

---

## II BÖLMƏ

### KONDENSƏ OLUNMUŞ MÜHİT FİZİKASI

**POLİETİLENQLİKOLUN MOLEKULYAR KÜTLƏSİNİN  
PEQ-LİMON TURŞUSUNUN NATRİUM DUZU-SU İKİFAZALI  
SİSTEMİNDƏ FAZALARA AYRILMA PROSESİNƏ TƏSİRİ**

**E.Ə.Məsimov, T.O.Bağirov, A.Ə.Həsənov, X.T.Həsənova,  
S.Y.Ocaqverdiyeva**  
[xaveraylin@rambler.ru](mailto:xaveraylin@rambler.ru)  
Bakı Dövlət Universiteti

*Təqdim olunan işdə yeni ikifazalı polietilenqlikol - limon turşusunun natrium duzu - su (PEQ- $C_6H_5O_7Na_3 - H_2O$ ) sistemlərinin binodal əyriləri qurulmuş, birləşdirici xətlərin bucaq əmsalları təyin edilmişdir. Həmçinin tədqiq olunan ikifazalı sistemdə fazaəmələgəlmə prosesinə polimerin molekul kütləsinin təsirinə baxılmışdır. Polietilenqlikolun beş müxtəlif fraksiyası ilə limon turşusunun natrium duzunun əmələ gətirdiyi ikifazalı sistemlərin tədqiqi zamanı məlum olmuşdur ki, verilmiş temperaturda polimerin molekul kütləsinin artması ilə binodal əyrilərinin həm formaca dəyişməsi müşahidə edilir, həm də binodallar koordinat başlanğıcına doğru sürüşür. Alınan nəticələrə əsasən demək olar ki, fazaəmələgəlmə prosesi faza əmələ gətirən komponentlərin məhluldakı konsentrasiyasının daha kiçik qiymətlərində baş verir. Həmçinin polimerin molekul kütləsinin artması birləşdirici xəttin bucaq əmsalının mütləq qiymətinin artması ilə müşahidə edilir.*

***Açar sözlər:** PEQ, limon turşusunun natrium duzu, su, ikifazalı sistemlər, binodal əyrisi, birləşdirici xəttin tənliyi.*

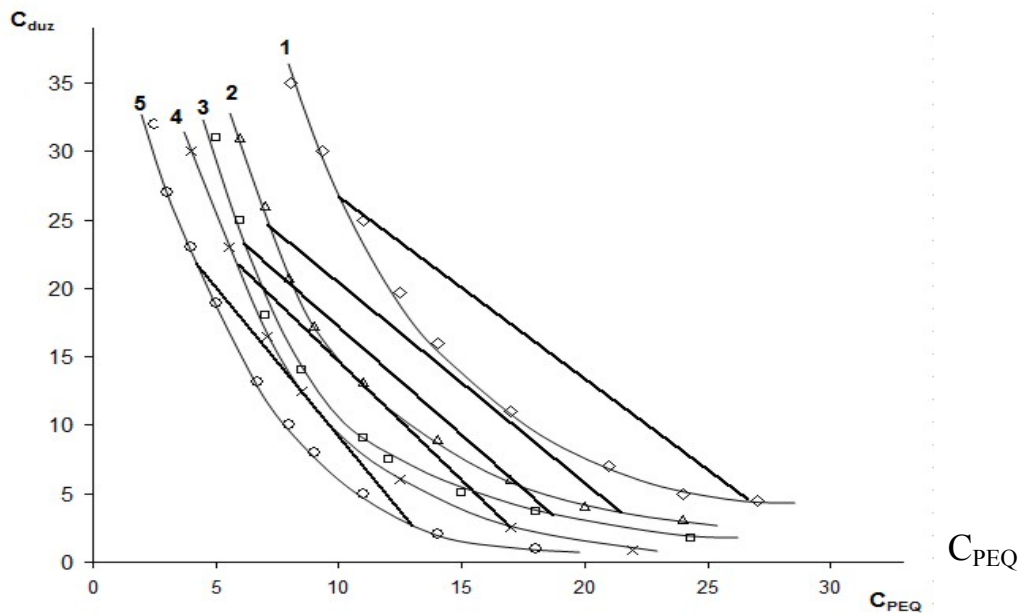
İlk dəfə isveç tədqiqatçısı Albertson [1] ikifazalı sistemləri tədqiq etmiş, onların tibbdə və biotexnologiyada tətbiq imkanlarını göstərmişdir. Məlum olmuşdur ki, zülallar, nuklein turşuları və s. kimi bioloji mənşəli maddələri, hüceyrə, virus və s. kimi bioloji hissəcikləri ikifazalı sistemlərdə həll etdikdə, həmin maddələrin sistemin eyni zamanda tarazlıqda olan fazaları arasında qeyri-bərabər paylanması baş verir ki, bu da həssas və dayanıqsız struktura malik olan bioloji maddələrin hissəciklərini onların nativ xüsusiyyətlərini saxlamaqla əldə etməyə imkan verir [2,3]. Belə ki, ikifazalı sulu sistemlərin hər iki fazasının əsasını su təşkil etdiyindən bu sistemlərdən bioloji hissəcikləri yumşaq ayırmaq məqsədlə istifadə etmək çox əlverişlidir.

İkifazalı sistemlərin, eyni zamanda mövcud olan və bir-birindən hidrofobluqlarına görə fərqlənən fazaları arasında bioloji maddələrin paylanmasının araşdırılması, çoxkomponentli, çoxfazlı sistem olan canlı orqanizmdə gedən bir sıra proseslərin o cümlədən maddələr mübadiləsi prosesinin bəzi məqamlarına aydınlıq gətirə bilər [2,4].

Fazaəmələgətirən komponentlərin hər ikisi polimer olan ikifazalı sistemlər geniş miqyasda tədqiq olunmuş və müxtəlif sahələrdə geniş tətbiq olunur. Komponentlərindən biri duz, digəri polimer olan polimer-duz-su ikifazalı sistemlər də böyük elmi maraq kəsb edir və bu cür sistemlər həm iqtisadi səmərəliliyinə görə, həm də bioloji sistemlərə daha yaxın olduğuna görə canlı orqanizmdə gedən proseslərin öyrənilməsi üçün daha məqsədəuyğundur. Ona görə də həm polimer-polimer-su, həm də polimer-duz-su ikifazalı sistemlərdə fazalara ayrılmanın mexanizminin molekulyar aspektlərinin araşdırılması öz elmi aktuallığını saxlayır [5,7].

Təqdim olunan işdə PEQ- $C_6H_5O_7Na_3 - H_2O$  ikifazalı sisteminin fiziki-kimyəvi xassələri tədqiq olunmuşdur. Bu məqsədlə limon turşusunun natrium duzu və polietilenqlikolun molekul kütlələri 1500, 3000, 4000, 6000 və 20000 olan fraksiyalarından istifadə edilmişdir. Bu sistemlərin hər birinin binodal əyriləri qurulmuş, binodalların birləşdirici xətlərinin meyl bucaqları təyin edilmiş, polimerin molekul kütləsinin dəyişməsi ilə

binodallarda baş vermiş dəyişiklik izlənmişdir. PEQ-in molekul kütləsi artdıqca fazalara ayrılma komponentlərin konsentrasiyalarının daha kiçik qiymətlərində baş verir. Bu nəticəni onunla izah etmək olar ki, polimerin molekul kütləsi artdıqca makromolekulun ölçüsü böyüdüyündən onun hidrat təbəqəsindəki su molekullarının sayı artır və sistemdə sərbəst su molekullarının sayı azalır və bu zaman həllolma çətinləşir, əmələ gəlmiş iki müxtəlif strukturlu suyun bir-birində həllolması qeyri-mümkün olur və fazalara ayrılma komponentlərin daha kiçik konsentrasiyalarında baş verir. Bu isə fazalara ayrılma prosesində suyun həlledici rola malik olması haqqındakı E.Ə.Məsimov və B.Y.Zaslavskinin verdikləri hipotezi bir daha təsdiq edir [6,7]. Başqa sözlə, istər polimer-polimer-su, istərsə də polimer-duz-su sistemlərində faza əmələ gətirən komponentlər özlərinə məxsus iki müxtəlif su strukturları yaradır və həmin su strukturları komponentlərin böyük konsentrasiyalarında ayrı-ayrı fazalarda cəmlənərək ikifazlı sistem yaradırlar.



**Şəkil 1.** PEQ-  $C_6H_5O_7Na_3 - H_2O$ -ikifazlı sisteminin müxtəlif fraksiyaları üçün otaq temperaturunda binodal əyriləri: 1 – 1500, 2—3000, 3- 4000, 4 – 6000, 5 - 20000 .

Şəkil 1-də tədqiq olunmuş sistemin müxtəlif molekul kütləli bütün fraksiyalarının hal diaqramları verilmişdir. Polimerin molekul kütləsi artdıqca binodallar koordinat başlanğıcına doğru sürüşür. Tədqiq olunan ikifazlı sistemin tibbi-diaqnostik məqsədlərlə istifadə edilməsi imkanlarını müəyyənləşdirmək üçün hazırda sistemin ayırma qabiliyyəti təyin olunur.

### Ə D Ə B İ Y Y A T

1. Albertsson P.A. Partition of cell particles and macromolecules, 3rd Ed., Willey Press: New York, 1986, 396 p.
2. Masimov E., Bagirov T., Zaslavsky B. Separation ability of aqueous polymer two-phase systems // Journal of Qafqaz University, 2007, № 19, p.26-29.
3. Rogers R., Willauer H., Griffin S., Huddleston J. Partitioning of small molecules in aqueous biphasic systems. // J. Chromatogr. B, 1998, v.711, p.255-264.
4. Масимов Э.А., Алиева Н.И., Багиров Т.О. Влияние ионизирующей радиации на изменение относительной гидрофобности белков сыворотки крови // Журнал изв. вузов «Химия и химическая технология», 2006, том 49, вып. 9, с. 103-106.

5. Salabat A., Mohammad H., Azadeh R. Amino acids partitioning in aqueous two-phase system of polypropylene glycol and magnesium sulfate. // J. of Chromatography B, 2007, v. 858, № 1-2, p. 234-238.
6. Zaslavsky B.Yu., Bagirov T.O., Borovskaya A.A., Gasanova G.Z., Gulaeva N.D., Levin V.Yu., Masimov E.A., Mahmudov A.U., Mestechkina N.M., Miheeva L.M., Osipov N.N. and Rogozhin S.V. Aqueous biphasic systems formed by nonionic polymers. I. Effects of inorganic salts on phase separation // J. Colloid and Polymer Science, 1986, v. 264, № 12, p. 1066-1071.
7. Zaslavsky B. Aqueous Two-Phase Partitioning: Physical Chemistry and Bioanalytical Applications, Marcel Dekker, New York, 1994, 212 p.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ И ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ КОМПЛЕКСОВ ТЕТРАКАРНОЗИНА С АТОМОМ МЕДИ

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

*Институт физических проблем Бакинского Государственного Университета*

### РЕЗЮМЕ

*В работе полуэмпирическими методами молекулярной механики  $MM^+$  и квантовой химии РМЗ исследовано пространственное и электронное строение комплексов, состоящих из четырех молекул карнозина с одним атомом меди. Изучено влияние атома меди на геометрические и энергетические параметры комплексов тетракарнозина в обоих таутомерных формах имидазольного кольца карнозина  $N^1H$  и  $N^3H$ . Для рассчитанных комплексов проведен сравнительный анализ НОМО и LUMO орбиталей.*

**Ключевые слова:** карнозин, тетрамерные комплексы, атом меди, квантово-химические расчеты

### ВВЕДЕНИЕ

Известный природный дипептид карнозин играет важную роль в организме человека. К числу биологических свойств карнозина относится способность распознавать опасные для здоровья экзогенные и эндогенные молекулы и путем химического связывания, обезвреживать их. Он обладает сильными антиоксидантными и мембранопротекторными свойствами, что позволяет использовать карнозин и его производные для профилактики и лечения различных заболеваний. Особое внимание в последнее время уделяется комплексам карнозина с различными катионами металлов, что расширяет возможности его применения. Известно, что карнозин является лигандом в координационных комплексах с различными катионами металлов, поэтому многие его биохимические свойства и проявление биологической активности зависят от участия определенных катионов металлов [1]. Наличие катионов металлов существенно также для стабилизации и активации фермента карнозиназы. Поскольку карнозин является основным источником  $\beta$ -аланина в организме человека [2-6], а гидролиз играет ключевую роль в его метаболизме. У человека эта реакция катализируется двумя изоферментами: тканевой (цитозольной) и сывороточной карнозиназами.

В настоящее время установлено, что при взаимодействии с ионами металлов карнозин является полидентантным лигандом, несущим шесть потенциальных центров связывания: два атома азота имидазольной группы, одну карбоксильную и одну аминогруппу, а также пептидную связь. Тип образуемых комплексов строго зависит от катиона металла, соотношения металл: лиганд и значения рН раствора. Эксперимен-

тально наиболее изученными являются комплексы карнозина с медью. Нами ранее были проведены квантовохимические исследования пространственной и электронной структуры мономерных и димерных форм комплексов карнозина с медью [7-10]. Экспериментальные исследования мономерных и димерных комплексов растворов карнозина с применением ЯМР- и ЭПР-спектроскопии показали, что в диапазоне pH 5-7 и при высоком соотношении карнозин: Cu(II) в координационном связывании участвуют только атомы азота имидазольного кольца карнозина [11]. ЭПР спектры, снятые при температуре 77 К [12,13], указывают на образование четырех связей N-Cu при участии N3-атомов. Это заключение подтверждено также результатами независимого исследования ЯМР спектров таких комплексных соединений [14]. Данная работа посвящена теоретическому исследованию комплексов, состоящих из четырех молекул карнозина и атома меди Cu(II). При этом изучалась возможность образования тетракомплекса карнозина с атомом меди для обоих его таутомерных форм N<sup>1</sup>H и N<sup>3</sup>H-карнозинов.

### РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На рис.1 приведены устойчивые конформационные состояния тетракомплексов карнозина с атомом Cu для двух таутомерных форм карнозина N<sup>1</sup>H и N<sup>3</sup>H.

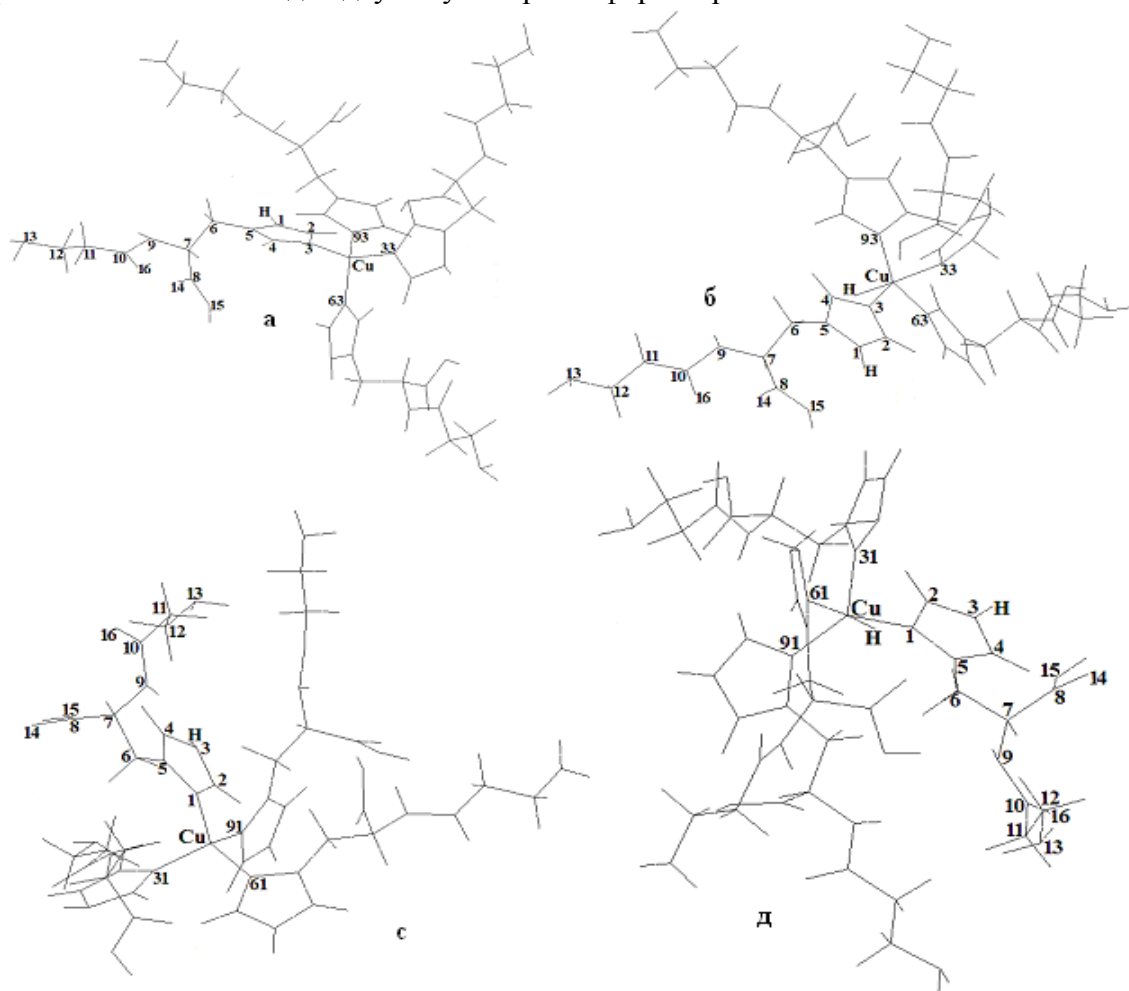


Рис.1. Пространственные структуры тетракомплексов карнозина с атомом Cu (II): а) 4carN<sup>1</sup>H+Cu; б) 4carN<sup>1</sup>H+Cu+H; в) 4carN<sup>3</sup>H+Cu; д) 4carN<sup>3</sup>H+Cu+H

### МЕТОД РАСЧЕТА

Пространственная и электронная структуры координационных комплексов тетракарнозина с атомом Cu(II) рассчитывались в потенциалах полуэмпирического ме-

тогда молекулярной механики ММ<sup>+</sup>. При построении теоретической модели комплекса тетракарнозина с атомом меди был использован нейтральный атом меди, образующий координационные связи с атомами N1 для комплекса N<sup>3</sup>N или N3 для комплексов N<sup>1</sup>N каждой из четырех молекул карнозина. Оптимизация геометрии проводилась при помощи алгоритма Polak-Ribiere с точностью 0,001 ккал/моль. Полученные координаты равновесных конфигураций ядер были положены в основу оптимизации пространственной структуры и расчета электронной структуры координационных комплексов тетракарнозина с атомом Cu(II) полуэмпирическим квантово-химическим методом PM3, параметризованным для соединений, содержащих атомы переходных металлов с учетом всех валентных электронов. Для проведения расчетов была использована демонстрационная версия программы HyperChem.8.06.

Первоначально расчет геометрии проводился, как и для ранее изученных нами комплексов [7-10], полуэмпирическим методом PM3. При этом для расчета спиновых состояний был выбран ограниченный метод Хартри-Фока RHF, в котором многоэлектронная волновая функция выбирается в виде единственного детерминанта Слейтера, построенного из пространственных орбиталей, занятых парой электронов с противоположными спинами. Таким образом, электроны с различным спином занимают одинаковые в пространственном распределении орбитали. Рассчитанные модели тетрамеров оказались энергетически на порядок стабильнее свободного карнозина и его мономерных и димерных комплексов. Расчет с использованием метода RHF для обоих комплексов тетракарнозина N<sup>1</sup>N и N<sup>3</sup>N с атомом меди дает правильные симметричные конфигурации комплексов, нормальные градиенты и значительное снижение энергии по сравнению с другими комплексами карнозина с атомом меди (например, -286836.4 ккал/моль для 4carN<sup>1</sup>N+Cu и -286829.0 ккал/моль для 4carN<sup>3</sup>N+Cu), но выдает сообщение о некорректной энергии -27.2 ккал/моль для 4carN<sup>1</sup>N+Cu и -26.0 ккал/моль для 4carN<sup>3</sup>N+Cu. Добавление водорода в качестве пятого лиганда атома меди приводит к вполне корректным значениям энергетических параметров для обоих таутомеров тетрамерных комплексов карнозина с атомом меди (-287213.0 ккал/моль для 4carN<sup>1</sup>N+Cu+H и -287209.9 ккал/моль для 4carN<sup>3</sup>N+Cu+H).

Для более корректной оптимизации геометрии комплексов методом PM3, нами был также использован неограниченный (по спину) метод Хартри-Фока UHF, описывающий электроны с различным направлением спина с помощью различных пространственных функций ( $\alpha$ - и  $\beta$ -орбитали). Несмотря на то, что этот метод требует большего времени для расчета, чем RHF, он обеспечивает большую гибкость волновой функции и применяется, в основном, при изучении систем с открытыми оболочками, но может быть применим и для систем с закрытыми электронными оболочками. При расчете тетракомплексов карнозина с атомом меди без добавления H было установлено, что синглетное состояние определено с нечетным числом электронов и не дает решения. Добавление атома водорода в качестве пятого лиганда атома Cu снимает ошибку и расчет приводит к нормальным результатам без наталкивания соседних молекул карнозина в тетракомплексах. В таблицах 1-4 приведены результаты проведенного UHF расчета. Значения геометрических параметров двух таутомерных форм тетракарнозина с Cu+H после оптимизации методом PM3 обобщены в табл. 1 и 2.

**Таблица 1. Длины связей (Å) тетракомплексов карнозина с атомом Cu+H**

Связь	Комплекс 4carN <sup>1</sup> N+Cu+H				Комплекс 4carN <sup>3</sup> N+Cu+H				
Cu-H	1.569	-	-	-	Cu-H	1.581	-	-	-
Cu-N3	1.914	1.915	1.900	1.905	Cu-N1	1.900	1.896	1.906	1.991

N3-C4	1.403	1.409	1.413	1.405	N1-C5	1.419	1.482	1.440	1.429
N3-C2	1.433	1.379	1.379	1.387	N1-C2	1.384	1.359	1.421	1.380
C2-N3	1.435	1.386	1.376	1.381	C2-N3	1.389	1.390	1.429	1.386
N1-C5	1.428	1.395	1.399	1.388	N3-C4	1.377	1.392	1.427	1.386
C4-C5	1.388	1.392	1.390	1.396	C4-C5	1.395	1.394	1.376	1.390
C5-C6	1.476	1.482	1.482	1.482	C5-C6	1.489	1.482	1.484	1.486
C6-C7	1.542	1.546	1.545	1.543	C6-C7	1.546	1.543	1.541	1.541
C7-C8	1.526	1.528	1.527	1.523	C7-C8	1.528	1.53	1.527	1.531
C7-N9	1.488	1.482	1.484	1.492	C7-N9	1.497	1.484	1.483	1.481
N9-C10	1.433	1.436	1.433	1.419	N9-C10	1.423	1.434	1.422	1.429
C10-C11	1.517	1.515	1.516	1.521	C10-C11	1.522	1.515	1.517	1.515
C11-C12	1.525	1.527	1.527	1.523	C11-C12	1.527	1.525	1.525	1.525
C12-N13	1.481	1.480	1.480	1.481	C12-N13	1.480	1.480	1.480	1.480
C8-O14	1.219	1.221	1.220	1.289	C8-O14	1.282	1.221	1.215	1.220
C8-O15	1.351	1.348	1.349	1.379	C8-O15	1.385	1.344	1.361	1.351
C10-O16	1.220	1.220	1.220	1.226	C10-O16	1.225	1.220	1.223	1.221
N1-H17	0.992	0.989	0.988	1.053	C2-H17	1.098	1.105	1.090	1.104
C2-H18	1.105	1.110	1.174	1.095	N3-H18	0.986	0.987	0.994	0.987

Таблица 2. Валентные углы (град) тетракомплексов карнозина в атоме Cu+H

Угол	Комплекс 4carN1H+Cu+H				Угол	Комплекс 4carN3H+Cu+H			
	1	2	3	4		1	2	3	4
N3-Cu-H	83.9	87.0	175.8	83.5	N1-Cu-H	84.7	157.9	78.7	94.4
N3-Cu-N33	114.5	96.4	96.6		N1-Cu-N31	94.5	94.4	97.6	
N3-Cu-N93	120.3	122.8			N1-Cu-N91	101.0	107.4		
N3-Cu-N63	92.5				N1-Cu-N61	155.9			
Cu-N3-C2	123.5	123.8	122.1	127.9	Cu-N1-C2	122.4	102.5	126.3	124.0
Cu-N3-C4	128.1	129.5	130.7	72.5	Cu-N1-C6	131.1	148.9	128.2	130.4
N1-C2-N3	107.6	108.9	108.5	108.7	N1-C2-N3	108.4	108.2	109.4	109.7
C2-N3-C4	107.2	106.6	107.2	106.8	C2-N3-C4	109.7	108.8	106.2	109.0
N3-C4-C5	109.9	109.3	108.6	108.7	N3-C4-C5	106.6	107.1	108.9	106.5
C4-C5-N1	108.2	106.4	106.3	106.9	C4-C5-N1	108.9	107.4	109.8	109.5
C5-N1-C2	106.9	108.9	109.4	108.9	C5-N1-C2	106.4	108.5	105.4	105.2
C4-C5-C6	127.6	127.7	128.1	128.6	C4-C5-C6	122.2	126.4	125.9	123.6
N1-C5-C6	124.1	125.9	125.5	124.4	N1-C5-C6	128.9	126.1	124.3	126.7
C5-C6-C7	111.8	111.7	112.0	113.0	C5-C6-C7	111.4	111.4	113.8	112.1
C6-C7-C8	110.6	109.5	110.5	114.3	C6-C7-C8	114.3	108.7	109.3	109.1
C6-C7-N9	112.3	109.0	108.6	107.8	C6-C7-N9	107.2	108.8	108.8	109.5
C7-N9-C10	120.6	120.5	120.7	120.9	C7-N9-C10	120.6	120.8	121.5	121.0
N9-C10-C11	115.6	116.8	117.0	116.0	N9-C10-C11	117.1	115.6	116.0	115.7
C10-C11-C12	112.3	110.7	111.4	112.7	C10-C11-C12	111.5	112.4	111.7	112.4
C11-C12-N13	109.8	109.6	109.7	110.5	C11-C12-N13	110.2	109.7	110.1	70.2
C7-C8-O14	128.9	127.1	127.9	123.9	C7-C8-O14	125.1	127.2	128.8	128.1
O15-C8-O14	115.8	115.5	115.1	108.0	O15-C8-O14	107.8	117.6	114.3	115.5
C7-C8-O15	115.3	117.4	117.0	117.3	C7-C8-O15	116.2	115.2	116.8	116.4
C8-C7-N9	106.0	114.5	113.6	110.2	C8-C7-N9	109.4	111.5	113.6	113.0
N9-C10-O16	119.1	118.6	118.8	120.0	N9-C10-O16	120.2	118.7	118.9	118.5
C11-C10-O16	125.1	124.6	124.1	123.8	C11-C10-O16	122.3	125.6	124.9	125.8
C7-N9-H23	112.3	113.3	113.4	113.1	C7-N9-H23	111.4	113.2	114.4	114.0
C10-N9-H23	113.8	114.5	114.4	113.0	C10-N9-H23	110.1	114.3	116.8	115.2

Как видно из табл.3, образование тетракомплексов карнозина с Cu+H приводит к перераспределению электронной плотности для обеих таутомерных форм карнозина. Как известно, при образовании комплексов металл-лиганд атом металла играет роль

акцептора. Как видно из рис. 1, при образовании тетракомплекса  $N^1H$  с атомом меди соединяются атомы азота  $N^3$  имидазольных колец каждой из четырех молекул карнозина, а при образовании тетракомплекса  $N^3H$  с атомом меди соединяются атомы азота  $N^1$  четырех имидазольных колец. При этом перераспределение зарядов наблюдается на всех атомах имидазольных колец тетракомплексов (табл.3). Согласно результатам исследования донором электронов в комплексе тетракарнозина  $N^1H$ , по-видимому, является не атом азота  $N^3$ , с которым он соединяется, а атом  $C2$  имидазольного кольца. В комплексе тетракарнозина  $N^3H$  донором электронов является атом азота  $N^1$ , с которым соединяется атом меди и атом  $C2$  имидазольного кольца, а атом  $N^3$  является акцептором. Это говорит о том, что влияние атома меди распространяется не только на атомы, непосредственно связанные координационной связью с  $Cu$ , но и на все атомы примыкающих имидазольных колец.

**Таблица 3. Заряды (в ед.заряда электрона) на атомах тетракомплексов карнозина с атомом  $Cu+H$  по данным метода UHF**

Атом	Карнозин $N^1H$	Комплекс $4carN^1H+Cu+H$				Карнозин $N^3H$	Комплекс $4carN^3H+Cu+H$			
		1	2	3	4		1	2	3	4
N1	0.440	0.234	0.410	0.430	0.298	-0.064	0.577	0.534	0.396	0.391
C2	-0.309	0.411	0.594	0.553	0.571	-0.311	0.419	0.385	0.220	0.408
N3	-0.078	-0.608	-0.446	-0.486	-0.472	0.428	-0.494	-0.399	-0.590	-0.407
C4	-0.146	-0.220	-0.299	-0.296	-0.364	-0.375	-0.312	-0.254	-0.308	-0.246
C5	-0.361	-0.346	-0.261	-0.283	-0.171	-0.129	-0.308	-0.253	-0.237	-0.248
C6	-0.006	-0.010	-0.015	-0.010	-0.037	-0.028	-0.029	-0.039	-0.029	-0.049
C7	-0.060	-0.054	-0.057	-0.054	-0.051	-0.061	-0.047	-0.058	-0.036	-0.037
C8	0.359	0.388	0.366	0.363	0.029	0.359	0.037	0.358	0.361	0.370
N9	-0.026	-0.058	-0.047	-0.044	-0.020	-0.027	-0.055	-0.054	-0.089	-0.037
C10	0.250	0.245	0.255	0.256	0.236	0.243	0.249	0.251	0.252	0.248
C11	-0.134	-0.124	-0.118	-0.128	-0.131	-0.134	-0.134	-0.123	-0.124	-0.122
C12	-0.081	-0.098	-0.097	-0.095	-0.096	-0.082	-0.114	-0.096	-0.096	-0.097
N13	-0.041	-0.038	-0.036	-0.035	-0.043	-0.046	-0.034	-0.035	-0.035	-0.033
O14	-0.386	-0.405	-0.420	-0.415	-0.632	-0.383	-0.622	-0.409	-0.372	-0.403
O15	-0.269	-0.294	-0.297	-0.301	-0.355	-0.274	-0.380	-0.282	-0.340	-0.317
O16	-0.382	-0.353	-0.354	-0.360	-0.397	-0.372	-0.403	-0.360	-0.379	-0.364
Cu12 1	-	-0.902	-	-	-	-	-0.772	-	-	-

В табл.4 приведены энергетические параметры, характеризующие электронную структуру исследуемых соединений, а для сравнения-энергетические параметры свободной молекулы карнозина в двух таутомерных формах. Обе формы свободного карнозина почти равноправны по полной энергии, а выигрыш в 298.7 ккал/моль дает электронная энергия. Различие в структуре двух таутомерных форм свободного карнозина отражается на величине полной энергии всего на 0.09 ккал/моль в пользу формы  $N^3H$ . При образовании тетракомплексов карнозина с атомами меди и водорода энергия значительно понижается на 222360.4 ккал/моль для комплекса  $N^1H+Cu+H$  и на 222335.2 ккал/моль для комплекса  $N^3H+Cu+H$ . Таким образом, комплексообразование тетракарнозина с атомом  $Cu$  и  $H$  приводит к существенному понижению энергии и образованию устойчивых структур. Таутомерная форма  $N^1H$  комплекса тетракарнозина с атомами  $Cu$  и  $H$  образует более устойчивый комплекс по сравнению с таутомерной формой  $N^3H$ . Выигрыш в энергии составляет 25.1 ккал/моль.

**Таблица 4. Энергетические параметры тетракомплексов карнозина с атомом  $Cu+H$**



Комплекс	Энергетические параметры, ккал/моль					Дипольный момент, D
	Полная энергия	Электронная энергия	Энергия отталкивания ядер	Градиент энергии	Энергия связывания	
Карнозин N <sup>1</sup> H	-64839.5	-402729.6	337890.1		-2976.7	2.6
Карнозин N <sup>3</sup> H	-64839.6	-403028.3	338188.7		-2976.8	5.8
4car N <sup>1</sup> H + Cu+H	-287199.9	-3426349.2	3139149.3	0.099	-12239.1	21.5
4car N <sup>3</sup> H + Cu+H	-287174.8	-3865607.5	3578432.7	0.098	-12214.0	9.6

Важной характеристикой электронной структуры исследуемых соединений являются орбитальные энергии НОМО (энергия высшей занятой электронами молекулярной орбитали, с которой происходит возбуждение, а следовательно характеризует донорные свойства молекул) и LUMO (нижней свободной молекулярной орбитали, на которую происходят электронные возбуждения, характеризующей акцепторные свойства молекулы). В табл.5 приведены значения энергии НОМО и LUMO орбиталей в тетракомплексах карнозина в атоме Cu+H.

**Таблица 5. Энергии НОМО и LUMO орбиталей (эВ) тетракомплексов карнозина с атомом Cu+H**

Car N <sup>1</sup> H+Cu+H			Car N <sup>3</sup> H+Cu+H		
Орбиталь	α-орбиталь	β-орбиталь	Орбиталь	α-орбиталь	β-орбиталь
НОМО	E= -5.12	-6.80	НОМО	E= -5.31	-6.51
LUMO	E= -0.93	-0.93	НОМО	E= -0.90	-0.91
Δ	4.19	5.87		4.41	5.60

Энергия ионизации соответствует значениям энергии НОМО по абсолютному значению и чем меньше эта энергия, тем более реакционноспособен комплекс. Разность энергий НОМО и LUMO интерпретируется как первая энергия возмущения, и чем ближе значения энергий этих орбиталей, тем система имеет большее сродство к электрону. В исследуемых комплексах значения этих энергий практически не отличаются и перемешаны для α и β-орбиталей.

## ЛИТЕРАТУРА

Babizhayev M.A., Seguin M.C., Gueyne J., Evstigneeva R.P., Ageyeva E.A., Zheltukhina

G.A. // Biochem. J., 1994, vol.304, p.509-516.

1. Scriver C.R., Gibson K.M. // In The Metabolic and Molecular Basis of Inherited Disease (Scriver C.R., Beaudet A.L., Sly W.S., Valle D., eds.) Mc. Graw Hill, New York, 7th ed., 1995, vol. 1, pp.1349-1368.
2. Rosenberg A. // Arch. Biochem. Biophys., 1960, vol.88, p.83-93.
3. Rosenberg A. // Biochim. Biophys. Acta, 1960, vol.45, p.297-310.
4. Rosenberg A. // Ark. Kemi, 1961, vol.17, p.25-40.
5. Rosenberg A. // Ark. Kemi, 1961, vol.17, p.41-50.
6. Годжаев Н.М., Демухамедова С.Д., Алиева И.Н. Исследование молекулы карнозина и его производных методами квантовой химии // Journal of Qafqaz University, 2007, v.21, p.614-618
7. Алиева И.Н., Демухамедова С.Д., Годжаев Н.М. Электронные эффекты в координационных комплексах карнозина с атомом меди // Вестник Бакинского Университета (серия физ-мат.наук), 2009, №3, с.163-173

8. Демухамедова С.Д. Пространственная структура димерных комплексов карнозина с медью и водой // Journal of Qafqaz University, 2010, v.29, c.37-47
9. Демухамедова С.Д., Алиева И.Н., Годжаев Н.М. Квантовохимический анализ заселенностей атомных орбиталей координационных связей в димерных комплексах карнозина с атомами меди и воды // Transaction ANAS, 2011, v.XXXI, № 2, p. 65-77
10. Viola R.E., Hartzell C.R., Villafranca J. J. // J. Inorg. Biochem., 1979, vol.10, p.281-292.
11. Brown C.E., Antholine W.E., Froncisz W. // J. Chem. Soc. Dalton Transact., 1980, p.590-596.
12. Brown C.E. // J. Theor. Biol., 1981, vol.88, p. 245-256.
13. Gaggelli E., Basosi R., Pogni R., Valensin G. // J. Inorg. Biochem., 1988, v.32, p.7-12.

## MIOMODULİN İ VƏ C MOLEKULLARININ YAN ZƏNCİRLƏRİNİN

### KONFORMASIYA İMKANLARI

Əhmədov N.A., Abbaslı R.M., Əhmədova S.R.

*Bakı Dövlət Universiteti, Fizika Problemləri İnstitutu*

*Bakı/Azərbaycan*

[Abbasli\\_Rena@mail.ru](mailto:Abbasli_Rena@mail.ru)

#### XÜLASƏ

Nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə Ser1-Leu2-Ser3-Met4-Leu5-Arg6-Leu7-NH<sub>2</sub>-miomodulin İ və Gly1-Trp2-Ser3-Met4-Leu5-Arg6-Leu7-NH<sub>2</sub> miomodulin C molekulullarının fəza quruluşları tədqiq olunmuş və göstərilmişdir ki, molekulaların fəza quruluşları doqquz stabil konformasiya ilə təənnüm oluna bilər. Hər iki molekulun ən stabil konformasiyasında molekuları əmələ gətirən aminturşu qalıqlarının yan zəncirlərinin konformasiya imkanları konformasiya xəritələri qurulmaqla öyrənilmişdir.

Miomodulinlər molekulaları neyropeptidlər fəsiləsinə aiddirlər. Onlar neyrotransmitterlərin köməyi ilə neyronların və membran cərəyanlarının həyəcanlaşmasına modullaşdırıcı təsir göstərir. Miomodulin həm də K<sup>+</sup>, Ca<sup>++</sup> ionlarının daşınması üçün müxtəlif ion kanallarını modullaşdırır, sensor neyronlarının elektrofizioloji xassələrinə tormozlaşdırıcı təsir göstərir [1-2]. Ser1-Leu2-Ser3-Met4-Leu5-Arg6-Leu7-NH<sub>2</sub> –miomodulin İ və Gly1-Trp2-Ser3-Met4-Leu5-Arg6-Leu7-NH<sub>2</sub> miomodulin C molekululları yeddi aminturşu qalığından ibarətdir. Molekulaların fəza quruluşları nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə tədqiq edilmişdir.

Molekulun fəza quruluşunu öyrənmək üçün sistemin potensial enerjisi qeyri-valent, elektrostatik, torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinin və hidrogen rabitəsi enerjisinin cəmi şəklində seçilmişdir. Qeyri-valent qarşılıqlı təsir enerjisi Lennard-Cons potensialı ilə Skott və Şeraqanın təklif etdiyi parametrlərlə hesablanmışdır. Molekulun konformasiya imkanları su mühitində öyrənilmişdir Hidrogen rabitəsinin enerjisi Morze potensialı ilə hesablanmışdır Torsion qarşılıqlı təsir enerjilərini hesablamaq üçün potensial funksiyalar, atomlardakı parsial yüklərin qiymətləri, valent bucaqlarının qiymətləri və valent rabitələrinin uzunluqları Momani və Şeraqanın məqaləsindən götürülmüşdür. İkiüzlü fırlanma bucaqlarının işarələri və qiymətləri beynəlxalq nomenklaturaya uyğundur [3].

Miomodulin İ və C molekulullarının fəza quruluşları onları fraqmentlərə ayırmaqla öyrənilmişdir və bizim əvvəlki tədqiqatlarımızın davamıdır [4-8].

Əvvəlcə molekulların N-tərəf və C-tərəf -NH<sub>2</sub> tetrapeptid fraqmentlərinin konformasiya imkanları onları əmələ gətirən aminturşu qalıqlarının stabil konformasiyaları əsasında öyrənilmişdir. İkinci mərhələdə N- və C-tərəf tetrapeptid fraqmentlərinin stabil konformasiyaları əsasında heptapeptid molekulların fəza quruluşları hesablanmışdır. Hesablamaların nəticələri göstərir ki, şeyplərin, əsas zəncirin formalarının və konformasiyaların enerjilərinə görə kəskin diferensiasiya gedir. 0-10.0 kkal/mol enerji intervalına heptapeptid molekulların 9 konformasiyası düşür. Həmin konformasiyalar, onlara qeyri-valent, elektrostatik, torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinin verdikləri pay, ümumi və nisbi enerjiləri cədvəl 1-də və cədvəl 2-də göstərilmişdir.

Miomodulin İ molekulunun ən stabil konformasiyası R<sub>22</sub>B<sub>21</sub>R<sub>11</sub>B<sub>2122</sub>R<sub>21</sub>B<sub>3322</sub>R<sub>21</sub>-dir. Onun stabilləşməsinə qeyri-valent qarşılıqlı təsir enerjisi (-39.2) kkal/mol, elektrostatik qarşılıqlı təsir enerjisi 9.7 kkal/mol, torsion qarşılıqlı təsir enerjisi isə 4.7 kkal/mol qədər pay verir. Cədvəl 1-dən görüldüyü kimi qlobal konformasiyada molekulun əsas zəncirinin yarı açılmış RB formalarının kombinasiyalarından əmələ gəlir və onların arasında əlverişli qarşılıqlı təsir yaranır.

Miomodulin C molekulunun ən stabil konformasiyası R<sub>22</sub>B<sub>21</sub>R<sub>11</sub>B<sub>2122</sub>R<sub>21</sub>B<sub>3322</sub>R<sub>21</sub>-dir. Onun stabilləşməsinə qeyri-valent qarşılıqlı təsir enerjisi (-40.1) kkal/mol, elektrostatik qarşılıqlı təsir enerjisi 9.6 kkal/mol, torsion qarşılıqlı təsir enerjisi isə 4.7 kkal/mol qədər pay verir. Cədvəl 1-dən görüldüyü kimi qlobal konformasiya molekulun əsas zəncirinin yarı açılmış RB formalarının kombinasiyalarından əmələ gəlir və onların arasında əlverişli qarşılıqlı təsir yaranır.

Aminturşu qalıqları ardıcılığından görüldüyü kimi heptapeptid molekulda hidrofob yan zəncirli leysin, triptofan, metionin, hidrofil yan zəncirli serin və müsbət yüklənmiş yan zəncirli arginin daxildir. Ona görə də qeyd olunan aminturşu qalıqlarının yan zəncirlərinin stabil konformasiyalarda hansı konformasiya sərbəstliklərinə malik olduqlarını bilmək əhəmiyyət kəsb edir. Aminturşu qalıqlarının konformasiya imkanlarını bilməklə onların reseptor molekulları ilə müxtəlif qarşılıqlı təsirlərdə iştirak edə biləcəkləri haqqında mülahizələr söyləmək olar.

Miomodulin İ və C molekullarının həmin qlobal konformasiyalarda onlara daxil olan aminturşu qalıqlarının yan zəncirlərinin konformasiya imkanları tədqiq edilmişdir. Bunun üçün hər bir aminturşu qalığının yan zəncirinin ikiüzlü fırlanma bucaqları ətrafında konformasiya xəritələri qurulmuşdur.

Miomodulin İ molekulunda Ser1-in yan zəncirindəki ikiüzlü bucaqlar ətrafında qurulmuş konformasiya xəritəsi göstərir ki, o tam konformasiya sərbəstliyinə malikdir. Ona görə də istənilən reseptor və digər molekullarla qarşılıqlı təsirlərdə asanlıqla iştirak edə bilər. Miomodulin İ molekulunda Leu2-nin, miomodulin C molekulunda Trp2-nin yan zəncirləri müəyyən konformasiya sərbəstliyinə malikdir, konformasiya sərbəstliklərinə görə oxşarırlar. Məlum olduğu kimi miomodulin İ və C molekullarının C-tərəf pentapeptid fraqmentləri eynidir. Hər iki molekulda Ser3 tam konformasiya sərbəstliyinə malikdir və istənilən molekullarla qarşılıqlı təsirlərdə asanlıqla iştirak edə bilər.

Dördüncü metionin yan zənciri miomodulin İ molekulunda kifayət qədər konformasiya sərbəstliyinə malikdir, miomodulin C molekulunda heç sərbəstliyə malik deyil, fəzada yalnız bir vəziyyətdə ola bilər. Leu5 və Arg6 hər iki molekulda eyni cür müəyyən konformasiya sərbəstliyinə malikdir. Leu7 nin yan zənciri miomodulin C və İ molekullarının ikisində heç bir konformasiya imkanına malik olmur, fəzada yalnız qlobal konformasiyada reallaşan vəziyyətdə ola bilər.

**Cədvəl 1.** Ser1-Leu2-Ser3-Met4-Leu5-Arg6-Leu7-NH<sub>2</sub> –miomodulin İ molekulunun stabil konformasiyaları, onlara qeyri valent, elektrostatik, torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinin verdikləri pay, ümumi və nisbi enerjiləri.

№	Konformasiya	$U_{qv}$	$U_{el}$	$U_t$	$U_{üm}$	$U_{nis}$
1	B <sub>22</sub> B <sub>12</sub> B <sub>11</sub> B <sub>2122</sub> R <sub>21</sub> B <sub>3322</sub> R <sub>21</sub>	-35.0	9.5	5.2	-20.3	4.5
2	R <sub>22</sub> R <sub>21</sub> R <sub>11</sub> B <sub>2122</sub> R <sub>21</sub> B <sub>3322</sub> R <sub>21</sub>	-39.2	9.7	4.7	-24.8	0
3	R <sub>22</sub> R <sub>21</sub> R <sub>11</sub> R <sub>2222</sub> B <sub>21</sub> R <sub>3122</sub> R <sub>21</sub>	-39.0	9.1	5.4	-24.5	0.3
4	B <sub>22</sub> B <sub>12</sub> R <sub>32</sub> B <sub>2122</sub> R <sub>21</sub> B <sub>3322</sub> R <sub>21</sub>	-38.0	10.0	4.7	-23.3	1.5
5	R <sub>22</sub> R <sub>12</sub> B <sub>21</sub> B <sub>2122</sub> R <sub>21</sub> B <sub>3322</sub> R <sub>21</sub>	-33.1	10.0	6.6	-16.5	8.3
6	R <sub>22</sub> R <sub>21</sub> R <sub>31</sub> B <sub>2122</sub> B <sub>21</sub> R <sub>3122</sub> R <sub>21</sub>	-39.0	11.9	4.9	-22.3	2.5
7	R <sub>22</sub> R <sub>21</sub> R <sub>11</sub> B <sub>2322</sub> B <sub>21</sub> B <sub>3322</sub> B <sub>32</sub>	-36.0	10.9	5.0	-20.1	4.7
8	R <sub>22</sub> R <sub>21</sub> R <sub>21</sub> R <sub>2222</sub> B <sub>21</sub> B <sub>3322</sub> B <sub>32</sub>	-36.8	9.4	4.8	-22.6	2.2
9	B <sub>22</sub> R <sub>33</sub> R <sub>21</sub> B <sub>2222</sub> R <sub>21</sub> R <sub>3322</sub> R <sub>32</sub>	-39.1	11.7	8.4	-19.0	5.8

**Cədvəl 2.** Gly1-Trp2-Ser3-Met4-Leu5-Arg6-Leu7-NH<sub>2</sub> –miomodulin C molekulunun stabil konformasiyaları, onlara qeyri valent, elektrostatik, torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinin verdikləri pay, ümumi və nisbi enerjiləri.

№	Konformasiya	$U_{qv}$	$U_{el}$	$U_t$	$U_{üm}$	$U_{nis}$
1	BB <sub>11</sub> B <sub>11</sub> B <sub>2122</sub> R <sub>21</sub> B <sub>3322</sub> R <sub>21</sub>	-33.7	9.5	4.2	-20.1	4.7
2	RR <sub>13</sub> R <sub>11</sub> B <sub>2122</sub> R <sub>21</sub> B <sub>3322</sub> R <sub>21</sub>	-40.1	9.6	4.7	-25.8	0
3	RR <sub>21</sub> R <sub>11</sub> R <sub>2222</sub> B <sub>21</sub> R <sub>3122</sub> R <sub>21</sub>	-38.8	8.4	5.8	-24.6	1.2
4	BB <sub>11</sub> R <sub>32</sub> B <sub>2122</sub> R <sub>21</sub> B <sub>3322</sub> R <sub>21</sub>	-37.3	9.9	3.8	-23.6	2.2
5	RR <sub>13</sub> B <sub>21</sub> B <sub>2122</sub> R <sub>21</sub> B <sub>3322</sub> R <sub>21</sub>	-33.3	9.8	4.1	-19.5	6.3
6	RR <sub>11</sub> R <sub>31</sub> B <sub>2122</sub> B <sub>21</sub> R <sub>3122</sub> R <sub>21</sub>	-35.9	11.8	5.6	-18.5	7.3
7	RR <sub>11</sub> R <sub>11</sub> B <sub>2322</sub> B <sub>21</sub> B <sub>3322</sub> B <sub>32</sub>	-36.5	10.6	5.1	-20.8	5.0
8	RR <sub>11</sub> R <sub>21</sub> R <sub>2222</sub> B <sub>21</sub> B <sub>3322</sub> B <sub>32</sub>	-36.8	9.0	4.9	-22.9	2.9
9	BR <sub>21</sub> R <sub>21</sub> B <sub>2222</sub> R <sub>21</sub> R <sub>3322</sub> R <sub>32</sub>	-36.7	11.2	8.9	-16.7	9.1

Ser1-Leu2-Ser3-Met4-Leu5-Arg6-Leu7-NH<sub>2</sub> və Gly1-Leu2-Ser3-Met4-Leu5-Arg6-Leu7-NH<sub>2</sub> molekulullarının fəza quruluşunun və yan zəncirlərinin konformasiya sərbəstliyinin öyrənilməsi göstərir ki, molekul elə fəza quruluşları yığına malik olur ki, o müxtəlif bioloji funksiyaları yerinə yetirə bilər.

## ƏDƏBİYYAT

1. Brezina V., Bank B., Cropper E.C., Rosen S., Vilim F.C., Kupferman L., Weiss K.R., Journal of Neurophysiology, 1995, V.74, p.54-72.
2. Azaki J., Liu G.J., Zhang W., Takeuchi H., Munekata E., Gen.Pharmacol.,1995,V.26, p.1701-1708. p.2361-2381.
3. IUPAC-IUB, Quantity, Units and Symbols in Physical Chemistry. V.39. Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1988.
4. Akhmedov N.A., Tagiyev Z.H., Hasanov E.M., Akverdieva G.A., J.Molecular Structure, 2003, V.646, p.75-80.
5. Ахмедов Н.А., Исмаилова Л.И., Аббаслы Р.М., Ахмедов Н.Ф., Годжаев Н.М. Биоорганическая химия, 2005, Т. 31, № 1, С. 31-38.
6. Исмаилова Л.И., Ахмедов Н.А., Аббаслы Р.М. Биофизика, 2008, Т.53, вып.1, С.14-21.
7. Годжаев Н.М., Агаева Л.Н., Исмаилова Л.И., Ахмедов Н.А. Российский аллергологический журнал, 2010, №1, вып.1, с.46-47.

8. Axmedov N.A., Ismailova L.I., Agayeva L.N., Gocayev N.M. Current Topics in Peptide & Protein Research, 2010, V.11, p.87-93.

## XARİCİ AMİLLƏRİN POLİMER-SU İKİFAZALI SİSTEMLƏRİNİN HAL DİAQRAMLARINA TƏSİRİ

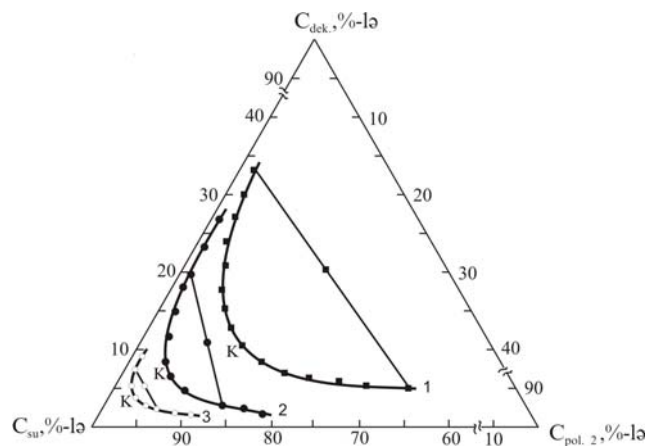
Bağirov T.O., Prudko V.V., Həsənova X.T., Qarayev E.S., Məmmədov M.Ş., Əhmədov N.F.

[baghirov@mail.ru](mailto:baghirov@mail.ru)

Bakı Dövlət Universiteti,

Təqdim olunmuş işdə polimer-su ikifazalı sistemlərinin termodinamik tarazlıq halı araşdırılmışdır. Dekstran-PEQ-su, dekstran-PVPD-su, dekstran-fikoll-su, dekstran-PVS-su ikifazalı sistemlərinin hal diaqramları qurulmuş, bu sistemlərin eyni zamanda mövcud olan fazalarının fiziki-kimyəvi xassələri tədqiq olunmuşdur. İqtisadi səmərəliliyinə və təbabətdə geniş tətbiq edildiklərinə görə bu sistemlərdən seçilən PEQ-qeyri-üzvi elektrolit ikifazalı sistemlərinin binodal ayrılıqları qurulmuş və birləşdirici xəttin tənliyi tapılmışdır.

Dekstran-PEQ-su, dekstran-PVPD-su, dekstran-PVS-su ikifazalı sistemlərinin Qibbs koordinatlarında binodal ayrılıqlarının müqayisəli təhlili nəticəsində göstərilmişdir ki (şək. 1), dekstran-PVS-su ikifazalı sisteminin binodal ayrılığı çox kiçik bir sahəni əhatə edir. Bu PVS-in suda az həllolması ilə əlaqədardır. Digər polimerlərin suda həll olma qabiliyyəti kifayət qədər çox olduğundan onların daxil olduğu sistemlərin hal diaqramları daha böyük oblastı əhatə edir, başqa sözlə fazalara ayrılma komponentlərin daha böyük konsentrasiyasında baş verir.



**Şək. 1.** Dekstran-pol.2-su ikifazalı sistemlərinin hal diaqramları: (t=25°C), 1 – PVPD; 2 – PEQ; 3 – PVS.

Dekstran-poli-etilenqlikol (PEQ)-su ikifazalı sistemlərində fazalara ayrılma prosesinə xarici amillərin (polimerin molekulyar kütləsinin, temperaturun, qeyri-üzvi duzların və digər əlavələrin və s.) təsirlərinin sistemli tədqiqi aparılmış və göstərilmişdir ki, suya daxil edilən faza əmələ gətirən komponentlərin hər birinin təsiri ilə sistemdə suyun strukturu (halı) elə dəyişir ki, yaranacaq fazaların özəyi olan iki müxtəlif su strukturu (halı) yaranır və komponentlərin konsentrasiyasının müəyyən qiymətindən böyük qiymətlərdə sistemin fazalara ayrılması baş verir.

Həmin sistemin fazalarındakı su molekulları protonlarının NMR spektrlərində rezonans xətlərinin eni və kimyəvi sürüşməsi öyrənilmişdir və məlum olmuşdur ki, sistemin

fazalarının NMR spektrinin kimyəvi sürüşmələri bir-birindən fərqlənir. Eyni zamanda digər nümunələr (təmiz su, ilkin məhlullardan hazırlanmış dekstran-su, PEQ-su və dekstran-PEQ-su) üçün də NMR spektrləri alınmış və onların təhlili göstərmişdir ki, bu nümunələr üçün də spektrin kimyəvi sürüşməsi, rezonans xəttinin eni və maqnit relaksasiya müddəti fərqlidir. Beləliklə, alınan nəticələr güman etməyə imkan verir ki, suya daxil edilmiş istənilən maddə su molekulları arasındakı hidrogen rabitələrinin sayına, enerjisinə və paylanmasına təsir edir, bu da su molekulu protonlarının NMR spektrlərində özünü göstərir. Böyük maraq kəsb edən fakt ondan ibarətdir ki, eyni polimer tərkibinə malik nümunələrin heterogen oblastda götürülmüş nöqtədən və ilkin polimer məhlullarından hazırlanmasından asılı olaraq kimyəvi sürüşmələri kəskin fərqlənir. Bu da öz növbəsində eyni polimer tərkibli məhlulun alınması yollarının fərqlinin suyun struktur yaddaşında öz izini buraxması ilə izah edilə bilər.

Dekstran-PEQ-su ikifazlı sistemin eyni zamanda mövcud olan fazalarındakı su molekulları protonlarının NMR spektrlərinin tədqiqi bu növ sistemlərdə fazalara ayrılma mexanizmi barədə verilmiş, suyun həlledici rolu barədəki hipotezi tam təsdiq edir.

Daha sonra, göstərilmişdir ki, qeyri-üzvi duzlarla yanaşı üzvi duzların da suya təsiri böyük maraq kəsb edir. Bu duzlardan biri kimi  $C_4O_6H_4Na_2$  – çaxır turşusunun Na duzu dissertasiya işinin tədqiqat obyektini kimi götürülmüşdür. Məlum olmuşdur ki,  $C_4O_6H_4Na_2$  duzu ilə PEQ-in sulu qarışığında komponentlərin müəyyən konsentrasiyasında ikifazlı sistem alınır. Tədqiq olunmuş ikifazlı sulu polimer sistemlərində olduğu kimi PEQ- $C_4O_6H_4Na_2$ - $H_2O$  sisteminin eyni zamanda mövcud olan fazaları özlərində hər iki komponenti ehtiva etsə də, onların fazalardakı konsentrasiyası müxtəlif olur. Bu zaman əsas rolu su ilə komponentlər arasındakı qarşılıqlı təsir oynayır.

Tədqiqat obyektini kimi seçilmiş polietilenqlikolun müxtəlif molekulların çəkilişi ilə qeyri-üzvi elektrolit sistemləri öyrənilərkən məlum olmuşdur ki, məhz  $Na_2SO_4$ ,  $Li_2SO_4$ ,  $ZnSO_4$ ,  $MgSO_4$ ,  $CoSO_4$ ,  $NiSO_4$ ,  $Al_2(SO_4)_3$ ,  $CuSO_4$ ,  $Na_3PO_4$ ,  $Na_2HPO_4$ ,  $NaH_2PO_4$ ,  $K_3PO_4$ ,  $K_2HPO_4$ ,  $KH_2PO_4$ ,  $(NH_4)_2HPO_4$ ,  $NaNO_3$ ,  $NaNO_2$  duzları PEQ-lə ikifazlı sistemlər verirlər. Qeyd edək ki, polimer-duz-su sistemlərində polimer-polimer-su sistemlərinə nisbətən fazalara ayrılma prosesi sürətlə baş verir. Bu fakt olunla izah olunur ki, bu halda faza əmələ gətirən komponentlərdən birinin – ionların mütəhərrikiyi polimerinkinə nisbətən böyükdür. Göründüyü kimi, tədqiq olunan duzlar ion tərkiblərinə görə fərqlənirlər. Polimer-duz-su sistemlərində ikifazlı sistemlərin əmələ gəlməsində də ehtimal etmək olar ki, polimer-polimer-su sistemlərində olduğu kimi əsas rolu həlledici-su oynayır. Məlum olduğu kimi, ionlar və onların aid olduğu duzlar suyun strukturuna təsir baxımından suyu strukturlaşdıran və strukturu dağıdan duzlara bölünürlər. Yuxarıda qeyd olunan duzlar suyu strukturlaşdırdığından, sistemdə hidrogen rabitələrinin intensivliyi artır və Bernal-Fauler modelinə əsasən sistemdəki sərbəst su molekullarının sayı azalır. Bu isə sistemi təşkil edən komponentlərin həll olmasını çətinləşdirir (həll olma sərbəst su molekulları hesabına baş verir), fazalara ayrılma baş verir.

