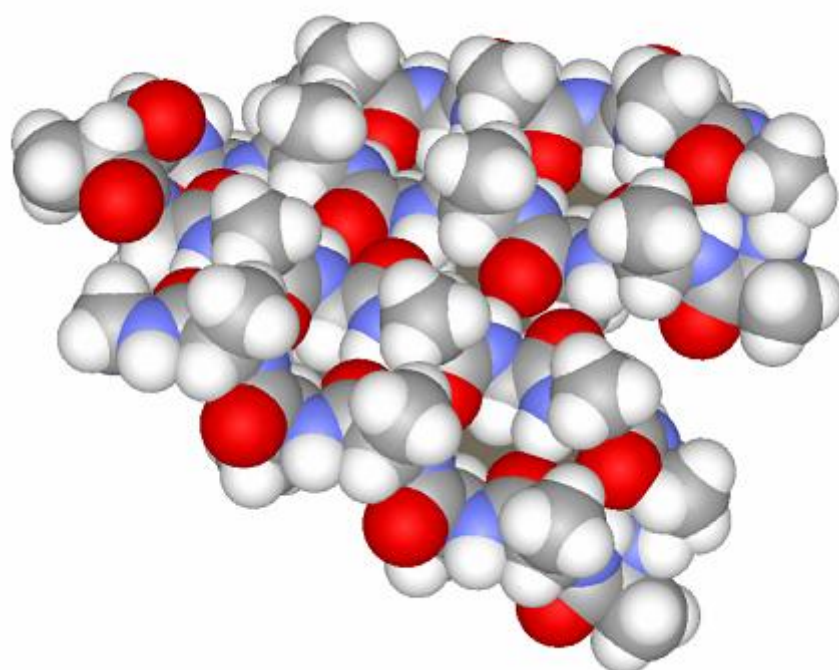


---

### III BÖLMƏ

## BİOLOJİ SİSTEMLƏR FİZİKASI



## СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ВОДЫ

А.С. Атогой

Бакинский Государственный Университет  
atagoy-89@mail.ru

*Вода является одним из наиболее исследованных веществ на Земле. Повышенная сжимаемость жидкой воды при малых температурах, минимум объема, большая вязкость воды и малая теплопроводность качественно поняты в предположении большой деформируемости молекулы воды. Выяснение особенностей свойств молекулы  $H_2O$  по сравнению со свойствами других представителей гомологического ряда молекул ( $H_2O$ ,  $H_2S$ ,  $H_2Se$ ,  $H_2Te$ ), конденсированные фазы которых не обладают особенностями воды, представляется очень важным. Молекула  $H_2O$  является самым маленьким и легким представителем гомологического ряда:  $H_2O$ ,  $H_2S$ ,  $H_2Se$ ,  $H_2Te$ . Она построена из атомов, которые сильно различаются по электроотрицательности по сравнению с атомами других гомологов. Отсюда следует, что связь в молекуле  $H_2O$  наиболее прочная.*

Современные технологии позволяют нам проникать далеко в космос и, пытаясь обнаружить жизнь на других планетах, мы в первую очередь ищем там воду. Наша земля отличается от других планет –она живая, потому что на ней есть вода –самое удивительное вещество на земле. На сегодня ученые абсолютно уверены, что первые живые организмы возникли в первичном океане, так что вода – это по существу прародительница всего живого. Именно в воде была записана последовательность развития, где каждый вид живых организмов, от простейших бактерий до млекопитающих достигал своего совершенства.

Часто утверждают, что жизнь на Земле обуславливается аномальными свойствами воды. Если бы вода была «нормальной» жидкостью, наша планета, быть может, до сих пор оставалась бы мертвым космическим телом. Все, так называемые, аномалии воды имеют огромное значение для важнейших природных процессов, для поддержания жизни на Земле. Поведение воды (в зависимости от изменения температуры, давления и других факторов) существенно отличаются от поведения у подавляющего большинства других жидкостей, у которых это поведение схожие и могут быть объяснены исходя из самых общих физических принципов. После многочисленных успехов в изучении физико-химических свойств воды в последние годы, вряд ли можно утверждать, что свойства этого простого и в то же время необычного вещества до конца поняты и прогнозируемы. Когда говорят о свойствах воды, то подразумевают совокупность физических, химических, физико –химических, биохимических и других свойств воды. Необычные физико-химические свойства воды обусловлены ее способностью участвовать в образовании водородных связей.

На сегодня известны около 48 аномалий в поведении воды. Одна из аномалий воды –это наблюдаемая температурная зависимость плотности воды. Плотность большинства жидкостей, кристаллов и газов при нагревании уменьшается, а при охлаждении увеличивается, вплоть до процесса конденсации или кристаллизации. Плотность воды при охлаждении от 100 до 3,98°C возрастает, как и у подавляющего большинства жидкостей. Но, достигнув максимального значения при температуре

3,98°C, она при дальнейшем охлаждении воды начинает уменьшаться (рис.1). Другими словами, максимальная плотность воды наблюдается при температуре 3,98°C.

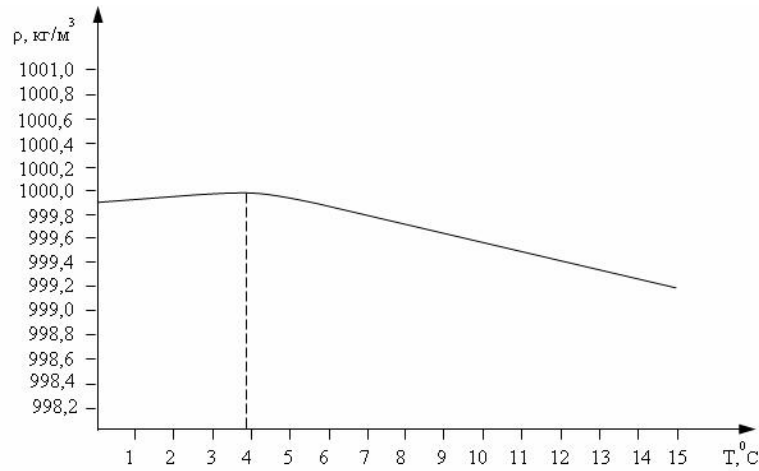


Рис.1. Температурная зависимость плотности воды

Замерзание воды сопровождается скачкообразным уменьшением плотности на 9%, тогда как у большинства других веществ процесс кристаллизации сопровождается увеличением плотности. В связи с этими лёд занимает большой объем, чем жидкая вода, и держится на её поверхности.

Столь необычное поведение плотности воды крайне важно для поддержания жизни на Земле. Максимальная плотность воды при 3,98°C и низкая плотность и теплопроводность льда приводят к тому, что замерзание рек, озер, морей и океанов происходит сверху вниз, что изолирует воду от дальнейшего промерзания. Если бы лёд был тяжелее воды, водоемы начали бы промерзать со дна, превращаясь в гигантские ледяные глыбы, в которых навсегда исчезла бы жизнь.

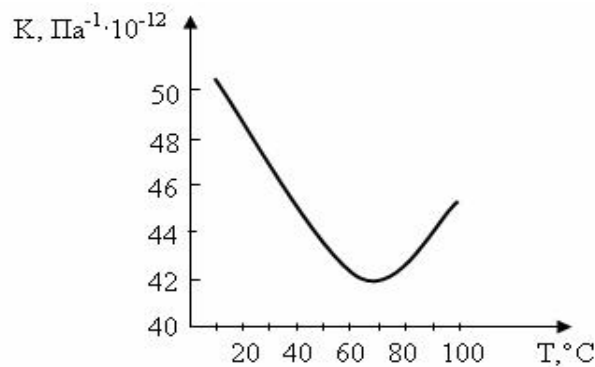


Рис.2. Температурная зависимость сжимаемости воды.

Вода обладает необычно слабой сжимаемостью. На рис.2 представлена температурная зависимость сжимаемости воды. Как видно из рисунка, в отличие от других жидкостей, на этой зависимости наблюдается минимум сжимаемости. Для всех изученных жидкостей, за исключением воды, сжимаемости увеличиваются при повышении температуры. Особенности структуры воды, связанные с наличием

водородных связей, обуславливают представленную на рис.2 зависимость сжимаемости от температуры. При повышении температуры водородные связи разрушаются и заполняются пустоты, как предполагается в двухструктурной модели. При этом происходит уплотнение объема, тем самым затрудняется процесс сжатия воды. После определенной температуры (65-70°C) вода ведет себя как обычные жидкости, т.е. сжимаемость увеличивается с увеличением температуры.

Вода обладает самым высоким поверхностным натяжением среди всех известных жидкостей (за исключением ртути)  $-72,86 \cdot 10^{-3} \text{Н/м}$  (приблизительно 73мН/м). Эта аномалия воды и её способность к смачиванию, т.е. «прилипанию» к поверхности многих твердых тел, обуславливают так называемые капиллярные явления –подъем воды на значительную высоту по тончайшим трубочкам –капиллярам. Физические свойства воды, находящиеся в капиллярах, настолько отличаются от свойств обыкновенной воды, что некоторые ученые капиллярную воду считают четвертым состоянием воды. В частности, при охлаждении капиллярной воды до температуры  $-30^\circ\text{C}$  она не замерзает, а лишь становится вязкой. Максимальная плотность такой воды смещается с  $+4^\circ\text{C}$  в область минусовых температур. Даже при охлаждении до  $-70^\circ\text{C}$  капиллярная вода не кристаллизуется; она переходит в стеклообразное состояние. С повышением температуры воды уменьшается поверхностное натяжение воды.

Как известно, скорость распространения ультразвуковых волн в жидкостях с плотностью  $\rho$ , определяется нижеследующим выражением:  $v = \sqrt{\frac{1}{\rho\beta_{ад}}} = \sqrt{\frac{\gamma}{\rho\beta_{из}}}$ , где  $\beta_{из}$  –сжимаемость при постоянной температуре,  $\beta_{ад}$  –адиабатическая сжимаемость и  $\gamma$  – отношение теплоемкостей  $\left(\gamma = \frac{C_p}{C_v}\right)$ . Для объема  $V$  сжимаемость  $\beta$  определяется в следующем виде:  $\beta = -\frac{1}{V} \frac{dV}{dP}$ .

С повышением температуры скорость звука в воде увеличивается и достигает своего максимума при температуре  $73^\circ\text{C}$ , затем снова уменьшается. Температурная зависимость скорости звука определяется от температурной зависимости сжимаемости. Это связано с тем, что с увеличением температуры сжимаемость воды уменьшается и при температуре  $+67^\circ\text{C}$  принимает минимальное значение. Следовательно, с увеличением температуры скорость звука в воде увеличивается. Во всех других жидкостях, наоборот, с увеличением температуры сжимаемость резко возрастает и, следовательно, скорость звука уменьшается.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Зацепина Г.Н. Свойства и структура воды. Изд. Московского Университета, 1974, 166 с.
2. Самойлов О.Я. Структура водных растворов электролитов и гидратация ионов. М., 1957, 182 с.
3. Ленинджер А.Л. Основы биохимии: В 3-х т. Т 1. Пер. с англ. – М.: Мир, 1985.- 367 с.
4. Масимов Э.А. Вода и живой организм - изд. БГУ, Баку, 2007, 116 стр.

## MADDƏNİN GEL HALININ BƏZİ XÜSUSİYYƏTLƏRİ

**E.Ə. Məsimov, A.R. İmaməliyev, A.H. Əmrahova**

*Bakı Dövlət Universiteti*

*Məlumdur ki, bir sıra polimer-həllədicilərdən ibarət məhlullar müəyyən şəraitdə polimerin konsentrasiyasından, temperaturdan və müxtəlif əlavələrdən asılı olaraq məhlul-gel faza keçidinə məruz qalaraq gel halına keçirlər. Bu keçidlər özünün spesifik xüsusiyyətləri ilə maddələrin digər fiziki hallarından fərqlənirlər (histerezis, sinerezis və s.). Gellərin böyük tətbiq sahələrinin olmasına baxmayaraq məhlul-gel faza keçidinin molekulyar mexanizminə və gəl faza halına aid bir çox məşhur alimlərin fikirləri əksər hallarda üst-üstə düşürlər. İşdə, gəl faza halı və keçidin mexanizmi haqqında elmi ədəbiyyatda olan fikirlər və müəlliflərin bu fikirlərə münasibətləri şərh edilmişdir.*

Maddənin xüsusi fiziki halı kimi qəbul edilən gel halı (bu halı rus elmi ədəbiyyatda həm gel, həm də studen, ingilis dilli ədəbiyyatda gel və ya jel, azərbaycan dilində isə həlməşik və ya gel adlandırılır) alınması, formalaşması və müxtəlif çevrilmələr zamanı polimer sistemlərinə məxsus olan bütün qanunauyğunluqlara tabe olurlar. Lakin, buna baxmayaraq polimer sistemlərinin gel halı bəzi özünəməxsus xüsusiyyətlərə malikdir və çox geniş tətbiq sahələri olduğuna görə bu halın quruluşunu və xassələrini xüsusi araşdırmağa ehtiyac vardır. Eyni zamanda elmi ədəbiyyatda gel halına həsr olunmuş nəzəriyyələr də bir-birindən fərqlənirlər və bu da polimer sistemlərinin müxtəlif çevrilmə texnologiyalarının təkmilləşdirilməsində müəyyən problemlər yaradır.

Terminoloji anlaşılmaqları aradan qaldırmaq üçün biz gel terminindən istifadə edəcəyik. Beləliklə, gel dedikdə polimer məhlullarının (bəzi hallarda hətta kiçik molekullu birləşmələr məhlullarının) alınmasından asılı olmayaraq (qeyd edək ki, gel halını məhlulun temperaturunu dəyişməklə və ya məhlula müxtəlif komponentlər əlavə etməklə almaq olar) məhlulların xüsusi fiziki halı kimi qəbul edəcəyik.

Dərinliyinə varmadan maddənin geli halını aşağıdakı kimi xarakterizə etmək olar: gel – yüksək elastikli dənən deformasiya etmək qabiliyyətinə malik olan, praktiki olaraq axıcılığı olmayan kiçik molekullu komponentin miqdarı üstünlük təşkil edən çoxkomponentli polimer-kiçikmolekullu maye sistemə deyilir. Göründüyü kimi bu tərifdə sistemin üç əsas göstəriciləri – sistemin tərkibi, komponentlərin miqdar nisbəti və reoloji xassələr əks olunmuşdur.

Başqa sözlə desək, gel halını polimerin kiçikmolekullu mayədə və ya mayələr qarışığındakı axıcılığını itirmiş məhlulu kimi və ya kiçikmolekullu mayədə həcmcə bir neçə dəfə şişmiş və bu mayenin çox böyük miqdarda (1; 100 nisbəti qədər) olmasına baxmayaraq axıcılıq əldə edə bilməyən polimer kimi qəbul etmək olar.

Gəl yaranması və strukturu haqqında mövcud olan müxtəlif hipotezlər və mülahizələr mövcuddur, lakin qeyd etmək lazımdır ki, baxmayaraq həll olan polimerlə (dispersiya olunmuş faza ilə) həllədicinin (dispersiya mühitilə) miqdarları arasındakı belə fərqin olmasına baxmayaraq sistemin axıcılığını itirməsi yalnız polimer molekulları və ya onların aqreqatları arasındakı çox böyük olmayan xarici təsirlərlə pozulmayan (dağılmayan) dayanıqlı qarşılıqlı təsirlərin olması ilə izah oluna bilər.

