опытах по получению группы крови O из A, B и AB однако исследования показывают что обработанные таким образом эритроциты обладают иммуногенностью и, соответственно, низкой выживаемостью в организме реципиента при трансфузии [2].

Полиэтиленгликоль обладает способностью механически восстанавливать поврежденные клеточные мембраны и подавлять вторичную атрофию аксонов при травматических повреждениях головного и спинного мозга [3]. Это достигается благодаря спонтанному восстановлению структуры мембраны за счет гидрофильных полимеров, которые сначала «склеивают» фрагменты поврежденной мембраны, после чего позволяют их липидной основе слиться воедино.

Эндрю Куб и Ричард Боргенс [3] считают, что раствор полиэтиленгликоля можно использовать в качестве средства неотложной помощи при различных травмах головного мозга. Возможно, в скором времени он станет обязательным компонентом аптечек первой помощи [3].

Для исследования растворов ПЭГ избран вискозиметрический метод. Вязкость – это одно из тех физических свойств жидкостей и растворов, которое позволяет судить о процессах, происходящих в них, и наблюдаемых в этих системах изменениях под действием разных факторов. Вязкость растворов полимеров зависит, прежде всего, от факторов, определяющих объем, занимаемый макромолекулой в растворе, от величины молекулярной массы, от концентрации раствора, от строения полимера, характера взаимодействия растворителя с полимером и температуры.

В работе использовали метод падающего шарика (вискозиметр Гепплера). Измерения проводили в пределах от 20°C до 70°C. Для регулирования температуры вискозиметр подсоединяли к термостату с контактным термометром, с помощью которого устанавливалась и поддерживалась постоянная нужная температура в вискозиметре. В самом вискозиметре имеется контрольный термометр, по которому определяли температуру в вискозиметре с точностью 0,1°C. Все измерения проводили после установления равновесного состояния в растворе полимера.

Зная время падения шарика, определяли вязкость полимерных растворов по формуле

$$\eta = K(\rho_1 - \rho_2)\tau,$$

где η - вязкость, выраженная в Пз, ρ_1 – плотность материала, из которого сделан шарик, ρ_2 – плотность раствора при температуре измерения, которую определяли с помощью пикнометра, K – константа шарика, τ - время падения шарика. Значения K и ρ_1 шарика даются в описании прибора. При исследовании растворов использовали шарик с параметрами $\rho_1 = 2,402 \frac{г}{см^3}$, $K = 0,009056 \frac{сПз \cdot см^3}{г \cdot сек}$. Ошибка в измерении вязкости не превышала 1%.

В работе исследовали водные растворы полиэтиленгликолей со следующими молекулярными массами: 600, 3000, 4000, 15000, 20000, 40000. При приготовлении растворов использовали бидистиллированную воду. Концентрации ПЭГ меняли от 0,3 до 6 вес. %.

На основе полученных экспериментальных данных построены зависимости $lg\eta = f\left(\frac{1}{T}\right)$ для всех растворов разных концентраций, для ПЭГ с разными молекулярными массами.

Полученные экспериментальные данные показали, что повышение температуры приводит к снижению вязкости. Это связано с возрастанием теплового движения молекул и ослаблением связей, существующих между молекулами. Поскольку в любом растворе существует некоторая структура, то можно говорить о её разрушении под действием температуры.

Повышение температуры уменьшает размеры макромолекул, так как наблюдается дегидратация молекул ПЭГ, когда ассоциация молекул воды с кислородными атомами цепей ПЭГ ослабляется, структура воды нарушается и вероятно возникают Н-связи между концевыми группами и атомами кислорода одной и той же цепи, что и приводит к уменьшению размеров молекул ПЭГ и к снижению вязкости.

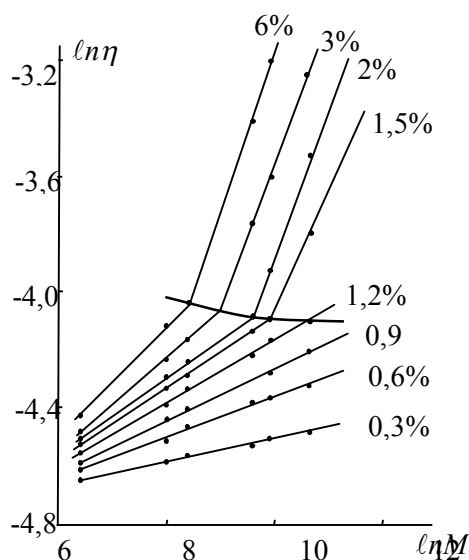


Рис.1. Зависимости $\ln \eta$ от $\ln M$ для водных растворов ПЭГ при разных концентрациях полимера ($t=25^{\circ}\text{C}$)

Полученные зависимости $\lg \eta = f\left(\frac{1}{T}\right)$ в определенной области температур носят линейный характер, что позволило определить теплоты активации вязкого течения по формуле $\Delta H = \frac{d(\lg \eta)}{Rd\left(\frac{1}{T}\right)}$, где T – абсолютная температура, R – универсальная газовая

постоянная [4]. Это дает возможность судить об изменениях, происходящих в растворах. Результаты, приводимые в таблице, показывают, что с увеличением концентрации и молекулярной массы ΔH растет, что свидетельствует о стабилизации состояния системы.

На рис. 1 представлены зависимости вязкости от молекулярной массы при постоянной концентрации полученные при температуре 25°C .

Как видно из рис. 1 с увеличением молекулярной массы ПЭГ вязкость растворов увеличивается. Это, согласно литературным данным [5], объясняется уменьшением подвижности молекул воды, когда всё большее количество молекул воды оказывается связанным с молекулами ПЭГ. В [6] исследование водных растворов ПЭГ с молекулярными массами до 600 методом ЯМР высокого разрешения показало, что у полиэтиленгликоля связывается по две молекулы воды с кислородом эфирной группы и по одной – с концевыми гидроксильными группами. Это следует как из анализа зависимости химического сдвига от концентрации, так и из зависимости интенсивности сигнала воды от температуры ниже 0°C . В [7] приводятся литературные данные о том, что ПЭГ оказывает стабилизирующее действие на несколько молекулярных слоев воды. Следовательно, чем выше молекулярная масса и концентрация ПЭГ, тем более стабилизирующее воздействие на структуру воды оказывает ПЭГ. Значения ΔH ,

приводимые в таблице, и рост вязкости с увеличением молекулярной массы и концентрации подтверждают вышесказанное.

Из рис. 1 видно, что в результате изменения молекулярной массы при фиксированной концентрации состояние системы ПЭГ – вода меняется. Это можно рассматривать как переход от менее структурированной системы к более структурированной, или как превращение некоторой флуктуационной пространственной сетки в более постоянную. Надо отметить, что это наблюдается для растворов ПЭГ с молекулярной массой больше 3000 и концентрациях выше 0,9%. Концентрацию ПЭГ, соответствующую переходу из одной области в другую, обозначим $C_{П}$. В переходной области, соответствующей определенным сочетаниям концентраций и молекулярных масс ПЭГ, молекулы ПЭГ образуют специфическую пространственную сетку. На рис.2 приводится зависимость $C_{П}$ от молекулярных масс ПЭГ. Как видно из графика чем выше молекулярная масса, тем ниже $C_{П}$; для молекул-

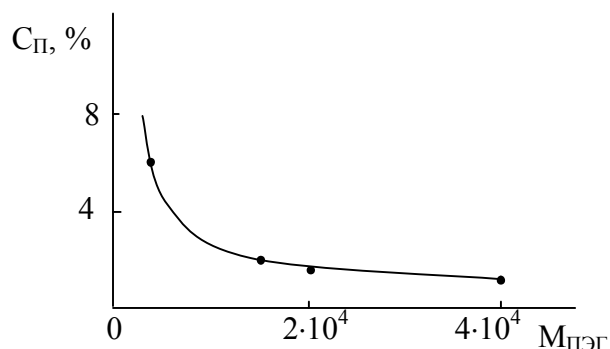


Рис. 2. Зависимости $C_{П}$ от молекулярной массы ПЭГ

ярных масс от $2 \cdot 10^4$ до $4 \cdot 10^4$ $C_{П}$ мало отличаются друг от друга, а для молекулярных масс меньше $2 \cdot 10^4$ наблюдается более сильное изменение $C_{П}$ с изменением молекулярной массы ПЭГ.

Полученные данные подтверждаются и зависимостью характеристической вязкости $[\eta]$ от молекулярной массы.

Таким образом, путем увеличения молекулярной массы при постоянном значении концентрации или концентрации ПЭГ при постоянной молекулярной массе, при определенном их сочетании, можно добиться перехода системы ПЭГ-вода в более структурированное состояние, которому соответствует образование специфической пространственной сетки. $C_{П}$ – это концентрации, ниже которых ни при каких молекулярных массах (в пределах рассматриваемых от $6 \cdot 10^4$ до $4 \cdot 10^4$) образование пространственной сетки в системе ПЭГ-вода невозможно.

Таблица.

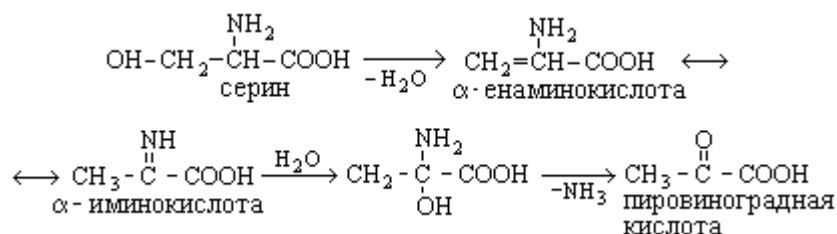
Значения теплот активации вязкого течения

$\left(\frac{kcal}{mоль} \right)$ для водных растворов ПЭГ.

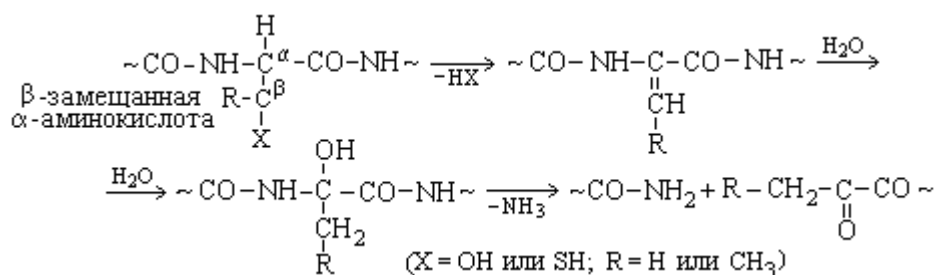
$M_{ПЭГ} \backslash C_{ПЭГ}, \%$	600	3000	4000	15000	20000	40000
0,3	3,3	3,4	3,5	3,7	4,1	4,6
0,6	3,3	3,5	-	3,8	4,1	4,7
0,9	3,4	3,5	3,7	-	4,2	4,7
1,2	3,5	3,6	-	4,0	4,2	4,9

пептидных связей, образованных серином и треонином, и склонностью остатков серина и треонина к реакциям β-элиминирования [1].

Элиминирование характерно для α-аминокислот, в которых в боковом радикале в β-положении к карбоксильной группе содержатся электроноакцепторные функциональные группы, например гидроксильная или тиольная. Их отщепление приводит к промежуточным реакционноспособным α-аминокислотам, легко переходящим в таутомерные α-иминокислоты. α-иминокислоты в результате реакции гидратации по иминной группе и последующего отщепления молекулы аммиака превращаются в α-оксокислоты. Такой тип превращений называют *элиминирование-гидратация*. Примером служит получение пировиноградной кислоты из серина [2]:



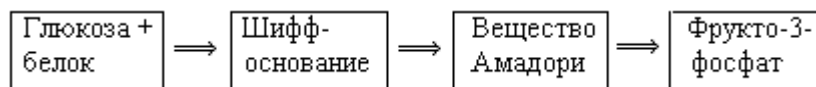
Поскольку главными компонентами серицина являются гидрокси-аминокислоты - серина и треонина, характер биосинтеза серицина в шелкоотделительной железе определяется в значительной мере количеством этих аминокислотных остатков в гемолимфе гусениц тутового шелкопряда. Таким образом, появилась возможность использования реакционную способность гидроксильной группы серина и треонина в аминокислотном составе макромолекул серицина, замедлять скорости биосинтеза этого белка и целью замедления скорости биосинтеза серицина нами использовано важное свойство гидроксиаминокислоты серина и треонина - способности β-элиминирования. В реакцию β-элиминирования некоторые производные серина и треонина в пептидах легко расщепляются пептидной связи по α-углеродному атому дегидроаланил пептидов [3]:



Как видно, предполагаемый к применению препарат должен вести себя как основание (акцепторы протонов), кроме того, он должен быть устойчивым к действию различных биологических факторов. Настаивая на выполнении этих условий, сначала применяли фенольный антиоксидант *ионол* (4-метил-2,6-ди-трет-бутил-фенол). Однако ионол не дал ожидаемого результата. Тогда мы обратили внимание на процесс гликирования, т.е. основную причину спонтанного повреждения белков.

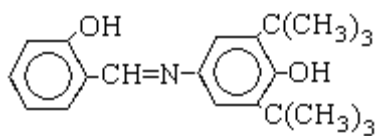
Из литературы известно, что реакция гликирования белков, при сахарном диабете, осуществляется без участия ферментов, регулируется в организме редуцирующими сахарами ациклической формы и зависит от времени контакта углеводов с белком [4]. Данный процесс обуславливается способностью глюкозы образовывать с аминокислотными группами различных белков различные соединения (интермедиаты), участвующие в обмене и являющиеся исходным материалом для образования необратимых в химических реакциях веществ, которые получили название конечных продуктов *гликозилирования*.

Гликозилирование белков и образование гликирования является сложной многоэтапной цепью метаболических процессов. Первым этапом, является образование альмидина (N-гликозиламина) или соединения глюкоза-белок:



Предполагается, что процесс неферментативного гликозилирования происходит в результате взаимодействия альдегидной группы глюкозы с гидроксильной группы серина или треонина [5], ε-аминогруппы лизина, амидных групп аспарагина и глутамина с образованием нестабильного основания *Шиффа* [6], которое в результате перегруппировки Амадори превращается в стабильный кетоамин [7].

Эта информация позволила нам обратить внимание на альдимин. Проведенные эксперименты позволили определить, что применение *альдиминов* дает положительные результаты и нами использованы различные фенольные антиоксиданты, содержащие азометиновую группу. Наилучший результат получен при применении *N-(3,5-ди-трет-бутил-4-гидроксифенилсалицилаль-димина (n-CA)* [8]. В молекуле этого препарата фенол имеет 2 электронодонорных заместителя $-\text{C}(\text{CH}_3)_3$ и, таким образом, увеличена активность антиоксиданта n-CA, имея $-\text{C}=\text{N}-$ *азиновую* группу и разветвленные алкильные заместители типа ионола, является азометиновым красителем и антиоксидантом с увеличенной электронодонорной активностью:



В таблице представлены данные о влиянии обработки корма гусениц тутового шелкопряда препаратом n-CA на производственные показатели коконов.

Таблица.

Сводные результаты размотки воздушно-сухих коконов

Показатель	Варианты опыта	
	Контроль	Опыт
Куколка, %	50,05	48,6
Шелконосность, %	49,95	4
Отходы, %	20,47	51,3
В том числе; а)		6
невидимые шелковые	8,86	17,5
угары, %	5,26	6
б) сидр, %		
в) холст из одонков и	6,32	6,36
неразмотка, %	0,03	5,21
г) рвани, %		5,97
		0,02

Начиная с первого дня 4-го возраста, до завивки, гусениц тутового шелкопряда были скормлены листья шелковицы, обработанные 0,1%-ном раствором n-CA. Доза препарата рассчитана на каждый грамм живой массы гусениц. Разовая доза препарата составляла $5 \cdot 10^{-6}$ кг на 1 кг живой массы гусеницы. Препарат растворяли в этиловом спирте, затем

разбавляли в 4-х кратном объеме дистиллированной водой. Полученным раствором, соответственно расчету, опрыскивали свежие листья шелковицы.