Müxtəlif yükə və ölçüyə malik ionların polimer-duz-su ikifazlı sistemlərində fazalara ayrılma prosesinə təsirini tədqiq etmək üçün PEQ- $Al_2(SO_4)_3$ - $H_2O$ , PEQ- $MgSO_4$ - $H_2O$ , PEQ- $ZnSO_4$ - $H_2O$  və PEQ- $Na_2SO_4$ - $H_2O$  ikifazlı sistemlərinin binodal ayrılıqları tədqiq olunmuşdur. Müəyyən olunmuşdur ki, PEQ- $MgSO_4$ - $H_2O$  və PEQ- $ZnSO_4$ - $H_2O$  sistemlərinin binodal ayrılıqları çox az fərqləndiyi halda PEQ- $Al_2(SO_4)_3$ - $H_2O$  sisteminin binodal koordinat başlanğıcına yaxınlaşır, PEQ- $Na_2SO_4$ - $H_2O$ -nunkü isə koordinat başlanğıcından uzaqlaşır, başqa sözlə  $Al_2(SO_4)_3$  duzu olan halda fazalara ayrılma komponentlərin daha kiçik konsentrasiyasında baş verdiyi halda  $Na_2SO_4$  duzu iştirak edən sistemdə fazalara ayrılma komponentlərin daha böyük konsentrasiyalarında baş verir. Suyun strukturu üçün Bernal və Fauler modelini əsas götürərək alınmış nəticələri çox asan izah etmək olar. Məlum olduğu kimi ionların hidratlaşma dərəcəsi ilə onların yükünün səthi sıxlığı arasında korrelyasiya asılılığı vardır və bu asılılıq aşağıdakı ifadə ilə təyin olunur:

$$n = 31,528 \sigma + 3,6207 (R^2 = 0,9948),$$

burada,  $n$  – ionun hidratlaşma dərəcəsi ( $\text{Na}^+$  ionu üçün 6-7,  $\text{Mg}^{++}$  üçün 14-16,  $\text{Al}^{+++}$  üçün 30-33-dür),  $\sigma$  – ionun yükünün səthi sıxlığı,  $R^2$  – isə korrelyasiya əmsalidir.  $n_{\text{Al}} > n_{\text{Mg}} > n_{\text{Na}}$  olduğundan  $\text{Al}^{+++}$  ionu iştirak edən PEQ-duz-su sistemində sərbəst su molekullarının sayı kəskin azalmış olur və bu səbəbdən faza əmələ gətirən komponentlərin birgə həll olması çətinləşir, fazalara ayrılma komponentlərin konsentrasiyasının daha kiçik qiymətlərində baş verir.

Beləliklə, su ilə yüksəkmolekullu birləşmələrin və qeyri-üzvi duzların qarşılıqlı təsiri bir daha tədqiq edilərək göstərilmişdir ki, bu sistemlərdə baş verən prosesləri faza əmələ gətirən komponentlərin suyun strukturuna (termodinamik halına) bu və ya digər istiqamətdə təsirini nəzərə almaqla izah etmək olar. Tədqiq olunmuş sistemlərdə xarici amillərin fazalara ayrılma prosesinə təsirini də onların bilavasitə, suyun strukturunu dəyişməsi ilə izah etmək olar.

### **Xülasə**

*Bir sıra polimer-polimer-su və polimer-duz-su ikifazlı sistemlərinin hal diaqramları qurulmuş, eyni zamanda mövcud olan fazalarının fiziki-kimyəvi xassələri tədqiq olunmuşdur. Fazalara ayrılma prosesinə xarici amillərin təsirlərinin sistemli tədqiqi aparılmış və göstərilmişdir ki, suya daxil edilən faza əmələ gətirən komponentlərin hər birinin təsiri ilə sistemdə iki su strukturunu yaranır və termodinamik tarazlıq halında ikifazlı sistem alınır*

### **ƏDƏBİYYAT**

1. Кулезнев В.Н., Шершнев В.А. [Химия и физика полимеров](#), Москва, «Колос», 2007, 378 с.
2. Chumaevskii N.A., Rodnikova M.N. Some peculiarities of liquid water structure // J. Mol. Liquids, 2003, v.106, pp.167-177.
3. Блайт Э.Р., Блур Д. [Электрические свойства полимеров](#) Москва, «Физматлит», 2007, 468 с.
4. Масимов Э.А., Аббасов Х.Ф., Багиров Т.О., Гасанова Х.Т., Гурбанов Дж.Т. Структурные особенности двухфазной системы полиэтиленгликоль-  $\text{C}_4\text{O}_6\text{H}_4\text{Na}_2\text{-H}_2\text{O}$  // Журнал «Физика» Институт Физики НАН Азербайджана, 2007, том 13, № 1-2, с.334-336.
5. Salabat A., Mohammad H., Azadeh R. [Amino acids partitioning in aqueous two-phase system of polypropylene glycol and magnesium sulfate](#). // J. of Chromatography B, 2007, v. 858, № 1-2, p. 234-238.

## **KALIUM HİDROKSİDİN DURU SULU MƏHLULLARINDA İONLARIN HİDRATLAŞMA ƏDƏDLƏRİNİN REFRAKTOMETRİK ÜSULLA TƏYİNİ**

**Məsimov E.Ə., Abbasov H.F., İbrahimov N.Ə.**

[hakimabbasov@yahoo.com](mailto:hakimabbasov@yahoo.com)

*İşdə KOH + su sisteminin sındırma əmsalının KOH-ın konsentrasiyasından asılılığı refraktometrik metodla tədqiq edilmişdir. Lorens- Lorens tənliyindən istifadə etməklə alınan nəticələr əsasında ionların hidratasiya ədədini təyin etməyə imkan verən model təklif olunmuşdur.*

Məhlulların refraksiyası bir çox hallarda məhlulların strukturu bəzədə, məhlullardakı ionların solvatasiyası haqqında informasiya daşıyır. Optik tezliklərdə dipol və ionlar elektrik sahəsini izləyə bilmədiyindən mühitin polyarizasiyasında əsas rolu yalnız elektronlar oynayır və bu halda Lorens-Lorens tənliyi tətbiq olunur.

Optik tezliklərdə kalium hidroksidin sulu məhlulu üçün Lorens-Lorens tənliyini aşağıdakı kimi yazmaq olar [1-2]:

$$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} = \frac{N_{su}\alpha_{su}}{3} + \frac{N_{K^+}\alpha_{K^+}^*}{3} + \frac{N_{OH^-}\alpha_{OH^-}^*}{3} + \frac{N_{KOH}\alpha_{KOH}}{3} \quad (1)$$

burada,  $n$  baxılan məhlulun sındırma əmsalı,  $\alpha_{su}$ ,  $\alpha_{K^+}$ ,  $\alpha_{OH^-}$  və  $\alpha_{KOH}$  uyğun olaraq, su molekullarının,  $K^+$  və  $OH^-$  ionlarının və neytral  $KOH$  molekullarının polyarlaşma əmsalları,  $N_{su}$ ,  $N_{K^+}$ ,  $N_{OH^-}$ ,  $N_{KOH}$  uyğun olaraq, məhlulun vahid həcmindəki sərbəst su molekullarının,  $K^+$  və  $OH^-$  ionlarının və neytral  $KOH$  molekullarının sayıdır.

Bu tənliyin sağ tərəfində birinci hədd sərbəst su molekullarının, ikinci hədd məhlulda dissosiasiyaya uğramış  $K^+$  ionlarının, üçüncü hədd  $OH^-$  ionlarının, dördüncü hədd dissosiasiyaya uğramamış neytral  $KOH$  molekullarının məhlulun polyarizasiyasına verdiyi payları əks etdirir. Bir neçə sadələşmədən sonra (birinci yaxınlaşmada hidratlaşmış ionun polyarlaşma əmsalını həmin ionun radiusunun kubu ilə mütənasib götürərək) (1) tənliyi aşağıdakı formaya düşür [3]:

$$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} = \frac{n_{su}^2 - 1}{n_{su}^2 + 2} + \frac{c\rho N_A \alpha_{su}}{3M_{KOH}} \left[ \left( \frac{r_{K^+}}{r_{su}} \right)^3 + \left( \frac{r_{OH^-}}{r_{su}} \right)^3 + h_1 + h_2 \right] \quad (2)$$

Burada,  $n_{su}$  - təmiz suyun sındırma əmsalı,  $c$  -  $KOH$  - in konsentrasiyası,  $\rho$  - məhlulun sıxlığı,  $N_A$  - Avaqadro sabiti,  $M_{KOH}$  -  $KOH$ -ın molyar kütləsi,  $h_1$  və  $h_2$   $K^+$  və  $OH^-$  ionlarının hidrat ədədləri,  $r_{K^+}$ ,  $r_{OH^-}$ ,  $r_{su}$  hidratlaşmamış  $K^+$  və  $OH^-$  ionlarının və su molekullarının radiuslarıdır

(2) tənliyi əsasında  $(n^2 - 1)/(n^2 + 2)$  nisbətinin  $c$  - dən asılılığının qrafikinin  $tg\phi$

bucaq əmsalına görə məhlulda  $KOH$  -in müxtəlif konsentrasiyalarında  $K^+$  və  $OH^-$  ionlarının hidrat ədədlərinin cəmini təyin etmək olar:

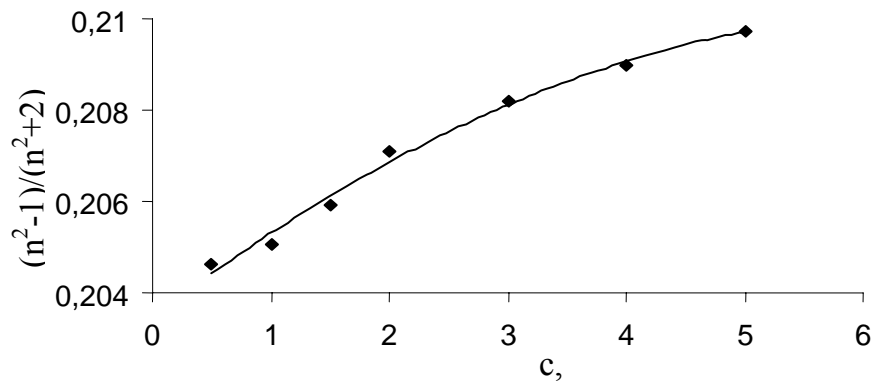
$$h_1 + h_2 = \frac{3M_{KOH} tg\phi}{\rho N_A \alpha_{su}} - \left( \frac{r_{K^+}}{r_{su}} \right)^3 - \left( \frac{r_{OH^-}}{r_{su}} \right)^3 \quad (3)$$

Kalium hidroksidin duru sulu məhlullarının sındırma əmsallarının  $0 \leq c \leq 5\%$  konsentrasiya intervalında  $KOH$  -in konsentrasiyasından asılılığı refraktometrlə



ölçülmüşdür. Alınan nəticələr  $(n^2 - 1)/(n^2 + 2) - c$  koordinatlarında şəkil 1-də göstərilmişdir.

Şəkildən görüldüyü kimi  $KOH$ -ın müəyyən konsentrasiyasınadək ( $c \approx 2\%$ ) bu asılılıq xətti xarakter daşıyır, bu konsentrasiyadan başlayaraq isə əyrinin meyli azalır. Bunu onunla izah etmək olar ki, kiçik konsentrasiyalarda ( $c \leq 2\%$ ) kalium hidroksid ionlara tam dissosiasiya edir və bu ionların konsentrasiyaları az olduğundan onlar ideal qazda olduğu kimi qarşılıqlı təsirdə olmurlar. Buna görə də ionların ətrafındakı hidrat təbəqəsinin qalınlığı və bu hidratlaşmış ionların polyarlaşma əmsalları göstərilən konsentrasiyaya qədər sabit qalır və (2) – dən görüldüyü kimi baxılan oblastda qrafikin bucaq əmsalı konsentrasiyadan asılı olmur. Konsentrasiyanın sonrakı artımında hidratlaşmış ionların radiusları  $c$ -dən asılı olaraq dəyişir: bu halda ionlar sıxlaşdığından onların bir-biri ilə qarşılıqlı təsiri güclənir, ionların hidrat təbəqələri dağılmağa başlayır, onların radiusları  $r_{K^+}^*$ ,  $r_{OH^-}^*$  azalır, şəkil (1)- də qrafikin meyli ( $tg\phi$ ) azalır.



Şəkil 1.  $KOH + su$  sistemi üçün  $(n^2 - 1)/(n^2 + 2)$  nisbətinin  $KOH$ -ın konsentrasiyasından asılılığı

$c \approx 2\%$  konsentrasiyadan başlayaraq qarşılıqlı təsirin güclənməsi və sulu məhlulun strukturunun dəyişməsi kalium hidroksidin baxılan duru sulu məhlullarının alçaq tezlikli dielektrik spektroskopiyası metodu ilə apardığımız tədqiqat nəticəsində təsdiq edilmişdir [4,5].

(3) düsturuna daxil olan bir sıra parametrlərin ədəbiyyatdan [6-11] götürülmüş qiymətlərini nəzərə alaraq ( $r_{K^+} = 133 pm, r_{OH^-} = 140 pm, r_{su} = 140 pm, \alpha_{su} = 1.45 \cdot 10^{-30} m^3$ ) şəkil 1 – dən qrafikin bucaq əmsallarına görə  $K^+$  və  $OH^-$  ionlarının hidatasiya ədələrinin cəmi  $KOH$  – ın müxtəlif konsentrasiyalarında təyin edilmişdir:

$$c < 2\%, tg\phi = 0.1644 \text{ konsentrasiya intervalında } h_{K^+} + h_{OH^-} \approx 29.81;$$

$$2\% < c < 3\%, tg\phi = 0.111 \text{ konsentrasiya intervalında } h_{K^+} + h_{OH^-} \approx 19.57 ;$$

$$3\% < c < 4\%, tg\phi = 0.08 \text{ konsentrasiya intervalında } h_{K^+} + h_{OH^-} \approx 13.59 ;$$

$$4\% < c < 5\%, tg\phi = 0.0723 \text{ konsentrasiya intervalında alınır } h_{K^+} + h_{OH^-} \approx 12.1 .$$

### Ədəbiyyat:

1. Орешкин П.Т. Физика полупроводников и диэлектриков, М.: «Высшая школа», 1977, с. 448.

2. Bottcher C. J. F., Bordewijk P. Theory of Electric Polarization., Elsevier, Amsterdam, 1992
3. Masimov E.A., Abbasov H.F. Refractometric Determination of the hydration number of ions in diluted aqueous solutions of magnesium sulfate, News, BSU, 2011, pp. 121-124.
4. Масимов Э.А., Аббасов Х.Ф. //Abs. XVI Inter. Conf. Chem. Thermodynamics in Russia, v.1, Suzdal, 2007, p. 3S-239-3S-240
5. Масимов Э.А., Аббасов Х.Ф. // «Структурные изменения разбавленных водных растворов полиэтиленгликоля», XV Всероссийская конф. «Структура и динамика молекулярных систем», Яльчик, 2008
6. Полинг Л., Общая химия, пер. с англ., М., 1974, с. 683.
7. Кемпбел Д ж., Современная общая химия, пер. с англ., т. 1, М., 1975
8. Картмелл Э., Фоулз Г. В. А., Валентность и строение молекул, пер. с англ., М., 1979. В. Г. Дашевский.
9. Бокий Г. Б., Кристаллохимия, 3 изд., М., 1971
10. Балданов М.М. и др., Неэмпирический расчет сольватных чисел ионов в растворах // ДАН СССР. – 1989.- Т.308.- №1.- С.106-110.
11. Балданов М.М., Балданова Д.М., Жигитова С.Б., Танганов Б.Б. К проблеме радиусов гидратированных ионов // Доклады АН ВШ России.-2006.-Вып.2.-С.32-37.

## ОЗОННАЯ ТЕХНОЛОГИЯ ДЛЯ ОЧИСТКИ ЗАГРЯЗНЁННЫХ ВОД.

Н.А.Мамедов, Б.Б.Давудов, К.М. Дашдамиров, Г.М. Садых-заде

*Бакинский Государственный Университет*

[nematmamedov@hotmail.com](mailto:nematmamedov@hotmail.com), [mamed\\_dash@hotmail.com](mailto:mamed_dash@hotmail.com).

### Резюме

Данная работа посвящена исследованию физических процессов в озонаторах с двухбарьерным разрядом. Предлагаемая озонная технология из-за большой окислительной способности озона, а также образования активных радикалов во время синтеза позволяет использовать его для разложения большого числа молекул органических веществ, растворённых в производственных сточных водах нефтехимической промышленности. Для сохранения целостности флоры и фауны среды от губительных воздействий производственных загрязняющих стоков самым надёжным, технологически легко выполнимым является озонная технология. Полученные в работе результаты и их анализ показывают, что предлагаемая озонаторная установка обладает наибольшей мощностью и соответственно наибольшей производительностью при резонансной частоте. В работе приводятся некоторые основные технические характеристики такого озонатора средней мощности. Показано, что предлагаемая озонаторная установка может быть успешно применена для очистки сточных вод.

**Ключевые слова:** озонная технология, двухбарьерный разряд, связанные контуры, экология.

При планировании строительства любого производства необходимо заранее оценить ожидаемую экологическую ситуацию. Для сохранения целостности флоры и фауны среды от губительных воздействий производственных загрязняющих стоков самым надёжным, технологически легко выполнимым, на наш взгляд, является озонная технология.

На выходе любых нефтеперерабатывающих заводов загрязнённые токсичными веществами (фенолами, пестицидами, цианидами, ионами  $\text{NO}_2^-$ ,  $\text{NO}_3^-$ ,  $\text{NH}_4^+$ ) воды, в конце концов могут попасть в реки, озёра или моря. Все эти отходы производства наносят непоправимый вред окружающей среде. Очистка этих загрязнённых вод является неотложным требованием времени. Сброс этих вод в водоёмы может быть допущен лишь при снижении концентрации загрязнений до предельно допустимой концентрации (ПДК).

Предлагаемая нами озонная технология из-за большой окислительной способности озона, а также образования активных радикалов во время синтеза позволяет использовать его для разложения большого числа молекул органических веществ, растворённых в производственных сточных водах нефтехимической промышленности. В работе [1] показано, что после циклов биологической и физико-химической очистки применение озона для окисления оставшихся молекул растворённых органических веществ позволяет добиться полного избавления от болезнетворных бактерий, микробов и токсичных компонентов очищаемых вод. Озонная технология позволяет увеличить степень очистки по многим показателям.

На опытно-промышленном заводе (ОПЗ) при Институте Нефтехимических Процессов (ИНХП) Академии Наук Азербайджана совместно с учеными Бакинского Государственного Университета спроектирован и работает многоэлементный озонатор. ОПЗ в среднем, имеет около  $150\div 200 \text{ м}^3/\text{сут.}$  производственных загрязнённых вод, которые подлежат очистке. Основными загрязнителями этих вод являются углеводороды, ионы  $\text{NH}_4^+$ ,  $\text{NO}_2^-$  и небольшое количество фенолов. Озон, как известно, эффективно окисляет фенолы и расщепляет углеводороды ароматического ядра, вследствие чего пропадает их токсическое воздействие.

Во всех системах очистки сточные воды сначала подвергаются механической очистке по известной схеме, проходя через решетки, песко- и жироловки, и, наконец, первичный отстойник. Затем направляются в сооружение биологической очистки, после чего попадают в камеру флокуляции и во вторичный отстойник. После всех этих операций более или менее очищенные воды для обеззараживания от токсичных компонентов направляются в камеру контакта с озоном.

Главным элементом этой системы является озонатор. Фильтрованный воздух после осушки с помощью дегидрататора попадает в озонатор под давлением приблизительно  $1,5 \cdot 10^5 \text{ Па}$ , в котором происходит генерация озона в барьерном разряде.

Следует отметить, что в настоящее время на мировом рынке имеются различные типы озонаторов с разной производительностью, доходящей до нескольких килограммов в час. Однако эти генераторы очень дорогие и требуют постоянного ухода.

Учитывая это обстоятельство, в научно-исследовательской лаборатории БГУ «Озонные генераторы» разработаны озонаторы с достаточно низкой себестоимостью [3]. Некоторые технические характеристики такого озонатора средней мощности приведены ниже:

Количество активных элементов, шт.....	100
Рабочее напряжение, В .....	380
Потребляемая мощность, кВт.....	3
Производительность по озону, г/ч .....	30
Количество обрабатываемой воды, т/ч.....	25
Количество нагоняемого воздуха, $\text{м}^3/\text{ч}$ .....	10
Энергетические затраты для синтеза 1 кг озона, кВт ч/кг...	22
Время непрерывной работы, ч.....	8
Масса без компрессора, кг.....	60

Способ охлаждения.....Воздушно-водяной

Озонатор, который предусмотрен для применения в пилотной системе водоочистки, имеет производительность около 30 г/час, что вполне удовлетворяет потребности ОПЗ в очистке производственных сточных вод. Приведенные предварительные эксперименты по очистке производственных сточных вод показали, что микробное число исследованных образцов под действием озона падает в 1000 раз, а колииндекс – от 1.900.000 до 220. Многоэлементный озонатор работает на основе двухбарьерных разрядов. Двухбарьерные озонаторы, прежде всего, привлекают внимание тем, что их электроды покрыты качественным диэлектриком или же разделены стеклянной трубкой с достаточно высокой диэлектрической проницаемостью, отсутствием на выходе вредных тяжелых атомов, включений материалов эрозии электродов и пригодны для очистки даже питьевой воды.

Барьерные разряды относятся к наиболее сложным типам разрядов [4,6,7]. Механизм возникновения подобных разрядов и их структура исследованы не полностью. Поэтому для выяснения основных закономерностей синтеза озона требуется изучение физических процессов, протекающих в разрядных промежутках барьерных разрядов в каждом конкретном случае. Необходимо также определить и установить связь активной мощности, вкладываемой в разрядный промежуток с другими параметрами, например, с производительностью озонаторов. Однако, это не так просто из-за нелинейности сопротивления разрядного промежутка барьерных разрядов. Для разработки электрической теории озонаторов и оценки их выходных параметров важное значение имеет изучение их вольт-амперных характеристик (ВАХ). Зависимость ВАХ от условий экспериментов и конструктивных особенностей озонаторов была предметом ряда исследований [4-7].

В статье [5] экспериментально сняты и изучены ВАХ одного активного элемента многоэлементного озонатора в интервале частот питающего напряжения 250-1000 Гц. ВАХ рассматриваемого элемента имеет очень специфический вид. По ВАХ определялись вкладываемые активные мощности в зависимости от частоты.

При достижении на электродах определённого значения напряжения ( $\sim 10^4$  В) разрядный ток возрастает почти линейно и достигает максимального значения  $\sim 1$ А. Следует отметить, что здесь существенную роль играют токи смещения, определяемые общей ёмкостью активного элемента, и поэтому, естественно, с увеличением частоты также повышаются вкладываемые в разряд мощности. Однако мощность разряда, достигая своего максимального значения 26,5 Вт при частоте 750 Гц, стремительно падает. Вероятно, это и есть предельная резонансная частота, при которой в разряд вкладывается максимальная мощность. Действительно, при этом значении мощности озонатор имел наибольшую производительность, равную приблизительно 30 г/час.

Мощность определялась из вольт-амперной характеристики разряда по формуле

$$P = [I_{cp} - I_{cp.з}] \cdot U_{\Gamma} \quad (1)$$

где  $I_{cp}$ - средний ток,  $I_{cp.з}$ - ток при потенциале зажигания,  $U_{\Gamma}$  -напряжение горения разряда. Отметим что, при повышении частоты до значений, превышающих 1000 Гц, разряд прекращается. Этот вывод фактически противоречит установленной в теории озонаторов расчётной формуле [1], где мощность увеличивается с ростом частоты.

$$P = \frac{2}{\pi} \omega U_{\Gamma} [C_6(U - U_{\Gamma}) - U_{\Gamma}C_n] \quad (2)$$

где  $\omega=2\pi f$ - круговая частота,  $U_{\Gamma}$  - напряжение горения разряда,  $U$ - приложенное напряжение к озонатору,  $C_{\delta}$ - емкость барьера,  $C_{\Pi}$  –емкость разрядного промежутка.

Для выяснения вышеуказанного отклонения результатов эксперимента от теоретического выражения (2) в работе [5] составлена полная эквивалентная схема озонаторной установки, работающей на основе двухбарьерного разряда в импульсном режиме (рис.1). В этой схеме озонаторная установка представлена как система двух связанных контуров. Напряжение питания передается с первичного контура на вторичный посредством импульсного трансформатора.

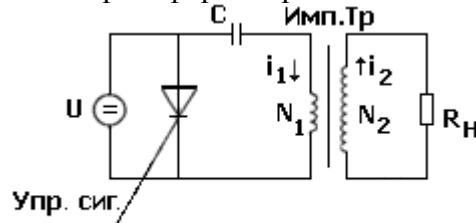


Рис. 1

Первая влияет на форму импульсов при передаче быстрых процессов и формирование их передних фронтов, а вторая- оказывает своё влияние при передаче медленно-изменяющейся части импульсов и формирует их вершины.

Разрядный ток имел два полупериода и носил сильно затухающий характер. Его можно представить в комплексном виде как  $I_1=I_{m1}e^{j\omega t}$  – для первичного и  $I_2=I_{m2}e^{j\omega t}$  – для вторичного контуров.  $I_1$ - создается воздействием  $e_1(t)$ - э.д.с. первичного контура. В результате в первичный контур вносится определённое комплексное сопротивление, равное

$$\dot{Z} = \frac{\omega^2 M^2}{\dot{Z}_2}$$

(где  $M$ - коэффициент взаимной индукции)

Реактивная часть этого, так называемого вносимого сопротивления, компенсирует реактивное сопротивление первичного контура, в результате чего сопротивление системы становится активным и, естественно, независимым от частоты.

Этим объясняется независимость вкладываемой в разряд мощности от частоты вблизи резонансной частоты ( $\omega_0=750$  Гц), наблюдаемая в экспериментах [8]. Очевидно, при этом изменяются и другие характеристики, в частности коэффициент передачи рассматриваемой системы связанных контуров.

Заключение.

1. Показано, что предлагаемая озонаторная установка обладает наибольшей мощностью и соответственно наибольшей производительностью при резонансной частоте.
2. Приведенные предварительные эксперименты по очистке производственных сточных вод показали, что микробное число исследованных образцов под действием озона падает в 1000 раз, а колиндекс- от 1.900.000 до 220.
3. Озонаторная установка может быть успешно применена для очистки сточных вод мини - нефтеперерабатывающих заводов.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Султанлы Б.Ю., Давудов И.Б., Мамедов Н.А., Давудов Б.Б. Озон: его электросинтез и применение в качестве окислителя // *Azərbaycan jurnalı*.-1999.-№4.-С.65-68.
2. Мамедов А.Г. Каспию быть чистым.-Баку: Ока, 2004.-415 с.

3. I.B.Davudov, N.A. Mamedov, B.B. Davudov Патент 20000060 (Azərbaycan Respublikası), 2000
4. Лунин В.В., Попович М.П., Ткаченко С.Н. Физическая химия озона.- М.:МГУ,1998.-504 с.
5. Mammadov N.A., Davudov B.B., Jabarov J.N. To a choice of active elements of tavuar ozone generators / et al. // I Intern. Conf. on Tech. and Phys. Problems in Power Eng.- Ba-ku,2002.-P.289.
6. Филиппов Ю.В., Вобликова В.А., Пантелеева В.И. Электросинтез озона. М., Изд.-во МГУ, 1987 г.,с.237
- 7.Самойлович В.Г., Гибалов В.И., Козлов К.В. Физическая химия барьерного разряда.М.,1989 г. С.176
8. Мамедов Н.А., Давудов Б.Б., Дашдамиров К.М., Садых-заде Г.М., Джабаров Дж.Н. Исследование влияния частоты питающего напряжения на режимы работы активного элемента многоэлементного озонатора. «Проблемы энергетики» журн., №3,2004,с.66
9. Davudov B.B., Dashdamirov K.M. Radiofizika, Bakı Univer. Nəşriyyatı 2008. s.392

## İON RABİTƏLİ MAYELƏRİN DİNAMİK ÖZLÜLÜYÜ

Eyvazov E.Ə., Abdullayev S.N, Zeynalov S.A.

ADPU, Azərb. Müəl. İnstitutu

*Hazırkı işdə molekullararası qarşılıqlı təsirin Kulon potensialı ilə verildiyini fərz etməklə müvafiq mayelərin dinamik özlülüyünün analitik ifadəsi müəyyən edilmiş və yeddi ion rabitəli mayələrdə bu ifadənin təcrübi nəticələrlə uzlaşması araşdırılmışdır.*

Göstərilmişdir ki, ion rabitəli mayelərin dinamik özlülüyü, fenomenoloji baxımdan

$$\eta = \frac{A}{r^m} \quad (1)$$

ifadəsi ilə verilə bilər.(Burada r-molekullararası məsafə, A-mayenin təbiətindən asılı olan və hər bir maye üçün sabit kəmiyyətdir). Deməli, hissəciklərarası rabitə ion xarakterli olduqda dinamik özlülük bilavasitə qonşu molekullar arasına məsafənin artması ilə üstlü qanunla azalmalıdır. Əgər fərz etsək ki, mayələrdə hissəciklər arasına məsafə, bərk cisimlərdə olduğu oxşar olaraq, temperaturdan  $r = \beta T$  qanunu üzrə dəyişir, onda  $\eta(T) = \frac{B}{T^m}$  - olar. Buradan isə

belə bir nəticəyə gəlmək olar ki, ion rabitəli mayelərin özlülüyü üstlü qanuna müvafiq azalmalıdır. Qeyd edək ki, son deyilən mayelərin özlülüyün temperatur asılılığına dair məlum eksponensial qanundan ciddi fərqlənir. Bunun köklü səbəbi yanaşmaların əsasında müxtəlif fiziki modellərin durmasıdır:[2]-də özlülüyün aktivasion-molekulların fərdi diffuziyası nəticəsində impuls daşınması, bizim yanaşmada isə impulsun əsasən fononlar vasitəsi ilə daşınması durur.

Tərəfimizdən müəyyən edilən və yuxarıda şərh olunan qanuna uyğunluğun təcrübə ilə uzlaşmasını müəyyənləşdirmək məqsədi ilə  $NaCl$ ,  $NaOH$ ,  $KOH$ ,  $LiNO_3$ ,  $KNO_3$ ,  $AgT$  və  $AgBr$  kristallarının maye ərintiləri olmaqla yeddi mayenin dinamik özlülüyü geniş

temperatur intervalında araşdırılmışdır. Müəyyən olunmuşdur ki, baxılan bütün hallarda, özlülüyün hesablanmış və təcrübi qiymətləri və eləcə də özlülüyün temperatur asılılığı, kifayət qədər dəqiqliklə biri-biri ilə uzlaşır.

Qeyd edək ki, ilk dəfə [1]-də təklif olunan hazırkı yanaşmanın əvvəllər 30-dan artıq müxtəlif təbiətli mayelər üçün də yoxlanılmışdır.

[1] E.Ə.Eyvazov və b. Molekulyar fizika və termodinamikaya giriş. Bakı, 2010

[2] De Bur. Teoriya jidkoqo sostoyaniya. M.,1986

## КОНФОРМАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА МОЛЕКУЛЫ PRO-PRO-ILE

Л.С. Гаджиева, Л.И. Исмаилова

*Бакинский Государственный Университет, Институт Физических Проблем*

[Larisa\\_Ismailova@yahoo.com](mailto:Larisa_Ismailova@yahoo.com)

### *Резюме*

С помощью метода теоретического конформационного анализа найдены низкоэнергетические конформации трипептидной молекулы Pro-Pro-Ile, обладающей иммуногетеропротекторным и ноотропным свойствами. Для данной пептидной молекулы оценены ее энергетические и геометрические характеристики.

Живой организм защищается от любых чужеродных агентов с помощью иммунной системы. В настоящее время известны 3 класса пептидных молекул, которые участвуют в процессах иммунорегуляции – нейропептиды, пептиды тимуса и пептиды костного мозга. Известно, что биологические свойства пептидных молекул определяются их химическим и пространственным строением. Конформационные изменения молекулы играют важную роль в структуре и связывании пептидных молекул. Поэтому актуальным становится исследование пространственной структуры пептидов с высокой биологической активностью.

Ключевым органом иммунной системы является тимус. Он играет важную роль в ослаблении системы клеточного и гуморального иммунитета в процессе старения организма. Возрастная эволюция тимуса сопровождается сильными функциональными изменениями его клеток, что влечет за собой ослабление выработки сигнальных пептидных молекул, которые регулируют созревание Т-лимфоцитов. Синтетические пептиды вилон (Lys-Glu), эпиталон (Ala-Glu-Asp-Gly) и трипептид Pro-Pro-Ile обладают выраженными иммуногетеропротекторными и ноотропными свойствами. Они относятся к классу пептидных тимомиметиков, обладающих иммуномодулирующим действием. Первые две молекулы идентифицированы в качестве фрагментов в различных белковых молекулах. Установлено, что эти синтетические пептиды стимулируют процессы регенерации, ускоряют заживление ран, способствуют восстановлению клеточного метаболизма в лимфоцитах, тормозят развитие спонтанных и индуцированных опухолей у животных [1, 2].

Целью данного исследования является определение конформационных свойств молекулы Pro-Pro-Ile, которая включает два аминокислотных остатка Pro и Ile. Конформационные изменения могут приводить к различной взаимной ориентации отдельных участков молекулы, к различиям энергетических характеристик функциональных групп молекулы. Поэтому выяснение конформационных аспектов пептидных молекул на сегодняшний день представляет особый интерес.

Полуэмпирический метод молекулярной механики позволяет оценить конформационные возможности пептидной молекулы, оценить энергетические и геометрические параметры молекулы.

С помощью метода теоретического конформационного анализа для трипептидной молекулы Pro-Pro-Ile был проведен расчет пространственной структуры в рамках механической модели молекул с учетом невалентных, электростатических и торсионных взаимодействий и энергии водородных связей. Для этой молекулы были найдены низкоэнергетические конформации, значения двугранных углов основной и боковых цепей аминокислот, входящих в нее. При этом оценивалась энергия внутри- и межостаточных взаимодействий в каждой пространственной структуре.

В молекуле Pro-Pro-Ile обе аминокислоты пролина являются объемными с конформационно жесткими боковыми цепями. Боковая цепь изолейцина является объемной и конформационно лабильной. Конформационные возможности аминокислоты пролин определяются двумя двугранными углами основной цепи  $\psi$  и  $\omega$  ( $\omega = -60^\circ$ ), а конформационные свойства аминокислоты изолейцин определяются углами основной цепи  $\phi$ ,  $\psi$ ,  $\omega$  и четырьмя углами  $\chi_1, \chi_2, \chi_3, \chi_4$  боковой цепи. Молекула Pro-Pro-Ile включает в себя 53 атома и 12 переменных двугранных углов вращения.

Формы остатков определялись низкоэнергетическими областями В, R и L двугранных углов основной цепи  $\phi$ - $\psi$ . При расчете были рассмотрены для аминокислоты Pro1 только форма основной цепи В, так как форма R является высоко энергетичной, потому что эта аминокислота стоит перед пролином. Для остатка Pro2 трипептидной молекулы были рассмотрены две формы основной цепи В и R, а для аминокислотного остатка Ile3 были рассмотрены все возможные низкоэнергетические области двугранных углов основной цепи В, R и L. Таким образом, для молекулы Pro-Pro-Ile рассчитывались полностью развернутые формы основной цепи BBB, BBR, BRL (шейп ee) и полусвернутые формы основной цепи BRB, BRR, BBL (шейп ef). В развернутых формах основной цепи боковые цепи остатков Pro1 и Ile3 находятся по разные стороны основной цепи молекулы, поэтому эффективными оказываются взаимодействия боковых цепей этих аминокислотных остатков между собой и с участками основной цепи молекулы. В случае же полусвернутых структур, сближенными оказываются боковые цепи аминокислотных остатков Pro2 и Ile3, а так же боковой цепи Pro1 с основной цепью трипептидной молекулы.

Конформационное состояние каждого аминокислотного остатка обозначалось символом  $X_{ij}$ , где X означает одну из возможных форм основной цепи В, R, L, P, а индексы  $ij = 11\dots, 12\dots, 13\dots, 21\dots$  и т.д. означает положение углов боковой цепи  $\chi_1, \chi_2, \chi_3\dots$ . При этом индекс 1 соответствует значению угла  $\chi$  в области  $0 - 120^\circ$ , 2 -  $120 - 120^\circ$ , 3 -  $-120 - 0^\circ$ . В качестве начальных приближений при расчете конформационных возможностей молекулы рассматривались известные значения двугранных углов основной цепи и боковых цепей молекулы, соответствующих низкоэнергетическим состояниям монопептидов Pro и Ile (они приведены в таблице 1). Отсчет двугранных углов проводился согласно общепринятой номенклатуре [3]. В проведенном расчете была использована сервисная программа для изучения пространственного строения биомолекул [4].

Таблица 1. Начальные приближения аминокислотных остатков Pro и Ile трипептидной молекулы

PRO	$\phi$	$\psi$	$\chi_1$
R	-60	-50	
B	-60	130	
Ile			



R	-60	-40	60
	-100	-60	180
	-100	-60	-60
B	-100	140	60
	-120	120	180
	-120	140	-60
L	60	70	60
	80	60	180
	60	60	-60

Исходные приближения для расчета конформационных состояний молекулы Pro-Pro-Ile составили свыше 50 различных вариантов. При расчете конформационных возможностей остатка Ile для двугранных углов боковой цепи  $\chi_1, \chi_3$  задавались три возможных значения 60, 180 и  $-60^\circ$ , а для углов  $\chi_2, \chi_4$  -  $180^\circ$ . Расчет всех шести возможных форм основной цепи трипептидной молекулы позволил определить ее низкоэнергетические пространственные структуры. Все рассчитанные конформации попадают в энергетический интервал от  $-11$  ккал/моль до 10 ккал/моль.

Энергетические параметры, вклады невалентных, электростатических, торсионных взаимодействий, а также вклады внутри и межостаточных взаимодействий для некоторых низкоэнергетических конформаций молекулы Pro-Pro-Ile представлены в таблице 2, а значения геометрических параметров (значения двугранных углов основной и боковых цепей молекулы) приведены в таблице 3.

Определенные нами геометрические и энергетические параметры низкоэнергетических конформаций молекулы Pro-Pro-Ile дают полную информацию о пространственной структуре трипептидной молекулы. Самой низкоэнергетической конформацией молекулы является BRR<sub>2222</sub> (общая энергия составляет  $-10,6$  ккал/моль). Вклад невалентных взаимодействий в данной пространственной структуре составляет  $-7,8$  ккал/моль, электростатических взаимодействий составляет  $-3,5$  ккал/моль, а торсионных взаимодействий  $0,6$  ккал/моль. Всего  $0,6$  ккал/моль проигрывает ей конформация BRB<sub>1222</sub>. Здесь вклад невалентных, электростатических и торсионных взаимодействий составляет соответственно  $-6,8$ ,  $-3,8$  и  $0,6$  ккал/моль. Таблица 2 дает наглядное представление о внутримолекулярных взаимодействиях.  $E_1, E_2, E_3$  – это вклады монопептидных взаимодействий,  $E_{12}, E_{23}$  – вклады дипептидных взаимодействий Pro1-Pro2 и Pro2-Ile3, и, наконец,  $E_{13}$  – вклад трипептидных взаимодействий аминокислот Pro1-Ile3,  $E_{\text{общ}}$  – общая энергия конформации. Данная таблица дает четкие количественные характеристики всех возможных энергетических вкладов. Из нее видно, что самыми эффективными являются дипептидные взаимодействия  $E_{12}$  и трипептидные энергетические вклады  $E_{13}$ .

Таблица 2. Энергетические характеристики низкоэнергетических конформаций молекулы Pro-Pro-Ile

№	Конформация	Енев	Еэл	Етор	$E_1$	$E_2$	$E_3$	$E_{12}$	$E_{23}$	$E_{13}$	$E_{\text{общ}}$
1	BBB <sub>1222</sub>	$-5,6$	$-3,8$	$1,2$	$-1,7$	$0,3$	$-0,4$	$-4,1$	$0$	$-3,3$	$-8,3$

2	BBB <sub>2222</sub>	-5,4	-3,8	1,2	-1,7	0,3	-0,9	-4,4	0	-2,6	-8,0
3	BBB <sub>3222</sub>	-4,7	-3,8	1,1	-1,8	0,4	-0,4	-4,4	0	-2,4	-7,5
4	BBR <sub>1222</sub>	-3,6	-3,7	1,4	-1,7	0,3	1,3	-4,4	0	-2,9	-5,9
5	BBR <sub>2222</sub>	-3,1	-3,7	1,6	-1,7	0,3	1,3	-4,4	0	-2,3	-5,3
6	BBR <sub>3222</sub>	-5,2	-3,7	0,8	-1,7	0,3	-0,5	-4,4	0	-2,6	-8,1
7	BRB <sub>1222</sub>	-6,8	-3,8	0,6	-1,6	0,3	-0,4	-3,9	0	-4,9	-10,0
8	BRB <sub>2222</sub>	-7,0	-3,8	1,1	-1,6	0,2	-0,7	-4,0	0	-4,7	-9,8
9	BRB <sub>3222</sub>	-6,8	-3,8	0,9	-1,6	0,3	-0,5	-4,0	0	-4,8	-9,8
10	BRR <sub>1222</sub>	-7,2	-3,5	1,2	-1,4	0,2	1,6	-4,0	0	-7,2	-9,5
11	BRR <sub>2222</sub>	-7,8	-3,5	0,6	-1,6	0,3	-0,6	-3,9	0	-5,4	-10,6
12	BRR <sub>3222</sub>	-7,0	-3,5	0,8	-1,8	0,3	0,8	-3,8	0	-6,0	-9,7
13	BBL <sub>1222</sub>	-1,9	-3,8	1,6	-1,9	0,2	0,7	-4,1	0	-0,7	-4,0
14	BBL <sub>3222</sub>	-4,3	-3,6	1,5	-1,7	0,3	0,3	-4,3	0	-2,3	-6,3
15	BRL <sub>1222</sub>	-2,7	-3,4	1,3	-1,9	0,3	0,7	-3,6	0	-1,6	-4,8
16	BRL <sub>3222</sub>	-6,9	-3,3	1,5	-1,6	0,3	0,2	-3,9	0	-5,2	-9,0

Таблица 3. Геометрические параметры низкоэнергетических конформаций молекулы Pro-Pro-Pe

Конформация	$\omega_1$	$\psi_2$	$\omega_2$	$\psi_3$	$\omega_3$	$\phi_4$	$\chi_{41}$	$\chi_{42}$	$\chi_{43}$	$\chi_{44}$	$\psi_4$	$\omega_5$	$E_{\text{общ}}$
BBB <sub>1222</sub>	177	161	173	116	178	-137	58	188	173	188	155	180	-8,3
BBB <sub>2222</sub>	177	161	178	130	181	-152	182	187	170	188	143	180	-8,0
BBB <sub>3222</sub>	178	159	175	140	175	-124	-61	183	172	189	137	180	-7,5
BBR <sub>1222</sub>	177	161	178	134	180	-81	71	190	176	188	-37	179	-5,9
BBR <sub>2222</sub>	177	161	177	135	180	-86	197	187	174	189	-39	180	-5,3
BBR <sub>3222</sub>	177	161	178	134	182	-99	-58	184	174	189	-61	180	-8,1
BRB <sub>1222</sub>	177	162	177	-53	181	134	61	188	173	188	153	180	-10,0
BRB <sub>2222</sub>	177	162	174	-47	177	-145	181	184	170	187	138	180	-9,8
BRB <sub>3222</sub>	176	162	174	-50	177	-122	-58	185	173	189	131	180	-9,8
BRR <sub>1222</sub>	177	166	178	-48	178	-68	67	190	174	187	-37	179	-9,5
BRR <sub>2222</sub>	177	163	179	-53	180	-97	-59	185	172	189	-62	181	-10,6
BRR <sub>3222</sub>	178	159	178	-52	182	-98	-49	172	-58	189	-61	180	-9,7
BBL <sub>1222</sub>	178	156	176	127	189	36	56	186	174	189	50	180	-4,0
BBL <sub>3222</sub>	178	159	177	131	182	61	-49	188	175	189	80	180	-6,3
BRL <sub>1222</sub>	178	155	173	-68	184	34	51	184	175	190	56	180	-4,8
BRL <sub>3222</sub>	178	162	177	-55	182	60	-51	187	174	189	82	180	-9,0

Для низкоэнергетических конформаций трипептидной молекулы количественные характеристики геометрии молекулы дает таблица 3. В ней для каждой конформации приведены значения двугранных углов основной цепи молекулы и двугранных углов боковой цепи Pe3. Таблица 2 и таблица 3 показывают, что конформации с полу-свернутой основной цепью трипептидной молекулы Pro-Pro-Pe являются энергетически предпочтительнее, чем конформации с развернутой формой основной цепи. Основной стабилизирующий вклад вносят невалентные и электростатические взаимодействия, а также вклад от межостаточных взаимодействий между участками основной цепи и боковыми цепями остатков пролинов и пролинов с изолейциновой аминокислотой.

Исследование пространственного строения трипептидой молекулы позволило определить низкоэнергетические конформации молекулы, получить количественные энергетические и геометрические характеристики молекулы. Полученные результаты

могут быть использованы для конструирования новых аналогов пептидных тимомиметиков

### Литература

1. Щербак В.А., Кузник Б.И., Витковский Ю.А. Цитокинины и воспаление, 2005, №2, с.46-49
2. Рыжак Г.А., Алехова Т.М., Бахидзе Е.В. II Российский симпозиум по химии и биологии пептидов, 2005, Санкт-Петербург, с.106
3. IUPAC-IUB Quantity, Unit and Symbols in Physical Chemistry, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 39
4. I.S. Maksimov, L.I. Ismailova, N.M. Godjaev J. Struc. Chem., 1983, 24, s. 147

## ПРОСТРАНСТВЕННАЯ СТРУКТУРА ИММУНОАКТИВНОГО ДИПЕПТИДА GLY-PRO

Л.С.Гаджиева, Л.И.Исмаилова  
larisa\_ismailova@yahoo.com

*Бакинский Государственный Университет, Институт Физических Проблем*

### Резюме

*С помощью метода теоретического конформационного анализа исследовано пространственное строение и конформационные свойства глипролина – иммуноактивного дипептида Gly-Pro с цитопротективным действием. Найдены низкоэнергетические конформации дипептидной молекулы, значения геометрических и энергетических параметров.*

Целью настоящей работы является выявление конформационных особенностей строения глицин- и пролин содержащего пептида, проявляющего нейропротективное действие на моделях повреждения нейронов *in vitro*. Короткие пептиды, аминокислотные последовательности которых состоят только из остатков глицина и пролина, называют глипролинами. Они образуются в организме в результате внутри- и экстраклеточного катаболизма коллагена, эластина и родственных белков. Биологическая активность глипролинов представляет большой практический интерес. Известно, что они влияют на систему свертывания крови, модулируют работу иммунной и нервной систем, обладают противовоспалительным действием [1, 2]. В настоящее время механизмы и мишени действия глипролинов мало изучены. Актуальным является создание синтетических аналогов глипролинов, которые отличались бы высокой стабильностью и эффективностью действия. В связи с этим, важным представляется проведение структурно-функциональных исследований глипролинов с помощью теоретических методов исследования.

Недавно получены новые сведения о взаимосвязи между структурой коротких глицин- и пролин содержащих пептидов и их биологической активностью [3]. Показано, что эндогенные пептиды Pro-Gly-Pro и N-ацетил-Pro-Gly-Pro в условиях окислительного стресса оказывают цитопротективное действие. Установлено, что наличие C-концевой последовательности Gly-Pro является необходимым условием для проявления цитопротективного действия коротких синтетических глицин- и пролин содержащих

пептидов. Данный С-концевой дипептидный участок присутствует у молекулы Семакс - Met-Glu-His-Phe-Pro-Gly-Pro. Экспериментальные исследования показали, что Семакс является эндогенным регулятором функций центральной нервной системы, обладает адаптивным и ноотропным эффектом. Высокая протеолитическая устойчивость Семакса и его фрагментов может лежать в основе пролонгированных эффектов этого пептида [4].

В последние десятилетия уделяется значительное внимание изысканию лекарственных средств анксиолитического действия, лишенных недостатков соединений, использующихся в клинической практике в настоящее время. Одним из таких веществ является эндогенный регуляторный аналог тафтсина Селанк – Thr-Lys-Pro-Arg-Pro-Gly-Pro, обладающий иммуномодулирующим эффектом [5], а также широким спектром как анксиолитической, так и психостимулирующей активности. Молекула Селанка также содержит в конце аминокислотной последовательности важный для ее биологической активности дипептидный фрагмент Gly-Pro.

Расчет пространственной структуры молекулы Gly-Pro проводился с помощью метода теоретического конформационного анализа и теоретического подхода, позволяющего рассчитывать трехмерную структуру биомолекул исходя из известной аминокислотной последовательности [6]. Формы основной цепи остатков определялись низкоэнергетическими областями В, R, L и P двугранных углов основной цепи  $\phi$ - $\psi$  для остатка Gly и В и R форм для аминокислоты Pro. Начальные приближения формировались из низкоэнергетических конформаций глицина ( R форма –  $\phi = -90^\circ$ ;  $\psi = -90^\circ$ ; В форма –  $\phi = -90^\circ$ ;  $\psi = 100^\circ$ ; L форма –  $\phi, \psi = 90^\circ$  и R форма основной цепи –  $\phi = 90^\circ$ ;  $\psi = -90^\circ$ ). Для аминокислоты пролин учитывались два положения (В форма –  $\psi = 130^\circ$  и R форма –  $\psi = -50^\circ$ ). Для глицина также рассматривались четыре граничных значений углов  $\phi$ - $\psi$ . Всего было составлено 16 различных начальных приближений.

Расчет выполнялся в рамках механической модели молекул с учётом невалентных ( $E_{нв}$ ), электростатических ( $E_{эл}$ ), торсионных взаимодействий ( $E_{тор}$ ) и энергии водородных связей ( $E_{вс}$ ). Невалентные взаимодействия оценивались по потенциалу Леннарда-Джонса с параметрами Скотта и Шераги [7]. Электростатические взаимодействия рассчитывались в монополярном приближении по закону Кулона с использованием зарядов, предложенных в этой же работе. Конформационные возможности дипептида рассчитывались применительно к условиям водного окружения, поэтому величина диэлектрической проницаемости принята равной 10. Водородные связи, которые оценивались по потенциалам типа Морзе, предполагались ослабленными (максимальная энергия образования водородной связи при  $r_0 = 1,8 \text{ \AA}$  составляла 1,5 ккал/моль). Торсионные потенциалы и величины барьеров вращения аналогичны величинам, предложенным в работе [7]. Обозначения и отсчеты углов вращения соответствуют принятой международной номенклатуре [8].

Расчет данной дипептидной молекулы выполнялся на основе стабильных конформаций монопептидов N-ацетил-L-пролина и L-глицина. Для дипептида Gly-Pro, содержащего 27 атомов и 6 переменных двугранных углов, возможны 2 шейпа и 8 форм основной цепи. Развернутый шейп e включает четыре формы BB, BR, LB, LR, а свернутый шейп f включает формы основной цепи RB, RR, PR, PB.

Учитывая специфику боковых цепей аминокислотных остатков глицина и пролина, важно подчеркнуть, что остаток Gly лишен боковой цепи (в боковой цепи находится один атом водорода), а боковая цепь остатка Pro представляет жестко фиксированное кольцо. Конформационные возможности дипептидной молекулы определяются углами только основной цепи остатков глицина и пролина:  $\phi$ ,  $\psi$ ,  $\omega$ . Таких двугранных углов в молекуле Gly-Pro шесть. Энергетические и геометрические характеристики

всех возможных конформаций дипептидной молекулы представлены в таблицах 1 и 2. В таблице 1 для каждой конформации приведены вклады невалентных, электростатических и торсионных взаимодействий, а так же вклады внутримолекулярных монопептидных ( $E_1$  и  $E_2$ ) и дипептидных взаимодействий ( $E_{12}$ ). Оптимизированные двугранные углы для Gly ( $\varphi_2$ ,  $\psi_2$  и  $\omega_2$ ) и Pro ( $\psi_3$ ,  $\omega_3$ ) представлены для каждой исследуемой пространственной структуры в таблице 2.

Как видно из таблицы 1 основной вклад в энергию молекулы вносят дипептидные взаимодействия, их энергия варьируется от -1.0 до -5.0 ккал/моль. Формы основной цепи шейпа e имеют одинаковый развернутый ход основной цепи, при этом боковые цепи Gly и Pro находятся по разные стороны от основной цепи, а формы шейпа f имеют одинаковый свернутый ход основной цепи, где боковые цепи аминокислот оказываются сближенными. Конформации 9–16 соответствуют граничным начальным приближениям остатка Gly:  $\varphi = -90^\circ$ ,  $\psi = 0^\circ$ ;  $\varphi = -90^\circ$ ,  $\psi = 180^\circ$ ;  $\varphi = 90^\circ$ ,  $\psi = 0^\circ$ ;  $\varphi = 90^\circ$ ,  $\psi = 180^\circ$ . При этом конформации аминокислотного остатка Pro рассматривались в двух формах B, R.

Таблица 1. Энергетические параметры дипептида Gly-Pro

Конформация		Энергетические вклады (ккал/моль)						
		$E_{нв}$	$E_{эл}$	$E_{тор}$	$E_1$	$E_2$	$E_{12}$	$E_{отн}$
1	BB	4.3	-2.0	0.5	2.0	2.3	-2.0	3.9
2	BR	3.5	-1.0	0.3	2.0	1.5	-1.0	3.0
3	LB	1.3	-1.8	0.8	1.9	2.2	-4.0	1.6
4	LR	0.6	-1.6	0.6	1.8	1.4	-4.0	0.8
5	RB	1.7	-1.8	0.8	1.8	2.2	-4.0	1.8
6	RR	0.2	-1.6	0.7	1.8	1.5	-4.0	0.4
7	PB	1.5	-2.0	0.3	2.3	2.2	-4.0	1.0
8	PR	0.6	-1.9	0.2	2.3	1.4	-4.0	0
9	1	1.1	-1.7	0.9	1.9	2.3	-4.0	1.4
10	2	-0.1	-1.6	0.7	1.9	1.5	-5.0	0.3
11	3	1.9	-2.0	0.5	2.2	2.3	-4.0	1.7
12	4	1.1	-1.8	0.3	2.2	1.5	-4.0	0.8
13	5	1.4	-1.8	0.8	2.0	2.3	-4.0	1.7
14	6	0.6	-1.6	0.6	2.0	1.4	-4.0	0.8
15	7	1.9	-1.8	0.5	1.9	1.4	-4.0	0.7
16	8	1.0	-1.8	0.4	2.2	1.5	-4.0	1.8

Расчет обнаружил все возможные для дипептидной молекулы конформационные состояния, выявил низкоэнергетические конформации. Из таблицы 1 видно, что относительная энергия конформаций попадает в интервал 0–4 ккал/моль. Самой низкой энергией обладает конформация PR формы основной цепи. Всего 0.4 ккал/моль уступает ей конформация со свернутой формой основной цепи RR. Низкой энергией обладают конформации 10, 12, 14 с граничными значениями углов основной цепи Gly. Следует подчеркнуть, что в низкоэнергетических структурах молекул Семакс и Селанк концевой дипептидный участок Gly-Pro так же находится в конформации PR. Можно предположить, что низкоэнергетическая конформация дипептидной молекулы ответственна за выполнение определенной биологической функции каждой гептопептидной молекулы и присутствие именно этого дипептидного фрагмента важно и обязательно для активности молекул Семакса и Селанка

Таблица 2. Геометрические параметры дипептида Gly-Pro

Конформация		Геометрические параметры (град.)						E <sub>отн</sub>
		$\omega_1$	$\varphi_2$	$\psi_2$	$\omega_2$	$\psi_3$	$\omega_3$	
1	BB	179	-103	119	-179	132	180	3.9
2	BR	179	-104	119	-179	-53	179	3.0
3	LB	179	65	72	177	141	180	1.6
4	LR	180	69	74	177	-54	179	0.8
5	RB	180	-84	-82	175	133	180	1.8
6	RR	180	-71	-76	175	-52	179	0.4
7	PB	179	138	-72	177	142	180	1.0
8	PR	180	137	-72	178	-53	179	0
9	1	179	-66	-72	176	133	180	1.4
10	2	180	-64	-71	176	-52	179	0.3
11	3	-179	-89	179	177	131	180	1.7
12	4	180	-90	179	178	-52	179	0.8
13	5	180	62	72	178	133	180	1.7
14	6	180	62	71	178	-55	179	0.8
15	7	179	88	179	178	133	180	0.7
16	8	179	89	181	177	-52	179	1.8

### ЛИТЕРАТУРА

1. Золотарев Ю.А., Бадмаева К.Е., Бакаева З.В., Самонина Г.Е., Копылова Г.Н., Дадаян А.К., Зверков Ю.Б., Васьковский Б.В., Ашмарин И.П., Мясоедов Н.Ф. Биорганическая химия. 2006, Т. 32, № 2, С. 89-94
2. Бакаева З.В., Самонина Г.Е., Умарова Б.А., Копылова Г.Н., Гончарова Е.Л., Багликова К.Е. Цитокины и воспаление. 2008, Т.7, №2, С. 28-32
3. Мартынова К.В., Нагаев И.Ю., Шрам С.И., Швец В.И., Мясоедов Н.Ф. Вестник МИТХТ.2008, Т. 3, №5, С. 96-100
4. Исмаилова Т.И., Исмаилова Л.И. Аллергология и клиническая иммунология, 2008, №1, С.117-118
5. П.М.Клодт, В.С.Кудрин, В.Б.Наркевич, М.М. Козловская, А.П.Майский, К.С. Раевский Психофармакология и биологическая наркология, 2005, Т.5, С.984-987
6. Попов Е.М. Белки и пептиды, М.: Наука, 1995, С.10-73
7. Momany F.A., McGuire R.F., Burgess A.W., Scheraga H.A. // J.Phys.Chem., 1975, V. 29, P.2361-2381
8. IUPAC-IUB, Quantity, Units and Symbols in Physical Chemistry. V.39. Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1988

### PEPTİD CREKANIN ANALOQLARININ DƏMİR OKSİDİ (Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>) KOMPLEKSLƏRİNİN ELEKTRON QURULUŞU

Gültəkin Cümşüd qızı Abbasova, Fəridə Ələkbər qızı Qədimova

*Bakı Dövlət Universiteti, Optika və molekulyar fizika kafedrası*

([abbasova1962@mail.ru](mailto:abbasova1962@mail.ru))

Xülasə

Təqdim olunmuş işdə peptid CREKA, onun 17 təbii analoqunun və onların di-qlükoza və üçvalentli dəmir oksidi ilə komplekslərinin fəza və elektron quruluşlarının hesablanmış nəticələri şərh edilmişdir. Daha dayanıqlı quruluşları tapmaq üçün MM+ molekulyar mexanikası üsulu ilə birləşmələrin və komplekslərin ümumi enerjiləri minimumlaşdırılmışdır. Komplekslərin elektron quruluşlarının tədqiqi, xüsusi olaraq, keçid metalların atomları daxil olan birləşmələr üçün parametrləşdirilmiş PM3 yarımempirik kvant kimyəvi üsulun köməyi ilə aparılmışdır. Hesablamalar zamanı Hypercube korporasiyası saytından əldə edilmiş HyperChem proqramının 8.03 versiyasından da istifadə edilmişdir ([www.hyper.com](http://www.hyper.com)).

Peptid CREKA (Cys1-Arg2-Glu3-Lys4-Ala5) beş aminturşu qalığından təşkil olunmuş təbii birləşmədir. Bir sıra tədqiqatlarda bu peptidin müxtəlif orqan və toxumalardakı şiş hüceyrələri ətrafında yüksək konsentrasiyada toplandığı müəyyən olunmuşdur. 2006-cı ildə, ilk dəfə olaraq, Ruoslahti və onun əməkdaşları tərəfindən prostat xərçəngi ilə zədələnmiş toxumalara dərman preparatlarının daşınması məqsədilə CREKA tərkibli komplekslər və peptid CREKA-nın müxtəlif analoqları sintez olunmuşdur. Dekstranla örtülmüş üçvalentli dəmir oksidi və di-qlükoza ilə birləşdirilmiş peptid CREKA komplekslərinin nəzəri modelləri qurulmuş və müxtəlif konformasiya hallarını xarakterizə edən parametrlər tapılmışdır.