Belə qarşılıqlı təsirlər nəticəsində sistemdə ayrı-ayrı elementlərinin kinetik sərbəstliyi olmayan fəza topu yaranır. Əlbəttə ki, belə qarşılıqlı təsirlər axıcılığa malik olan məhlullarda da mövcuddur. Lakin S.Y.Frenkelin nəzəriyyəsində olduğu kimi məhlullarda belə qarşılıqlı təsirlər mayenin bir tarazlıq halından digər tarazlıq halına keçməsi üçün (özlü axın üçün) yalnız kiçik energetik bəndlər yaradır ( $e^{u/kt}$ ) və dönməyən deformasiya (axma) üstünlük təşkil

edir. Gellərdə isə əksinə, qarşılıqlı təsirlərin möhkəmliyi nəticəsində dönməyən deformasiyanın sürəti praktiki olaraq sıfıra bərabər olur.

Qeyd etmək lazımdır ki, gellərdə mövcud olan fəza toru böyük konsentrasiyalarda, məhlullarda da əmələ gələ bilər. Lakin belə fəza toru gellərdə olan fəza torundan fərqli olaraq fluktuasiya xarakteri daşıyır –istilik hərəkəti nəticəsində dağılır və yenidən yaranır. Əlbəttə, müəyyən şəraitdə –temperaturun böyük qiymətlərində və ya gələ tətbiq olunan böyük gərginliklərdə qarşılıqlı təsirlər nəticəsində yaranmış kontaktlar qırıla bilər, fəza toru dağılar və fluktuasiya xarakteri daşıyır və gel məhlul halına keçər.

Qeyd edək ki, böyük dönmə deformasiyalar komponentlərinin sırasında polimer olmayan gellərdə də müşahidə olunur (məsələn, benzolun suda emulsiyasında). Lakin polimer gellərinin spesifikliyi onun özünəməxsus elastiki xüsusiyyətlərinin mövcudluğunda olmayıb, bu xassələrin əmələ gəlmə mexanizmində və bəzi hallarda məhluldan gələ və gəldən məhlula dönmə keçid imkanlarına malik olmasındadır.

Digər tərəfdən daha bir spesifik cəhət ondan ibarətdir ki, mayeni gəldən ayırır sonradan yaradılan kontakt nəticəsində gəlin bərpa ola bilməsidir. Polimer gellərinin dönmə xassəsi onları qeyri-üzvü maddələrdən yaranan gellərdən fərqləndirən əsas xassəsidir.

### **Gellərin klassifikasiyası**

Gellərin termodönmə və termomexaniki xassələrinin öyrənilməsi onların iki əsas qrupa I və II növ gellərə bölünməsinə gətirib çıxardı.

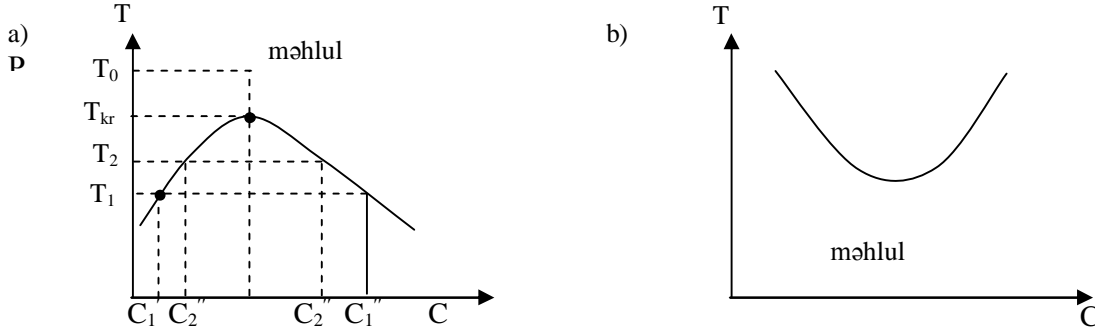
I növ polimer gelləri kimyəvi rabitələrlə tikilmiş polimerin şişməsi zamanı əmələ gəlir. Bu növ gellərin fəza toru (karkası) düyünlər (kimyəvi tikiş nöqtələri) arasında yerləşən makromolekulun hissələrindən təşkil olunmuşdur. Makromolekullar arasında kimyəvi rabitələrin olması sistemin axmasına mane olur, makromolekulların düyünlər arasındakı yerləşən statistik yumaqların konformasiya çevikliyi isə sistemin yüksək elastikliyi təmin edir. I növ gelləri qızdırdıqda kimyəvi rabitələr (kiçik temperaturlarda) qırılmaz və bu növ gellər heç bir temperaturda ərimirlər. Lakin müəyyən temperaturdan böyük temperaturlarda sistem termik destruksiyaya məruz qalır və bütün sistem dağılır. I növ gellər bəzən termodönməyən gellər adlanırlar.

II növ gellər homogen polimer məhlul qeterogen hala keçdikdə, yəni iki fazaya ayrıldıqda yaranır. Bu növ gellərdə fəza toru müxtəlif təbiətli molekullararası qarşılıqlı təsirlər (kimyəvi olmayan) nəticəsində əmələ gəlir. Müəyyən şəraitdə bu növ sistem dayanıqlı olur. Lakin şərait dəyişdikdə sistem dağılıraq homogen sistemə çevrilir. Sistemi əvvəlki vəziyyətinə qaytardıqda o yenidən gel halına keçir, yəni bu növ gellər termodönmə olurlar.

II növ gəlin əmələ gəlməsi – homogen məhlulun heterogen ikifazaya ayrılması zamanı əsas özək fəza polimerlə zəngin (belə demək mümkündürsə suyun polimerdə məhlulu) tor fəza olur və onun daxilində yerləşmiş su ilə zəngin (polimerin suda duru məhlulu) fəza yerləşir. Bu cür fazalara ayrılma tam olmur, yəni makroayrılma baş vermir. Əksər hallarda makromolekulun fraqmentlərinin kinetik çətinlikləri makroayrılmağa imkan vermir və sistem gel halına keçir. Belə qeyri-tarazlıq sistem tarazlığa gələrsə (çox böyük relaksasiya müddəti ilə) tam ikifazalı sistemə çevrilər. Bu mənada mühitin həlletmə qabiliyyətinin azalması (bu azalma müxtəlif səbəblərdən də baş verə bilər) hesabına yaranan bu tam olmayan ayrılma sistemin gel halı kimi qəbul oluna bilər. Lakin deyilənləri nəzərə almaqla II növ gellərə ikifazalı sistem kimi baxmaq olar. Polimer fazasının elementlərinin elastiki əyilməsi sistemin yüksək elastiklik xassəsini, bu elementlərin kiçik qalınlıqda olması isə fazalar sərhəddinə bərk cisim xassəsi verərək gəlin axıcılığının olmamasını təmin edir.

Gellərdə baş verən temperaturdan və konsentrasiyadan asılı fəza çevrilmələrini əyani görmək üçün II növ gellərin hal diaqramını nəzərdən keçirək. Yuxarı kritik ayrılma temperaturu ( $T_{kr}$ ) olan sistemlər üçün (YKAT) temperaturun artması (sistemin qızması)

zamanı gəlin dağılması (əriməsi) baş verir. Şəkil 1-də temperatur –konsentrasiya koordinatlarında sistem soyuduqda  $T_0$ -dan  $T_1$ -ə qədər) polimerin homogen məhlulunun gel halına keçməsinə, yəni sistemin heterogen hala keçməsinə görmək olar.



Şəkil 1.

Qeyd edək ki, I növ gəllərdə kritik nöqtəsi müşahidə olunmur. YKAT-dan aşağı temperaturlarda (sistemin qeyri-stabil halında) sistem iki fazaya ayrılır.  $T_1$  temperaturunda birinci fazada –polimerin əsasən aşağı molekulyar çəkili fraksiyalarının suda duru məhlulunun konsentrasiyası  $C_1'$ , ikinci fazada –polimerlə zəngin fazada isə  $C_1''$  olur. Polimer məhlullarının fazalara ayrılması (geləmələgəlmə) prosesinin kinetikasının xüsusiyyətləri sistemin dönmə deformasiyasını təmin edən ikinci fazanın yaranmasına gətirib çıxarır. (Şəkil 1b aşağı kritik ayrılma temperaturuna (AKFT) malik olan sistemin hal diaqramıdır).

Bu deformasiyanın qiyməti fəzaların həcmli nisbətləri ilə müəyyən olunur. Sistemi qızdırdıqda ikinci fazada polimerin müəyyən konsentrasiyasından başlayaraq axıcılığı elə yüksək səviyyəyə çatır ki, bu da gəlin dönməz dağılması ilə nəticələnir (bu halda sistemin ikifazlı halında qalması mümkündür). Sistemin komponentlərinin uyuşmaqlarının onun dağılmasına gətirən halı (sistemin temperaturu) adətən gəlin ərimə temperaturuna identik götürülür. Lakin sözün əsl mənasında bu temperaturlar üst-üstə düşmür, çünki gəlin ərimə temperaturu –müxtəlif metodlarla (məs., kürəciyin sistemdə hərəkəti və s.) təyin edilir.

### Gəllərdə sinerezis hadisəsi

Mayenin gəldən onun ümumi formasının saxlanılaraq həndəsi ölçülərinin azalması (kiçilməsi) və ya dağılması ilə müşayiət olunan ayrılması prosesinə sinerezis deyilir. Sinerezis nəticəsində ayrılan mayenin tərkibini araşdırmadan qeyd edək ki, bu proses bəzi hallarda müşahidə olunur və gəlin alınma (formalaşdırılması) üsulundan asılıdır. Məsələn, polimerin şişməsi nəticəsində alınan gəllərdə (I növ gəllər) sabit temperaturda və təzyiqdə, ətraf mühitin tərkibi dəyişmədikdə və sistemdə heç bir kimyəvi dəyişikliklər olmadıqda sinerezis müşahidə olunmur. II növ gəllərdə isə (polimer məhlulunu soyuduqda və ya bir sıra hallarda qızdırdıqda) məhlula pis həlledici əlavə etdikdə və zaman keçdikcə kimyəvi dəyişikliklər baş verdikdə kiçik sürətli olsa da sinerezis baş verir. Qatı polimer məhlulları gel halına gətirildikdə sineretik mayenin xaricə ayrılması (sinerezis) əksər hallarda müşahidə olunmur, maye mikroblastlarda uzun müddət qala bilər, çünki onun ayrılması üçün lazım olan açıq kapilyar kanallar sistemi yaranmır, yəni gel dağılmır. Sinerezisin olmaması polimerlə həlledici arasında özünəməxsus tarazlığın yaranması kimi qəbul olunur. Bu isə polimerlə həlledici arasında müəyyən dərəcədə qarşılıqlı təsirin (solvatlaşmanın) olmasından xəbər verir. Misal olaraq, jelatinin su ilə solvatlaşmasını göstərmək olar. Müəyyən edilmişdir ki, jelatin su ilə solvatlaşması, yəni solvasiya dərəcəli 10-a bərabərdir və buna görə jelatinin



10%-li suda məhlulu sinerezisin yaranması üçün kritik konsentrasiya kimi qəbul olunur, yəni  $C_{kr.} > 10\%$  -li məhlulun sinerezis baş vermir. Qeyd etmək lazımdır ki, solvatsiya, solvatsiya ədədi dedikdə polimerlə energetik olan sıx bağlı mayenin miqdarı götürülür və

$$n = \frac{100 - \nu}{c} \quad (1)$$

düsturu ilə hesablanır. Burada  $\nu$  - sinerezis nəticəsində ayrılan mayenin (suyun) q/100q –larla ifadə olunan həcmi,  $C$  –polimerin konsentrasiyasıdır. Beləliklə, gelləri sinerezisə məruz qalması və qalmaması onların təsnifatında bir sıra digər xassələri ilə birlikdə istifadə oluna bilər. Daha bir vacib məqamı qeyd etmək lazımdır ki, sinerezisə məruz qalmayan gellərdə sinerezis prosesinin müşahidə olunması tarazlıq halında olan gellərdə əlavə kimyəvi çevrilmələrin baş verməsi ilə əlaqədardır.

I növ gellərdə, yəni həlledici mühitində makromolekulların bir-birinə kimyəvi bağlanaraq fəza toru əmələ gətirdikləri gellərdə eninə rabitələrin sıxlığından və həlledicinin aktivliyindən asılı olaraq əmələ gəlmiş gəlin şişmə dərəcəsi tarazlıq qiymətindən kiçik olduqda gel əlavə şişməyə məruz qalır, böyük olduqda isə həlledicinin artıq hissəsi gəldən ayrılır, yəni sinerezis prosesi baş verir. Bu proseslərin hər ikisi şişmə dərəcəsinin tarazlıq dərəcəsinin eyni qiymətinə gətirib çıxarır.

Kimyəvi rabitələrlə bağlanmış polimeri, tor strukturlu polimeri (TSP) həlledici ilə kontakta gətirdikdə onun həcmi artır (şişir) və bu proses sərbəst enerjinin (izoxor izotermik enerjinin) dəyişməsi dayanana qədər, yəni onun dəyişməsi sıfıra bərabər olana qədər davam edir. Kimyəvi rabitələrlə tikilməmiş polimerlərdə həlledici ilə qarşılıqlı təsir nəticəsində məhlulun sonsuz durulaşması baş verdiyi halda (bu, sərbəst enerjinin azalmasını təmin edən entropiya artımı hesabına olur), tor strukturlu polimer şişdikcə (zəncirlərin açıldıqca) eyni zamanda molekul zəncirinin monomerlərinin ixtiyari qarşılıqlı yerləşmə imkanları ehtimalının azalması hesabına entropiya azalır (sərbəst enerji artır). Bu isə öz növbəsində komponentlərin qarışmasına mane olur və şişmənin müəyyən qiymətində sistem tarazlığa gəlir, yəni sərbəst enerjinin komponentləri – həllolma sərbəst enerjisinin və elastiki deformasiya sərbəst enerjilərinin dəyişmələri bir-birinin kompensə edir:

$$\Delta G_{həll} + \Delta G_{el} = 0 \quad (1)$$

Tor strukturu olmayan polimerlərdə (II növ gelləri əmələ gətirən polimerlərdə) sistemin ayrıldığı fazaların biri polimerin həlledicidə duru məhlulu olduğu halda (bəzi hallarda bu fazada konsentrasiya böyük qiymətlərdə ola bilər), tor strukturlu polimerlərdə bu faza tarazlıq halına qədər şişmiş polimerin üzərində olan praktiki olaraq təmiz həlledicidən ibarət olur. Lakin tikiş dərəcəsi kiçik olduqda polimer zəncirlərinin müəyyən, bəzən böyük hissəsi sərbəst olurlar (bir –birinə tikilməmiş). Bu zaman şişmə dərəcəsini təyin etmək çətin olur. Belə halda, şişmə dərəcəsinin zamandan asılı olaraq azalması mümkündür. Bu polimerin sərbəst, bağlı olmayan fraksiyalarının gəldən «yuyulması» (şişmənin boşalma məhz sinerezis adlandırılır. Sinerezis hadisəsi – mayenin şişmiş polimerdən ayrılması bir çox səbəblərdən yarana bilər.