Располагая сведениями таблицы можно заключить, что качественные признаки коконов, полученных из опытной партии, подкормленных препаратом n-CA, заметно превосходят полученные из контрольной партии. Влияние препарата n-CA отражается в увеличении общей длины коконных нитей, на способность разматываемости коконов и выход шелка-сырца.

Определяя содержание серицина, по известной методике [9], установили, что оболочки коконов из контрольной партии содержат 26,84% серицина, а опытной – 19,31%. Эти результаты позволили сделать вывод о том, что при подкормке гусениц тутового шелкопряда, n-CA, препарат играет роль ингибитора процесса биосинтеза серицина и уменьшает его количество в шелковой массе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Шульц Г.Е., Ширмер Р.Х. Принципы структурной организации белков. М: Мир, 1982, 356 с.
2. Тюкавкина Н.А., Бауков Ю.И. Биоорганическая химия: учебник для вузов . – 4-ое изд. М.: Дрофа, 2005, 542 с.
3. Шредер Э. Любке, К. Пептиды. Т.1. М.: Мир, 1967, 469 с.
4. Ahmed N, Dobler D, Dean M, Thornalley PJ. Peptide mapping identifies hotspot site of modification in human serum albumin by methylglyoxal involved in ligand binding and esterase activity // J Biol Chem 2005; **280**: 5724–5732.
5. Buse MG. Hexosamines, insulin resistance, and the complications of diabetes: current status // Am J Physiol Endocrinol Metab 2006; **290** (1): E1–E8.
6. Witz G. Biological interactions of α, β -unsaturated aldehydes // Free Rad Biol Med 1989; **7**: 333–49.
7. Ансари Н.А., Рашид З. [Неферментативное гликирование белков: от диабета до рака](#) // Биомедицинская химия, 2010, No 2, с.168-178.
8. А.с. № 1069745 (СССР). Средство для повышения продуктивности тутового шелкопряда / Бакиров М.Я., Исмаилова Р.С., Шукюров Ю.Г. и др. // Б.И., 1984, № 4.
9. Филиппович Ю.Б., Егорова Т.А., Савостьянова Г.А. Практикум по общей биохимии. М: Просвещение, 1975, с. 38.

СОРБЦИЯ ФИЗЕТИНА КЕРАТИНОМ

Юсиф Гаджибала оглы Шукюрлу,

Иззет Рамзи оглы Салманов

*Шекинский филиал Института Учителей Азербайджана,
Кафедра «Естественные науки и методика их преподавания»*

Для построения кривых сорбции физетина кератиновой нити (шерсти) окрашенные физетином, применялась рецептура водной ванны, не отличающаяся от традиционной, приведенной в работе [1]: физетин – 3%; глауберова соль¹ – 10%; 30%-ная уксусная кислота – 4% (здесь проценты от массы окрашиваемого материала). Модуль ванны составлял 1:50.

Физетин вводили в ванну при температуре раствора 310K и при периодическом перемешивании повышали температуру раствора до 371K и вводили шерсть в кипящий раствор. До введения кератина в красящий раствор, пробы были приготовлены в виде

¹Na₂SO₄·10H₂O

отдельных кусочков, определены их массы высушиванием до постоянного веса, каждый кусочек вкладывался в марлевый мешочек и нумеровался. Крашение продолжалось при температуре кипения в течение 40 минут с периодическим перемешиванием и через каждые 5 минут брали пробы для изучения кинетики сорбции красителя.

Для построения кривых сорбции физетин извлекался из окрашенной пробы шерсти, по методу И.К.Журри [2]: окрашенный кусочек шерсти переносился в агатовые ступки и тщательно растирался с небольшим количеством кварцевого песка в присутствии этанола (95%-ной раствор этилового спирта). Растертая масса переносилась в колбу и кипятилась с добавлением спирта, применением обратного холодильника и через 10 минут кипения содержимое в колбе охлаждалось. После чего переносилось в воронку Бюхнера.

Масса на воронке Бюхнера многократно экстрагировалась этанолом до полного обесцвечивания остатка из стекающего экстракта. Для фильтрации использован водоструйный насос. Экстракт, полученный после фильтрации, переносился в мерную колбу на 100мл и добавлялся этанол до метки. Из этого объема отделялось 25мл для анализа и переносилось в колбу Вюрца. Этанол удалялся из колбы отгонкой. После чего к осадку в колбе Вюрца малыми порциями прибавляли петролейный эфир для растворения жировых веществ.

Эфирные выделения и осадок из колбы количественно переносили на фильтр, промывали осадок на фильтре эфиром. Эфирные выделения изымались.

Физетин, остающийся на фильтре, растворяли горячим этанолом и общий объем экстракта доводился в мерной колбе этанолом до объема 50мл. Этот раствор использовался для колориметрического определения физетина на фотооптическом устройстве (ФОУ).

Для приготовления раствора колориметрирования в небольшую колбу добавлялось 5мл раствора физетина в этаноле, затем - 5мл 2%-ного раствора хлористого алюминия - $AlCl_3$, и 15мл 8%-ного раствора уксуснокислого натрия - CH_3COONa . Содержимое колбы тщательно перемешивали и оставляли настаиваться 2ч в затемненном месте. За это время раствор приобретал устойчивый желтый цвет.

Одновременно готовился контрольный раствор. Для этого в колбу добавляли 5мл этанола, 5мл дистиллированной воды (вместо хлористого алюминия), 15мл 8%-ного раствора уксуснокислого натрия, перемешивали и оставляли настаиваться 2ч.

Для колориметрирования использовали кювету с толщиной слоя 10мм. Колориметрирование проводилось против контроля при синем светофильтре (420нм). Содержание физетина вычислялось по калибровочному графику, показывающий зависимость оптической плотности от концентрации раствора.

Калибровочный график строился следующим образом. Готовился стандартный раствор физетина путем растворения 20мг чистого физетина в 100мл этаноле. Затем в широких пробирках брали следующее количество стандартного раствора физетина: 1,0; 1,5; 2,0; 2,5; 3,0; 3,5; 4,0; 4,5 и 5,0мл и объем каждого раствора доводился до 5мл этанолом. В полученном объеме каждой пробирки, соответственно, содержалось 0,20; 0,30; ...; 0,90 и 1,00мг физетина. Затем в каждую пробирку добавляли по 5мл 2%-ного раствора $AlCl_3$ и по 15мл 8%-ного раствора CH_3COOH , перемешивали и оставляли настаиваться в затемненном месте 2ч. Для построения калибровочного графика на оси абсцисс откладывалась масса физетина в миллиграммах, а на оси ординат – оптическая плотность окрашенных растворов.

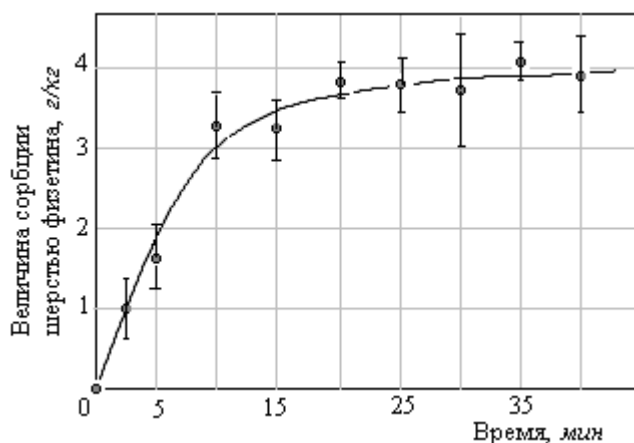


Рис. Зависимость количества сорбированного фуксина от времени, при крашении шерсти.

Приводим пример вычисления результатов: навеска окрашенной шерсти 2г; общий объем спиртного экстракта 100мл. Для анализа было взято 25мл экстракта. После обработки эфиром объем спиртного раствора стал 50мл. Для колориметрирования из этого раствора было взято 5мл экстракта. По калибровочному графику в 5мл экстракта найдено 0,15мг фуксина. Содержание фуксина (x) в мг% (в мг на 100г шерсти) будет

$$x = 0,15 \cdot 100 \cdot 50 \cdot 100 / (2 \cdot 25 \cdot 5) = 300 \text{ мг\%}.$$

На рисунке показана зависимость величины адсорбции шерстью фуксина от времени крашения.

Как видно из рисунка, процесс сорбирования фуксина кератином носит характер насыщения и максимальное значение сорбции красителя волокном составляет ~4г/кг. Влияние температуры крашения на адсорбцию фуксина шерсти не рассматривалось. Крашение по описанному режиму вызывает потерю прочности шерстяной нити не более чем на 2%.

ЛИТЕРАТУРА

1. Новорадовская Т.С., Беленьский Л.И., Васильева Л.В. Способ расчета состава красительных ванн для однородного крашения смешанной ткани из шерсти и нитрона // Техн. текст. пром., 1974, № 1, с. 91-95.
2. Плешков Б.П. Практикум по биохимии растений. М.: Агропромиздат, 1985, с. 238-240.
3. Дəмиров И.А., Шүкүров Ч.З. Азəрбајчанын мейвə вə тəрəвəз биткилəринин муаличə əнəмијјəти. Бакы: Маариф, 1990, 192 с.

ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ КОЛЕБАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА КАРНОЗИНА В ТАУТОМЕРНОЙ ФОРМЕ N³H МЕТОДОМ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

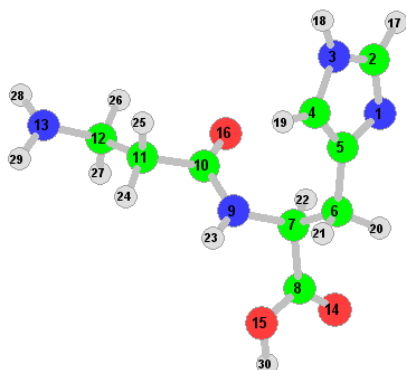
С.Д. Демухамедова, З.И. Гаджиев, И.Н. Алиева

Институт физических проблем Бакинского Государственного Университета

Карнозин – природный дипептид, содержащийся во многих тканях организма и играющий важную физиологическую роль. Благодаря своему природному

происхождению он нетоксичен, и поэтому на основе карнозина, его производных и комплексов с различными металлами создаются новые лекарственные препараты, что требует всестороннего исследования структуры и свойств этого дипептида и его производных.

Данное сообщение посвящено квантовохимическому расчету колебательных спектров молекулы карнозина в одной из двух возможных таутомерных форм его



имидазольного кольца N³H. Расчетная модель молекулы с указанием нумерации атомов приведена на рис.1, где атомы азота обозначены цифрами 1, 3, 9 и 13, атомы кислорода – 14, 15 и 16, атомы углерода – 2, 4, 5, 6, 7, 8, 10, 11 и 12, остальные - атомы водорода. Всего молекула содержит 30 атомов.

Квантовохимический расчет колебательного спектра молекулы карнозина был проведен по программе Gaussian-03 неэмпирическим методом функционала плотности B3LYP с использованием базиса 6-31+G.

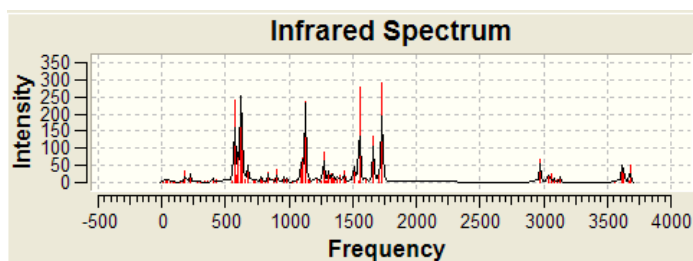
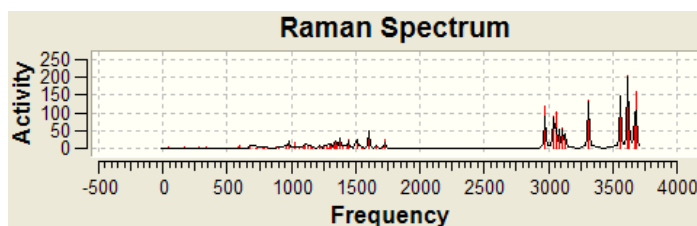


Рис.1. Модель карнозина N³H
Расчет по программе Caussian03 проводился с оптимизацией по методу Berny и расчетом колебательных спектров ИК и Раман. В результате расчета получены оптимизированные геометрические параметры молекулы, заряды на атомах, дипольные,

квадрупольные моменты, анализ распределения электронной плотности используя SCF, энергетические и термодимические параметры, частоты и интенсивности ИК и Раман спектров молекулы.

Данное сообщение посвящено анализу полученных результатов по расчету колебательных спектров молекулы. Расчетные спектры приведены на рис.2. Анализ распределения потенциальной энергии в колебательных спектрах карнозина N³H был произведен с использованием программы VEDA4 [1], которая в качестве входных данных берет файлы из уже проведенного расчета по программе Gaussian-03.

В таблице приведены результаты анализа полученных частот гармонических колебаний, проведенного с использованием программы veda, показаны значения



интенсивностей полос в ИК и КР спектрах и подробная интерпретация распределения потенциальной энергии колебаний по колебательным координатам по программе veda4.

Рис.2. Колебательные спектры карнозина N³H

Таблица. Теоретические частоты(см⁻¹), интенсивности и распределение потенциальной энергии в ИК и Раман спектрах молекулы карнозина N³H по данным метода DTF/6-31+G

v, см ⁻¹	Интенсивность	Распределение потенциальной энергии по колебательным координатам (%)	Интенсивность
338	3.3	s51 C ₆ C ₅ N ₁ (-32)	2.7
300	6.1	s50 O ₁₅ C ₈ C ₇ (25)+s52 C ₈ C ₇ N ₁ (11)	0.5
279	11.9	s24 C ₈ C ₇ (11)+s48 C ₁₀ N ₉ C ₇ (14)	2.7
224	21.8	s53 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ (10)+s56 C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (39)	0.8
167	51.9	s51 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ (10)+s56 C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (39)	160.6
162	35.8	s01 H ₂₈ N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ , H ₂₉ N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ (81)	0.7
142	3.6	s42 H ₂₅ C ₁₁ H ₂₄ (80)	7.5
139	33.4	s54 H ₁₇ C ₂ N ₁ (-20)+s81 out C ₆ C ₄ N ₁ C ₅ as, tors C ₂ N ₃ C ₄ C ₅ , C ₄ N ₃ C ₂ N ₁ , out O ₁₄ C ₇ O ₁₅ C ₈ as (-20)+s83 out	50.8
117	48.1	s17 O ₁₅ C ₈ (10)	203.2
114	6.8	s48 C ₁₀ N ₉ C ₇ (14)+s52 C ₈ C ₇ N ₁ (-14)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (13)	9.8
104	6.8	s57 C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ N ₉ (39)+s73 tors C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₄ C ₅ C ₆ C ₇ , C ₇ N ₉ C ₁₀ C ₁₁ , C ₆ C ₇ N ₉ C ₁₀ as(21)+s83 out C ₈ C ₆ N ₉ C ₇ (20)	143.8
102	0.8	s57 C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ N ₉ (39)+s73 tors C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₄ C ₅ C ₆ C ₇ , C ₇ N ₉ C ₁₀ C ₁₁ , C ₆ C ₇ N ₉ C ₁₀ as(21)+s83 out C ₈ C ₆ N ₉ C ₇ (20)	123.8
100	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
99	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
98	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
97	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
96	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
95	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
94	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
93	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
92	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
91	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
90	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
89	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
88	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
87	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
86	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
85	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
84	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
83	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
82	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
81	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
80	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
79	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
78	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
77	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
76	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
75	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
74	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
73	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
72	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
71	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
70	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
69	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
68	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
67	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
66	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
65	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
64	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
63	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
62	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
61	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
60	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
59	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
58	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
57	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
56	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
55	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
54	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
53	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
52	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
51	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
50	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
49	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
48	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
47	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
46	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
45	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
44	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
43	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
42	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
41	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
40	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
39	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
38	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
37	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
36	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
35	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
34	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
33	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
32	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
31	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
30	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
29	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
28	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
27	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
26	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
25	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
24	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
23	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
22	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
21	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
20	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀ N ₉ , C ₇ C ₆ N ₁₃ (46)+s78 N ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀ (31)	38.5
19	0.8	s55 C ₁₁ C ₁₀	

В таблице приведены следующие обозначения нормальных колебаний: $s_1 \div s_{29}$ – координаты растяжения валентных связей (s_1 –OH; $s_2 \div s_5$ –NH; $s_6 \div s_{14}$ –OH; $s_{15,16,22}$ –OC; $s_{17,19} \div s_{21,25,27,28}$ –NC; $s_{18,23,24,26,29}$ –CC); $s_{30} \div s_{57}$ –координаты изменения валентных углов (s_{30} –NCN, s_{31} –HOC, $s_{32} \div s_{34}$ –HNC, s_{35} –HNN, $s_{36-38,40,43}$ –HCN, $s_{39,42,44}$ –HCH, s_{45} –OCO, s_{46} –OCN, $s_{47,48}$ –CNC, $s_{49,51,52,54,55}$ –CCN, s_{50} –OCC, s_{53} –NCC, $s_{56,57}$ –CCC); $s_{58} \div s_{84}$ –неплоские координаты (out - координаты выхода из плоскости – это s_{59} –OCOC, s_{74} –OCNC, s_{81} –CCNC, s_{82} –OCOC, s_{83} –CCNC; все остальные неплоские координаты – это tors - крутильные колебания одних групп атомов относительно других). В скобках указан процент потенциальной энергии данного нормального колебания приходящийся на определенные колебательные координаты.