No	Peptid +Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	*E <sub>tam.</sub>	E <sub>elek.</sub>	E <sub>itəl.</sub>	E <sub>rab.</sub>	E <sub>ist.</sub>	μ
1	AREKA	-303739	-4204709	3900970	-12521	-877	34.2
2	CPEKA	-292035	-3966233	3674197	-11865	-977	39.6
3	CKEKA	-313740	-7204710	6900970	-12771	-988	32.6
4	CRERA	-334141	-4769214	4435073	-12606	-762	32.8
5	SREKA	-334163	-4447260	4113097	-12627	-784	20.4
6	CKEKA	-310393	-4266874	3956481	-12503	-800	36.4
7	CRDKA	-300572	-4005438	3704866	-12393	-910	47.8
8	CREKV	-314880	-4418098	4103218	-13095	-836	48.5
9	SKEKA	-303049	-4285393	3982344	-12428	-951	23.7
10	SRDKA	-177912	-1877926	1700013	-11058	-488	28.1
11	SRERA	-317979	-4547334	4229354	-12819	-891	46.3
12	SREKV	-317128	-4591095	4273966	-12902	-649	44.7
13	CKDKA	-296829	-3835584	3538755	-11818	-609	40.9
14	CKEKV	-169491	-1768304	1598813	-10632	-131	35.2
15	CRDRA	-320183	-4412944	4100762	-12633	-972	37.2
16	CRDKV	-314880	-4418098	4103218	-13095	-836	36.4
17	CRERV	-195452	-1990742	1845290	-7998	-135	36.5

\*E<sub>tam.</sub>=tam enerji, E<sub>elek.</sub>=elektron enerjisi, E<sub>itəl.</sub>=nüvə qarşılıqlı təsir enerjisi, E<sub>rab.</sub>=rabitə enerjisi, E<sub>ist.</sub>=istilik əmələgəlmə enerjisi

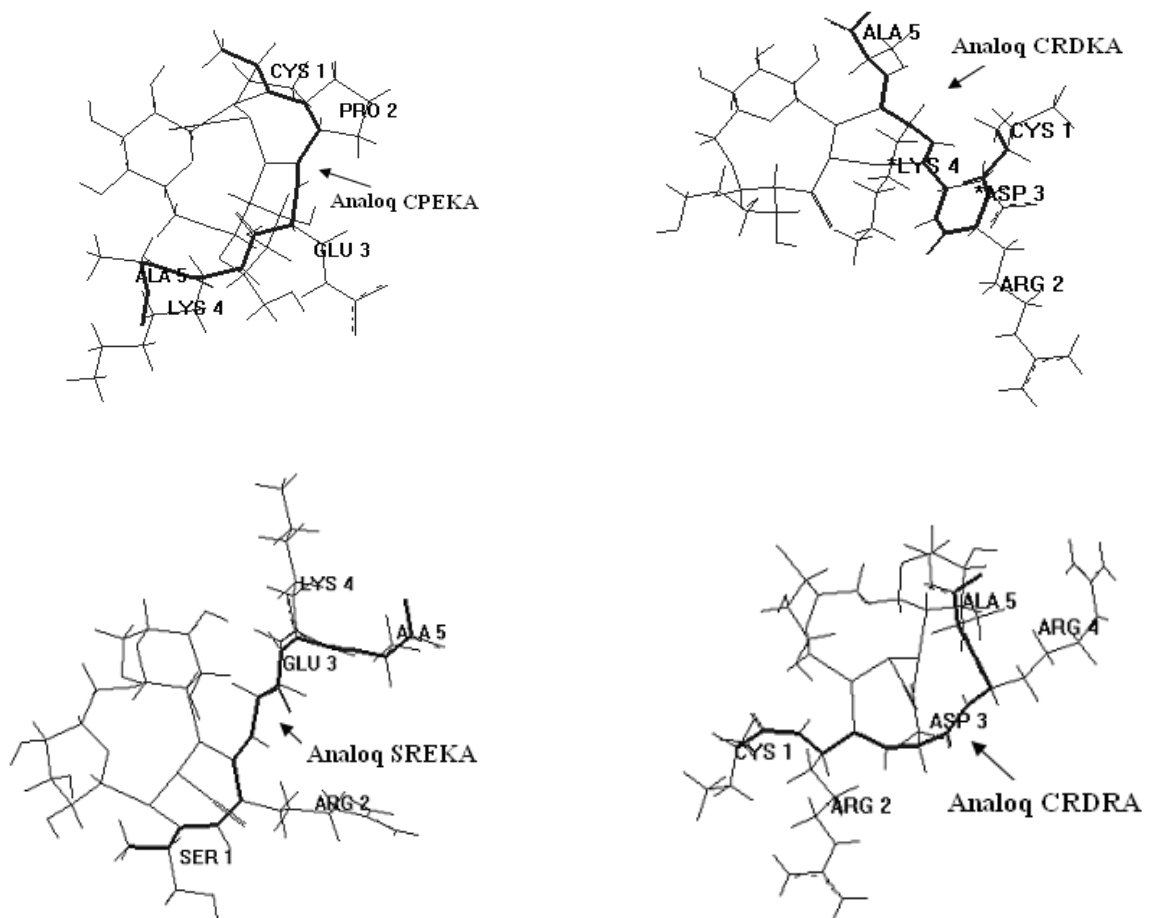
Peptid CREKA-nın analoqları ardıcıl nöqtəvi əvəzetmə nəticəsində alınmışdır: Cys1 aminturşu qalığı alanin və ya serinlə, arginin ikinci vəziyyətində prolin və ya lizinlə, Glu3 asparagin turşusu ilə, Lys4 müsbət yüklənmiş arginin turşu qalığı ilə, Ala5 isə qeyri-polyar valin amin turşusu ilə əvəz olunmuşdur.

Cədvəldə peptid CREKA-nın analoqlarının di-qlükoza və Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> ilə komplekslərinin enerji parametrləri (kkal/mol) və dipol momentləri (μ, Debay) verilmişdir.

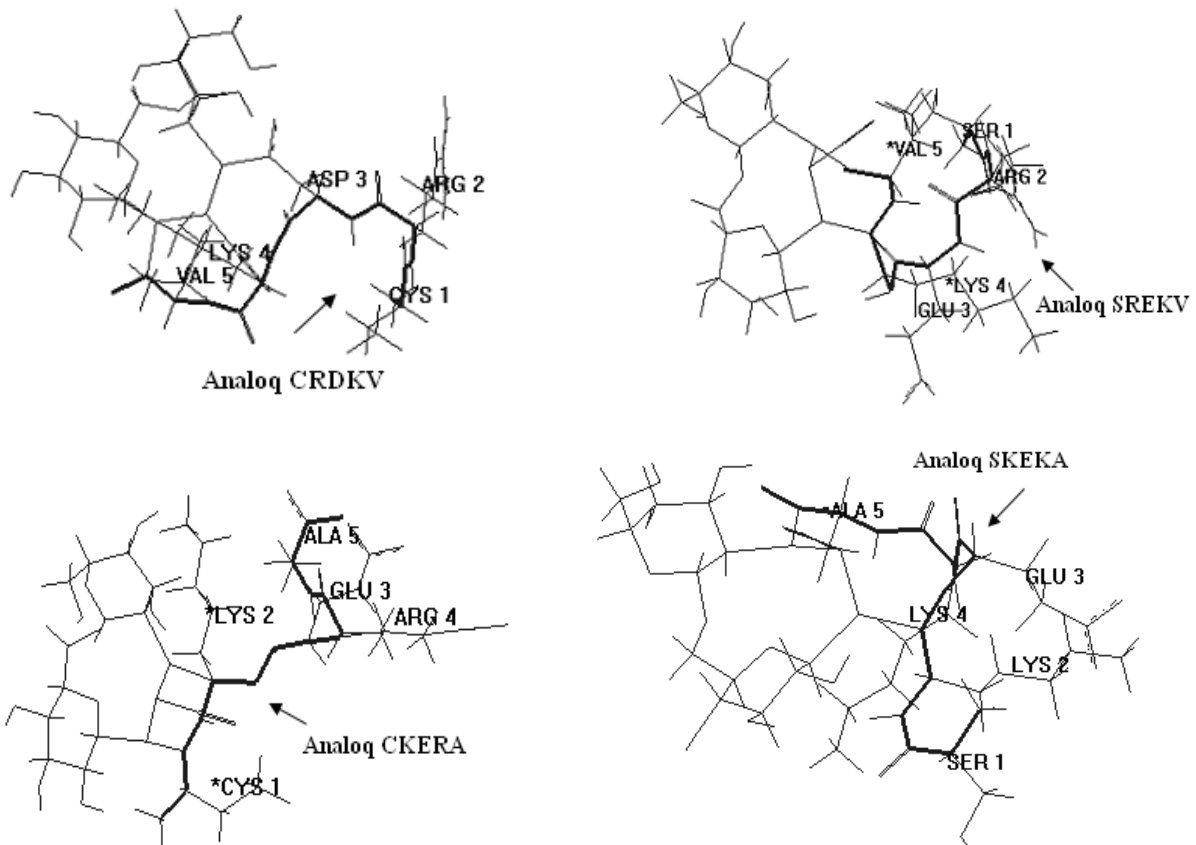
Peptid molekuluna daxil olan aminturşu qalıqlarının atomlarında elektron sıxlıqlarının və effektiv yüklərinin qiymətlərinin müqayisəsi göstərir ki, müəyyən atomlar qruplarının, peptid

zəncirinin 2 və 4 vəziyyətlərində argininin (Arg2, Arg4) yan zəncirində, xüsusilə də glutamin turşusunun (Glu3) yan zəncirinin atomlarındakı yük sıxlıqları xeyli dəyişir. Daha böyük elektron sıxlığı peptid CREKA-nın bütün analoqları üçün karbonil peptid qruplarının oksigen atomlarında aşkar edilmişdir. Konkret atomların effektiv yüklərinin dəyişmə dinamikasının analizinə əsasən peptid molekulunun konformasiya dəyişikliklərinə həssas hissəsi təyin olunmuşdur. Onlara peptid CREKA-nın müxtəlif analoqlarındakı Lys4-Ala5 və Arg4-Val5 dipeptid fraqmentləri daxildir. CPEKA və CRERA analoqlarında Gly1-Glu3 fraqmentindəki atomların effektiv yükləri nisbətən kiçik dəyişikliklə xarakterizə olunur. Bu nəzəri konformasiya analizi metodunun nəticələrinə əsasən atomların əlverişli qarşılıqlı təsirlərinin (qeyri-valent, eləcə də elektrostatik) mövcud olması ilə əlaqədar bu quruluşların dayanıqlığı fikrini bir daha təsdiq edir.

Şəkillərdə peptid CREKA-nın bəzi analoqlarının di-qlükoza və  $Fe_3O_4$  ilə daha stabil komplekslərinin optimizasiya edilmiş strukturları verilmişdir.







Peptid CREKA-nın analoqlarının di-qlükoza və üçvalentli dəmir oksidi ilə kompleksləri ilə aparılan müqayisəli analizinin nəticələri göstərmişdir ki, SREKA, CRERA, CREKV, SRERA, SREKV, CRDRA və CRDKV analoqları ilə əmələ gələn komplekslər daha stabil olmuşdur. SRDKA, CKEKV, CRERV analoqları ilə əmələ gələn komplekslər energetik cəhətdən daha az üstünlüyə malik olmuşlar.

Təqdim olunmuş işdən alınan nəticələrə görə peptidin analoqlarının fəza və elektron quruluşundakı dəyişmə qanunauyğunluğu tədqiq olunan birləşmələrin dayanıqlı və reaksiyaya girmə qabiliyyəti haqqında proqnoz vermək üçün zəruridir.

## ƏDƏBİYYAT

- [1] D.Simberg, T.Duza, et al. PNAS, 2007, 104 (3), p. 932-936
- [2] Z.A Flores-Ortega., A.I Jimnez, et al. J. Phys. Chem. B, 2009, 11
- [3] А.М.Магеррамов, Г.Д.Аббасова, И.Н.Алиева, М.А.Рамазанов и др. Журнал Нанотехника, 2009, 4, с.70-76
- [4] И.Н.Алиева, Г.Д.Аббасова, Н.М.Годжаев. Application of Information and Communication Technologies (AICT), International Conference, 2009, p.148-152 (<http://ieeexplore.ieee.org>)
- [5] Н.М.Годжаев, Г.Д. Аббасова, И.Н.Алиева J. Qafqaz University, 2008, 21, p.30-37

**VAL-TYR ANTİHİPERTENZİV DİPEPTİDİNİN  
KONFORMASIYA-ELEKTRON XASSƏLƏRİ**

**G.Ə. Haqverdiyeva**

**E-mail: [Haqverdigulnara@gmail.com](mailto:Haqverdigulnara@gmail.com)**

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

Xülasə. Antihipertenziv H-Val-Tyr-OH dipeptidin fəza quruluşu nəzəri metodlarla tədqiq olunmuşdur. Molekulun optimal konformasiyalarının həndəsi, enerji və elektron parametrləri təyin edilmişdir. Nəticələr göstərir ki, molekulun əsas zənciri bükülü və açıq formada olan optimal konformasiyaları enerjiyə görə fərqlənməsəldə, konformasiya müxtəlifliyi molekulun elektron quruluşunda əks olunur.

Val-Tyr dipeptidi anqiotenzinçevirən fermentə inqibitor kimi *in vitro* təsir göstərir [1-2] və bu səbəbdən qida əlavəsi kimi arterial təzyiqin profilaktikası və müalicəsi üçün istifadə oluna bilər. Dərman maddəsinin təsir mexanizmini başa düşmək üçün onun molekulunun konformasiya imkanlarını tədqiq edib bioloji aktiv formasını müəyyən etmək lazımdır. Təqdim olunmuş işdə H-Val-Tyr-OH molekulunun optimal konformasiyalarının həndəsi, enerji və elektron parametrləri təyin edilmişdir. Molekulun konformasiya profilləri molekulyar mexanika metodu ilə [3], elektron quruluşu AM1 metodu ilə HyperChem7.5 proqramının nümayiş versiyasının (<http://www.hyper.com/>) [4] köməyi ilə tədqiq olunmuşdur.

Nəticələr göstərir ki, H-Val-Tyr-OH molekulunun quruluş təşkilatı əsas zəncirin bükülü və açıq formasında olan iki tip konformasiya ilə təsvir olunur. Val və Tyr qalıqlarının yan zəncirlərinin dispersion kontaktları konformasiyaların stabilləşməsində əsas rol oynayırlar. Bu səbəbdən molekulun enerjisi yan zəncirlərin vəziyyətinə həssasdır. Molekulun stabilləşməsində onun N- və C-uclarındakı atom qrupları arasında müəyyən sayda elektrostatik kontaktların rolu da az deyil. Qeyd edək ki, əsas zənciri açıq olan quruluş monopeptid enerjilərinin cəminə görə üstün olsada, bükülmüş quruluşda yan zəncirlərin atomları maksimal yaxınlaşaraq effektiv dispersion kontaktlar yaradırlar. Cədvəl 1-də dipeptid molekulunun bükülü ( $E_{rel.}=0.0$  kcal/mol) və açıq ( $E_{rel.}=0.5$  kcal/mol) optimal konformasiyalarında əsas və yan zəncirlərinin ikiüzlü bucaqlarının qiymətləri təqdim olunmuşdur.

Cədvəl 1. H-Val-Tyr-OH dipeptid molekulunun əsas zəncirinin bükülü və açıq formasında olan optimal konformasiyalarının həndəsi parametrləri (dərəcələrdə)

Konformasiya	Bucaqlar	
	Val	Tyr
Bükülü	$\varphi = -153$ $\psi = -57$ $\omega = 182$ $\chi_1 = 179$ $\chi_2 = 183$ $\chi_3 = 181$	$\varphi = -118$ $\psi = -54$ $\chi_1 = -53$ $\chi_2 = 110$ $\chi_3 = 180$
Açıq	$\varphi = -80$ , $\psi = 147$ $\omega = 181$ , $\chi_1 = 61$ $\chi_2 = 176$ , $\chi_3 = 181$	$\varphi = -142$ , $\psi = 148$ $\chi_1 = -58$ , $\chi_2 = 87$ $\chi_3 = 180$

Bükülü və açıq konformasiyalarda, müvafiq olaraq, Val qalığının yan zəncirinin CG1 atomu və Tyr qalığının yan zəncirindəki hidroksil qrupunun O atomu arasında olan məsafə 4.1 və 7.7 Å, Val qalığının yan zəncirinin CG2 atomu və Tyr qalığının yan zəncirindəki hidroksil qrupunun O atomu arasında olan məsafə 6.3 və 8.6 Å, molekulun N və C uclarındakı atomlar arasındakı olan məsafə 4.7 və 6.0 Å qiymətlər alır. Qeyd olunan məsafələrin bükülü quruluşda daha qısa olması molekulun bu konformasiyada olarkən kiçik qabaritlərindən və kompakt olmasından xəbər verir. Hər bir konformasiya özünəməxsus elektron paylanması və parametrləri ilə xarakterizə olunduğundan hər iki konformasiyanın elektron quruluşunun tədqiqi xüsusi maraq kəsb edir. Hesablamalar göstərir ki, konformasiya müxtəlifliyi elektron buludlarının paylanması öz əksini tapır. Cədvəl 2-də tədqiq olunmuş iki quruluşda fərqlənən atom yükləri verilmişdir.

Bu cədvəldən görüldüyü kimi, daha çox yük dəyişmələri COO<sup>-</sup> qrupunun O atomunda, Tyr-nin əsas zəncirinin N və H atomlarında, Val qalığının yan zəncirinin HG atomunda müşahidə olunur. Yüklərin cüzi dəyişikliyi qalıqların yan zəncirlərinin C atomlarında və <sup>+</sup>NH<sub>3</sub> qrupunun H atomlarında müşahidə olunur. Elektron buludunun paylanmasının dəyişməsi dipol momentinin qiymətində öz əksini tapır: bükülü quruluş açıq quruluşa nisbətən 3 debay az dipol momenti ilə xarakterizə olunur.

Beləliklə H-Val-Tyr-OH dipeptid molekulunun əsas zənciri bükülü və açıq formada olan konformasiyaları enerjiyə görə fərqlənməsələrdə, konformasiya müxtəlifliyi molekulun elektron quruluşunda əks olur. Görünür, tədqiq olunmuş dipeptidin konkret konformasiyasının reallaşması ferment-substrat qarşılıqlı təsirlər üçün önəmli olan elektron aspektləri ilə diktə olunur.

Cədvəl 2. H-Val-Tyr-OH dipeptid molekulunun əsas zəncirinin bükülü və açıq formasında olan optimal konformasiyalarında fərqlənən atom yükləri

Atomlar	Konformasiya	
	Bükülü	Açıq
2H (NH <sub>3</sub> )	0.247813	0.237651
3H (NH <sub>3</sub> )	0.239509	0.247073
C (CO) Val	0.262896	0.271420
O (CO) Val	-0.320516	-0.388686
HA Val	0.162724	0.141488
CB Val	-0.133569	-0.129438
HB Val	0.111983	0.088591
CG1 Val	-0.206504	-0.230031
1HG1 Val	0.125010	0.044290
1HG3 Val	0.087419	0.131973
2HG2 Val	0.091313	0.132914
3HG2 Val	0.045620	0.088218
N (NH) Tyr	-0.309697	-0.283673
H (NH) Tyr	0.213594	0.250234
HA Tyr	0.130631	0.124411
CD1 Tyr	-0.109431	-0.119973
CD2 Tyr	-0.084340	-0.068728
CG2 Tyr	-0.108820	-0.085314
CE1 Tyr	-0.240574	-0.262834
HE1 Tyr	0.122898	0.106283
CE2 Tyr	-0.158187	-0.146927
O (COO <sup>-</sup> )	-0.513488	-0.563327
O (COO <sup>-</sup> )	-0.571865	-0.515517

## Ədəbiyyat

- [1]. Matsui T., Zhu X. L., Watanabe K., Tanaka K., Kusano Y., Matsumoto K., Life Sciences 79 (2006) 2492-2498.
- [2]. Vercruyssen L., Morel N., Van Camp J., Szust J., Smagghe G., Peptides, 29 (2008) 261-267.
- [3]. Максумов И.С., Исмаилова Л.И., Годжаев Н.М. // Ж. Структ. химии. 24(1983)147-148.
- [4]. Allinger N.L., Yuh Y. QCPE 395, Quantum chemistry program exchange, Indiana Univ., Indiana, 1982.

## HIS5-LEU11 FRAQMENTİNİN FƏZA QURULUŞUNUN ƏSAS ELEMENTLƏRİNİN TƏDQIQI

Vəliyeva L.İ., E.Z.Əliyev

*Bakı Dövlət Universiteti*

e-mail: [Lala\\_Velieva@rambler.ru](mailto:Lala_Velieva@rambler.ru)

Bir sıra neuropeptidlərin 7 amin turşusundan ibarət son uclu His5-Leu11 fraqmentinin fəza quruluşunun əsas elementləri müxtəlif kompüter proqramları vasitəsi ilə tədqiq edilmiş, onun həndəsi və enerji parametrləri öyrənilmişdir. Hesablamalar həm su mühitində, həm də vakuum şəraitində aparılmışdır.

**Açar sözlər:** *allatostatin, helicostatin, shistostatin, neuropeptid, nəzəri konformasiya analizi, molekulyar dinamika, fəza quruluşu.*

## GİRİŞ

Helicostatin 9, allatostatin 11 və shistostatin 10 neuropeptidlərinin son uclu fraqmenti olan His5-Leu11 fraqmentinin fəza quruluşunun əsas elementlərini tədqiq etmək üçün müasir kompüter proqramları paketindən ibarət olan nəzəri konformasiya analizi və molekulyar dinamika üsullarından istifadə edilmişdir. Bu neuropeptidlərə olan maraq onunla bağlıdır ki, onların konsentrasiyası izolə olunduqları həşəratların qanında artanda, həşəratlarda məhvolma mexanizmi işə düşür və bununla da, onların sayını tənzimləmək mümkün olur.

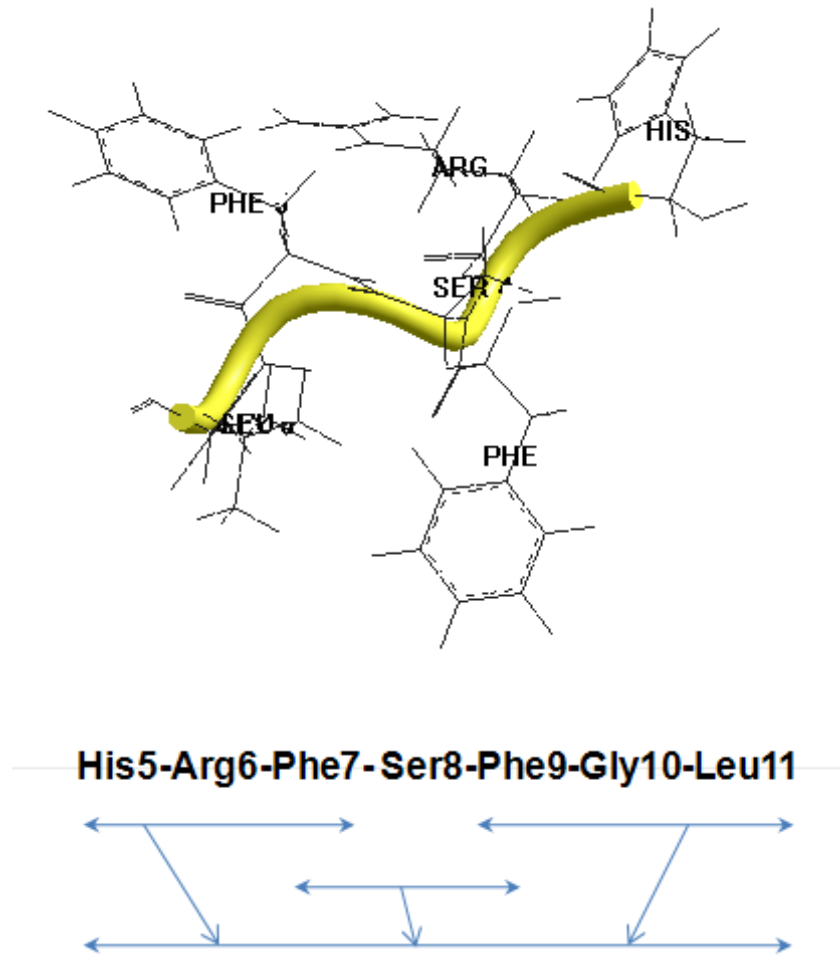
Nəzəri konformasiya analizi və molekulyar dinamika üsullarının əsası XX əsrin 50-ci illərinin əvvəllərində qoyulmuşdur. Bu üsullara görə molekul atomlar sistemi kimi götürülür və onun nüvə-elektron quruluşu nəzərə alınmır. Nəzəri konformasiya analizi və molekulyar dinamika üsullarında molekulun tam enerjisi aşağıdakı enerjilərin additiv cəmi şəklində ifadə olunur:

$$E_{\text{tam}} = E_{\text{q.v.}} + E_{\text{el.st.}} + E_{\text{tor}} + E_{\text{h.r.}}$$

Burada istifadə olunan yarımempirik potensial funksiyalar və onların parametrləri [1, 2] işlərindən götürülmüşdür. Bundan başqa, nəticələri şərh etmək üçün standart identifikatorlar sistemindən istifadə olunmuşdur [3].

### ALINAN NƏTİCƏLƏRİN QISA ŞƏRHİ

Şəkil 1-də His5-Leu11 fraqmentinin fəza quruluşu və hesablanma sxemi təsvir olunmuşdur. Göründüyü kimi, fraqmentin fəza quruluşunu – enerji və həndəsi parametrlərini tədqiq etmək üçün o, kiçik hissələrə bölünmüşdür. Əvvəlcə həmin hissələrin fəza quruluşunun əsas elementləri müəyyən edilmiş, sonra isə alınan nəticələr əsasında bütöv fraqmentin fəza quruluşu tədqiq olunmuşdur. Aşağıdakı cədvəldə His5-Arg6-Phe7-Ser8-Phe9-Gly10-Leu11-NH<sub>2</sub> heksapeptid fraqmentinin kiçikenerjili konformasiyalarının enerji parametrləri verilmişdir.



Şəkil 1. His5-Leu11 fraqmentinin kiçikenerjili konformasiyasının fəza quruluşu və hesablanma sxemi

Hesablamalardan aydın olur ki, bu fraqment üçün alınan bütün kiçikenerjili fraqmentlər bükük quruluşla xarakterizə olunurlar. Onların stabilləşməsində qeyri-valent qarşılıqlı təsirləri ilə yanaşı, His5...Phe7, His5...Phe9, Arg6...Gly10, Arg6...Leu11, Phe7...Ser8, Ser8...Gly10, Phe9...Leu11 amin turşuları arasında yaranan hidrogen rabitələri də mühüm rol oynayır və məhz bu fraqment bioloji fəallığa cavab verir.

Alınan bu nəticələrdən Helicostatin 9, allatostatin 11 və shistostatin 10 neyropeptidlərinin fəza quruluşları tədqiq edilən zaman istifadə olunacaqdır

Cədvəl 1. His5-Leu11 fraqmentinin kiçikenerjili konformasiya halları

N	şəyp	konformasiya	Enerji payı, kkal/mol				
			$E_{q.v.}$	$E_{el.st}$	$E_{tor}$	$E_{tam}$	$E_{nisbi}$
1	<i>feffe</i>	R <sub>1</sub> BR <sub>1</sub> R <sub>3</sub> B <sub>1</sub> B <sub>3</sub> R <sub>3</sub>	-28.97	1.83	2.02	-25.13	0.00
2	<i>feefef</i>	R <sub>1</sub> BB <sub>1</sub> R <sub>3</sub> B <sub>2</sub> R <sub>3</sub> R <sub>3</sub>	-28.30	2.51	2.19	-23.60	1.53
3	<i>fffe</i>	R <sub>3</sub> RR <sub>1</sub> B <sub>3</sub> R <sub>1</sub> B <sub>3</sub> R <sub>3</sub>	-29.74	3.21	3.44	-23.08	2.05
4	<i>feffef</i>	R <sub>2</sub> BR <sub>2</sub> R <sub>3</sub> B <sub>3</sub> R <sub>2</sub> B <sub>3</sub>	-28.37	3.57	2.25	-22.54	2.59
5	<i>fffeff</i>	R <sub>3</sub> RR <sub>1</sub> B <sub>3</sub> R <sub>1</sub> R <sub>2</sub> B <sub>3</sub>	-28.74	3.56	3.01	-22.17	2.96
6	<i>fefeef</i>	R <sub>1</sub> BR <sub>2</sub> B <sub>1</sub> B <sub>3</sub> R <sub>2</sub> R <sub>3</sub>	-27.29	2.98	2.47	-21.83	3.30
7	<i>feefff</i>	R <sub>1</sub> BB <sub>1</sub> R <sub>3</sub> R <sub>2</sub> R <sub>3</sub> R <sub>3</sub>	-27.48	3.78	1.93	-21.76	3.37
8	<i>fffeef</i>	R <sub>1</sub> RB <sub>1</sub> R <sub>3</sub> B <sub>3</sub> R <sub>2</sub> B <sub>3</sub>	-27.79	4.48	2.13	-21.17	3.96
9	<i>effeef</i>	B <sub>3</sub> RR <sub>1</sub> B <sub>3</sub> B <sub>3</sub> R <sub>2</sub> B <sub>3</sub>	-27.84	4.08	3.49	-20.27	4.86
10	<i>feeffe</i>	R <sub>1</sub> BB <sub>1</sub> R <sub>3</sub> B <sub>1</sub> L <sub>3</sub> B <sub>1</sub>	-25.55	2.98	3.13	-19.43	5.70

### ƏDƏBİYYAT:

1. Полозов Р.В. *Метод полуэмпирического силового поля в конформационном анализе биополимеров*, М., "Наука", 1981, 120 с.
2. Allinger N.L., Zhou X., Bergsman J. "Molecular mechanics parameters". *J. of Mol. Struct. (Theochem.)*, 1994, v.312, p.69-83
3. IUPAC-IUB Joint Commission on Biochemical Nomenclature. *J. Biol. Chem.*, 1983, v.260, p.14-42

## π- ELEKTRONLU YAXINLAŞMADA ANTRASEN MOLEKULUNUN SİMMETRİKLƏŞDİRİLMİŞ MOLEKULYAR ORBİTALLARININ TAPILMASI

M.R.Vahabova, F.B.Abdulov

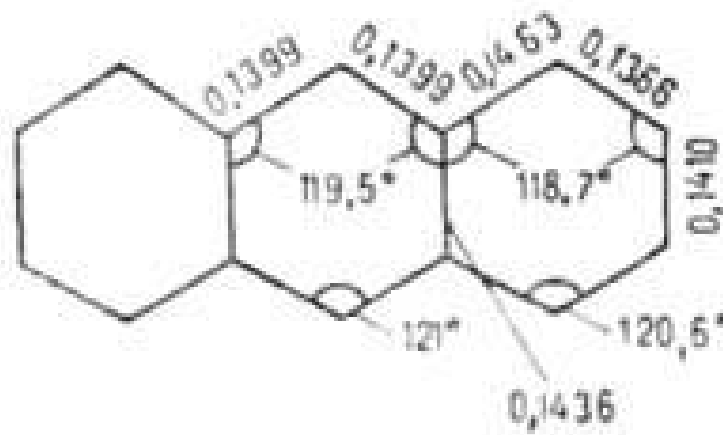
nigar\_v@mail.ru

Bakı Dövlət Universiteti

Qrup nəzəriyyəsi metodundan istifadə etməklə  $C_{2v}$  - nöqtəvi qrupuna mənsub olan antrazen molekulunun  $\pi$ - elektronlu yaxınlaşmada gətirilə bilən təsviri qurulmuşdur. Bunun üçün bazis funksiyalarının simmetriya əməliyyatları nəticəsində çevrilmələrinə baxılmış, uyğun matrislər qurulmuşdur. Antrazen molekulunun gətirilə bilən təsvirinin gətirən matrisinin elementləri hesablanmışdır və simmetrikləşdirilmiş molekulyar orbitallar qurulmuşdur.

**Açar sözlər:** antrazen, simmetriya qrupu, gətirilə bilən təsvir, gətirilə bilməyən təsvir, gətirən matris.

MO LCAO metodunun sadə variantı olan Hückel metodu əsasında qrup nəzəriyyəsi metodundan istifadə edərək antrazen molekulunun simmetrikləşdirilmiş birelektronlu dalğa funksiyaları tapılmışdır. Antrazen molekulunun həndəsi quruluşu aşağıdakı kimidir:



Antrasen- $C_{14}H_{10}$  molekulu  $C_{2v}$  nöqtəvi qrupuna mənsubdur.  $C_{2v}$  nöqtəvi qrupunun elementləri:  $I$ ,  $C_2$ ,  $\sigma_v$ ,  $\sigma_v'$ .  $C_{2v}$  qrupunun elementlərinə uyğun simmetriya əməliyyatları nəticəsində bazis funksiyalarının çevrilmələri müəyyən edilmiş və baxılan molekul üçün 14-tərtibli matrislər toplusuna ibarət olan gətirilə bilən  $\Gamma(g)$  təsviri qurulmuşdur. Simmetriya çevrilmələrinin nəticəsi cədvəl 1-də verilmişdir. Bazis funksiyaları ( $\pi$  orbitalları) kimi  $\chi_q$  Sleyter atom orbitalları götürülmüşdür.

**Cədvəl 1.**

AO	I	$C_2$	$\sigma_v$	$\sigma_v'$
$\chi_1$	$\chi_1$	$-\chi_8$	$\chi_8$	$-\chi_1$
$\chi_2$	$\chi_2$	$-\chi_7$	$\chi_7$	$-\chi_2$
$\chi_3$	$\chi_3$	$-\chi_6$	$\chi_6$	$-\chi_3$
$\chi_4$	$\chi_4$	$-\chi_5$	$\chi_5$	$-\chi_4$
$\chi_5$	$\chi_5$	$-\chi_4$	$\chi_4$	$-\chi_5$
$\chi_6$	$\chi_6$	$-\chi_3$	$\chi_3$	$-\chi_6$
$\chi_7$	$\chi_7$	$-\chi_2$	$\chi_2$	$-\chi_7$
$\chi_8$	$\chi_8$	$-\chi_1$	$\chi_1$	$-\chi_8$
$\chi_9$	$\chi_9$	$-\chi_9$	$\chi_9$	$-\chi_9$
$\chi_{10}$	$\chi_{10}$	$-\chi_{10}$	$\chi_{10}$	$-\chi_{10}$
$\chi_{11}$	$\chi_{11}$	$-\chi_{14}$	$\chi_{14}$	$-\chi_{11}$
$\chi_{12}$	$\chi_{12}$	$-\chi_{13}$	$\chi_{13}$	$-\chi_{12}$
$\chi_{13}$	$\chi_{13}$	$-\chi_{12}$	$\chi_{12}$	$-\chi_{13}$
$\chi_{14}$	$\chi_{14}$	$-\chi_{11}$	$\chi_{11}$	$-\chi_{14}$

Qrup nəzəriyyəsi metodundan istifadə edilməklə tapılmışdır ki,  $C_{14}H_{10}$  molekulunun gətirilə bilən  $\Gamma(g)$  təsvirinin gətirilə bilməyən təsvirlərlə ifadə olunan düz cəmi aşağıdakı kimidir:

$$\Gamma = 6A_2 + 8B_1$$

$C_{2v}$  qrupunun gətirilə bilməyən təsvirlərinin xarakterləri cədvəl 2-də verilmişdir.

Cədvəl 2.

$C_{2v}$	I	$C_2$	$\sigma_v$	$\sigma_v'$
$A_1; z$	1	1	1	1
$A_2$	1	1	-1	-1
$B_1; x$	1	-1	1	-1
$B_2; y$	1	-1	-1	1

Məlum düsturlar vasitəsilə  $C_{14}H_{10}$  molekulu üçün gətirən matris qurulmuş və elementləri hesablanmışdır. Gətirən matrisin sütunlarındakı elementlər uyğun simmetriyaya malik olan molekulyar orbitalların MO LCAO metoduna əsasən  $U_i = \sum_q c_{qi} \chi_q$  düsturundakı  $\chi_q$  atom orbitallarının  $C_{qi}$  əmsalları ilə üst-üstə düşür. Bundan istifadə edərək  $C_{14}H_{10}$  molekulu üçün molekulyar orbitallar qurulmuşdur. Antrasen molekulu qrup nəzəriyyəsi metodundan istifadə edilərək tapılmış simmetrikləşdirilmiş birelektronlu dalğa funksiyaları aşağıdakı kimidir:

$$\begin{aligned}
 U_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_1 - \chi_8) & U_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_2 - \chi_7) & U_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_3 - \chi_6) \\
 U_4 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_4 - \chi_5) & U_5 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{11} - \chi_{14}) & U_6 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{12} - \chi_{13}) \\
 U_7 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_1 + \chi_8) & U_8 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_2 + \chi_7) & U_9 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_3 + \chi_6) \\
 U_{10} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_4 + \chi_5) & U_{11} &= \chi_9 & U_{12} &= \chi_{10} \\
 U_{13} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{11} + \chi_{14}) & U_{14} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{12} + \chi_{13})
 \end{aligned}$$

$\chi_q$  atom orbitalları aşağıdakı ifadə ilə təyin olunur:

$$\chi_q = \chi_{nlm}(\xi, \vec{r}) = \frac{(2\xi)^{n+l}}{\sqrt{(2n)!}} e^{-\xi r} r^{n-1} \cdot S_{lm}(\theta, \varphi)$$

Alınmış nəticələr molekulu müxtəlif parametrlərinin kvant-mexaniki hesablanması zamanı istifadə oluna bilər.

### ƏDƏBİYYAT

1. Болотин А.Б., Степанов Н.Ф. Теория групп и ее применения в квантовой механике молекул. М.1973, 227с.
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Физматлит, М., 2004, 752с.
3. Вагабова М.Р., Мурсалов Т.М. Вестник Бакинского Университета, сер. физ-мат наук, 2003, №2, с.116-121.
4. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. Изд. Феникс, Р-на-Д., 1997, 407с.
5. Т.М. Мүрсəлов, N.F. Qəhrəманов. Molekul fizikası. SDU-nin mətbəəsi, Sumqayıt, 2006, 346 s.



## NAFTALİN MOLEKULU ÜÇÜN BİRELEKTRONLU DALĞA FUNKSİYALARININ QRUP NƏZƏRİYYƏSİ METODUNDAN İSTİFADƏ ETMƏKLƏ TAPILMASI

M.R.Vahabova, N.S.Nəbiyev, X.İ.Rzayev

Bakı Dövlət Universiteti

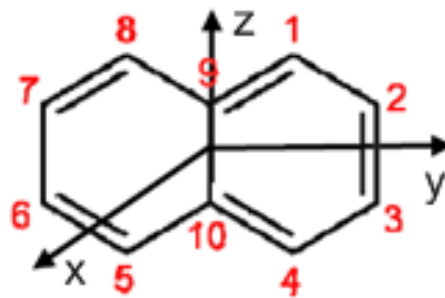
[xetai\\_r@yahoo.com](mailto:xetai_r@yahoo.com)

*Qrup nəzəriyyəsi metodundan istifadə etməklə  $D_{2h}$  - nöqtəvi qrupuna mənsub olan naftalin molekulunun  $\pi$ - elektron yaxınlaşmasında gətirilə bilən təsviri qurulmuşdur. Bunun üçün bazis funksiyalarının simmetriya əməliyyatları nəticəsində çevrilmələrinə baxılmış, uyğun matrislər qurulmuşdur. Naftalin ( $C_{10}H_8$ ) molekulunun gətirilə bilən təsvirinin gətirən matrisinin elementləri hesablanmış və simmetrikləşdirilmiş molekulyar orbitallar qurulmuşdur.*

*Açar sözlər: naftalin, simmetriya qrupu, gətirilə bilən təsvir, gətirilə bilməyən təsvir, gətirən matris.*

MO LCAO metodunun sadə variantı olan Hückel metodu ( $\pi$ -yaxınlaşması) qrup nəzəriyyəsi vasitəsilə molekulların simmetrikləşdirilmiş molekulyar orbitallarının tapılmasında tətbiq olunur. Molekulyar orbitallar  $\pi$ -rabitələri yaradan karbon atomlarının  $2p_z$ - orbitallarının xətti kombinasiyası şəklində qurulur. Qrup nəzəriyyəsinin tətbiqi Şredinger tənliyini bilavasitə həll etmədən baxılan molekulun simmetrikləşdirilmiş molekulyar orbitallarını tapmağa imkan verir.

Təqdim olunan işdə naftalin molekulunun mənsub olduğu  $D_{2h}$  nöqtəvi qrupuna daxil olan simmetriya çevrilmələrinə baxılmışdır. XYZ koordinat sisteminin başlanğıcı molekulun kütlə mərkəzində yerləşdirilmişdir. Molekul müstəvisi YOZ müstəvisi ilə üst üstə düşür. Karbon atomları şəkil 1-də göstəriləndi kimi işarələnmişdir. Uyğun olaraq hər bir karbon atomuna məxsus  $\pi$  orbitallar molekul müstəvisinə perpendikulyar yerləşmişdir. Hesablamalar zamanı bazis funksiyaları ( $\pi$  orbitalları) Sleyter atom orbitalları kimi götürülmüşdür ( $\chi_q$ ).



Şəkil 1.

$D_{2h}$  qrupunun elementlərinə uyğun simmetriya əməliyyatları nəticəsində bazis funksiyalarının çevrilmələri müəyyən edilmiş və baxılan molekul üçün 10 tərtibli matrislər toplusundan ibarət gətirilə bilən  $\Gamma(g)$  təsviri qurulmuşdur.

Cədvəl.1.

J	$C_2^z$	$C_2^y$	$C_2^x$	i	$\sigma_{xy}$	$\sigma_{xz}$	$\sigma_{yz}$
$\chi_1$	$-\chi_8$	$-\chi_4$	$\chi_5$	$-\chi_5$	$\chi_4$	$\chi_8$	$-\chi_1$
$\chi_2$	$-\chi_7$	$-\chi_3$	$\chi_6$	$-\chi_6$	$\chi_3$	$\chi_7$	$-\chi_2$
$\chi_3$	$-\chi_6$	$-\chi_2$	$\chi_7$	$-\chi_7$	$\chi_2$	$\chi_6$	$-\chi_3$
$\chi_4$	$-\chi_5$	$-\chi_1$	$\chi_8$	$-\chi_8$	$\chi_1$	$\chi_5$	$-\chi_4$
$\chi_5$	$-\chi_4$	$-\chi_8$	$\chi_1$	$-\chi_1$	$\chi_8$	$\chi_4$	$-\chi_5$
$\chi_6$	$-\chi_3$	$-\chi_7$	$\chi_2$	$-\chi_2$	$\chi_7$	$\chi_3$	$-\chi_6$
$\chi_7$	$-\chi_2$	$-\chi_6$	$\chi_3$	$-\chi_3$	$\chi_6$	$\chi_2$	$-\chi_7$
$\chi_8$	$-\chi_1$	$-\chi_5$	$\chi_4$	$-\chi_4$	$\chi_5$	$\chi_1$	$-\chi_8$
$\chi_9$	$-\chi_9$	$-\chi_{10}$	$\chi_{10}$	$-\chi_{10}$	$\chi_{10}$	$\chi_9$	$-\chi_9$
$\chi_{10}$	$-\chi_{10}$	$-\chi_9$	$\chi_7$	$-\chi_9$	$\chi_9$	$\chi_{10}$	$-\chi_{10}$

Cədvəl 2.  $D_{2h}$  nöqtəvi qrupunun gətirilə bilməyən təsvirlərinin xarakteri.

$D_{2h}$	J	$C_2^z$	$C_2^y$	$C_2^x$	i	$\sigma_{xy}$	$\sigma_{xz}$	$\sigma_{yz}$
$A_g$	1	1	1	1	1	1	1	1
$B_{1g}$	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1
$B_{2g}$	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
$B_{3g}$	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1
$A_u$	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
$B_{1u}$	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1
$B_{2u}$	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1
$B_{3u}$	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1

Gətirilə bilməyən təsvirlərin hər birinin gətirilə bilən təsvirdə neçə dəfə rast gəlinməsi məlum düstur vasitəsilə hesablanmışdır. Naftalin molekulunun gətirilə bilən  $\Gamma(g)$  təsvirinin gətirilə bilməyən təsvirlərlə ifadə olunan düz cəminin aşağıdakı kimi olduğu müəyyən olunmuşdur:

$$\Gamma = 2B_{1g} + 3B_{2g} + 2A_u + 3B_{3u}$$

Qeyd olunan metodda təklif olunan düsturlar vasitəsilə baxılan molekul üçün gətirən matrisin elementləri hesablanmışdır. Gətirən matrislərin sütunlarındakı elementlər uyğun simmetriyaya malik olan molekulyar orbitalların MO LCAO metoduna əsasən

$U_i = \sum_q c_{qi} \chi_q$  düsturundakı atom orbitallarının  $c_{qi}$  əmsalları ilə üst-üstə düşür.

Bundan istifadə edərək naftalin molekulunu üçün molekulyar orbitallar qurulmuşdur:

$$\begin{aligned} U_1 &= 1/2(\chi_1 + \chi_4 - \chi_5 - \chi_8) & U_6 &= 1/2(\chi_1 - \chi_4 + \chi_5 - \chi_8) \\ U_2 &= 1/2(\chi_2 + \chi_3 - \chi_6 - \chi_7) & U_7 &= 1/2(\chi_2 - \chi_3 + \chi_6 - \chi_7) \\ U_3 &= 1/2(\chi_1 - \chi_4 - \chi_5 + \chi_8) & U_8 &= 1/2(\chi_1 + \chi_4 + \chi_5 + \chi_8) \\ U_4 &= 1/2(\chi_2 - \chi_3 - \chi_6 + \chi_7) & U_9 &= 1/2(\chi_2 + \chi_3 + \chi_6 + \chi_7) \\ U_5 &= 1/\sqrt{2}(\chi_9 - \chi_{10}) & U_{10} &= 1/\sqrt{2}(\chi_9 + \chi_{10}) \end{aligned}$$

Burada  $\chi_q$  uyğun C atomunun atom orbitalını göstərir.  $\chi_q$  atom orbitalı aşağıdakı düsturla hesablanır:

$$\chi_q \equiv \chi_{nlm}(E, \vec{r}) = \frac{(2l)!^{n+l}}{\sqrt{(2n)!}} e^{-E_r} r^{n-1} \cdot S_{lm}(\theta, \varphi)$$

parametrlərinin kvant-mexaniki hesablanması zamanı istifadə oluna bilər.

## ƏDƏBİYYAT

- 1.Болотин А.Б.,Степанов Н.Ф. Теория групп и ее применения в квантовой механике молекул. М.1973, 227с.
- 2.Ландау Л.Д.,Лифшиц Е.М.Квантовая механика. Физматлит, М., 2004,752с.
- 3.Вагабова М.Р.,Мурсалов Т.М. Вестник Бакинского Университета, сер.физмат наук, 2003, №2, с.116-121.
- 4.Минкин В.И.,Симкин Б.Я.,Миняев Р.М. Теория строения молекул. Изд. Феникс, Р-на-Д.,1997,407с.
- 5.Т.М.Mürsəlov, N.F.Qəhrəmanov. Molekul fizikası.SDU –nin mətbəəsi, Sumqayıt ,2006, 346s.

## ВИСКОЗИМЕТРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РАСТВОРОВ ПЭГ

**В.В.Прудько, А.А.Багиров, С.М.Мусаева, С.М.Ахмедова**

*Бакинский государственный университет*

Полиэтиленгликоли (ПЭГ) - это полимеры, широко применяемые в науке и многих отраслях промышленности [1]. Кроме того, имеются сведения об исследованиях по влиянию ПЭГ на некоторые процессы, протекающие в живых объектах. Например, авторы [2] считают, что раствор ПЭГ можно использовать в качестве средства неотложной помощи при различных травмах головного мозга.

Полимеры – это особый класс вещества, свойства растворов которых существенно отличаются от свойств растворов низкомолекулярных соединений [3]. Они зависят от молекулярной массы полимера и геометрических характеристик его макромолекул. В разбавленных растворах макромолекулы принимают форму статистического клубка и занимают неперекрывающиеся элементы объема. Переход от разбавленных растворов к концентрированным связан с «обезличиванием» отдельных макромолекул и изучение концентрированных растворов позволяет судить о структуре, термодинамических и реологических свойствах системы в целом, тогда как изучение разбавленных растворов дает сведения о свойствах индивидуальных макромолекул.

Одним из методов, широко применяемых при исследовании как самих полимеров, так и их растворов, является вискозиметрия. Этот метод может дать сведения как о параметрах, характеризующих макромолекулы, так и сведения о процессах, происходящих в исследуемых системах [4].

В зависимости от агрегатного состояния полимера, от концентрации растворов полимера, от того какие параметры интересуют исследователей используют разные методы и разные приборы [5]. Наиболее распространены методы вискозиметрии, основанные на законе Стокса (метод падающего шарика) и на законе Пуазейля (капиллярные вискозиметры), которые и использованы в данной работе.

Вязкость растворов полимеров зависит от факторов, определяющих объем, занимаемый макромолекулой в растворе, от величины молекулярной массы  $M$ , строения полимера (геометрических характеристик макромолекул) от температуры, концентрации, от характера взаимодействия растворителя с полимером.

В данной работе исследованы как разбавленные растворы ПЭГ (с помощью капиллярного вискозиметра Уббеллоде), так и более концентрированные (с помощью вискозиметра Гепплера). Оба метода в совокупности позволяют судить о процессах, происходящих в растворах, и об изменениях параметров макромолекул. С помощью этих

методов исследовано влияние на свойства водных растворов ПЭГ хлорида натрия (NaCl), т.е. рассмотрено изменение свойств растворов путем изменения качества растворителя. Соль может влиять как на структуру воды, так и на полимер.

С помощью вискозиметра Гепплера были получены температурные зависимости вязкости для растворов ПЭГ в интервале температур от комнатной до 70°C. Молекулярная масса ПЭГ равна 3000. Концентрации растворов ПЭГ – 3 вес.% и 6 вес.%, концентрация NaCl ( $C_s$ ) – 1 моль.

Зная время падения шарика, по формуле  $\eta = K(\rho_1 - \rho_2)\tau$  определяли вязкость ( $\eta$ ). В формуле:  $\tau$  - время падения шарика,  $K$  – константа шарика,  $\rho_1$  – плотность материала из которого сделан шарик,  $\rho_2$  – плотность раствора, которую определяли с помощью пикнометра. Значения  $K$  и  $\rho_1$  шарика даются в описании прибора.

На основе полученных данных построены зависимости  $\lg \eta = f\left(\frac{1}{T}\right)$ . Эти данные показали, что с повышением температуры вязкость уменьшается, что связано с возрастанием теплового движения молекул и ослаблением связей, существующих между молекулами. С ростом же концентрации ПЭГ вязкость увеличивается. Это, согласно литературным данным [6], объясняется уменьшением активности воды, когда все большее количество молекул воды оказывается связанным с молекулами ПЭГ, т.е. с ростом концентрации растет стабилизирующее воздействие ПЭГ на структуру воды.

На основе уравнения Френкеля-Эйринга  $\eta = Ae^{\Delta G/RT}$  ( $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$ ,  $R$  – универсальная газовая постоянная,  $T$  – температура по шкале Кельвина) вычислены параметры активации вязкого течения: теплота активации  $\Delta H$ , свободная энергия  $\Delta G$ , энтропия  $\Delta S$  [7], которые приводятся в таблице 1.

Таблица 1.

Параметры активации вязкого течения водных и водносолевых растворов ПЭГ-3000

Концентрация ПЭГ, вес. %	Концентрация NaCl, моль	$\Delta H$ , $\frac{\text{ккал}}{\text{моль}}$	$\Delta G$ , $\frac{\text{ккал}}{\text{моль}}$	$\Delta S$ , $\frac{\text{кал}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$
3,0	-	3,8	1,4	8,0
6,0	-	4,0	1,6	8,8
3,0	1	3,6	1,3	8,4
6,0	1	3,7	1,5	8,9

Эти параметры показывают, что с повышением концентрации ПЭГ  $\Delta H$  и  $\Delta G$  растут, что говорит о возрастании прочности структуры раствора. Растет и  $\Delta S$ , что свидетельствует о некотором разупорядочении структуры, так как с ростом концентрации ПЭГ растет число молекул ПЭГ, которым все труднее ориентироваться друг относительно друга. Если рассматривать влияние NaCl, то добавление соли снижает значения  $\Delta H$  и  $\Delta G$  и увеличивает  $\Delta S$ , что свидетельствует о разрушении структуры раствора ПЭГ.

Для исследования разбавленных растворов ПЭГ использовали капиллярный вискозиметр Уббелодде со временем истечения растворителя 96,8 с. Измерения проводили при 25°C. Использовали полиэтиленгликоли с различными молекулярными массами 600, 3000, 4000, 20000. Концентрации ПЭГ меняли от 5 вес.% до 1,5 вес.% для ПЭГ с  $M=600$ , для остальных фракций концентрации меняли от 1,5 вес.% до 0,5 вес. %. Концентрация соли ( $C$ ) менялось от 0,3 до 1,5 молей.

Экспериментально определяли время истечения растворителя и растворов. Исходя из этих значений вычисляли относительную ( $\eta_{\text{отн.}} = \frac{\eta}{\eta_0}$ , где  $\eta$  и  $\eta_0$  – вязкости раствора и растворителя), удельную ( $\eta_{\text{уд.}} = \eta_{\text{отн.}} \cdot l$ ), приведенную ( $\eta_{\text{прив.}} = \frac{\eta_{\text{уд.}}}{C}$ ) и характеристическую  $\left( [\eta] = \lim_{C \rightarrow 0} \frac{\eta_{\text{уд.}}}{C} \right)$  вязкости [7] для водных растворов ПЭГ и для растворов ПЭГ с добавлением NaCl.

Полученные результаты приводятся в таблице 2. Согласно данным, характеристическая вязкость водных растворов ПЭГ растет с увеличением молекулярной массы, поскольку с ростом молекулярной массы ПЭГ растет и объем, занимаемый макромолекулой в растворе, что затрудняет передвижение молекул растворителя. При добавлении NaCl и увеличении её концентрации  $[\eta]$  для всех фракций ПЭГ уменьшается, причем для фракций ПЭГ с малыми молекулярными массами с ростом концентрации NaCl характеристическая вязкость меняется незначительно. Уменьшение  $[\eta]$  при добавлении NaCl говорит о разрушении структуры растворителя.

По значениям характеристической вязкости определяли коэффициенты  $K$  и  $\alpha$ , входящие в уравнение Марка-Хаувинка-Куна  $[\eta] = KM^\alpha$ , где  $K$  – константа для данного полимергомологического ряда, зависящая от свойств молекул растворенного вещества и растворителя, от характера их взаимодействия;  $\alpha$  – коэффициент, характеризующий конформацию макромолекул в растворе и зависящий от всех факторов, влияющих на конформацию цепей (температуры, качества растворителя и др.). Как видно из таблицы 2, при добавлении NaCl коэффициент  $\alpha$  уменьшается, а  $K$  увеличивается, что свидетельствует об уменьшении объема макромолекул. Это можно объяснить тем, что взаимодействие растворитель – растворитель превосходит взаимодействие полимер-растворитель.

Таблица 2.

Значения характеристической вязкости и коэффициентов  $K$  и  $\alpha$  для водных растворов ПЭГ при добавлении NaCl ( $t=25^\circ\text{C}$ )

C \ M	0	0,3	0,6	0,9	1,2	1,5
600	0,044	0,043	0,042	0,041	0,0405	0,40
3000	0,10	0,099	0,098	0,096	0,094	0,092
4000	0,127	0,121	0,118	0,113	0,111	0,110
20000	0,375	0,361	0,349	0,323	0,317	0,294
$r^2$	0,9918	0,9925	0,9939	0,9957	0,9953	0,9972
$K \cdot 10^4$	8,17	8,27	8,30	9,05	9,02	10,1
$\alpha$	0,61	0,61	0,60	0,59	0,59	0,57

$r^2$  - коэффициент корреляции для зависимости  $\lg[\eta] \sim \lg M$

### Литература

1. Энциклопедия полимеров. М.: Сов.энц. т.II 1974, 1032 с.
2. A.O.Koob, J.M.Colby and R.V.Borges. Journal of Biological Engineering 2008, 2: 9 doi : 10. 1186/1754-1611-2-9.
3. Энциклопедия полимеров. М.: Сов.энц. т.III 1974, 1152 с.
4. Калоус В., Павличек З. Биофизическая химия. М.: Мир, 1985, 446с.
5. Физический энциклопедический словарь. М.: Сов. энц., 1983, 928 с

6. Салянов В.И., Погребняк В.К., Скуридин С.Г. и др. Молекулярная биология, т.12, вып.3, 1978, 485-495.
7. Тагер А.А. Физикохимия полимеров. М.: Химия, 1978, 544 с.

## ABŞERON YARIMADASININ TORPAQLARINDA DOZİMETRİK VƏ SPEKTROMETRİK ÖLÇMƏLƏR

Q. Q.Məmmədov, M. Ə. Ramazanov, V. H. Bədəlov, C. Ə.Nağıyev  
*Bakı Dövlət Universiteti*

İşdə Abşeron yarımadasının Bakıətrafı ərazilərində neftlə çirklənmiş torpaqlarda aparılan radioekoloji tədqiqatların nəticəsi verilmişdir. Seçilmiş marşrutlar üzrə radioaktiv şüalanma mənbələrinin ekspozisiya dozasının gücü (EDG) tədqiq olunmuş, bəzi lokal ərazilərdə EDG-nin qiymətinin ətraf mühitin yol verilən radiasiya fonundan çox yüksək olduğu aşkar edilmiş və spektrometrik analizlərin köməyi ilə həmin şüalanmaları yaranan radionüklidlər təyin olunmuşdur.

Abşeron yarımadasının torpaqları və digər təbii obyektləri (gölləri, çayları və s.) tərkibində radioaktiv elementlər olan neft və gaz tullantıları ilə son dərəcə çirklənmişdir. Radioaktiv elementlər dedikdə həm təbii ( $U^{235}$ ,  $U^{238}$ ,  $Th^{232}$ ,  $K^{40}$  və s.) həm də süni ( $Cs^{137}$ ,  $Ir^{192}$ ,  $Sr^{90}$ , və s.) radionüklidlər nəzərdə tutulur. Təbii radioaktiv nüklidlərin mənbələri Yerin Litosfera qatında olur və Günəş sisteminin planetləri ilə eyni zamanda yaranmışlar, adətən böyük yarımparçalanma perioduna malikdirlər. Süni radionüklidlər baş verən müxtəlif antropogen proseslərin nəticəsində yaranır, mənbələri isə atmosferdə, sulara və torpağın üst qatından başlayaraq bir neçə 10 m-lərə qədər dərinliklərində yerləşir.