II növ gellərdə birfazlı (homogen) məhlulun parametrlərini dəyişməklə alınan gellərdə fazaların rüşeymlərin əmələ gəlməsi və inkişafı iki variantda baş verə bilər. Birinci variantda polimerin konsentrasiyası cüzi olan fazanın rüşeymlərinin əmələ gəlməsi və inkişafı, ikinci variantda isə polimerin konsentrasiyası çox böyük olan fazanın əmələ gəlməsi və inkişafı üstünlük təşkil edir. Birinci halda praktiki olaraq həlledicidən ibarət birinci fazanın üstün inkişafı nəticəsində qeyri –tarazlıqda olan məhlulda həlledicinin miqdarı azalacaq (məhlul həllediciyə nəzərən «kasıblayacaq»). Uyğun olaraq qeyri-tarazlıqda olan məhlulun polimerə görə konsentrasiyası artacaq və tərkibinə görə ikinci fazaya (polimerlə zəncin fazaya) yaxınlaşacaq. Beləliklə, prosesin axırında bir-biri ilə tarazlıqda olan iki faza yaranacaqdır. Termodinamik nöqtəyi-nəzərdən sistemin necə tarazlığa gəlməsi bir o qədər də

vacib olmadığı halda, fiziki forma nöqtəyi-nəzərdən bu sistemi tarazlığa hansı yolla gəlməsi əhəmiyyət kəsb edir. Belə sistem fiziki formaca kiçik konsentrasiyalı fazanın yüksək konsentrasiyası fazadakı emilsiyasını xatırladır.

Yüksəkkonsentrasiyalı fazanın özlülüyü çox böyük olduğundan kiçik konsentrasiyalı fazanın hissəciklərinin yerdəyişməsi, görüşməsi və birləşməsi praktiki olaraq mümkün olmur. Ancaq ilkin məhlulun kiçik konsentrasiyalarında, məhlulun parçalanması zamanı əmələ gələn polimerlə zəngin fazanın həcmi kifayət qədər kiçik olduqda matrisanın mexaniki dağılması baş verir və bu zaman bu matrisaya daxil olan birinci fazanın hissəcikləri birləşərək bütöv laya çevrilirlər. Matrisanın belə dağılması və birinci fazanın ayrılması, yəni təmiz həlledicinin və ya polimerin çox duru məhlulunun ayrılması məhz sinerezis hadisəsini xarakterizə edir.

İlkin məhlulun böyük konsentrasiyalarında ikinci fazanın həcmi dayanıqlı matrisin yaranmasına səbəb olur və bu halda sinerezis hadisəsi ya baş vermir, ya da çox zəif olur.

### ƏDƏBİYYAT

1. С.А.Гликман. Введение в физическую химию высокоолигомеров, Изд-во Саратовского Университета, 1959.
2. А.А.Тагер. Физико-химия полимеров, Госкомиздат, Москва, 1963.
3. Папков С.Г. Студнеобразные состояния полимер, Москва. Изд-во 1974.
4. Məsimov E.Ə. Polimerlərin fiziki-kimyası, Bakı Universiteti Nəşriyyatı, 2010.

### ЛАЗЕРНЫЙ ОПТО-АКУСТИЧЕСКИЙ МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ НЕКОТОРЫХ ФИЗИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ НЕФТИ И НЕФТЕПРОДУКТОВ

**М.А. Мусаев, Р.А. Ахмедов, Х.О. Садиг, И.И. Аббасов**  
*Азербайджанская Государственная Нефтяная Академия,*  
[ihm@adna.baku.az](mailto:ihm@adna.baku.az)

*Предложен и экспериментально реализован метод, позволяющий одновременно определить коэффициент поглощения света и скорость звука в нефти и нефтепродуктах. Предложенным методом проведены измерения этих величин в различных нефтях, а также, определены температурные коэффициенты скорости звука и смолистость.*

Важнейшими физическими параметрами нефти являются скорость распространения звука и коэффициент поглощения света в них. Экспериментальное определение скорости звука наряду с изучением других параметров среды позволяет с необходимой точностью рассчитать такие важные характеристики вещества, как сжимаемость и теплоемкость [1]. А коэффициент поглощения света является единственным параметром, который с достаточной точностью характеризует качества нефти [2].

Существующие традиционные методы измерения скорости звука, как прямые, так и косвенные являются сложными.

В данной работе предложен и экспериментально реализован метод одновременного определения этих двух важных параметров в нефти и нефтепродуктах. Суть данного метода заключается в следующем. Когда сильнопоглощающая среда облучается коротким лазерным импульсом ( $\tau_l \ll (\alpha c_0)^{-1}$ ,  $\tau_l$  – длительность импульса лазерного излучения,  $\alpha$  – коэффициент поглощения лазерного излучения в среде,  $c_0$

–скорость распространения света в среде) нагрев среды можно практически считать мгновенным. Тогда изменение температуры среды описывается выражением

$$T' = \frac{\alpha \varepsilon_s}{\rho_0 c_p} \exp(-\alpha z)$$

За время действия лазерного импульса плотность среды не успевает существенно изменяться, а за счет неоднородного температурного поля создается поля механического напряжения. Выражение приращения давления  $p'$  может быть представлено в виде [3]

$$p' = p - p_0 = c_0^2 \rho' + c_0^2 \rho_0 \beta T'$$

Здесь  $\rho_0$  – равновесная плотность среды,  $\rho' = p - p_0$  – приращение плотности,  $T' = T - T_0$  – приращение температуры и  $\beta = -\frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p$  – температурный коэффициент объемного расширения среды,  $c_p$  – удельная теплоемкость среды при постоянном давлении. В данном случае можно считать, что  $\rho' = 0$ , поэтому  $p' = c_0^2 \rho_0 \beta T'$ .

Поля механического напряжения в свою очередь, создает акустические волны, которые распространяются от зоны тепловыделения. Эти напряжения распространяется поровну между волной убегающей от границы  $z=0$ , и волной бегущей по направлению к границе. Вне области тепловыделения существует лишь волна, распространяющейся от границы в глубь поглощающей среды. Ее временной профиль формируется как прямой волной, так и волной распространяющейся к границе и отражающейся от нее. Поскольку передний фронт импульса ( $\tau = t - \frac{z}{c_0} < 0$ )

формируется прямой волной, которая распространяется сразу от границы, его профиль повторяет пространственное распределение источников напряжения. Для однопоглощающих сред ( $\alpha = const$ ) передний фронт имеет универсальную экспоненциальную форму  $p'(\tau < 0) \sim \exp(\alpha c_0 \tau)$  [4].

По форме акустического сигнала измеряемой в глубине  $z$  легко можно определить время распространения акустической волны от поверхности до данной точки среды  $\tau$ . Следовательно, зная толщину слоя  $z$  легко определить скорость распространения звука в среде, как  $v = \frac{z}{\tau}$ . Принимая во внимание то, что для

однородной жидкости теоретически рассчитанная форма термоакустического импульса сжатия имеет простой вид  $p'(\tau < 0) \sim \exp(\alpha c_0 \tau)$ , строя зависимость амплитуды фронта импульса от времени в полулогарифмическом масштабе, по наклону прямой может быть определен коэффициент поглощения света.

Генерация акустических волн в исследуемых средах осуществлялась по традиционной схеме эксперимента [5]. Источником оптического излучения служил импульсный лазер, работающий на длине волны 1,06 мкм. Длительность и энергия импульса составляет ~20нс и ~5мДж, соответственно.

Лазер работал в импульсно-повторяющемся режиме с частотой ~1Гц. Несфокусированный пучок лазерного излучения диаметром ~6мм вертикально направлялся на кювет с исследуемой жидкостью.

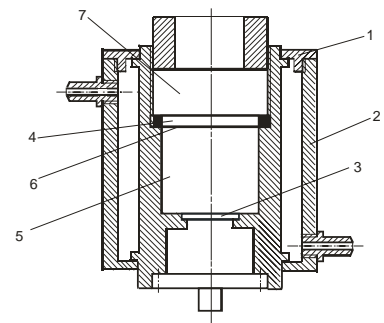


Рис. 1

Для исследования температурной зависимости измеряемых величин разработана специальная кювета, схема которой приведена на рис.1. Кювета изготовлена из латуни. На наружной поверхности имеется буртики 1 для прикрепления рубашки для термостатирования. К окну на дне кюветы приклеивалась задемпфированная пластина 3 из необата –лития, которая служила приемником акустического сигнала.

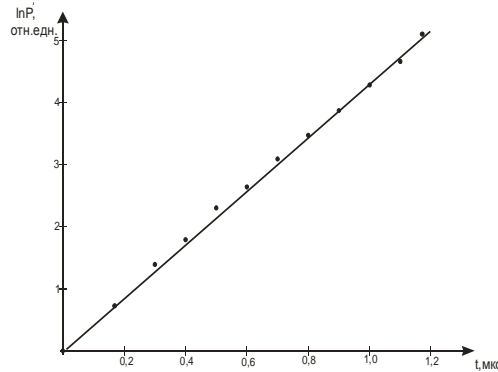


Рис. 2

Для измерения скорости звука прозрачных средах, где практически лазерное излучение не поглощается и генерация акустических волн в самой среде не происходит, на поверхности сред размещается тонкий слой 4 водного раствора хлорной меди. Этот слой, толщина которого составляет не более  $\sim 1,5$ мм находится в хорошем акустическом контакте с исследуемой средой 5 и играет роль акустического генератора. Их разделяет тонкая тефлоновая пленка 6. Сверху слоя раствора хлорной меди поставлена стеклянная пластина, которая прозрачна для лазерного излучения. Измерения показали, что коэффициент поглощения лазерного излучения в растворе  $\text{CuCl}_2$  составляет  $\sim 50\text{см}^{-1}$ . Лазерное излучение практически полностью поглощается в растворе хлорной меди и вызывает акустические волны, которые в свою очередь в дальнейшем распространяются в исследуемой среде.

Исследования проводились в нефти и в различных нефтепродуктах из разных месторождений. На рис. 2 приведен характерный график зависимости давления на фронте акустического сигнала от времени в полулогарифмическом масштабе. Как и следовало бы ожидать, зависимость имеет линейный характер. Для нефти с большим коэффициентом поглощения фронты акустических сигналов являются более крутыми, и наклон в полулогарифмическом масштабе имеет больший наклон, соответственно.

В таблице приведены результаты измерений по указанной методике скорости звука  $c_0$  и коэффициента поглощения света  $\alpha$ . Точность измерения скорости звука не превышала  $\sim 5\%$  и в основном определялась точностью определения толщину исследуемого слоя. А точность определения коэффициента поглощения света была не хуже  $\sim 10\%$ .

№-образца	$c_0 \cdot 10^3, \text{ м/сек}$	$\alpha, \text{ см}^{-1}$
1	1,46	1,3
2	1,55	2,8
3	1,45	24,8
4	1,47	25,2
5	1,60	39,3
6	1,40	31,5

Для нефти из месторождений Нефтяные Камни получено  $\alpha \approx 2,7 \text{ см}^{-1}$ . Коэффициент поглощения смолы полученной из этой нефти составляет  $\alpha \approx 14 \text{ см}^{-1}$ . Таким образом, ответственным за поглощения излучения на данной длине волны являются смолистые вещества. Сравнивая, коэффициенты поглощения нефти и смолы получаем, что смолистость данной нефти составляет  $\sim 20\%$ , что хорошо согласуется с известными литературными данными, полученными другими методами. В этих традиционных методах содержание смолистых веществ осуществляется выделением их от сырой нефти. После этого из соотношения массы смолистых веществ к массе взятой сырой нефти определяется содержание этой фракции в нефти. Этот способ определения смолистости нефти достаточно трудоемкий и не оперативен.

Исследования температурных зависимостей показали, что в исследуемом температурном интервале коэффициент поглощения излучения практически не меняется, в то время как скорость звука во всех нефтях монотонно и довольно существенно убывает с увеличением температуры. Температурный коэффициент скорости звука различных нефтей меняется в пределах  $2 - 6 \frac{\text{м}}{\text{с} \cdot \text{град}}$ .

### ЛИТЕРАТУРА

1. Р. Балдев, В. Раджендран, П. Паланичами. Применения ультразвука. Москва, Издательство Техносфера, 2006, 579с.
2. А.Х. Мирзаджанзаде. Парадоксы нефтяной физики. Азербайджанское государственное издательство, Баку, 1981, 148 с.
3. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Гидродинамика. –Москва, Наука, 1986, 730с.
4. А.А. Карабутов, В.В. Кошкин, А.С. Подольский, А.А. Филатов, С.А. Хижняк. Контроль. Диагностика, 2008, т.126, №12, с.22-27.
5. М.А. Мусаев. Анализ масляных эмульсии на поверхности воды лазерным оптико –сакустическим методом. Физика, 2000, том. VI, №1, с. 43-46

### КАРДИОАКТИВНЫЕ ТЕТРАПЕПТИДЫ, ИХ СТРУКТУРА И СВОЙСТВА

**Л.И. Исмаилова, Р.М. Аббаслы, С.Р. Ахмедова, Н.А. Ахмедов**

*Институт Физических Проблем, Бакинский Государственный Университет*

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

*Пространственное строение и конформационные свойства пяти кардиоактивных тетрапептидных молекул были исследованы с помощью метода теоретического конформационного анализа. Кардиоактивные тетрапептидные молекулы, являясь нейропептидами, осуществляют контроль над сократительной деятельностью сердца моллюсков. Найдены низкоэнергетические конформации для каждой молекулы, значения двугранных углов основной и боковых цепей, оценена энергия внутри –и межстаточных взаимодействий. Расчет показал, что низкоэнергетическими для тетрапептидных молекул являются свернутые формы основной цепи.*

Что может быть важнее здоровья человека? В настоящее время многие ученые, работающие в области биологии, физики, химии, информатики работают над созданием медицинских препаратов на основе биологически активных пептидных

молекул. Как известно, являясь низко токсичными, пептидные препараты не обладают побочными эффектами. Кроме того, с помощью регуляторных пептидов осуществляется управление всеми биохимическими процессами в живом организме. Регуляторные пептиды являются ключевым звеном механизма регуляции функций человеческого организма. Для каждого органа имеются отдельные специфические пептиды: для сердечной мышцы – кардиопептиды. Свойства пептидов зависят, главным образом, от их первичной структуры – последовательности аминокислот, а также от строения молекулы и ее конфигурации в пространстве. Количество аминокислот в пептиде может сильно варьироваться, при этом, несмотря на одинаковый количественный и качественный состав, пептиды имеют разные свойства. Выяснение структурно-функциональных свойств этих пептидов имеет большое прикладное значение в медицине и фармакологии. Кардиоактивные пептидные молекулы относятся к классу регуляторных пептидов, нейропептидов, модулирующих работу сердечно-сосудистой системы.

В настоящее время согласно данным Всемирной Организации Здоровья сердечно-сосудистые заболевания по своей распространенности занимают первое место в мире, поэтому одной из актуальных медицинских проблем является изучение кардиологических расстройств. Перспективным направлением здесь считается создание препаратов на основе биологически активных пептидных молекул. Сейчас ведется активный поиск веществ с высоким кардиоактивным действием.

Сравнительно недавно было выделено пять кардиоактивных пептидов Ocp1 – Ocp4 и Octopus Proctolin, которые показали положительный инотропный и хронотропный эффекты на изолированной сесречной системе [1, 2]. Octopus Proctolin показал сократительное влияние на прямую кишку осьминога, а также возбуждающее действие на его сердце. Обладая высокой сократительной активностью, эти кардиопептиды стимулируют сердечную деятельность моллюсков. Все эти тетрапептидные молекулы относятся к классу молекулы ахитина. Молекула ахитина контролирует сердечную деятельность улитки [3, 4]. Огромная улитка ахитина – самый крупный представитель сухопутных моллюсков. Выделенные кардиоактивные тетрапептиды вовлечены в возбуждающий контроль сердечно –сосудистой системы осьминога, как нейропептиды и нейрогормоны.