Проведенный анализ распределения потенциальной энергии колебаний по внутренним колебательным координатам показывает, что потенциальная энергия высокочастотных колебаний, лежащих в интервале частот $3678 \text{ см}^{-1} \div 1731 \text{ см}^{-1}$ и частота 1603 см^{-1} сосредоточена в чисто валентных колебательных координатах растяжения связей. Причем для частот 3678 , 3632 и 3617 см^{-1} все 100% потенциальной энергии сосредоточены в колебательных координатах растяжения связей соответственно N_3H_{18} , N_9H_{23} и $\text{O}_{15}\text{H}_{30}$. Если рассматривать частоты, соответствующие симметричным и антисимметричным колебаниям CH_2 групп, то это частоты 3559 и 3677 см^{-1} , где сосредоточено 99% потенциальной энергии колебаний растяжения связей C_6H_{20} и C_6H_{21} , частоты 3056 см^{-1} и 3109 см^{-1} , где сосредоточено соответственно 97% и 90% энергии растяжения связей C_6H_{20} и C_6H_{21} , а также частоты 3037 и 3083 см^{-1} – $\text{C}_{11}\text{H}_{24}$ и $\text{C}_{11}\text{H}_{25}$. Частоты 3313 и 3303 см^{-1} содержат колебания двух связей имидазольного кольца C_2H_{17} и C_4H_{19} . Частота 2974 см^{-1} содержит 97% энергии изменения длины связи $\text{C}_{12}\text{H}_{27}$, а частота 3126 см^{-1} – 93% энергии изменения связи $\text{C}_{12}\text{H}_{26}$. Начиная с частоты 1709 см^{-1} и ниже появляются деформационные колебания изменения валентных углов. Эта частота на 85% определяется энергией изменения угла $\text{H}_{29}\text{N}_{13}\text{H}_{28}$, но также содержит небольшой вклад антисимметричных неплоских крутильных колебаний этих же Н связей относительно основной цепи ($\text{H}_{28}\text{N}_{13}\text{C}_{12}\text{C}_{11}$ и $\text{H}_{29}\text{N}_{13}\text{C}_{12}\text{C}_{11}$). В этой области наблюдается много колебаний смешанного типа. Чисто деформационными частотами, определяющимися изменениями валентных углов НСН являются частоты 1546 , 1517 и 1508 см^{-1} . Низкочастотные колебания характеризуются смесью неплоских колебательных координат – крутильных и выхода из плоскости.

ЛИТЕРАТУРА

1. М.Н. Jamróz et al. / Journal of Molecular Structure, 2006, v. 787, p.172–183

КОНФОРМАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА АНАЛОГОВ С-КОНЦЕВОГО ГЕПТАПЕПТИДА МОЛЕКУЛЫ ФИЗАЛАЕМИНА

Агаева Г.А.

*Институт физических проблем, Бакинский Государственный Университет,
gulshen@mail.ru*

В настоящей работе методом теоретического конформационного анализа было исследовано пространственное строение монозамещенных аналогов С-концевого гептапептида молекулы физалаемина, обладающих способностью стимулировать слюноотделение. На основе фрагментарного анализа были определены геометрические и

энергетические параметры оптимальных конформационных состояний 18 аналогов гептапептида физаламина с точечными заменами остатков в позициях 5 и 6.

Молекула нейропептида физаламина впервые была выделена из кожи амфибии *Physalaemin fuscumaculatus* [1]. Эта пептидная молекула содержит 11 остатков с аминокислотной последовательностью: pGlu1-Ala2-Asp3-Pro4-Asn5-Lys6-Phe7-Tyr8-Gly9-Leu10-Met11NH₂ [2] и по многим функциональным признакам и гомологичной первичной структуре относится к группе тахикининовых пептидов, характеризующихся одинаковой С-концевой последовательностью Phe-Хaa-Gly-Leu-Met NH₂. Было выяснено, что физаламин способствует снижению артериального давления, стимулирует выделение слюны и сокращение гладких мышц, а также взаимодействует с общей системой тахикининовых рецепторов. В последнее время интенсивно изучаются различные структурные аналоги физаламина в качестве лекарственных препаратов для лечения сухости во рту. Особый интерес к поиску эффективных аналогов физаламина связан с высокой физиологической активностью его С-концевого гептапептида и его модифицированных аналогов, стимулирующих слюноотделение. В работе [2] были синтезированы 126 структурных аналогов его С-концевого гептапептида, монозамещенных в различных позициях последовательности различными аминокислотными остатками. Было показано, что некоторые аналоги с монозамещениями в позициях 5 и 6 проявляют более высокую физиологическую активность, чем природная молекула. В таблицах 1 и 2 приведены показатели активности монозамещенных аналогов и природного гептапептида физаламина. Для детального исследования механизма действия гептапептидных аналогов физаламина необходимо знание их пространственного строения и конформационных особенностей, требуемых для комплементарного взаимодействия этих лигандов с рецепторами реагирующей клетки. Методами ¹H-ЯМР и ИК-спектроскопии в работе [3] была изучена пространственная структура физаламина. Следует однако заметить, что спектральные методы не в состоянии дать детальное описание всех стабильных конформаций подвижного олигопептида, величины двугранных углов, иерархии стабильности конформеров, энергетические вклады отдельных взаимодействий и т.д. В данной статье приведены результаты исследования пространственного строения 18 аналогов гептапептидов молекулы физаламина и сопоставления их конформационных возможностей с ранее исследованными конформациями всей молекулы физаламина [4,5] методом теоретического конформационного анализа.

Исследование пространственного строения молекул аналогов С-концевого гептапептида физаламина проводилось методом теоретического конформационного анализа с использованием стандартной геометрии. При конформационном расчете пептидов учитывали невалентные и электростатические взаимодействия, водородные связи и торсионные потенциалы. Отсчет двугранных углов проводился согласно общепринятой номенклатуре [6]. В расчетах были использованы программа и техника расчета, разработанные и примененные авторами в работах [7,8]. В качестве начальных приближений при расчете конформаций отдельных молекул послужили известные значения двугранных углов, соответствующих низкоэнергетическим состояниям монопептидов.

ТАБЛИЦА 1.

Показатели биологического тестирования аналогов С-концевого гептапептида молекулы физаламина, монозамещенных в позиции 5, на способность стимулирования слюноотделения.

№	Г Е П Т А П Е П Т И Д	Параметры биологического тестирования	
		Скорость потока слюноотделения	Секреция белка %
1.	Asn ⁵ -Lys ⁶ -Phe ⁷ -Tyr ⁸ -Gly ⁹ -Leu ¹⁰ -Met ¹¹ -NH ₂	100	100
2.	Gln ⁵ -Lys ⁶ -Phe ⁷ -Tyr ⁸ -Gly ⁹ -Leu ¹⁰ -Met ¹¹ -NH ₂	169	286
3.	Cys ⁵ -Lys ⁶ -Phe ⁷ -Tyr ⁸ -Gly ⁹ -Leu ¹⁰ -Met ¹¹ -NH ₂	129	195
4.	Ala ⁵ -Lys ⁶ -Phe ⁷ -Tyr ⁸ -Gly ⁹ -Leu ¹⁰ -Met ¹¹ -NH ₂	124	147
5.	Thr ⁵ -Lys ⁶ -Phe ⁷ -Tyr ⁸ -Gly ⁹ -Leu ¹⁰ -Met ¹¹ -NH ₂	117	105
6.	Arg ⁵ -Lys ⁶ -Phe ⁷ -Tyr ⁸ -Gly ⁹ -Leu ¹⁰ -Met ¹¹ -NH ₂	112	123
7.	Pro ⁵ -Lys ⁶ -Phe ⁷ -Tyr ⁸ -Gly ⁹ -Leu ¹⁰ -Met ¹¹ -NH ₂	106	147
8.	Asp ⁵ -Lys ⁶ -Phe ⁷ -Tyr ⁸ -Gly ⁹ -Leu ¹⁰ -Met ¹¹ -NH ₂	88	136
9.	Val ⁵ -Lys ⁶ -Phe ⁷ -Tyr ⁸ -Gly ⁹ -Leu ¹⁰ -Met ¹¹ -NH ₂	48	53
10.	Glu ⁵ -Lys ⁶ -Phe ⁷ -Tyr ⁸ -Gly ⁹ -Leu ¹⁰ -Met ¹¹ -NH ₂	38	56

ТАБЛИЦА 2.

Показатели биологического тестирования аналогов С-концевого гептапептида молекулы физаламина, монозамещенных в позиции 6, на способность стимулирования слюноотделения.

№	Г Е П Т А П Е П Т И Д	Параметры биологического тестирования	
		Скорость потока слюноотделения	Секреция белка %
1.	Asn ⁵ - Lys ⁶ -Phe ⁷ -Tyr ⁸ -Gly ⁹ -Leu ¹⁰ -Met ¹¹ -NH ₂	100	100
2.	Asn ⁵ - Gln ⁶ -Phe ⁷ -Tyr ⁸ -Gly ⁹ -Leu ¹⁰ -Met ¹¹ -NH ₂	183	208
3.	Asn ⁵ - Arg ⁶ -Phe ⁷ -Tyr ⁸ -Gly ⁹ -Leu ¹⁰ -Met ¹¹ -NH ₂	166	175
4.	Asn ⁵ - Tyr ⁶ -Phe ⁷ -Tyr ⁸ -Gly ⁹ -Leu ¹⁰ -Met ¹¹ -NH ₂	161	248
5.	Asn ⁵ - Met ⁶ -Phe ⁷ -Tyr ⁸ -Gly ⁹ -Leu ¹⁰ -Met ¹¹ -NH ₂	154	170
6.	Asn ⁵ - His ⁶ -Phe ⁷ -Tyr ⁸ -Gly ⁹ -Leu ¹⁰ -Met ¹¹ -NH ₂	144	156
7.	Asn ⁵ - Thr ⁶ -Phe ⁷ -Tyr ⁸ -Gly ⁹ -Leu ¹⁰ -Met ¹¹ -NH ₂	134	224
8.	Asn ⁵ - Asn ⁶ -Phe ⁷ -Tyr ⁸ -Gly ⁹ -Leu ¹⁰ -Met ¹¹ -NH ₂	119	119
9.	Asn ⁵ - Glu ⁶ -Phe ⁷ -Tyr ⁸ -Gly ⁹ -Leu ¹⁰ -Met ¹¹ -NH ₂	112	119
10.	Asn ⁵ - Leu ⁶ -Phe ⁷ -Tyr ⁸ -Gly ⁹ -Leu ¹⁰ -Met ¹¹ -NH ₂	108	165

Конформационное исследование аналогов физаламина делится на ряд последовательно решаемых структурных задач. Согласно экспериментальным данным именно гидрофобный пентапептидный участок молекулы, локализованный на С-конце, ответственен за связывание с рецептором на поверхности реагирующей клетки. Надо отметить, что этот пентапептид считается сигнальной последовательностью для тахикининов. Энергетически предпочтительной для этого пентапептида является α-спиральная структура. Низкоэнергетические конформации перекрывающихся фрагментов 18 монозамещенных аналогов тетрапептидного участка 5-8 и С-концевого пентапептида позволили последовательно рассмотреть конформационные возможности всех аналогов С-концевого гептапептида физаламина. При составлении структурных вариантов гептапептида ориентации боковых цепей остатков перекрывающегося участка Phe⁷-Tyr⁸

брались с учетом сохранения максимума межостаточных взаимодействий, образуемых этими остатками в перекрывающихся фрагментах. В результате минимизации энергии составленных структурных вариантов были найдены низкоэнергетические конформации аналогов С-концевого гептапептида. Во всех низкоэнергетических конформациях аналогов гептапептида образуются внутримолекулярные водородные связи. Так, например, в α -спиральном сегменте на С-концевом участке наиболее стабильных конформаций аналогов образуется система регулярных водородных связей, характерных для правой α -спирали: NH(Gly⁹)...CO(Xxx⁵), NH(Leu¹⁰)...CO(Xxx⁶) и NH(Met¹¹)...CO(Phe⁷). В результате расчетов были определены энергетически предпочтительные области величин двугранных углов и взаимное расположение остатков в низкоэнергетических конформациях гептапептидных аналогов молекулы физаламина.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследование пространственного строения 18 аналогов С-концевого гептапептидов физаламина с точечными заменами остатков в позициях 5 и 6, обладающих способностью стимулировать слюноотделение, показало, что эти молекулы обладают ограниченным набором стабильных структур, характеризующихся наличием α -спирального сегмента на С-концевом участке и формированием изогнутых структур на N-концевом участке. Сопоставление конформационных особенностей молекул аналогов С-концевого гептапептида физаламина выявило определенную аналогию их пространственной организации, а также позволило определить степень подвижности отдельных участков в их предпочтительных пространственных структурах. Конформационные возможности аналогов С-концевого гептапептида молекулы физаламина выявили структурообразующую роль каждого замещенного и вновь внедряемого остатка. На основе полученных данных были обсуждены конформационно-функциональные взаимосвязи молекулы физаламина и его аналогов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Bertaccini G., De Caro G., Br. J. Pharmacol., 1965, v.25, p.380-388.
2. Gao C., Abe K., Exper. Oral Biology, 2000, v.6, p.180-186.
3. Bernier J.L., Henichart J.P., Helbecque N., Eur. J. Biochem, 1984, v.142, N2, p.371-377.
4. Агаева Г.А., Известия БГУ, сер. физ.-мат. наук, 2006, 88-96.
5. Агаева Г.А., Journal of Qafqaz University, 2005, 15, p.72-82
6. IUPAC-IUB Commission on Biochemical Nomenclature, Biochim. Biophys. Acta, 1971, v.121, p.121
7. Попов Е.М., Int. J. Quant. Chem., 1979, v.16, p.707-718.
8. Годжаев Н.М., Максумов И.С., Исмаилова Л.И., Ж. Структ. хим., 1983, 24., с.147-149.

TALLIUM TIOGERMANATIN SU MÜHİTİNDƏ ALINMASI

**Əhməd Məmməd oğlu Qarayev, Bayram Zülfüqar oğlu Rzayev,
Rafiq Yaqub oğlu Quliyev**

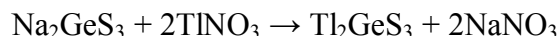
AMEA Naxçıvan Bölməsinin Təbii Ehtiyatlar İnstitutu

Bu işdə tiogerminatların alınmasında istifadə edilən məlum metodlardan fərqli olaraq adi şəraitdə natrium tiogerminatla talliumun suda həll olan duzlarının qarşılıqlı təsirindən Tl_2GeS_3 tərkibli tallium tiogerminatın alınması şəraiti öyrənilmişdir.