Radioaktiv maddələr müxtəlif texnologiya prosesləri zamanı (məs. neftçixarmada, vulkan püskürmələrində və s.) Yerin üst qatına çıxaraq radioaktiv  $\alpha$ ,  $\beta$  və  $\gamma$ -şüalanma mənbələrinə çevrilirlər. Bu növ şüaların yaratdığı doza gücü yol verilən dozadan artıq olduqda canlı orqanizmlərdə genetik dəyişikliklər və onkoloji xəstəliklər yaranır. Bu şüalardan nüvə reaksiyaları zamanı yaranan yüksək nüfuzedici  $\gamma$ - şüaları ətraf mühitdə daha ciddi fəsadlar yadırlar. Qamma şüalarının ətraf mühitdə və eləcə də canlı orqanizmlər tərəfindən udulması mexanizmləri müxtəlif fiziki proseslər əsasında baş verir. Bu proseslərin ilkin mərhələsi gamma kvantların ətraf mühit obyektlərində və canlı obyektlərdə fotoudulma, Kompton səpələnməsi və elektron-pozitron cütlərinin yaranması yolu ilə başlayır. Göstərilən fiziki qanunlarla baş verən proseslər obyektlərdə molekulyar səviyyələrdə gedən müxtəlif bioloji və fizioloji proseslərin təsiri ilə davam edir. Qeyd etmək lazımdır ki, gamma şüaların enerjisi çox geniş diapazonda dəyişir və odur ki, hansı udulma mexanizminin işə düşməsi  $\gamma$ - kvantın enerjisindən asılı olur.

Radioaktiv şüalanma mənbələrinin aşkara çıxarılması və bu şüaların təbii obyektlərlə qarşılıqlı təsirinin öyrənilməsi hazırda mühüm elmi istiqamətlərdən biri hesab olunur. Qeyd etdiyimiz kimi radioaktiv qamma şüalarının enerjiləri çox geniş diapazonda dəyişir və bu şüaların ətraf mühit obyektləri (torpaq, su, canlı orqanizmlərlə və s.) ilə qarşılıqlı təsiri kvant mexanikasının qanunları ilə müəyyən olunur. Qamma şüaları öz mənbələri və qeyd olunma anına kimi ətraf mühitdə qarşılıqlı təsirdə olduqları obyektlər haqqında qiymətli məlumatlar daşıyırlar.

Təbii obyektlərdə mövcud olan radioaktiv mənbələrin aşkara çıxarılması, onların radionüklid tərkibinin, aktivliyinin, enerjilərinin (tezliklərinin) və s. kimi digər parametrlərinin təyin edilməsində yüksək ayırdetmə qabiliyyətinə malik olan NaI(Tl) detektorlu gamma spektrometrləri və detektoru yüksək təmiz HPGe əsaslı olan yarımkeçirici spektrometrləri

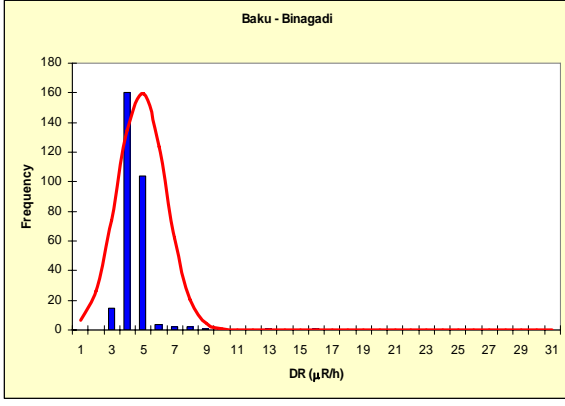
geniş miqyasda tətbiq olunmaqdadır [1-4]. Bu növ spektrometlərdə tədqiq olunacaq obyektə götürülmüş nümunə (torpaq) məlum texnologiya üzrə hazırlandıqdan sonra xüsusi qablarda detektor blokunun qarşısında yerləşdirilir. Nümunədən gələn  $\gamma$ - şüaları (kvantları) detektor blokunun NaI(Tl) kristalında udularaq işıq siqnalları yaradır. Bu siqnallar gücləndirildikdən sonra analizator blokundan keçərək cərəyan impulslarına çevrilmiş şəkildə ölçü blokuna ötürülür. Son nəticədə bu siqnalların spektri - qeyd olunan hissəciklər sayının enerjiden asılılığı çəkilir. Çəkilmiş spektrlərə əsasən spektrometr istehsalçıları tərəfindən hazırlanmış proqramın köməyi ilə tədqiq olunan nümunələrin radioekoloji parametrləri - nümunədə mövcud olan elementin radionüklid tərkibi, aktivliyi, enerjisi və s. hesablanır. Lakin yarımkeçirici HPGe tipli spektrometrlərdə proses daha yüksək səviyyədə gedir və radionüklidin aşkarlanması prosesi spektrometrin iş prinsipinə daxil edilmiş xüsusi proqramla aparılır.

Qeyd edək ki, ərazilərin radioekoloji tədqiqi əksər hallarda dozimetrik cihazların köməyi ilə torpaq sahələrində, bataqlıqlarda və su hövzələrində guman edilən yerlərdə şüalananan radionüklidlərin ekspozisiya dozası gücünün (EDG) ölçülməsi ilə başlayır. EDG-nin ölçülməsi radiasiya fonunun yüksək olduğu lokal əraziləri müəyyən etmək və bu ərazilərin coğrafi koordinatlarını təyin etməyə imkan verir və lazım olan yerlərdən nümunələr götürərək stasionar şəraitdə həmin nümunələrin spektrlərini öyrənmək təminatı yaradır. BDU-da yerinə yetirilən bu proyektə bağlı olan 10 marşrut üzrə - Bakı-Lökbatan, Bakı-Qurd Qapısı, Bakı-Şamaxı, Bakı-Quba, Bakı-Binəqədi, Bakı-Balaxanı, Bakı-Maştağa, Bakı-Əzizbəyov, Bakı-Suraxanı, Bakı-Pirallahı radioaktiv şüalanma mənbələrinin coğrafi koordinatlardan asılı olaraq ekspozisiya dozasını gücü (EDG) ölçülmüş və müxtəlif rənglərdə Abşeron yarımadasının xəritəsində göstərilmişdir (Şəkil 1).

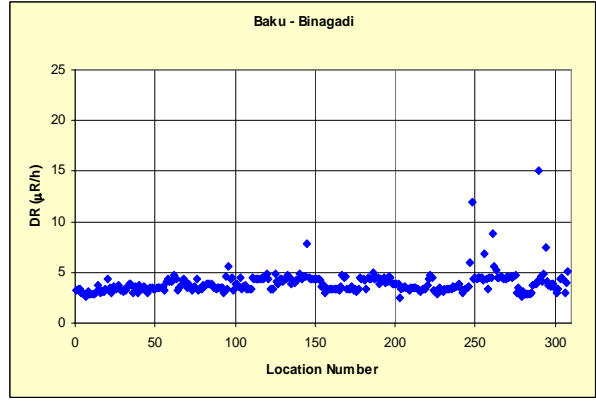


Şəkil 1. Marşrutlar üzrə dozimetrik ölçmələrin coğrafi koordinatlardan asılılığı

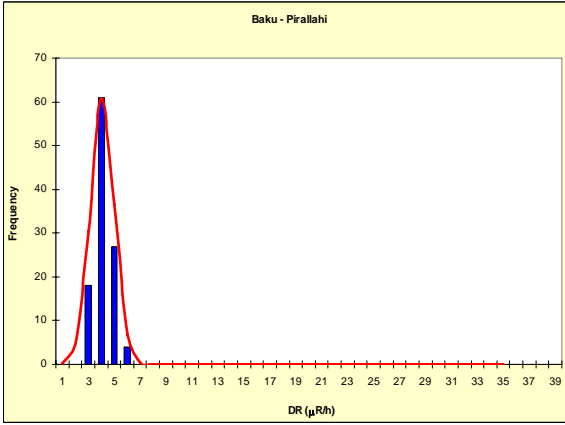
Bu nəticələrə əsasən EDG-nü xarakterizə edən kəmiyyətlərin qiymətləri təyin edilmişdir. Gamma şüalanmasının ekspozisiya dozasını gücü MKC-AT 1125 tipli dozimetrlərin (Belarusiya istehsalı), ölçü nöqtələrinin coğrafi koordinatları isə GPS cihazı (ABŞ istehsalı) vasitəsi ilə təyin edilmişdir. Ölçmələr nəticəsində alınmış EDG-nin Bakı-Binəqədi, Bakı-Pirallahı marşrutları üzrə coğrafi koordinatlardan asılı qrafiki şəkil 2-də verilmişdir:



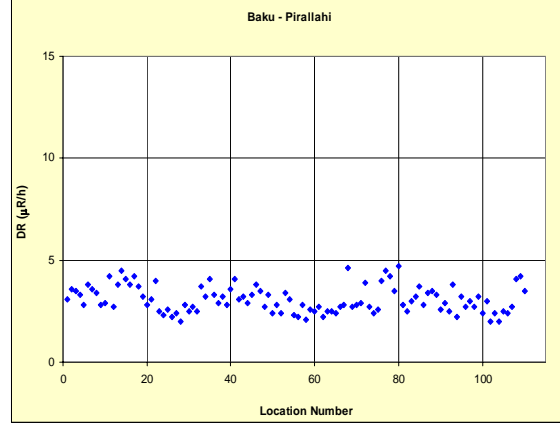
a)



b)



a)



b)

Şəkil 2. Bakı-Binəqədi, Bakı-Pirallahi marşrutları üzrə a) EDG-nin nöqtələrin sayından (N) (tezliyindən) asılılığı; b) EDG-nin coğrafi koordinatlardan asılılığı

Qeyd edək ki, analogi asılılıqlar tədqiq olunan digər marşrutlar (Bakı-Əzizbəyov, Bakı-Maştağa, Bakı-Suraxanı) torpaqları üzrə də alınır [1-4].

Şəkil 2-də verilən qrafiklərdən görünür ki, EDG-nin nöqtələrin sayından asılılığı normal paylanmaya (Qaus paylanmasına) uyğun gəlir:

$$N(x) = A e^{-\frac{(x_i - \mu)^2}{2\sigma^2}} \quad (1)$$

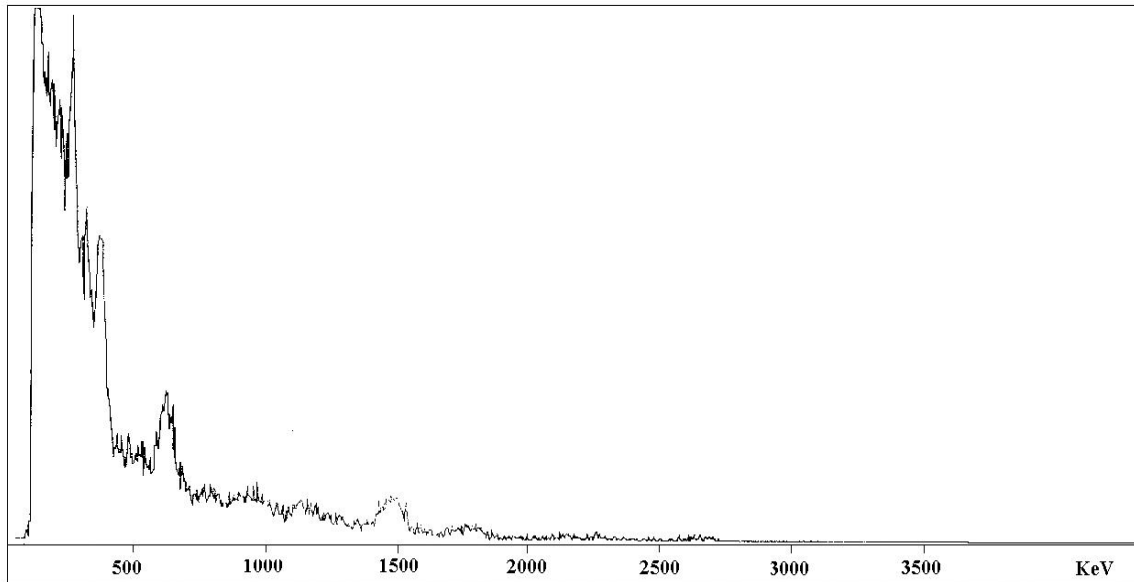
burada  $A$  - ən çox təkrar olunan nöqtələrin sayı;  $x_i$  - nöqtəsində EDG-nin qiyməti;  $\mu$  - EDG-nin orta qiyməti;  $\sigma$  - EDG-nin orta qiymətdən kənara çıxmasının kvadratik orta qiymətidir. Belə ki, (1) düsturuna daxil olan parametrlərin qiymətləri Cədvəl 1- də verilmişdir.



Cədvəl 1. 10 marşrut üzrə dozimetrik ölçmələrdən alınan parametrlərin qiymətləri

Marşrutların adları	Tədqiqat aparılan marşrutun uzunluğu, km	Ölçmə nöqtələrin maksimal sayı, $A$	EDG-nin qiyməti, mkR/saat			
			minimal	maksimal	orta, $\mu$	Ortakvadratik kənarəçixmə, $\sigma$
<i>Bakı – Lökbatan</i>	101.0	694	1.7	187.0	5.7	2.5
<i>Bakı – Qurd qapısı</i>	24.6	136	2.2	7.8	3.8	1.3
<i>Bakı – Şamaxı</i>	36.9	249	2.5	14.5	5.1	1.5
<i>Bakı – Quba</i>	79.2	377	2.7	5.8	4.2	0.6
<i>Bakı – Binəqədi</i>	35.3	308	2.5	15.0	3.7	1.1
<i>Bakı – Balaxanı</i>	41.5	430	2.5	8.8	3.8	0.7
<i>Bakı – Maştağa</i>	78.9	711	2.9	8.5	4.4	0.9
<i>Bakı – Əzizbəyov</i>	75	574	2.4	37.5	7.5	4.9
<i>Bakı – Suraxanı</i>	70	570	31	825	74.8	85.5
<i>Bakı – Piralahhi</i>	23.4	110	2.0	4.7	3.1	0.6

Qeyd edək ki, EDG - nin maksimal olan nöqtələrdəki qiymətləri Bakı-Suraxanı, Bakı-Əzizbəyov marşrutlarında normadan (2-7 mkR/saat) çox yüksəkdir. Bakı-Suraxanı marşrutu üzrə müəyyən bir torpaq nümunəsinin radionuklidlər sayının enerjiden asılılığı - qamma-spektri verilmişdir (Şəkil 3.). Qeyd edək ki, analoji asılılıqlar tədqiq olunan digər marşrut torpaqları üçün də alınmışdır.



Şəkil 3. Bakı-Suraxanı marşrutu üzrə torpaq nümunəsinin qamma-spektri

Şəkil 3-də göstərilən asılıqdan istifadə edərək torpaq nümunəsinin radionuklid tərkibi və onların xüsusi aktivlikləri təyin edilmişdir (Cədvəl 2.).

Cədvəl 2. Radionüklidlər və onların xüsusi aktivliyi

Radionüklid	Xüsusi aktivlik, $Bk/kq$
K-40	$224 \pm 46$
Ra-228	$18,6 \pm 3,9$
Ra-226	$38,5 \pm 5,5$

### Ədəbiyyat

1. Q. Q. Məmmədov, M. Ə. Ramazanov, V. H. Bədəlov, C. Ə. Nağıyev, A.Ə. Mehdiyeva, M.M.Bəkirova, Abşeron yarımadasında təbii və antropogen radionüklidlərlə çirklənmiş ərazilərin tədqiqi, Fizikanın Müasir Problemləri, III Respublika konfransı, Məqalələr, s. 11-13, Bakı, 17-18 dekabr, 2009.

2. Gudrat G. Mamedov, Mahammadali A. Ramazanov, Jalal A. Naghiyev, Afat A. Mehdiyeva, Masiva M. Bakirova and Tjalle T.Vandergraaf, Investigation into Natural and Anthropogenic Radionuclide Contamination on the Absheron Peninsula, Azerbaijan – 10208, WM2010 Conference, March 7-11, 2010, 10p., Phoenix, AZ.

3. Q. Q.Məmmədov, M. Ə. Ramazanov, V. H. Bədəlov, M.Ə. Nuriev, C. Ə.Nağıyev “Abşeron yarımadasının Bakıtrafı ərazilərində radioekoloji çirklənmələrin tədqiqi”, Fizikanın Müasir Problemləri, IV Respublika konfransı, Məqalələr, s. 11-13, Bakı, 24-25 dekabr, 2010.

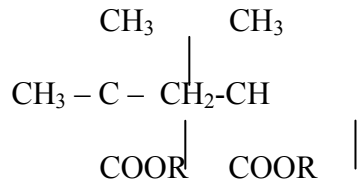
4. Tjalle T.Vandergraaf, Gudrat G. Mamedov, Mahammadali A. Ramazanov, Jalal A. Naghiyev, Afat A. Mehdiyeva, Nazim A.Huseynov, Determination of the radionuclide contamination on the Absheron peninsula in Azerbaijan, Proceedings of the 14th International Conference on Environmental Remediation and Radioactive Waste Management IECM2011 September 25-29, Reims, 9 p., France.

## Karbohidrogen-Mürəkkəb Efir Qarışıqlarının Dinamik Özlülüyü

**Ş.X.Xəlilov. V.N.Abbasov**

*Azərbaycan Dövlət Pedaqoji Universiteti*

Molekulyar mayelərin və binar qarışıqlarının istilik-fiziki xassələrinin öyrənilməsi mayelər fizikasının qarşısında duran aktual məsələlərdən biridir. Onun həm praktik həm də elmi əhəmiyyəti böyükdür. Bu məqsədlə aromatik karbohidrogenin dinamik özlülüyünə metakril turşusunun efirlərinin təsiri öyrənilmişdir. Metakril turşusunun efirləri-metakrilatlar polimerləşdirildikdən sonra maye yağların dinamik özlülüyünü, eyni zamanda doyma temperaturunun aşağı düşürülməsi məqsədilə aşqar kimi istifadə olunur. Bunu nəzərə alaraq metakril efirlərinin bəzi karbohidrogenlərin dinamik özlülüyünə təsiri öyrənilmişdir. Bu məqsədlə karbohidrogenlərdən tsikloheksanın dinamik özlülük əmsalına nonilmetakrilat efirinin təsiri müəyyən edilmişdir. Bu o məqsədlə seçilmişdir ki, tsiklik quruluşlu karbohidrogenlərlə metakril efirləri arasında zəif kimyəvi qarşılıqlı təsir mövcud olur. Bu isə maye qarışıqlarının nəzəriyyəsinin yaradılmasının əsasında durur. Karbohidrogenlərin dinamik özlülüyünü daha çox artırmaq üçün metakril efirlərinin nonilmetakrilatından aşqar kimi istifadə olunmuşdur. Metakril efirlərinin kimyəvi quruluşu aşağıdakı kimidir.



Quruluşdan görünür ki, metakril turşusunun efirləri özlülük əmsalının dəyişməsində əhəmiyyətli effekt verir və bundan texnikada aşqar kimi istifadə olunur.

Zəif kimyəvi qarşılıqlı təsirdə olan sistemlərin tədqiqi bir çox fiziki xassələrin o cümlədən özlülüynün mexanizmini izah etməyə imkan verir. Maye məhlullarının özlülük əmsalının hesablanması üçün əsaslı nəzəriyyə olmadığından təcrübə vasitəsilə ölçmə aparmaq məqsədəuyğundur. Ona görə də kompleks birləşmə əmələ gətirən maye qarışıqlarının (tsikloheksan-nonilmetakrilat) dinamik özlülüynü müxtəlif temperaturalarda kapilyar viskozimetr vasitəsilə ölçülmüşdür. Nonilmetakrilatın kiçik miqdarda (0,5 ; 1; 3 ; 5%) tsikloheksana aşqar kimi vurulması nəticəsində kompleks birləşmə əmələ gətirən qarışıq alınmışdır. Kompleks birləşmənin əmələ gəlməsinə səbəb nonilmetakrilat efirinin tərkibində olan oksigendir. Oksigenin sərbəst elektron cütlərinin olması nəticəsində kiçik konsentrasiyalarda tsikloheksanın molekullarını öz ətrafına çəkərək molekulyar kompleksin əmələ gəlməsinə səbəb olur ki, bu da müəyyən konsentrasiyada özlülük böyük qiymət alır.

Dinamik özlülük əmsalının konsentrasiya asılılığı additivlik qanunundan kənara çıxır. Təcrübə  $223 \div 343^{\circ} K$  temperatur intervalında aparılmışdır. Ölçmə intervalında 0,5% konsentrasiyada maksimum alınmışdır. Bu maksimumun hündürlüyü temperatur artdıqca azalır. Bu onunla izah olunur ki, 0,5% konsentrasiyada kompleks birləşmə maksimum halını almışdır. Kompleks birləşmənin əmələ gəlməsinə müəyyən edilməsi üçün göstərilən konsentrasiyadan rentgen şüalarının kiçik bucaq altında səpilməsinə baxılmışdır. J(s) dioqram əsasında müəyyən edilmişdir ki, birinci maksimumun hündürlüyü 0,5%-də o biri konsentrasiyalara nisbətən daha böyükdür. Bu da qarışıqın özlülüynü ilə quruluşu arasında olmasını təsdiq edir. Aydındır ki, mayelərdə və eləcə də maye qarışıqlarında özlülük daha həssas parametrdir ki, onun ölçülməsi əsasında kompleks birləşmənin əmələ gəlməsi bir daha təsdiq olunur. Hər bir konsentrasiyalı məhlulların ( sabit konsentrasiyada ) özlülük əmsalının temperatur asılılığı təmiz mayelərdə olduğu kimi eksponensial qanunla azalır, yəni Frenkel-Eyring nəzəriyyəsinə tabe olur.

- 1.С.И .Мехтиев, А.А.Мамедов,Ш.Х.Халилов Экспериментальное исследование гектил метакрилат на вязкость углеводородов. Ж.. нефть и газ №5.1974.
- 2.М.И.Шахпаранов Введение в молекулярную теорию растворов М.1956.ст.26-28,ст.124-200,201-311.
- 3.А.Ф.Скрышевский Структурный анализ жидкостей изд.В.Ш.1971 стр.50-58

## AMORF VƏ NANOKRİSTALLİK MAQNİT MATERIALLARIN ALINMASI VƏ ONLARIN XASSƏLƏRİ

T.M.Pənahov, A.Ə İsayeva, G.A.Əmənova, S.M.Həmidova

*Azərbaycan Memarlıq və İnşaat Universiteti*

*Bu iş maqnit hadisələri fizikasının fundamental problemlərinin həllinə maqniyumşaq materiallarının funksional xassələrinin yeni səviyyəsinə gətirən termomaqnit və termomexaniki təsir üsullarının amorf və nanokristallik ərintilərin quruluşuna və maqnit xassələrinə təsirinin müəyyən olunmasına həsr olunmuşdur.*

Bu maddələrin maqnit xassələri onların quruluşu və kimyəvi tərkibi ilə əlaqədardır. 80-ci illərin sonunda nanokristallik quruluşlu maqniyumşaq materialların yeni sinfinin işlənməsi müasir texnikanın tələblərinə cavab verən keyfiyyətə yeni maqniyumşaq materialların hazırlanmasında böyük sıçrayış oldu. Optimal termik emaldan sonra bu ərintilərin histerezis maqnit xassələri kobalt əsaslı ən yaxşı kristallik (permallay) və amorf ərintilərin xassələrinə yaxındır və doyma induksiya  $B_s$  amorf ərintilərin  $B_s$ -indən iki dəfə böyükdür. Xüsusi maqnit xassələri olan maqniyumşaq nanokristallik ərintiləri dəmir əsaslı amorf ərintilərin kristallaşdırılması yolu ilə alınır. Başqa sözlə nanokristallik halın yaradılması üçün amorf haldan aralıq hal kimi istifadə olunur.

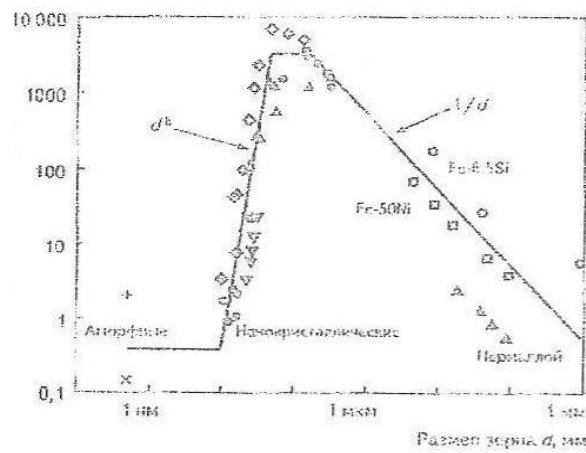
Amorf fazasının kristallaşmasının inkişaf prosesində nanokristallik quruluşun formalaşması əvvəla amorf ərintinin tərkibi ilə müəyyən olunur. Bu tərkib elə seçilməlidir ki, kristallaşma mərkəzlərinin yaranmasının yüksək sürətini və kristallitlərin böyüməsinin ləngidilməsini təmin etsin. Bu şərtlərin ödənilməsi nəticəsində dənəsinin ölçüsü təxminən 10 nm olan nanostuktur halın formalaşması təmin olunur.

Maqniyumşaq nanokristallik materialların alınması iki mərhələdə aparılır. Birinci mərhələdə sürətli tablama üsulu ilə fırlanan istilik aparıcı baraban üzərində ərintidən amorf halında lentşəkilli ərinti alınır. İkinci mərhələdə termik emal prosesində onlarda nanokristallik ölçülü dənələr alınır. Amorf və nanokristallik lentlərin termik və termomaqnit emalı həm vakuumda, həm də havada aparılmışdır. Termomaqnit emal zamanı ərintilərin müəyyən maqnit xassələrinin formalaşması müxtəlif gərginlikli sabit və dəyişən sahələrdə aparılır. Dəyişən (50Hz) və ya kiçik gərginlikli (150E qədər) sabit maqnit sahələri solenoidin sahəsi ilə əldə olunur. Torodial nümunələrdə maqnit sahəsi maqnitləndirici sarğıdan cərəyan buraxmaqla əldə olunur. Qüvvətli maqnit sahələrində termomaqnit emal aparmaq üçün tab alma elektromaqnitdə (5-6 kE) aparılır.

Termomexaniki emal şaquli qızdırıcıda orta hissəsində 100mm-dən az olmayan uzunluqla temperaturun bircinsliyi ( $\Delta T < 5^{\circ}S$ ) təmin olunan uzun nümunələrdə aparılır. Nümunənin otaq temperaturuna qədər soyudulması yük altında aparılmışdır. Termomexaniki emalın dartıcı gərginliyi 200 ÷ 400 MPa diapazonunda dəyişir.

Maqnit materiallarının yumşaqlığını yəni onların maqnitlənmə xüsusiyyətləri xarakterizə edən əsas parametrlər koersitiv qüvvədir. Koersitiv qüvvə kiçik olduqda materialı doyma halına çatdırmaq daha kiçik maqnit sahəsi lazımdır. 1-ci şəkildə polikristallik maqniyumşaq materiallarda koersitiv qüvvənin  $H_c$  dənənin ölçüsündən asılılığı göstərilmişdir. Qüsurların sıxlığının artması nəticəsində dənənin ölçüsü 100 nm qədər azaldıqda koersitiv qüvvə  $1/d$  asılılığı ilə artır. Bu zaman materialın makroskopik maqnit anizotropluğu ilə üst-üstə düşür. Əgər dənənin ölçüsü müəyyən uzunluqdan, yəni maqnit mübadilə korrelyasiyasının uzunluğundan kiçikdirsə dənələr arasındakı qarşılıqlı təsiri nəticəsində makroskopik maqnit anizotropğunun azalması baş verir. Bu zaman koersitiv qüvvə dənələrin ölçüsündən asılı olaraq  $d^6$  qanunu ilə azalır. Bu effekt təsadüfi maqnit anizotropğunun modeli ilə izah olunur.

Nanokristallik maqnyumşaq materialların alınması texnologiyası qalınlığı 30 mkm və amorf quruluşlu sürətlə tablanmış amorf lentdən alınmasından və termik emal vasitəsilə amorf quruluşun nanokristallaşmasından ibarətdir. Nanokristallik maqnyumşaq materialları kəşf edənlər dəmir əsaslı  $Fe_{73.5}Cu_1Nb_3Si_{13.5}B_9$  ərintilərindən istifadə etmişlər. Hazırda bu ərinti kimyəvi tərkibinin az dəyişmələri vasitəsilə nanokristallik maqnyumşaq materialların istehsalı üçün əsas ərinti olaraq qalır. Adətən silisium və bor sürətlə tablanmış lentdə amorf quruluşunun alınması üçün istifadə olunur. Mis tab almanın başlanğıc mərhələsində mis ilə zənginləşmiş klasterlərin formalaşmasında kömək edir və materialın bütün həcmi boyunca çoxlu mərkəzlərdə kristallaşmanın başlanğıcında təmin edir. Niobium misin daha kiçik klasterlərini formalaşdırır, yüksək temperatura qədər kristallik fazanın böyüməsini ləngidir və dəmirin bor ilə birləşməsinin yaranmasına mane olur.



Şəkil 1. Koersitiv qüvvənin maqnyumşaq materialların ölçülərindən asılılığı

Nanokristallaşma nəticəsində qalıq amorf faza ilə əhatə olunmuş və ölçüsü 10nm qədər olan h.m.k. qəfəslı  $Fe_{80}Si_{20}$  dənəsi yaranır. Kristallik fazanın həcmi payı təxminən 0.7 bərabərdir. Hazırda  $\alpha$ -Fe (nanoperin) və  $\alpha'$  FeCo (hitperin) dənələrindən ibarət olan nano ərinti yaranır və onların doyma maqnit induksiya böyük olub, uyğun olaraq 1,7 və 2,0 Tl-dır. Lakin texnologiya çətinliklərə görə bu nanokristallik ərintilər texnikada tətbiq olunmur.

### Nəticə

1. Amorf maqnyumşaq materialların maqnit xassələrini yaxşılaşdırın və histerezis ilgəyinin nyerdəyişməsinin qarşısını alan üsullar təklif olunmuşdur: yüksək tezlikli və sabit maqnit sahəsinin birlikdə təsiri altında kompleks termomaqnit emal, dəyişən maqnit sahələrində Kuri nöqtəsindən yuxarı temperaturdan  $5000^{\circ}S/dəq$  sürətlə sürətli soyuma. Bu emallardan sonra maqnit xassələrinin dəyişməsi bir oxlu maqnit anizotropluğu yaranması və domen sərhədlərinin stabilliyinin pozulması ilə əlaqədardır.
2. Dəmir və kobalt əsaslı (FeCo-CuNbSiB) amorf və nanokristallik ərintiləri onların sabit maqnit sahəsində termomaqnit emalı nəticəsində meydana çıxan histerezis ilgəyinin sürüşməsi aşkar edilmişdir. Müəyyən olunmuşdur ki, sürüşmə

$\alpha$ -Co,  $\beta$ -Co klasterlərinin və (FeCo)<sub>3</sub>Si və (FeCo)<sub>2</sub>B nanofazaların ayrılması ilə əlaqədar olduğu müəyyən olunmuşdur.

#### Ədəbiyyat

1. A.M.Məhərrəmov, M.Ə.Ramazanov, Nanotexnologiya, Bakı 2007, səh 232.
2. T.M.Pənahov, A.Ə.İsayeva, Metallik amorf materiallar, H.Əliyev adına AANM Elmi əsərlər məcmuəsi, № 1 (14), səh 33.
3. T.M.Pənahov, T.Q.Şamilov, Fiziki metalşünaslıq, Bakı 2011, səh 52.
4. В.Миропоп основы скапирующей зопдовой микроскопии М.Техпосфеча 2004, 144с.

### МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ И КОНФОРМАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ПЕПТИДА Т7

Аббасова Г.Дж., Алиева И.Н., Омарова А.И.

*Кафедра оптики и молекулярной физики,  
Бакинский Государственный Университет*

#### АБСТРАКТ

В работе исследована пространственная структура и конформационные свойства пептида Т7, являющегося линейной последовательностью семи аминокислотных остатков His-Ala-Ile-Tyr-Pro-Arg-His (НАІУРН). Расчеты проводились методом молекулярной механики с использованием силового поля атом-атомных потенциальных функций. Установлено, что низкоэнергетические состояния пептида Т7 стабилизированы устойчивыми водородными связями в пределах тетрапептидных фрагментов молекулы.

#### Введение

В настоящее время весьма актуальными являются исследования комплексов, участвующих в целенаправленном транспорте лекарственных средств к опухолевым клеткам. К числу интенсивных исследований последних лет можно отнести работы, посвященные изучению свойств пептида, состоящего из линейной последовательности семи аминокислотных остатков His-Ala-Ile-Tyr-Pro-Arg-His (НАІУРН), известного также под названием пептида Т7 [1]. Пептид Т7 является лигандом в системе, активирующей рецепторы трансферрина (ТfR) и осуществляющей доставку лекарств внутрь клетки посредством эндоцитоза. Исследования показали, что комплекс, включающий наряду с пептидом Т7 полиамидоамин (РАМАМ) и полиэтиленгликоль (ПЭГ) и далее загруженный доксорубицином (ДОХ), характеризуется более высокой противоопухолевой активностью в экспериментах, проведенных в естественных условиях на белых мышцах [2-6]. На основе проведенных исследований был сделан вывод о том, что пептид Т7 играет ключевую роль в механизмах транспорта противоопухолевых лекарственных препаратов внутрь клеток.

В данной работе методом молекулярной механики, основанном на силовом поле полуэмпирических потенциальных функций, исследована пространственная структура и динамические свойства пептида His-Ala-Ile-Tyr-Pro-Arg-His (НАІУРН), известного также под названием Т7 пептида. Исследования необходимы для моделирования структуры более сложных комплексных соединений, используемых в терапии онкологических заболеваний.

**Ключевые слова:** НАІУРН, пептид Т7, конформация, структура

**Метод расчета**

Конформационные свойства и пространственная структура пептида T7 (NAIYPRH), были исследованы путем поиска локальных минимумов полной конформационной энергии согласно методике и технике расчетов, описанных в работах [7,8]. Критерием отбора устойчивых структур являлись минимальные значения конформационной энергии, вклады межостаточных взаимодействий, а также система водородных связей, стабилизирующих низкоэнергетические конформационные состояния пептида. При этом были рассчитаны вклады различных видов внутримолекулярных взаимодействий валентно-несвязанных атомов-ван-дер-ваальсовых ( $E_{нев}$ ), электростатических ( $E_{эл}$ ), торсионных ( $E_{торс}$ ) и энергии образования водородных связей ( $E_{в.с.}$ ).

**Результаты и обсуждение**

Согласно результатам исследования низкоэнергетические конформационные состояния пептида T7 характеризуются значениями полной конформационной энергии, варьирующими в интервале  $-19,0 \div -25,7$  ккал/моль. Они принадлежат 14 структурным типам основной цепи пептида (табл.1), различаются как вкладами отдельных энергетических составляющих, так значениями двугранных углов вращения в основной и боковых цепях пептида.

**Таблица 1. Низкоэнергетические конформационные состояния пептида T7**

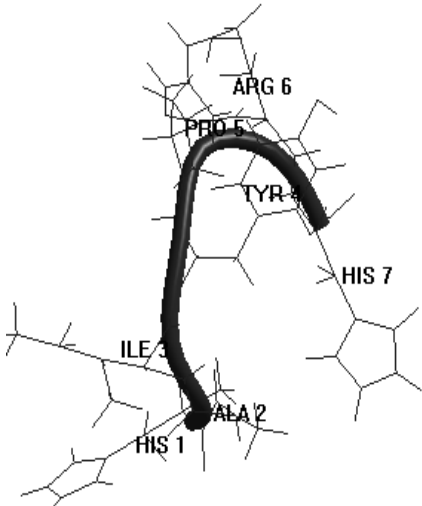
№	Шейп	Форма	$E_{н-в}$	$E_{эл}$	$E_{торс}$	$E_{полн}$	$E_{отн}$
1	efeefe	$B_2RB_2B_3RB_3B_3$	-34.6	2.2	6.8	-25.7	0.0
2	efeeff	$B_2RB_2B_3RR_3R_3$	-33.4	2.5	5.9	-25.0	0.7
3	efeeee	$B_2RB_2B_3BB_3R_3$	-31.5	2.3	6.1	-23.1	2.6
4	effefe	$B_2RRB_3RB_3R_3$	-32.6	3.3	6.5	-22.8	2.9
5	eefefe	$B_2BRB_3RB_3R_3$	-29.2	2.8	4.6	-21.9	3.8
6	eeefe	$B_2BB_3B_3RB_3R_3$	-30.0	2.3	6.4	-21.6	4.1
7	fffefe	$R_3RRB_3RB_3B_3$	-30.6	3.8	5.9	-20.9	4.8
8	ffeefe	$R_2RB_3B_1RB_3B_3$	-30.3	3.4	6.7	-20.2	5.5
9	ffeef	$R_2RB_3B_3BR_3R_3$	-29.9	3.6	6.2	-20.2	5.6
10	fffeff	$R_3RRB_3RR_3R_3$	-29.5	4.3	5.0	-20.1	5.7
11	eefe	$B_2BRB_3RR_3R_3$	-27.1	3.3	4.2	-19.6	6.1
12	efeef	$R_2RB_3B_3BR_3R_2$	-29.5	3.6	6.4	-19.4	6.3
13	ffeef	$R_2RB_3B_1RR_3R_3$	-29.1	3.9	6.1	-19.1	6.5
14	eeee	$B_2BB_3B_1BR_2B_2$	-28.1	3.1	6.0	-19.0	6.6

В табл.2 приведена пространственная структура и геометрические параметры, характеризующие состояние с минимальным значением полной энергии (табл.2).

Как следует из результатов расчета, наиболее устойчивые состояния характеризуются образованием водородных связей в пределах тетрапептидных фрагментов молекулы. Хотя и вклады энергии водородных связей, образованных между атомами пептидной цепи остатков His1 и Tyr4, а также Tyr4 и Arg6 незначительны, они играют важную роль в стабилизации устойчивых конформационных состояний пептида.

Полученные результаты могут быть использованы для моделирования структуры комплексов, участвующих в целенаправленном транспорте лекарственных препаратов к пораженным опухолевым клеткам в терапии онкологических заболеваний.

**Таблица 2. Пространственная структура и двугранные углы (в град) низкоэнергетического конформационного состояния пептида Т7**

Остаток	Форма пептидной цепи $B_2RB_2B_3RB_3B_3$	Пространственная структура
His1	*-113,105,180 177,197	
Ala2	-93,-60,171 177	
Ile3	-161,143,178 183, 167,173,188	
Tyr4	-131,158,167 -63,96,180	
Pro5	-61,157	
Arg6	-118,100,180 -60,177,182,180	
His7	-117,140,186 -68,177	

\*Углы даны в последовательности: основная цепь-  $\phi$ ,  $\psi$ ,  $\omega$  (верхняя строка), боковая цепь- $\chi_1$ ,  $\chi_2$ ,  $\chi_3$ ,  $\chi_4$  (нижняя строка).

### Литература

1. Han L., Huang R., Liu S., Huang S., Jiang C. Peptide-conjugated PAMAM for targeted doxorubicin delivery to transferrin receptor over expressed tumors // *Mol. Pharm.*, 2010, vol.7(6), p. 2156-2165.
2. Han L., Li J, Huang S., Huang R., Liu S., Hu X., Yi P., Shan D., Wang X., Lei H., Jiang C. Peptide-conjugated polyamidoamine dendrimer as a nanoscale tumor-targeted T1 magnetic resonance imaging contrast agent // *Biomaterials*, 2011, vol.32(11), p.2989-2998.
3. Han L., Huang R., Li J., Liu S., Huang S., Jiang C. Plasmid pORF-hTRAIL and doxorubicin co-delivery targeting to tumor using peptide-conjugated polyamidoamine dendrimer // *Biomaterials*, 2011, vol.32(4), p.1242-1252.
4. Oh S., Kim B.J., Singh N.P., Lai H., Sasaki T. Synthesis and anti-cancer activity of covalent conjugates of artemisinin and a transferrin-receptor targeting peptide // *Cancer Lett.*, 2009, vol.274(1), p.33-39.
5. Brammer L.A., Bolduc B., Kass J.L., Felice K.M., Noren C.J., Hall M.F. A target-unrelated peptide in an M13 phage display library traced to an advantageous mutation in the gene II ribosome-binding site // *Anal Biochem.*, 2008, vol.373(1), p.88-98.
6. Lee J.H., Engler J.A., Collawn J.F., Moore B.A. Receptor mediated uptake of peptides that bind the human transferrin receptor // *Eur J Biochem.*, 2001, vol.268(7), p.2004-2012.
7. Аббасова Г.Д., Алиева И.Н., Омарова А.И., Годжаев Н.М. Пространственная структура и конформационные свойства аналогов пептида CREKA // *Известия НАНА (серия физ.-мат. и технических наук)*, 2010, том XXX, № 5, с.112-120.
8. Maharramov A.M., Alieva I.N., Abbasova G.D., Ramazanov M.A., Nabiyevev N.S., Mohammad R.Saboktakin Iron oxide nanoparticles in the transport medicine systems // *Digest journal of nanomaterials and biostructures*, 2011, vol.6, No.2, p.419-431.



## КОНФОРМАЦИОННЫЕ АСПЕКТЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПЕНИЦИЛЛОПЕПСИНА С МЕТИЛАМИДОМ N-АЦЕТИЛ-L-ЛЕЙЦИНОМ

Алиев Р.Э., Кадымова Ф.А

[rashid\\_aliev@mail.ru](mailto:rashid_aliev@mail.ru)

Бакинский Государственный Университет

На основе кристаллографических данных нативного пенициллопепсина и его ингибиторных комплексов, на классической основе при помощи полуэмпирического метода атом-атомных потенциалов рассмотрены конформационные аспекты невалентного комплекса пенициллопепсина с метиламидом N-ацетил-L-лейцином. Проанализированы возможные ориентации гидролизуемой пептидной связи субстрата, нуклеофильной молекулы воды и реакционных остатков Asp33 и Asp213 пенициллопепсина в невалентном комплексе.

В настоящей работе, используя трехмерные структуры высокого разрешения нативного пенициллопепсина и его ингибиторных комплексов [1-2] методом молекулярной механики предпринята попытка выяснить характер стереохимических взаимоотношений гидролизуемой пептидной связи, нуклеофильной молекулы воды и активного центра фермента в невалентном комплексе пенициллопепсина. Изучены конформационные аспекты взаимодействия пенициллопепсина с модельным субстратом  $\text{CH}_3\text{CO-L-Leu-NHCH}_3$ . Расчетная модель приведена на рис.1.

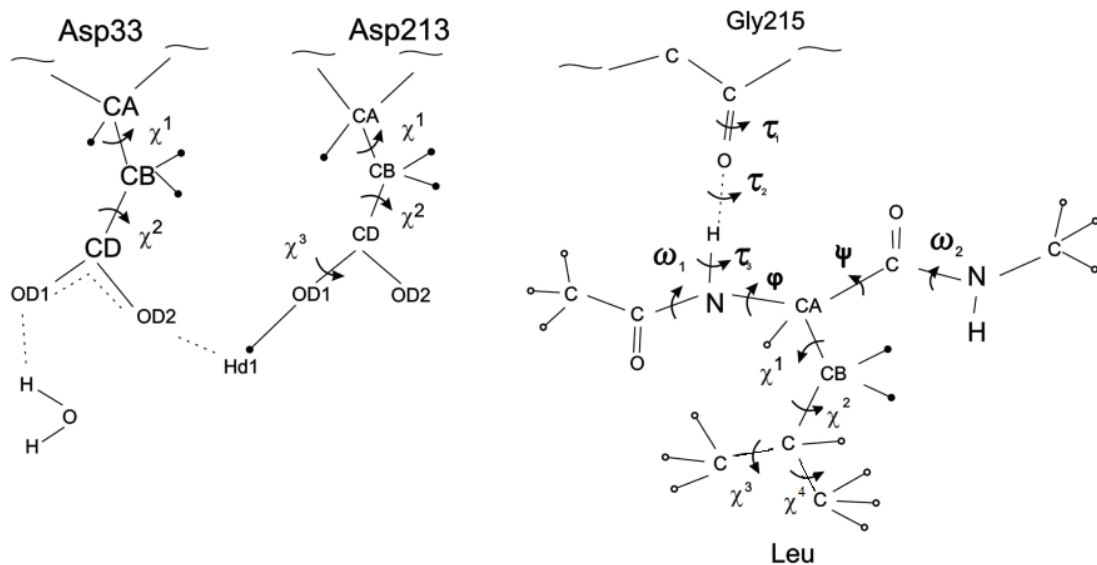


Рис.1. Расчетная модель  $\text{CH}_3\text{CO-L-Leu-NHCH}_3$  и остатков активного центра Asp33 и Asp213, связанных с молекулой  $\text{H}_2\text{O}$

При проведении расчетов мы исходим из того, что осуществляемый аспартатными протеазами гидролиз пептидной связи относится к невалентному типу [3] и не были связаны ни с какими априорными предположениями о конкретной схеме механизма катализа. Выбор физической модели активного центра пенициллопепсина обоснован нами в [4-6]. Там же подробно проведен анализ конформационных состояний боковых цепей субстрата связывающей полости и реакционных остатков Asp33 и Asp213 в нативном ферменте, приведены, использованные в расчетах потенциальные функции и

полуэмпирические параметры. Расчет энергии и оптимизация проводились с помощью программы невалентных взаимодействий [7]. При сорбции субстрата неперенным условием было образование водородной связи N-H группы Leu с C=O группой связи Gly215 пенициллопепсина. Критерием отбора структур невалентного комплекса пенициллопепсина с  $\text{CH}_3\text{CO-L-Leu-NHCH}_3$  служила конформационная энергия. Получено, что из трех возможных низкоэнергетических форм (B, R и L) субстрата в поле фермента только (B и R) конформации представляют интерес. В табл.1 приведены геометрические (двугранные углы) и энергетические (ккал/моль) параметры оптимальных конформаций  $\text{CH}_3\text{CO-L-Leu-NHCH}_3$  в невалентном фермент-субстратном комплексе.

Таблица 1

Геометрические (град) и энергетические (ккал/моль) параметры оптимальных конформаций метиламида N-ацетил-L-лейцина в невалентном комплексе с пенициллопепсином

Конформация	Двугранные углы								Энергия		
	$\phi$	$\psi$	$\omega_1$	$\omega_2$	$\chi^1$	$\chi^2$	$\chi^3$	$\chi^4$	$E_{\phi+c}$	$E_c$	$E_{\text{компл}}$
R <sub>21</sub>	-164	-71	180	-163	177	55	-179	171	-21.7	-3.7	-25.5
B <sub>22</sub>	-159	108	180	180	-162	173	-169	180	-22.6	-2.9	-25.4
B <sub>21</sub>	-164	120	180	180	177	55	-179	171	-20.5	-4.2	-24.6
B <sub>12</sub>	-159	149	-179	180	81	168	-169	180	-21.4	-3.2	-24.6
B <sub>33</sub>	-152	142	-177	180	-85	-74	169	-170	-22.1	-2.2	-24.3
B <sub>23</sub>	-157	-67	-178	-169	-161	-58	168	-169	-22.1	-1.3	-23.4
B <sub>31</sub>	-137	140	-179	180	-77	75	177	165	-20.6	-1.7	-22.2
B <sub>13</sub>	-163	165	179	180	71	-50	165	-164	-20.3	-1.7	-22.0
B <sub>32</sub>	-143	132	179	180	-69	171	-174	-177	-18.9	-3.0	-22.0
B <sub>23</sub>	-158	108	-178	-179	-161	-58	168	-169	-20.4	-1.4	-21.8
B <sub>11</sub>	-159	157	180	180	37	69	178	167	-16.4	-2.9	-19.3
R <sub>33</sub>	-151	-56	-177	176	-85	-74	169	-170	-15.2	-1.8	-17.0

### Литература

1. James M.N.G., Sielecki A.R. J.Mol. Biol., 1983,v.163, p.299-361.
2. James M.N.G., Sielecki A.R. Biochemistry, 1985, v.24, p.3701-3713
3. Антонов В.К. Химия протеолиза, М.:Наука, 1991,с.504
4. Алиев Р.Э. Вестник Бакинского Государственного Университета, серия физ.-мат. наук, 1998, №1, с.66-70.
5. Алиев Р.Э. Journal of Qafqaz University, 2004, №14, p.115-119

6. Алиев Р.Э. International Conference. Application of information-communication technologies in science and education, Baku, 2007, p.610-613.
7. Максумов И.С., Исмаилова Л.И., Годжаев Н.М. Журн. структ. химии, 1983, т.24, №4, с.147-148

## ЭЛЕКТРЕТНЫЕ СВОЙСТВА РАДИАЦИОННО МОДИФИЦИРОВАННЫХ ПЛЁНОК ПОЛИЭТИЛЕНОВ РАЗНОЙ ПЛОТНОСТИ

Магеррамов А.М. , Дашдамиров М.К., Багирбеков Х.В.  
Институт Радиационных Проблем НАНА

### Резюме

*В данной работе приводятся результаты сравнительного анализа радиационно модифицированных тонких плёнок полиэтиленов низкой и высокой плотности. Установлены различия электретных свойств (величины электретных зарядов и их временная стабильность) радиационно-модифицированных плёнок ПЭНП и ПЭВП. Причинами этих различий является наличие распределений по глубинам ловушек (объемных и поверхностных) как структурного, так и электронного происхождения.*

**Ключевые слова:** электреты, радиационное модифицирование, полимерные тонкие плёнки

Улучшение электретных, пьезоэлектрических, антистатических свойств полимерных электретов является актуальной задачей. В работе [1] впервые показано, что величина электретных зарядов и их стабильность существенно зависит от особенностей надмолекулярной структуры (НМС) и условий кристаллизации полиолефинов. Было показано, что изменение электретных свойств полиэтилена (ПЭ) высокой плотности (ПЭВП) связано со степенью кристалличности (К), ориентации макромолекул, структурной релаксацией и модифицирующими факторами (одноосная ориентация, воздействия рентгеновских,  $e^-$  - и  $\gamma$ - излучений, введение мелкодисперсных наполнителей, магнитная и электрополевая обработка и т.п.).

Целью настоящей работы является установление причины различия электретных свойств (величины электретных зарядов и их временная стабильность) радиационно-модифицированных плёнок ПЭНП и ПЭВП.

Образцы пленок ПЭНП и ПЭВП толщиной 50-60 мкм были изготовлены из гранул или порошков этих полимеров путем быстрого охлаждения (закалка при 273 К) расплава со скоростью 30-35 град/с. Температура прессования под давлением  $10^7$  Па для ПЭНП и ПЭВП составляла 453 и 473 К.

Облучение образцов при дозах 3-100 Мрад осуществляли  $\gamma$  – лучами  $^{60}\text{Co}$  на установке РХ- $\gamma$ -30 в предварительно вакуумированных до  $10^{-2}$  атм ампулах при 293К или 77 К. Мощность дозы составляла 1 Мрад/с.

В  $\gamma$  –облученных образцах концентрации парамагнитных центров определяли в спектрофотометре “Radioran” X диапазона с частотой модуляции 100 кГц.

Электретное состояние в образцах облученного или необлученного ПЭНП и ПЭВП создавалось путем воздействия на них коронного разряда при напряжении 8 кВ в течение времени 5 мин [1]. Значения электретной разности потенциалов  $U_{\Sigma}$  определены методом вибрирующего электрода [2], Токи термостимулированной деполяризации (ТСД) электрета снимали в режиме короткого замыкания при скорости нагрева образца 4 град/мин.

Зависимости поверхностной плотности электретных зарядов  $\sigma$  коронно-поляризованных предварительно  $\gamma$ -облученных при дозе 50 мрад плёнок ПЭНП и ПЭВП от времени хранения  $t_{xp}$  приведены на рис.1. Видно, что электреты на основе ПЭВП более стабильны.

Величина  $\sigma$  для ПЭНП в течении времени до  $t_{xp}=5\div 10$  часов снижается на 80 %, а у пленок ПЭВП ( кривая 2) при значениях  $t_{xp}=40$  суток значения  $\sigma$  составляет  $(2\div 3)\cdot 10^{-4}$  Кл/м<sup>2</sup>. Наблюдаемое значительное различие стабильности электретных зарядов  $\gamma$ -облученных плёнок ПЭНП, ПЭВП могут быть связаны со структурными особенностями этих полимеров и различием кинетики элементарных радиационно-химических процессов в них. Кроме того, на величину электретных зарядов и их стабильность при нормальных условиях хранения могут повлиять также процессы структурной релаксации различных участков полимерной цепи и пострадиационные процессы стабилизации зарядов в ловушках разной природы, (диэлектрические полости, радикалы, наличие разветвлений и примесей и т.д.)

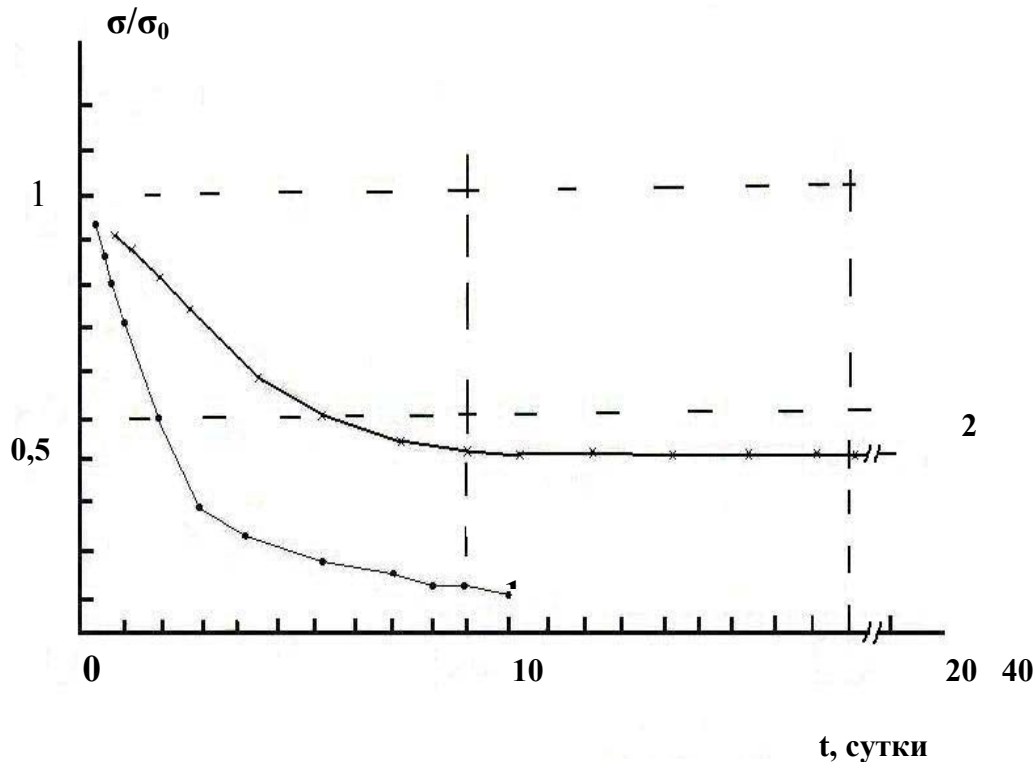


Рис.1 Временные зависимости относительного значения поверхностной плотности электретных зарядов плёнок ПЭНП (1) и ПЭВП (2) модифицированных при оптимальной дозе 50 Мрад.

Наблюдаемые различия величины плотности электретных зарядов и их стабильность ранее объяснены со структурными особенностями и конформационными различиями пленок ПЭНП и ПЭВП. Различие структурных “неоднородностей” типа С=О, С=С и т.п, которые могут быть ловушками для электретных зарядов в ПЭНП и ПЭВП ( концентрация этих ловушек в ПЭ может достигать в среднем по объему  $\sim 10^{19}$  см<sup>-3</sup> [1,2,3,6]). Однако, эти причины стабилизации электретных зарядов в различных ПЭ как для необлученных, так и для  $\gamma$ -облученных образцов этих полимеров представляются недостаточными. Можно ожидать, что стабильность электретных зарядов в плёнках полиэтилена, полипропилена (ПП) определяется не только условиями и режимом поляризации, но и обуславливается другими факторами; например структурными фактора-

ми, образованием радикалов и их подвижностью, а также конкуренцией разных релаксационных процессов и пострадиационными явлениями.

При радиационном модифицировании в результате отрыва водорода и при образовании срединного радикала в ПЭ возможен изгиб и увеличение валентного угла от 112 до 120° [4,7].

Кроме этих пост-явлений на процесс электризации могут повлиять также продукты радиолитического разложения, пероксидные радикалы [ROO\*][4].

В таблице 1 приведены значения оптимальных доз  $\gamma$ -облучения  $D$ , эффективные значения плотности электретных зарядов  $\sigma$ , отношение вероятностей ( $\beta/\alpha$ ) процессов деструкций  $\beta$  и сшивания  $\alpha$ , концентрация квазистабильных радикалов  $[R] \cdot 10^{-18}$  спин/г при 293К электретов из ПЭНП и ПЭВП.

Таблица 1

Стабильность электретных характеристик плёнок ПЭНП и ПЭВП,  
облученных при оптимальных дозах

Полимер	D, Мрад	$\sigma_{эф,10^{-4}}$ Кл/м <sup>2</sup> $t_{xp}=100$ час	$\beta/\alpha$	$[R], 10^{18}$ спин/г	Стабильность электрета
ПЭНП	0	0,02	-	-	Не стабилен
	30-35	0,15	0,3	5	Не стабилен
ПЭВП	0	0,2	-	-	стабилен
	50-55	3,5	0,3	7,1	стабилен

Из табл.1 видно, что значения доз, при которых наблюдается рост  $\sigma$  (в том числе  $E_{пр}$ ) для ПЭВП гораздо больше, чем у плёнок ПЭНП, причем на эту тенденцию не влияет НМС и условия кристаллизации этих полимеров. Как видно из таблицы 1, стабильность электретных зарядов  $\sigma$  ( $t_{xp}$ ) в  $\gamma$ - облученных образцах ПЭ коррелируется концентрацией  $[R]$  квазистабильных радикалов, а не коэффициентом  $\beta/\alpha$ .

Основным типом радикалов, образующихся в ПЭ при  $\gamma$ - облучении являются радикалы  $\sim CH_2-C\dot{H}-CH_2 \sim$  алкильного типа, причем их радиационный выход практически мало зависит от НМС полимера и составляет  $3,2 \pm 0,2$  спин/ 100 эВ. Вместе с тем оказалось, что концентрация “квазистабильных “ радикалов в образцах ПЭВП всегда больше, чем в образцах ПЭНП, полученных при одинаковых условиях кристаллизации и облученных при одинаковых значениях дозы.

Из рис.2 видно, что радиационный выход  $[R]$  квазистабильных радикалов (при дозах облучения 5-10 Мрад) в образцах ПЭВП всегда больше, чем в образцах ПЭНП, закристаллизованных при идентичных режимах. При времени хранения  $t_{xp}=200$  часов и температуре 300 К для ПЭНП и ПЭВП значения  $[R]$  составляет  $2,1 \cdot 10^{17}$  и  $3,3 \cdot 10^{18}$  спин/г.

Следует отметить, что для исключения влияния заряженных продуктов разложения на число и стабильность электретных зарядов образцы подвергались отбеливанию видимым светом.

Для установления роли пероксидных (ROO´) и алкильных ( $\sim CH_2-C\dot{H}-CH_2 \sim$ ) на стабильность электретных зарядов  $\gamma$ - облученных плёнок ПЭНП и ПЭВП (рис.2) можно использовать модели окисления перенапряженных связей в этих полимерах.

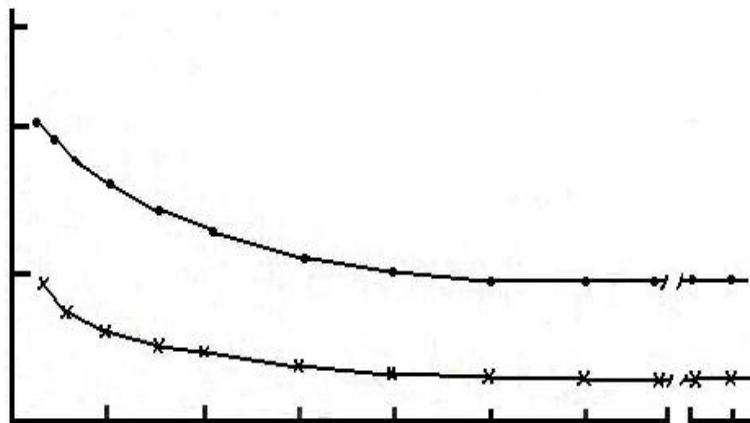


Рис.2 Зависимости концентрации квазистабильных радикалов  $\gamma$ - облученных дозой 10 Мрад при 77 К в вакууме образцов ПЭВП (1) и ПЭНП (2) от времени хранения при 293 К.