Чтобы определить природу регуляторных пептидов и выполняемые ими функции, необходимо определить пространственное строение и их структурно-функциональную организацию. Целью данной работы является изучение пространственной организации и конформационных свойств тетрапептидных кардиоактивных молекул Gly-Phe-Gly-Asp (Ocp1), Gly-DPhe-Gly-Asp (Ocp2), Gly-Ser-Trp-Asp(Ocp3), Gly-DSer-Trp-Asp(Ocp4) и Gly-DPhe-Ala-Asp (ахитин). Эти кардиоактивные пептиды обнаружили положительный сократительный эффект на изолированном сердце. Стереоизомеры в положении второго аминокислотного остатка также были изолированы, однако их сократительная активность оказалась в десять раз меньше соответствующего пептида [5].

Понять механизмы действия этих кардиоактивных тетрапептидных молекул можно, если решить задачу их пространственной структуры. Короткие линейные пептиды, как правило, существуют в виде набора низкоэнергетических конформаций, который определяется их аминокислотной последовательностью и свойствами растворителя. Биологически активная конформация пептидной молекулы, которая реализуется при взаимодействии с рецептором, обычно входит в набор низкоэнергетических структур, существующих в водном растворе. Поэтому представляет самостоятельный интерес исследование пространственного строения и конформационных возможностей кардиоактивных тетрапептидов.

Конформационные взаимодействия пептидных молекул являются основой современных теоретических представлений разных механизмов их функционирования. Полуэмпирический метод молекулярной механики позволяет оценить конформационные возможности пептидной молекулы. Для нахождения пространственного строения данных пептидных молекул использовалась разработанная нами компьютерная программа [6].

Известно, что короткие линейные пептиды не имеют в растворах фиксированной пространственной структуры. Аминокислотная последовательность и физико-химические свойства растворителя определяют набор низкоэнергетических конформаций пептидной молекулы. При взаимодействии биологически активного пептида с рецептором могут происходить конформационные изменения в пептидной цепи. Они обеспечивают эффективные взаимодействия активного центра молекулы с рецептором. Биологически активная конформация пептидной молекулы, которая реализуется при взаимодействии с рецептором, обычно входит в набор низкоэнергетических структур, существующих в водном растворе.

Для нахождения пространственного строения пептидов, нами использовался теоретический подход, позволяющий рассчитывать трехмерную структуру биомолекул исходя из известной аминокислотной последовательности [7]. Такой подход позволяет с достаточной точностью количественно описать геометрию молекулы, определить значения двугранных углов основной цепи и боковых цепей молекулы, а также энергетические взаимодействия атомов в этой молекуле. Специально введенная классификация (шейп, форма основной цепи, конформация) позволяет четко разделять рассматриваемые структуры, предполагая, что низкоэнергетическая структура биомолекулы формируется из отдельных структурных блоков меньшей длины, которые потом укладываются в пространственную структуру всей молекулы. Формы аминокислотных остатков определялись низкоэнергетическими областями В, R, L и P двугранных углов основной цепи  $\phi$ - $\psi$ . Отсчет двугранных углов вращения производился согласно стандартной номенклатуре IUPAC-IUB [8].

Расчет выполнялся в рамках механической модели молекул с учетом невалентных, электростатических, торсионных взаимодействий и энергии водородных связей. Невалентные взаимодействия оценивались по потенциалу Леннарда-Джонса с параметрами Шераги [9]. Электростатика рассчитывалась в монопольном приближении по закону Кулона с использованием зарядов, предложенных в работе [9]. Конформационные возможности пептидов 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 [9].

Кардиоактивная тетрапептидная молекула Gly-Phe-Gly-Asp и Gly-DPhe-Gly-Asp включали в себя 49 атомов и 15 переменных двугранных углов основной цепи и боковых цепей аминокислот, входящих в них, молекулы Gly-Ser-Trp-Asp и Gly-DSer-Trp-Asp – 57 атомов и 17 двугранных углов, молекула ахитина Gly-DPhe-Ala-Asp- 52 атома и 16 двугранных углов. Аминокислотная последовательность тетрапептидов включает в себя аминокислоту Gly, которая не имеет боковой цепи, Phe и Trp имеют объемные и конформационно лабильные ароматические боковые цепи и аспарагиновую кислоту Asp с отрицательно заряженной боковой цепью. Молекула тетрапептида существует в виде цвиттерионной формы с положительно заряженным N-концом и отрицательно заряженным C-концом.

Расчет пространственной структуры кардиоактивных тетрапептидов выполнялся на основе низкоэнергетических конформаций монопептидов Gly (B, R, L, P формы основной цепи, а так же граничные значения углов основной цепи), Phe и Trp (B, R, L формы основной цепи) и Asp, Ala (B, R формы основной цепи). Для каждой молекулы было составлено 200-300 различных начальных вариантов, которые затем были проминимизированы по энергии. Расчет обнаружил наличие резкой энергетической дифференциации пространственных структур тетрапептидных молекул. Низкоэнергетические формы основной цепи с относительной энергией представлены таблице 1.

Таблица 1.

Низкоэнергетические формы основной цепи  
кардиоактивных тетрапептидов

N	Молекулы	Низкоэнергетические формы основной цепи
1	Gly-Phe-Gly-Asp	RRRR, PRRR, RBPR, RBLR, RRBR
2	Gly-DPhe-Gly-Asp	BPRR, LPRR, BRRR, RPRR, BLRR
3	Gly-Ser-Trp-Asp	RRRR, PRRR, RRBR, BRBR, BRRR
4	Gly-DSer-Trp-Asp	BPRR, LPRR, BPBR, RRBR, PRRR
5	Gly-DPhe-Ala-Asp	BPRR, , LPRR, RPRR, RRRR, BPBR

Замена второй аминокислоты в L форме на его оптический изомер D форму приводит к смещению конформационного равновесия природной пептидной молекулы, так как D –изомеризация отражается на конформационной свободе самого аминокислотного остатка. Если для L –аминокислоты низкоэнергетическими являются B, R, L области, то для D –изомера разрешенными становятся P, L и R области на конформационной карте. Глобальными конформациями тетрапептидных молекул являются свернутые формы основной цепи RRRR, PRRR, BPRR и LPRR. Благодаря такой свернутой форме основной цепи между аминокислотными остатками молекул возникают сильные взаимодействия. Низкая энергия этих конформаций обусловлена наличием всех возможных для тетрапептидной молекулы взаимодействий.

Проведенный расчет позволил определить низкоэнергетические конформации для каждой молекулы, найти значения двугранных углов основной и боковых цепей этих молекул, оценить энергии внутри- и межостаточных взаимодействий. Расчет показал, что низкоэнергетическими для из кардиоактивных тетрапептидных молекул являются свернутые формы основной цепи. Свернутая форма сближает участки основной цепи и боковые цепи аминокислот, входящих в эти молекулы, и приводит к их эффективным взаимодействиям.

## ЛИТЕРАТУРА

1. H. Minakata, E. Iwakoshi, K. Takuwa, Structure and function of molluscan neuropeptides – cardioactive peptides isolated from the Octopus mino., Pept. Sci, Vol. 1999, p.171-174, 2000
2. E. Iwakoshi, M. Hisada, H. Minakata, Cardioactive peptides isolated from the brain of a Japanes octopus, Octopus mino, Peptides, Vol. 21, No. 5, p.623-630, 2000
3. T. Kimura, E. Okamura, N. Natubayasi, K. Asami, M. Nakahara, NMR Stude on the binding of neuropeptide achatin – I to phospholipids bilayer, Biophys. J., Vol. 87, No. 1, p. 375-385, 2004



4. L. Bail., EV Romanova, JV Sweedler, Measuring, D-amino acid containing neuropeptides with capillary electrophoresis, Anal. Chem., vol. 83, N. 7, p. 2794-2800, 2011.
5. E. Iwakoshi, K. Takuva-Kuroda, Y. Fujisawa, Isolation and characterization of a GnRH-like peptide from Octopus vulgaris, Biochem. Biophys. Res. Commun., vol. 291, N. 5, p. 1187-1193, 2002.
6. I.S. Maksumov, L.I. Ismailova, N.M. Godjaev, A computer program for calculation of conformations of molecular systems, J. Struc. Chem., Vol. 24, p. 147-148, 1983
7. E.M. Попов, Белки и пептиды, Москва, Наука, с. 10-73, 1995
8. IUPAC-IUB, Quantity, Units and Symbols in Physical Chemistry, Blackwell Scientific Publications, Oxford, p. 39, 1988
9. F.A. Momany, R.F. McGuire, A.W. Burgess, H.A. Scheraga, Energy parameters in polypeptides. VII. Geometric parameters, partial atomic charges, nonbonded interactions, hydrogen bond interaction and intrinsic torsional potentials for naturally occurring aminoacid, J.Phys.Chem., J.Phys.Chem., Vol. 29, p. 2361-2381, 1975

## BETA-NEOENDORFIN MOLEKULUNUN YAN ZƏNCİRLƏRİNİN KONFORMASIYA İMKANLARI

**N.A. Əhmədov, L.İ. İsmayılova, R.M. Abbash, N.F. Əhmədov**

*BDU, Fizika Problemləri İnstitutu*

[Namig.49@bk.ru](mailto:Namig.49@bk.ru)

*Nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə beta-neoendorfin molekulunun fəza quruluşu tədqiq olunmuş və müəyyən edilmişdir ki, onun fəza quruluşu on bir stabil konformasiya ilə təbənnüm oluna bilər. Molekulun ən stabil konformasiyasında onu əmələ gətirən amin-turşu qalıqlarının yan zəncirlərinin ikiüzlü fırlanma bucaqları ətrafında konformasiya xəritələyə qurulmuş və onların konformasiya sərbəstlikləri müəyyən olunmuşdur.*

Beta-neoendorfin Tyr1–Gly2–Gly3–Phe4–Leu5–Arg6–Lys7–Tyr8–Pro9 molekulu doqquz amin-turşu qalığından ibarətdir. Onun N-tərəf pentapeptid hissəsi [Leu] –enkefalin molekulunu əmələ gətirir. Beta-neoendorfin molekulu opioid aktivliyinə malikdir və onun aktivliyi [Leu] –enkefalin molekulunun aktivliyindən 8 dəfə çoxdur [1]. Beta-neoendorfin molekulunun fəza quruluşu öyrənilmiş və göstərilmişdir ki, onun fəza quruluşu on bir stabil konformasiya ilə təbənnüm oluna bilər [2]. Molekulun stabil konformasiyaları, onlara qeyri-valent, elektrostatik, torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinin verdikləri pay və nisbi enerjiləri cədvəl 1-də göstərilmişdir. Bu konformasiyalar [Leu] –enkefalinin stabil konformasiyalarına görə qruplara ayrılmışdır. Cədvəl 1-dən göründüyü kimi belə qrupların sayı beşdir, bunlardan ikisinə üç stabil konformasiya düşür. Bu tədqiqat işində molekulun stabil konformasiyaları araşdırılmış, onların formalaşmasında müxtəlif amin-turşu qalıqlarının rolları müəyyən edilmişdir. Bunun üçün molekulun ən stabil konformasiyasında onu əmələ gətirən Tyr1, Phe4, Leu5, Arg6, Lys7, Tyr8 amin-turşu qalıqlarının yan zəncirlərinin ikiüzlü fırlanma bucaqları ətrafında konformasiya xəritələri qurulmuşdur. Bu iş bizim apardığımız tədqiqat işlərinin davamıdır [3-5].

Cədvəl 1.

Beta-neoendorfin molekulunun stabil konformasiyaları, onlara qeyri-valent, elektrostatik, torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinin verdikləri pay və nisbi enerjiləri.

№	Konformasiya	$U_{qv}$	$U_{el}$	$U_{tor}$	$U_{nisbi}$
1	$B_1BPB_2B_{21}R_{3322}B_{2322}B_2B$	-45.9	8.1	6.0	0
2	$B_1BPB_2B_{21}B_{1222}R_{2222}B_2B$	-41.5	8.9	4.6	3.8
3	$B_1BPB_2B_{21}B_{2122}B_{2322}B_2B$	-40.3	7.6	6.3	5.4
4	$B_2PRR_2B_{21}R_{3222}B_{2322}B_2B$	-43.7	8.1	6.1	2.3
5	$B_2PRR_2B_{21}B_{2222}B_{2322}B_2B$	-42.0	8.2	6.6	4.6
6	$B_2PRR_2B_{21}B_{1222}B_{2222}B_2B$	-39.6	9.2	4.9	6.3
7	$B_2BPR_2R_{21}B_{1222}R_{2122}B_2B$	-43.3	9.9	5.4	3.8
8	$B_2BPR_2R_{21}B_{1232}B_{2322}B_2B$	-43.8	9.3	6.7	3.9
9	$B_1PRB_3B_{21}B_{2122}B_{2322}B_2B$	-46.1	9.5	6.5	6.2
10	$B_1PRB_3B_{21}B_{1222}R_{2322}B_2B$	-38.4	8.0	5.1	6.5
11	$B_2LPB_2R_{21}B_{1222}R_{2222}B_2B$	-37.4	7.5	5.7	7.6

Tyr1-in yan zəncirinin  $\chi_1$ - $\chi_2$  bucaqları ətrafında qurulan konformasiya xəritəsi göstərir ki, o tam konformasiya sərbəstliyinə malikdir. Ona görə də Tyr1-in yan zənciri istənilən reseptor molekulu ilə əlverişli qarşılıqlı təsir yarada bilər.

Phe4-ün yan zəncirinin  $\chi_1$ - $\chi_2$  bucaqları ətrafında qurulan konformasiya xəritəsi göstərdi ki, onun da yan zənciri tam konformasiya sərbəstliyinə malikdir və asanlıqla digər molekullarla və reseptorlarla qarşılıqlı təsirdə iştirak edə bilər.

Leu5-in yan zəncirinin  $\chi_1$ - $\chi_2$  bucaqları ətrafında qurulan konformasiya xəritəsi göstərdi ki, onun yan zənciri konformasiya sərbəstliyinə malik deyil, o yalnız fəzada müəyyən bir vəziyyətdə ola bilər, molekulun daxili hissəsində yerləşir və reseptorlarla qarşılıqlı təsirdə ola bilməz.

Məlum olduğu kimi arginin və lizin yan zəncirə və yan zəncirləri dörd ikiüzlü fırlanma bucaqlarına malikdir. Ona görə də iki aminturşu qalığının yan zəncirlərinin  $\chi^1$ - $\chi^2$ ,  $\chi^2$ - $\chi^3$ ,  $\chi^3$ - $\chi^4$  ikiüzlü fırlanma bucaqları ətrafında konformasiya xəritələri qurulmuşdur. Hər iki aminturşu qalığının konformasiya xəritələri göstərir ki, onların yan zəncirləri kifayət qədər konformasiya sərbəstliyinə malikdirlər, molekuldan su mühitinə doğru yönəlmişlər və digər molekullarla və reseptorlarla qarşılıqlı təsirdə iştirak edə bilərlər.

Konformasiya xəritəsi qurulmaqla müəyyən olundu ki, Tyr8-in yan zənciri kifayət qədər konformasiya sərbəstliyinə malikdir və müəyyən vəziyyətlərdə reseptor molekulları ilə qarşılıqlı təsirlərdə iştirak edə bilər.

Beta-neoendorfin molekulunu əmələ gətirən aminturşu qalıqlarının yan zəncirlərinin konformasiya imkanlarının tədqiqi əsasında təbii molekulun sintetik analoqlarını seçmək və öyrənmək olar.