İşin yerinə yetirilməsi üçün istifadə edilən tallium nitrat – tallium metalı duru nitrat turşusunda həll edilərək hazırlanmışdır. Alınmış məhlulun talliuma görə qatılığı $6,85 \cdot 10^{-2}$ M olmuşdur. $10^{-4}\%$ təmizlik dərəcəsinə malik germanium qatı ammonium hidroksid, hidrogen peroksid məhlulu qarışığında həll edilmişdir. Məhlul buxarlandırılaraq qurudulmuş və alınan germanium dioksid 3N xlorid turşusunda həll edilmiş və tannin metodu ilə germaniumun qatılığı təyin edilmişdir.

Hazırlanmış məhluldan təmiz hidrogen sulfid qazı buraxmaqla ağ rəngli germanium(IV)sulfid alınmışdır. Distillə suyu ilə təmiz yuyulmuş germanium(IV)sulfid 393 K-də qurudularaq sabit çəkiyə gətirilmişdir.

GeS_2 -dən nümunə götürülərək təzə hazırlanmış natrium sulfid məhlulunda həll edilmişdir (həllolma germanium sulfidin miqdarının artıq qalması sərti ilə aparılmışdır). Natrium tiogerminat məhlulu üzərinə tallium nitrat məhlulu əlavə edilir. Bu zaman qəhvəyi rəngli çöküntünün əmələ gəlməsi tarazlığın pozulduğunu göstərir. Alınan nümunənin ilkin analizi reaksiya tənliyini aşağıdakı kimi tərtib etməyə imkan verir.



Bununla yanaşı reaksiyanın termodinamiki parametrləri hesablanmış və nəticələr cədvəl 1-də verilmişdir

Cədvəl 1

298 K-də reaksiyanın termodinamiki parametrləri

ΔH	ΔG	ΔC
406,5 k/mol	401,2 k/mol	142,31 k/mol-dər.

Termodinamiki parametrlərin qiymətləri, prosenin gedində müşahidə olunan dəyişikliklərin (məhlulda Tl ionlarının azalması, çöküntünün əmələ gəlməsi, sonda mühidə Ge ionlarının olmaması) reaksiyanın verilən tənlik üzrə gətməsinin mümkünlüyünü təsdiq edir.

Birləşmənin əmələ gəlməsinin hidrogen ionlarının qatılığından asılılığı öyrənilmişdir. Natrium tiogerminat məhluluna $TlNO_3$ məhlulunun əlavə edilməsi zamanı qara rəngli çöküntü və tünd qəhvəyi rəngli məhlul əmələ gəlmişdir. Analizlər çöküntünün Tl_2S və Tl_2GeS_3 -ün qarışığından ibarət olduğunu göstərmişdir. Lakin pH-ın sonrakı 6 – 2 həddində alınan birləşmələr Tl_2GeS_3 formuluna uyğun alınmışdır. Çöküntü ayrıldıqdan sonra məhlulun rəngi bulantılı olmuşdur. Məhlulu xeyli qarışdırdıqdan sonra rəng şəffaflaşmışdır. Aparılan analizlərlə müəyyən edilmişdir ki, cökdürücünün miqdarı bir az artıq götürüldüyündən birləşmə əmələ gəldikdən sonra cökdürücünün ($TlNO_3$) artığı $TlOH$ şəklində ayrılır və o göstərilən pH-da həll olmayaraq sonradan çöküntüyə qarışır. Həllolma hasilərinin qiymətlərinin fərqlərinə görə ilk anda tallium tiogerminat əmələ gəlir və çökür, sonra isə $TlOH$ alınır.

Bu maneəni aradan qaldırmaq üçün sonrakı təcrübələr bufer məhlulu ($CH_3COOH + NH_4OH$) mühitində aparılmışdır. Belə ki, $TlNO_3$ sirkə turşusu ilə ammonium hidroksidin məhlulları ($CH_3COOH + NH_4OH$) qarışığında və pH-ın 7 – 1 həddində çöküntü əmələ gətirmir.

Bu işə birləşmənin daha təmiz alınmasına imkan yaradır. Bu şəraitdə yenidən Tl_2GeS_3 -ün əmələ gəlməsinin hidrogen ionlarının qatılığından asılılığı öyrənilmişdir.

Cədvəl 2

Tl_2GeS_3 -ün bufer məhlulu mühitində əmələ gəlməsinin pH-dan asılılığı

$$[Ge] = 2,65 \cdot 10^{-2}M, [Tl] = 1,37 \cdot 10^{-1}M, \text{tem-r. } 318 \text{ K}$$

Nö	Na_2GeS_3 ml	$TlNO_3$,ml	pH	Bir-in küt, mq	Bir-in nəzəri küt, mq	Qeyd
1	10	10	9,7	357,2	397,20	Məh. səf.
2	10	«__»	8,7	392,56	«__»	«__»
3	10	«__»	6,5	394,43	«__»	«__»
4	10	«__»	4,3	393,15	«__»	«__»
5	10	«__»	2,1	392,12	«__»	«__»

Reaksiyanın gedişinə temperaturun təsiri öyrənilmiş və bu zaman məlum olmuşdur ki, temperaturun birləşmənin əmələ gəlməsinə təsiri yoxdur (reaksiya aşağı temperaturda gedir). Lakin temperaturun 313 – 343 K həddində çökmə və süzmə sürətlə gedir, reaksiya 0,4 – 0,8 dəqiqəyə başa çatır (otaq temperaturunda 2 –5 dəq).

Müəyyən edilmiş optimal şəraitdə alınmış nümunələrin tərkibi kimyəvi analiz edilərək onun Tl_2GeS_3 formuluna uyğun gəldiyi təsdiq edilmişdir. Alınan nəticələr cədvəl 3-də verilmişdir.

Cədvəl 3

Tallium tiogermanatın kimyəvi analizi

Nüm., q	Tl, mq		Ge, mq		S, mq	
	nəz.	təc.	nəz.	təc.	nəz.	təc.
0,3342	237,15	231,58	42,44	40,82	34,61	31,35

Birləşmənin differensial termiki analizlə ərimə temperaturu təyin edilmişdir (769 K). Piknometrik metodla Tl_2GeS_3 -ün sıxlığı müəyyən edilmişdir ($d = 4,96 \text{ sm}^3$). Tl_2GeS_3 -ün suda həllolma qabiliyyəti öyrənilmiş və həllolma hasili ($hH = 1,84 \cdot 10^{-6}$) hesablanmışdır.

HEMORFİN PEPTİDLƏRİNİN FİZİOLOJİ AKTİV MƏRKƏZİNİN TƏDQIQI

G.Ə.Haqverdiyeva, N.M.Qocayev, Ə.M.Nəbiyev

Fizika Problemləri İnstitutu, Bakı Dövlət Universiteti, Z.Xəlilov 23, AZ-1148,

Bakı, Azərbaycan, E-mail: Hagverdigulnara@gmail.com

Təqdim olunmuş məqalə hemorfin opioid peptidərinin quruluş-funksiya əlaqələrinin araşdırılmasına həsr olunmuşdur. Ötən işlərimizdə [1-5] mexaniki model çərçivəsində 4 – 10 aminturşularından ibarət hemorfin peptidlərinin fəza quruluşları tədqiq olunmuşdur. Müəyyən edilmişdir ki, tədqiq olunmuş molekullar fəzada konformasiya sərtliyinə malik olsalarda, onların enerjisi aminturşu qalıqlarının yan zəncirlərinin vəziyyətlərinə çox həssasdır. Böyük molekulyar kütləli hemorfinlərin N- və C-uclu hissələrinə nəzərən mərkəzi Tyr-Pro-Trp-Thr tetrapeptid fraqmenti konformasiya sərtliyinə malikdir. Bu peptidlərin optimal quruluşlarında qeyd olunan tetrapeptidin Pro-Trp seqmentində peptid zəncirinin dönüşü aşkar olunmuşdur. Bu tip konformasiyalarda Tyr, Trp və Thr qalıqları bir-birilə və digər qalıqlar ilə effektiv qarşılıqlı təsirlərdə iştirak edirlər. Quruluş-funksiya analizi nəticəsində aşkar olunmuşdur ki, hemorfin-4 peptidi ilə eyni aminturşusu ardıcılığına malik olan Tyr-Pro-Trp-Thr fraqmenti hemorfinlərin liqand-reseptor qarşılıqlı təsirləri üçün önəmlidir. Bioloji testlərdən keçmiş analoqların konformasiya profillərinin araşdırılması [6-7] əsasında belə nəticəyə gəlmişik ki, hemorfinlərin spesifik təsirlərinə cavab verən bu fizioloji aktiv mərkəz onların fəza quruluşlarının formalaşmasında əsas rol oynayır. Hemorfin-4 peptidinin fəza quruluşunu daha dərinədən öyrənmək məqsədi ilə onun elektron quruluşunu tədqiq etmişik.

Məlumdur ki, molekulanın hər bir konformasiyası özünəməxsus elektron parametrlərlə xarakterizə olunur. Bu tetrapeptidin elektron quruluşunu xarakterizə edən bir sıra enerji xarakteristikalar, elektron sıxlığının paylanması, atomların parsial yükləri, elektrostatik potensialı, elektrik dipol momentləri biopolimerlərin hesablanması üçün hazırlanmış AM1 kvantkimyəvi metodunun köməyi ilə və HyperChem 7.5 proqramının demonstrasiya versiyasından istifadə edərək tədqiq olunmuşdur. Elektron enerjisinin optimallaşması üçün nüvələrin tarazlıq halına cavab verən konfigurasiyalar nəzərə alınmışdır, hesablamalarda hemorfin-4 peptidinin əsas zəncirin formasına görə fərqlənən optimal konformasiyaların həndəsi parametrləri [1] istifadə olunmuşdur. Valent yanaşmada 109 molekulyar orbitalları dolduran 218 elektron nəzərə alınmışdır. Optimizasiyada 199 molekulyar orbital iştirak etmişdir, onlardan 90 doldurulmamış qalmışdır. Öz-özünə qararlaşmada hemorfin-4 peptidinin dörd stabil quruluşları üçün iterasiyaların sayı, müvafiq olaraq 14, 35, 31 və 35 olmuşdur. Təqdim olunmuş cədvəldə bu konformasiyaların elektron quruluşlarını xarakterizə edən enerji parametrləri verilmişdir. Hesablama nəticələri həndəsi parametrlərin optimallaşdırılmasının korrekt olmasının göstəricisidir. Ortakvadratik Gradiyent (RMS Gradient) sıfır qiymətinə yaxınlaşır, bu da ki potensial enerjisinin minimizasiya procedurunun effektiv yerinə yetirilməsindən və sistemin enerji xassələrinin balansda olmasından xəbər verir. Dipol momentin qiyməti elektron sıxlığının, müsbət və mənfi yüklərin bərabər paylanmasını xarakterizə edir. Buna sübut stabil quruluşlardakı hesablanmış üçölçülü səthlərin konfigurasiyalarıdır. Müəyyən olmuşdur ki, tetrapeptidin nisbi enerjisi 0.0 kkal/mol və 1.4 kkal/mol olan konformasiyalar bu ardıcılığın optimal elektron quruluşuna cavab verirlər. Pro-Trp seqmentində dönüş ilə xarakterizə olunan bu konformasiyalarda Tyr və Trp qalıqları Pro-nə nəzərən sis-vəziyyətdə yerləşirlər və onların yan zəncirlərindəki halqaların müstəviləri bir birinə nəzərən 90^0 və ya 0^0 bucaq təşkil edirlər.

Cədvəl. Hemorfin-4 peptidinin stabil konformasiyalarının əsas elektron və enerji xarakteristikaları

Konformasiya	$E_{\text{nisb.}}=0.0$ (kkal/mol)	$E_{\text{nisb.}}=1.4$ (kkal/mol)	$E_{\text{nisb.}}=3.0$ (kkal/mol)	$E_{\text{nisb.}}=3.2$ (kkal/mol)
Dipol momenti (Db)	25.74	41.56	38.52	46.23
Tam enerji (kkal/mol)	-172170.7	-172170.2	-172129.98	-172129.98
Baglantı enerjisi (kkal/mol)	-7808.8	-7808.4	-7768.2	-7792.8
İzolə olunmuş atom enerjisi (kkal/mol)	-164362	-164362	-164362	-164362
Elektron enerjisi (kkal/mol)	-1763499.5	-1751094.4	-1807805.4	-1742734.9
Nüvə qarşılıqlı təsirlər enerjisi (kkal/mol)	1591328.8	1578924.2	1635675.39	1570580.31
Əmələ gəlmə enerjisi (kkal/mol)	-47.54	-47.06	-6.86	-31.47
HOMO	-6.21	-6.02	-5.87	-5.69
LUMO	-1.75	-2.19	-2.12	-2.27

Qeyd edək ki, nəzəri konformasiya analizinin nəticələrinə əsasən hemorfin-4 peptidinin nisbi enerjisi 1.4 kkal/mol olan konformasiyası qlobal konformasiyadan Trp-Thr seqmentinin açılmış vəziyyətdə olması ilə fərqlənir, bu səbəbdən tetrapeptidin bu dipeptid seqmenti fəzada dartılmış forma alır. Hemorfin-4 peptidinin məhz bu konformasiyası peptid zəncirini uzatdıqda hemorfinlər sinfinə daxil olan digər molekulaların qırmağı xatırladan optimal quruluşlarını təşkil edir, bu cür konformasiyalarda Tyr, Trp və Thr amin turşusu qalıqları daha effektiv kontaktlar qura bilirlər. Apardığımız kvant-kimyəvi hesablamalar da təsdiqləyir ki, tetrapeptidin qlobal konformasiyasının elektron quruluşu hemorfin-4 molekulu üçün, nisbi enerjisi 1.4 kkal/mol olan konformasiyanın elektron quruluşu isə bu tetrapeptid ardıcılığının fraqment forması üçün optimaldır. Cədvəldən görüldüyü kimi, nisbi enerjisi $E_{\text{nisb.}}=3.0$ və 3.2 kkal/mol olan konformasiyalar qlobal konformasiyaya tam enerjinin qiymətinə görə 41 və 16 kkal/mol qədər uduzurlar. Bağlantı enerjinin qiymətinə görə də bu konformasiyaların qlobal konformasiyaya uduşu da elə bu qədərdir. Qeyd edək ki, elektron enerjisinə görə nisbi enerjisi $E_{\text{nisb.}}=3.0$ kkal/mol olan quruluş qlobal formadan 44305 kkal/mol qədər daha əlverişli olsada, enerjinin bu növündə olan uduş nüvələrin itələmə enerjisinin və müvafiq olaraq tam enerjinin qiymətinin artması ilə kompensasiya olur. Tetrapeptidin tədqiq olunan konformasiyaları dipol momentinin qiymətinə görə də fərqlənilir. Nəticələrdən görüldüyü kimi, qlobal konformasiya dipol momentinin və molekulun elektron-donor xassələrini əks etdirən, yüksək dolmuş molekulyar orbital enerjisinin E_{homo} kiçik qiymətləri ilə xarakterizə olunur. Belə fikir yürütmək olar ki, bu quruluş cüzi kimyəvi reaksiya qabiliyyətinə və bu səbəbdən digər quruluşlara nisbətən aktivləşmə dərəcəsi ilə bağlı olan zəif elektrodonor xassələrinə malikdir. Müəyyən olmuşdur ki,

baxılmış hər bir konformasiya elektron sıxlığının spesifik paylanması ilə xarakterizə olunur, bu da ki öz növbəsində funksional qalıqların atomlarının effektiv yüklərinin qiymətlərində öz əksini tapmışdır. Qeyd edək ki, kiçikenerjili intervallarda baş verən konformasiya keçidləri müəyyən atom qruplarında yük sıxlığının fluktuasiyası ilə nəticələnir. Parsial yüklərin qiymətlərinin analizi göstərir ki, bu fluktuasiya 20 faizdən artıq deyil. Optimal quruluşlar arasında konformasiya keçidləri həm əsas zəncirin, həm də ki yan zəncirlərin atomlarının yüklərinin dəyişməsi ilə müşayət edilir, bu da ki onların hər bir konformasiyada fəzada özünə məxsus pozisiyalarda yerləşmələri ilə izah olunur. Yüklərin daha çox dəyişməsi yan zəncirlərində aromatik halqa daşıyan Tyr və Trp qalıqlarının və fəzada onlara yaxınlaşan Thr qalığının əsas zəncirinin atomlarında baş verir. Hemorfin-4 peptidinin elektron-konformasiya qarşılıqlı təsirlərinin tədqiqi bu sinfə mənsub olan peptidlərin təsir mexanizminin və quruluş-funksiya əlaqələrinin araşdırılması üçün vacib bir mərhələdir.