При действии коронного разряда (электретировании) на перенапряженный облученный полимер, из-за образования двойных связей образуются концевые свободные радикалы.

Таким образом сравнительный анализ короноэлектретных свойств плёнок ПЭНП и ПЭВП как  $\gamma$ -облученных, так и после процесса поляризации показывают, что значительное расхождение их электретных свойств связано как преимущественно конформационной структурой, наличием короткоцепных ответвлений в главной цепи ПЭ с одной стороны, так и участием макрорадикалов в процессе стабилизации электретных зарядов.

#### Литература.

1. Магеррамов А.М.. Структурное и радиационное модифицирование электретных, пьезоэлектрических свойств полимерных композитов. Баку, Элм, 2001, 327с.
2. Электреты. Под редакцией Г.Сесслера, Мир, 1983, 487 с.
3. Луцейкин Г.А.. Полимерные электреты. М. Химия, 1984, 184 с.
4. Томашевский Э.Е., Квачадзе Н.Г. Срединные макрорадикалы и их влияние на прочность ориентированных полимеров. // ФТТ, 2005, т.47, № 5.,с. 899-905.
5. Ванников А.В., Матвеев В.К., Сичкарь В.П., Тютнев А.П. Радиационные эффекты в полимерах. Электрические свойства. М. Наука, 1982, 272 с.
6. Тютнев А.П., Ванников А.В., Мингалиев Г.С., Саенко В.С. Электрические явления при облучении полимеров. М. Энергоиздат, 1985, 176 с.
7. Ходяков А.А., Громов В.В. Влияние примесных радикалов на электризацию полимеров // Журнал физической химии, 2002, т.76, №3, с. 524-525.
8. Финкель Э.Э., Брагинский Р.П. Радиационное модифицирование полиолефинов. В кн. Радиационная химия полимеров, М., Наука, 1973, с. 186-305
9. Гордиенко В.П. Радиационное модифицирование композиционных материалов на основе полиолефинов. Киев, Наукова думка, 1986, - 176с

## ИССЛЕДОВАНИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ И МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ ПРИ ОБРАЗОВАНИИ КОМПЛЕКСОВ М-НИТРОАНИЗОЛА С АНИЛИНОМ И Н-ПРОПИЛАМИНОМ

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

*Институт физических проблем Бакинского Государственного Университета*

*С помощью ab initio вычислений изучены структуры ассоциатов н-пропиламина и анилина с м-нитроанизолом. Установлены устойчивые конфигурации, структурные и энергетические характеристики комплексов. Проведено квантовохимическое исследование колебательных спектров свободных молекул и ассоциатов на их основе и установлена природа полос поглощения низкочастотной области ИК спектров, связанных с образованием водородной связи.*

Межмолекулярные взаимодействия с образованием водородных связей играют определяющую роль в биологии и биофизике как стабилизирующие вторичную структуру полипептидных цепей и влияющие на конформационное строение нуклеиновых кислот и углеводов [1,2]. Строгое обоснование причин образования водородных связей требует детального квантовохимического исследования. В теоретических исследованиях различных межмолекулярных взаимодействий особое место занимают *ab initio* расчеты, которые позволяют детально рассмотреть механизм образования комплексов, определить их структуру и энергетические характеристики, а также выявить взаимосвязь между структурой комплексов и свойствами входящих в его состав молекул [3]. Образование межмолекулярных водородных связей влияет на структуру компонентов, входящих в комплекс, а это проявляется в колебательных спектрах ассоциатов. В данной работе нами проведено квантовохимическое исследование межмолекулярных взаимодействий комплексов м-нитроанизола с анилином и н-пропиламином (рис.1).

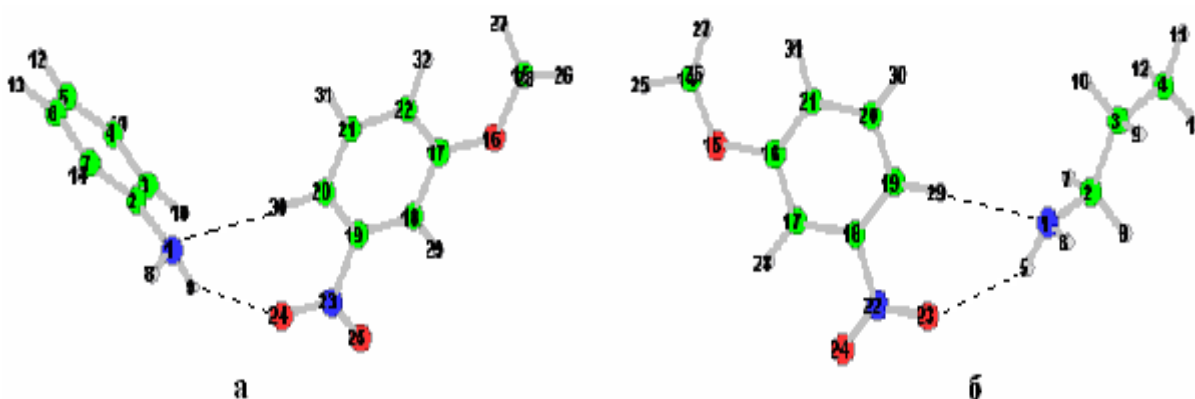


Рис.1. Модели комплексов: а) м-нитроанизола с анилином; б) м-нитроанизола с н-пропиламином

При моделировании комплексов была учтена координация наиболее электроотрицательных и электроположительных атомов компонентов, входящих в комплексы, образующие водородными связями. Оптимизация геометрии исследуемых комплексов и вычисление их различных квантовохимических характеристик и колебательных спектров проводили ограниченным методом Хартри-Фока в базисе 6-31G(d,p) с использованием программ Gaussian 09 и GAMESS [4,5].

Таблица 1. Структурно-энергетические характеристики комплексов

Структура	$P_{NH}^{связ.}$	$P_{NH}^{своб.}$	$Z_H^{связ.}$	$Z_H^{своб.}$	$r_{N-H}, \text{Å}$	$r_{H-O}, \text{Å}$	$r_{N-H}^{связ.}, \text{Å}$	$r_{N-H}^{своб.}, \text{Å}$	$\Delta E, \text{кДж/моль}$
n-P <sub>2</sub> NH <sub>2</sub>		0,916		0,264				1,000	
PhNH <sub>2</sub>		0,903		0,302				0,990	
Ассоциаты с м-нитроанизолом									
1	0.892	0.913	0.298	0.262	2.53 6	2.51 0	1.001	1.001	14.85
2	0.880	0.907	0.320	0.285	2.63 3	2.41 0	0.997	0.996	21.62

n-P<sub>2</sub>NH<sub>2</sub> – нормальный пропиламин; PhNH<sub>2</sub> – анилин; P-порядок связей; Z- заряд; r- длина связей;  $\Delta E$  - энергия образования комплексов-сумма энергий свободных молекул с вычетом энергии комплексов

Структурно-энергетические характеристики модельных комплексов были исследованы с использованием программы GAMESS и приведены в таблице 1. Как видно из таблицы 1, в исследуемых ассоциатах порядок связанных NH связей (степень перекрытия электронных облаков) уменьшается, а заряд связанных NH атомов увеличивается по сравнению со свободными NH связями молекул. Длина NH связи в комплексе с анилином меняется на 0.001 Å в отличие от комплекса с н-пропиламином, в котором длина связи для свободных и связанных NH-связей не меняется. Энергия образования комплексов на основе анилина примерно на 7 кДж/моль больше, чем для аналогичного комплекса с н-пропиламином. По энергетическим данным кольцевые структуры при образовании водородных связей в комплексе с анилином прочнее, чем в комплексе с н-пропиламином.

Для оптимизированных структур свободных молекул и комплексов были рассчитаны частоты и интенсивности ИК спектров, выполненных нами с использованием программы Gaussian09. Теоретические спектры исследуемых комплексов приведены на рис. 2. Для установления природы полос поглощения в колебательных спектрах исследуемых нами ассоциатов была использована программа VEDA4 [6], которая позволяет из результатов расчета колебательных спектров получить распределение потенциальной энергии по колебательным координатам для каждой полосы поглощения. Результаты проведенных исследований приведены в таблицах 2 и 3.



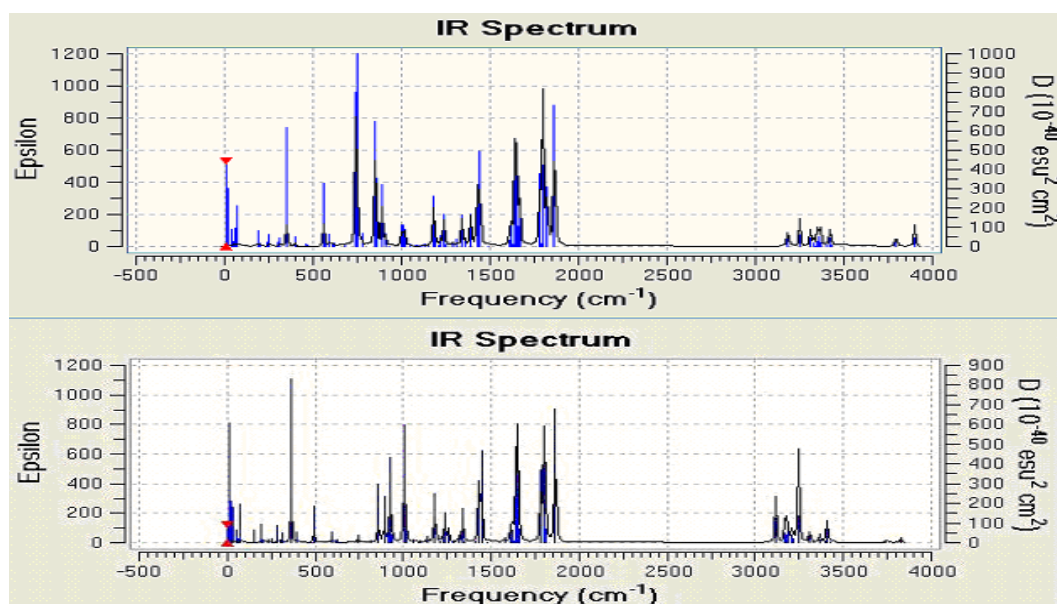


Рис. 2. Теоретические ИК-спектры модельных молекулярных комплексов: а) м-нитроанизола с анилином; б) м-нитроанизола с н-пропиламином

Таблица 2. Частоты и интенсивности N-H и O-N связей в ИК спектре комплексов и свободных молекул, входящих в комплексы

м-нитроанизол + н-пропиламин							
Свободный н-пропиламин				Пропиламин в комплексе с нитроанизолом			
	$r_{N-H}^{своб.}$	$\nu_{N-H}^{своб.}$	$I_{N-H}^{своб.}$		$r_{N-H}^{связ.}$	$\nu_{N-H}^{связ.}$	$I_{N-H}^{связ.}$
$N_1H_5$	1.0002	3825	0.27	$N_1H_5$	1.0007	3828	11.22
$N_1H_6$	1.0011	3738	0.63	$N_1H_6$	1.0014	3739	4.33
Свободный м-нитроанизол				Пропиламин в комплексе с нитроанизолом			
$O_{10}-N_9$	1.1937	1869	266.69	$O_{23}-N_{22}$	1.1954	1865	316.31
$O_{11}-N_9$	1.1929	1648	246.94	$O_{24}-N_{22}$	1.1923	1648	234.88
Свободный анилин				Анилин в комплексе с м-нитроанизолом			
$N_1H_8$	1.0500	3200	65.98	$N_1H_8$	0.9963	3901	41.89
$N_1H_9$	1.0500	3296	34.51	$N_1H_9$	0.9971	3795	34.27
Свободный м-нитроанизол				Анилин в комплексе с м-нитроанизолом			
$O_{10}-N_9$	1.1937	1869	266.69	$O_{25}-N_{23}$	1.1907	1865	343.00
$O_{11}-N_9$	1.1929	1648	246.94	$O_{24}-N_{23}$	1.1971	1647	218.50

Анализ рассчитанных частот свободного н-пропиламина и н-пропиламина в комплексе показывает, что частоты полос поглощения колебаний NH связей не меняются, а интенсивность в ассоциатах увеличивается для обоих частот. В комплексе с н-пропиламином длина связи  $O_{23}N_{22}$ , участвующей в образовании водородной связи увеличивается, а также увеличивается интенсивность соответствующей полосы  $1865\text{ см}^{-1}$ , определяемой колебаниями структурных элементов  $O_{23}N_{22}$  -32%,  $O_{24}N_{22}$ -38%,  $H_{27}C_{14}H_{26}$ -14%. Эта полоса, характеристическая для свободных колебаний NO связей становится нехарактеричной при образовании водородной связи. Таким образом, межмолекулярные взаимодействия приводят к деформации молекул.

Частоты поглощения, связанные с колебаниями NH группы молекулы свободного анилина проявляются при  $3200$  и  $3096\text{ см}^{-1}$ . Соответствующие частоты в комплексе с нитроанизолом наблюдаются в более высокочастотной области -  $3901$  и  $3795\text{ см}^{-1}$ . Длина NH связи и интенсивность полосы поглощения  $3200\text{ см}^{-1}$  уменьшаются, в то

время как полоса поглощения  $3096 \text{ см}^{-1}$  остается неизменной. Частоты  $1865$  и  $1648 \text{ см}^{-1}$ , характеризующие валентные колебания комплексов м-нитроанизола с н-пропиламином и с анилином не меняются по сравнению со свободным м-нитроанизолом. Интенсивность этих частот в комплексе с н-пропиламином становится соответственно  $316$  и  $343$ , в то время как для свободной молекулы м-нитроанизола эта интенсивность была  $267$ .

Таблица 3. Интерпретация частот, связанных с межмолекулярными взаимодействиями

№	$\nu \text{ см}^{-1}$	I,	Распределение потенциальной энергии по колебательным координатам
м-нитроанизол + н-пропиламин			
1	7	0.16	$\text{C}_2\text{N}_1\text{H}_{29}$ - 5%, $\text{H}_{29}\text{N}_1\text{H}_5\text{O}_{23}$ -19%, $\text{C}_2\text{N}_1\text{H}_{29}$ -15%
2	14	2.06	$\text{H}_{29}\text{N}_1\text{H}_5\text{O}_{23}$ -14%, $\text{H}_5\text{O}_{23}\text{N}_{22}\text{C}_{18}$ -12%, $\text{O}_{23}\text{N}_{22}\text{C}_{18}\text{C}_{17}$ - 21%, $\text{C}_2\text{N}_1\text{H}_{29}\text{C}_{19}$ -20%
3	26	1.41	$\text{N}_1\text{H}_5\text{O}_{23}$ -16%, $\text{H}_5\text{O}_{23}\text{N}_{22}\text{C}_{18}$ -19%, $\text{C}_2\text{N}_1\text{H}_{29}\text{C}_{19}$ -19%
4	35	1.57	$\text{N}_1\text{H}_5\text{O}_{23}$ -10%, $\text{C}_2\text{N}_1\text{H}_{29}$ -13%, $\text{H}_5\text{O}_{23}\text{N}_{22}\text{C}_{18}$ -17%, $\text{O}_{23}\text{N}_{22}\text{C}_{18}\text{C}_{17}$ - 22%
5	51	0.84	$\text{C}_2\text{N}_1\text{H}_{29}$ -10%, $\text{H}_{29}\text{C}_{19}\text{C}_{20}\text{C}_{21}$ -12%, $\text{H}_5\text{O}_{23}\text{N}_{22}\text{C}_{18}$ -12%, $\text{O}_{23}\text{N}_{22}\text{C}_{18}\text{C}_{17}$ -23%
6	62	0.37	$\text{O}_{23}\text{H}_5$ -20%, $\text{N}_1\text{H}_5\text{O}_{23}$ -12%, $\text{H}_5\text{O}_{23}\text{N}_{22}$ -16%, $\text{C}_3\text{C}_2\text{N}_1\text{H}_5$ -17%
7	71	3.51	$\text{C}_{14}\text{O}_{15}\text{C}_{16}\text{C}_{17}$ -59%
8	74	0.92	$\text{O}_{23}\text{H}_5$ -24%, $\text{C}_3\text{C}_2\text{N}_1\text{H}_5$ -10%
9	3739	4.33	$\text{N}_1\text{H}_5$ -33%, $\text{N}_1\text{H}_6$ -63%
10	3828	11.22	$\text{N}_1\text{H}_5$ -63%, $\text{N}_1\text{H}_6$ -36%
м-нитроанизол +анилин			
1	8	0.86	$\text{N}_1\text{H}_9\text{O}_{24}$ -10%, $\text{O}_{24}\text{N}_{23}\text{C}_{19}\text{C}_{18}$ -14%, $\text{N}_1\text{H}_9\text{O}_{24}\text{N}_{23}$ -34%, $\text{C}_2\text{N}_1\text{H}_9\text{O}_{24}$ -17%
2	17	1.22	$\text{N}_1\text{H}_9\text{O}_{24}$ -10%, $\text{N}_9\text{O}_{24}\text{N}_{23}\text{C}_{19}$ -36%, $\text{O}_{24}\text{N}_{23}\text{C}_{19}\text{C}_{18}$ -17%
3	24	1.79	$\text{N}_1\text{H}_9\text{O}_{24}$ -37%, $\text{H}_9\text{O}_{24}\text{N}_{23}$ -10%, $\text{H}_9\text{O}_{24}\text{N}_{23}\text{C}_{19}$ -12%, $\text{C}_7\text{C}_2\text{N}_1\text{H}_9$ -21%
4	35	0.77	$\text{H}_1\text{N}_9\text{O}_{24}\text{N}_{23}$ -16%, $\text{H}_9\text{O}_{24}\text{N}_{23}\text{C}_{19}$ -12%, $\text{C}_2\text{N}_1\text{H}_9\text{O}_{24}$ -36%
5	53	0.38	$\text{N}_1\text{H}_9\text{O}_{24}\text{N}_{23}$ -22%, $\text{N}_9\text{O}_{24}\text{N}_{23}\text{C}_{19}$ -15%, $\text{O}_{24}\text{N}_{23}\text{C}_{19}\text{C}_{18}$ -42%
6	61	1.40	$\text{H}_9\text{O}_{24}\text{N}_{23}$ -44%, $\text{C}_7\text{C}_2\text{N}_1\text{H}_9$ -37%
7	69	0.77	$\text{O}_{24}\text{H}_9$ -79%
8	72	3.76	$\text{H}_{26}\text{C}_{15}\text{O}_{16}\text{C}_{17}$ -10%, $\text{C}_{15}\text{O}_{16}\text{C}_{17}\text{C}_{18}$ -70%
9	3795	34.27	$\text{N}_1\text{H}_8$ -50%, $\text{N}_1\text{H}_9$ -48%
10	3901	41.89	$\text{N}_1\text{H}_8$ -50%, $\text{N}_1\text{H}_9$ -50%

В таблице 3 приведены частоты наиболее значимых при образовании водородной связи полос поглощения и распределение потенциальной энергии по координатам для этих частот. Из таблицы видно, что частоты  $74$  и  $46 \text{ см}^{-1}$  в свободном м-нитроанизоле соответствуют частотам  $71$  и  $51 \text{ см}^{-1}$  в комплексах н-нитроанизола с н-пропиламином, т.е. практически не меняются, что говорит о том, что эти низкочастотные колебания являются характеристическими колебаниями для молекулы м-нитроанизола. Полосы поглощения  $74 \text{ см}^{-1}$  в комплексе м-нитроанизола с н-пропиламином и  $69 \text{ см}^{-1}$  в комплексе м-нитроанизола с анилином соответствуют валентному колебанию ОН связей. Остальные частоты в низкочастотной области (табл.3) соответствуют колебаниям молекул, входящих в комплексы относительно друг друга. Интенсивности этих низкочас

тотных колебаний очень малы и изучать их с помощью экспериментальной ИК спектроскопии затруднительно, что подтверждает необходимость проведения теоретических расчетов.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Хобза П., Заградник Р. Межмолекулярные комплексы. М., Мир, 1989, с.376
2. 2. Коплан И.Г. Введение в теорию молекулярных взаимодействий. Наука, 1982, с.312
3. Новаков И.А., Корольков В.В., Павлючко А.И., Орловский Б.С., Грибов Л.А. ЖСХ, 2004, т.45, №4, с.595-601
4. M.J.Frisch et al. Gaussian09 Revision C.02. Gaussian Inc Wallingford, CT 2009
5. Schmidt M.W., Baldrige K.K. Boatz J.A. et al. J.Comput Chem. 1993.-14.-P.1347-1363
6. M.H. Jamroz et al. / Journal of Molecular Structure, 2006, v. 787, p.172-183

### ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОТЕРМОПОЛЯРИЗАЦИИ НА ЗАРЯДОВОЕ СОСТОЯНИЕ НАНОКОМПОЗИЦИЙ ПЭ+Cr И ПЭ+PbCrO<sub>4</sub>

**Керимова Б.Е.**

**b\_kerimova@hotmail.com**

*БГУ, физический факультет*

*В данной работе излагаются результаты исследования влияния электротермополяризации на зарядовое состояние композиций ПЭ+Cr и ПЭ+PbCrO<sub>4</sub>. Показано, что с увеличением напряженности поля поляризации до  $E_n=5 \cdot 10^6$  В/м улучшаются поляризационные процессы в композиции, а после  $E_n > 5 \cdot 10^6$  В/м по видимому увеличивается концентрация объемных зарядов, а это приводит ухудшению электретных свойств. Наблюдаемый эффект может быть связан с повторным перезахватом электронов в более глубокие ловушки за счет внутреннего электрического поля. Кроме того, интенсивность пиков ТСД, а следовательно, количество стабилизированных зарядов поляризованных при высоких напряженностях выше, чем поляризованных при низких напряженностях.*

При введении значительного количества наполнителей, свойства полимерного материала определяются как структурными изменениями в полимерной матрице, так и изменениями в при поверхностном слое наполнителя. Наполнители влияют на скорость кристаллизации или отвердевания, температуру релаксационных переходов, электрических, механических, теплофизических и других свойств. Для прогнозирования стабильности электретных зарядов и исследования механизма их образования используют метод термостимулированной деполяризации. Одним из методов термоактивационной спектроскопии является метод ТСД, который успешно применяется для исследования зарядовых состояний и релаксационных процессов в диэлектриках [1-3].

Полимерные наноконпозиции были подвергнуты электротермополяризации при температуре  $T_n=353-413$ К и интенсивности электрического поля  $E_n=(3-12) \cdot 10^6$ В/м в течение 1 час с последующим охлаждением под действием электрического поля до комнатной температуры.

Энергия активации максимума рассчитывалась из кривых ТСД по методу температурного положения максимумов тока ТСД :

$$E = k \frac{T_m(T_m - \Delta T)}{\Delta T}$$

Из площади ТСД рассчитана величина накопленного заряда в процессе поляризации образцов.

В результате структурирования на межфазных границах образуются глубокие ловушки для электрических зарядов, о которых свидетельствуют кривые ТСД (рис.1), по смещению температурного положения максимумов.

Из кривых ТСД видно, что в зависимости от  $E_n$  площадь кривых ТСД, из которых вычисляется количество поляризационных зарядов, величина поляризационных зарядов изменяется с экстремумом. Из кривых ТСД видно, что для композиция ПЭ+Сг наблюдается 2 максимума, т.е. при температуре 370К и 403-410К (кривая 2,3). Из рис.1 видно, что количество зарядов  $Q$  увеличивается, а затем постепенно уменьшается. У электретов из поляризационных пленок при высоких напряженностях (кривая 2, 3) начинает проявляться новая область поляризации.

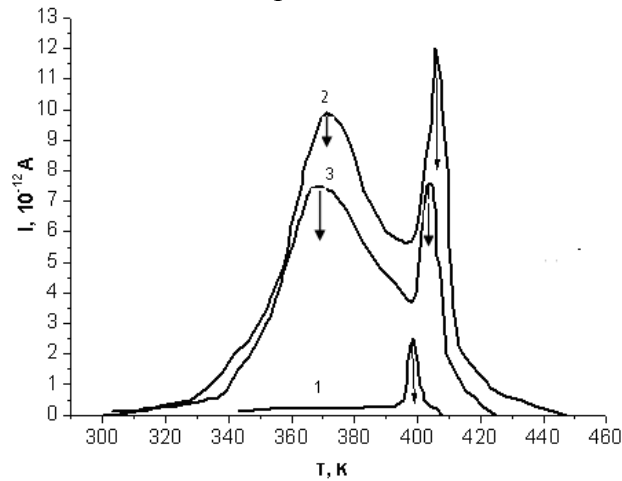


Рис.1. Кривые ТСД снятия для композиции ПЭ+Сг предварительно подвергнутых электротермополяризации при  $T=373K$ , в течение 1 часа  
 1.  $E_n=1 \cdot 10^6$  В/м, 2.  $E_n=4 \cdot 10^6$  В/м, 3.  $E_n=6 \cdot 10^6$  В/м

Кроме того, интенсивность пиков ТСД, а, следовательно, количество стабилизированных зарядов у поляризованных при высоких напряженностях поля поляризации выше, чем поляризованных при низких напряженностях поля поляризации. В таб.1 приведена энергия активации максимума и количество зарядов зависимости от напряженности электротермополяризации.

Таблица 1

$E_n, 10^6$ В/м	1	4		6	
		$T_{max}=370K$	$T_{max}=403-410K$	$T_{max}=370K$	$T_{max}=403-410K$
$E_a, эВ$	2,6	0,27	1,25	0,24	4,6
$Q, 10^{-10}$ Кл	1,89	60,5	23	46	15
$\sigma, 10^{-6}$ Кл/м <sup>2</sup>	0,27	8,64	3,29	6,53	2,12

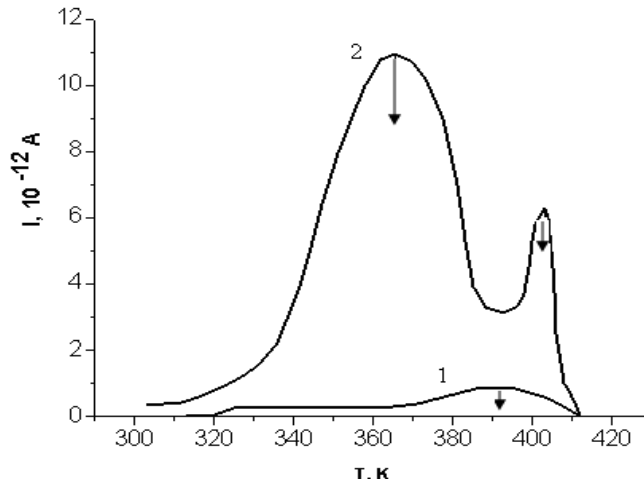


Рис.2. Кривые ТСД снятия для композиции ПЭ+PbCrO<sub>4</sub>, предварительно подвергнутых электротермополяризации при  $T_n=373\text{K}$ , в течение 1 часа  
 1.  $E_n=1 \cdot 10^6 \text{В/м}$ , 2.  $E_n=6 \cdot 10^6 \text{В/м}$

На рис.2 показаны кривые ТСД, снятые для композиции ПЭ+PbCrO<sub>4</sub>, подвергнутых электротермополяризации при температуре  $T_n=373\text{K}$ , в течение 1 часа. Из кривых тока ТСД получена детальная информация о плотности, времени релаксации и энергии активации зарядов, ответственных за электретное состояние. Из кривых ТСД видно, что в зависимости от  $E_n$  площадь кривых ТСД, из которых вычисляется количество поляризационных зарядов, изменяется.

В спектрах тока ТСД электретов из ПЭ+PbCrO<sub>4</sub> после электротермополяризации при напряженности  $E_n=1 \cdot 10^6 \text{В/м}$  наблюдается максимум при температуре 393К (кривая 1), а после электротермополяризации при напряженности  $E_n=6 \cdot 10^6 \text{В/м}$  две максимума 365-402К (кривая 2). У электретов из поляризационных пленок (кривая 2) начинает проявляться новая область деполяризации при 406-410К. В таб.2 приведена энергия активации максимума и количество зарядов в зависимости от напряженности электротермополяризации.

Таблица 2

$E_n, 10^6 \text{ В/м}$	1	6	
		$T_{\max}=365\text{K}$	$T_{\max}=406\text{K}$
$E_a, \text{ эВ}$	0,52	0,25	1,3
$Q, 10^{-10} \text{ Кл}$	5,41	56	10,1
$\sigma, 10^{-6} \text{ Кл/м}^2$	0,77	8,12	1,4

Анализ экспериментальных результатов свидетельствует о том, что тип полимера и состав компонентов композиции существенно влияет на электретное и зарядовое состояние. У электретов из поляризационных пленок начинает проявляться новая область деполяризации. Этот эффект может быть связан с повторным перезахватом электронов в более глубокие ловушки под действием высокого напряженности поля поляризации. Кроме того, интенсивность пиков ТСД, а следовательно, количество стабилизированных зарядов поляризованных при высоких напряженностях выше, чем поляризованных при низких напряженностях.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Годжаев Э.М., Магеррамов А.М., Османова С.С., Нуриев М.А., Аллахьяров Э.А. Зарядовое состояние композиций на основе полиэтилена с полупроводниковым наполнителем // Электронная обработка материалов, 2007, №2, с.84-88.
2. Mitra Tulika, Keller J. M., Bajpai R. A thermally stimulated depolarization current investigation of poly (phenylene oxide): Poly(styrene) polymer blends // Indian: J. Physic., 2005, t.79, № 4, p.361-366.
3. Рамазанов М.А., Гусейнова А.С., Мехтиева С.И. Влияние электротермополяризации на структуры и свойства на основе композиции полиэтилена и  $\text{Co}(\text{AlO}_2)_2$  // Электронная обработка материалов, 2008, №3, с.77-81.

## ПРОСТРАНСТВЕННОЕ СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛЫ СОМАТОСТАТИН

Л.И.Велиева, Н.А.Ганифаева

Бакинский Государственный Университет

e-mail: [Lala\\_Veliyeva@rambler.ru](mailto:Lala_Veliyeva@rambler.ru)

*Методом теоретического конформационного анализа установлена пространственная структура нейропептида сомаостатина, принадлежащего семейству аллатостатинов. На основе расчёта величины внутримолекулярной конформационной энергии проведена количественная оценка стабильности возможных конформационных состояний молекулы в условиях полярной среды.*

**Ключевые слова:** аллатостатины, нейропептиды, пространственное строение, конформационный анализ.

### ВВЕДЕНИЕ

Нейропептиды, семейства аллатостатинов, играют ключевую роль в процессах онтогенеза насекомых [1-3]. Они участвуют в гормональной регуляции насекомых, ингибируя синтез и выделение ювенильных гормонов в процессе их метаморфоза. Изучение геометрических параметров структуры молекулы сомаостатина крайне необходимо для установления принципов функциональной активности природных нейропептидов.

Исследование пространственного строения молекулы сомаостатин проводилось методом теоретического конформационного анализа. На рис.1 приведена линейная последовательность аминокислотных остатков и схема поэтапного расчета нейропептида сомаостатина. Схема разбиения на фрагменты произвольна и согласно результатам многочисленных расчетов не влияет на конечные результаты исследования [4-6]. Нулевые приближения для конформационных состояний фрагментов, используемые в минимизационном процессе, были составлены из *B*, *R*, *L* и *P* форм аминокислотных остатков *Gly*, *Tyr*, *Ser*, *Phe*, *Arg*, *Pro* и *Leu* при различных конформационных состояниях их боковых цепей, соответствующих низкоэнергетическим конформациям метиламидов *N*-ацетил- $\alpha$ -аминокислот [7].

Рис.1. Схема расчета молекулы сомаостатина



**ИЗЛОЖЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ**

Результаты фрагментарного анализа были положены в основу расчета структуры всей молекулы (табл.1-3). Сопоставление полученных данных свидетельствует, что решающее значение в стабилизации пространственной структуры молекулы принадлежат дисперсионным взаимодействиям, характеризующим плотность упаковки аминокислотной последовательности. Наиболее компактные структуры в меньшей мере удовлетворительны в отношении электростатических контактов, менее чувствительных к межатомным расстояниям.

Таблица 1. Низкоэнергетические конформации молекулы соматостатин

Шейп	Конформация	Энергетические вклады (ккал/моль)				
		$E_{\text{нв.}}^*$	$E_{\text{эл.}}$	$E_{\text{торс}}$	$E_{\text{полн}}$	$E_{\text{отн.}}$
<b>Соматостатин</b>						
<i>fefeff</i>	PBRB <sub>1</sub> R <sub>1</sub> B <sub>3</sub> PR <sub>3222</sub> **	-31.2	-1.1	3.8	-28.5	<b>0.3</b>
	RBRB <sub>1</sub> R <sub>1</sub> B <sub>3</sub> PR <sub>3222</sub>	-31.2	-0.7	4.5	-27.4	1.3
	PBRB <sub>3</sub> R <sub>1</sub> R <sub>3</sub> RR <sub>2222</sub>	-28.7	-0.4	2.3	-26.9	1.9
	PBRB <sub>3</sub> R <sub>2</sub> B <sub>3</sub> PR <sub>3222</sub>	-27.6	-0.7	1.7	-26.6	2.1
<i>fefeff</i>	RBRB <sub>1</sub> R <sub>1</sub> B <sub>3</sub> PR <sub>3222</sub>	-36.6	3.6	4.3	-28.7	<b>0.0</b>
	PBRB <sub>1</sub> R <sub>1</sub> B <sub>3</sub> PR <sub>3222</sub>	-35.5	3.4	3.7	-28.4	0.4
	PBRB <sub>3</sub> R <sub>1</sub> R <sub>3</sub> RR <sub>2222</sub>	-31.8	4.5	2.2	-25.0	3.7
<i>feffff</i>	PBRR <sub>1</sub> R <sub>1</sub> R <sub>3</sub> RR <sub>2222</sub>	-32.9	3.6	2.6	-26.7 -	<b>2.0</b>
	RBRR <sub>1</sub> R <sub>1</sub> R <sub>3</sub> RR <sub>2222</sub>	-33.1	3.9	3.0	26.2 -	2.5
	PBRR <sub>1</sub> R <sub>1</sub> B <sub>3</sub> PR <sub>3222</sub>	-32.9	3.5	3.3	26.1 -	2.6
	RBRR <sub>1</sub> R <sub>1</sub> B <sub>3</sub> PR <sub>3222</sub>	-33.1	3.8	3.7	25.6	3.2

\* Энергия водородных связей включена в  $E_{\text{нв.}}$ .

\*\* Индексы 1,2,3 соответствуют значениям углов  $\chi$  в области  $0 \div 120^\circ$ ,  $120 \div -120^\circ$  и  $-120 \div 0^\circ$ , соответственно..

Стабилизирующий эффект от энергии образования водородных связей также невелик, поскольку вычислительный эксперимент был проведен с учетом водной среды, где водородные связи ослаблены. Согласно результатам расчета, полученным после минимизации энергии молекул в пространстве независимых геометрических параметров – двугранных углов  $\omega$ ,  $\varphi$ ,  $\psi$  и  $\chi$ , наиболее предпочтительные конформации, имеющие шейпы основной цепи *fefeff* и *feffff*. Их преимущество перед другими рассчитанными конформациями связано, главным образом с тем, что в них реализуются эффективные стабилизирующие взаимодействия между удаленными в последовательности остатками.

Таблица 2. Двугранные углы (град) молекулы соматостатин

Аминокислота	К о н ф о р м а ц и и		
	<i>Ser</i> <sup>1</sup>	$\varphi=138$ $\psi=-72$ $\omega=181$	$\varphi=-70$ $\psi=-73$ $\omega=175$
<i>Arg</i> <sup>2</sup>	$\varphi=125$ $\psi=164$ $\omega=175$	$\varphi=109$ $\psi=161$ $\omega=179$	$\varphi=94$ $\psi=162$ $\omega=175$
<i>Pro</i> <sup>3</sup>	$\psi=-42$ $\omega=179$	$\psi=-45$ $\omega=177$	$\psi=-54$ $\omega=180$ $\chi=154$
<i>Tyr</i> <sup>4</sup>	$\varphi=-121$ $\psi=160$ $\omega=183$	$\varphi=-118$ $\psi=161$ $\omega=182$	$\varphi=101$ $\psi=-38$ $\omega=177$
<i>Ser</i> <sup>5</sup>	$\varphi=-91$ $\psi=-32$ $\omega=191$	$\varphi=-89$ $\psi=-31$ $\omega=193$	$\varphi=-93$ $\psi=-30$ $\omega=174$
<i>Phe</i> <sup>6</sup>	$\varphi=-70$ $\psi=145$ $\omega=189$	$\varphi=-69$ $\psi=145$ $\omega=189$	$\varphi=-75$ $\psi=-48$ $\omega=178$
<i>Gly</i> <sup>7</sup>	$\varphi=70$ $\psi=-72$ $\omega=181$	$\varphi=71$ $\psi=-74$ $\omega=180$	$\varphi=-67$ $\psi=-57$ $\omega=180$
<i>Leu</i> <sup>8</sup>	$\varphi=-116$ $\psi=-51$ $\omega=174$	$\varphi=-117$ $\psi=-52$ $\omega=174$	$\varphi=-101$ $\psi=-52$ $\omega=178$
Форма	PBRB <sub>1</sub> R <sub>1</sub> B <sub>3</sub> PR <sub>3222</sub>	RBRR <sub>1</sub> R <sub>1</sub> R <sub>3</sub> PR <sub>3222</sub>	PBRR <sub>1</sub> R <sub>1</sub> R <sub>3</sub> RR <sub>2222</sub>

Анализ вкладов межостаточных взаимодействий (табл.6) показал, что центром дисперсионной стабилизации в низкоэнергетических конформациях может быть остаток *Phe*<sup>6</sup>. Суммарная энергия взаимодействий *Phe*<sup>6</sup> с *Tyr*<sup>4</sup>, *Ser*<sup>5</sup> и *Leu*<sup>8</sup> составляет -6.4ккал/моль.

Таблица 3. Вклады межостаточных взаимодействий (ккал/моль) в полную энергию наиболее предпочтительных конформаций молекулы соматостатин

<i>SER</i> <sup>1</sup>	<i>ARG</i> <sup>2</sup>	<i>PRO</i> <sup>3</sup>	<i>TYR</i> <sup>4</sup>	<i>ASP</i> <sup>5</sup>	<i>PHE</i> <sup>6</sup>	<i>GLY</i> <sup>7</sup>	<i>MET</i> <sup>8</sup>	
1.37	-3.17	-0.45	-0.11	-0.04	-0.01	0.00	-0.01	
1.35	-0.43	-0.50	-0.08	-0.06	-0.02	0.01	0.00	<i>SER</i> <sup>1</sup>
1.36	-3.25	-0.29	-0.09	-0.08	0.00	0.00	0.00	
	0.76	-3.53	-2.63	-0.21	-0.04	0.00	-1.39	
	0.74	-4.48	-3.49	0.78	0.11	-0.09	-2.66	<i>ARG</i> <sup>2</sup>
	0.73	-0.30	-2.12	-0.43	-1.28	0.01	0.01	
		0.21	-2.03	-0.17	-0.02	0.00	0.01	
		0.24	-2.51	-0.18	-0.02	0.00	0.01	<i>PRO</i> <sup>3</sup>
		0.94	-3.05	0.13	-1.75	-1.20	-0.33	
			-0.04	-1.99	-2.45	-0.25	-1.25	
			0.11	-2.06	-3.08	-0.24	-0.97	<i>TYR</i> <sup>4</sup>
			0.04	-3.29	-1.81	-0.95	-1.71	
				-0.83	-2.57	-0.47	-1.16	
				-0.82	-2.46	-0.47	-1.09	<i>SER</i> <sup>5</sup>
				-0.81	-2.31	-0.88	-1.50	
					0.60	-0.33	-1.39	
					0.62	-0.34	-1.51	<i>PHE</i> <sup>6</sup>
					0.14	-0.23	-0.83	
						1.30	-0.70	
						1.29	-0.68	<i>GLY</i> <sup>7</sup>
						1.34	-0.55	
							0.14	
							0.14	<i>LEU</i> <sup>8</sup>
							0.23	

\*Примечание: Приведены данные для глобальных конформаций

## ВЫВОДЫ

1. Методом теоретического конформационного анализа установлены низкоэнергетические конформационные состояния молекулы соматостатина.
2. Впервые установлены элементы пространственного строения в состоянии конформационного равновесия - спиральные участки на С-концевом фрагменте и лабильный N-концевой участок. Конформационные состояния последнего разделены невысокими потенциальными барьерами, благодаря чему возможно смещение равновесия в зависимости от условий окружающей среды и специфических межмолекулярных взаимодействий.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Konopinska D., Rosinski G., Sobotka W. "Insect peptide hormones, an overview of the present literature". *Int. J. Pept. Protein Res.*, 1992, v.39, N.1, p.1-11
2. Menn J.J.(Ed.) "Insect Neuropeptides: Chemistry, Biology and Action". *Amer. Chem. Soc.*, Washington D.C.,1991, 254 pp.
3. Rankin S.M., Palmer J.O., Yagi K.J., Scott G.L., Tobe S.S. "Allatostatic and allatropic factors in the brain of the desert locust, schistocerca-gregaria". *Belgian Journal of Zoology*, 1995, v.125, N.1, p.243-249
4. Полозов Р.В. *Метод полуэмпирического силового поля в конформационном анализе биополимеров*, М., "Наука", 1981, 120 с.
5. Попов Е.М. *Структурная организация белков*, М., "Наука", 1989, 352 с.
6. Попов Е.М. "Quantative approach to conformations of Peptides". *Int. J. Quant. Chem.*, 1979, v.16, p.707-737



7. Levis P.N., Momany F.A., Scheraga H.H. "VI. Conformational energy analysis of the N-acetyl N-methyl amides of the twenty naturally occurring amino acids". *Israel J. Chem.*, 1973, v.11, p.121-152

## НЕКОТОРЫЕ ПРАКТИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ

Мамедов В.Б., Эйвазов Э.А., Гусейнов К.Д.

*(Азербайджанский Государственный Педагогический Университет)*

Открытие в конце 1986 года нового класса высокотемпературных сверхпроводящих материалов радикально расширяет возможности практического использования сверхпроводимости для создания новой техники и окажет революционизирующее воздействие на эффективность отраслей народного хозяйства.

Явление, заключающееся в полном исчезновении электрического сопротивления проводника при его охлаждении ниже критической температуры, было открыто в 1911 году, однако практическое использование этого явления началось в середине шестидесятых годов, после того как были разработаны сверхпроводящие материалы, пригодные для технических применений. В связи с тем, что критические температуры этих материалов не превышали 20К, все созданные сверхпроводниковые устройства эксплуатировались при температурах жидкого гелия, т.е. при 4-5К. Несмотря на дефицитность этого хладагента, высокие энергозатраты на его ожижение, сложность и высокую стоимость систем теплоизоляции по целому ряду направлений началось практическое использование сверхпроводимости. Наиболее крупно-масштабными применениями сверхпроводников явились электромагниты ускорителей заряженных частиц, термоядерных установок, МГД-генераторов. Были созданы опытные образцы сверхпроводниковых электрогенераторов, линий электропередачи, накопителей энергии, магнитных сепараторов и др. В последние годы в различных странах началось массовое производство диагностических медицинских ЯМР-томографов со сверхпроводниковыми магнитами.

Открытие высокотемпературных сверхпроводников, критическая температура которых превышает температуру кипения жидкого азота, принципиально меняет экономические показатели сверхпроводниковых устройств, поскольку стоимость хладагента и затраты на поддержание необходимой температуры снижаются в 50-100 раз. Кроме того, открытие высокотемпературной сверхпроводимости (ВТСП) сняло теоретический запрет на дальнейшее повышение критической температуры с 30 - вплоть до комнатной. Так, со времени открытия этого явления критическая температура повышена с 30 – 130К. [1]

В настоящее время наиболее актуальными являются создание конкретных технических изделий на основе ВТСП материалов в слаботочной технике, т.е. в микроэлектронике и вычислительной технике. [2]

Предполагается разработка и освоение трех классов электронных сверхпроводниковых приборов:

- СКВИДы (приборы на основе джозефсоновских переходов) как детекторы слабых магнитных полей для применения в медицине (магнитоэнцефалография), геологии и геофизике (поиск полезных ископаемых, изучение геологического строения земной коры, прогноз землетрясений), материаловедении (неразрушающий контроль мате

риалов, конструкций), военной технике (обнаружение магнитных аномалий, в частности, глубинных подводных лодок), научных исследованиях, связи и навигации.

Широкое освоение и внедрение СКВИД магнитометрического метода измерений позволит в короткий срок качественно изменить многие виды измерительной техники, повысить в сотни и более раз чувствительность приборов и точность измерений, подвести измерительные возможности широкой номенклатуры датчиков к теоретическому пределу, вывести измерительную технику на высший качественно новый уровень.

- Аналого-цифровые приборы (АЦП), использующие сверхбыстрые (доли пикосекунды) переключения от джозефсоновского к "гиверовскому" режиму работы, для применений в новейших системах связи, цифровых вычислительных устройствах для обработки и анализа аналоговых сигналов и др.

- Приборы, основанные на эффекте появления, на джозефсоновском переходе постоянного напряжения при подаче на него СВЧ сигнала, для использования в прецизионных измерительных системах (например, эталон Вольта).

Применение ВТСП в сильноточной технике будет иметь наиболее радикальные экономические последствия для народного хозяйства. Это направление включает в себя создание электроэнергетических устройств и систем, вырабатывающих, передающих и преобразующих электроэнергию в промышленных масштабах. Основой этого направления является способность сверхпроводников нести без потерь высокие плотности ( $10 \cdot 9 - 10 \cdot 10 \text{ А/м}^2$ ) транспортного тока в сильных магнитных полях при температурах ниже критической. Синхронные сверхпроводящие генераторы для ТЭС, АЭС и ГЭС будут иметь на 0,5-0,8% более высокий КПД и на 30% меньшие весогабаритные показатели. Предполагается создание сверхпроводниковых индуктивных накопителей энергии, которые по сравнению с гидроаккумулирующими станциями, единственным типом накопителей энергии, нашедшим промышленное применение в энергетике, будут обладать существенно более высоким КПД (до 97-98% вместо 70%). Предполагается создание широкой гаммы электротехнических и электроэнергетических устройств. Предусматривается разработка и выпуск сверхпроводящих устройств и систем, создание которых экономически и технически целесообразно на основе традиционных гелиевых сверхпроводников. Это сверхпроводящие сепараторы, ЯМР-томографы, магнитные системы для удержания плазмы в ТОКОМАКах и ускорителях заряженных частиц и др. Создание таких систем кроме реального экономического эффекта от их внедрения заложит необходимую техническую и технологическую основу для быстрого перехода на ВТСП по мере создания технологичных ВТСП проводников.

Широкое применение ВТСП найдет в вычислительной технике. Уже в настоящее время разработаны, изготовлены и испытаны макеты ячейки памяти, сверхчувствительный элемент считывания на ВТСП пленках с кратным снижением энерговыделения по сравнению с полупроводниковыми усилителями считывания, сверхскоростные линии связи, которые позволят увеличить производительность систем в 10 - 100 раз. Внедрение ВТСП в вычислительную технику даст кратное увеличение ее быстродействия и степени интеграции. Так, переход на ВТСП соединения и снижение рабочей температуры полупроводниковых суперЭВМ, позволит повысить их производительность с  $10 \cdot 9$  до  $10 \cdot 12$  операций/сек. Одной из перспективных областей применения ВТСП будет космическая техника - бортовые и "забортовые" измерительная аппаратура и вычислительные системы (возможна работа без специальных устройств охлаждения, так как "тенева" температура у спутников - 90К). При этом при переходе на ВТСП удельная масса охлаждающей системы снизится в 50 раз, объем уменьшится в 1000 раз, надежность возрастет в 10 раз.

Широкие перспективы использования ВТСП открываются в СВЧ-технике и в создании датчиков видимого и ИК-диапазона с высокой чувствительностью.

#### Литература

- [1] Гинзбург В.Л. УФН 2000, №3, Т. 184  
 [2] Мошалков У.У. «Высокотемпературные сверхпроводники», М. 1987 г.

## СПОСОБЫ ЗАМЕДЛЕНИЯ ДЕГРАДАЦИИ И ЗАЩИТЫ ВТСП-МАТЕРИАЛОВ

Мамедов Ф.Ш.

*Азербайджанский Архитектурно-Строительный Университет*

Наиболее очевидный и поэтому наиболее широко исследованный способ защиты от внешнего воздействия-нанесения защитных покрытий. Напыление различных металлов и их влияние на ВТСП-свойства изучались в работах [1, 4]. При этом было установлено, что из всего исследованного ряда напыляемых металлов- Ag, Au, Pd, Cu, Rb, Bi и La- лишь первые два не подавляют сверхпроводимость в подложках из YBCO [1, 5] и LSCO [1]. Все остальные металлы подавляют сверхпроводимость и мало пригодны для использования и качестве защитных покрытий. Основная причина подавления сверхпроводимости - взаимодействие металла с кислородом ВТСП-подложки, в результате которого наблюдается образование соответствующих оксидов, удаление кислорода из подложки, восстановление меди до  $Cu^+$  и, как следствие, потеря сверхпроводимости. Что касается Ag и Au, то они не взаимодействуют с подложкой и совершенно не влияют на сверхпроводящие свойства керамик YBCO и LSCO в то же время при напылении Ag на керамику BSCCO [4] отмечали, что, хотя оксиды серебра не образуются, наблюдается восстановление  $Cu^{2+} \rightarrow Cu^+$  и ухудшение сверхпроводимости. Необходимо отметить, что во всех этих работах влияние на скорость деградации не изучалось. Такие исследования были приведены при нанесении защитных органических пленок [2, 3]. В работе [2] изучалось осаждение плазмохимическим методом защитной пленки  $CHF_3$  на керамику YBCO. Наблюдали очевидное замедление взаимодействия с водой. (табл.). В то же время увлечение сверхпроводящей фазы. Осаждение из раствора бутадиена и сополимера стирола в  $CCl_4$  пленки толщиной 0,1 мм привело к существенному повышению стабильности керамики YBCO [86]: после погружения исходной керамики на 15 мин в воду при 100 °C она практически полностью потеряла сверхпроводимость (объем ВТСП-фазы упал до 2-4% от начального), в то время как защищенная пленкой керамика после аналогичного воздействия потеряла лишь 1-2% начального объема ВТСП-фазы.

Так как проникновение воды в глубь керамики идет через поры, то одним из способов защиты является их заполнение или устранение. Удобным веществом для этого оказалось Ag [5]. Добавление  $Ag_2O$  при синтезе керамики YBCO не приводит к внедрению серебра в структуру и, как следствие, не нарушает сверхпроводимости. В то же время серебро заполняет межзеренные пространства и значительно уменьшает количество углеродных примесей на ГЗ. При некоторой оптимальной концентрации [5] приходится даже не большое  $T_c$ . Так как при этом повышается содержание кислорода, т.е. уменьшается количество кислородных вакансий, то можно ожидать и замедления деградации таких керамик. С целью уменьшения концентрации Vö в [2] использовалось частичное замещение F вместо O и Mn вместо Cu. Это дало хорошие результаты; после замещения  $T_c$  керамики не изменилась через 1 ч воздействия паров воды при 200 °C,

тогда как исходная керамика при таком же воздействии полностью потеряла сверхпроводимость [5].

Хорошие результаты дала обработка керамики YBCO в атмосфере  $F_2$  [5] при 20-100 °C. После выдержки обработанного образца в течение 4 мес в насыщенных парах воды на дифрактограмме не было обнаружено пиков побочных фаз; данные ОЭС свидетельствуют об отсутствии углеродородных примесей в объеме образца. К сожалению, результаты изменений электрофизических или магнитных характеристик не приведены.

Таблица

Изменения характеристик керамики YBCO после 1 ч выдержки в воде при  $T_{ком}$  до и после нанесения защитного покрытия [2]

Образец	До взаимодействия		После взаимодействия	
	$T_c$	( $T_{ком}$ )	$T_c$	( $T_{ком}$ )
YBCO	80	1,84	17	26,5
YBCO с $CHF_3$	80	1,66	80	1,76

Улучшение стабильности наблюдали керамики стали прочнее и тверже, в них практически не было пор, скорость деградации в воде при 30%-ном замещении уменьшилась в 4 раза. Авторы [6] внесли коррективы в процесс синтеза с целью уменьшения содержания ВА, который, как мы уже видели, наиболее сильно взаимодействует с водой. Им удалось добиться получения фактически сплошных керамик с ориентированными зернами. От этих керамик можно ожидать не только хорошей стабильности, но и повышения плотности критического тока; этот вопрос, к сожалению, не изучался.

Подводя итоги, можно сказать, что для повышения стабильности ВТСП керамик и пленок необходимо, во-первых, ограничивать взаимодействие с внешней средой, для чего нужно уменьшить пористость образца и наносить защитные покрытия; во-вторых, (для YBCO) повышать качество образца с целью уменьшения концентрации кислородных вакансий. Гораздо более сложным является вопрос о защите с целью получения высоких значений  $J_c$ . Здесь первым мероприятием должен стать «чистый» синтез, т.е. методика, при которой не на одной стадии синтеза нет контакта ингредиентов с внешней средой, либо применение каких-то способов очистки деградировавших зерен. Именно это область изучения и борьбы с деградацией представляется наиболее важной в данный момент.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Waganer T.J., Gao G., Vitomirov L.M. et.al. Phys. Rev. B. 1988. V.38 №1. P.232
2. Morohashi S., Tamura H., Yoshida A. et al. Appl. Phys. Letti. 1988. V. 52 №22. P. 1897
3. Borns R.Z., Laudise R. A. Appl. Phys. Letti. 1988. V. 51 №17. P. 1373
4. Lindberg P.A.P., Shen. Z-X., Lundau L. et.al. Appl.Phys. Letti. 1988. V. 53 №6. P. 529
5. Nishi G., Moriya S., Tokunaga S. Mater. Letti. 1988. V. 7. №6. P. 596
6. Murugaraj P., Maier J., Rabenau A. Solia State Commun. 1988. V.66. №7. P. 735

## АКУСТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА РАСТВОРОВ БИОЛОГИЧЕСКИХ МАКРОМОЛЕКУЛ

С.Х. Садыхова Н.А. Ганифаева

Бакинский Государственный Университет

[gomesh2006@mail.ru](mailto:gomesh2006@mail.ru)

*С помощью импульсной ультразвуковой установки изучено затухание ультразвука в водных растворах белков в диапазоне частот 12-68 МГц. Установлена взаимосвязь между коэффициентом поглощения и конформационными особенностями исследованных белков. Мышечные и глобулярные белки (актин, миозин, актомиозин) отличаются между собой по поглощению ультразвуковых волн в указанном диапазоне частот.*

**Ключевые слова:** акустические параметры, Г-актин, Ф-актина, ультраакустические методы

Важнейшей проблемой современной физики является построение общей теории жидкого состояния вещества. До настоящего времени такой теории нет и для её создания необходимо накопление разнообразных экспериментальных сведений о строении жидкостей.

Существуют различные физические методы исследования жидкостей (оптическая спектроскопия, ЯМР, ЭПР и др.), среди которых определенное место занимают ультраакустические методы. Основными информационными величинами при этом является скорость распространения ультразвуковых волн  $c$  и их поглощение  $\alpha$ .

Проводя исследование основных акустических параметров в области ультразвуковых волн, т.е. работая на длинах волн, сравнимых с размерами комплексов молекул и даже с размерами самих молекул, удастся получить богатую информацию о механизме переноса акустической энергии молекулами вещества, термодинамических и кинетических параметров сред, внутримолекулярных и межмолекулярных процессах, кинетике необратимых процессов, протекающих в них.

В этом аспекте значительный интерес представляет изучение акустических параметров биологически активных веществ, которое приобретает особую актуальность в связи с успешным применением некавитационного ультразвука в биологии и медицине. Следует отметить, что имеется лишь очень небольшое число исследований, посвященных вопросам молекулярной акустики биополимеров и биологических жидкостей.

Ряд исследований, проведенных с антителами, которые обычно используются как модель протеинов, связывает изменение затухания ультразвуковых волн с конформационными изменениями макромолекул с гидратацией рН среды. В нашей работе исследовались фибриллярные белки.

Для измерения затухания ультразвуковых волн использовалась ультразвуковая установка разработанная специально для малых объемов жидкости ( $5-10\text{см}^3$ ). Установка работала по принципу переменного акустического пути с использованием двух кварцевых преобразователей. Диапазон частот составлял 12-68 МГц, погрешность измерений была около  $\pm 5\%$ . Нами изучались водные растворы мышечных белков (актина, миозина и актомиозина). Изучение структуры и физико-химических особенностей белков мышцы тесно связано с расшифровкой механизма мышечного сокращения.

Как известно, актин в растворе может существовать в глобулярном и фибриллярном состоянии. Способность взаимного перехода актина из глобулярного в фибриллярное состояние определяет его существенную роль в элементарном мышечном сократительном акте.

Глобулярный актин (Г-актин) находится в мономерной или димерной форме. Под влиянием солей и в зависимости от рН среды Г-актин подвергается полимеризации, превращаясь в фибриллярную модификацию—(Ф-актин), характеризующийся большим молекулярным весом ( $3-8 \cdot 10^6$ ). Согласно измерениям двойного лучепреломления, Ф-актин представляет собой длинную полупрозрачную нить, состоящую из многих сотен молекул Г-актина. Миозин составляет основную часть миофибрилл. Он является носителем аденозинтрифосфатазной активности и легко соединяется с актином с образованием актомиозина. Молекулярный вес миозина 450-500 тыс. Согласно рентгеноструктурным исследованиям, полипептидные цепи, образующие миозин свернуты в  $\alpha$ -спираль.

Актомиозин является продуктом соединения актина и миозина и сочетает в себе физико-химические и ферментативные свойства обоих белков.

Переходим к изложению результатов наших исследований. Измерения затухания проводились при  $20^{\circ}\text{C}$  и рН7. Затухание ультразвуковых волн в водном растворе Ф-актина значительно превышает затухание в соответствующем растворе Г-актина. Следует отметить, что для Г-актина в использованном диапазоне частот характерным является, и больший коэффициент поглощения ультразвука (почти в 2 раза на частоте 12 МГц) по сравнению для соответственных водных растворов альбумина, близкого по молекулярному весу к актину.

Нами была исследована зависимость величины затухания  $\alpha/f^2$  от концентрации Г- и Ф-актина, которая в пределах 0,16-0,34 г/100 мл, оказалась почти линейной.

Ход кривых зависимости  $\alpha/f^2$  от частоты ультразвука для водных растворов миозина такой же, как и для актина. Однако для получения таких кривых оказалась необходимым увеличить концентрацию миозина.

В изученных нами белковых растворах обнаружено значительное отклонение измеренного коэффициента поглощения от коэффициента поглощения, вычисленного на основании классической формулы Стокса.

Для того, чтобы получить представление о форме релаксационных спектров для мышечных белков, мы вычислили релаксационную часть поглощения и представили релаксационные спектры исследуемых мышечных белков. Оказалось, что максимумы релаксационных спектров актина и миозина лежат за пределами измеряемого диапазона частот и сдвинуты в область более низких частот. Что касается актомиозина, то максимум релаксационного спектра последнего в отличие от актина и миозина находится в измеряемом диапазоне частот. Размытость этого максимума, вероятно связана со значительным изменением конформаций белков, участвовавших в образовании комплекса актина и миозина-актомиозина.

### Литература

1. Михайлов И.Г. Основы молекулярной акустики, М., «Наука», 1964, 254 с.
2. Зарецкий А.А., Фурсов К.П. Импульсная установка для измерения затухания ультразвуковых волн в биологических растворах. Ультразвуковая техника, 1968, 2, 39-46
3. И.Г. Михайлов, Н.М. Федорова. Изучение структурных изменений концентрированных растворов полимеров при помощи ультразвука. Акуст м., 1963, 9, 1, 50-53

## О ВАРИАЦИОННОМ МЕТОДЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ЖИДКОСТЕЙ И РАСТВОРОВ

Усейнова С.М.