## ƏDƏBİYYAT

1. Minamino N., Kangawa K., Chino N., Sakakibara S., Matsuo H. Biochem. And Biophys.Res.Commun. 1981 v.99 №3 P.864-870.
2. Ахмедов Н.А., Ахмедов Н.Ф., Аббаслы Р.М., Попов Е.М. Биоорганическая химия, 1992 Т.18, №12, С.1464-1472.
3. Исмаилова Л.И., Ахмедов Н.А., Аббаслы Р.М. Биофизика, 2008, Т.53 вып.1, С.14-21.
4. Akhmedov N.A., Ismailova L.I., Agayeva L.N., Gocayev N.M. Current Topics in Peptide Protein Research, 2010. V.11. P.87-93.
5. Исмаилова Л.И., Аббаслы Р.М., Ахмедов Н.А. Российский аллергологический журнал, 2012, №1, вып.1.С.140-141.

## KRİSTALLİNİN KONFORMASIYA VƏ ELEKTRON XASSƏLƏRİ

G. Ə. Haqverdiyeva

*Fizika Problemləri İnstitutu, Bakı Dövlət Universiteti,*[Haqverdiguynara@gmail.com](mailto:Haqverdiguynara@gmail.com)

Molekulyar mexanika metodu ilə kristallin adlandırılan H-Trp-Gly-OH opioid dipeptid molekulunun konformasiya profilləri öyrənilmişdir. Sonrakı mərhələdə dipeptidin aşağıenerjili konformasiyaları kvant –kimyəvi metod ilə dəqiqləşdirilmişdir. Hesablamaların nəticələri göstərir ki, bu molekul üçün əsas zəncirin həm bükülü həm də ki açıq quruluşlarına aid konformasiyaları mümkündür. Bu ardıcılığın stabilliyi triptofanın yan zəncirinin və molekulun əsas zəncirinin atomlarının qarşılıqlı vəziyyətlərlə qararlaşır və elektron sıxlığının spesifik paylanması ilə xarakterizə olunur.

**Açar sözlər:** *kristallin opioid dipeptidi, konformasiya, elektron quruluşu*

Kristallin opioid dipeptidi (H-Trp-Gly-OH) insan hipofizindən ayrılmışdır. *İn vivo* aparılan tədqiqatlarda bu peptid siçan orqanizmində opioid effekti nümayiş etdirir [1]. Məlumdur ki, canlı orqanizmlərdə peptidlərin yerinə yetirdikləri funksiyaları onların fəza quruluşları ilə bağlıdır. Bu səbəbdən dərman preparatının təsir mexanizminin başa düşülməsi üçün onun molekulunun konformasiya imkanları tədqiq olunaraq fizioloji aktiv forması müəyyən edilməlidir. Təqdim olunmuş işdə kristallin molekulunun konformasiya profilləri molekulyar mexanika metodu ilə öyrənilmişdir. Konformasiya enerjisinin lokal minimumlarının tapılması üçün universal hesablama proqramından istifadə edilmişdir [2]. Peptid molekulunun əsas zəncirinin forma və şeyplərini təsvir edən identifikatorlar sistemindən istifadə edilmişdir. Hər bir amin turşusu qalığının konformasiya vəziyyətini onun əsas zəncirinin  $\phi$  (N – C <sup>$\alpha$</sup>  - ətrafında),  $\psi$  (C <sup>$\alpha$</sup>  –C' ətrafında) və yan zəncirin  $\chi_1, \chi_2, \chi_3$ , (C <sup>$\alpha$</sup>  – C <sup>$\beta$</sup> , C <sup>$\beta$</sup>  – C <sup>$\gamma$</sup> , ətrafında) ikiüzlü bucaqlarının qiymətləri xarakterizə edir. Amin turşusu qalığının konformasiyasını R ( $\phi, \psi = -180^\circ - 0^\circ$ ), B ( $\phi = -180^\circ - 0^\circ$ ,  $\psi = 0^\circ - 180^\circ$ ), L ( $\phi, \psi = 0^\circ - 180^\circ$ ), P ( $\phi = 0^\circ - 180^\circ$ ,  $\psi = -180^\circ - 0^\circ$ ) oblastları ilə müəyyən edirlər. Kristallinin hesablamaları üçün hazırlanmış konformasiyalar onun tərkib hissələri olan Trp amin turşusunun əsas zəncirinin mümkün olan R, B, L formaları və Gly amin turşusunun mümkün olan R, B, L, P formaları əsasında tərtib olunmuşdur. Trp amin turşusunun yan zəncirinin  $\chi_1$  bucağı üçün  $60^\circ, 180^\circ$  və  $-60^\circ$ ,  $\chi_2$  bucağı üçün  $90^\circ$  və  $-90^\circ$  torsion minimumlarına uyğun qiymətlər baxılmışdır. Bunu nəzərə alaraq, bu dipeptidin əsas zənciri açıq olan quruluşa (e şeypi) malik olan BB, BR, LB, LR, RL, RP formalarına və bükülü olan quruluşa (f şeypi) malik olan RR, RB, BL, BP, LL, LP formalarına aid 72 konformasiya hesablanmışdır. Aşağı enerjili malik quruluşların optimallaşması AMBER qüvvə sahəsində aparılmışdır. Nəticələr göstərir ki, bu dipeptid ardıcılığı üçün əsas zəncirin həm açıq, həm də ki bükülü quruluşları mümkündür. Belə ki, enerji cəhətdən daha əlverişli konformasiyalar e şeypin BB, BR, LB, LR formalarına, f şeypin isə BL, BP formalarına mənsubdur. Kristallinin əsas zəncirinin açıq və bükülü quruluşa malik olan optimal konformasiyaları (B<sub>2</sub>B və B<sub>2</sub>P) demək olar ki, izoenergetikdirlər, onların nisbi enerjiləri müvafiq olaraq 0.0 kkal/mol və 0.7 kkal/mol-dir. Bu konformasiyaların həndəsi parametrləri Cədvəl 1-də verilmişdir. Triptofan amin turşusunun massivliyi və dipeptid ardıcılığının ikinci pozisiyasında yan zənciri olmayan qlisin qalığının yerləşməsi səbəbindənən peptid zəncirinin mütəhərrikliliyi bu molekulun fəza quruluşunu formalaşdıran əsas faktorlardır. Qeyd etmək lazımdır ki, triptofan qalığının yan zəncirinin atomları ilə

dipeptidin əsas zəncirinin atomları arasında yaranan dispersion qarşılıqlı təsirlərin bu molekulun stabilləşməsi üçün önəmli olduğundan onun enerjisi Trp amin turşusu qalığının yan zəncirinin vəziyyətinə çox həssasdır. Belə ki, hər forma daxilində bu qalığın  $\chi_1$  bucağına görə konformasiyalar arası enerji differensiasiyası baş verir. Müəyyən olmuşdur ki, triptofanın  $\chi_1$  bucağının  $180^\circ$  qiyməti onun yan zəncirinin daha əlverişli vəziyyətinə cavab verir. Triptofanın yan zənciri  $\chi_1$  bucağının  $60^\circ$  və  $-60^\circ$  qiymətlərinə uyğun vəziyyətlərdə olduqda molekulun digər atomları ilə əlverişli kontaktlar qura bilmir və bu səbəbdən dipeptid molekulunun enerjisi 0.6 –4.5 kkal/mol intervalında artır. Yalnız dörd konformasiyada bu qalığın  $\chi_1$  bucağının  $60^\circ$  qiyməti əlverişli olur, triptofanın  $\chi_2$  bucağı  $-90^\circ$  qiymətinə bərabər olduqda. Qeyd edək ki, triptofanın  $\chi_2$  bucağının  $90^\circ$  və  $-90^\circ$  qiymətlərinə cavab verən vəziyyətləri demək olar ki izoenergetikdirlər, lakin e şəypinin LB və LR formalarına aid olan quruluşlarda triptofanın  $\chi_1$  bucağı  $180^\circ$  qiymət aldıqda onun  $\chi_2$  bucağı üçün  $-90^\circ$  qiyməti qeyri mümkün olur. Qeyd edək ki, dipeptidin əsas zənciri açıq vəziyyətdə olduqda triptofanın yan zənciri molekulun əsas zənciri ilə maksimal yaxınlaşaraq effektiv dispersion kontaktlar qurur. Məsələn e şəypinə aid olan global konformasiyada qeyri-valent qarşılıqlı təsirlərin ümumi qiyməti -6.1 kkal/mol-dir, Trp-Gly qarşılıqlı təsirin qiyməti isə -8.6 kkal/mol-dir. Müqaisə üçün deyək, f şəypin optimal quruluşunda enerjinin qeyd olunan payları müvafiq olaraq -5.0 və -7.7 kkal/mol-dir, lakin bu enerji itkisi elektrostatik qarşılıqlı təsirlərin stabilləşdirici effekti ilə müəyyən dərəcədə kompensasiya olunur. Hesablamalar göstərdi ki, dipeptidin stabil quruluşlarında molekulun uclarındakı ağır atomlar arasında olan məsafə 5.8 –6.9 Å -dir, bu məsafə kiçildikcə bir çox atomlararası dispersion kontaktlar mümkün olmur, triptofanın yan zənciri molekulun digər atomlarına yaxınlaşa bilmir. Onuda qeyd edək ki, kristallin molekulunun stabil quruluşlarında son uclu amin kationu və triptofanın əsas zəncirinin karbon atomuna peptid rabitəsilə bağlı olan oksigenin arasında hidrogen rabitəsi mövcuddur (2,44A).

Cədvəl 1.

Kristallinin əsas zəncirinin açıq və bükülü quruluşa malik olan optimal konformasiyalarının həndəsi parametrləri (dərəcələrdə)

Trp					Gly	
□	$\chi_1$	$\chi_2$	$\psi$	$\omega$	□	$\psi$
-182.631	180.371	73.518	151.032	176.931	-91.100	99.120
-182.757	181.220	97.808	148.721	179.106	89.169	-85.711

Sonrakı mərhələdə kristallin molekulunun optimal konformasiyaları CNDO kvant-mexaniki metod ilə HyperChem7.5 (<http://www.hyper.com>) proqramın nümunə versiyasından istifadə edərək dəqiqləşdirilmişdir [3]. Elektron enerjisinin optimallaşması üçün başlanğıc vəziyyət olaraq bu molekulun molekulyar mexanika üsulu ilə hesablanmış optimal konformasiyaların həndəsi parametrlərinə (Cədvəl 1) cavab verən nüvələrin tarazlıqda olan konfigurasiyaları baxılmışdır. Atomların effektiv yüklərinin qiymətləri, elektrostatik potensialının paylanması, elektron quruluşunu xarakterizə edən enerji parametrləri əsasında molekulun elektron –konformasiya xassələri öyrənilmişdir. Hesablamalar göstərdi ki, konformasiya müxtəlifliyinə baxmayaraq bu quruluşların bir çox elektron parametrləri az fərqlənir (Cədvəl 2). Belə ki, dipeptidin əsas zəncirinin bükülməsi elektron enerjisinin artmasına səbəb olsa da, bu enerji itkisi nüvələrin itələmə enerjisinin azalması ilə kompensasiya olunur və bu səbəbdən molekulun tam enerjisi dəyişməz qalır. Hər iki

quruluşlar üçün yüksək dolmuş ( $E_{\text{HOMO}}$ ) və aşağı dolmamış ( $E_{\text{LUMO}}$ ) molekular orbital enerjilərinin qiymətləri yaxındır. Molekulun əsas zəncirinin bükülməsi nəticəsində müsbət yük mərkəzinin yerdəyişməsi baş verir və bu səbəbdən molekulun dipol momenti 2 debay azalmış olur. Dipeptidin bir cox atomlarının yükləri hər iki quruluşlar üçün yaxın qiymətlər alsalarda, triptofan amin turşusunun yan zəncirindəki funksional atom qruplarının ətrafında yük sıxlığının spesifik paylanması nəzərə çarpır. Triptofanın indol halqasının molekulun əsas zəncirinin üstündə asılmış vəziyyətdə olması səbəbindən bu qalıqlın yan zəncirindəki funksional qrupların və son uclu  $\text{COO}^-$  və  $^+\text{NH}_3$  ionogen qrupların atomları fəzada yaxınlaşmış olurlar, bu da ki reseptorlarla bağlanmaq üçün önəmli ola bilər.

Cədvəl 2.

Kristallinin əsas zəncirinin açıq və bükülü quruluşa malik olan optimal konformasiyalarının elektron quruluşlarının əsas parametrləri

Elektron parametrləri	Açıq quruluş	Bükülü quruluş
Dipol momenti (debay)	25.231	23.262
Tam enerji (kkal/mol)	-121631.0509226	-121630.2009902
Baglanma enerjisi (kkal/mol)	-10433.8865589	-10433.0366265
İzolə olunmuş atom enerjisi (kkal/mol)	-111197.1643637	-111197.1643637
Elektron enerjisi (kkal/mol)	-618926.2631477	-587632.0521384
Nüvə qarşılıqlı təsirlər enerjisi (kkal/mol)	497295.2122251	466001.8511483
Əmələ gəlmə enerjisi(kkal/mol)	-6913.1095589	-6912.2596265
$E_{\text{HOMO}}$	-6.21	-6.02
$E_{\text{LUMO}}$	-1.75	-2.19

\* Qeyd:  $E_{\text{HOMO}}$  - yüksək dolmuş molekular orbital enerjisi,  $E_{\text{LUMO}}$  - aşağı molekular orbital enerjisi

Kristallinin elektron-konformasiya xassələrinin tədqiqi qeyritipik opioid peptidlərinin quruluş-funksiya münasibətlərinin araşdırılmasında vacib rol oynaya bilər.

## ƏDƏBİYYAT

1. Neidle A., Kelly J.A. // Arch. Biochem. Biophys.233(1984)115–126
2. Максумов И.С., Исмаилова Л.И., Годжаев Н.М. // Ж. Структ. Химии. 24(1983)147-148
3. Allinger N.L., Yuh Y. QCPE 395, Quantum chemistry program exchange, Indiana Univ., Indiana, 1982.

## POLIETİLENQLİKOL-KARBOMİD-SU İKİ VƏ ÜÇ QAT SİSTEMLƏRİNDƏ SƏTHİ GƏRİLMƏ

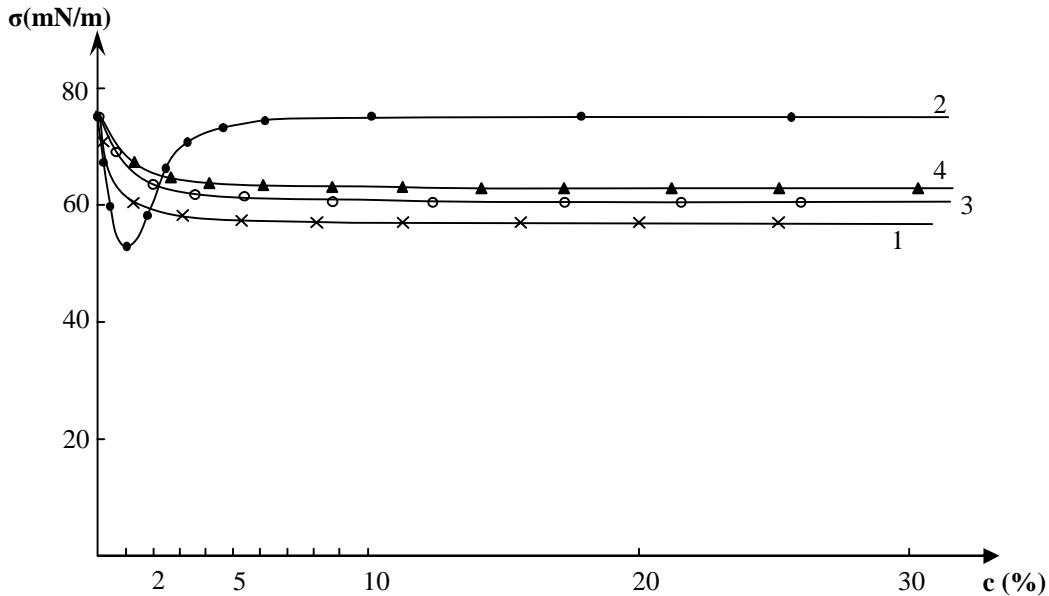
**K.M. Budaqov, Q.M. Bayramov, Ç.İ. İbrahimov**  
Bakı Dövlət Universiteti, Fizika Problemləri ETİ

Mayelərdə səthi gərilmə ümumiyyətlə koqeziya qüvvələrinin asimetriyası hesabına baş verir ki, buda mayeni təşkil edən molekulların qarşılıqlı təsir qüvvələrindən asılıdır. Təbiətə bu qüvvələr dispers, dipole –dipol və induksiya qarşılıqlı təsirləri və həmçinin hidrogen rabitələri ola bilər. Belə ki, həcmdə yerləşən molekullar hər tərəfdən qonşu molekullar ilə əhatə olunduğu halda, səthdə yerləşən molekullar üst tərəfdən belə qonşulardan məhrum olduğundan həcmdəki molekullar tərəfindən daha çox cəzb olunurlar. Bu asimetriya səth enerjisinin dəyişməsinə və səthi gərilmənin yaranmasına səbəb olur [1].