ƏDƏBİYYAT

1. Qocayev N.M., Haqverdiyeva G.Ə., Nəbiyev Ə.M. Hemorfinlərin bioloji aktiv hissəsinin konformasiya tədqiqi. Journal of Qafqaz University, 17 Fall, 2006, p.107-111
2. Nəbiyev Ə.M., Haqverdiyeva G.Ə., Qocayev N.M., VV-hemorfin-4 peptidinin fəza quruluşu. Journal of Qafqaz University, 17 Fall, 2006, p.63-69
3. Nəbiyev Ə.M., Haqverdiyeva G.Ə., Spinorfinin fəza quruluşunun tədqiqi. Journal of Qafqaz University, N.19, 2007, p.87-94
4. Ахвердиева Г.А., Набиев А.М., Годжаев Н.М. Теоретический подход к разработке анальгетических средств XV Российский национальный конгресс “Человек и лекарство”, 14-18 апреля 2008 г., Москва
5. Nəbiyev Ə.M., Haqverdiyeva G.Ə., Qocayev N.M. LVV-hemorfin-7 peptidinin fəza quruluşunun tədqiqi. Journal of Qafqaz University, N.23, 2008, p.72-78
6. Набиев А.М., Ахвердиева Г.А., Годжаев Н.М. Конформационные профили LVV-геморфина-7 и его монозамещенных аналогов. Всероссийская конференция «Биомедицинская инженерия и биотехнология», 7-8 июня, 2010 г., Курск, с.126-129
7. Nəbiyev Ə.M., Haqverdiyeva G.Ə., Qocayev N.M. LVV-hemorfin-7 peptidinin quruluş-funksiya xassələri. Azerbaijan Journal of Physics, Volume XVI, Series: Az, June, p.70-72

YAĞ TURŞUSUNUN MÜRƏKKƏB EFİRLƏRİNİN FİZİKİ XASSƏLƏRİ VƏ QURULUŞU

Ş.X.Xəlilov. D.R.Vəliyeva

Azərbaycan Dövlət Pedaqoji Universiteti

Mayelər fizikasının müasir problemlərindən biri mayelərin quruluşu ilə, fiziki xassələri arasında əlaqənin yaradılmasıdır. Bu məqsədlə yağ turşusunun mürəkkəb efirlərinin müxtəlif temperatur və təzyiqlərdə dinamik özlülüyü kapilyar viskozimetr üsulu ilə (İ.F.Qolibyev) [1] tədqiq edilmişdir. Təcrübənin nəticələri göstərir ki, dinamik özlülük əmsalı temperaturdan asılı olaraq eksponensial qanunla dəyişir.

$$\eta \sim \exp \frac{B}{T} \quad (1)$$

Ölçmə intervalında ($P=1 \div 500 \text{ mPa}$) özlülük əmsalının təzyiqdən asılı olaraq dəyişməsi demək olar ki, xətti qanunla artır. Bu düz xəttin tənlikləri yazılaraq dinamik özlülüğü müxtəlif təzyiq və temperatur intervalında hesablamaq mümkündür.

$$\eta_{P,T} = \eta_0 + \left(\frac{\partial \eta}{\partial P}\right)_T^{ort} + (P - P_0) \quad (2)$$

Burada η_0 - atmosfer təzyiqində T-yə uyğun özlülük əmsalı, $\left(\frac{\partial \eta}{\partial P}\right)_T^{ort}$ -özlülüğün orta barik

düzəlişidir. Bu düstur vasitəsilə istənilən temperatur və təzyiq intervalında $\pm 2\%$ dəqiqliklə dinamik əmsalını hesablamaq olar. Mayelərin özlülük əmsalının temperatur və təzyiqdən asılı olaraq dəyişməsi onların quruluşu ilə bağlıdır. Bu məqsədlə kiçik bucaq altında mayelərdən rentgen şüalarının səpilməsinin interferensiya mənzərəsinə baxılmışdır. İnterferensiya mənzərəsi əsasında J(S) diaqramı alınmışdır.[2]. Mayelərin böhran temperaturlarının malekulyar kütlədən asılılıq qrafiki göstərir ki, normal mayelərin böhran temperaturları bir xəttin üzərindədir. İzomerləri isə həmin xəttin üzərində olmur. Bu onu göstərir ki, normal mayelərin quruluşu izomerlərinkindən fərqlidir. J(S) diaqramı əsasında malekullar arasındakı məsafə hesablanır. J(S) diaqramının birinci maksimumunun hündürlüyü normal və izomerlərdə fərqlidir. Birinci maksimumun hündürlüyü normal propilbutirat üçün 671(e.v), izopropilbutirat üçün isə 639(e.v)-a bərabərdir. Buradan aydın olur ki, normalın J(S) diaqramının hündürlüyü izomerinkindən böyükdür. Dinamik özlülük üçün alınmış təcrübü nəticələr göstərir ki, normal mayelərin dinamik özlülüğü onun izomerinkindən çoxdur. Bu isə malekulalar arasındakı məsafədən asılıdır. Quruluş analizindən görünür ki, normal propilbutirat mayesində malekulalar arasındakı məsafə 5.5 \AA , izopropilbutirat üçün isə 5.7 \AA -dır.

Qonşu malekullar arasındakı orta məsafə məlum olarsa P.F.Çolpanin[2] təklif etdiyi düstur əsasında koordinasiya ədədi (Z) hesablanmışdır.[3]

$$Z = 6.2 \bar{R}^3 \frac{\rho}{\mu} \quad (3)$$

Burada ρ -mayenin sıxlığı, μ -molyar kütləsidir. J(S) diaqramı elektron vahidi ilə deyil nisbi vahidlərlə alınır, lakin radial paylanma funksiyasını hesablamaq üçün elektron vahidlərdən istifadə olunur. Ona görə də təcrübədən alınan nəticələri elektron vahidlərinə çevirmək lazımdır, yəni

$$J_{el.v}(s) = kJ_{nisbi} \quad (4)$$

k-nı təyin etmək üçün müxtəlif metodlardan istifadə olunur.

Radial paylanma funksiyası isə rentgen şüalarının səpilməsinə əsasən hesablanır. Əsasən radial paylanma funksiyasının $\omega(R)$ əvəzinə atom sıxlığının paylanma funksiyasından $\rho(R)$ -dən istifadə olunur ki, o da bir-birilə aşağıdakı kimi asılıdır:

$$\frac{N}{V} \omega(R) = \rho(R)$$

Radial paylanma funksiyasını bilməklə yaxın qonşu malekulların sayını (koordinasiya ədədini) hesablamaq olar:

$$N(r) = \frac{4\pi N_A}{V} \int_0^r r^2 \rho(R) dr$$

Burada, V- mayenin bir malekulunun həcmi, N_A - Avaqadro ədədidir. Həmçinin R.P.F-nı bilməklə maye malekullarının quruluşu haqqında dəqiq məlumat alınmışdır. Bu isə elektron sıxlığının paylanma əyrisini analiz etməklə müəyyən edilir. Mürəkkəb efir malekullarının quruluşunda əsasən CH₂ qrupu və COOH qrupu vardır. Onların zıqzaq şəklində düzülüşdür. Mərkəzdən keçən ox ətrafında fırlanıqda silindirik forma alır. Müəyyən edilmişdir ki, mürəkkəb efirlər üçün C-C arasındakı məsafə təqribən 1.48 \AA ; C-O= 1.45 \AA ; O-H= 0.96 \AA ; C-H= 1.09 \AA -dir.

[1]. İ.F. Qolıbyev, N.İ. Qiezdilov. Vyazkost qazovix smesey qoskomiteta standartov S.D.

SSSR M.1971 st.319

[2]. A.F. Skrişevskiy. Strukturniy analiz jidkostey izd. Vıssşaya şkola 1971 st.79-82

[3]. A.Z. Qolik. P.F. Çolpan. Plotnost i blijnaya koordinasiya nekatorix jidkostey. Ukr.fiz.jurn.

T. VII. №20 1966 c. 20.

**BİR SIRA NEYROPEPTİDLƏRİN KOMPÜTER PROQRAMLARI
VASİTƏSİ İLƏ FƏZA QURULUŞUNUN TƏDQIQI**

L.İ.Vəliyeva, E.Z.Əliyev

Bakı Dövlət Universiteti

e-mail: Lala_Veliyeva@rambler.ru

Müasir zamanda insanların katastrofik artımı ilə əlaqədar ekoloji problemin ön plana çəkilməsi danılmazdır. Bununla əlaqədar kənd təsərrüfatı məhsulları ziyanvericilərinin məhvi ilə bağlı aparılan elmi-tədqiqat işləri öz aktuallığı baxımından bir çox alimlərin maraq dairəsini təşkil edir. Bu baxımdan mənim fəza quruluşunu tədqiq etdiyim drostatinlər sinfinə mənsub neyropeptidlərin fəza quruluşlarının tədqiqi bir sıra aparıcı elmi dairələr tərəfindən rəğbətlə qarşılır və alınan nəticələr maraqla təhlil edilir.

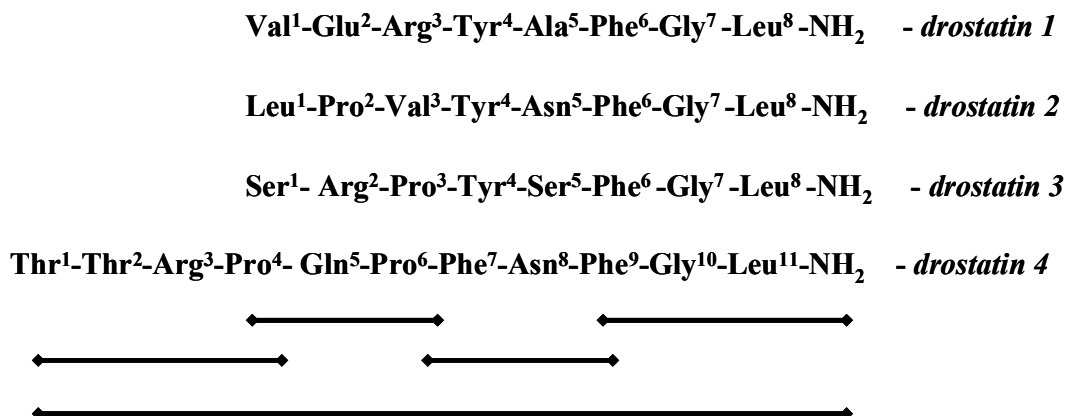
Keçən əsrin sonlarından qeyd edilən neyropeptidlərin hərtərəfli tədqiq edilməsinə baxmayaraq, onlara olan maraq hələ də davam edir. Belə ki, bir qrup ingilis bioloqlarının təcrübələri nəticəsində müəyyən edilib ki, bu neyropeptidlərin konsentrasiyası qanda lazımı səviyyədə çox olduqda, onların izolə edildikləri həşəratlarda öz-özünü məhv etmə mexanizmi işə düşür.

Bu molekulların fəza quruluşlarını tədqiq etmək üçün nəzəri kompüter proqramları üsullarından – nəzəri konformasiya analizi, molekulyar dinamika və yarımempirik kvant-kimyəvi üsullardan istifadə edilmişdir. Tədqiqatlar nəticəsində bu neyropeptidlərin stabil (dayanıqlı) konformasiyaları, onların enerji və həndəsi parametrləri həm vakuum şəraitində, həm də su mühitində müəyyən edilmişdir.

Qeyd edilən birləşmələrə misal olaraq *Drosophila melanogaster* sisəyinin neyrosekretor hüceyrələri tərəfindən ifraz olunan drostatinlər sinfinə mənsub bir qrup neyropeptidi göstərmək olar (şəkil 1). Bu neyropeptidlər yuvenil-cavan hormonların sintezini ingibirləşdirməklə yanaşı, sinir sisteminin tənzimlənməsi proseslərində və neyroötürmədə də fəal iştirak edirlər.

Bu neyropeptidlərin fəza quruluşlarını tədqiq etmək üçün drostatin 1 üçün 120, drostatin 2 üçün 960, drostatin 3 üçün 1297, drostatin 4 üçün isə 1506 variant hesaba buraxılmış və müəyyən edilmişdir ki, drostatin molekullarının stabilləşməsində xüsusi rolu həm əsas zəncirinn atomları, həm də yan zəncirinn atomları arasında yaranan hidrogen rabitələri oynayır (məsələn, Val(CO)...Ala(NH), Arg(CO)...Leu(NH), Tyr(CO)...Phe(NH), Phe(CO)...Leu(NH), Val(CO)...Asn(NH), Ser(CO)...Tyr(NH), Gln(CO)...Phe(NH)). Bundan başqa, hesablamalar nəticəsində məlum olmuşdur ki, drostatin molekullarının bükük quruluşlarını təmsil edən konformasiyaların əksəriyyətinin son uclu pentapeptid fraqmentlərində α -spiral quruluş yaranır.

Bizim tərəfimizdən alınan nəticənin bu molekullar üçün mətbuatda gedən nəticələrlə üst-üstə düşməsi faktı bir daha bizim hesablamaların dürüstlüyünün göstəricisidir.



Şəkil 1. Drostatin molekullarının ilkin quruluşu və hesablama sxemi

Alınan nəticələrin doğruluğu neuropeptidlərin molekulyar-dinamik xüsusiyyətlərinin öyrənilməsi zamanı da təsdiq olunmuşdur. Neuropeptidlərin molekulyar dinamikası həm vakuum şəraitində, həm də su mühitində 30 pikosaniyə müddətində nəzərdən keçirilmiş və su molekullarına qarşı dayanıqlı quruluşa malik olmaları aydınlaşdırılmışdır. Neuropeptidlərin çoxlu sayda su molekulları ilə hidrogen rabitələrinin yaranmasında iştirak etmələrinə baxmayaraq, son uclu fraqmentdə α -spiral quruluşun dəyişməyərək saxlanılması müəyyən edilmişdir.

Alınan nəticələrdən gələcəkdə drostatin neuropeptidlərinin sintetik analoqlarının yaradılmasında, elektron-dinamik xüsusiyyətlərinin öyrənilməsində və ingibirləşmə proseslərində bioloji rollarının müəyyən edilməsində istifadə edilməsi nəzərdə tutulur.

ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ КОНФОРМАЦИОННЫЙ АНАЛИЗ МОЛЕКУЛЫ ИНДОЛИЦИДИНА

Р.Э.Алиев, К.А.Юсифова, Ф.А.Кадымова

Бакинский Государственный Университет

Антибактериальный пептид индолицидин относится к классу пептидов семейства кателицидинов, выделенных из нейтрофильных гранул свиньи [1]. Этот пептид способен эффективно бороться с бактериями и грибами и эта его особенность может быть использована в качестве лекарственных препаратов в лечении ряда инфекционных болезней. Однако, наряду с антибактериальной и противовирусной способностью, индолицидин обладает вредным для человека гемолитическим действием, то есть разрушает человеческие эритроциты, и это не позволяет использовать его в качестве нового антибиотика [2]. Триптофан-богатый пептид индолицидин имеет первичную структуру из 13 аминокислот :

Pe1-Leu2-Pro3-Trp4-Lys5-Trp6-Pro7-Trp8-Trp9-Pro10-Trp11-Arg12-Arg13. По всей видимости, оригинальная аминокислотная последовательность индолицидина необходима для формирования определенной пространственной структуры, которая является важной для связывания пептида с мембраной. Понять стереохимические особенности механизма действия индолицидина возможно, если знать ее структурно-функциональную организацию, то есть не только определить пространственную организацию молекулы на атомном уровне, но и исследовать ее динамические характеристики. В настоящей работе методом молекулярной механики, используя методику поэтапного расчета [3] исследованы конформационные возможности молекулы индолицидина в условиях полярной среды и среды, имитирующей окружение мембраны. Схема поэтапного расчета конформаций индолицидина приведена на рис. 1. Pe1-Leu2-Pro3-Trp4-Lys5-Trp6-Pro7-Trp8-Trp9-Pro10-Trp11-Arg12-Arg1

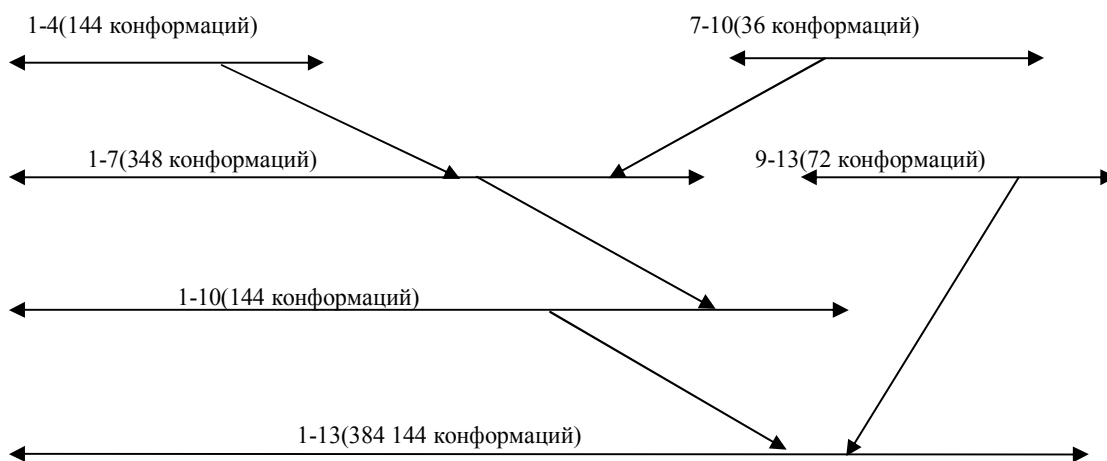


Рис. 1. Схема поэтапного расчета конформаций молекулы индолицидина.

Результаты конформационного анализа двух тетрапептидных фрагментов (Pe1-Trp4 и Pro7-Pro10), пентапептида (Trp9-Arg13) и гептапептида (Pe1-Pro7) приведены в [4]. При расчете конформаций фрагментов Pe1-Pro10 и всей молекулы индолицидина выбрана стандартная геометрия аминокислот: изолейцина, лейцина, пролина, лизина, триптофана и аргинина. Конформационная энергия молекулы нами представлялась как сумма невалентных, электростатических взаимодействий атомов, а также торсионных вкладов и энергии водородных связей. Невалентные взаимодействия рассчитывали по потенциалу Леннарда-Джона с параметрами Скотта и Шераги [5]. Электростатическую энергию оценивали по закону Кулона с зарядами на атомах, предложенными Момани и др. [6]. Все расчеты выполнены применительно к условиям полярной среды и среды, имитирующей окружение мембраны, т.е. величина диэлектрической проницаемости среды принята равной 10.

Торсионные потенциалы, описывающие вращения вокруг связей основных и боковых цепей взяты из работ Момани и др. [6]. Водородные связи, оцениваемые по потенциалу типа Морзе, предполагались ослабленными и энергия связи в воде на равновесном расстоянии принята равной 1,5 ккал/моль. Отсчет двугранных углов произведен согласно номенклатуре IUPAC-IUB [7]. Расчет оптимальных форм фрагмента Pe1-Pro10 и всей молекулы индолицидина выполнен путем минимизации конформационной энергии при вариации двугранных углов вращения. В качестве нулевых приближений выбраны сочетания оптимальных форм R и В состояний остатков на конформационной карте ϕ - ψ .

Низкоэнергетические конформационные состояния гептапептидного Pe1-Pro7 и тетрапептидного Pro7-Pro10 фрагментов стали исходными для N-концевого декапептидного фрагмента Pe-Pro10. Расчет 144-х конформаций, принадлежащих 16-ти

возможным шейпам выявил 9 низкоэнергетических шейпов, конформации которых попадают в интервал 0-5 ккал/моль. И, наконец, на основе стабильных структур N-концевого декапептидного Ile1-Pro10 и перекрывающегося с ним C-концевого пентапептидного Trp9-Arg13 фрагментов было исследовано пространственное строение всей молекулы индолицидина. Анализ 384 конформаций индолицидина выявил 28 низкоэнергетических конформаций, принадлежащих 12-ти шейпам и попадающих в интервал энергии 0-5 ккал/моль. Расчет конформационных состояний молекулы индолицидина показал, что все его стабильные конформационные состояния можно сгруппировать в нескольких семействах, которые содержат идентичную конформацию центрального участка в виде комбинаций β -загибов.

Литература

1. C.L.Friedrich, A.Rozek, A.Patrykat, R.E.W.Hancock J.Biol.Chemistry, 2001, v.276, N 26, p.26015-26022
2. D.J.Schibli, L. T. Nguyen, et al Biophysical J., 2006, v.91, p.4413-4426
3. Попов Е.М. Структурная организация белков, М., 1989, 360 с.
4. Алиев Р.Э., Юсифова К.А., Кадымова Ф.А. Fizikanın müasir problemləri. II Respublika konfransının materialları, Bakı, 2008, s.115-116
5. Scott R.A., Scheraga H.A. J.Chem.Phys., 1966, v.45, p.209
6. Momany F.A., Mc Guire R.F., et al J. Phys. Chem., 1975, v.79, p.2361
7. IUPAC-IUB Comission Biochemical nomenclature, Biochem. Biophys. Acta, 1971, v.229, p.17

АКУСТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ЖИДКИХ КРИСТАЛЛАХ

М.А. Асланов, Ф.Ш. Мамедов

Аз. АСУ

Исследования в этой области акустики жидких кристаллов (ЖК) в значительной степени связаны с поиском путей управления и оптимизации функциональных характеристик акустооптических (АО) приборов на ЖК, предназначенных для систем отображения информации. Анализируя результаты этих исследований более полно представленные в [1], их можно классифицировать по двум признакам: геометрии эксперимента и знаку диэлектрической анизотропии $\Delta\epsilon$:

- поперечное электрическое поле (директор и вектор E параллельны оси Z), $\Delta\epsilon > 0$ [2].

- поперечное электрическое поле, $\Delta\epsilon < 0$ [3].

Изучению физики и особенностей ориентационных явлений в НЖК в условиях совместного воздействия электрического и акустического полей посвящены работы [4]. Средних заслуживают особого внимания работы, посвященные исследованию вторичных явлений. К ним относится, например эффект локального вращения директора обнаруженный экспериментально в гомеотропном слое НЖК в поперечном электрическом поле при воздействии механических деформаций, эллиптический сдвиг, сжатие на звуковых (50-500 Гц) и УЗ – частотах (1-100 кГц). Из результатов систематических экспериментальных и теоретических исследований воздействия поверхностных акустических волн с частотой 6-30 МГц на слой НЖК о поперечном электрическом поле (частота ~ 50 Гц) приведен семейство графиков, иллюстрирующих связь оптической прозрачности слоя и амплитуды волны в отсутствие электрического поля и при

напряжениях равных 4,5 и 4,6 В. Существенным представляется тот факт, что вблизи перехода Фредерикса [5] чувствительность НЖК к акустическому воздействию возрастает более чем на порядок. Согласно теории, имеются следующие формульные представления: $m(E) = m(0)E_D^4 / \Pi^4(E_D - E)^4$, которое хорошо согласуется с экспериментальными данными. Здесь E_D соответствует порогу перехода Фредерикса.

Эффект «Акустической памяти»:

Среди известных сегодня эффектов «акустической памяти» в ЖК отметим следующие:

- эффект памяти в ХЖК, связанный с образованием «пузырьковых доменов»;
- эффект памяти в ХЖК – аналог электрооптического эффекта динамического рассеяния света с памятью;
- эффект памяти при фазовом переходе НЖК – СЖК

В планарных слоях ХЖК с большим шагом спирали воздействие механических деформаций, которая осуществляется за счет перестройки исходной макроструктуры. Механизм этого явления связан с нелинейным акустическим эффектом: образованием акустических потоков. При высоких интенсивностях УЗ эти потоки приводят к формированию полидоменной структуры, интенсивно рассеивающий свет. Природа медленного «заживления» планарной макроструктуры изучено, но известно, что восстановление исходной планарной ориентации можно ускорить с помощью переменного электрического поля (~ 20 Гц). Экспериментально установлено, что остаточное рассеяние света составляет $\sim 0,5$ К, где К-коэффициент ослабления зеркально отраженного пучка света, значение которого определяет интенсивность УЗ. Отметим возможность использования этого эффекта в системах отображения акустической информации если необходимо разделить во времени и в пространстве процессы получения акустического изображения и его анализ.

Физическая природа еще одного механизма акустической памяти связано с образованием стадии релаксации ХЖК после воздействия УЗ, стабильной неоднородной структуры в виде интенсивно рассеивающей свет системы пузырьковых доменов (ПД) в слое с гомеотропными граничными условиями. Этот эффект имеет место только в том случае, когда в стадии озвучивания интенсивность УЗ достигает порогового значения возникновения акустического динамического рассеяния света. Между диаметром D пузырьковых доменов, толщиной слоя и шагом спирали существует определенная взаимосвязь, причем изменение частоты УЗ в интервале 0,5-3 МГц на вид функции $D(d, P_0)$ не влияет. Оказалось, данные экспериментов хорошо вписываются в рамки теории, которая объясняет образование и сравнительно высокую стабильность ПД наличием дефектов, закрепляющих ПД.

Корреляция теоретических результатов с данными экспериментов вполне удовлетворительная. Некоторое расхождение при $d/P_0 > 1,5$ обусловлено повышением плотности упаковки акустических ПД в этих условиях и их взаимодействием, что теория не учитывает. Свободная энергия F_{\min} стабильного (ПД), удерживаемого дисклинациями, также зависит от d/P_0 . При $d/P_0 < 0,5$ гомеотропная ориентация более стабильная, чем текстура с системой ПД, так как $F_{\min}/F_r > 1$; здесь F_r – свободная энергия гомеотропной макроструктуры. Принудительное восстановление исходной гомеотропной структуры осуществляет с помощью переменного электрического поля.

ЛИТЕРАТУРА

1. Капустин А.П., Капустина О.А. «Акустика жидких кристаллов» М.: Наука 1985. 247 с.
2. Sato S., Vedo H. // Jpn.I. Appl. Phys. 1981. V. 20. P. 511
3. Strigazzi A., Barbero G. // Mol. Cryst. Liq. Cryst. Lett. 1982. V. 82 P. 5.
4. Hakemi H. // I. Appl. Phys. 1982. V. 53. P. 6137

5. Де Жен П. Физика жидких кристаллов. М.: Мир, 1977. 400С.

SU-POLİETİLENQLİKOL (1000)-KOH SİSTEMİNİN ÖZLÜ AXINININ AKTİVLƏŞMƏ PARAMETRLƏRİ VƏ STRUKTUR XÜSUSİYYƏTLƏRİ

E.Ə. Məsimov, H.Ş. Həsənov, B.G. Paşayev, S.İ. Musayeva

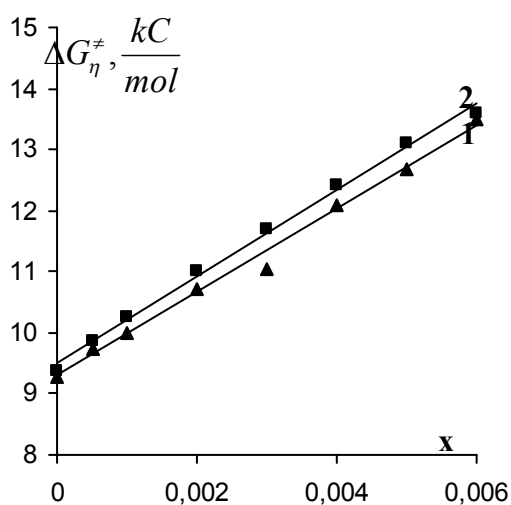
Bakı Dövlət Universitetinin Fizika Problemləri İnstitutu
p.bakhtiyar@yahoo.com

Polietilenqlikol $[HO-(CH_2-CH_2-O)_n-H]$ iki atomlu etilenqlikol (HO-CH₂-CH₂-OH) spirtinin polimerləşməsindən alınır. Polimerləşmə dərəcəsi (n-dən) asılı olaraq istənilən molyar kütləli polietilenqlikol (PEQ) almaq mümkündür. Bu polimer suda yaxşı həll olmaqla yanaşı molekulyar biologiyada, biokimyada, təbabətdə və s. geniş istifadə olunur. Su-PEQ sisteminin tədqiqinə həsr olunmuş işlər [1, 2] qəstərir ki, kiçik konsentrasiyalarda PEQ suyu strukturlaşdırır. Su-KOH və Su-NaOH sistemlərinin reoloji xassələrinin [3, 4, 5] tədqiqi əsasında müəyyən edilmişdir ki KOH kiçik konsentrasiyalda suyun strukturunu dağıdır, NaOH isə suyun nizamlı strukturunu artırır. Uç komponentli, məsələn, Su-PEQ-qələvi (duz), sistemlərinin reoloji xassələrinin tədqiqi komponentlər arasında mövcud ola biləcək qarşılıqlı təsir məsələlərini araşdırmağa imkan verir.

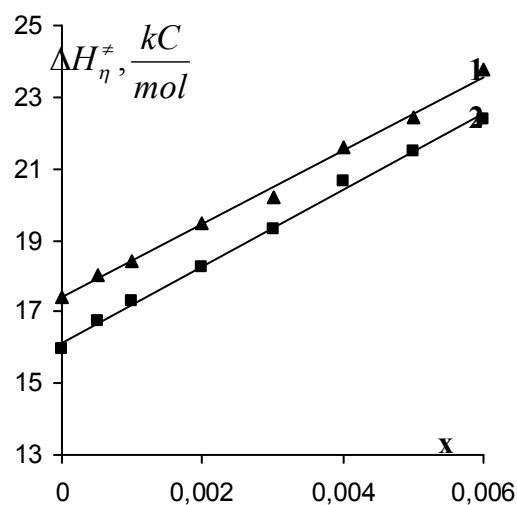
Təqdim olunan işdə su-PEQ-KOH sisteminin 293.15-323.15 K temperatur və PEQ-in 0-0.006 molyar hissə konsentrasiyası intervalında dinamik özlülüyü və sıxlığı ölçülmüşdür. İşdə molyar kütləsi 1000 olan PEQ-dən istifadə olunmuşdur. Həllədiçi olaraq KOH-in 0.01 molyar hissə konsentrasiyalı məhlulu götürülmüşdür.

Tədqiq olunan məhlulun baxılan temperatur və konsentrasiyalarda özlü axının aktivləşmə parametrləri (ΔG_η^\ddagger , ΔH_η^\ddagger , ΔS_η^\ddagger) təyin edilmiş, bunlara əsasən məhlulda baş verən struktur xüsusiyyətləri təhlil edilmişdir.

Su-PEQ (1000)-KOH (0.01) sistemlərinin özlü axının aktivləşmə parametrlərinin (ΔG_η^\ddagger , ΔH_η^\ddagger , ΔS_η^\ddagger) PEQ-in konsentrasiyasından asılılıqları uyğun olaraq şəkil 1, 2 və 3-də göstərilmişdir.