*Бакинский Государственный Университет  
nushana\_kasimova@yahoo.com*

### РЕЗЮМЕ

Теоретической основой изучения поляризационных, релаксационных и диэлектрических свойств жидкостей и растворов являются теории Дебая, Онзагера, Фрелиха и Кирквуда.

В диапазоне СВЧ, волноводные методы исследования являются одними из наиболее обоснованных. Однако технические трудности и ограниченность сферы применения являются их недостатком. С целью устранения этих недостатков, был разработан новый вариационный метод исследования диэлектрических характеристик жидкостей и растворов в диапазоне СВЧ и математически рассчитаны уравнения, связывающие диэлектрические параметры с экспериментальными данными.

Для описания диэлектрических свойств полярных жидкостей и растворов в области высоких частот, где имеет место дисперсия электромагнитных волн, обычно используют выводы релаксационной теории Дебая, [1-4]согласно которым:

$$\frac{\dot{\epsilon} - 1}{\dot{\epsilon} + 2} = \frac{4\pi}{3} n \left( \alpha + \frac{\mu^2}{3kT} \cdot \frac{1}{1 + i\omega\tau^*} \right) \quad (1)$$

где:  $\omega$  - круговая частота;

$\dot{\epsilon} = \epsilon' - i\epsilon''$  - комплексная диэлектрическая проницаемость вещества;

$\epsilon'$  - диэлектрическая проницаемость;

$\epsilon''$  - диэлектрические потери;

$n$  - число молекул  $1\text{см}^3$ -е диэлектрика;

$\mu$  - дипольной момент молекулы;

$\tau^*$  - молекулярное или собственное время дипольной релаксации;

$$\tau^* = \frac{4\pi\eta a^3}{kT} \quad (2)$$

где  $\eta$  - макроскопическая вязкость жидкости или растворителя,  $a$  - эффективный радиус молекул,  $k$  - постоянная Больцмана,

$k \cdot T$  - тепловая энергия молекул.

При  $\omega = 0$  и  $\omega \rightarrow \infty$ ,  $\dot{\epsilon}$  становится вещественной и равной, соответственно  $\epsilon_0$  - предельной низкочастотной, т.е. статической диэлектрической проницаемости и  $\epsilon_\infty$  - предельно высокочастотной, т.е. измеряемой в оптическом диапазоне волн диэлектрической проницаемости. Используя эти обозначения в уравнении (1), получим:

$$\dot{\epsilon} = \epsilon' - i\epsilon'' = \epsilon_\infty + \frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{1 + i\omega\tau} \quad (3)$$

Здесь  $\tau = \tau^* \cdot \frac{\epsilon_0 + 2}{\epsilon_\infty + 2}$  - является макроскопическим временем релаксации, харак-

теризующим время установления или спада электрической поляризации во всем объеме

диэлектрика при наложении или снятии внешнего электрического поля. Разбивая уравнение (3) на мнимую и вещественную его части:

$$\varepsilon' = \varepsilon_{\infty} + \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_{\infty}}{1 + (\omega\tau)^2} \quad (4)$$

$$\varepsilon'' = \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_{\infty}}{1 + (\omega\tau)^2} \cdot \omega\tau$$

Из совместного решения уравнений (4):

$$\left( \varepsilon' - \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_{\infty}}{2} \right) + \varepsilon''^2 = \left( \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_{\infty}}{2} \right)^2 \quad (5)$$

В практике высокочастотных измерений диэлектрических параметров полярных жидкостей и растворов часто используются методы, основанные на измерение отражения. Электромагнитной волн от короткозамкнутые на конце волноводной или коаксиальной ячейки с исследуемой жидкостью, при условии, что толщина жидкости в ячейке регулируема [1-4]. Обладая сравнительно высокой точностью измерения, возможностью учета систематических ошибок, эти методы, однако весьма трудоемки и требуют нахождения всей экспериментальной зависимости модуля коэффициента отражения электромагнитной волны  $|\rho|$  или коэффициента стоячей волны  $\eta$ , от толщины слоя жидкости в ячейке  $l$ , что технически не всегда возможно. Кроме того, методы переменной толщины имеют ограниченную сферу применения; они удобны лишь для измерения диэлектрических характеристик жидкостей, обладающих в диапазоне сверхвысоких частот средними потерями. При заметных диэлектрических потерях в жидкости зависимость  $|\rho|$  или  $\eta$  от толщины слоя в жидкости  $l$  имеет один максимум и минимум в своем ходе, что соответственно исключает возможность применения метода переменных толщин [1-2], базирующегося на измерении расстояния между минимумами зависимости  $|\rho|$  или  $\eta$  от  $l$ , и отношения  $|\rho|$  или  $\eta$  в точках максимума этой зависимости. Как показано в [5], из-за больших систематических ошибок указанные методы [1-2] неприемлимы также и для измерения диэлектрических постоянных слабополярных жидкостей обладающих в диапазоне сверхвысоких частот малыми потерями.

Разработанный вариационный метод оценки диэлектрической проницаемости  $\varepsilon'$  и диэлектрических потерь  $\varepsilon''$  полярных жидкостей свободен от выше перечисленных недостатков. Он основан на измерении толщины слоя жидкости в ячейке, при котором имеет место минимум амплитуды отраженной волны  $|\rho|$  или коэффициента стоячей волны  $\eta$  и величины  $\eta_m$  при этой толщине жидкости соответствующие расчеты привели к следующим уравнениям:

$$\varepsilon_1 = \frac{\varepsilon' - (\lambda/\lambda_0)^2}{1 - (\lambda/\lambda_0)^2}; \quad \varepsilon_2 = \frac{\varepsilon''}{1 - (\lambda/\lambda_0)^2} \quad (6)$$

а также,

$$\begin{aligned} \varepsilon' &= (1 - tg^2 \Delta/2) \\ \varepsilon'' &= 2(\lambda/\lambda_g)^2 \cdot tg \Delta/2 \end{aligned} \quad (7)$$



где  $\lambda$  – длина электромагнитной волны в свободном пространстве при отсутствии среды;  $\lambda_0$  - критическая длина волны, определяемая размерами волновода,  $\lambda_g$  - длина электромагнитной волны в рассматриваемом волноводе,  $\Delta = \arctg \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1}$  ;

Так как значения  $\lambda_b$  и  $\lambda_0$  обычно известны, то задача измерения  $\epsilon'$  и  $\epsilon''$  с использованием полученных уравнений сводится к определению значений  $\lambda_g$  и  $\tg \Delta/2$  исследуемой жидкости

### Литература

1. Дебай П. Полярные молекулы. М.-Л., 1931. 280 с.
2. Фрелих Г. Теория диэлектриков. М., 1980, 325 с.
3. Шахпаронов М.И. Методы исследования теплового движения молекул и строение жидкостей. М., 1983, 350 с.
4. Усейнова С.М., Касимов Р.М. «Измерение диэлектрических коэффициентов полярных жидкостей на СВЧ с применением универсальных номограмм». Ж. «Измерительная техника» , №2, 1975, с. 80-82

## ГРАФИЧЕСКИЕ СПОСОБЫ ПРИМЕНЕНИЯ ВАРИАЦИОННОГО МЕТОДА ПРИ ОПРЕДЕЛЕНИИ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ

Усейнова С.М.

nushana\_kasimova@yahoo.com

Бакинский Государственный Университет

### РЕЗЮМЕ

В диапазоне СВЧ, волноводные методы исследования являются одними из наиболее обоснованных. Однако технические трудности и ограниченность сферы применения являются их недостатком. С целью устранения этих недостатков к разработанному ранее вариационному методу исследования диэлектрических характеристик жидкостей и растворов в диапазоне СВЧ были предложены графические способы применения вариационного метода. Построены универсальные номограммы, напрямую связывающие значения диэлектрических характеристик с экспериментальными данными, которые носят универсальный характер; они не зависят от частоты, при которой ведется измерение и могут быть применены при измерении диэлектрических параметров полярных жидкостей в свободном пространстве и в коаксиальных системах.

В практике высокочастотных измерений диэлектрических характеристик полярных жидкостей и растворов используемые волноводные методы, основанные на измерении отражения электромагнитной волны от короткозамкнутой на конце волноводной или коаксиальной ячейки с исследуемой, при условии, что толщина слоя жидкости в ячейке регулируема [1-3]. Обладая весьма высокой степенью точности измерения, возможностью учета систематических ошибок и пр., но весьма трудоемки, требуют нахождения всей экспериментальной зависимости модуля коэффициента отражения электромагнитной волны  $|\rho|$  или  $\eta$  коэффициенты стоячей волны от толщины слоя жидкости в ячейке  $l$ , что технически не всегда возможно, в особенности в диапазоне де

циметровых и метровых волн. Кроме того, методы переменной толщины имеют ограниченную сферу применения; они удобны лишь для измерения диэлектрических характеристик жидкостей, обладающих в диапазоне сверхвысоких частот средними потерями. При заметных диэлектрических потерях в жидкости зависимости  $|\rho|$  или  $\eta$  от  $l$  имеют лишь один максимум и минимум в своем ходе, что, естественно, исключает возможность применения этих методов.

Разработанный новый вариационный высокочастотный метод измерений диэлектрических характеристик полярных жидкостей и растворов свободен от перечисленных выше недостатков. Для его применения достаточен наличие лишь одного минимума в зависимости  $|\rho|$  или  $\eta$  от  $l$ . Математическое развитие данного метода позволили получить уравнения напрямую связывающие экспериментальные данные с диэлектрическими параметрами ( $\varepsilon'$  - диэлектрическая постоянная и  $\varepsilon''$  - диэлектрические потери):

$$\varepsilon_1 = \frac{1-y^2}{u^2}; \quad \varepsilon_2 = \frac{2y}{u^2} \quad (1)$$

Здесь

$$\varepsilon_1 = \frac{\varepsilon' - p}{1 - p}; \quad \varepsilon_2 = \frac{\varepsilon''}{1 - p} \quad (2)$$

где

$$p = \left( \frac{\lambda}{\lambda_0} \right)^2, \quad u = \frac{\lambda_g}{\lambda_b}; \quad y = tg \Delta / 2; \quad \Delta = arctg \varepsilon / \varepsilon_1 \quad (3)$$

и  $\lambda_0$  - длина электромагнитной волны в вакууме,  $\lambda_0 = 2a$  - критическая длина волны в волноводе ( $a$  - размер волновода)  $\lambda_b = \frac{\lambda}{\sqrt{1-p}}$  - длина электромагнитной волны в пустом волноводе,  $\lambda_g$  - длина электромагнитной волн в рассматриваемом волноводе  $y = tg \frac{\Delta}{2}$ . Уравнения (1) и (2) могут быть представлены в ином виде:

$$\varepsilon' = (\lambda/\lambda_0)^2 + (\lambda/\lambda_g)^2 (1 - tg \Delta / 2) \quad (4)$$

$$\varepsilon'' = 2(\lambda/\lambda_g)^2 \cdot tg \Delta / 2 \quad (5)$$

Наиболее удобным способом решения уравнений (1-5) оказался графический метод.

$y = tg \frac{\Delta}{2}$  - параметр, характеризующей степень затухания электромагнитных волн в волноводе с исследуемой средой и лежит в пределах от 0 до 0,5 единиц [3].

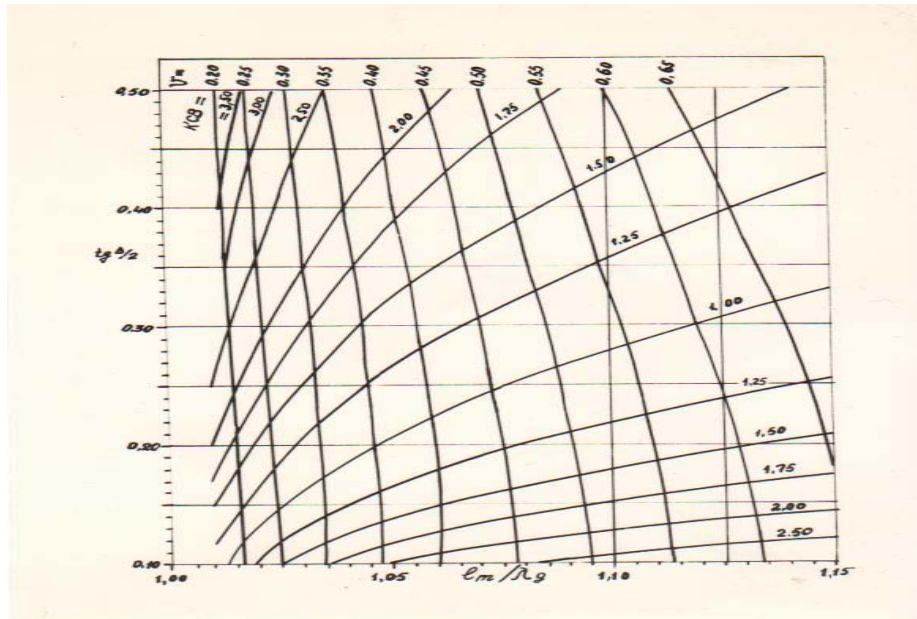


Рис. 1 Номограмма к графическому методу вычисления  $\lambda_g$  и  $tg\Delta/2$  по экспериментальным значениям  $l_m$  и  $\eta_m$ , при толщине слоя жидкости в волноводной ячейке, при которой имеет место первый минимум зависимости  $\eta$  от  $l$ . В плоскости координат  $[x = l_m / \lambda_g ; y = tg\Delta/2]$ .

Для построения универсальных графиков  $\eta$  номограем0 для определения  $\varepsilon'$ ,  $\varepsilon''$ ,  $\lambda_g$  и  $tg\Delta/2$  по экспериментальным данным о  $\eta_{m1}$  и  $l_{m1}$ , функции (1, 2 и 4,5) были табулированных в рассчитанных пределах. На рис.1 представлены в плоскости координат  $[x; y]$  номограммы функций  $\nu = l_m / \lambda_b$  и  $\eta_m$  от  $x = l_m / \lambda_g$  и  $y = tg\Delta/2$  для первого минимума зависимости коэффициента стоячей волны  $\eta$  от толщины слоя жидкости  $l$ . При использовании номограммы (рис.1) методика вычисления  $\lambda_g$  и  $tg\Delta/2$ , следовательно,  $\varepsilon'$  и  $\varepsilon''$  исследуемой жидкости существенно упрощается. Если известны  $l_{m1}$  и  $\eta_{m1}$  для первого минимума зависимости  $\eta$  от  $l$ , то ордината точки пересечения двух кривых, соответствующих найденным экспериментальным значениям  $l_m$  и  $\eta_m$  дает нам значение  $tg\Delta/2$ , тогда как абсцисса этой точки – отношение  $l_m / \lambda_g$ , из которого может быть найдена  $\lambda_g$ . Определенные подобным образом  $\lambda_g$  и  $tg\Delta/2$  используются затем в (4) и (5) для вычисления  $\varepsilon'$  и  $\varepsilon''$  [4].

Следует отметить, что использование при построении номограммы (рис.1). приведенных параметров, придает номограмме универсальный характер; они не зависят от частоты, при которой ведется измерение и могут быть применены при измерениях диэлектрических параметров полярных жидкостей в свободном пространстве и в коаксиальных системах.

### Литература

1. Дебай П. Полярные молекулы. М.-Л., 1931. 280 с.
2. Фрелих Г. Теория диэлектриков. М., 1980, 325 с.
3. Шахпаронов М.И. Методы исследования теплового движения молекул и строение жидкостей. М., 1983, 350 с.

4. Усейнова С.М., Касимов Р.М. «Измерение диэлектрических коэффициентов полярных жидкостей на СВЧ с применением универсальных номограмм». Ж. «Измерительная техника», №2, 1975, с. 80-82

## TƏZYİQİN AMORF METALLİK Fe-Ni-Si-B ƏRİNTİLƏRİN MAQNİT XARAKTERİSTİKALARINA TƏSİRİ

T.M.Pənahov, V.İ.Əhmədov, Z.S.Musayev

AzMIU "Fizika" kafedrası, AzMIU, "Metal və ərintilərin fizikası" ETL

İşdə amorf ərintinin quruluş halı hidrostatik təzyiqlə tətbiq etməklə dəyişdirilərək ərintinin quruluş və maqnit tədqiqi aparılmışdır. Təzyiqlə tətbiq edilməsi nanoməsələlərin ölçülərini azaldaraq onların sərhədləri arasındakı orta məsafə artırır. Təzyiqlə təsiri nəticəsində öyrənilən nümunələrdə maksimal maqnit induksiyanın artması, qalıq induksiya isə azalması aşkar edilmişdir. İşdə amorf ərintinin maqnit xassələrinin, təzyiqlə təsiri nəticəsində dəyişməsinin nanoməsələliklə mümkün əlaqəsi araşdırılır.

Amorf fazanın stabilizatoru rolunu oynayan silisium və bor kimi qeyri maqnit əlavələr daxil etməklə dəmir qrupu maqnit metalları əsasında maqnit amorf ərintilərin alınması, tədqiqi və tətbiqinə son illər xeyli yer verilir. Bu obyektlərə olan elmi və texniki maraq onların fiziki xassələri- yüksək mexaniki, elektrik, korroziya və maqnit xarakteristikalarının unikal uzlaşması- ilə əlaqədardır [1]. Amorf ərintilər arasından maqnit xassələrinə görə kiçik koersitiv qüvvəyə və yüksək doyma induksiyasına malik, texniki cəhətdən mühüm maqnit yığma material olan "ferromaqnit metal (Fe, Co, Ni-70%)-qeyri-metal (B, Si, C-10-30%)" tip ərintilər xüsusi ilə fərqlənirlər. Amorf ərintilərin maqnit və həmçinin, digər xassələrinə onların quruluş-dinamik xarakteristikaları- ərintinin "ideal" amorf quruluşdan fərqi xarakterizə edən "qüsurlar" təsir edir. Buraya klasterlər, tərkibin bu və ya digər komponentlə doyması, kristallaşma mərkəzləri, daxili gərginliklərin lokal konsentrasiyası və s. aiddir. Ölçüləri ~10-100 nm olan nanoməsələlər kimi qüsurlar da xüsusi qeyd edilməlidir. Nanoməsələlər, amorf ərintinin alınması prosesində ərintinin çox yüksək sürətlə tablama zamanı yaranır və struktur elementi hesab olunur. Belə ki, nanoməsələlərin aradan qaldırılması amorf ərintinin simmetriya xarakterinin və topoloji xarakteristikalarının dəyişməsinə gətirmir [2]. Tədqiqatlar [2] göstərir ki, nanoməsələliyin parametrləri (nanoməsələnin ölçü və forması, onların konsentrasiyası, ərintinin həcmi boyunca nanoməsələlərin ölçülərinə görə paylanması) amorf ərintinin möhkəmliyi, mikrobərkliyi, kristallaşma qanunauyğunluğu və s. kimi xassələrə əhəmiyyətli dərəcədə təsir göstərir.

Nanoməsələliyin amorf ərintinin maqnit xassələrinə təsiri məsələsi isə faktiki olaraq tədqiq edilməyib. Burada hidrostatik təzyiqlə (hərtərəfli sıxılma) təsiri hesabına amorf ərintinin quruluş halının dəyişməsi zamanı nanoməsələlik xarakteristikaları və maqnit xarakteristikaları ölçülmüş, maqnit xarakteristikalarının və nanoməsələliyin dəyişməsi müqayisə edilmişdir.

Tədqiqat obyektini olaraq, çox yüksək sürətlə tablama ilə alınmış ~20 µm qalınlıqlı lent şəklində Fe-Ni-Si-B amorf ərintisi seçilmişdir. Ərintinin quruluşunun amorfliyinə  $\text{CuK}_\alpha$  şüalanmasında (dalğa uzunluğu  $\lambda=0,154$  nm) böyük bucaqlarda rentgen difraksiyanın ölçülməsi ilə nəzarət edilmişdir.

T=293 K temperaturda, 10 dəqiqə müddətində, 10 kbar hidrostatik təzyiqlə tətbiq etməklə ərintinin quruluşuna təsir həyata keçirilmişdir. Nümunələr maye yağ doldurulmuş

presin silindirik hissəsində yerləşdirilmişdir. Yağın təzyiq altında nümunəyə nüfuz etməsinin qarşısını almaq üçün nümunələr yumşaq teflon təbəqəyə bürünmüşdür. Təzyiqə məruz qalmış nümunələrin difraktoqrammaları ərintinin quruluşunun amorf qaldığını təsdiq etmişdir.

Əgər sistemdə daxilolmaların ölçülərə görə paylanması ölçülərin diskret qiymətlərinə ( $D_i$ ) malikdirsə, onda Porod funksiyasından istifadə etmək effektivlidir:  $\Phi(\varphi) = I(\varphi)\varphi^2$  funksiyası qeyri-monoton funksiya olub  $\varphi_i \approx 0,7\lambda/D_i$  bucaqlarında bir sıra maksimumlara malikdir. Onda bu bucaqlara görə  $D_i \approx 0,7\lambda/\varphi_i$  qiymətini,  $I(\varphi)\varphi^2$  funksiyasının maksimumuna görə isə  $D_i$  ölçülü daxilolmaların konsentrasiyasını tapmaq olar [3]. Burada da öyrənilən amorf ərintidə nanoməsamələrin konsentrasiyasının və ölçülərinin təyin edilməsində [3] işində istifadə edilən bu üsuldən istifadə edilmişdir.

İlkin nümunələrin difraktoqrammalarının təhlili ərintidə 140 və 30 nm (bu qiymətlər difraktoqrammada maksimumlara uyğun bucaqların qiymətindən istifadə etməklə  $D_i \approx 0,7\lambda/\varphi_i$  ifadəsi ilə tapılmışdır) ölçülü iki qrup daxilolmanın (məsamənin) olduğunu göstərir. Təzyiqə məruz qaldıqdan sonra nümunənin quruluşundakı dəyişmələri əks etdirən difraktoqrammalarda maksimumların sayı iki olaraq qalmış, yalnız difraktoqrammalar daxilolmaların (məsamələrin) ölçülərinin 90 və 20 nm qədər azaldığını göstərmişdir. Intensivliyin azalması da həmçinin daxilolmaların həcmnin azalması ilə əlaqədardır.

Hidrostatik çəkmə metodundan istifadə etməklə nümunələrin sıxlığı  $10^{-4} \text{ q/sm}^3$  dəqiqliyi ilə təyin edilmişdir. Təzyiqin təsiri altında nümunələrin sıxlığının nisbi artımı aşkar edilmişdir  $\Delta\rho/\rho \approx 8,3 \cdot 10^{-3}$  ki, bu da təsvir edilən metodla aşkar edilən daxilolmaların nanoməsamələr olması haqqında mülahizəni təsdiq edir.

Beləliklə, nəticəyə gəlmək olar ki, öyrənilən amorf ərintidə iki xarakterik ölçülü (~30 nm və ~140 nm) iki fraksiya məsamə mövcuddur. Hidrostatik təzyiq məsamələrin həcmnin azalmasına səbəb olsa da onların konsentrasiyası praktiki olaraq dəyişməz qalmışdır.

Ərintinin maqnit xarakteristikalarını təyin etmək üçün histerezis ilgəyi qurulmuş, oradan da maksimal maqnit induksiyası (doyma induksiyası)  $B_S$  və qalıq induksiya  $B_r$  təyin edilmişdir. Ölçmələr  $T=293 \text{ K}$  temperaturda, 50 Hs tezlikdə və 80-1000 A/m sahələrdə aparılmışdır.

Ölçmələr nəticəsində:

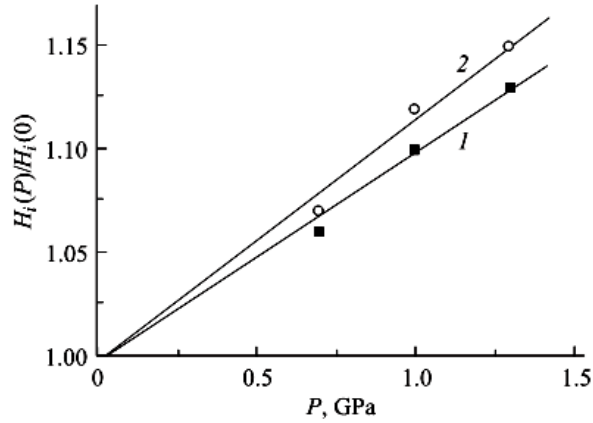
-ilkin halda olan nömunələrdə  $B_S=1,12 \text{ Tl}$  ;  $B_r=0,34 \text{ Tl}$ ;

-təzyiqin təsirindən sonra  $B_S=1,22 \text{ Tl}$  ;  $B_r=0,27 \text{ Tl}$  qiymətləri alınmışdır.

Göründüyü kimi təzyiqin təsiri nəticəsində ərintinin maqnit xarakteristikaları əhəmiyyətli dərəcədə yaxşılaşmış, doyma induksiyası artmış, qalıq induksiya isə azalmışdır.

Güman etmək olar ki, maqnit xarakteristikalarının yaxşılaşması domen sərhədlərinin dəyişmənin dinamikasının sərbəstliyinin artması ilə əlaqədardır ki, bu da səlt maqnit mühütün ölçülərinin kifayət qədər böyük olmasını tələb edir. Məsamələrin olması mühitin səltliyini pozaraq domenlərin manevr oblastının ölçülərini azaldır. Məsamələrin ölçüsünün azalması zamanı bu cür manevr oblastlarının ölçüsünün artması domenlərin mobilliyini yüksəldir və bununla da maksimal induksiyanın artmasına və qalıq induksiyanın azalmasına səbəb olur.

Ölçmələrin nəticəsi göstərir ki, təzyiqin təsiri nəticəsində ərinti nümunələrində həm böyük həm də kiçik nanoməsamələrin konsentrasiyası praktiki olaraq dəyişməzdir. Deməli, təzyiqin artması ilə məsamələrarası oblastın orta ölçüsünün nisbi artımı  $H_i(P) / H_i(0)$  yalnız məsamələrin diametrinin azalması ilə əlaqədardır. Nanoməsamələrin hər iki fraksiyası üçün  $H_i$  –nin nisbi artımının P təzyiqdən asılılığı şəkil 1-də göstərilmişdir. Şəkildən göründüyü kimi bu xətti asılılığa yaxındır.



Şəkil 1. Nanoməsamələrin sərhədləri arasındakı orta məsafənin təzyiqdən asılılığı. 1- böyük məsamələr, 2- kiçik məsamələr.

Təzyiq nəticəsində nanoməsamələrin sərhədləri arasındakı orta məsafənin və maqnit xarakteristikalarının nisbi dəyişməsinin müqayisəsi onların bir-birinə yaxın olduğunu yəni, amorf ərintinin nanoməsaməlik xarakteristikaları ilə maqnit xarakteristikaları arasında korellasiya olduğunu göstərir.

Aydın məsələdir ki, amorf ərintinin nanoməsaməliliyinin azalması ilə maqnit xarakteristikalarının yüksəlməsinin əlaqəli olması və sadə izahı maraqlı olsa da hələlik ilkin xarakter daşıyır. Bu məsələnin daha ətrafı öyrənilməsi üçün amorf ərintilərdə maqnitoelestiki effektlər daha dərindən araşdırılmalı, təzyiqin mübadilə qarşılıqlı təsirinə, Kürü temperaturuna, amorf ərintilərin maqnit quruluşuna təsiri daha ətraflı öyrənilməlidir.

### Ədəbiyyat

- 1.Глезер А.М., Молотилов Б.В. Структура и механические свойства аморфных сплавов. М.,1992. 206 с.
- 2.Бетехтин В.И., Кадомцев А.Г., Амосова О.В.// Изв. АН. Сер. Физ.2003. Т. 67. №6 С. 818-822.
3. Бетехтин В.И., Гюлиханданов Е.Л., Кадомцев А.Г., и др. ФТТ. 2000. Т. 42. Вып. 8. С. 1420-1424.

## PLAZMA – KİMYƏVİ ÜSULLA MADDƏLƏRİN SƏTHLƏRİNİN TƏMİZLƏNMƏSİ

\*ƏLİYEV S.A., \*\*ƏLİYEV S.S.

\* *Azərbaycan Texniki Universiteti*

\*\* *Azərbaycan Memarlıq və İnşaat Universiteti.*

Yeni yarımkeçirici maddələrin səthlərinin təmizlənməsinin effektiv texnologiyasının işlənməsi hal-hazırda aktual məsələlərdən biridir. Baxılan işdə saffir altlıq üzərinə çəkilmiş nitrid-qalliumun təmizlənmə texnologiyasının xüsusiyyətləri verilib. Nümunələrin təmizlənməsi elektronları dreyf hərəkət edən plazma-kimyəvi reaktorda (PKR) aparılır [1]. Maddənin səthindəki səthi yükləri götürmək üçün xüsusi sxemdən istifadə olunur. Bu sxemə əsasən PKR-a eyni zamanda iki yüksək tezlikli generator qoşulur: 13,56 kHs tezlikli əsas və 440 kHs tezlikli əlavə generator. Birinci generator ionlardan, elektronlardan və radikallardan ibarət aktiv kimyəvi plazma yaradır, ikinci generatorun köməyi ilə işə nitrid qalliumun

səthindən yük götürülür [2]. Generatorların hər ikisinin işlədiyi zaman birinin digərinə təsiri xüsusi hazırlanmış filtrlər vasitəsilə minimuma endirilib.

Səthlərin təmizlənməsi zamanı işçi qaz kimi dördqat xlorlu karbon, habelə onun oksigen və arqonla müxtəlif nisbətlərdə olan qarışığından istifadə olunub. Reaktordakı işçi qazın təzyiqi  $(1 \div 7) \cdot 10^{-2} \text{ mm}$  civə sütunu intervalında dəyişib. Ionların enerjisini isə idarə olunan maqnit sahələri vasitəsilə 80eV-dan 400eV-dək dəyişmək mümkün olub. Plazmadakı cərəyan 8A olduqda əsas generatorun gücü 1kVt-dan böyük olmayıb.

$\text{CCl}_4$  qazından alınan plazmada ionların kiçik enerjisində GaNi-in təmizlənməsi çox yavaş gedir və nümunənin səthi bu zaman qaralır (çirklənir). Görünür bu, səthə karbonun və ya polimer təbəqələrin çökməsi ilə əlaqədardır.

Səthdə arzuolunmaz törəmələrin əmələ gəlməməsi üçün təmizlənmiş GaNi, oksigen ionlarının enerjiləri  $\sim 250\text{eV}$  olan oksigen qazı boşalmasında 3-10 dəqiqə müddətində saxlanılır. Bu cür işlənmiş səthlər təmiz olur, yəni səthdən bütün radikallar və xlor uzaqlaşdırılır. Məlumdur ki, radikal və xlor olan səthə nəmişlik düşdükdə nümunənin səthi dağıla bilər [3].

Nümunənin səthində yaranan polimer təbəqənin qalınlığını azaltmaq üçün nitrid qalliumun dördqatxlorlu karbon qazı plazmasında təmizlənmə prosesində reaktora 3:1 nisbətində oksigen əlavə olunur. Bu zaman təmizlənmənin keyfiyyəti artır, lakin optimal rejimin alınması üçün texnologiyanı təkmilləşdirmək lazımdır.

Nümunənin səthindəki ion stimulyasiyasını artırmaq üçün plazma-kimyəvi reaktora əsas işçi qazın 10%-i miqdarında arqon qazı əlavə edilir ki, bu da nümunənin səthindəki polimer təbəqəni azaldır.

Yuxarıda qeyd olunduğu kimi GaNi-in xlorla reaksiyası nəticəsində səthdə alınan bütün mümkün qalıqların buxarlanma temperaturu kifayət qədər böyük qiymətə  $(200 - 535)^\circ \text{S}$  malikdir. Buna görə nümunənin səthində polimer təbəqələrlə yanaşı nitrid-qalliumun xlorla reaksiyasının qalıqları ( $\text{GaCl}-\text{GaCl}_3$ )da ola bilər. Nümunə səthindən onların desorbsiyasını stimullaşdırmaq məqsədilə soyutmaq üçün istifadə olunan suyu qızdırmaq lazımdır. Belə iş rejimi sapfir altlığın da 0,3 mkm dərinliyə qədər təmizlənməsinə gətirib çıxarır ki, bu da altlığa hopmuş GaNi qalıqlarının aradan qaldırılmasına səbəb olur.

Beləliklə, elektronlar qapalı dreyft hərəkəti edən plazma kimyəvi reaktorda GaNi-in xlorlu plazmada təmizlənmə imkanları müəyyən edilmişdir və sapfir altlıq üzərinə çəkilmiş nitrid qalliumun səthindən səthi yüklərin götürülməsi metodikası işlənib hazırlanmışdır.

## Ə D Ə B İ Y Y A T

1. Луценко Е.В., Зубелевич В.З, Павловский В.Н. и др. Импульсные лазеры УФ–синий области гетеро-структур GaN, выращенных на кремниевых подложках. Материалы международный научный школы «Физика импульсных разрядов в конденсированных средах». Николаев, Атолл, 2003, с. 66-67.

2. Vassilevski K.V. Sizov V.V., Babanin A.J. et al. Dry etching of gallium nitride using  $\text{CCl}_2\text{F}_2$ ,  $\text{CCl}_4$  and their mixtures with  $\text{N}_2$  and air. Just. Phys. Conf. Ser. № 142; Chapter 6, Paper presented of Silikon Carbide and Related Materials 1995 Cont., Kyoto, Japan, s. 1027-1030.

3. Коновал В.М., Усталов В.В., Федорович О.А. ПХРС замкнутым дрейфом электронов для производства элементов с субмикронными размерами. Материалы 6-ой Международной Крымской микроволновой конференции Крымико-96, Севастополь, Крым.

## DƏMİR-BOR ƏSASLI MAQNİTYUMŞAQ AMORF ƏRİNTİLƏRİN MAQNİT XASSƏLƏRİ

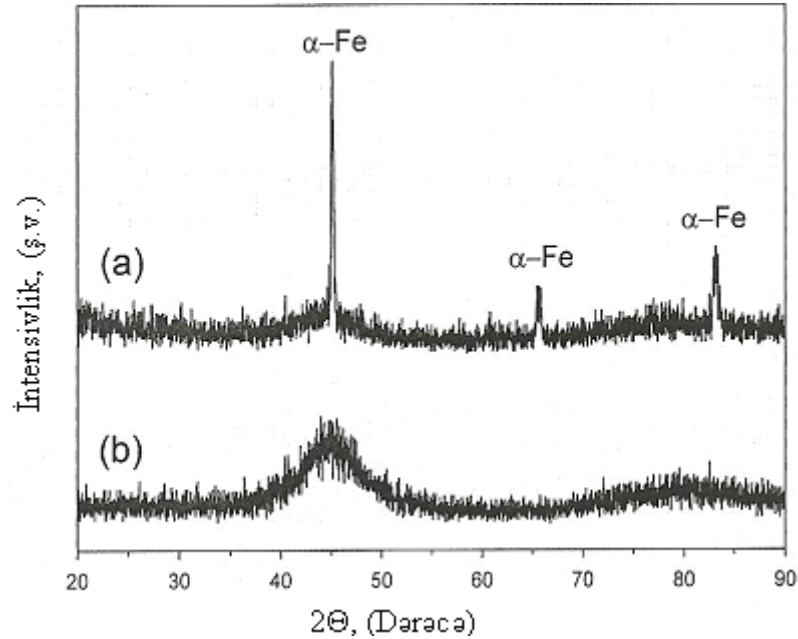
Mehrabov A.O., Əliyev S.S., Əlizadə İ.İ., Zeynalov N.M., Şamilov T.Q

*Azərbaycan Memarlıq və İnşaat Universiteti, Nüvə gamma-rezonansı spektroskopiyası*

Bu işdə Fe-Nb-B-Si tərkibli iri həcmli metallik amorf materialların faza tərkibi və maqnit xassələri tədqiq olunmuşdur. Amorf fazanın varlığı rentgen struktur analiz üsulu ilə sübut olunmuşdur. Termik analiz metodu ilə metallik amorf ərintinin şüşə keçidi temperaturunun  $T_g = 561^{\circ}\text{C}$ , kristallaşma temperaturunun  $T_x = 583^{\circ}\text{C}$  olduğu müəyyən olunmuşdur. Maqnit xassələri titrəşimli maqnitometr vasitəsi ilə ölçülmüşdür.

İri həcmli metallik şüşələr elektrik müqavimətlərinin, sərtliklərinin, korroziyaya davamlılığı və maqnit xassələrinin yüksək olmaları ilə əlaqədar diqqəti cəlb edirlər [1]. Maqnit yumşaq materiallar əldə etmək üçün amorflaşma qabiliyyətinin yüksək olması ilə bağlı dəmir-bor əsaslı ərintilər seçilmişdir. Əsası dəmir və bor elementlərindən ibarət olan maqnit yumşaq metallik şüşələrin sənaye üsulu ilə istehsalının iqtisadi cəhətdən əlverişli olması üçün bahalı aşqar elementlərinin miqdarının azaldılması, materialların istehsalının asanlaşdırılması və onların ölçülərinin mikrometr tərtibindən, millimetr tərtibinə çıxarılması lazımdır. Bu məqsədlə, həmin materialların əsasını təşkil edən  $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$  dəmir-bor ərintisinə üç və ya daha artıq element əlavə etməklə alınan ərintilərin şüşə əmələ gətirmək qabiliyyətini, maqnit xüsusiyyətlərini və korroziyaya davamlılığının öyrənilməsi zəruridir.

Fe-Nb-B-Si əsaslı ərintilərdən əvvəlcə  $\text{Fe}_{72}\text{B}_{14.4}\text{Si}_{9.6}\text{Nb}_4$  tərkibli ərinti hazırlanmışdır. Qırılma üzvlərində aparılan makrostruktur analiz alınan ərintilərin çox nazik hissələrdə tamamilə şüşə, daha qalın hissələrdə şüşə və kristal, ən qalın hissələrdə isə tamamilə kristallik olduğunu göstərmişdir.

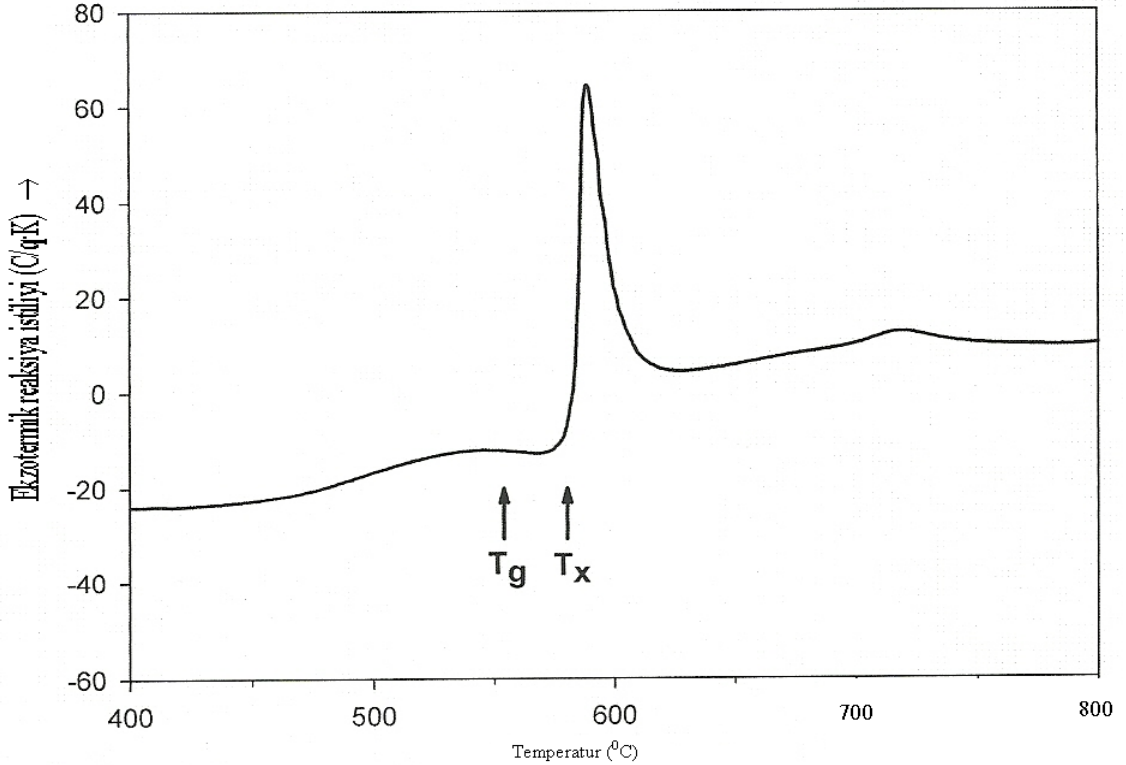


Şəkil 1.  $\text{Fe}_{72}\text{B}_{14.4}\text{Si}_{9.6}\text{Nb}_4$  (a) və  $\text{Fe}_{36}\text{Co}_{36}\text{B}_{14.4}\text{Si}_{9.6}\text{Nb}_4$  (b) nümunələrinin sürətli soyutmadan sonra rentgendifraktometrləri



Tamamilə şüşə struktur almaq üçün daha yüksək şüşə əmələ gətirmək qabiliyyətinə malik olan  $\text{Fe}_{36}\text{Co}_{36}\text{B}_{14.4}\text{Si}_{9.6}\text{Nb}_4$  kompozisiyası hazırlanaraq sürətli tökmə ilə 3 mm qalınlığında tamamilə şüşə struktur əldə edilmişdir. Alınmış ərintilərin faza tərkibi rentgen şüalarının difraksiyasından görünür. Şəkil 1a-dan görüldüyü kimi  $\text{Fe}_{72}\text{B}_{14.4}\text{Si}_{9.6}\text{Nb}_4$  kompozisiyası amorf matrisada yerləşən  $\alpha$ -Fe kristallarından ibarət bir quruluşa malikdir. Amorf matrisanın olması difraksiya bucaqlarını  $45^\circ$  və  $80^\circ$  ətrafında olan qiymətlərində yayılmış difraksiya maksimumlarının olması ilə izah olunur. Şəkil 1b-dən görüldüyü kimi  $\text{Fe}_{36}\text{Co}_{36}\text{B}_{14.4}\text{Si}_{9.6}\text{Nb}_4$  maddəsi tamamilə şüşə quruluşa malikdir. Ərintinin tərkibində kristal fazanın olmadığı aydın görünür.

Alınmış iri həcmli metallik şüşə  $\text{Fe}_{36}\text{Co}_{36}\text{B}_{14.4}\text{Si}_{9.6}\text{Nb}_4$  maddəsinin termik analizləri aparılmışdır. Şəkil 2-dən görüldüyü kimi bu ərinti tamamilə şüşə quruluşa malik olmaqla aydın şəkildə özünü göstərən bir şüşə keçidi temperaturuna ( $T_g$ ) və bir kristallaşma başlanğıcı temperaturuna ( $T_x$ ) malikdir. Bu parametrlərin qiymətləri uyğun olaraq  $T_g=561.2^\circ\text{C}$ ,  $T_x=583.1^\circ\text{C}$  olmuşdur. Bundan başqa soyuma əyrilərindən maye fazaların tarazlığını müyyən edən ifratsoyuma dərəcəsi ( $\Delta T_x$ ) və şüşələşmə temperaturunun aşağı salınma dərəcəsi ( $T_{rg}$ ) parametrləri də təyin edilmişdir.  $\Delta T_x=22^\circ\text{C}$  və  $T_{rg}=0,65$  qiymətlərini almışdır. Maye-bərk faza keçidi temperaturunun başlanğıc temperaturu üçün  $T_\ell=1012.7^\circ\text{C}$  qiyməti soyuma əyrisindən təyin edilmişdir.



Şəkil 2.  $\text{Fe}_{36}\text{Co}_{36}\text{B}_{14.4}\text{Si}_{9.6}\text{Nb}_4$  amorf maddəsinin DSC analizi. Qızdırılma sürəti  $40^\circ\text{C/dəq}$ -dir

Ərintilərin maqnit xassələri 3.0 Tesla tutumlu VSM cihazında ölçülmüşdür. Maqnitometrik analiz alınmış iri həcmli şüşənin maqnit yumşaq xüsusiyyətlərə malik olduğunu göstərdi.  $\text{Fe}_{36}\text{Co}_{36}\text{B}_{14.4}\text{Si}_{9.6}\text{Nb}_4$  ərintisi 1,02 Tl doyma maqnitlənməsinə və enerji itkilərini azalda biləcək 0,239 Erstedə malik kiçik bir koersitiv qüvvəyə malik olması müəyyən edilmişdir.

1. Inoue A. Bulk amorphous alloys with soft and hard magnetic properties, Materials Science and Engineering A, 1997, p.226-228.

## ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МОД СТРАТОВЫХ КОЛЕБАНИЙ В АРГОНОВОМ РАЗРЯДЕ

Г. И. Гарибов  
garibovgio@yahoo. Com

*Бакинский государственный университет, Институт физических проблем*

*В работе экспериментально изучаются свойства аргонового разряда с бегущими стратами при действии на него внешнего синусоидального напряжения звуковой частоты. Показано, что при определенном значении амплитуды и частоты внешней принудительной силы стратовые колебания захватываются внешней силой, и частота страт следует за вынуждающей силой при изменении последней в некоторой полосе частот. При большой амплитуде внешнего воздействия обнаруживается сильное взаимодействие между колебаниями естественных и искусственно возбужденных страт, приводящее к подавлению искусственных страт.*

Условия возбуждения и характеристики страт очень чувствительны к малейшему изменению условий опыта – радиуса и длины разрядной трубки, давления и чистоты используемого газа, параметров внешней цепи и т. д. Поэтому страты в разряде возникают при широком диапазоне изменения параметров разряда [1-4]. Для разработки эффективных методов управления этим явлением требуется изучение природы страт и причины их возникновения при различных условиях.

Известно, что в автоколебательной системе при действии на нее внешней гармонической силы наблюдается явление принудительной синхронизации (захватывания) автоколебаний [5,6]. Оно заключается в том, что автоколебания системы полностью синхронизируются частотой внешнего воздействия и система совершает вынужденные колебания внешней частоты. Такой синхронный режим существует лишь в определенном интервале изменения частоты внешнего источника, называемой полосой захватывания. В настоящей работе исследовались автоколебательные свойства аргонового разряда с естественными бегущими стратами при внешнем синхронизирующем воздействии на разряд.

Опыты проведены в стеклянной разрядной трубке с расстоянием анод-катод 72 см и внутренним диаметром 3,2 см. В трубке использован оксидный катод косвенного подогрева, позволяющий получать разрядный ток до 300 мА. Анод в виде круглого диска диаметром 2,8 см изготовлен из листового молибдена. В разрядную трубку в области положительного столба введены плоские пристеночные и цилиндрические зонды, при помощи которых определялись основные параметры плазмы.

После тщательной вакуумной обработки разрядная трубка наполнялась рабочим газом до нужного давления, и производились измерения. Исследования проведены в аргоне при изменении давления от 0,1 до 1 мм рт. ст. и силы тока от нескольких миллиампер до 200 мА. Для изучения колебаний яркости свечения положительного столба и определения длины волны страт использовались фотоэлектронный умножитель ФЭУ-39 и осциллограф С1-77. Частотный спектр колебаний плазмы изучался панорамными анализаторами спектра СК4-58 и СК4-56, которые позволяют обозревать спектр колебаний плазмы в интервале 0,4-600 кГц. В качестве источника внешней вынуждающей силы, действующей на положительный столб, использовался генератор синусоидальных напряжений, диапазон частот которого лежит в интервале от 20 Гц до 200 кГц. Эксперименты проведены при включении генератора последовательно с разрядной трубкой. На рис. 1 приведена зависимость частоты страт  $f_s$  от частоты внешней вынуж

дающей силы  $f_g$  при давлении  $P = 0,96$  мм рт.ст. и силе тока  $I = 17$  мА. В описываемых опытах при отсутствии воздействия вынуждающей силы на положительный столб в

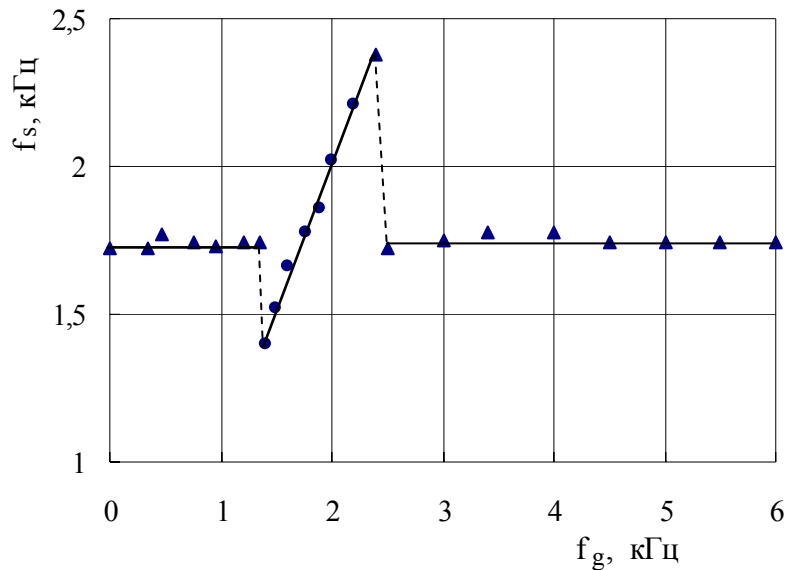


Рис.1. Зависимость частоты страт от частоты внешней принудительной силы.  
 $P = 0,96$  мм рт.ст.,  $J = 17$  мА.  $U_{gr} = 50$  В.

разряде имеются естественные бегущие страты частотой  $f_s = 1,72$  кГц и длиной волны  $\lambda = 8,0$  см. Опыты показали, что явление "захвата" частоты стратовых колебаний частотой внешней вынуждающей силы происходит не при любых значениях амплитуды напряжения внешнего воздействия, а начиная с некоторого минимального ее значения. В указанных условиях влияние на страты внешней силы обнаруживалось только при амплитуде последней начиная с  $U_g = 50$  В.

При включении внешнего генератора с амплитудой сигнала  $U_g = 50$  В наблюдается некоторое расширение спектра колебаний страт. Пока частота внешнего генератора меньше некоторой величины изменение его частоты не влияет на величину частоты страт. В некоторых же пределах вынуждающая частота внешнего генератора может быть сообщена стратовым колебаниям. Так, при частоте генератора  $f_g = 1,40$  кГц происходит "захват" стратовой частоты частотой внешней вынуждающей силы: в разряде появляется страта с частотой 1,40 кГц и длиной волны  $\lambda = 7,3$  см. При дальнейшем увеличении частоты внешней силы частота страт «следит» за частотой внешней силы. Картина резко изменяется, когда частота генератора достигает значения  $f_g = 2,50$  кГц. Основная частота страты скачком уменьшается до значения  $f_s = 1,72$  кГц и длина волны становится равной  $\lambda = 7,6$  см, т.е. в положительном столбе опять устанавливаются страты, которые существовали до воздействия на разряд внешней вынуждающей силы.

При сравнительно большой амплитуде внешнего принудительного воздействия наблюдается интересная особенность взаимодействия естественных стратовых колебаний с синусоидальными колебаниями внешней вынуждающей силы. Приведем описание одного из подобных опытов, проведенных при давлении  $P = 0,96$  мм рт.ст.,  $J = 20$  мА и амплитуде внешнего воздействия  $U_g = 80$  В. В описываемых опытах без внешнего воздействия в разряде имеются бегущие страты частотой  $f_s = 2,15$  кГц и длиной волны  $\lambda = 7,5$  см. Включение генератора внешней принудительной силы вызывает увеличение уровня шума, максимум которого соответствует частоте  $\sim 2,15$  кГц. Измерение длины волны страты, проведенное этих условиях, показало, что с включением внешней пе

риодической силы страты в разряде пропадают. С ростом частоты внешнего генератора спектр шума продолжает расширяться как в сторону низких, так и высоких частот. При частоте внешнего воздействия  $f_g = 1,3$  кГц в положительном столбе появляются бегущие страты частотой  $f_s' = 1,32$  кГц, которая «следует» за частотой генератора и при  $f_g = 2,00$  кГц становится равной  $f_s' = 2,05$  кГц. Поскольку частота этих страт «следует» за частотой вынуждающей силы, то их можно идентифицировать как стимулированные (искусственные) страты.

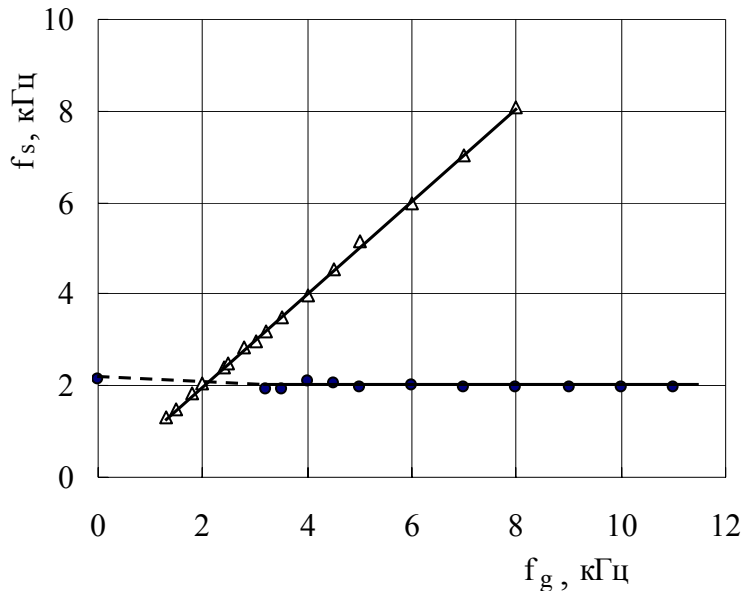


Рис.2. Зависимость частоты естественных и стимулированных (искусственных) страт от частоты внешней вынуждающей силы. Точка на оси ординат соответствует частоте естественных страт в отсутствии внешнего воздействия на разряд.  $P = 0,96$  мм рт.ст.,  $J = 20$  мА.  $U_g = 80$  В.

●●● – естественные страты,  $\Delta\Delta\Delta$  – стимулированные страты

При частоте генератора  $f_g = 3,2$  кГц в разряде возникают новые страты с частотой  $f_s'' = 1,92$  кГц. Частота их не зависит от вынуждающей силы и, следовательно, являются естественными стратами.

Эти результаты в виде графиков представлены на рис. 2 и 3. Из рис. 2 видно, что с ростом частоты генератора частота стимулированных страт растет пропорционально частоте генератора, а частота естественных страт - не меняется. Нами измерены амплитуды обеих типов страт, результаты которых приведены на рис.3. Из графика видно, что появление в разряде естественных страт вызывает уменьшение амплитуды стимулированных. По мере увеличения частоты внешней принудительной силы амплитуда стимулированных страт уменьшается, а естественных – увеличивается. При частоте внешней принудительной силы  $f_g \approx 6$  кГц амплитуда естественных страт достигает насыщения, в то время как амплитуда стимулированных страт продолжает уменьшаться и при  $f_s = 8,10$  кГц стимулированные страты исчезают, а естественные страты продолжают существовать.

Этот экспериментальный факт можно объяснить на основе следующих соображений.

Газовый разряд обладает свойствами реактивных элементов электрической цепи, в первую очередь, свойствами индуктивности. Вся электрическая цепь разряда в целом

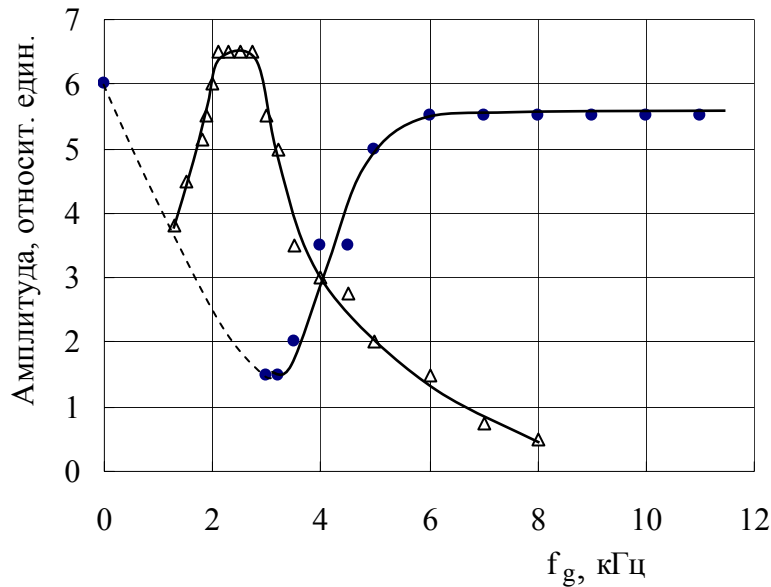


Рис.3. Зависимость амплитуды естественных и стимулированных (искусственных) страт от частоты внешней вынуждающей силы. Точка на оси ординат соответствует амплитуде естественных страт в отсутствие внешнего воздействия на разряд.

$P = 0,96$  мм рт.ст.,  $J = 20$  мА.  $U_g = 80$  В.

●●● – естественные страты, ΔΔΔ – стимулированные страты.

всегда обладает реактивностями и, следовательно, образует колебательную систему. Наличие отрицательного сопротивления в этой системе, обусловленного падающим участком вольтамперной характеристики разряда, может привести к автоколебаниям. В автоколебательной системе возможна конкуренция колебаний (мод). Явление конкуренции мод проявляется в том, что если в автоколебательной системе существует несколько мод колебаний, которые черпают энергию из одного общего источника, то возможно подавление одних колебаний другими. При этом одна из нарастающих мод «организует» дополнительное нелинейное затухание для других. При очень слабой связи между колебательными модами они сосуществуют не подавляя друг друга. При достаточно сильной связи выживает одна из них. Из рис. 3 видно, что с ростом частоты, амплитуда стимулированных страт уменьшается и при частоте генератора  $f_g = 8,10$  кГц искусственные страты полностью подавляются естественными. Это говорит о том, что связь между этими двумя модами колебаний зависит от частоты и с ее ростом она увеличивается, а при  $f_s = 8,10$  кГц приводит к полному подавлению искусственных страт.

#### Литература

1. Недоспасов А.В. «Страты». УФН, 1968, т. 94, №3, с. 439.
2. Ланда П.С., Мискинова Н.А., Пономарев Ю.В. «Ионизационные волны в низкотемпературной плазме». УФН, 1980, т. 132, №4, с. 601.
3. Солонин В.В., Степанов В.А., Чиркин М.В. «Неустойчивый режим возбуждения кинетических страт в газоразрядной плазме». ЖТФ, 2000, т. 70, №4, с. 141.
4. Привалов В.Е. «Колебания в разряде газового лазера». Квантовая электроника, 1977, т. 4, № 10, с. 2085.
5. Теодорчик К.Ф. Автоколебательные системы. М.–Л., 1959.
6. Андронов А.А., Витт А.А., Хайкин С. Э. Теория колебаний. М., 1959.

## **ИЗМЕРЕНИЕ ВОЛЬТАМПЕРНОЙ ХАРАКТЕРИСТИКИ ВЫСОКООМНОГО ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО ЗОНДА, ПОГРУЖЕННОГО В ПЛАЗМУ АРГОНОВОГО РАЗРЯДА.**

**Мурадов А.Х.**

*Институт Физических Проблем БГУ*

Колебательные процессы флуктуационного характера влияют на различные параметры излучения и пороги генерации лазеров [1]. Существует множество различных методов стабилизации работы лазеров. Одним из наиболее эффективных является использование полупроводниковых электродов взамен обычных металлических [2]. Существенное влияние полупроводникового электрода на устойчивость разряда связано с процессами, происходящими в контакте полупроводника и плазмы. По мере увеличения разрядного тока часть разности потенциалов перераспределяется у поверхности полупроводника, и контракция тока ослабевает.