Polietilenqlükol (PEQ) polimer maddə kimi hüceyrə membranlarındakı antigenlərə ciddi zərər vermədiyindən tibb və kosmetika sahəsində istifadə olunduğundan onun karbomid və su ilə məhlulu tədqiqat üçün maraq kəsb edir. Məlumdur ki, polimer məhlullarında səthi gərilmə yaranmış səthin tarazlıq vəziyyətinə gəlmə müddətindən, komponentlərin sayından, həll olunma qabiliyyətindən, səthə diffuziya eymə sürətindən və molekulların konfigurasiyasının dəyişməsindən asılıdır.

Polimer məhlullarında adsorbsiyayı izah etmək müəyyən çətinlik yaradır. Çünki onların molekulyar kütləsi böyük olduğuna görə həll olunması zəif, səthə toplanması isə çox olur. Digər tərəfdən səthdə polimer molekullarının konfigurasiyası ciddi dəyişikliyə məruz qala bilər. Bu səbəbdən də polimerlərin səthi gərilməsini dinamik üsul ilə ölçmək lazımdır. Dinamik səthi gərilmə –tarzlıq halı yaranana qədər olan səthi gərilmənin dəyişməsidir.

Səthi gərilmə əmsalı yarımstatik metod olan qabarcığın kapilyar təzyiqinin maksimal qiymətinin təyin edilməsinə əsaslanmışdır [2].



Şəkil 1-dəki 1-əyrisində PEQ-su məhlulu üçün səthi gərilmə əmsalının konsentrasiyadan asılılığı verilmişdir. Şəkildən görüldüyü kimi bu məhlul özünü səthi aktiv maddə kimi aparır. Əvvəlcə b azalır (PEQ-in məhluldakı payının 10%-nə qədər), sonradan isə adsorbsiya təbəqəsinin doyması baş verdiyindən b sabit qalır. Səthi aktiv maddənin yüksək

konsentrasiyalarında b-nin doymuş qiymət alması onunla izah olunur ki, nazik səth təbəqəsi artıq səthi aktiv maddə molekulları ilə dolmuşdur.

Səthi aktivliyə malik olan PEQ molekulları iki hissədən –polyar və zəif molekulyar qüvvələr sahəsinə malik olan qeyri-polyar radikallara maldır. Onun polyar qrupları adsorbsiya olunduqda polyar fazaya (suya) qohumluğuna əsasən ona tərəf cəzb olunurlar. Qeyri –polyar radikallar isə qeyri –polyar fazaya (havaya) tərəf itələnilir. Kiçik konsentrasiyalarda havaya tərəf itələnilmiş karbohidrogen zəncirləri suyun üzərində üzür, polyar qruplar isə suya daxil olmuş vəziyyətdə olurlar. Belə vəziyyəti almaq karbohidrogen zəncirlərinin mütəhərriqliyi hesabına baş verir. PEQ –in konsentrasiyasının sonrakı artımı ilə səth təbəqəsində molekulların sayı artır və karbohidrogen zəncirləri son halda şaquli vəziyyət alırlar. Doymuş adsorbsiya təbəqəsi yarananda suyun üzəri tamamilə karbohidrogen zəncirləri ilə örtülmüş olur ki, onun da hesabına b azalaraq təmiz səthi aktiv maddə - hava sərhədi üçün mövcud olan qiymətinə yaxınlaşır.

Şəkil 1-dəki 2-əyrisində krbomid-su məhlulu üçün karbomidin məhluldakı konsentrasiyasından asılılığı verilmişdir. Əyridən görüldüyü kimi karbomidin konsentrasiyası 1-2% təşkil etdiyi halda qədər səthi gərilmə əmsalı kəskin azalıb minimumdan keçərək yenidən artır və müəyyən bir qiymətə çataraq sabit qalır.

Göründüyü kimi karbomidin konsentrasiyanın 1-2%-i ətrafında suyun srukturu dedikdə ondakı hidrogen rabitələrinin sayı, enerjisi klasterlərin ölçülərinə görə paylanması və s. nəzərdə tutulur.

Qeyd etmək lazımdır ki, təmiz karbomid tetraqonal quruluşa malik olub onun kristallik yuvacığı dörd molekuldan ibarət olur[3]. Karbomid molekullarının öz aralarında yaratdığı belə quruluş sayəsində diametrlərinin ölçüləri 4-9A intervalında digər maddə molekullarının yerləşməsi mümkün ola bilər. Digər tərəfdən təsdiq edilmişdir ki, təmiz su molekulları adətən özündə daha çox ölçüləri 30-50 nm olan klasterlər saxlayırlar. Buradan belə nəticəyə gəlmək olar ki, karbomid çox kiçik konsentrasiyalarda (1-2%-ə qədər) suya daxil edildikdə onun kristallik yuvacıqları dağılır və onun molekulları məhlulda su klasterlərinə daxil olaraq onun strukturunu dəyişdirir. Lakin ehtimal etmək olar ki, yüksək konsentrasiyalarda karbomid molekullarının müəyyən hissəsi öz aralarında yenidən assosiatlar yarada bilər ki, onlar da su klasterlərinə kifayət qədər daxil ola bilmirlər. Bu səbəbdən də səthi gərilmə əmsalı əvvəlcə azalmış, sonradan isə minimumdan keçərək müəyyən qiymətinə qədər artaraq son halda müəyyən bir qiymət alaraq sabit qalmışdır.

Şəkil 1-dəki 3 və 4 əyrişlərində karbomidin konsentrasiyası sabit saxlanılmaqla (3-əyrisində 10%, 4-əyrisində 20%) PEQ-karbomid-su sistemində səthi gərilmənin konsentrasiyadan asılılığı verilmişdir. Şəkildən görüldüyü kimi karbomidin konsentrasiyasının artması ilə PEQ-karbomid-su sistemi üçün b-c asılılığı PEQ-su sistemi üçün olan asılılığa bənzəyir və konsentrasiyanın artması ilə yuxarıya tərəf sürüşür (krbomid-su sistemi üçün olan asılılığa). Bunu onunla izah etmək olar ki, verilən üç qat məhlulda aparıcı rol PEQ molekulları yerinə yetirir. Yəni karbomid molekulları PEQ molekulları ilə qarşılıqlı təsirdə olduğundan səthi gərilmə əmsalı bir qədər də artır. Eyni zamanda karbomidin kiçik konsentrasiyalarında karbomid –su məhlulu üçün mövcud olan minimumdan keçmə hadisəsi baş vermir.

Bu nəticələr məhlullarda mövcud olan qarşılıqlı təsirlərin nə qədər mürəkkəb olduğunu bir daha nümayiş etdirir.

## ƏDƏBİYYAT

1. Məsimov E.Ə. Polimerlərin fiziki kimyası. Bakı Universiteti Nəşriyyatı, 2010, 416 s.
2. Məsimov E.Ə., Budaqov K.M., Bayramov Q.M., Ələkbərov Ş.Ş. Aqar-su məhlullarında səthi gərilməyə temperaturun və konsentrasiyanın təsiri. BDU-nun xəbərləri, 2011, №3, səh.133-138.
3. A.В.Артемов, С.Я.Садивский. Особенности взаимодействия карбамида с инертными цепными молекулами.

## NEFT MƏHSULLARINDAN QAZOLININ BƏZİ İSTİLİK FİZİKİ VƏ OPTİK XASSƏLƏRİNİN TƏYİNİ

**Ə.Ə. Əliyev, Ə.L. Bəxtiyarov**  
Azərbaycan Dövlət Neft Akademiyası  
[ali.bakhtiyarov@mail.ru](mailto:ali.bakhtiyarov@mail.ru)

*Təqdim olunan işdə neft məhsullarından qazolin nümunəsinin bəzi istilik fiziki və optik xassələrinə baxılmışdır. Təcrübənin nəticələri göstərmişdir ki, nümunənin istilik fiziki xassələrindən olan sabit təzyiqdəki istilik tutumunun, kinematik, dinamik özlülük əmsallarının və sıxlığının temperatur asılılığı, həmçinin onun optik xassələrindən işıq şüası intensivliyinin dalğa uzunluğundan və temperaturdan asılılığına baxılmışdır. Nəticədə bu nümunənin aktivləşmə enerjisinin qiymətinin  $W = 0,86e \cdot V$  olduğu, işıq şüası intensivliyinin dalğa uzunluğu və temperaturdan asılılıq qrafikinə əsasən isə səpilmənin molekulyar səpilmə xarakterinə uyğun gəldiyi müəyyən olunmuşdur.*

Neft və neft məhsullarının istər nəqlində, istərsə də saxlanması işində onun fiziki xassələrini təyin edən fiziki kəmiyyətlərin öyrənilməsi məsələsi də mühüm rol oynayır [1, 2]. Təqdim olunan bu işdə isə neft məhsullarından olan qazolinin bəzi istilik və optik xassələrinin öyrənilməsinə baxılır.

Qazolin nümunəsinin sabit təzyiqdəki istilik tutumunun temperatur asılılığı  $298 \div 398^{\circ}\text{K}$  intervalında IT-C-400 ölçü cihazı vasitəsilə

$$C_p = \frac{K_T}{m_0} (\tau_T - \tau_T^0)$$

ifadəsinə görə təyin olunmuşdur. Burada  $K_T$  –istilik keçirmə əmsalı;  $\tau_T^0$  –istilik ölçmənin özünün temperaturunun yubanma vaxtı;  $\tau_T$  –isə nümunənin ölçülməsi zamanı yubanma vaxtıdır. İstilik tutumunun temperatur asılılığı cədvəl 1–də verilmişdir.

Cədvəl 1.

No	T(K)	$\tau_T^0$ (san)	$\tau_T$ (san)	$K_T \left(\frac{V}{K}\right)$	$C_p \left(\frac{C}{K \cdot kq}\right)$
1	298	13,9	17,3	0,395	2441
2	323	15,2	18,5	0,369	2389
3	348	14,5	18,8	0,374	3216
4	373	14,8	18,6	0,391	2972
5	398	16,0	19,7	0,400	2960

Cədvəldən görüldüyü kimi, qazolinin sabit temperaturdakı istilik tutumunun qiyməti temperaturun artması ilə artır, temperaturun sonrakı artmasında isə o, azalmağa başlayır.

İşdə həmçinin qazol neft məmulatı nümunəsinin kinematik, dinamik və onun sıxlığının temperatur asılılığına da baxılmışdır. Kinematik əmsal, diametri 0,56 mm olan viskozimetr vasitəsilə

$$V = \frac{g}{980,7} \tau \cdot C$$

ifadəsinə əsasən tapılmışdır. Burada  $\tau$  –mayenin axma müddəti;  $C$  –isə viskozimetr üçün sabit kəmiyyət olub,  $C = 0,010128(\text{mm}^2 / \text{san}^2)$  -dir.

Təcrübənin nəticələri cədvəl 2-də verilmişdir.



Cədvəl 2.

Nö	$\tau$ (san)	$V_{kin}$ (m <sup>2</sup> /san)	$\eta$ (kq/m·san)	$\rho$ (kq/m <sup>3</sup> )	T(K)
1	485	$4907,6 \cdot 10^{-10}$	$4122,4 \cdot 10^{-7}$	840	297
2	327	$3308,8 \cdot 10^{-10}$	$2736,4 \cdot 10^{-7}$	827	313
3	-	-	-	-	323
4	207	$2094,6 \cdot 10^{-10}$	$1717,6 \cdot 10^{-7}$	820	333
5	157	$1586,1 \cdot 10^{-10}$	$1280,0 \cdot 10^{-7}$	807	353

Alınmış bu nəticələr əsasında qazol nümunəsinin aktivləşmə enerjisinin qiyməti tapılmışdır. Aktivləşmə enerjisinin qiyməti məlum  $\eta = Ae^{W/KT}$  və ya  $\ln\eta = \ln A + \frac{E}{KT}$  ifadəsinə görə hesablanmış və  $W = 0,86e \cdot V$  olduğu alınmışdır.

Bu işdə qazol nümunəsinin optik xassələrindən nümunə daxilində udulma və səpilmə nəticəsində işıq şüası intensivliyinin dalğa uzunluğundan və temperaturdan asılılığına da baxılmışdır.

Təcrübənin nəticələri cədvəl 3-də verilmişdir.

Cədvəl 3.

Nö	T = 393K		T = 413K	T = 433K	T = 453K
	$\lambda$ (mm)	$\ln\left(\frac{I}{I_0}\right)$	$\ln\left(\frac{I}{I_0}\right)$	$\ln\left(\frac{I}{I_0}\right)$	$\ln\left(\frac{I}{I_0}\right)$
1	680	2,5648	2,1203	2,4177	2,8549
2	610	2,0808	2,0947	2,3187	2,379
3	590	2,1523	2,1970	2,1970	2,1523
4	535	2,1752	2,2192	2,4713	2,3758
5	480	2,0504	2,0919	2,3295	2,6326
6	430	2,2194	2,6753	2,6753	2,2623
7	390	2,160	2,2118	2,3918	2,4200

Alınmış bu təcrübə nəticələrinə görə intensivliyin dalğa uzunluğundan və temperaturdan asılılıq qrafikini qurmuş olsaq, görürük ki, intensivliyin dalğa uzunluğundan və temperaturdan asılı olaraq dəyişmə əyriyə eyni formaya malik olsalar da, lakin qısa dalğalarda intensivliyin temperaturdan asılı olaraq zəiflənməsi daha çox özünü büruzə verir.

Məlumdur ki, işıq şüası maddə daxilindən keçdikdə onun dalğa uzunluğu, maddəni təşkil edən hissəciklərin ölçüsü tərtibdə olduğu halda səpilmə difraksiya xarakterli olub müxtəlif bucaq altında səpilir. Hissəciklərin ölçüsü dalğa uzunluğuna nisbətən çox kiçik olduğu halda isə səpilmə dipol xarakterli olur, çünki şüanın dəyişən elektrik sahəsi dipolları məcburi rəqsə gətirdiyindən səpilmə şüanın tezliyi onu yaradan şüanın tezliyinə bərabər olur. Belə səpilmə isə Reley səpilməsinə tabe olduğundan, səpilmənin intensivliyi qısa dalğalarda uzun dalğalara nisbətən daha çox səpilməyə məruz qalmalıdır [3].

Lakin işıq şüası kənar qarışıqı olmayan çox təmiz maddələrdən keçdikdə isə səpilmənin nəticəsi fluktuasiya nəticəsində mühitdəki qeyri-bircinsliliyin (sıxlığın, anizotropiyanın) yaranması nəticəsində molekulyar səpilməyə məruz qalır ki, bu da temperaturun artması ilə intensivliyin artmasına səbəb olur.