Şəkil 1. Su-PEQ (1000)-KOH (0.01) sistemlərinin

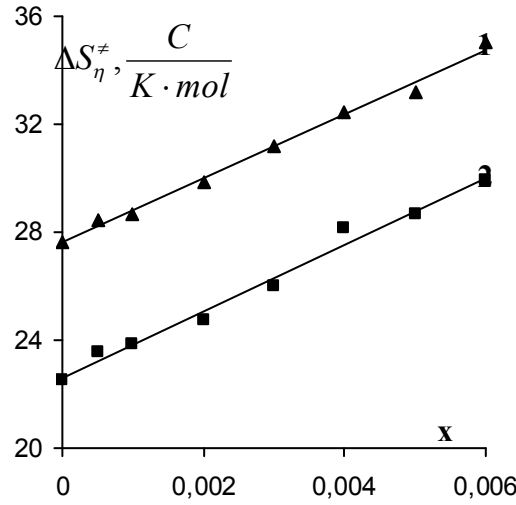


Şəkil 2. Su-PEQ (1000)-KOH (0.01) sistemlərinin

özlü axınının aktivləşmə Gibbs enerjisinin PEQ-in konsentrasiyasından asılılığı (T=293.15 K).

özlü axınının aktivləşmə entalpiyasının PEQ-in konsentrasiyasından asılılığı (T=293.15 K).

1-Su-PEQ (1000), 2- Su-PEQ (1000)-KOH (0.01)



Şəkil 3. Su-PEQ (1000)-KOH (0.01) sistemlərinin özlü axınının aktivləşmə entropiyasının PEQ-in konsentrasiyasından asılılığı (T=293.15 K).
1-Su-PEQ (1000), 2- Su-PEQ (1000)-KOH (0.01)

1, 2 və 3 sayılı şəkillərdən görüldüyü kimi, həm Su-PEQ (1000), həm də Su-PEQ (1000)-KOH (0.01) sistemləri üçün tədqiq olunan temperatur və konsentrasiya intervalında özlü axınının aktivləşmə parametrləri məhlulda PEQ-in konsentrasiyasının artması ilə artırlar. Lakin hər üç parametrlərin qiymətləri verilmiş temperaturda fərqlidirlər. Belə ki,

$$\Delta G_{\eta}^{\ddagger}(Su - PEQ(1000)) < \Delta G_{\eta}^{\ddagger}(Su - PEQ(1000) - KOH(0.01)),$$

$$\Delta H_{\eta}^{\ddagger}(Su - PEQ(1000)) > \Delta H_{\eta}^{\ddagger}(Su - PEQ(1000) - KOH(0.01)),$$

$$\Delta S_{\eta}^{\ddagger}(Su - PEQ(1000)) > \Delta S_{\eta}^{\ddagger}(Su - PEQ(1000) - KOH(0.01))$$

olur.

Yuxarıda qeyd etdik ki, kiçik konsentrasiyalarda KOH suyun strukturunu dağıdır, PEQ isə suyu strukturlaşdırır. Bu işdə ilkin həlledici olaraq KOH-in 0,01 molyar hissəli su məhlulu qötürülmüşdür. Deməli, PEQ strukturu nisbətən dağılmış suya daxil edilir. Bu halda da PEQ suya strukturlaşdırıcı təsir göstərir (şəkil3, 2-ci əyri), lakin bu təsir Su-PEQ sistemində nəzərə alınmayan bir qədər azdır. Su-PEQ-KOH sistemində K^+ ionunun PEQ-in molekulu ilə qarşılıqlı təsirdə olub-olmadığını müəyyənləşdirmək üçün yəqin ki, digər metodlardan da istifadə etməyə ehtiyac var.

ƏDƏBİYYAT

1. E.Ə.Məsimov, B.G.Paşayev, H.Ş.Həsənov, S.V. Hüseynova. Polietilenqlikolun sulu məhlulunun struktur xüsusiyyətləri. Bakı Universitetinin Xəbərləri, fizika-riyaziyyat elmləri seriyası, 2007, № 1, s.101-108.
2. E.Ə.Məsimov, H.F.Abbasov, H.Ş.Həsənov. Polietilenqlikolun duru sulu məhlullarının struktur xüsusiyyətləri: Qafqaz universiteti jurnalı. Təbiyət elm seriyası №21, 2008, s.73-76.

3. E.Ə.Məsimov, H.Ş.Həsənov, H.F.Abbasov, B.G.Paşayev. KOH-ın sulu məhlullarının reoloji xassələri. Bakı universiteti xəbərləri. Fizika-riyaziyyat elmləri seriyası 2007, №2.s.165-170.
4. E.Ə.Məsimov, H.F.Abbasov, B.G.Paşayev. KOH və NaOH-ın duru sulu məhlullarının dielektrik xassələri. Fizika, 2006. cild X11 №3. s.11-13.
5. Э.А.Масимов, Б.Г.Пашаев, Г.Ш.Гасанов, Х.Ф.Аббасов. О структурных изменениях в разбавленных водных растворах NaOH и KOH. АМЕА, Fizika, СІLD XIII, №1-2, 2007, s.139-143.

МИКРОЭЛЕМЕНТЫ ПОДЗЕМНЫХ ВОД ПРИКАСПИЙСКОЙ НИЗМЕННОСТИ

Имамова Т.А

Институт физических проблем, Бакинский Государственный Университет

Прикаспийская низменность (междуречье Самур – Атачай) располагается в северной части Азербайджана, между северо-восточными предгорьями Большого Кавказа и берегом Каспийского моря. В административном отношении район исследования охватывает территории Хачмасского, Кусарского, Яламинского, Кубинского, Дивичинского и Сиазанского районов Азербайджанской республики. Крупными населенными пунктами в пределах исследуемого района работ являются районные центры- гг.Куба, Кусары, Хачмас, Худат, Дивичи и Сиазань.

В орографическом отношении северный склон юго - восточного Кавказа делится на две основные части: низменность (область аккумуляции) и горы (область денудации).

Район междуречья Самур - Атачай Прикаспийской низменности имеет слабо наклонную, террасированную поверхность, постепенно понижаясь от 100 - 300 м над уровнем до 28 м ниже уровня океана (уровня Каспийского моря).

Подземные воды распространены повсеместно. Глубина залегания грунтовых вод уменьшается от предгорий к морю (от 75 до нуля), такое же направление имеет поток подземных вод, уклон которого изменяется от 0,2 - 0,15 до 0,017 - 0,02.

Мощность водоносных горизонтов грунтовых вод изменяется от 60 до 114 м. Грунтовые воды территории характеризуются высокой водообильностью - суммарный дебит выходящих на дневную поверхность родников составляет 6,8 м³/сек., дебит эксплуатационных скважин колеблется в пределах от 46 до 166 л/сек., при удельных дебитах 0,35 - 22,9 л/сек.

В зимние месяцы года воды рек региона замерзают лишь у водораздела Главного Кавказского хребта на высотах 2500 м и более. Наиболее распространенными являются забереги, шуга и донный лед. Продолжительность их отмечается значительной неустойчивостью и составляет от 5 до 60 дней в зиму.

Изучение микроэлементов в минеральных и термальных водах представляет большой интерес как в теоретическом отношении, так и для решения многих практических задач. Изучение микроэлементов позволяет решить такие вопросы, как генезис вод. Использовать их содержание в водах в качестве лечебного фактора, оценить эти воды как промышленное сырье для получения ряда ценных химических элементов и возможности применения их в качестве гидрохимических показателей при поисках вод и других полезных ископаемых.

В настоящее время большинство микроэлементов, содержащихся в минеральных и термальных водах междуречья Самур-Атачай сравнительно хорошо изучены. Микроэлементы в минеральных и термальных водах описываемого региона изучаются в

основном с бальнеологической точки зрения, так как некоторые из них придают минеральным водам высокие лечебные свойства. Микроэлементы также представляют особый интерес в санитарно-гигиеническом отношении.

В минеральных и термальных водах междуречья Самур-Атачай обнаружено следующие микроэлементы: J, Br, Mn, Sr, Fe, Cu, As, Zn, Pb.

В настоящей статье на основании данных микроэлементов рассматриваются особенности распространения наиболее типичных минеральных и термальных вод исследуемой территории.

Количество йода (J) в минеральных и термальных водах исследуемого региона изменяется в пределах от нуля до 32,2 мг/л. Самое высокое содержание йода наблюдается в водах в скважины №116 - пл.Худат (рис.4.7) достигающей 137,1 мг/л.

Содержание брома (Br) в минеральных и термальных водах изменяется. Оно колеблется от 7,5 (скв.№9–пл. Ялама) до 276,6 мг/л (скв.№112-пл. Худат). Значительное содержание брома наблюдается в хлоридных и натриево-кальциевых термальных и минеральных водах.

Содержание стронция (Sr) в минеральных и термальных водах междуречья Самур-Атачай незначительно. Оно колеблется в интервале 0,0033-0,0079 мг/л (скв.№20,113-пл.Худат).

Марганец содержится в минеральных и термальных водах этого региона в незначительном содержании (от 0,0005 - до 0,003 мг/л).

Железо также присутствует во всех минеральных и термальных водах исследуемого региона, однако, в незначительном количестве от нуля до 0,07 мг/л.

В минеральных и термальных водах междуречья Самур - Атачай был установлен и мышьяк, но в незначительном количестве 0,000014 мг/л. Известно, что мышьяк также придает воде особое лечебное свойство.

Мышьяк обычно накапливается в водах с повышенным содержанием хлора и высокой минерализацией. Это свидетельствует о том, что накопление мышьяка в минеральных и термальных водах также связано с концентрацией ионно-солевого состава этих вод.

Накопление в минеральных и термальных водах исследуемого региона углекислоты, гидрокарбонатов, мышьяка и радона свидетельствует о тектонической активности и значительной сейсмичности зоны предгорий Кусарской наклонной равнины (междуречья Самур – Атачай).

Содержание Zn, Cu, Pb в водах региона незначительное.

Накопления микроэлементов в рассматриваемых водах тесно связано с действием таких факторов, как глубина их формирования, характер вмещающих пород, природа глубинных тектонических разломов и трещин, химический состав этих вод, их температура, степень минерализации и др.

AMORF POLIMERLƏRDƏ KOMPLEKS DINAMİK MODULA ƏSASƏN RELAKSASIYA SPEKTRININ HESABLANMASI

N.F.Əhmədov, N.Ə.Hənifəyeva, F.A.Əhmədov

Bakı Dövlət Universiteti gomes@2006@mail.ru

Məlumdur ki, polimerin deformasiyası zamanı onlar həm özlülük və həm də elastiklik xassələrinə malik olan materiallar kimi özlərini aparırlar. Başqa materiallardan fərqli olaraq polimerlərin özlülüyü və elastikliyi deformasiya müddətindən və onun sürətindən asılı olur. Ona görə də polimerlərin deformasiyası qeyri-stasionar və ya tarazılıqda olmayan prosesdir. Deformasiya zamanı materialı təşkil edən quruluş elementlərinin qarşılıqlı vəziyyəti dəyişir.

Quruluş elementləri arasındakı qarşılıqlı təsir onların vəziyyətinin dəyişməsinə mane olur. Bu səbəbdən quruluş elementlərinin dönməsi, yerdəyişməsi, onların deformasiyası zamandan asılı olaraq baş verir. Beləliklə, deformasiya zamanı polimerin tarazılıq halı bir müddət keçdikdən sonra yaranır. Bu müddət isə elementlər arasındakı qarşılıqlı təsirin xarakterindən asılıdır.

Polimerin deformasiyasının ilk anlarında elastik deformasiya (kinetik vahidlərin dönməsi, ölçülərinin dəyişməsi) və özlüaxıcılıq (quruluş elementlərinin bir-birinə nəzərən yerini dəyişməsi) eyni zamanda baş verir və onları bir-birindən ayırmaq mümkün olmur: makromolekul zənciri və onu təşkil edən kinetik vahidlər verilmiş həcmdə xaotik paylandıqları üçün gərginlik (deformasiya) onlar arasında bərabər paylanır. Bu ondan irəli gəlir ki, quruluş elementləri həm öz aralarında və həm də zəncirlərin yaratdığı sahə ilə qarşılıqlı təsirdə olurlar. Ona görə də polimerlərdə bütün həcmdə gərginliyin qərarlaşması bir relaksasiya müddəti ilə deyil, relaksasiya müddətləri spektri ilə xarakterizə olunur. Relaksasiya müddətləri spektrini müəyyən etmək üçün kompleks moduldan istifadə etmək daha əlverişlidir.

Tutaq ki, xətti makromolekul zəncirlərdən təşkil olunmuş amorf polimerin deformasiyası $\varepsilon(t) = \varepsilon_0 e^{(\omega_1 + i\omega)t}$ qanunu ilə dəyişir

Aydındır ki, gərginliyin dəyişməsi deformasiyanın dəyişməsi ilə eyni fazada olmur. Bunu nəzərə almaq üçün deformasiyanın θ anındakı qiymətinin gərginliyə t anındakı təsirini ifadə edən $\psi(t - \theta)$ funksiyasından istifadə etsək, gərginliyin zamandan asılılığını aşağıdakı inteqralla ifadə etmək olar:

$$\sigma(t) = \int_{-\infty}^t \frac{d\varepsilon(\theta)}{d\theta} \psi(t - \theta) d\theta \quad (1)$$

Burada $\frac{d\varepsilon(t)}{dt} = \varepsilon_0 (\omega_1 + i\omega) e^{(\omega_1 + i\omega)t}$ olduğunu nəzərə alaraq və $t - \theta = u$ dəyişəni ilə əvəz edək, onda

$$\begin{aligned} \sigma(t) &= \varepsilon_0 (\omega_1 + i\omega) \int_{-\infty}^t e^{(\omega_1 + i\omega)\theta} \overline{\psi}(t - \theta) d\theta = -\varepsilon_0 (\omega_1 + i\omega) \int_{-\infty}^t e^{(\omega_1 + i\omega)(t-u)} \overline{\psi}(u) du = \\ &= \varepsilon_0 e^{(\omega_1 + i\omega)t} (\omega_1 + i\omega) \int_0^{\infty} e^{-(\omega_1 + i\omega)u} \overline{\psi}(u) du \end{aligned}$$

alırıq. Aşağıdakı işarələməni edək:

$$E^*(\omega_1 + i\omega) = (\omega_1 + i\omega) \int_0^{\infty} e^{-(\omega_1 + i\omega)u} \overline{\psi}(u) du = (\omega_1 + i\omega) \left\{ E_{\infty} \left| -\frac{e^{-(\omega_1 + i\omega)u}}{\omega_1 + i\omega} \right|_0^{\infty} + \int_0^{\infty} \overline{\psi}(u) e^{-(\omega_1 + i\omega)u} du \right\}$$

Burada $\omega_1 \rightarrow 0$ -da limitə keçsək dinamik modul üçün

$$E^*(i\omega) = E_{\infty} + i\omega \int_0^{\infty} \overline{\psi}(\theta) e^{-i\omega\theta} d\theta \quad (2)$$

alırıq ($\omega_1 \rightarrow 0$ -da limitə keçmə o deməkdir ki, zaman $\rightarrow \infty$ olduqda rəqslərin amplitudu sıfıra bərabər olur. Bu şərt fiziki baxımdan doğrudur, ona görə ki, rəqslər həmişə məhdud zamanda baş verir). Yuxarıda yazılanların limiti $\varepsilon(t) = \varepsilon_0 e^{i\omega t}$ və $\sigma(t) = E^*(i\omega) \varepsilon(t) = E^*(i\omega) \varepsilon_0 e^{i\omega t}$ verdiyindən (1) tənliyi aşağıdakı şəkildə düşər:

$$\begin{aligned} E^*(i\omega) \varepsilon_0 e^{-i\omega t} &= \varepsilon_0 i\omega \int_{-\infty}^t i\omega \tau \psi(t - \theta) d\theta = \varepsilon_0 e^{i\omega t} i\omega \int_0^{\infty} \overline{\psi}(u) e^{-i\omega u} du \quad \text{və ya} \\ E^*(i\omega) &= i\omega \int_0^{\infty} \overline{\psi}(\theta) e^{-i\omega\theta} d\theta . \end{aligned}$$