В разрядах в плоской газоразрядной ячейке один из электродов представляет собой пластину из высокоомного и фоточувствительного полупроводника. В процессе образования первичных электронов у поверхности катода образуется большой скачок потенциала и сильное электрическое поле. Таким образом, у поверхности полупроводникового катода имеется направленный к ней ионный поток, а от нее поток эмиттированных электронов. Наличие этих осложняющих условий не позволяет изучить непосредственный контакт плазмы и полупроводника.

Такая попытка сделана в работах [3,4], где рассматривается контакт плазмы положительного столба самостоятельного разряда в гелии и неоне с высокоомным полупроводниковым плоским электродом. В этих работах измерены вольт-амперные характеристики фоточувствительного полупроводникового зонда и их первые производные при различных степенях освещенности ее поверхности. Под действием внешнего излучения сами характеристики и их производные смещаются. Величина смещения интерпретируется как глубина проникновения электрического поля в полупроводник. Большая разница электронных температур в гелиевой и неоновой плазмах с одной стороны и в полупроводнике с другой, несколько затрудняет аналитическую интерпретацию и более эффективного использования экспериментальных данных.

В данной работе измерены ВАХ полупроводникового зонда, помещенного в аргоновую газоразрядную плазму и их первые производные. Изучено влияние постороннего излучения на зондовую характеристику. Под действием внешнего излучения характеристики и их производные смещаются в сторону положительных потенциалов зонда. Т.к. электронные температуры в аргоновой плазме гораздо ниже чем в гелиевой и неоновой разрядах, то величины смещений, интерпретируемые как глубина проникновения электрического поля в полупроводник, имеют более четкие значения. Используя эти значения в уравнении плазмы и слоя [5], можно составить полную физическую картину процессов, происходящих в контакте плазмы и полупроводникового электрода.

Зонд был изготовлен из высокоомного образца GaAs ( $\rho = 10^8 \text{ Ом.см}$ ) в виде диска толщиной 1 мм и диаметром 8 мм. Боковая и тыльная стороны были покрыты стеклом так, что с плазмой контактировала только обращенная к ней поверхность. На рис.1 приведены зондовые характеристики при различных освещенностях зонда. Измерения проведены при условии  $P = 0,2 \text{ Тор}$  и силе разрядного тока  $J_p = 150 \text{ мА}$ . Изменение интенсивности излучения проводилось с помощью нейтральных фильтров. Из рисунка видно, что с ростом интенсивности излучения зондовые характеристики возрастают круче и смещаются в сторону положительных потенциалов. Такие же характеристики, полученные при излучении через инфракрасные фильтры, идут существенно ниже (ближе к

оси напряжения). Этот факт дает возможность заключить, что измерения характеристик связаны в основном с объемными процессами.

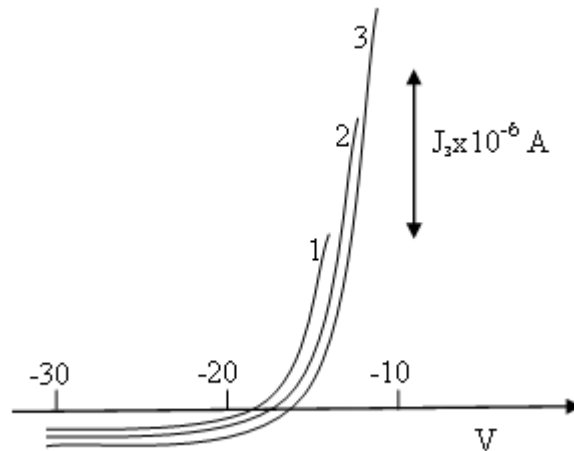


Рис. 1. Зондовые характеристики, измеренные при различных освещенностях зонда. 1 – 0%, 2 – 50%, 3 – 100%. ( $Ar, P = 0,2 \text{ Torr}, J_p = 150 \text{ mA}$ ).

Измерение производных зондового тока по потенциалу зонда осуществлялось радиотехническим методом [6]. В цепь измерительного зонда вводился переменный сигнал малой амплитуды. Присутствие этого сигнала наряду с постоянным зондовым смещением приводит к возникновению переменных составляющих зондового тока, связанных с различными степенями производных. Для их измерений соответствующая гармоника усиливалась и регистрировалась. Измерения показали, что с ростом интенсивности излучения величина сигнала возрастает, максимумы первых производных смещаются в сторону электронной части характеристики. Максимум первой производной соответствует потенциалу пространства в точке расположения зонда. Смещение максимумов свидетельствует о проникновении поля внутрь полупроводника, поэтому это смещение может служить мерой проникновения. При проведении измерений было обнаружено, что с увеличением разрядного тока абсолютные значения зондовых токов растут. С ростом давления изменения  $U_{nl}$  от интенсивности излучения уменьшается. Это по-видимому связано с тем, что при низких давлениях теплопроводность газа низка, и под действием излучения полупроводниковый образец нагревается до высоких температур, и вследствие этого уменьшается его сопротивление. С ростом давления теплопроводность газа увеличивается и поэтому устанавливается более низкая температура и низкая проводимость зонда.

Рассмотрение контакта плазмы с металлом приводит к т. н. уравнению плазмы и слоя [5]. Для вывода этого уравнения воспользуемся уравнением Пуассона

$$\nabla^2 V = 4\pi e(n_i - n_e) \quad (1)$$

При отрицательных значениях потенциала концентрация электронов подчиняется распределению Больцмана

$$n_e = n_0 \exp \frac{-e(V - V_0)}{kT_e}, \quad (2)$$

где  $n_0$ ,  $V_0$  - концентрация и потенциал у границы слоя,  $T_e$  - электронная температура в невозмущенной плазме.

Ионы в ускоряющем поле приобретают кинетическую энергию  $eV$ , и во всех точках значение ионного тока должно быть одинаковым.

$$j_i = n_i \sqrt{\frac{2eV}{m_i}} = n_0 \sqrt{\frac{2eV_0}{m_i}} \quad (3)$$

т. е.,

$$n_i = n_0 \sqrt{\frac{V_0}{V}} \quad (4)$$

Таким образом концентрация ионов, по мере их ускорения, уменьшается. Подстановка (4) и (2) в уравнение (1) приводит к

$$\frac{d^2V}{dx^2} = n_0 e \left[ \sqrt{\frac{V_0}{V}} - e^{-\frac{e(V-V_0)}{kT_e}} \right], \quad (5)$$

Из решения этого уравнения следует, что для образования устойчивого слоя необходимо чтобы ионы приходили к слою с энергией, превышающей

$$eV_0 = \frac{1}{2} kT_e. \quad (6)$$

В случае полупроводниковой поверхности по мере увеличения зондового тока часть разности потенциалов садится у поверхности полупроводника, и зависимость силы тока от приложенного потенциала ослабевает. Этого хорошо видно из измеренных характеристик. Т. к. при этом характеристика целиком деформируется и смещается, то плавающий потенциал также перемещается, и смещение плавающего потенциала может служить мерой проникновения поля вглубь полупроводника. Таким образом измерив смещение плавающего потенциала можно оценить глубину проникновения поля в полупроводник. Было установлено, что изменение плавающего потенциала представляет собой величину порядка нескольких вольт, и возрастает с уменьшением давления.

## ЛИТЕРАТУРА

1. В.Е.Привалов *Квантовая электроника* **4** №10 (1977) 2085.
2. E. L.Gurevich, A. W.Liehr, Sh.Amiranashvili, H. G.Purwinn *Physical Review E.*, **69** (2004) 036211-1-7.
3. А.Х.Мурадов *Проблемы энергетики*, №1 (2008) 106.
4. А.Х.Мурадов *Проблемы энергетики*, №1 (2009) 59.
5. Грановский В.Л., “Электрический ток в газе”, Москва: Наука, 1971, 543с.
6. Ю.М.Каган в сб. *Спектроскопия газоразрядной плазмы* под. ред. С.Э.Фриша, Л.: (1970) 201.



**ÇOXMƏRKƏZLİ SPİN-SPİN QARŞILIQLI TƏSİR İNTEQRALLARININ  
SLEYTER FUNKSİYALARININ KÖÇÜRMƏ DÜSTURU TƏTBİQ ETMƏKLƏ  
ANALİTİK HESABLANMASI**

**T.H. Əliyeva**

[aliyevatarana@rambler.ru](mailto:aliyevatarana@rambler.ru)

*BDU, Fizika Problemləri ETİ*

*İşdə Sleyter atom orbitalları daxil olan iki-, üç- və dördmərkəzli spin-spin qarşılıqlı təsir inteqralları üçün analitik ifadələr alınmışdır. Sleyter funksiyalarının köçürmə düsturundan istifadə etməklə coxmərkəzli spin-spin inteqralları daha sadə birmərkəzli inteqralların sırası şəklində ifadə olunmuşdur.*

Xartri-Fok-Rutan (XFR) metoduna görə molekulun halı determinant dalğa funksiyası ilə təsvir olunur. Determinantın elementləri molekulyar-spin orbitalları adlanan (MSO) birləşənlikli dağla funksiyalarıdır. Spin orbital qarşılıqlı təsirini nəzərə almadıqda MSO-rını  $U_i(\vec{r})$ - molekulyar orbitallarla (MO) elektronun  $U_{ms}(\sigma)$  spin funksiyalarının hasili şəklində axtarmaq olar.  $i$ -molekulyar kvant ədədləri yığımını bildirir. MO-ların axtarılmasının müxtəlif variantları mövcuddur. Bunlar içərisində ən geniş yayılanı MO LCAO yaxınlaşmasıdır. Ən geniş yayılanı MO LCAO yaxınlaşmasıdır. Bu yaxınlaşmaya əsasən  $U_i$  MO-lar molekuldakı atomların  $\chi_q = \chi_{nlm}(r_1\vec{r})$  atom orbitallarının xətti kombinasiyası şəklində axtarılır:

$$U_i = \sum_{q=1}^m C_{qi} \chi_q \quad (1)$$

$$\chi_q \equiv \chi_{nlm}(r_1\vec{r}) = \frac{(2\xi)^{n+\frac{1}{2}}}{\sqrt{(2n)!}} r^{n-1} e^{-\xi^2} \begin{cases} Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ S_{lm}(\theta, \varphi) \end{cases} \quad (2)$$

-Sleyter atom orbitallarıdır (SAO).  $C_{qi}$  - naməlum əmsallarının qiymətləri molekul üçün XFR tənliklərinin həllindən tapılır.

Molekulun məlum determinant dağla funksiyasından istifadə etməklə iki elektronun spin maqnit momentlərinin qarşılıqlı təsir enerjisini hesablamaq olar [1;2].

Bu ikielektronlu qarşılıqlı təsirin  $E_{ss}$  enerjisi  $C_{qi}$  xətti kombinasiya əmsalları və aşağıdakı kimi təyin olunan spin-spin qarşılıqlı təsir inteqralları ilə ifadə olunurlar.

$$J_{pqrs}^{kl} = \int \chi_p(1)\chi_q(2)V_{ss}^{kl}(1,2)\chi_r(1)\chi_s(2)dv_1dv_2 \quad (3)$$

$k, l = 0, \pm 1$  qiymətləri alır və

$$V_{ss}^{kl}(1,2) = \frac{3(X_k - x_k)(X_l - x_l) - \delta_{kl}r_{12}^2}{r_{12}^5} \quad (4)$$

burada  $X_1 = x_1$ ,  $X_{-1} = y_1$ ,  $X_0 = Z_1$  və  $x_1 = x_2$ ,  $x_{-1} = y_2$ ,  $x_0 = z_2$  - uyğun olaraq, birinci və ikinci elektronun dekart koordinatlarıdır.

Hesablamalar zamanı bir-, iki-, üç- və dördmərkəzli spin-spin inteqralları meydana çıxır. Bu zaman əsas çətinlik iki-, üç- və dördmərkəzli inteqralların hesablanması zamanı yaranır. Bu çətinlikləri aradan qaldırmaq üçün Sleyter funksiyalarının köçürmə düsturundan istifadə etmək olar [3,4].

Köçürmə düsturunu üç dəfə tətbiq etməklə

$$J^{kl} = \int \chi_a(1)\chi_c(2)V_{ss}^{kl}(1,2)\chi_b(1)\chi_d(2)dv_1dv_2 \quad (5)$$

dördmərkəzli inteqrallarını daha sadə birmərkəzli spin-spin inteqralları ilə ifadə etmək olar. Burada  $\chi_p(i) \equiv (n_p l_p m_p)$   $p = a, b, c, d$  nüvələrin mərkəzlərində həqiqi Sleyter atom orbitalarıdır.

$$\begin{aligned} J^{kl} &= \left[ (n_a l_a m_a) (n_c l_c m_c) \right] V_{ss}^{kl}(1,2) \left[ (n_b l_b m_b) (n_d l_d m_d) \right] = \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n'_a=1}^N \sum_{l'_a=0}^{n'_a-1} \sum_{m'_a=-l'_a}^{l'_a} W_{n'_c l'_c m'_c, n'_a l'_a m'_a}^N(\bar{P}_{ca}) \sum_{n_{a1}=1}^N \sum_{l_{a1}=0}^{n_{a1}-1} \sum_{m_{a1}=-l_{a1}}^{l_{a1}} W_{n_b l_b m_b, n_{a1} l_{a1} m_{a1}}^N(\bar{P}_{ba}) \circ \\ &\circ \sum_{n'_{a1}=1}^N \sum_{l'_{a1}=0}^{n'_{a1}-1} \sum_{m'_{a1}=-l'_{a1}}^{l'_{a1}} W_{n_d l_d m_d, n'_{a1} l'_{a1} m'_{a1}}^N(\bar{P}_{da}) \left[ (n_a l_a m_a) (n'_a l'_a m'_a) \right] V_{ss}^{kl}(1,2) \left[ (n_{a1} l_{a1} m_{a1}) (n'_{a1} l'_{a1} m'_{a1}) \right] \end{aligned}$$

$\bar{P}_{ka} = \xi \bar{R}_{kb}$ ,  $\bar{R}_{kb}$  ( $k = c, b, d$ ) -  $k$  və  $b$  mərkəzlərini birləşdirən radius-vektordur.  $W^N$  - əmsalları örtmə inteqralları və binomial əmsallarla ifadə olunurlar. Eyni qayda ilə iki- və üçmərkəzli spin-spin inteqrallarını da birmərkəzli inteqralların sırası şəklində ifadə etmək olar.

### ƏDƏBİYYAT

1. Цюликe Л., Квантовая химия, М., Мир, 1976, 512 с.
2. Бете Г., Квантовая механика, М., Мир, 1965, 333 с.
3. И.И. Гусейнов, Э.М. Имамов, Ф.Г. Пашаев, Ф.С. Садыхов. Использование преобразования трансляции слейтеровских функций при расчете многоцентровых интегралов, Ж. Структ. Химии, 1985, 26, № 5, с. 172-175.
4. Т.Н. Əliyeva, Sleyter funksiyaları bazisində iki- və üçmərkəzli nüvə kvadrupol qarşılıqlı təsir inteqrallarının hesablanması, Azerbaijan Journal of Physics, v. XVI, №2, 2010, s. 81-83.

### ПРОДОЛЬНАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ $\Lambda$ -ГИПЕРОНА В ПОЛУИНКЛЮЗИВНОЙ РЕАКЦИИ $e^- N \Rightarrow e^- \Lambda X$

С.К.Абдуллаев, М.Ш.Годжаев, m\_qocayev@mail.ru  
Бакинский Государственный Университет

*В работе рассматривается процесс полуинклюзивного рождения поляризованного  $\Lambda$ -гиперона при ГНР поляризованного электрона нуклонами. В рамках пертурбативной квантовой хромодинамики с учетом партонных подпроцессов порядка  $\alpha_s$  ( $\gamma^* q \rightarrow qg$ ,  $\gamma^* q \rightarrow gq$ ,  $\gamma^* g \rightarrow q\bar{q}$ ) найдены выражения для неполяризованных и поляризованных структурных функций процесса. Определена и подробно исследована степень продольной поляризации  $\Lambda$ -гиперона.*

В последнее время широко обсуждается новый класс процессов – полуинклюзивное рождение адронов при глубоконеупругом рассеянии (ГНР) поляризованных лептонов на нуклонах, изучение которых является источником информации о функциях распределения и фрагментации кварков [1-3].

Здесь рассматривается процесс полуинклюзивного рождения поляризованного  $\Lambda$ -гиперона при ГНР поляризованного электрона нуклонами

$$e^-(k, \lambda_e) + N(P) \Rightarrow e^-(k') + \Lambda(P_\Lambda, \lambda_\Lambda) + X(P_X), \quad (1)$$

где в скобках указаны 4-импульсы частиц,  $\lambda_e$  и  $\lambda_\Lambda$  – продольные поляризации начального электрона и  $\Lambda$ -гиперона.

Полуинклюзивные реакции описываются пятью кинематическими переменными: суммарная энергия начальных частиц в системе центра масс

$$s = (k + P)^2 \approx 2(kP), \quad (2)$$

где массами частиц пренебрегаются; обычные переменные ГНР, определяемые регистрацией конечно электрона

$$x_B = \frac{Q^2}{2(qP)}, \quad Q^2 = -q^2 = -(k - k')^2. \quad (3)$$

Для описания конечного  $\Lambda$ -гиперона вводим переменную

$$z_\Lambda = \frac{(PP_\Lambda)}{(qP)} \quad (4)$$

и «поперечную» компоненту импульса  $q$ , ортогональную импульсам  $P$  и  $P_\Lambda$ :

$$q_i^\mu = q^\mu - \frac{(qP_\Lambda)}{(PP_\Lambda)} P^\mu - \frac{(qP)}{(PP_\Lambda)} P_\Lambda^\mu. \quad (5)$$

Отметим, что  $q_i^\mu$  является пространственноподобным вектором и определим его величину как

$$q_T = \sqrt{-q_i^2}. \quad (6)$$

Дифференциальное сечение процесса (1) представим в виде

$$d\sigma = \frac{1}{2s} \cdot \frac{d^3 P_\Lambda}{(2\pi)^3 2E_\Lambda} \cdot \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3 2E'} \cdot \frac{e^4}{q^4} L_{\mu\nu}(k, k') W^{\mu\nu}(P, P_\Lambda, q), \quad (7)$$

где

$$L_{\mu\nu}(k, k') = 2[k_\mu k'_\nu + k'_\mu k_\nu - g_{\mu\nu}(kk') - i\lambda_e \varepsilon_{\mu\nu\rho\sigma} k^\rho k'^\sigma] \quad (8)$$

– лептонный тензор, а  $W^{\mu\nu}(P, P_\Lambda, q)$  – адронный тензор.

Расчет эффективного сечения проводится в адронной системе. В этой системе импульсы виртуального фотона, нуклона и  $\Lambda$ -гиперона равны:

$$q^\mu = (0, 0, 0, -Q), \quad P^\mu = \frac{Q}{2x_B}(1, 0, 0, 1), \quad P_\Lambda^\mu = \frac{1}{2} z_\Lambda Q \left( 1 + \frac{q_T^2}{Q^2}, 2 \frac{q_T}{Q}, 0, \frac{q_T^2}{Q^2} - 1 \right), \quad (9)$$

где  $Q = \sqrt{-q^2}$ .

Из импульсов  $q^\mu$ ,  $P^\mu$  и  $P_\Lambda^\mu$  можно составить взаимно ортогональные друг-другу четыре вектора:

$$\begin{aligned} T^\mu &= \frac{1}{Q}(q^\mu + 2x_B P^\mu), & X^\mu &= \frac{1}{q_T} \left[ \frac{1}{z_\Lambda} P_\Lambda^\mu - q^\mu - \left( 1 + \frac{q_T^2}{Q^2} \right) x_B P^\mu \right], \\ Y^\mu &= \varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma} Z_\nu X_\rho T_\sigma, & Z^\mu &= -\frac{q^\mu}{Q}. \end{aligned} \quad (10)$$

Эти векторы нормализованы как  $T^\mu T_\mu = 1$ ,  $X^\mu X_\mu = Y^\mu Y_\mu = Z^\mu Z_\mu = 1$ . Отметим, что  $T$ ,  $X$  и  $Z$  являются полярными векторами, а  $Y$ -аксиальный вектор.

Адронный тензор сохраняется  $q_\mu W^{\mu\nu} = q_\nu W^{\mu\nu} = 0$  и его можно разложить на девять независимых тензором

$$W^{\mu\nu} = \sum_{k=1}^9 W_k^{\mu\nu} (F_k + \lambda_\Lambda G_k), \quad (11)$$

где  $F_k$  и  $G_k$  – неполяризационные и поляризационные структурные функции (СФ) адронов, которые зависят от переменных  $x_B, Q^2, z_\Lambda$  и  $q_T^2$ . Для построения тензоров  $W_k^{\mu\nu}$  воспользуемся векторами (10):

$$\begin{aligned} W_1^{\mu\nu} &= X^\mu X^\nu + Y^\mu Y^\nu, & W_4^{\mu\nu} &= X^\mu X^\nu - Y^\mu Y^\nu, & W_7^{\mu\nu} &= i(T^\mu Y^\nu - Y^\mu T^\nu), \\ W_2^{\mu\nu} &= g^{\mu\nu} + Z^\mu Z^\nu, & W_5^{\mu\nu} &= i(T^\mu X^\nu - X^\mu T^\nu), & W_8^{\mu\nu} &= T^\mu Y^\nu + Y^\mu T^\nu, \\ W_3^{\mu\nu} &= T^\mu X^\nu + X^\mu T^\nu, & W_6^{\mu\nu} &= i(X^\mu Y^\nu - Y^\mu X^\nu), & W_9^{\mu\nu} &= X^\mu Y^\nu + Y^\mu X^\nu. \end{aligned} \quad (12)$$

Тензоры  $W_k^{\mu\nu}$  ( $k=1, 2, 3, 4, 8, 9$ ) симметричны, а тензоры  $W_k^{\mu\nu}$  ( $k=5, 6, 7$ ) антисимметричны. Тензоры  $W_k^{\mu\nu}$  ( $k=1, 2, 3, 4, 5$ ) Р-четны, а все остальные Р-нечетны. Тензоры  $W_k^{\mu\nu}$  ( $k=5, 8, 9$ ) Т-нечетны и из-за Т-инвариантности электродинамики адронов они не вносят вклада в сечение процесса (1).

В адронной системе импульсы начального и конечного электрона поляризуются как

$$\begin{aligned} k^\mu &= \frac{1}{2} Q(ch\psi, sh\psi \cos\Phi, sh\psi \sin\Phi, -1), \\ k'^\mu &= k^\mu - q^\mu = \frac{1}{2} Q(ch\psi, sh\psi \cos\Phi, sh\psi \sin\Phi, +1) \end{aligned} \quad (13)$$

где  $\Phi$  – азимутальный угол между адронной и лептонной плоскостями, а гиперболический косинус задается выражением

$$ch\psi = \frac{2x_B s}{Q^2} - 1. \quad (14)$$

Произведение лептонных и адронных тензоров является функциями углов  $\Phi$  и  $\psi$ :

$$\begin{aligned} A_1 &= 1 + ch^2\psi, & A_4 &= \cos 2\Phi \cdot sh^2\psi, & A_7 &= 2\lambda_e \cos\Phi \cdot sh\psi, \\ A_2 &= -2, & A_5 &= -2\lambda_e \sin\Phi \cdot sh\psi, & A_8 &= -\sin\Phi \cdot sh2\psi, \\ A_3 &= -\cos\Phi \cdot sh2\psi, & A_6 &= -2\lambda_e ch\psi, & A_9 &= \sin 2\Phi \cdot sh^2\psi. \end{aligned} \quad (15)$$

Нами получено следующее выражение для дифференциального сечения процесса (1), из-за Р-инвариантности электродинамики адронов только функции ( $F_1, F_2, F_3, F_4, G_6$  и  $G_7$  отличны от нуля):

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{dx_B dQ^2 dz_\Lambda dq_T^2 d\Phi} &= \frac{\alpha^2}{16\pi 9x_B^2 Q^2} \{ (1 + ch^2\psi)F_1 - 2F_2 - \cos\Phi sh2\psi F_3 + \cos 2\Phi sh^2\psi F_4 - \\ &\quad - 2\lambda_e \lambda_\Lambda y (ch\psi G_6 - \cos\Phi sh\psi G_7) \}, \end{aligned} \quad (16)$$

В рамках пертурбативной квантовой хромодинамики с учетом партонных подпроцессов порядка  $\alpha_s$

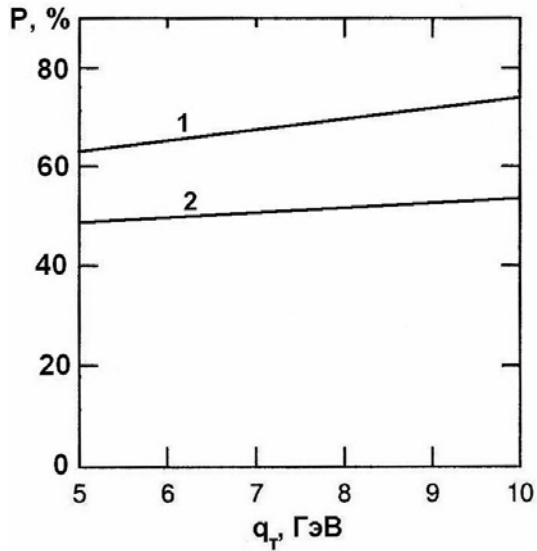
$$\gamma^* + q \Rightarrow q + g, \quad \gamma^* + q \Rightarrow g + q, \quad \gamma^* + g \Rightarrow q + \bar{q}$$

найлены СФ, из-за сложности выражений здесь их не приводятся.

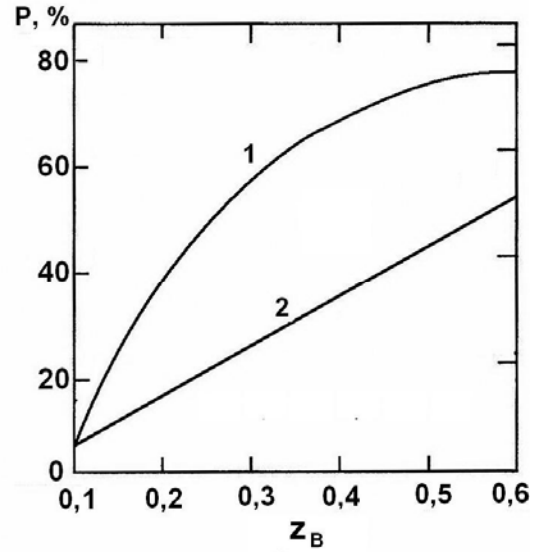
Степень продольной поляризации  $\Lambda$ -гиперона, проинтегрированной по азимутальному углу  $\Phi$ , определяется выражением

$$P(\lambda_e) = -\lambda_e \frac{2ch\psi G_6}{(1 + ch^2\psi)F_1 - 2F_2}. \quad (17)$$

Оценка степени продольной поляризации ( $\lambda_e$ ) проводится при энергиях COMPASS ( $s = 300 \text{ ГэВ}^2$ ) и EIC ( $s = 10^4 \text{ ГэВ}^2$ ). Переменные ( $Q^2, x_B$ ) нами выбраны как (100  $\text{ГэВ}^2$ , 0,4) для COMPASS энергий и (100  $\text{ГэВ}^2$ , 0,012) для EIC энергий. Результаты расчетов приведены на рис. 1 и 2.



**Рис. 1.** Зависимость поляризации от поперечного импульса при  $z_B = 0,5$  и кинематики COMPASS (кривая 1) и EIC (кривая 2).



**Рис. 2.** Зависимость поляризации от переменной  $z_B$  и кинематики COMPASS (кривая 1) и EIC (кривая 2).

Как видно из рисунков степень продольной поляризации почти не зависит от поперечного импульса  $q_T$ , а от переменной  $z_B$  наблюдается зависимость. Ростом  $z_B$  поляризация увеличивается.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Barone V., Melis S., Prokudin A. Boer-Mulders effect in unpolarized SIDIS: An analysis of the COMPASS and HERMES data on the  $\cos 2\phi$  asymmetry // Phys. Rev. D, 2010, N81, p.114026-1-9
2. De Florian D., Navarro G.A., Sassot R. Sea quarks and gluon polarization in the nucleon at NLO accuracy // Phys. Rev. D71, 2005, 094018-1-12
3. Mulders P.J. Polarized structure functions // Progress in Particle and Nuclear Physics, 2005, N55, p.243-269

## ***D* - ÖLÇÜLÜ ŞREDİNGER TƏNLIYİNİN VUD-SAKSON POTENSİALLI SAHƏDƏ $l \neq 0$ HALI ÜÇÜN SUPERSİMMETRİK HƏLLİ**

**V.H. Bədəlov**

*Fizika Problemləri İnstitutu, Bakı Dövlət Universiteti  
Z.Xəlilov küç. 23, Az-1148, Bakı, Azərbaycan*

İşdə Supersimmetrik kvant mexanikasına görə ixtiyari  $l$ - halında Vud-Sakson potensialı sahədə  $D$ -ölçülü radial Şredinger tənliyinin supersimmetrik həlli tapılmışdır. Həmçinin potensialın  $V_0$  dərinliyindən, radial  $n$  və orbital  $l$  kvant ədədlərindən,  $D$ ,  $a$ ,  $R_0$  parametrlərindən asılı məhdud sayda enerji spektri müəyyən edilmişdir.

Sferik simmetrik  $V(r)$  potensialı sahədə  $D$ -ölçülü radial Şredinger tənliyi aşağıdakı kimidir [1]:

$$\frac{d^2 R_{nl}(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_{nl}(r)}{dr} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[ E_{nl} - V(r) - \frac{\hbar^2 l(l+D-2)}{2\mu r^2} \right] R_{nl}(r) = 0, \quad (0 \leq r < \infty) \quad (1)$$

burada  $l$  - orbital kvant ədədi,  $\mu$  - sistemin gətirilmiş kütləsidir.

Yeni  $u_{nl}(r) = r^{\frac{D-1}{2}} R_{nl}(r)$  funksiyası üçün (1) tənliyi

$$\frac{d^2 u_{nl}(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[ E_{nl} - V(r) - \frac{\hbar^2 \left( l + \frac{D-1}{2} \right) \left( l + \frac{D-3}{2} \right)}{2\mu r^2} \right] u_{nl}(r) = 0 \quad (2)$$

olur. Yeni  $\tilde{l} = l + \frac{D-3}{2}$  parametri daxil etsək, (2) tənliyi aşağıdakı şəkllə düşər:

$$\frac{d^2 u_{nl}(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E_{nl} - V_{eff}(r)] u_{nl}(r) = 0, \quad (3)$$

burada  $V_{eff}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 \tilde{l}(\tilde{l}+1)}{2\mu r^2}$  - effektiv potensialdır.

Sferik simmetrik standart Vud-Sakson potensialı [2]

$$V(r) = - \frac{V_0}{1 + e^{-\frac{r-R_0}{a}}} \quad (a \ll R_0), \quad (4)$$

şəklindədir, burada  $V_0$  - potensialın dərinliyi,  $R_0$  - potensialın eni və ya nüvənin radiusu,  $a$  - parametri səth təbəqəsinin qalınlığı və o, ionlaşma enerjisinin təcrübi qiyməti ilə müəyyən olunur.

Vud-Sakson potensialı sahədə  $\tilde{l} \neq 0$  qiymətində (3) tənliyini analitik həll etmək mümkün deyil, buna səbəb olan effektiv  $V_{eff}(r)$  potensialın orbital mərkəzəqaçma

$V_l(r) = \frac{\hbar^2 \tilde{l}(\tilde{l}+1)}{2\mu r^2}$  potensialıdır. Ona görə də yeni  $x = \frac{r-R_0}{R_0}$  dəyişənini daxil edib,

$r = R_0(1+x)$  və orbital mərkəzəqaçma  $V_l(r)$  potensialını  $x=0$  ( $r=R_0$ ) nöqtəsi ətrafında Teylor sırasına ayıraq:

$$V_l(r) = \frac{\hbar^2 \tilde{l}(\tilde{l}+1)}{2\mu r^2} = \frac{\hbar^2 \tilde{l}(\tilde{l}+1)}{2\mu R_0^2} \cdot \frac{1}{(1+x)^2} = \tilde{\delta}(1-2x+3x^2-4x^3+\dots), \quad (5)$$

burada  $\tilde{\delta} = \frac{\hbar^2 \tilde{l}(\tilde{l}+1)}{2\mu R_0^2}$  - dir. Pekeris approksimasiyasına görə  $V_l(r)$  potensialı aşağıdakı kimi götürülür [3]:

$$V_l^*(r) = \tilde{\delta} \left( C_0 + \frac{C_1}{1+e^{\alpha x}} + \frac{C_2}{(1+e^{\alpha x})^2} \right), \quad (6)$$

burada  $\alpha = R_0/a$  -dir.  $V_l^*(r)$  potensialını  $x=0$  ( $r=R_0$ ) nöqtəsi ətrafında Teylor sırasına ayırıb,  $x$  - in uyğun dərəcələrinin müqayisəsindən  $C_0$ ,  $C_1$ ,  $C_2$  sabitlərini tapırıq:

$$C_0 = 1 - \frac{4}{\alpha} + \frac{12}{\alpha^2}; \quad C_1 = \frac{8}{\alpha} - \frac{48}{\alpha^2}; \quad C_2 = \frac{48}{\alpha^2}. \quad (7)$$

Beləliklə, yeni effektiv potensial

$$V_{eff}^*(r) = V_{WS}(r) + V_l^*(r) = \tilde{\delta} C_0 - \frac{V_0 - \tilde{\delta} C_1}{1 + e^{\frac{r-R_0}{a}}} + \frac{\tilde{\delta} C_2}{\left(1 + e^{\frac{r-R_0}{a}}\right)^2} \quad (8)$$

olur. Pekeris approksimasiyasına əsasən (3) tənliyində  $V_{eff}(r)$  yerinə  $V_{eff}^*(r)$  yazsaq, alarıq:

$$\frac{d^2 u_{nl}(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[ E_{nl} - \tilde{\delta} C_0 + \frac{V_0 - \tilde{\delta} C_1}{1 + e^{\frac{r-R_0}{a}}} - \frac{\tilde{\delta} C_2}{\left(1 + e^{\frac{r-R_0}{a}}\right)^2} \right] u_{nl}(r) = 0. \quad (9)$$

Supersimmetrik kvant mexanikasına görə əsas halın  $u_0(r)$  məxsusi funksiyası aşağıdakı kimi olar [4]:

$$u_0(r) = N \exp \left( -\frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar} \int W(r) dr \right), \quad (10)$$

burada  $N$  normalayıcı sabitdir və  $W(r)$ - superpotensialdır. Supersimmetrik partnyor  $V_{\pm}(r)$  potensialları ilə  $W(r)$  superpotensial arasında əlaqə aşağıdakı kimidir [4]:

$$V_{\pm}(r) = W^2(r) \pm \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu}} W'(r) + E \quad (11)$$

tənliyini ödəyir. (11) Rikkati tənliyinin həllini aşağıdakı şəkildə axtaraq:

$$W(r) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2\mu}} \left( A + \frac{B}{1 + e^{\frac{r-R_0}{a}}} \right), \quad (12)$$

burada  $A$  və  $B$  naməlum sabitlərdir.  $V_+(r) = V_{eff}^*(r)$  olduğundan, (7) və (12) münasibətlərini (11) ifadəsində yerinə yazıb, alınan bərabərliyin sağ və sol tərəflərindəki uyğun hədlərin müqayisəsindən tapırıq:

$$A^2 = -\frac{2\mu}{\hbar^2} (E_0 - \tilde{\delta} C_0), \quad 2AB - \frac{B}{a} = -\frac{2\mu}{\hbar^2} (V_0 - \tilde{\delta} C_1), \quad B^2 + \frac{B}{a} = \frac{2\mu \tilde{\delta} C_2}{\hbar^2}. \quad (13)$$

Ölçüsüz

$$\varepsilon^2 = -\frac{2\mu a^2}{\hbar^2}(E_0 - \tilde{\delta}C_0) > 0, \quad \beta^2 = \frac{2\mu a^2}{\hbar^2}(V_0 - \tilde{\delta}C_1) > 0, \quad \gamma^2 = \frac{2\mu a^2 \tilde{\delta}C_2}{\hbar^2} > 0 \quad (14)$$

parametrlərini daxil etsək, onda naməlum  $A$  və  $B$  parametrləri üçün (13) tənlikləri aşağıdakı şəkllə düşər:

$$A^2 = \frac{\varepsilon^2}{a^2}, \quad 2AB - \frac{B}{a} = -\frac{\beta^2}{a^2}, \quad B^2 + \frac{B}{a} = \frac{\gamma^2}{a^2}. \quad (15)$$

(12) ifadəsini (10) münasibətində yerinə yazıb, inteqralı hesablasaq, taparıq:

$$u_0(r) = N e^{Ar} \left( 1 + e^{-\frac{r-R_0}{a}} \right)^{-aB}. \quad (16)$$

Radial  $u_0(r)$  dalğa funksiyası üçün  $u_0(0) = 0$  və  $u_0(\infty) = 0$  sərhəd şərtlərinin ödənməsi üçün  $A < 0$ ,  $B > 0$  olmalıdır.  $A < 0$ ,  $B > 0$  şərtlərində (15) cəbri tənliklərin həlli

$$A = \frac{1}{2a} - \frac{\beta^2}{a(\sqrt{1+4\gamma^2}-1)}, \quad (17)$$

$$B = \frac{\sqrt{1+4\gamma^2}-1}{2a}, \quad (18)$$

$$E_0 = \tilde{\delta}C_0 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ \frac{1}{2a} - \frac{\beta^2}{a(\sqrt{1+4\gamma^2}-1)} \right]^2. \quad (19)$$

Tapılmış  $W(r)$  superpotensial  $r \rightarrow \infty$  olduqda  $W(r) \rightarrow -\frac{\hbar A}{\sqrt{2\mu}}$  olur. (12) ifadəsini (11)

münasibətində yerinə yazıb, supersimmetrik partnyor potensiallar üçün alarıq:

$$V_+(r) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ A^2 + \frac{B^2 - \frac{B}{a}}{\left(1 + e^{-\frac{r-R_0}{a}}\right)^2} + \frac{2AB + \frac{B}{a}}{1 + e^{-\frac{r-R_0}{a}}} \right] \quad \text{və} \quad V_-(r) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ A^2 + \frac{B^2 + \frac{B}{a}}{\left(1 + e^{-\frac{r-R_0}{a}}\right)^2} + \frac{2AB - \frac{B}{a}}{1 + e^{-\frac{r-R_0}{a}}} \right].$$

Qendenşteyn tərəfindən verilmiş invariant forma [5] aşağıdakı kimidir:

$$R(B_1) = V_+(B, r) - V_-(B_1, r). \quad (20)$$

(15) cəbri tənliklərdən ikincisi ilə üçüncünü tərəf-tərəfə toplasaq

$$2AB + B^2 = \frac{\gamma^2 - \beta^2}{a^2}$$

və nəticədə alarıq:

$$A = \frac{\gamma^2 - \beta^2}{2a^2 B} - \frac{B}{2}. \quad (21)$$

(12) şəkllində olan  $W(r)$  superpotensial forma invariantlıq şərtini ödəyir. Başqa sözlə,

$$R(B_1) = V_+(B, r) - V_-(B_1, r) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ \left( \frac{\gamma^2 - \beta^2}{2a^2 \left(B - \frac{1}{a}\right)} - \frac{B - \frac{1}{a}}{2} \right)^2 - \left( \frac{\gamma^2 - \beta^2}{2a^2 B} - \frac{B}{2} \right)^2 \right] \quad (22)$$



$$R(B_i) = V_+ \left[ B - \frac{i-1}{a}, r \right] - V_- \left[ B - \frac{i}{a}, r \right] = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ \left( \frac{\gamma^2 - \beta^2}{2a^2 \left( B - \frac{i}{a} \right)} - \frac{B - \frac{i}{a}}{2} \right)^2 - \left( \frac{\gamma^2 - \beta^2}{2a^2 \left( B - \frac{i-1}{a} \right)} - \frac{B - \frac{i-1}{a}}{2} \right)^2 \right]. \quad (23)$$

Bu proseduranı təkrar etsək, hər addımda  $B_n = B_{n-1} - \frac{1}{a} = B - \frac{n}{a}$  əvəzləməsini o vaxta qədər davam etmək lazımdır ki,  $B_n \geq 0$  olsun. Nəticədə  $H_-(B)$  hamiltonianının tam diskret spektrini alırıq:

$$\begin{aligned} E_{nl}^{(D)} = \tilde{\delta}C_0 - \frac{\hbar^2}{2\mu} & \left[ \left( \frac{\gamma^2 - \beta^2}{2a^2 \left( B - \frac{n}{a} \right)} - \frac{B - \frac{n}{a}}{2} \right)^2 - \left( \frac{\gamma^2 - \beta^2}{2a^2 \left( B - \frac{n-1}{a} \right)} - \frac{B - \frac{n-1}{a}}{2} \right)^2 + \left( \frac{\gamma^2 - \beta^2}{2a^2 \left( B - \frac{n-1}{a} \right)} - \frac{B - \frac{n-1}{a}}{2} \right)^2 - \right. \\ & \left. - \left( \frac{\gamma^2 - \beta^2}{2a^2 \left( B - \frac{n-2}{a} \right)} - \frac{B - \frac{n-2}{a}}{2} \right)^2 + \dots + \left( \frac{\gamma^2 - \beta^2}{2a^2 \left( B - \frac{2}{a} \right)} - \frac{B - \frac{2}{a}}{2} \right)^2 - \left( \frac{\gamma^2 - \beta^2}{2a^2 \left( B - \frac{1}{a} \right)} - \frac{B - \frac{1}{a}}{2} \right)^2 + \right. \\ & \left. + \left( \frac{\gamma^2 - \beta^2}{2a^2 \left( B - \frac{1}{a} \right)} - \frac{B - \frac{1}{a}}{2} \right)^2 - \left( \frac{\gamma^2 - \beta^2}{2a^2 B} - \frac{B}{2} \right)^2 + \left( \frac{1}{2a} - \frac{\beta^2}{a(\sqrt{1+4\gamma^2} - 1)} \right)^2 \right] = \\ & = \tilde{\delta}C_0 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ \frac{\gamma^2 - \beta^2}{2a^2 \left( B - \frac{n}{a} \right)} - \frac{B - \frac{n}{a}}{2} \right]^2 = \tilde{\delta}C_0 - \frac{\hbar^2}{2\mu a^2} \left[ \frac{\beta^2 - \gamma^2}{\sqrt{1+4\gamma^2} - 2n - 1} + \frac{\sqrt{1+4\gamma^2} - 2n - 1}{4} \right]^2. \quad (24) \end{aligned}$$

Beləliklə,  $\varepsilon, \beta, \gamma$  parametrlərini və (7) ifadələrini (24)-də nəzərə alsaq,  $l$  - halında enerjinin məxsusi qiyməti üçün alınmış ifadə, digər metodla, yəni Nikiforov-Uvarov metodunun tətbiqilə tapılmış ifadə [3] ilə üst-üstə düşür.

$D=3$  olduqda,  $l=0$  halında sistemin əlaqəli halları yoxdur. Çünki, bu halda  $A < 0, B > 0$  bərabərsizlikləri ödənmir.  $D > 3$  olduqda,  $l=0$  halında sistemin əlaqəli halları vardır. Enerjinin məxsusi qiyməti, potensialın  $V_0$  dərinliyindən, potensialın  $R_0$  enindən, səthin  $a$  qalınlığından və  $D$  parametridən aslıdır. Beləliklə,  $n$  və  $V_0$  üçün müəyyən olunmuş şərtlər, yəni  $A < 0, B > 0$  bərabərsizlikləri ödənərsə, onda əlaqəli hallar mövcuddur və bu halların enerji spektri məhdud saydadır.

## ƏDƏBİYYAT

- [1] J. Avery, *Hyperspherical Harmonics. Applications to Quantum Theory* (Kluwer, Dordrecht, 1989).
- [2] R. D. Woods and D. S. Saxon, *Phys. Rev.* **95** (1954) 577.
- [3] V. H. Badalov, H. I. Ahmadov, arXiv:math-ph/1111.4734 V1.
- [4] F. Cooper, A. Khare, U. Sukhatme, arXiv: hep-th/9405092 V2.
- [5] Л.Э.Генденштейн, И.В.Криве, *УФН*, **146** (1985) 553.

## ОЦЕНКА УПРУГОГО РАССЕЙЯНИЯ НЕЙТРОНОВ КАЛЬЦИЕМ В РАМКАХ ОПТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Х.Ш.Абдуллаев, Г.Я.Труханов, М.Ш.Мамедов, Н.А.Ибрагимов

*Бакинский Государственный Университет*

### Аннотация

Обсуждается вопрос о возможности улучшения данных по упругому рассеянию нейтронов – кальцием при добавлении к потенциалу оптической модели дальнедействующего члена типа  $\text{const}/r^4$ , предположительно именуемого электромагнитную природу. Оптический потенциал усложненной формы исследуется в дискретном приближении для нейтронов с энергиями от 0,5 кэВ до 14 МэВ. Показано, что описание упругих сечений малоуглового рассеяния при энергиях нейтрона 1-5 МэВ, заметно улучшается при введении дальнедействия  $\sim 0,7 \cdot 10^{-40} \text{см}^3$ .

**Ключевые слова:** нейтрон, ядро, оптический потенциал.

В настоящей работе предпринята попытка в рамках единого подхода проанализировать экспериментальные данные по упругому рассеянию нейтронов кальцием полученные в разное время для оценки возможного дальнедействия электромагнитной природы между нейтроном и ядром. При этом обращается внимание на возможные проявления эффекта электрической поляризуемости нейтрона в относительно сильном кулоновском поле ядра, т.е. появления у него дипольного момента  $\vec{p} = \alpha \vec{E}$ , приводящего к дополнительному взаимодействию типа  $\text{const}/r^4$ . По вопросу о существовании подобного эффекта исследователи до сих пор не пришли к единому мнению. Оценка коэффициента поляризуемости  $\alpha$  колеблются в интервале от  $10^{-42}$  до  $10^{-49} \text{см}^3$  [1]. Причина сложившейся ситуации по видимому кроются как в характере полученной экспериментальной информации, так и в недостатках процедуры её анализа. Естественно было бы искать основные эффекты от дополнительного взаимодействия, спадающего с расстоянием медленнее, чем ядерное, в области малых углов рассеяния нейтронов. Однако оценка амплитуды поляризационного взаимодействия [2] показывает, что для нейтронов с энергией 14 МэВ главный максимум амплитуды простирается до углов  $\sim 20^\circ$ , а для нейтронов с энергией  $\sim 1 \text{МэВ}$  до  $90^\circ$  и т.д. Несмотря на это, большинство исследователей при измерении дифференциальных сечений для нейтронов с энергиями 1-10 МэВ ограничились диапазоном углов  $\theta$ , меньших  $20^\circ$ .

Возникающая при сравнении форм расчетного и экспериментального угловых распределений необходимость нормировки значительно ослабляет эффекты дополнительного взаимодействия при небольшом угловом диапазоне, в котором выполнены измерения сечений рассеяния.

Отметим некоторые недостатки процедуры анализа дифференциальных сечений.

Воспользуемся представлением дифференциального сечения рассеяния нейтрона при наличии поляризационного дальнедействия в виде:

$$\delta(\theta) = \delta_{\text{я}} + 2 \text{Re} f_{\text{я}} f_{\text{пол}} + f_{\text{но}}^2 \quad (1)$$

где  $b_{\text{я}}$  – сечение рассеяния короткодействующим ядерным потенциалом,

$f_{\text{пол}}$  – амплитуда поляризационного рассеяния [2].

Реальная часть амплитуды ядерного рассеяния часто является величиной отрицательной, что может приводить к большой или меньшей взаимной компенсации второго и третьего членов в формуле (1). Степень компенсации зависит и от величины ко-

эфициента поляризуемости  $\alpha$ , которому пропорциональна амплитуда  $f_{\text{пол}}$ , и от величины  $\text{Ref}$ , которая не одинаково при различных энергиях нейтрона.

Отсюда, во-первых, следует, что нельзя делать категорических выводов, об отсутствии большой поляризуемости по результатам измерений для одной энергии нейтрона. Необходим анализ данных в широком энергетическом диапазоне. Во вторых, в общем случае нельзя пренебрегать третьим членом в формуле (1). Если коэффициент  $\alpha \sim 10^{-42} \text{ см}^3$ , то ядерная амплитуда в десятки и сотни раз больше поляризационной и вкладом квадрата последней можно пренебречь. Если поляризуемость велика, то обе амплитуды имеют один порядок величины и отсутствие заметных искажений в угловых распределениях из-за сильной взаимной компенсации второго и третьего членов в формуле (1) может быть интерпретировано как отсутствие большой поляризуемости нейтрона.

В данной работе мы приводим анализ данных ряда экспериментальных работ [3-5] по угловым распределениям киловольтных нейтронов от ядер кальция в рамках оптической модели с добавлением поляризационного потенциала, не вводя ограничений на величину коэффициента поляризуемости и требуя в рамках программы автоматического поиска параметров потенциала реалистического описания среднего уровня полных сечений взаимодействия.

Аналогическая подгонка параметров выполнена и для высокоэнергетического диапазона нейтронов  $E_n \sim 1 \div 14 \text{ МэВ}$  с привлечением данных работ по оценке поляризуемости нейтрона и данных об энергетической зависимости сечения рассеяния нейтронов на малый угол ( $\sim 1,5 \div 3^0$ ) [4,5].

В работе использован ядерно-оптический потенциал усложненной формы. Его реальная часть представляет собой сумму двух потенциалов Вудса-Саксона с параметрами:  $V_1, R_1, a_1$  и  $V_2, R_2, a_2$  соответственно (обозначения общепринятые). Мнимая часть потенциала имеет два максимума с параметрами  $W_{s1}, R_{w1}, b_1$  и  $W_{s2}, R_{w2}, b_2$  соответственно. Имеется, кроме того, и «объемное поглощение» в виде доли  $\chi$  от реальной части потенциала. Спин – орбитальное взаимодействие имеет форму Томаса-Ферми с параметрами  $V_{so}, R_{so}, a_{so}$ .

Сначала проведено предварительное исследование параметров потенциала с использованием экспериментального материала для 9 энергией нейтрона в диапазоне от 0,5 КэВ до 14 МэВ.

Были найдены следующие геометрические параметры потенциала (в фм):

$$\begin{aligned} R_1 &= 7,5; & a_1 &= 0,44; & R_2 &= 7,03; & a_2 &= 0,69; \\ R_{w1} &= 7,15; & b_1 &= 0,47; & R_{w2} &= 8,05; & b_2 &= 0,53; \\ R_{s0} &= 7,05; & a_{s0} &= 0,49; & V_{s0} &= 12,41 \text{ МэВ}; \end{aligned}$$

Поскольку в настоящей работе к ядерному потенциалу добавляется поляризационное дальноедействие, то могла понадобиться некоторая перенормировка параметров ядерного потенциала для сохранения качества описания экспериментального материала.

Дальноедействие введено в форме [6]

$$-U_{\text{пол}}(r) = \begin{cases} \frac{1}{2} \alpha Z^2 \ell^2 \left( \frac{1}{r^4} \right) & r > R \\ \frac{1}{2} \alpha Z^2 \ell^2 \left( \frac{1}{R^4} \right) \left( 3 - \frac{2r^2}{R^2} \right) & r \leq R \end{cases},$$

где  $R$  – радиус равномерно заряженной сферы, который принят равным радиусу  $R_1$ .

Новые значения параметров крайне мало отличаются от исходных (в фм):

$$R_1 = 7,55; \quad a_1 = 0,42; \quad R_2 = 7,15; \quad a_2 = 0,63;$$

$$R_{w1}=6,87; \quad b_1=0,44; \quad R_{w2}=7,95; \quad b_2=0,57;$$

$$R_{s0}=6,98; \quad a_{s0}=0,38; \quad V_{s0}=12,82 \text{ МэВ};$$

Этот набор оптических параметров использован в качестве исходного для более детального исследования в двух энергетических диапазонах 0,5-250 кэВ и 1÷14 МэВ.

Результаты подгонки параметров потенциала в киловольтной области могут быть кратко суммированы следующим образом. Используя результаты предварительных исследований и фиксируя коэффициент поляризуемости  $\alpha$  при различных значениях от 0 до  $2 \cdot 10^{-40} \text{ см}^3$ , получили наилучшее описание угловых распределений и полных сечений с помощью дискретных наборов динамических параметров, различных для каждого  $\alpha$ .

Оказалось, что квадратичный функционал, относящийся к полным сечениям, имеет минимум при  $\alpha \sim 1 \cdot 10^{-40} \text{ см}^2$ . Наилучшее описание угловых распределений получается при  $\alpha=0$ , числовое значение соответствующего квадратичного функционала увеличивается всего на 12% при изменении  $\alpha$  от 0 до  $1 \cdot 10^{-40} \text{ см}^3$ . Соответствующие дискретные наборы динамических параметров приведены в таблице. Значительных изменений параметров при введении  $\alpha=1,10^{-40} \text{ см}^3$  не происходит.

*Оптические параметры для низких энергий нейтронов.*

$E_n$ кэВ	$V_1$ , МэВ		$V_2$ , МэВ		$V_{s1}$ , МэВ		$V_{s2}$ , МэВ	
	0	0,7	0	0,7	0	0,7	0	0,7
0,5	22,15	23,02	26,88	26,54	0,13	0,15	0,68	0,91
0,55	23,46	25,15	28,15	27,15	0,17	0,15	0,17	0,82
1,61	25,42	25,85	25,37	25,31	0,18	0,26	1,26	1,35
2,55	24,02	26,45	27,03	26,07	0,27	0,45	1,43	1,41
4,05	23,15	24,77	27,38	27,85	0,54	1,27	1,27	1,33
5,50	24,25	25,05	27,75	28,01	1,25	1,28	2,21	1,82
8,35	24,47	25,15	27,45	27,22	2,27	2,35	2,35	2,12
25,00	24,07	24,27	25,12	24,75	2,27	2,27	1,70	2,13
86,00	23,85	23,73	24,83	24,53	1,13	2,17	1,80	1,73
100,00	23,85	23,65	24,47	24,25	1,50	1,60	1,75	1,76
150,00	23,85	23,50	24,67	23,97	2,20	1,72	1,72	2,21
225	23,85	23,45	24,21	23,97	2,75	1,96	1,00	2,15

Приводим параметры потенциала, пригодного для расчетов в интервале энергий нейтронов 0,5-300 кэВ.

$$V_1=23,5-8,76 E_n \text{ (МэВ)}; \quad a_1=0,165 \text{ фм}; \quad R_1=8,145 \text{ фм}$$

$$V_2=26,85-17,13 E_n \text{ (МэВ)}; \quad a_2=0,43 \text{ фм}; \quad R_2=6,97 \text{ фм}$$

$$W_{s1}=1,12+0,21 E_n \text{ (МэВ)}; \quad b_1=0,53 \text{ фм}; \quad R_{w1}=6,85 \text{ фм}$$

$$W_{s2}=1,57+1,46 E_n \text{ (МэВ)}; \quad b_2=0,53 \text{ фм}; \quad R_{w2}=7,86 \text{ фм}$$

$$X=0,0003+0,05101 E_n \text{ (МэВ)}; \quad V_{s0}=13,11 \text{ фм}; \quad \chi=0.$$

Результаты подгонки в высокоэнергетическом интервале нейтронов сводится к следующему. Для различных значений коэффициента  $\alpha$  при фиксированных геометрических параметрах ядерного потенциала найдены дискретные наборы динамических параметров, наилучшим образом описывающие совокупность экспериментальных данных.

Отметим, что суммарные отличия в качестве описания данных наборами параметров с  $\alpha=0$  и  $0,7 \cdot 10^{-40} \text{ см}^3$  малы. Для всех выделенных энергий квадратичный функционал дифференциальных сечений рассеяния на большие углы уменьшается в 1,5-2

раза при введении в расчет  $\alpha=0,7 \cdot 10^{-40} \text{ см}^3$  малы и продолжает уменьшаться вплоть до  $\alpha=1,5 \div 2 \cdot 10^{-40} \text{ см}^3$ . При столь больших  $\alpha$  заметно ухудшается, в частности, описание полных сечений.

Результаты исследований в высоких энергетических диапазонах приводят к следующим оптическим параметрам (в фм) при  $\alpha=0$ :

$$\begin{aligned} R_1 &= 8,22; & a_1 &= 0,43; & R_2 &= 7,75; & a_2 &= 0,63; \\ R_{w1} &= 6,85; & b_1 &= 0,42; & R_{w2} &= 7,78; & b_2 &= 0,51; \\ R_{s0} &= 7,15; & a_{s0} &= 0,47; & V_{s0} &= 13,4 \text{ МэВ}. \end{aligned}$$

Для практических расчетов в диапазоне энергий 0,5-14 МэВ можно рекомендовать этих, в так называемых, «геометрических» параметров, а также, линейную зависимость динамических параметров:

$$\begin{aligned} V_1 &= 23,15 - 0,37 E_n \text{ (МэВ)}; & V_2 &= 27,3 - 0,413 E_n \text{ (МэВ)}; \\ W_{s1} &= 0,2 + 0,43 E_n \text{ (МэВ)}; & W_{s2} &= 2,37 - 0,15 E_n \text{ (МэВ)}; \\ \chi &= 0,0087 E_n \text{ (МэВ)}; & V_{s0} &= 14,2 \text{ (МэВ)} \end{aligned}$$

Расчет в рамках оптической модели обнаруживает крайне слабую зависимость угловых распределений нейтронов киловольтного диапазона от величины  $\alpha \sim 1 \cdot 10^{-40} \text{ см}^3$ .

Наиболее чувствительным к введению дальнего действия являются сечения малоуглового рассеяния при энергиях нейтрона 1÷5 МэВ. При введении дальнего действия  $\alpha \sim 0,7 \cdot 10^{-40} \text{ см}^3$ . Хотя из расчета следует, что наилучшее описание получается с дальним действием, соответствующим величине  $\alpha \sim 0,7 \cdot 10^{-40} \text{ см}^3$ , вывод о том, что дальнее действие имеет поляризационную природу, не может быть сделан из анализа данных, относящихся к одному ядру. Поляризационная амплитуда должна удовлетворять, хотя бы, квадратичной зависимости от заряда ядра, что может быть проверено лишь проведением аналогичного анализа сечений для других ядер.

## Литература

1. Аникин Г.В., Котухов И.Н.// ВАН и Т Ядерные константы 1995, стр.55.
2. Лебедев Н.С., Морозов В.М.// Атом. энергия 1995, т.28, с.310.
3. Александров Ю.А., Самосвет Г.С. Письма в ЖЭТФ 1996, т.4 с. 496.
4. Annand J.R., Finlay R.W.// Nucl. Rhys, 2001, A443, p-249.
5. Горлов Г.В., Лебедева Н.С., Морозов В.М.// ЯФ 1998 т.8, с.1086.
6. Raparort J., Cheema T.S.// Nucl. Phys 2001 A 296, p.95.

## ГАЗОВЫЙ СОСТАВ ПОДЗЕМНЫХ ВОД ПРИКАСПИЙСКОЙ НИЗМЕННОСТИ

Т.А.Имамова

*Бакинский Государственный Университет, Институт Физических проблем  
Баку, Азербайджан*

### РЕЗЮМЕ

*Статья посвящается физической характеристике подземных минеральных и термальных вод Прикаспийской низменности. С целью установления закономерности формирования физико-химического состава подземных вод Прикаспийской низменности нами изучены более 50 скважин, которые пробурены на термальные воды в этом регионе Во всех этих скважинах, которые прбурены на структурах Ялама, Худат, На*

*брань, Хачмас и Дивичинского районов были выявлены термальные воды, которые характеризуются разнообразием по ионно-солевому и газовому составу, по степени минерализации, температуре, дебиту, микрокомпонентному составу, условиям формирования и распространения ресурсов, а также содержанием бальнеологических активных компонентов. Но данная статья посвящается физической характеристике подземных минеральных и термальных вод Прикаспийской низменности.*

Для выявления закономерности распространения минеральных и термальных вод, оценка их бальнеологических свойств, установлении их генезиса большое значение имеют природные газы как свободно выделяющиеся, так и растворенные в минеральных и термальных водах.