Beləliklə, apardığımız təcrübənin nəticəsi olaraq belə nəticəyə gəlmək olar ki, qazolin neft nümunəsi daxilində işıq şüası intensivliyinin temperaturdan asılı olaraq dəyişməsi molekulyar səpilmə xarakterinə uyğun gəlir.

## ƏDƏBİYYAT

1. Ə.Ə. Əliyev “Neftin istilik tutumunun və sıxlığının təyini”. Az.T.U. Elmi Əsərlər, Fundamental elmlər, №2, cild IX (34), Bakı 2010, səh.12-14.
2. Ə.Ə. Əliyev, F.V.Ayvazova, X.O.Sadiq “Neft məhsullarından olan dizel yağının bəzi optik xassələrinin təyini”. Az.T.U. Elmi Əsərlər, Fundamental elmlər, №1, cild IX (39), Bakı 2012, səh.14-16.
3. Н.М. Годжаев “Оптика” – Москва «Высшая школа» 1977 ст. 309-311.

### УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ СКОРОСТИ ЗВУКА В УГЛЕВОДОРОДАХ И СПИРТАХ ДЛЯ ЖИДКОЙ ФАЗЫ

**В.Г. Гасанов, Дж.Я. Назиев\***

*Азербайджанский Технический Университет,*

*\*Азербайджанская Государственная Нефтяная Академия*

[vgasanov2002@yahoo.com](mailto:vgasanov2002@yahoo.com)

*Предложено уравнение состояния с тремя коэффициентами для описания объемного поведения жидких углеводородов и спиртов. Это уравнение применено к углеводородам и спиртам различной молекулярной структуры (бензол, ноктан, изооктан, метанол) и показано, что оно передает экспериментальные данные в широкой диапозоне параметров состояния, с точностью не хуже опытный.*

Для интенсификации промышленности и выполнения широкой программы социально-экономического развития Республики требуются глубокие коренные сдвиги, и прежде всего, в экономике и в научно –техническом прогрессе. В этом плане для всего народного хозяйства страны особого внимания заслуживает наиболее экономичное и рациональное использование всех видов сырья и материальных ресурсов.

Отсутствие строгой теории жидкого состояния вещества затрудняет теоретическое определение переносных свойств жидкостей в широком интервале давлений и температур. Жидкости, являясь промежуточным между твердым и газообразным состояниями при температурах, близких к точке кристаллизации, в них больше проявляется характер твердых тел, а при температурах и давлениях, близких к критическим –характер газа.

Современная теория скорости звука (кинетические методы, модельные теории, аддитивные методы расчета с учетом молекулярного строения и т.д.) пока не позволяет установить теоретическую зависимость для расчета  $W$  в практически важной области параметров состояния с требуемой точностью. Некоторые из методов могут использоваться лишь для оценочных расчетов, и то в ограниченной области. Большинство существующих методов расчета в своей основе являются эмпирическими или полуэмпирическими.

В большинстве расчетных методов используют теоретические по форме уравнения с эмпирическими корреляциями постоянных. Добавка эмпиризма во второстепенные части теоретического уравнения является важным средством разработки превосходных корреляций.

Большинство уравнений, предложенных различными учеными, определяют скорость звука через плотность и теплоемкость жидкости.

В диссертационной работе М.Р. Мустафаева для практического применения использована формула в виде

$$W = 100 \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^m a_{ij} (T/100)^{j-1} p^{i-1}, \quad (1)$$

где  $W$  – скорость звука, м/с,  $T$  – температура, К,  $p$  – давление, МПа,  $a$  – коэффициенты регрессии.

С появлением большого количества надежных экспериментальных данных в дальнейшем формула (1) совершенствовалась и принята нами в виде

$$W = \sum_{i=0}^2 a_i \mu^i + \sum_{i=0}^2 b_i \mu^i T + \sum_{i=0}^2 c_i \mu^i T^2, \quad (2)$$

где  $\mu$  – коэффициент Пуассона для кварца.

В работе [1] приведено уравнение в следующем виде:

$$W = \sum_{i=0}^4 a_i p^i \quad (3)$$

Это уравнение описывает экспериментальные данные в пределах погрешности эксперимента.

Таким образом, перед нами ставилась задача составления новых уравнений состояния жидкостей для описания полученных экспериментальных данных.

Исходя из анализа применимости рассмотренных выше уравнений состояния к исследованным в работе объектам [2-4], можно прийти к следующему. Наиболее полно с удовлетворительной погрешностью описывают настоящие экспериментальные данные несколько видоизмененное уравнение. Предлагаемое уравнение состояния имеет следующий вид:

$$W = A + B \cdot T + C \cdot T^2, \quad (3)$$

где  $W$  – скорость звука в исследуемом веществе, м/с;  $T$  – температура, К;  $A$ ,  $B$ ,  $C$  – коэффициенты, зависящие от давления.

Здесь следует отметить, что уравнение (3) описывает весь массив экспериментальных данных со средней погрешностью 0,05-0,1%. При этом, лишь в некоторых точках, близко лежащих к линии насыщения, погрешность описания доходит до 0,15-0,18%. Таким образом, для аналитического описания экспериментальных данных, полученных в настоящей работе во всем исследованном интервале температур и давлений предпочтение отдается уравнению (3).

Для всех исследованных смесей и их чистых компонентов коэффициенты уравнения (3)  $A$ ,  $B$  и  $C$  вычислены для каждой изотермы методом наименьших квадратов и описаны аналитически в виде:

$$A(P) = \sum_{i=0}^3 a_i p^i; \quad B(P) = \sum_{i=0}^3 b_i p^i; \quad C(P) = \sum_{i=0}^3 c_i p^i. \quad (4)$$

Коэффициенты полиномов  $a_i$ ,  $b_i$  и  $c_i$ , полученные по специальной программе на компьютере.

Выполненные расчеты и сопоставления показывают, что уравнение состояния (4) с учетом коэффициентов  $a_i$ ,  $b_i$  и  $c_i$ , аппроксимируют опытные данные с отклонениями, близкими к оцененной погрешности измерений.

Следует отметить, что уравнение (3) имеет еще одно неоспоримое преимущество по сравнению с уравнением (2), которое заключается в том, что оно выражено в явном виде по отношению к  $W$ , что имеет немаловажное значение, так как в практических расчетах искомой величиной обычно является скорость звука и уравнение (3) позволяет проводить немашинное вычисление  $W$ .

## ЛИТЕРАТУРА

1. Алиев А.А. Комплексное исследование  $p, \nu, T$ -зависимости, скорости ультразвука и вязкости в бинарных системах метанол-вода и н-пропапол-вода: Автореф. дис. канд. техн. наук. Баку, 1988, 18 с.
2. Гасанов В.Г. Исследование скорости ультразвука в метаноле и этилбензоле при различных температурах и давлениях // АзТУ, ученые записки – фундаментальные науки, 2005, № 4, т. 4 (16), с. 18-20.
3. Hasanov V.H., Kabelac S. Speed of sound in (methanol+benzene) at temperatures between  $T=290$  K and  $T=530$  K and pressures up to  $p=60$  MPa // AzTU, Scientists of a note - Fundamental sciences, 2007, №1, vol. VI (21), p. 3-6.
4. Hasanov V.H. The Speed of Sound of n-Heptane, n-Octane and their Binary Mixtures at Temperatures  $T=293.15$  to  $523.15$  K and Pressures up to  $60$  MPa // High Temperature, vol. 50, No. 1, pp.44-51, 2012, USA.

### PROPILBENZOL DOYMUŞ BUXARI TƏZYİQİNİN TEMPERATURDAN ASILILIĞIN TƏCRÜBİ TƏDQIQI VƏ ANALITİK İFADƏSİ

**F.Q. Abdullayev, H.Ş. Həsənov, Y.A. Cəbiyev, N.İ. Cəfərova**

*Azərbaycan Dövlət Neft Akademiyası*

*Bakı Dövlət Universiteti*

*T = 298 – 638,75 temperatur intervalında propilbenzol doymuş buxarı təzyiqi təcrübi tədqiq olunmuş. Alınmış təcrübi nəticələr əsasında propilbenzolun  $P_s - T_s$  asılılığını ifadə etmək üçün yeni tənlik təklif olunur. Hesablama xətasının qiyməti  $\pm 0,01\%$  -dən böyük olmur.*

Aromatik karbohidrogenlər müasir sənayenin demək olar ki, bütün sahələrində geniş istifadə olunurlar. Bu maddələrin iştirak etdikləri proseslərin əksəriyyəti temperatur və təzyiqin çox geniş dəyişilmə intervalında baş verirlər. Belə proseslərin elmi cəhətdən düzgün lahiyələşdirilməsi və iqtisadi səmərəsinin yüksək olması üçün geniş temperatur və təzyiq intervalında aromatik karbohidrogenlərin istilikfiziki xassələrinin dəqiq qiymətlərinin məlum olması mühüm əhəmiyyət kəsb edir. Deyilənləri nəzərə alaraq, biz maye propilbenzolun doymuş buxarı təzyiqini  $T=(300\div 639)$ K temperatur intervalında təcrübi tədqiq etmişik.

Ölçmələr benzol, toluol, etilbenzol və s.  $P_s - T_s$  asılılıqlarının tədqiqində istifadə olunmuş  $P - \nu - T$  qurğusunda [1] aparılmışdır. Təcrübələrdə temperatur, xüsusi sifarişlə hazırlanmış ПТС-10 tipli, nümunəvi müqavimət termometri ilə ölçülür. Temperaturun ölçülməsində buraxılan mütləq xəta  $\pm 0,01$  K-dən böyük olmur. Nisbi xətanın qiyməti bundan da kiçik olur.

Təzyiq standartlaşdırma mərkəzlərində xüsusi yoxlama keçmiş nümunəvi МП-60 və МП-600 pistonlu manometrləri vasitəsilə ölçülür. Təzyiqin ölçməsində buraxılan nisbi xətanın ən böyük qiyməti  $\pm 0,01\%$  -dən böyük olmur.

Tədqiqat üçün istifadə olunan “ЧДА” (çistiy dlya analiza) markalı propilbenzol nümunəsi, yüksək həssaslığa malik rektifikasiya kalonunda təkrar təmizlənmişdir. Tədqiqatda istifadə olunan propilbenzolun təmizliyinin 99,9% olması müəyyən edilmişdir.

300-523K temperatur intervalında doymuş buxarın təztiqi, bu məqsəd üçün hazırlanmış xüsusi U-şəkilli manometrlə ölçülür. 523-598K temperatur intervalında təcrübənin təzyiq МП-60 tipli pistonlu manometrlərlə ölçülmüşdür. 598-639K temperatur

intervalında təcrübənin təzyiqləri həm MII-60, həm də MII-600 tipli pistonlu manometrlə ölçülmüşdür.

Təcrübi qurğu doymuş buxarın təzyiqini həm nümunəni qızdıraraq-qızdıraraq, həm də soyudaraq-soyudaraq ölçməyə imkan verir. Bu imkandan istifadə edərək propilbenzol doymuş buxarının təzyiqi iki dəfə həm qızdıraraq-qızdıraraq, həm də soyudaraq-soyudaraq ölçülmüşdür. Müxtəlif təcrübələrdə təzyiqlərin ölçülmüş qiymətləri arasındakı fərq  $\pm 0,01\%$  -dən böyük olmur.

Cədvəl 1

T, K	t°,C	$P_S$ , bar.	T, K	t°,C	$P_S$ , bar.
298,15	25	0,004489	523,15	250	5,6829
323,15	50	0,02030	548,15	275	10,2651
348,15	75	0,06368	573,15	300	14,6714
373,15	100	0,17090	598,15	325	24,6242
398,15	125	0,39401	623,15	350	28,1412
423,15	150	0,83102	632,36	359,21	31,4322
448,15	175	1,5153	635,56	362,41	32,6541
473,15	200	2,7051	637,47	364,32	33,4057
498,15	225	4,3820	638,75	365,60	33,9148

Ölçülmüş qiymətlər əsasında  $T = (323 - 639) K$  intervalında propilbenzol doymuş buxarı təzyiqinin temperaturdan asılı olaraq dəyişməsinə əks etdirən  $P_S - T_S$  qrafiki qurulmuşdur. Bu qrafikə hər iki seriyə təcrübələrdə təyin olunmuş qiymətlər qeyd olunur. Bütün təcrübə nəticələrin ümumiləşdirici əyrindən kənara çıxması  $\pm 0,01\%$  -dən böyük olmur.

Qrafoanalitik araşdırmalar nəticəsində müəyyən olunmuşdur ki, propilbenzol doymuş buxarı təzyiqinin  $\lg P_S^{Pb}(\tau)$  asılılığı ilə etilbenzol doymuş buxarı təzyiqinin  $\lg P_S^{Eb}(\tau)$  [2] asılılıqları arasında

$$\lg P_S^{Pb}(\tau) = M + N \cdot \lg P_S^{Eb}(\tau) \quad (1)$$

şəklində xətti asılılıq mövcuddur.  $\tau = 0,47 - 0,70$  temperatur intervalı üçün tənlik

$$\lg P_S^{Pb}(\tau) = -0,105045 + 1,046425 \cdot \lg P_S^{Eb}(\tau) \quad (2)$$

şəklində,  $\tau = 0,70 - 1,00$  temperatur oblastı üçün isə

$$\lg P_S^{Pb}(\tau) = -0,103486 + 1,040703 \cdot \lg P_S^{Eb}(\tau) \quad (3)$$

şəklində yazılır.

Bütün tədqiq olunan  $\tau = 0,47 - 1,00$  temperatur intervalı üçün propilbenzol doymuş buxarı təzyiqinin (2) və (3) tənlikləri ilə hesablanmış qiymətləri və onların təcrübədə alınmış nəticələrlə müqayisəsi cədvəl 2-də verilmişdir. Cədvəldən görüldüyü kimi bütün tədqiq olunan temperatur intervalında (2) və (3) düsturları ilə hesablanmış qiymətlərlə təcrübi nəticələr arasındakı fərq təcrübənin nisbi xətasından, yəni  $\pm 0,01\%$  -dən böyük olmur.

Cədvəl 2

	$\tau$	T, K	t°,C	$P_S^{öcr.}$ , bar.	$P_S^{form.}$ , bar.	$\frac{\Delta P}{P_S} \cdot 100$
1	0,47	300,21	27,06	0,0052708		
2	0,48	306,60	33,45	0,0077622		
3	0,49	312,99	39,84	0,0112087		
4	0,50	319,38	46,22	0,0158933	0,0158812	+0,008%
5	0,51	325,76	52,61	0,0221584		
6	0,52	332,15	59,00	0,0304118	0,030399	+0,043%

7	0,53	338,54	65,39	0,0411308		
8	0,54	344,92	71,78	0,0548823		
9	0,55	351,31	78,16	0,0722235		
10	0,56	357,70	84,55	0,0941319		
11	0,57	364,09	90,94	0,121189		
12	0,58	370,48	97,32	0,154401		
13	0,59	376,86	103,71	0,194791		
14	0,60	383,25	110,10	0,243746	0,243454	+0,12%
15	0,65	415,19	142,04	0,660516		
16	0,70	447,12	173,98	1,514158	1,513158	+0,087%
17	0,75	479,06	205,91	3,044264	3,044248	+0,0005%
18	0,80	511,00	297,85	5,552508	5,556024	-0,063%
19	0,85	542,94	269,79	9,396539	9,396471	+0,0007%
20	0,90	574,88	301,72	15,01039	15,031720	-0,14%
21	0,95	606,81	333,66	22,94027	22,940148	+0,0005%
22	0,97	619,59	346,44	26,91609		
23	0,98	625,98	352,82	29,10476		
24	0,99	632,36	359,21	31,43219		
25	0,995	635,56	362,41	32,65409		

Etilbenzol doymuş buxarı təzyiqinin  $\tau = 0,47 - 1,00$  intervalında temperaturdan asılı olaraq dəyişilməsini ifadə etmək üçün, xüsusi araşdırmalar nəticəsində

$$\ln \pi_s = s_0 + \frac{s_1}{\tau^\alpha} \quad (4)$$

düstur müəyyən etmişik. Hazırda  $\tau = \frac{T_s}{T_k}, T_k = 619,55 \text{ K}$  kritik temperatur;

$\pi_s = \frac{P_s}{P_k}, P_k = 37,195 \text{ bar}$  kritik təzyiq,  $\alpha, s_0$  və  $s_1$  müxtəlif temperatur intervalları üçün sabit əmsallardır, qiymətləri də cədvəl 3-də verilir.