Relaksasiya funksiyasını Laplas inteqralı ilə göstərək:

$$\psi(t) = \int_0^{\infty} N(s)e^{-ts} ds. \quad (3)$$

Burada $N(s)$ -spektral funksiya və ya relaksasiya spektri adlanır. (3)-ü (2)-də nəzərə alsaq

$$E^*(i\omega) = E_{\infty} + i\omega \int_0^{\infty} e^{-i\omega\theta} d\theta \int_0^{\infty} N(s)e^{-\theta s} ds$$

olar. İnteqrallamanın yerlərini dəyişərək bu ifadəni hesablasaq

$$E^* = E_{\infty} + i\omega \int_0^{\infty} N(s) ds \left| - \frac{e^{-(s+i\omega)\theta}}{s+i\omega} \right|_0^{\infty} = E_{\infty} + i\omega \int_0^{\infty} N(s) \frac{ds}{s+i\omega} \quad (4)$$

alarıq. Burada inteqralları ifadənin sürət və məxrəcini $(s-i\omega)$ -ya vursaq, alarıq:

$$E^*(i\omega) = E_{\infty} + E_1(\omega) + iE_2(\omega) = E_{\infty} + \int_0^{\infty} N(s) \frac{\omega^2}{s^2 + \omega^2} ds + i \int_0^{\infty} N(s) \frac{\omega s}{s^2 + \omega^2} ds.$$

Buradan isə dinamik modulun həqiqi və xəyali hissəsini aşağıdakı kimi tapmış olarıq:

$$E_1(\omega) = \int_0^{\infty} \bar{N}(s) \frac{\omega^2}{s^2 + \omega^2} ds, \quad E_2(\omega) = \int_0^{\infty} \bar{N}(s) \frac{\omega s}{s^2 + \omega^2} ds. \quad (5)$$

İndi isə $\omega = i\xi \pm \varepsilon$ əvəzləməsi edək. Onda (4) ifadəsi

$$E^*(-\xi \pm i\varepsilon) = E_{\infty} + (-\xi \pm i\varepsilon) \int_0^{\infty} \frac{N(s) ds}{s - \xi \pm i\varepsilon}$$

şəkildə olar. İnteqralları ifadəni məxrəcin qoşmasına vuraq. Onda

$$E(-\xi \pm i\varepsilon) = E_{\infty} - \xi \int_0^{\infty} \frac{N(s-\xi) ds}{(s-\xi)^2 + \varepsilon^2} + \varepsilon \int_0^{\infty} \frac{N(s) \varepsilon ds}{(s-\xi)^2 + \varepsilon^2} \pm i\varepsilon \int_0^{\infty} \frac{N(s)(s-\xi) ds}{(s-\xi)^2 + \varepsilon^2} \pm i\xi \int_0^{\infty} \frac{N(s) \varepsilon ds}{(s-\xi)^2 + \varepsilon^2}$$

alarıq.

Yenə də qəbul edək ki, rəqslər sonlu müddətdə sönürlər, yəni sistemin maksimum relaksasiya müddəti sonludur. Onda ε -nın sıfıra yaxınlaşan qiymətində birinci inteqralın limiti

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \xi \int_0^{\infty} \frac{N(s)(s-\xi) ds}{(s-\xi)^2 + \varepsilon^2} = \xi \frac{N(s) ds}{s-\xi},$$

ikinci və üçüncü inteqralların limiti isə sıfıra bərabər olur. Dördüncü inteqralın limitini hesablasaq

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \xi \int_0^{\infty} \frac{N(s) \varepsilon ds}{(s-\xi)^2 + \varepsilon^2} = \pi \xi \int_0^{\infty} N(s) ds \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\varepsilon}{\pi [(s-\xi)^2 + \varepsilon^2]} = \pi \xi \int_0^{\infty} N(s) \delta(s-\xi) ds = \pi \xi N(\xi)$$

olduğu alınır. Beləliklə görünür ki, E^* -un ifadəsində yalnız dördüncü hədd xəyali olur. Buradan isə relaksasiya funksiyasının dinamik modulun xəyali hissəsi ilə əlaqəsini

$$N(s) = \pm \frac{1}{\pi s} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \text{Im} E^*(-s \pm i\varepsilon)$$

şəklində tapmış oluruq. Burada $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (-s \pm i\varepsilon) = se^{\pm i\pi}$ əvəzləməsi etsək

$$N(s) = \pm \frac{1}{\pi s} \text{Im} E^*(se^{\pm i\pi}) \quad (6)$$

alınır. (5) düsturlarında uyğun olaraq

$$\frac{1}{s^2 + \omega^2} = \frac{i}{2\omega} \left(\frac{1}{s+i\omega} + \frac{1}{s-i\omega} \right) \quad \text{və} \quad \frac{s}{s^2 + \omega^2} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{s+i\omega} + \frac{1}{s-i\omega} \right)$$

əvəzləmələri etsək

$$N(s) = \pm \frac{2}{\pi s} \text{Im} E_1 \left(se^{\pm \frac{i\pi}{2}} \right) \quad \text{və} \quad N(s) = \frac{2}{\pi s} \text{Re} E_2 \left(se^{\pm \frac{i\pi}{2}} \right) \quad (7)$$

alarıq. Buradan görünür ki, kompleks dinamik modulu bilməklə relaksasiya spektrini axırıncı düsturlarla hesablamaq olar.

(7) düsturlarının ikincisindən istifadə etməklə dördelementli modelə uyğun amorf polimerin relaksasiya müddətləri spektrini

$$E_2(\omega) = \frac{E_0^2 \xi_0 \omega}{E_0^2 + \xi_0^2 \omega^2} + \frac{E_1^2 \xi_1 \omega}{E_1^2 + \xi_1^2 \omega^2}$$

ifadəsinə əsasən hesablasaq

$$N\left(\frac{1}{\tau}\right) = 2 \left[E_0 \tau_0 \frac{\tau_0^2 + \tau^2}{(\tau_0 + \tau)^2} \delta(\tau_0 - \tau) + E_1 \tau_1 \frac{\tau_1^2 + \tau^2}{(\tau_1 + \tau)^2} \delta(\tau_1 - \tau) \right]$$

alınar. Burada $\tau = \frac{1}{s}$, $\tau_0 = \frac{\xi_0}{E_0}$, $\tau_1 = \frac{\xi_1}{E_1}$ və $\delta(\tau_0 - \tau)$, $\delta(\tau_1 - \tau)$ - delta funksiyadır.

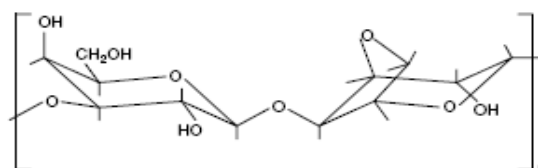
Spektral funksiyanın ifadəsindən alınır ki, $\tau = \tau_0$ və $\tau = \tau_1$ qiymətlərində onun maksimumları vardır, yəni xarakteristik relaksasiya müddətinə uyğun zaman anlarında rezonans udma yaranır.

AQAR GELİNİN BULANIQLIĞINA POLIETİLENQLIKOLUN TƏSİRİ

Məsimov E.Ə., İmaməliyev A.R., Abdullayeva A.İ.
Bakı Dövlət Universiteti, Fizika Problemləri İnstitutu

Məlumdur ki, polimer geli müxtəlif ölçülü assosiatların və bu assosiatlar arasındakı tikişlərin əmələ gətirdiyi fəza torundan ibarətdir [1]. Fəza torunun özəklərində həlledicinin immobilizasiya olunması gelin axıcılıq qabiliyyətinin itirilməsi ilə nəticələnir. Gelin fiziki xassələri qeyd olunan assosiatların sayından və ölçüsündən əhəmiyyətli dərəcədə asılıdır. Ona görə də assosiatların sayının və ölçüsünün təyin olunması gelin xassələrinin idarə olunması baxımından əhəmiyyətlidir. Gelin strukturunun öyrənilməsində ən effektiv metodlardan biri işığın səpilməsi metodudur. Bu işdə spektrfotometr vasitəsi ilə aqar gelində işığın səpilməsi və polietilenglikolun bu xassələrə təsiri öyrənilmişdir.

Təcrübələrdə geləmələgətirici polimer olaraq polisaxaridlərin tipik nümayəndəsi olan aqardan istifadə edilmişdir [2]. Aqar su mühitində güclü geləmələgətirmə qabiliyyətinə malikdir. Aqar bəzi dəniz yosunlarının (*Gellidium* və *Gracilaria*) qabığından alınır. Bütün aqar polisaxaridlərinin əsas quruluş vahidi olan aqarobioz disaxaridinin quruluşu şəkil 1-də göstərilmişdir. O, iki 1,3-β-D qalaktopiranoza (D-G) və 1,4-3, 6-anhidro-α-L-qalaktopiranozadan ibarətdir. Təbii aqar iki tərkib hissədən (komponentdən) ibarətdir. Bunlardan biri çox güclü gel əmələgətirmə qabiliyyətinə malik aqarozadır, digəri isə aqaropektin adlanır və bütün yüklü polisaxarid komponentləri özündə birləşdirir. Aqarozanı hətta kiçik miqdarda (0,15%) suya əlavə etdikdə gel əmələ gətirir. Məsələn, 1%-li aqar geli 85 – 90 °C temperaturlara qədər gel xassəsini saxlayır.



Şəkil 1

Müasir modellərə görə aqar gelinin fəza toru ikiqat spirallardan və çoxlu sayda ikiqat spirali özündə birləşdirən daha yuxarı tərtibli assosiatlardan – supraliflərdən ibarətdir [3]. Aqar gelinə bulanıqlıq verən bu assosiatlardır.

Aqar geli HİSPANAGAR firmasının istehsalı olan tozşəkili aqardan standart texnologiya üzrə hazırlanmışdır [4]. Toz şəklində olan aqar 0,5 çəki %-i miqdarında tərzidə çəkilərək təmiz (bidistillə) suyuna əlavə olunur və 1 – 2 gün bu vəziyyətdə saxlanır. Bu mərhələ aqarın şişməsi adlanır. Şişmiş aqar suyun qaynama temperaturuna yaxın temperatura qədər (95 °C) qızdırılır və bir neçə saat bu vəziyyətdə saxlanılır. Məhlul 16 mkm məsaməli şüşə süzəgcdən keçirildikdən sonra soyudulur və 35-40 °C intervalında gel halına keçir. Aqar geli geniş temperatur histerezisi xassəsi göstərir, yəni qızdırıldıqda aqarın konsentrasiyasından asılı olaraq 80 – 90 °C temperaturalara qədər gel halını saxlaya bilər.

Gelin strukturunu dəyişmək məqsədi ilə (məsələn, reoloji xassələrini idarə etmək üçün) ona 2% molekul kütləsi 3000 olan polietilenglikol (HO-(CH₂-CH₂-O)_n-H) əlavə olunmuşdur.

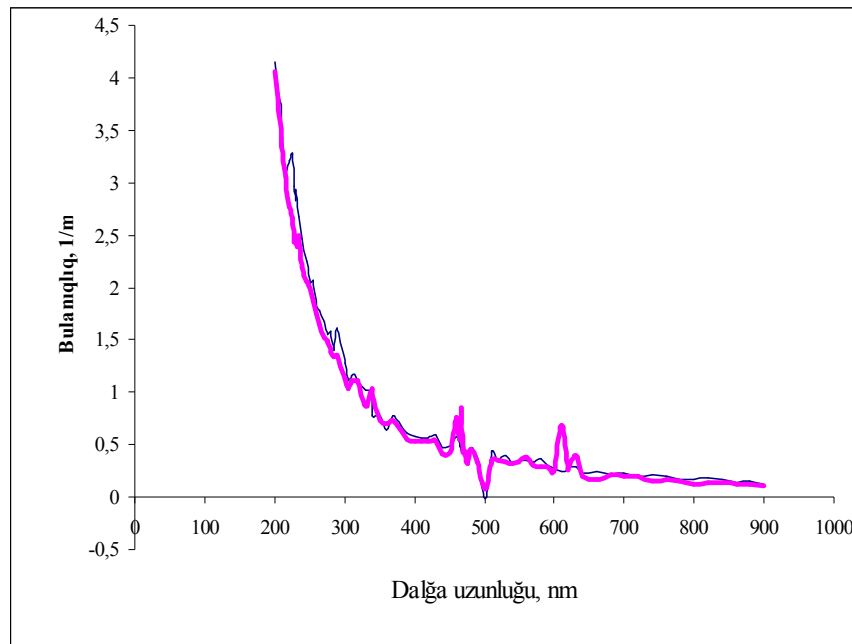
Hər bir ölçmədən əvvəl gel məhlul (zol) halında qalınlığı 5 mm olan standart kvarts küvetə tökülür və termodinamik tarazlıq halının alınması üçün bir gün verilmiş temperaturda saxlanır, çünki polimer məhlulu zol halından gel halına keçdikdən sonra fəza torunun formalaşması (assosiatların sayının və ölçüsünün, assosiatlar arasındakı rabitələrin sayının artması) uzun müddət davam edir. Bu işə özünü gelin bulanıqlığının artmasında (ışığı daha güclü səpməsində) göstərir. Qeyd edək ki, bulanıqlıq dedikdə

$$\tau = \frac{1}{L} \ln \frac{I_0}{I} \quad (1)$$

kəmiyyəti nəzərdə tutulur [5]. Burada L - nümunə tökülmüş küvetin qalınlığı, I_0 - təmiz sudan keçən, I isə gəldən keçən işığın intensivliyidir.

Ölçmələr SF-46 spektrofotometrində 190 nm – 1100 nm dalğa uzunluğu intervalında 1 nm addımla yerinə yetirilmişdir. Ölçmələrin nəticələri şəkil 2-də göstərilmişdir (enli xətt – 0,5 %-li təmiz aqar gelinə, nazik xətt isə 2 % polietilenglikol əlavə olunmuş aqar gelinə uyğundur.

Bulanıqlıq spektrinin analizindən aşağıdakı qanunauyğunluqları müəyyənləşdirmək olar: 1) dalğa uzunluğunun artması ilə qəlin bulanıqlığı azalır; 2) polietilenglikol əlavə olunmuş aqar geli adi aqar geli ilə müqayisədə işığı bir gədər güclü səpir.



Şəkil 2

Ədəbiyyat verilənləri göstərir ki, 0,5%-li assosiatların ölçüsü 100 nm tərtibində olur [6,7]. Ona görə də düşən işığın dalğa uzunluğu kiçildikcə (assosiatların ölçüsünə yaxınlaşdıqca) aqar geli işığı daha güclü səpir, yəni bulanıqlığı artırır. Polietilenglikol əlavə olunmuş aqar gelinin

ultrabənövşəyi oblastda işığı daha güclü səpməsi onun assosiatlarının orta ölçüsünün bir qədər kiçik olduğunu kiçik olduğunu göstərir. Böyük dalğa uzunluğu oblastında $\lambda \gg d$ ödəndiyindən bu fərq demək olar ki aradan şıxır.

ƏDƏBIYYAT

1. Guenet J.M., Termoreversible Gelation of Polymers and Biopolymers, New York, Academic Press, 1992, 212 p.
2. Dea I.C.M., Industrial Polysacharides – Pure & Appl. Chemistry, 1987, v.61, No7, pp.1315-1323
3. Labropoulus K.C., Niesz D.E. et all. Dynamic rheology of agar gels: theory and experiments, Carbohydrate Polymers, 2002, v.50, p.393
4. Məsimov E.Ə., İmaməliyev A.R. - Qələvi metalların duzlarının aqar gelinin reoloji xassələrinə təsiri, AMEA-nın xəbərləri, 2009, v.23, No2, p.92-95
5. Шмидт В., Оптическая спектроскопия для химиков и биологов, М, Техносфера, 2008, 373 с.
6. Guenet J.M. Polymer Solvent Molecular Compounds, Elsevier, 2008, 333 p.
7. Narayanan J., Xiong J.Y., Liu X.Y. Determination of agarose gel pore size, Journal of Physics, Conference Series, 2006, v.28, p.83-86