В.И.Вернадский [1] по газовому составу выделил 6 основных природных вод: 1. Кислородные; 2. Углекислые; 3. Азотные; 4. Метановые; 5. Сероводородные; 6. Водородные.

Наиболее распространенными газами, содержащимися в природных минеральных и термальных водах являются азотные углекислые, сероводородные, метановые и радоновые. Несомненно, эти газы позволяют судить о природной обстановке формирования минеральных и термальных вод.

Основными типами газов, которые встречаются в минеральных и термальных водах, являются газы воздушного происхождения (азот, кислород, углекислоты и др.), газы биохимического происхождения (метан, сероводород, тяжелый углеводород, азот, углекислота и др.) и газы метаморфического происхождения (преимущественно углекислота). Благородные инертные газы, а также газы радиоактивного происхождения являются сопутствующими основным типам газов.

В междуречья Самур - Атачай минеральные и термальные воды сопровождаются в основном азотными, метановыми, азотно-метановыми, метано-азотными и сероводородными газами.

Отмечая это в своих трудах А.Г.Аскеров [2] в классификации минеральных и термальных вод Азербайджана, по газовому составу, в основном, привлекает внимание на четыре наиболее распространенные газы ( $\text{CO}_2$ ,  $\text{HS}$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{N}_2$ ). А при районировании территории Азербайджана на пять типов ( $\text{CO}_2$ ,  $\text{HS}$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{Rn}$ ) газов.

Нами были изучены газы, сопровождающие минеральные и термальные воды в междуречье Самур-Атачай. При этом, были отобраны пробы газов из вод минеральных и термальных скважин и источников в спонтанном и растворенном видах, которые в дальнейшем были анализированы в лабораториях республиканской экспедиции "Азгеокаптажминвод" и лаборатории комитета по геологии и минеральным ресурсам Азербайджана.

В результате этих исследований было установлено, что минеральные и термальные воды региона обогащены в основном азотно-метановыми, метано-азотными газами. Эти газы сопровождаются сероводородным газом биогеохимического происхождения.

Азотно-метановые минеральные и термальные воды встречаются в основном в составе вод скважин: скв. № № 4, 115, (Хачмас); 20 (Худат); метано - азотные скв. №111 (Ялама);

Породы, из которых выделяются азотно - метановые и метано-азотные воды с включением сероводородного газа разнообразны; они представлены широким литолого - стратиграфическим диапазоном от меловых карбонатных отложений до неогеновых континентальных формаций. По ионно - солевому составу они относятся к хлоридно - гидрокарбонатно – натриево – кальциево - магниевому типам, а по газовому составу к азотным и метановым.

Ниже в таблице приводится газовый состав минеральных и термальных вод из скважин и источников междуречья Самур - Атачай.

Таблица

Месторождение	№№ скв.	Глубина м	CO <sub>2</sub> %	CH <sub>4</sub> %	N <sub>2</sub> %	Газонасыщенность Мг/л
Ялама	111	1140-946	27,64	56,96	15,40	5,39
Ялама	20	1926-1710	3,55	75,89	20,56	16,88
Хачмас	115	2477-2033	4,44	6,04	89,52	32,48
Худат	113	1895-1394	27,48	9,20	63,32	7,17

Систематизация и обобщения данных анализов подземных минеральных и термальных вод Прикаспийской низменности, т.е. воды междуречья Самур-Атачай по физико-химической характеристике имеет большое научно-практическое значение.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. В.И. Вернадский. *Труды по биогеохимии и геохимии почв* Москва, 1992, с.193.
2. А.Г. Аскеров. *Факторы и процессы, формирующие химический состав ократерм. В кн: Проблемы теоретической и региональной гидрогеохимии.* Изд-во МГУ, 1979, с.109-111
3. Т.А. Имамова. *Закономерности размещения минеральных и термальных вод междуречья Самур-Атачай.* Диссертационная работа, Баку, 2007, 145 стр.

#### ОБ ЭВОЛЮЦИИ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ ЧИСЛЕННЫХ СХЕМ МОДЕЛЕЙ НЕЛИНЕЙНЫХ ХАОТИЧЕСКИХ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ.

Аразов Г.Т., Новрузов А.Г., Фарханг Ю.Б.  
e-mail: [arazov\\_h@yahoo.com](mailto:arazov_h@yahoo.com)

Бакинский Государственный Университет  
НИИ Прикладной Математики

**Резюме.** В работе рассматриваются неуловимые хаосы в динамических системах связанные с точностями малых величин порядка значений погрешностей различных возмущений т.е. с неуловимыми неопределенностями вариаций возмущений оценок погрешностей измерений (наблюдений). На примерах оценок изменений точности методов Эйлера и Рунге-Кутты, величин гравитационного постоянного  $G$  и элементов орбиты  $V$  спутника Юпитера показаны, что их эволюции со временем связаны с неуловимыми эволюциями распределения масс и энергии как в центральном теле так и в близлежащем пространстве. Иначе говоря, суммы бесконечно малых неуловимых возмущений, за бесконечно большие промежутки времени, являются источниками неуловимых изменений в динамических системах.

**Ключевые слова:** Математические модели, возмущения, неуловимые погрешности, эволюция неуловимых погрешностей.

Известные закономерности природы верны только с точностью тех статистических данных (измерений и наблюдений) и методов их определения, которыми использованы при их установлении. Из года в год они уточняются. Одновременно уточняются и им соответствующие закономерности и теории [1-14]. Оценка точности предопределений, в природе наблюдаемых процессов, зависят от точности начальных данных, от

точности параметров рассматриваемой системы, а также и от точности величин возмущений характеризующих различных природных ограниченностей. Поэтому численные и аналитические схемы моделей, которые допускают учет различных аппроксимаций и эволюций возмущений всевозможных ограниченностей очень ценны. Однако, в соответствии выше указанным причинам решения модельных задач всегда заметно отличаются от решений реально наблюдаемых проблем.

При исследовании природных явлений, часто пользуются методами Эйлера, Рунге- Кутта и т.д. Первый из них отличается простотой, а второй высокой точностью вычислений.

Суть метода Эйлера заключается в определении решения дифференциального уравнения типа.

$$\frac{du}{dt} = f(t, u), \quad (t > 0); \quad u(0) = 0 \quad (1)$$

в виде

$$u(t + \Delta t) = u(t) + \Delta t u' + \frac{(\Delta t)^2}{2!} u'' + \frac{(\Delta t)^3}{3!} u''' = u(t) + \Delta t f + 0(\Delta t^2). \quad (2)$$

Оно представляет решение уравнения (1) с точностью первого порядка относительно  $\Delta t$ . Тейлеровое разложение в ряды допускает исключение членов с  $\Delta t^3$  или членов более высокого порядка. Таким образом, легко получить выражение метода Рунге-Кутта с точностью второго порядка относительно  $\Delta t$ :

$$u(t + \Delta t) = u(t) + \Delta t f + \frac{\Delta t^2}{2!} f' + 0(\Delta t^3) u(t) + \Delta t \left\{ f + \frac{\Delta t}{2} (f_t + f f_u) \right\} + 0(\Delta t^3). \quad (3)$$

Аналогично, формула метода Рунге-Кутта с точностью  $\Delta t^4$  может быть представлена выражением:

$$u(t + \Delta t) = u(t) + \frac{\Delta t}{6} (s_1 + s_2 + s_3 + s_4) \quad (4)$$

где  $s_1 = f(t, u)$ ,  $s_2 = f(t + \frac{\Delta t}{2}, u + s_1 \frac{\Delta t}{2})$ ,  $s_3 = f(t + \frac{\Delta t}{2}, u + s_2 \frac{\Delta t}{2})$ ,  $s_4 = f(t + \Delta t, u + s_3 \Delta t)$ .

Заметим, что эллиптическое движение, вращающегося с постоянной угловой скоростью  $\omega$  тела, может быть представлено равенствами:

$$x = a \cos \omega t, \quad y = b \sin \omega t. \quad (5)$$

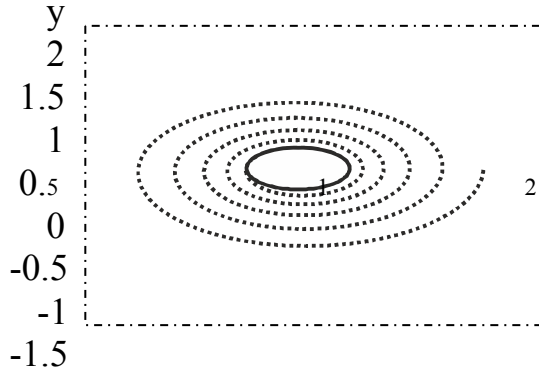
Дифференциальные уравнения этого движения имеет вид:

$$\left. \begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= -a\omega \sin \omega t = -\frac{a}{b} \omega y, \\ \frac{dy}{dt} &= b\omega \cos \omega t = -\frac{b}{a} \omega x. \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

Следуя [1], допуская  $a = 1$ ,  $b = 0,6$ , в случае когда угловая скорость вращения тела в орбите  $\omega = 2\pi$ ; используя шаг интегрирования равным 0,01, применяя метод Эйлера геометрическое изображение решения уравнений (6) представлено на рис. 1. При этом использованы известные разложения в ряды тригонометрических функций вида:



$$\sin x = x - \frac{x^3}{6} + \dots; \quad \cos x = 1 - \frac{x^2}{2} + \dots$$

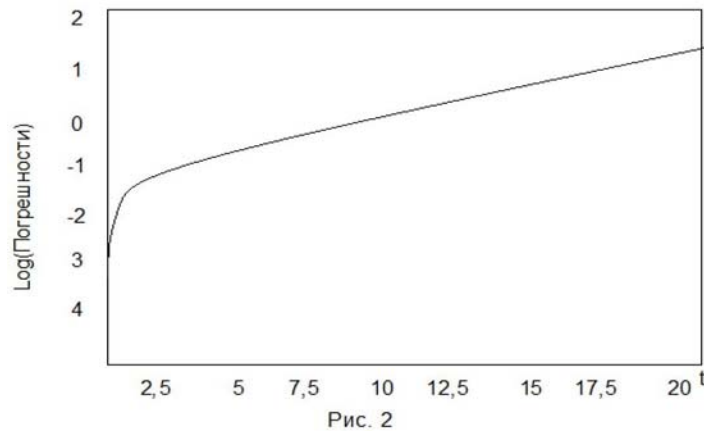


Эволюция эллиптического движения. 1-эллиптическое движение с постоянной угловой скоростью вычисленной методом Эйлера. 2- эллиптическое движение с постоянной угловой скоростью вычисленной методом Рунге – Кутты.

Эволюция логарифмических погрешностей этих решений дана на рисунке 2.

Эволюция погрешностей оценивается следующим образом.

Рис. 2 и рис.1, они взяты из [1], представляют изменения логарифма погрешностей со временем, и их возможные влияния на оценки состояний системы (6).



Эволюция логарифмических погрешностей эллиптического движения, вычисленной методом Эйлера.

Образование, рождения, движения и эволюция импульсивных (мгновенна возмущающих - остро чувствительных ) хаотических динамических процессов, типа извержения вулканов, оползни, землетрясения, и т.д., могут быть представлены системой дифференциальных уравнений:

$$\dot{x}(t+1) = f(t, x(t)) \quad (7)$$

где  $t \in J = (t_0, +\infty)$  ( $t_0 \geq 0$ ),  $x \in R^n$  являются переменными положений,  $f : J \times R^n \rightarrow R^n$ , мгновенные значения непрерывной вектор функции.

Чувствительность системы (7) в частности может быть представлена формулой.

$$\dot{x}_{k+1} = \{t_k, u_k(x(t_k))\}. \quad (8)$$

Она представляет эффекты мгновенных изменений положений рассматриваемой системы в моменты

$t_k$ , где  $t_1 < t_2, \dots, t_k < \dots, \lim t_k = \infty$  и  $t_1 > t_0$ , так что

$$u_k(x(t_k)) = \Delta x(t_k) = x(t_k^+) - x(t_k^-) \quad (9)$$

где  $x(t_k^+) = \lim_{t \rightarrow t_{k+1}} x(t)$ ,  $x(t_k^-) = \lim_{t \rightarrow t_k} x(t)$ .

Мгновенные возмущения ценны тем, что они могут превратить нестабильные, неустойчивые хаотические динамические системы в стабильные управляемые устойчивые системы, которые не могут быть сведены к линейным устойчивым системам обще известными методами.

Оценки вариаций погрешностей констант хаотических динамических систем в природе очень ценны. К таким величинам относится и погрешности изменения значений постоянной гравитации  $G$ . Им соответствующие значения отношений  $\dot{G}/G$  приведены в таблице 1. Она составлена используя данные в работе Havard B. Sandvik [3]. Они свидетельствуют о вариациях ограниченностей распределения масс и энергии со временем, в системах в которых они определены

Таблица 1.

	$\dot{G}/G \cdot 10^{12}$	Источник
1	$2 \pm 4$	R.W.Hellings, et. al., Phys. Rev. Lett. 51 (1983) 1609
2	$(1.0 \pm 2.3)10^1$	T.Damour, et. al., Phys. Rev. Lett. 61 (1988) 1152
3	$0.1 \pm 10.4$	J. Muller, et.al., Astrophys.J. 382 (1991) L 101
4	$4 \pm 5; -9 \pm 18$	V.M.Kaspi, et.al. Astrophys. J. 428 (1994) 713
5	$1 \pm 8$	J.G.Williams, et,al., Phys. D 53 (1996) 6730
6	$0.6 \pm 2.0$	S.E. Thorsett, Phys. Rev. Lett., 77 (1996) 14 321435

Одним из таких примеров является и V спутник Юпитера. Этот спутник будучи самым близким к центральному телу ( $r/a = 2,5$  где  $r$  - экваториальный радиус Юпитера,  $a$  - большая полуось орбиты V спутника) подвергаются к самым сильным возмущениям в Солнечной системе. Значительность погрешностей возмущений многих исследователей наводили на мысль об искусственности этого спутника. Наблюдаемые пределы изменения координат этого спутника  $\xi$  и  $\eta$  равны [11]:

$$-59^0,66 \leq \xi_0 \leq 60^0,65; \quad [n_\xi = 1096; (t-t_0)_\xi = 8428,88660 \text{ Ю.Д.}] \quad (10)$$

$$-02^0,46 \leq \eta_0 \leq 02^0,37; \quad [n_\eta = 0123; (t-t_0)_\eta = 9635.95966 \text{ Ю.Д.}] \quad (11)$$

где  $\xi_0$  - наблюдаемые иовицентрические угловые расстояния от центра Юпитера до V спутника,  $\eta_0$  - наблюдаемые иовицентрические угловые расстояния от экваториальной плоскости Юпитера до V спутника; в скобках указаны число наблюдений  $n_\xi$  и  $n_\eta$ . Нами использованы результаты наблюдений Э.Бернарда, Г.Струве и В.Вуркома [14]. Они охватывают соответственно интервалы времени  $(t-t_0)_\xi$  и  $(t-t_0)_\eta$ , в юлианских днях.

Оценки разностей:

$$-0,022 \leq \xi_0 - \xi_c \leq 0,81; \quad (13)$$

$$-0,61 \leq \eta_0 - \eta_c \leq 0,53; \quad (14)$$

где  $\xi_c$  и  $\eta_c$  результаты вычислений, соответствующих к моментам наблюдаемым значениям координат спутника (10) и (11), на базе формул математической модели задачи многих активно гравитирующих центров [11]. Оценки разностей (13) и (14) соответствуют к погрешностям наблюдаемых значений координат  $\xi$  и  $\eta$ .

**Заключение.** Рассмотрены неуловимые погрешности хаотических динамических систем в зависимости от точности методов исследования, от точности величин начальных данных, а так же и от точности погрешностей измерений (наблюдений). Показано, что отбрасываемые члены при аппроксимациях, в различных моделях [1-14], в рядах всегда должны быть меньше оценок точности используемых начальных данных, от оценок точности параметров модели, а также и от оценок точности определения погрешностей граничных ограничений. Все они определяются распределением масс и энергии в динамической комплексной системе, все элементы которой все время находятся в движении, т.е. в процессе комплексной эволюции. Эволюция чувствительности к погрешностям возмущений привлекательны, прежде всего, тем, что именно они управляют многими природными процессами. В качестве примеров оценок неуловимых вариаций рассмотрены точности методов Эйлера и Рунге-Кутты, величин гравитационного постоянного  $G$  и элементов орбиты  $V$  спутника Юпитера. Показаны, что их эволюции со временем связаны с изменениями распределения масс и энергии как в центральном теле так и в близлежащем пространстве. Иначе говоря, суммы бесконечно малых неуловимых возмущений, за бесконечно большие промежутки времени, являются источниками заметных изменений в динамических системах.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Takeshi Yanagino and Shinnosuke Oharu/ Sensitivity of Numerical Schemes for Lorenz Systems. *Advances in Mathematical Sciences and Applications*, Vol. 18, N 2 (2008), pp. 675-707.
2. Аразов Г.Т., Ганиева С.А., Новрузов А.Г. Эволюция внешней формы и внутренней структуры Земли. Баку - Элм -2006. с. 193.
3. Havard B. Sandvik / Constants of Nature, Novello, Marrio (ed) et al., The tenth Marcel Grossmann meeting. Rio de Janeiro, Brazil, 20-26 July 2003, 3 vols. Hackenack, N.J: World Scientific, 258-277, 2006.
4. Alejo B. Blaya and Victor J. Lopez. The Smallest Amount of Chaos. *Rocky mountain Journal of Mathematics* Vol. 40, N. 1, 2010, pp. 27-49.
5. Benest D., Froeschle C., Lega E., Hamiltonian systems and Fourier analysis, New prospects for gravitational dynamics. *Advances in Astronomy and Astrophysics*. Cambridge Scientific Publishers. 2005. pp. 308.
6. Arazov G.T. By variations of the elements in mathematical models of the dynamical systems. The 4<sup>th</sup> Congress of the Turkic World Mathematical Society (TWMS) Baku, Azerbaijan, 1-3 July, 2011, p. 421.
7. Kening Lu and Qiudong Wang. Chaos in differential equations driven by a nonautonomous force. *Nonlinearity* 23, (2010). 2935-2975.
8. Аразов Г.Т., Новрузов А.Г. О структуре геодинамической модели Земли. *N.Tusi and Modern Astronomy*, p. 177-182 (2002).
9. Аразов Г.Т., Новрузов А.Г. Формулы выражающие изменения параметров сжимающейся геодинамической модели Земли. Труды межд. Научной конф. «Исследование Солнечной системы», 114-117 (2004).

10. Аразов Г.Т., Новрузов А.Г. О связях динамической системы Якоби с геодинимическими моделями Ю. Баркина и С. Кери. НАН Азербайджана, Циркуляр ШАО, № 109, р. 16-20 (2005).
11. Аразов Г.Т. Аналитическая теория движения пятого спутника Юпитера. Известия АН Аз. ССР Сер. физ. – тех. и мат. Наук 1972, № 2, с. 75-81.
12. Ueoka Y., Suzuki T., Yamamoto S. Analysis on the efficiency of statistical measures to identify network structure of chaos coupled systems. International Journal of Modern Physics C Vol.21, N. 8 (2010) 1065-1079.
13. Brown R and Jain V.A new approach to chaos. Dynamics of Continuous, Discrete and Impulsive Systems series A: Math. Analysis 16 (2009) 863-890.
14. Van Woerkom A.J. Astron. Papers, Prepared for the use of the American ephemeris and nautical Almanac, vol. XIII, p. 1, 1950.

**POLİQLİSİNİN  $d^n$  ( $n=1,2$ ) ELEKTRON KONFİQURASIYASINA  
MALİK ATOM VƏ İONLARLA KOMPLEKSLƏRİNİN ELEKTRON-FƏZA  
QURULUŞUNUN XÜSUSSİYYƏTLƏRİ.**

**Bayramova D.B., Nəbiyev N.S.**

*Bakı Dövlət Universiteti*

Metal atomlarının və ionlarının müxtəlif üzvi maddələrlə valent və qeyri-valent kompleksləri biokimyəvi proseslərdə mühüm rol oynayır. Bu növ təbii komplekslərin canlı orqanizmlərdə baş verən proseslərdə, o cümlədən oksigen və yük daşınmasında, biokimyəvi reaksiyaların idarə edilməsində fəaliyyət mexanizmlərinin müəyyənləşdirilməsi uzun illər təbiətşünaslığın ən aktual problemlərindən biri olmuşdur və bu gün də öz aktuallığını saxlayır. Bu istiqamətdə aparılan tədqiqatların sistemli şəkildə müqayisə və izah edilməsi üçün bu komplekslərin fəza və elektron quruluşunun, eləcə də bu quruluşların dinamik xüsusiyyətlərinin atom-molekul səviyyəsində modelləşməsi tələb olunur.

Sc və Ti atomlarının polyqlisinlə komplekslərində və sərbəst halda atom orbitallarının məskunluğu

Cədvəl 1.

Orbital	Polyqlisin +Sc	Polyqlisin +Ti	Sc	Ti
$s$	0.19051	0.921608	2.000	2.000
$p_x$	0.133936	0.147279	0.000	0.000
$p_y$	0.119474	0.128663	0.000	0.000
$p_z$	0.135136	0.134730	0.000	0.000
$d_z^2$	0.209122	0.535076	0.325512	0.611282
$d_{xz}$	0.139654	0.037344	0.311164	0.082396
$d_{yz}$	0.144926	0.041879	0.191106	0.435165
$d_x^2$	0.165239	0.232079	0.17176	0.739915
$d_{xy}$	0.181681	0.269138	0.000458	0.385704

Təqdim olunan məruzədə xarici elektron təbəqəsi  $d^n(n=1,2)$  konfigurasiyasına malik olan atom və ionların polyqlisinlə qeyri-valent komplekslərinin elektron fəza quruluşunun kvant mexaniki hesablama nəticələri şərh olunur. Hesablamalarda  $d^n$  elektron konfigurasiya malik atomların əsas termlərinin dalğa funksiyaları və enerji səviyyələri təyin edilmiş, polyqlisin-metal kompleksinin həndəsi parametrləri və elektron quruluşunu müəyyənləşdirən parametrlər tapılmışdır.

Sc və Ti atomlarının və onların polyqlisinlə komplekslərinin enerji parametrləri.

Cədvəl2.

Enerji	Polyqlisin +Sc	Polyqlisin +Ti	Sc	Ti
$E_t$	-252697,910	-254491.311	-1031.344	-2142.189
$E_{bin}$	-16914.229	-17606.807	0.0205	-10.009
$E_{izo}$	-235783.681	-236884.503	-1031.365	-2132.188.
$E_{ee}$	-1873220.505	-1856760.206	-1031.365	-2142.189
$E_{cc}$	1620522.655	1602268.894	0.000	0.000
$H$	-10624.361	-11294.939	90.321	102.299

Metali əhatə edən koordinasiya təbəqəsinin birinci sferasına daxil olan atomlar müəyyənləşdirildikən sonra, mərkəzi atomun enerji səviyyələrinin parçalanma xüsusiyyətləri analiz edilmişdir. Hesablamalar zamanı çoxatomlu sistemlərin mexaniki molekulyar, molekulyar dinamik və yarımempirik kvant- mexaniki modelləri, elege də çox elektronlu atomun termlərinin hesablanması qaydaları əsas götürülmüşdür.

### Ədəbiyyat

1. Frenking G ; Pidium U ; “Ab initio studies of transition – metal compounds: the nature of the chemical bond to a transition metal” Y. Chem soc., Dalton Trans, 1997, 1693
2. Демухаммедова С.Д., Алиева И.Н., Набиев Н.С., Годжаев Т.М. Электронное строение мономерных и димерных комплексов молекулы карнозина с цинком. Journal of Qafqaz University, n23 ,2009 c.114-126
3. Nəbiyev N.S. Kvant kimyəvi yarımempirik metodlar. Bak 86s. 2002

## GÜMÜŞ NANOHISSƏCİKLƏRİN FOTOLÜMINİSENT SPEKTRLARININ TƏDQIQI

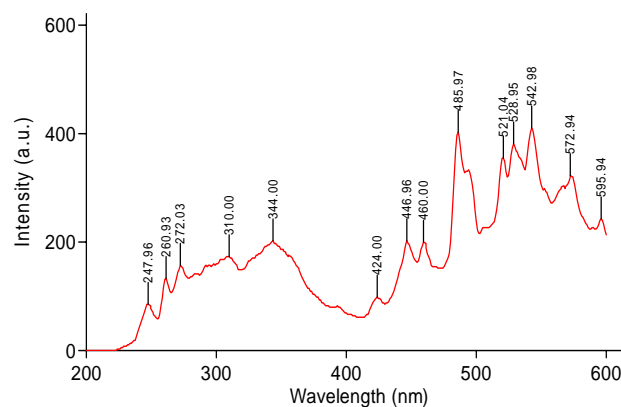
P.R. Məmmədov

Bakı Dövlət Universiteti

[poladazer@yhoo.com](mailto:poladazer@yhoo.com)

İşdə gümüş nanohissəciklərinin fotolüminisent xassələri tədqiq olunmuşdur. Bu məqsədlə gümüş nanohissəciklərin ihəyacanlaşdırmaq üçün ultrabənövşəyi və görünən işıqdan istifadə olunmuşdur. Aparılan təcrübi araşdırmadan müəyyən olmuşdur ki, gümüş nanohissəciklərinin həyacanlanma spektrində dalğa uzunluğunun müxtəlif qiymətlərində bir-birindən fərqli 14 intensivlik piki müşaidə olunur. Gümüş nanohissəciklərin spirt məhlulunda həyacanlanma spektrinə nəzərən və flüoroseent spektrlərində bir neçə Stoks-Lomel sürüşmələri müşahidə olunur. Belə ki, gümüş nanohissəciklərin spirt məhlulunu 247,96 nm dalğa uzunluqlu şüa ilə həyacanlandırıqda alınan flüoroseent spektrdə həyacanlanma maksimumuna nəzərən 57,88 nm və 246,88 nm Stoks-Lomel sürüşmələri müşahidə olunur. Temperaturu dəyişdikdə flüoroseent spektrlərdə maksimumların qiymətinin və formasının dəyişməsi gümüş nanohissəciklərinin flüoroseent elektron keçidlərinin temperaturdan asılı olduğunu göstərir.

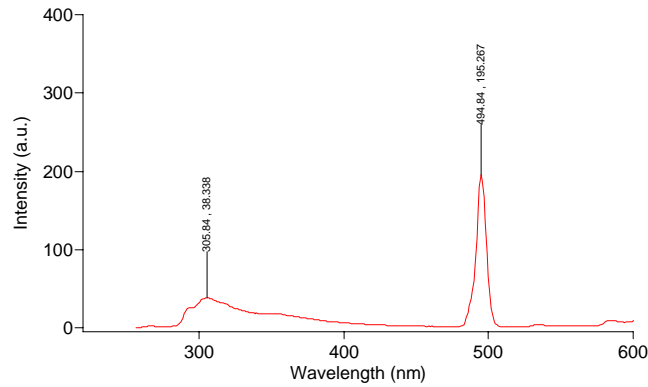
Nanoelektronikanın müasir inkişafı bu sahə üçün perspektivli olan yeni nano materialların axtarışını və onların fiziki xassələrinin hərtərəfli öyrənilməsini tələb edir.[1] Belə perspektivli materiallardan biri də gümüş nanohissəcikləridir. Məhz bu baxımdan son illər gümüş nanohissəciklərinin fotolüminisent xassələri tədqiqatçıların diqqətini daha çox cəlb edir[2] Belə ki, tərkibində gümüş nanohissəcikləri olan məhlullar ultrabənövşəyi və görünən şüalarla işıqlandırıldıqda kəskin maksimumlarla seçilən fotolüminisent şüalanma müşahidə olunur. Şək.1-də gümüş nanohissəcikləri üçün təcrübədən alınmış həyacanlaşma spektri verilmişdir.



Şək.1. Gümüşün nanohissəciklərinin həyacanlanma spektri. Slit 2,5 nm, 600V.

Aparılan təcrübi araşdırmadan müəyyən olmuşdur ki, gümüş nanohissəciklərinin həyəcanlanma spektrində dalğa uzunluğunun müxtəlif qiymətlərində kəskin seçilən 14 intensivlik maksimumları müşahidə olunur. Intensivliyin bu pikləri dalğa uzunluqlarının 247,96 nm, 260,93 nm, 272,03 nm, 310,00 nm, 344,00 nm, 424,00 nm, 446,96 nm, 460,00 nm, 485,97 nm, 521,04 nm, 528,95 nm, 542,94 nm və 595,94 nm qiymətlərinə uyğun gəlir. Flüoroseant spektrlərin alınmasında 247,96 nm və 272,03 nm dalğa uzunluqlu şüalardan istifadə olunmuşdur. 2-ci şəkildə gümüş nanohissəciklərin spirt məhlulunda 247,96 nm dalğa uzunluqlu şüa ilə həyəcanlandırıldıqda alınan flüoroseant spektri verilmişdir. Şəkildən görünür ki, flüoroseant spektral asılılıqda dalğa uzunluğunun 2 qiymətində intensivlik maksimumu müşahidə olunur. Bu maksimumlar dalğa uzunluğunun 305,84 nm və 494,84 nm qiymətlərinə uyğundur.

3-cü şəkildə gümüş nanohissəcikləri olan spirt məhlulunu 272,03 nm dalğa uzunluqlu şüa ilə işıqlandırdıqda alınan spektral asılılıq verilmişdir. Şəkildən görünür ki, spektral asılılıqda iki müxtəlif intensivlikli maksimum müşahidə olunur. Spektral asılılıqda yaranan bu piklər dalğa uzunluğunun 345,07 nm və 544,02 nm qiymətlərinə uyğundur

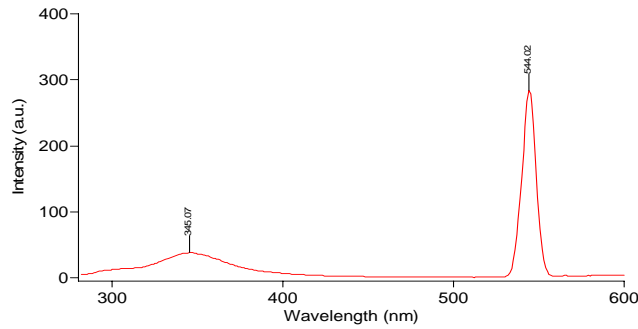


Şək.2. Gümüşün nanohissəciklərinin flüoroseant spektri. Həyəcanlanma 247,96 nm, slit 2,5nm, 1000V.

Gümüş nanohissəciklərinin spirt məhlulunun həyəcanlanma spektrinə və flüoroseant spektrlərinə nəzər saldıqda bir neçə Stoks-Lomel sürüşmələri müşahidə olunur. Belə ki, gümüş nanohissəciklərin spirt məhlulunu 247,96 nm dalğa uzunluqlu şüa ilə həyəcanlandırıldıqda alınan flüoroseant spektrdə həyəcanlanma maksimumuna nəzərən 57,88 nm və 246,88 nm Stoks-Lomel sürüşmələri müşahidə olunur.

Gümüş nanohissəcikləri məhlulunun 272,03 nm dalğa uzunluqlu şüa ilə həyəcanlandırıldıqda alınan flüoroseant spektrdə həyəcanlanma maksimumuna nəzərən 73,04 nm və 271,99 nm Stoks-Lomel sürüşmələri müşahidə olunur.

Gümüş nanohissəciklərin spirt məhlulunun temperaturunu və qatılığını dəyişdikdə flüoroseant spektrlərində intensivliyin maksimum qiymətlərinin və spektrin formasının dəyişməsi müşahidə olunur.



Şək.3.Gümüşün nanohissəciklərinin flüoroseant spektri.Həyəcanlanma 272,03 nm, slit 2,5nm,

Temperaturu dəyişdikdə flüoroseant spektrlərdə maksimumların qiymətinin və formasının dəyişməsi gümüş nanohissəciklərinin flüoroseant elektron keçidlərinin temperaturdan aslı olduğunu göstərir. Qatılığı dəyişdikdə flüoroseant spektrlərdə maksimumların qiymətinin və formasının dəyişməsi gümüş nanohissəciklərinin aqreqasiya dərəcəsinin dəyişməsi ilə izah olunur.

#### ƏDƏBİYYAT

1. G.A. Ozin, Adv. Mater. 1992 4. S.612-615
  2. D.D. Evanoff Jr, G. Chumanov, J. ChemPhysChem 2005, 6, S. 1221-1231
  3. Siüach Om P. Sen P.// Journal of Luminescence 2009. 129, S.6-11
- Məhərrəmov A.M., Məmmədov P.R. baki universiteti xəbərləri 2008, №4. S.29-30

## **BİOLOJİ AKTİV PEPTİD BİRLƏŞMƏLƏRİN FƏZA QURULUŞLARININ VƏ QURULUŞ-FUNKSİYA ƏLAQƏLƏRİNİN TƏDQIQI**

**Ağayeva G. Ə.**

**gulshen@mail.ru**

*Fizika Problemləri İnstitutu, Bakı Dövlət Universiteti*

#### **Xülasə**

Molekulyar mexanika və molekulyar dinamika üsulları vasitəsi ilə bir sıra bioloji aktiv peptidlərin fəza quruluşu və konformasiya dinamikası tədqiq olunmuşdur. Nəzəri modelləşdirmə üsulları vasitəsi ilə alınmış nəticələr əsasında peptid molekulların quruluş-funksiya əlaqələrinin konformasiya aspektləri müəyyən edilmişdir və quruluş-funksiya məsələlərinin həlli üçün mərhələli tədqiqat sxemi təklif olunmuşdur.

Zülalların və peptidlərin bir-birinə və yaxud müxtəlif liqandlara müəyyən tərzdə bağlanmaq qabiliyyəti çoxlu bioloji proseslərin vacib xüsusiyyətidir. Molekulyar



komplekslərin strukturunun və energetikasını səciyyələndirilməsi bioloji funksiyaları başa düşmək üçün aparıcı faktordur və bu energetika biomolekulyar sistemlərin strukturu ilə funksiyası arasındakı ən vacib və faydalı əlaqəni araşdırılmasını təmin edir. Beləliklə, molekullarla manipulyasiya edərək yeni keyfiyyətli materialların alınmasını və bu materiallardan istifadə edərək nanoölçülü bioloji maşın və mexanizmlərin, canlı orqanizmlərə tələb olunan maddələrin, o cümlədən dərman preparatlarının daşınmasını həyata keçirən qurğuların yaradılmasını təmin etmək olar. Son illər kiçik bioloji aktiv peptidlərin fəza quruluşuna və onların funksiyalarına elmi maraq çox artmaqdadır və bu əsasən molekulların farmakologiyada istifadə edilə bilməsi səbəbindəndir. Bu kiçik peptidlərin əksəriyyəti canlı orqanizmdə geniş sayda bioloji funksiyaların tənzimləməsində aparıcı faktorlardır, onlar hormonlar, mediatorlar və ya inhibitorlar kimi təsir edirlər. Bu peptidlərin bəzilərinin dərman vasitəsi kimi istifadəsi olduqca perspektivlidir. Qeyd etmək lazımdır ki, bioloji aktiv peptid molekullarının fəza quruluşunu və konformasiya xüsusiyyətlərinin müəyyən etməsi bu molekulların quruluş-funksiya əlaqələrinin və təsir mexanizminin öyrənilməsində zəruri mərhələdir. Məlumdur ki, peptidin maksimal bioloji fəaliyyətini reallaşdırması üçün o öz təbii konformasiya vəziyyətində membrandakı reseptor ilə qarşılıqlı təsirdə olmalıdır. Lakin reseptorla kompleks əmələ gətirən peptid molekulun təbii quruluşu haqqda qabaqcadan xəbər vermək çətinidir, çünki kiçik xətti molekulların çoxu suda və başqa həlledicilərdə müqayisəli aşağı-enerjili konformasiya vəziyyətlərində olurlar.

Zülal və peptid molekulların quruluşları haqqda dəqiq məlumatlar rentgen kristalloqrafiya və nüvə maqnit rezonansı təcrübi üsullardan istifadə edilir. Yalnız coxatomlu molekulların rentgen kristalloqrafiyasından və NMR-sı üsulundan alınan nəticələrin analizi üçün və zülalın real fəza quruluşunu müəyyənləşdirilməsi üçün nəzəri modelləşdirmə üsullarından geniş istifadə edilir. Nəzəri modelləşdirmə üsulları çox mürəkkəb hesablar ilə bağlı olduğundan bu tədqiqatlar kompyuter proqramları ilə müəyyən yanaşmalar əsasında aparılır. Məlumdur ki, zülallar və peptidlər hərəkətli molekulyar sistemlərdir və onlar bir unikal fəza quruluşu deyil, təbii quruluşu ilə müqayisəli bir yığım konformasiya vəziyyətləri əmələ gətirirlər. Bu molekulun daxilində elektron, fırlanma və rəqsi hərəkətlərin nəticəsində əmələ gələn konformasiya çevikliyi, başqa sözlə molekulların dinamikasıdır. Hal-hazırda peptidlərin konformasiya imkanlarının tədqiqində nəzəri modelləşdirmə üsullarından geniş istifadə edilir. Bu üsulların əsasında mexaniki model olduğundan onları ümumiləşdirilib molekulyar mexanika üsulu kimi adlandırırırlar. Molekulyar mexanika üsulunda molekulun konformasiya enerjisinin hesablanması valent rabitələrinin və bucaqlarının deformasiyası, qeyri-valent, elektrostatik, torsion qarşılıqlı təsirlərin və hidrogen rabitələrinin enerji payları nəzərə alınır. Bu qarşılıqlı təsirlər müxtəlif potensiallar vasitəsilə hesablanır. Molekulyar mexanika üsullarının üstünlüyü ondan ibarətdir ki, tədqiq olunan peptid molekulunun tərkibində olan bütün funksional qrupların arasında əmələ gələn qarşılıqlı təsir qüvvələrin enerji paylarını və onların peptid molekulunun fəza quruluşunun formalaşmasındakı rolunu müəyyən etməyə imkan verirlər. Bundan başqa bu üsullar vasitəsilə peptid molekulların quruluş-funksiya əlaqələrinin problemin müəyyən yanaşmalar əsasında tədqiq etmək olur. Belə yanaşmalardan biri, bu problemin həllində bir molekulun seçilən tək-tək aminturşusu qalıqlarının əvəz edilmələri nəticəsində peptidlərin konformasiya imkanlarına təsir göstərməsi. Beləliklə əvəz edilən tək-tək aminturşusu qalıqlarının peptidlərin fəza quruluşuna təsiri dəqiq qiymətləndirilir.

Məlumdur ki, farmakoloji tədqiqatların əksəriyyətində bioloji aktiv peptidlərin fəza quruluşlarının formalaşmasında molekulun ayrı-ayrı qalıqların rolunu bilmədən onların müxtəlif modifikasiyası əsasında çoxlu sayda lazımsız yeni analoqlar sintez edilirdi. Lakin nəzəri kompyuter üsulları vasitəsilə aminturşusu qalıqların peptidin fəza quruluşundakı rolunu aydınlaşdırandan sonra onun dəqiq modifikasiyası, hidrofob və yaxud hidrofil xüsusiyyətlərə malik olması və həmçinin peptidin bioloji fəaliyyəti üçün tələb edilən qalıqların minimal

sayının müəyyən edilməsi mümkün olur. Burada ilk növbədə qalıqların özünəməxsus konformasiya xüsusiyyətlərini bilmək lazımdır. Misal üçün hansısa bir qalıqın prolin qalığı ilə əvəz edilməsi peptidin konformasiya imkanlarını məhdudlaşdırır və onun əsas peptid zəncirinin formalarının sayını azaldır. Əksinə, glisin qalıqının radikalı olmadığından, hansısa qalıqın glisin ilə əvəz olunması fərqli olaraq peptidin konformasiya azadlığını artırır və qalıq üçün bütün formalar mümkün olur. Eyni zamanda peptidlərin tərkibində mövcud olan yüklü qalıqların oxşar neytral qalıqlar ilə əvəz olunanda (Glu-Gln, Asp-Asn və ya Arg-Met) peptidin fəza quruluşunun formalaşmasında elektrostatik qarşılıqlı təsirlərin rolunu dəqiq qiymətləndirilib müəyyən etmək olar. Beləliklə, peptid molekulunun quruluş-funksiya əlaqələrinin konformasiya aspektlərinin müəyyən etməsi üçün aşağıdakı mərhələli tədqiqat sxemi təklif oluna bilər:

1. Təbii bioloji aktiv peptidin və onun bir sıra aktiv və qeyri aktiv analoqlarının seçilməsi. İstifadə: Eyni bioloji sınaqların nəticələri.

2. Təbii peptidin və onun analoqlarının konformasiya imkanlarının müəyyən edilməsi. İstifadə: Müxtəlif nəzəri modelləşdirmə üsulları (nəzəri konformasiya analizi, kvant kimyəvi və molekulyar dinamika üsulları).

3. Bioloji aktiv peptidin və onun aktiv analoqları üçün oxşar konformasiya xüsusiyyətlərini müəyyən etmək. İstifadə: Molekulyar modelləşdirmə üsulları.

4. Bioloji aktiv peptidin və onun qeyri aktiv analoqları arasında fərqli konformasiya xüsusiyyətlərini müəyyən etmək. İstifadə: Molekulyar modelləşdirmə üsulları.

5. Təbii bioloji aktiv peptidin və onun bir sıra aktiv və qeyri aktiv analoqlarının nəzəri konformasiya analizinin nəticələri əsasında yeni modifikasiya edilmiş effektiv peptid aqonistlərin və antaqonistlərin qabaqcadan təklif edilməsi. İstifadə: Molekulyar modelləşdirmə üsulları.

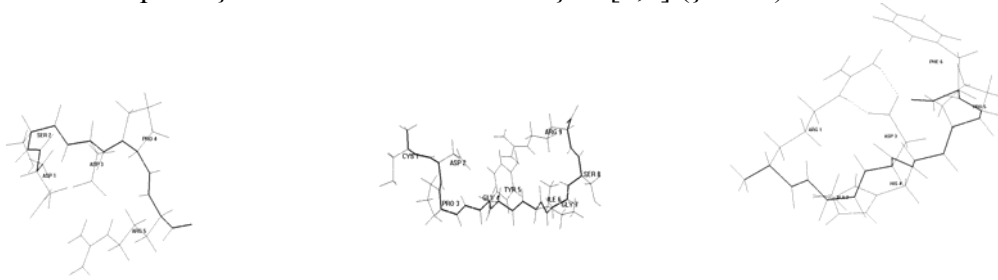
Aşağıda bəzi bioloji aktiv peptid molekulların fəza quruluşunun və quruluş-funksiya əlaqələrinin tədqiqatlarının nəticələri göstərilmişdir [1-28].

### **Bioloji aktiv peptid fragmentlər**

Məlumdur ki, bəzi bioloji aktiv zülal molekulların müəyyən fraqmentləri ana molekulun bioloji xassəsinə malikdirlər. Belə peptidlərdən immuqlobulin E molekulunun pentapeptidi (Asp-Ser-Asp-Pro-Arg), laminin molekulunun nonapeptidi (Cys-Asp-Pro-Gy-Tyr-Leu-Gly-Ser-Arg) və ovokinin 2-7 molekulu (Arg-Ala-Asp-His-Pro-Phe) aiddirlər. Onların nisbətən kiçik aminturşusu ardıcılığına malik olmaqlarına baxmayaraq, onlar müəyyən konformasiya xüsusiyyətlərinə malikdirlər və özlərinə məxsus stabil kvazitsiklik fəza quruluşu əmələ gətirirlər (şəkil 1). İmmuqlobulin E molekulunun peptid zəncirinin 320-324 hissəsinə uyğun gələn pentapeptid molekulu Asp-Ser-Asp-Pro-Arg başqa quruluş analoqlarından fərqli olaraq ana molekulun allergiya təsirinə qarşı istifadə edilir. Bu pentapeptidin farmakoloji təsiri ilə bağlı olaraq onun konformasiya xüsusiyyətlərinin tədqiqi elmi maraq kəsb edir. Molekulyar mexanika üsulu ilə bu peptidin ən optimal aşağı enerjili kompakt fəza quruluşu müəyyən edilmişdir və onun atomlarının koordinatları əsasında nəzəri fəza modeli qurulmuşdur [1-3].

Məlumdur ki, laminin molekulu xərçəng şişlərinin hüceyrələrinin metatazına səbəb olur və molekulun reseptorları insanda kartsinoma və fibrosarkoma xərçəng şişlərinin hüceyrələrinin plazmatik membranlarında müşahidə olunurlar. Müəyyən olunmuşdur ki, laminin molekulunun B1 zəncirində 925-933 seqmentinə uyğun gələn nonapeptid fraqmenti LamB1 – CDPGYİGSR – lamininin 67LR reseptoru ilə qarşılıqlı təsirə qirir və metastaz prosesinə inhibitor kimi təsir göstərir. Bu səbəbdən laminin nonapeptidinin konformasiya xüsusiyyətlərinin tədqiqi çox böyük elmi maraq kəsb edir. Nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə aparılan hesablamalar nəticəsində laminin nonapeptidin enerji cəhətdən ən əlverişli

konformasiya vəziyyəti aşkar edilmişdir və bu vəziyyətin atom koordinatları əsasında molekulun fəza quruluşunun modeli təklif edilmişdir [4,5] (şəkil 1).

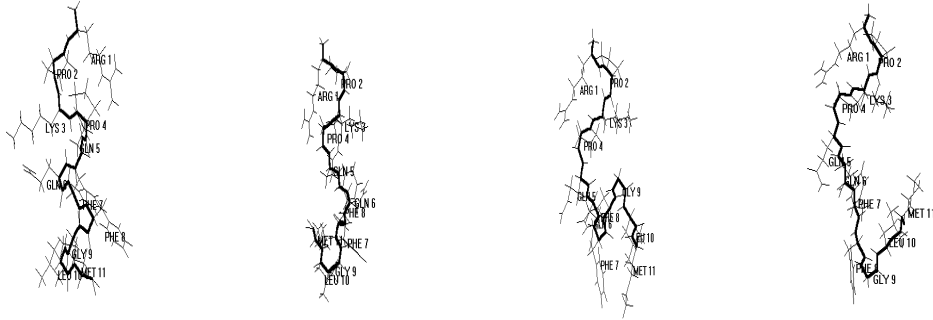


Səkil 1. Bioloji aktiv peptidlərin ən optimal fəza quruluşları: a) İmmuqlobulin E molekulunun pentapeptidi; b) Laminin molekulunun nonapeptidi və c) ovokinin 2-7 molekulu

Ovokinin (2-7) (RADHPF-Arg-Ala-Asp-His-Pro-Phe) hipertoniya əleyhinə istifadə edilən peptid molekulu ovalbumin zülal molekulunun 359-364 ardıcılıq hissəsindən hazırlanmış dərman əhəmiyyətli kimyəvi birləşmədir. Bioloji testlər vasitəsi ilə göstərilmişdir ki, bu peptid molekulu və onun analogları qan təzyiqinin canlı orqanizimlərdə stabiləşdirilməsini təmin edir [1-5]. Bu molekulun analoglarının təsir mexanizmini yaxşılaşdırmaq məqsədi ilə ilk növbədə təbii molekulun fəza quruluşunun və konformasiya imkanlarının öyrənilməsi çox böyük elmi maraq kəsb edir. Nəticədə hesablanmış optimal fəza quruluşları arasında çox kəskin enerji fərqi müşahidə olunur və enerji cəhətdən ən əlverişli konformasiya müəyyən olunmuşdur. Bu konformasiyada bütün amin turşularının qalıqları arasında çox effektiv qarşılıqlı təsirlər əmələ gəlmişdir (şəkil 1). Bunlardan arginin qalığının yan zənciri asparagin turşusu və fenilalanin qalığının yan zəncirlə ilə çox stabil qarşılıqlı təsirlər əmələ gətirir və onların qarşılıqlı təsir enerji paylarının qiyməti müvafiq olaraq -18.5 və -6.5 kkal/mol təşkil edir [6]. Eyni zamanda bu konformasiyada arginin qalığının yan zəncirinin asparagin turşusunun yan zəncirinin atomları arasında əmələ gələn iki molekul daxili hidrogen rabitələri molekulun fəza quruluşunu daha da sabitləşdirir. Qeyd etmək lazımdır ki, yuxarıda göstərilən peptid fragmentlərinin hamısında kompakt kvazitsiklik konformasiyaları arginin qalığının əks yüklü funksional qruplarla elektrostatik qarşılıqlı təsirlər yaradaraq, molekulyar-daxili hidrogen rabitələri bağlayırlar.

### **Neyropeptidlər**

Oxşar quruluşlarına və funksiyalarına malik olduqlarına görə eyni taxikinin ailəsinə məxsus substansiya P, neyrokinin A, neyrokinin B, kassinin, eledoisin, fizalaemin və fillomedusin neyropeptidlərin konformasiya xüsusiyyətləri və quruluş-funksiya əlaqələri tədqiq olunmuşdur. Qeyd etmək lazımdır ki, taxikin neyropeptidlərin fəza quruluşlarını bir yığım oxşar konformasiya vəziyyətləri ilə təsvir etmək olar. Müəyyən edilmişdir ki, onların ən optimal konformasiyaları orta və C-üçlü hissələrində alfa spiral quruluşunun əmələ gəlməsi enerji cəhətdən əlverişlidir. Bu nizamlı alfa spiral quruluşda çoxlu sayda requlyar hidrogen bağları əmələ gəlir. Mühitin polyarlığı artdıqca peptidlərin tərkibində alfa spiral seqmentin uzunluğu kiçilir. Şəkildə 1-də substansiya P molekulunun müxtəlif mühitlərdə ən optimal konformasiyası göstərilmişdir. Sonrakı mərhələlərdə taxikin neyropeptidlərinin qlisin qalığı ilə tək-tək əvəzolunmuş analogların konformasiya imkanları tədqiq olunmuşdur və göstərilmişdir ki, onların C-üçlü fragmentində yerləşən qalıqların əvəzolunması alfa spiral quruluşu üçün arzu olunmazdır. Bioloji testlər belə analogların funksiyalarının itirilməsini göstərir [7-12].



Səkil 2. Substansiya P molekulunun müxtəlif mühitlərdə optimal konformasiyası.

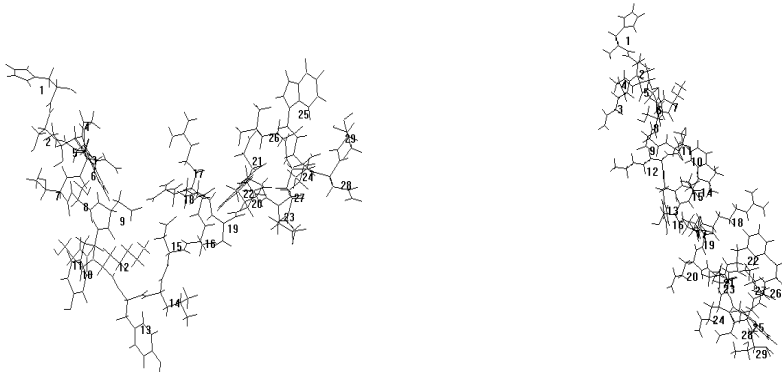
Taxikinın neyropeptidlərinə aid olan fizalaemin molekulunun üçölçülü fəza quruluşu nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə tədqiq olunmuşdur. Müvafiq fraqmentlərin stabil konformasiyalarının əsasında aparılmış hesablamalar müəyyən etmişdir ki, fizalaemin neyropeptidinin fəza quruluşu aşağı enerjili konformasiya yığımı ilə təsvir oluna bilər. Göstərilmişdir ki, fizalaemin molekulunun substansiya p molekulundakı kimi ən əlverişli konformasiyalarında C-uclu alfa spiral seqmenti əmələ gəlir. Hesablamalar nəticəsində fizalaemin molekulunun optimal konformasiyaların əsas və yan zəncirlərinin ikiüzlü bucaqlarının qiymətləri, eləcə də onların qalıqlar daxili və qalıqlar arası qarşılıqlı təsirlərin enerjisi qiymətləri alınmışdır. Taxikinın neyropeptidlərinə aid olan eledoizin, kassinin və fillomedusin molekulalarının müxtəlif mühitlərdə konformasiya şəvikliyi molekulyar mexanika və dinamika üsulları ilə öyrənilmişdir. Bunun üçün peptidlərin konformasiya dəyişmələri əvvəlcə vakuumdə müəyyən olunmuşdur. Sonrakı modelləşdirmə mərhələsində isə peptid su molekullarından ibarət qutuya salınmışdır. Hesablamalar nəticəsində göstərilmişdir ki, bu molekulaların N-uclu hissələrinin əsas və yan zəncirlərinin çevikliyi C-uclu hissəyə nisbətən vakuumdə və su mühitində daha çoxdur. Peptidlərin orta və C-uclu hissələrinin əsas zəncirinin alfa spiral quruluşu hər iki mühitlərdə dayanıqlıdır.

Nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə 1-5 calliFMRF amidlər qrupunu təşkil edən beş aminturşusu ardıcılıqları oxşar olan nonapeptidin molekulunun fəza quruluşları tədqiq olunmuşdur. Göstərilmişdir ki, bu nonapeptidlərin ümumi oxşar C-uclu heksapeptid hissələri ən əlverişli aşağı enerjili alfa spiral quruluşu əmələ gətirir, lakin onların fərqlənən N-uclu tripeptidləri isə müxtəlif quruluşlar formalaşdırırlar. Beləki 1-3 calli FMRF amidlərdə onların tripeptid fraqmentləri kvazitsiklik quruluşlar əmələ gətirirlər, lakin 4-5 calliFMRF amidlərdə isə bu fraqmentlər nizamsız quruluşlar əmələ qətirirlər. Göstərilən neyropeptidlərin üçü 1-3 calliFMRF amidlər insektisid aktivliyinə malikdirlər, iki qalan amidlər bu aktivliyi malik deyillər. Funksional tələblərə uyğun olan fəza quruluşları müəyyən etmək məqsədi ilə bu bioloji aktiv və qeyriaktiv neyropeptidlərin konformasiya imkanlarının müqaisəli tədqiqatı aparılmışdır. Bu tədqiqatın nəticələri bu neyropeptidlərin quruluş-funksiya əlaqələrini müəyyənləşdirməyə imkan verdi [12-15].

## **Peptid hormonlar**

Qlyukaqon ailəsinə aid olan üç peptid hormonunun : qlyukagon (29 aminturşusu qalğından ibarət olan), sekretin( 29 aminturşusu qalğından ibarət olan) və vazoaktiv intestinal peptidi VIP(28 aminturşusu qalğından ibarət olan) konformasiya xüsusiyyətləri və dinamikası molekulyar mexanika və dairəvi dixroizm spektrinin nəzəri analizi üsulları ilə tədqiq olunmuşdur. Nisbətən böyük molekulyar çəkiyə malik və quruluşca oxşar qlyukagon ailəsinə aid olan molekulalar, qlyukagon, sekretin və VIP neyropeptidlərin konformasiya imkanları və

dinamikaları nisbətən fərqlidir. Bu molekullar üçün iki tipli aşağı enerjili konformasiyalar müəyyən olunmuşdur: C-uclu 6-26 fraqmentində alfa spiral quruluşu əmələ gətirən konformasiyalar və beta-dönmə ilə birləşən iki alfa quruluşlu 6-11 və 16-26 seqmentlərinin 6-11 və 16-26 əmələ gətirən konformasiyalar.



Səkil 3. Qlyukaqon molekulunun iki eyni enerjili optimal konformasiyaları

Nəzəri hesablamalar nəticəsində 29-aminturşusu qalığında ibarət olan qlyukagon molekulunun fəza quruluşunu yalnız iki qrupa ayrılan konformasiyalarla təsvir etmək mümkündür. Qlyukaqon molekulunun enerji cəhətdən ən əlverişli iki konformasiya modeli şəkil 3-də göstərilib. Enerji hesablamaları nəticəsində molekullar üçün ümumi oxşar fəza quruluşunun təşkili sxemi təklif edilmişdir [15-28]. Bu molekulların alanin və qlisin qalıqları ilə tək-tək əvəz olunmuş analoqlarının konformasiya imkanlarının tədqiqi əsasında onların quruluş-konformasiya və quruluş-funksiya əlaqələrinin müzakirəsi aparılmışdır.

### ƏDƏBİYYAT

1. G.A.Agaeva, Fizika, v.6, N 3, p.5-9, 2000.
2. N.M.Godjaev, G.A.Agaeva, Biofizika, v.45, N 4, p.581-85, 2000
3. G.A.Agaeva, Baku University News, series of physical-mathematical and technical sciences, N1, p.72-81, 2009.
4. S.Celik, A.E.Ozel, S.Akyuz, S.Kecel, G.Agaeva, Journal of Molecular Structure, v. 993, pp.341-348, 2011.
5. S.Kecel, A.E.Ozel, S.Akyuz, S.Celik, G.Agaeva, Journal of Molecular Structure, 993, pp.349-356, 2011.
6. G.A.Agaeva, N.G.Hasanova, N.M.Godjaev, Conference Proceedings of 5<sup>th</sup> International and communication technologies, 12-14 october, 2011, Baku, pp.180-182.
7. G.A.Agaeva, Transactions of ANAS, ser. physical-mathematical and technical sciences, v. XXI, N 2,5, p.79-86, 2001.
8. G.A.Agaeva, N.N.Kerimli, N.M.Godjaev, Biofizika, v.50, N 2, p.203-14, 2005.
9. G.A.Agaeva, N.N.Kerimli, N.M.Godjaev, Biofizika, v.50, N 3, p.404-12, 2005.
10. G.A.Agaeva, N.N.Kerimli, N.M.Godjaev, Biofizika, v.50, N 4, p.613-22, 2005.
11. G.A.Agaeva, Proceedings of the 18<sup>th</sup> American Peptide Symposium, July 19-23, 2003, Boston, USA, p.698-700, 2004.
12. G.A.Agaeva Transactions of Azerbaijan National Academy of Sciences, ser. physical-mathematical and technical sciences, v. XXIV, N 2, p.135-149, 2004.
13. G.A.Agaeva, N.M.Godjaev, Russian Journal of Bioorganic Chemistry, v.29, N 2, p.117-26, 2003.
14. G.A.Agaeva, Biopolymers (Peptide Science), v.71, N.3, p.329, 2003.
15. G.A.Agaeva, Baku University News, ser. natural sciences, N2, p.83-93, 2002.

16. G.A.Agaeva ,The Journal of Astronomy and Physics, Istanbul University, v.62, p.45-52, 2000.
17. G.A.Agaeva , Journal of Applied Spectroscopy, v.72, N 3, p.447-453, 2005.
18. G.A.Agaeva, Transactions of ANAS, ser. physical-mathematical and technical sciences, v.XX, N 5, p.77-82, 2000.
19. G.A.Agaeva, Baku University News, series of physical-mathematical and technical sciences, N1, p.85-92, 2000.
20. G.A.Agaeva ,Transactions of ANAS, ser. physical-mathematical and technical sciences, v.XX, N 2, p.122-129, 2000.
21. G.A.Agaeva, The Journal of Astronomy and Physics, Istanbul University, v.62, p.59-65, 2000.
22. G.A.Agaeva, Fizika, v.6, N 2, p.23-27, 2000.
23. G.A.Agaeva ,The Journal of Astronomy and Physics, Istanbul University, v.62, p.67-74, 2000.
24. G.A.Agaeva, Fizika, v.6, N 4, p.47-50, 2000..
25. G.A.Agaeva, I.A.Bolotina, V.O.Chekhov, Biofizika, v.34, N 1, p.14-9, 1989.
26. G.A.Agaeva, N.A.Akhmedov, E.M.Popov, Molecular Biology, v. 21, p.164-173, 1987.
27. N.A.Akhmedov, G.A.Agaeva, E.M.Popov, Molecular Biology , v. 21, p.174-181, 1987.
28. E.M.Popov, G.A.Agaeva, N.A.Akhmedov, Molecular Biology , v. 21, p.182-188, 1987.