Cədvəl 3

	Temperatur intervalı	$\alpha$	$s_0$	$s_1$
1	$\tau = 0,47 - 0,55$	1,44	3,95522	-4,16447
2	$\tau = 0,50 - 0,63$	1,40	4,22889	-4,38446
3	$\tau = 0,64 - 0,79$	1,30	4,84304	-4,92634
4	$\tau = 0,71 - 0,86$	1,20	5,44813	-5,49857
5	$\tau = 0,80 - 0,95$	0,90	7,76903	-7,77839
6	$\tau = 0,94 - 1,00$	0,80	8,94733	-8,94931

## ƏDƏBİYYAT

1. Абдуллаев Ф.Г., Джабиев Ю.А., Джафарова Н.И., Агаева Д.А. Обобщенное уравнение состояния смеси бензол-хлорбензол в жидкой фазе. Изв. ВУЗ-ов Нефть и газ, 1997, №1-2, с.36-39
2. Абдуллаев Ф.Г., Агаева Д.А. Подробное экспериментальное исследование и аналитическое описание упругости паров этилбензола вблизи критической точки. Conference Proceedings, First International Conference on Technical and Physical Problems in Power Engineering, 23-25, April 2002, Buku, Azerbaijan, p.274-277

## ВЯЗКОСТЬ ПРИ ТЕЧЕНИИ НЕНЬЮТОНОВСКОЙ ЖИДКОСТИ ПО КРУГЛЫМ ЦИЛИНДРИЧЕСКИМ ТРУБАМ

**Г.Т. Гасанов, А.Н. Джафарова, М.А. Джафарова**  
*Азербайджанская Государственная Нефтяная Академия*  
[aymin@mail.ru](mailto:aymin@mail.ru)

Исследуя течение вязкопластичной жидкости по круглой цилиндрической трубе с переменным перепадом давления на концах трубы и расхода жидкости было установлено, что вязкость при малых значениях времени существенно изменяется со временем, а при больших значениях времени она стремится к своему стационарному значению.

Многокомпонентные жидкости как гомогенные, так и гетерогенные, в большей степени, могут содержать в своем составе компоненты, значительно изменяющие вязкость жидкости, и даже кардинально меняющие саму физическую основу и природу внутреннего трения. Многочисленные эксперименты проведенные с многокомпонентными жидкостями показали, что в таких жидкостях гипотеза вязкостного трения Ньютона (пропорциональность напряжений градиенту скорости относительного движения жидкости) неприемлема [1,2]. Соответственно такие жидкости принято называть неньютоновскими жидкостями. Среди неньютоновских жидкостей принято выделять вязкопластичные, вязкоупругие, псевдопластичные и дилатантные жидкости.

В данной работе мы будем рассматривать течение вязкопластичной жидкости по круглой цилиндрической трубе с переменным перепадом давления на концах трубы и расхода жидкости, при котором вязкость будет изменяться со временем.

Определение вязкости вязкопластичной жидкости с переменной вязкостью в нестационарном режиме математически сводится к решению уравнения движения вязкопластичной жидкости по цилиндрической трубе:

$$\rho \frac{\partial v}{\partial t} = \eta(t) \left( \frac{\partial^2 v}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial r} \right) - \frac{\tau_0}{r} + \frac{\Delta p}{l}(t) \quad (1)$$

При больших напряжениях сдвига принимается, что уравнение (1) описывает всю область течения. Начальные и граничные условия задаются в виде:

$$v(r,0) = 0, \quad v(R,t) = 0, \quad \frac{\partial v}{\partial r}(0,t) = (0,t) \quad (2)$$

Расход жидкости определяется по формуле

$$Q(t) = \int_0^R 2\pi r v(r,t) dr \quad (3)$$

Решая задачу (1) с использованием (2), (3) аналогично методу [3] для определения динамической вязкости вязкопластичной жидкости выведена расчетная формула:

$$0,4 \frac{\tau_0}{\rho R} \frac{v'}{v} = - \frac{48 Q v^2}{\pi R^6} - \left( \frac{8 Q'}{\pi R^4} - \frac{6 \Delta P}{\rho l R} + \frac{16 \tau_0}{\rho R^3} \right) \quad (4)$$

Используя экспериментальные данные [2] и проводя вычисления в среде программ Mathcad по выведенной формуле (4) произведена визуализация результатов на рисунке 1.

Из рис.1. видно, что вязкость при малых значениях времени существенно изменяется со временем, а при больших значениях времени она стремится к своему стационарному значению.

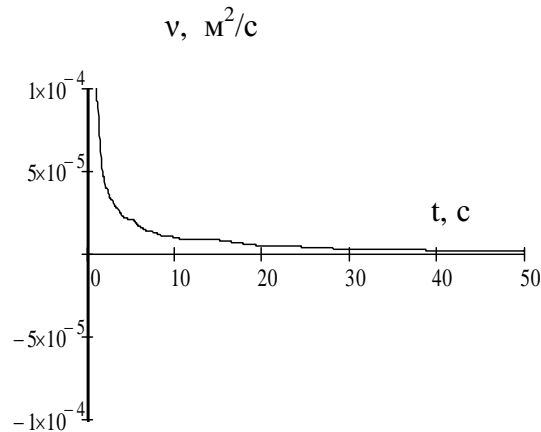


Рис.1. График зависимости кинематической вязкости  $\nu$  от времени  $t$

Для проектирования режима транспортировки нефтей крайне важен правильный выбор уравнений для описания течения этих нефтей. Необходимость в таких уравнениях значительно возросла в последние годы в связи с увеличением объема добычи высокопарафинистых и высоковязких нефтей в республике и транспортировании их в различных климатических условиях. Поэтому учитывая, что теплофизические параметры жидкости, в том числе и вязкость очень чувствительны к условиям их определения, разработанный нами метод не требует создания лабораторной экспериментальной установки и позволяет их определение в ходе технологического процесса основываясь на информации полученных в реальных условиях об изменении перепада давления и расхода жидкости со временем. Определение теплофизических параметров позволяет управлять технологическим процессом. Точность определения вязкости по предложенному методу зависит от точности полученных информации об изменении перепада давления и расхода жидкости со временем, то есть от точности применяемых для этой цели измерительных приборов.

## ЛИТЕРАТУРА

1. М.Г. Бернадинер, М.М. Ентов. Гидродинамическая теория фильтрации аномальных жидкостей. – М.: Недра, 1975, 200 с.
2. П. М. Огибалов, А.Х.Мирзаджанзаде. Нестационарные движения вязкопластичных сред. Издательство МГУ. Москва, 1970, 416 с.
3. Н.А. Следкин. Динамика вязкой несжимаемой жидкости. -М.: Физматгиз, 1952, 360 с.



## ANTİBAKTERİAL BAKTENETSİN 5 MOLEKULUNUN TETRAPEPTİD ANALOQLARININ KONFORMASIYA XÜSUSİYYƏTLƏRİ

X.Ə. Kərimova, G.Ə. Ağayeva, N.M. Qocayev

Bakı Dövlət Universiteti

[kerimova.xanim@gmail.com](mailto:kerimova.xanim@gmail.com)

*Nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə vərəm bakteriyalarına qarşı antibakterial təsir göstərən Baktenetsin 5 molekulunun Phe-Arg-Pro-Trp, Phe-Arg-Pro-Phe, Phe-Arg-Pro-Tyr, Phe-Arg-Pro-Met tetrapeptid analoqlarının fəza quruluşu və konformasiya xüsusiyyətləri polyar mühit üçün tədqiq edilmişdir. Molekulun konformasiya analizi onu təşkil edən aminturşusu qalıqlarının optimal konformasiya vəziyyətləri əsasında aparılmışdır. Hesablamalar nəticəsində molekulun aşağı enerjili konformasiyaların ikiüzlü bucaqların qiymətləri və qalıqlararası qarşılıqlı təsir qiüvvələrin enerji payları müəyyən edilmişdir.*

Peptid molekullarının canlı orqanizmdə yerinə yetirdikləri bioloji funksiyalar molekulun fəza quruluşları və konformasiya imkanları ilə bilavasitə bağlıdır. Adi antibiotiklərdən fərqli olaraq yeni dərman preparatları geniş antibakterial və nisbətən az toksik, yəni az zəhərləyici, təsirlərə malik olmalıdırlar. Təbii antimikrob peptidlərin təsir mexanizmi adi antibiotiklərin mexanizmindən fərqli olduğundan onların dərman preparatları kimi daha üstün keyfiyyətləri var. Belə dərman əhəmiyyətli peptidlərin funksional mexanizminin öyrənilməsi üçün onların konformasiya imkanlarını müəyyən etmək vacibdir.

Təqdim olunmuş işdə antibakterial təsirə malik olan Baktenetsin 5 (OaBac5) molekulunun [1-3] dörd tetrapeptid analoqlarının konformasiya imkanları konformasiya analizi üsulu ilə tədqiq edilib və onların fəza quruluşu modelləşdirilmişdir. Baktenetsin 5 (OaBac5), 43 aminturşusu qalığından ibarət olan peptid molekulu mənfi yüklü Gram bakteriyalara qarşı güclü təsir göstərir [1]. Bu molekulun tərkibində Phe-Arg-Pro ardıcılığı bir neçə dəfə təkrar olduğundan, bu fraqment antimikrob təsirində vacib rol oynayır. Bioloji sınaqlardan keçmiş Phe-Arg-Pro-Trp, Phe-Arg-Pro-Phe, Phe-Arg-Pro-Tyr və Phe-Arg-Pro-Met tetrapeptidlərindən ən yüksək antibakterial təsir potensialına və ən az toksik təsirinə görə Phe-Arg-Pro-Trp >Phe-Arg-Pro-Phe >Phe-Arg-Pro-Met ≥Phe-Arg-Pro-Tyr şəklində sıralanmışdır. Göründüyü kimi ən yüksək antibakterial təsir potensialına və ən az toksik təsirə malik olan Phe-Arg-Pro-Trp tetrapeptid molekulu müəyyən edilmişdir. Bu tetrapeptidin eyni zamanda vərəm mikroblarına qarşı məhvedici təsiri aşkar olunmuşdur. Göründüyü kimi, bu molekulda çoxlu hidrofob qalıqları (Phe, Pro və Trp) və tam müsbət yüklü Arg qalığı var. Bu amillər mənfi yüklü Gram bakteriyaların membranları ilə qarşılıqlı təsirə girməyə əlverişli imkanlar yaradır.

### HESABLAMA METODU

Konformasiya analizi üsulunda molekulun tam daxili potensial enerjisi onun tərkibində olan hər cüt atomların qarşılıqlı təsirlərin enerji qiymətlərinin cəmidir. Mexaniki model əsasında peptid molekulaları üçün, valent bucaqları və rabitələri dəyişməz olmaq şərti ilə, konformasiya enerjisi qeyri –valent, torsion, elektrostatik qarşılıqlı təsirlərin və hidrogen rabitələrinin enerjilərinin cəmi kimi göstərmək olar:  $E_{konf.} = E_{qval} + E_{els} + E_{tor} + E_{h.r.}$ . Hesablamalarda qeyri –valent qarşılıqlı təsir enerjisi «6-12» potensialla Skott və Şeraga tərəfindən təklif olunmuş parametrlər sistemi vasitə ilə hesablanmışdır [4]. Mexaniki modelə əsaslanaraq peptid birləşmələrdə elektrostatik qarşılıqlı təsir enerjisini monopol yaxınlaşması əsasında, yəni ayrı –ayrı atomların parsial yüklərin qiymətini bilməklə, Kulon qanunun əsasında hesablanmışdır. Peptidin əsas zəncirində bir qat  $C^{\alpha}$ -N( $\varphi$ ) və  $C^{\alpha}$ -C rabitələri və yan

zəncirlərin bucaqları ətrafında fırlanmalar üçün torsion potensiallardan istifadə olunub. Hidrogen rabitəsinin donor –akseptor təbiətini nəzərə alaraq bu rabitənin enerjisini Morze potensialı ilə hesablanmışdır. Bucaqların hesablanması İUPAC-İUB nomenklaturasına əsasən aparılıb. Aparılan müxtəlif quruluş məsələlərin həlli zamanı ilkin verilmiş bəzi qiymətlər dəyişir. Buna görə də N.M. Qocayev və İ.S. Maksimov tərəfindən tərtib edilmiş universal alqoritm bu tələbləri tamamilə nəzərə alır. Enerjinin minimumlaşması birinci tərtib törəmələrə görə gradient üsulu ilə aparılır. Qalıqların konformasiyasını  $\varphi$ ,  $\psi$  ikiüzlü bucaqlarının aşağıdakı sahələrə Ramaçandran xəritəsinə uyğun gələn hərflərlə işarə edirlər: R ( $\varphi=-180^\circ\div 0^\circ$ ,  $\psi=-180^\circ\div 0^\circ$ ); B ( $\varphi=-180^\circ\div 0^\circ$ ,  $\psi=0^\circ\div 180^\circ$ ); L ( $\varphi=0^\circ\div 180^\circ$ ,  $\psi=0^\circ\div 180^\circ$ ); P ( $\varphi=0^\circ\div 180^\circ$ ,  $\psi=-180^\circ\div 0^\circ$ ). Hərflərin (R,B,L,P) indeksləri yan zəncirin vəziyyətini xarakterizə edir: 1 rəqəmi  $\sim 0^\circ\div 120^\circ$ , 2 rəqəmi  $\sim 120^\circ\div -120^\circ$ , 3 rəqəmi  $\sim -120^\circ\div 0^\circ$  sahələrinə uyğundur. Qalıqların bütün mümkün formaları  $\theta$ -nun iki  $\sim 0^\circ$  və ya  $\sim 180^\circ$  sahələrində qruplaşır. Bununla əlaqədar olaraq əsas zəncirlərin müxtəlif formaları iki sinfə ayrılırlar: bükülü (f) və açıq (e) şeyplər. Beləliklə N aminturşusu qalıqından ibarət olan peptidin yarada bilən şeyplərin sayı ancaq  $2^{N-1}$  ola bilər.

## NƏTİCƏLƏR VƏ MÜZAKİRƏ

Təqdim edilmiş işdə antimikrob Baktenetsin 5 (OaBac5), molekulunun Phe-Arg-Pro-Trp, Phe-Arg-Pro-Phe, Phe-Arg-Pro-Tyr və Phe-Arg-Pro-Met tetrapeptid analoqlarının fəza quruluşu nəzəri konformaiya analizi üsulu ilə polyar mühit üçün (dielektrik sabiti  $\epsilon=10$ ) tədqiq olunmuşdur. Hər bir molekul üçün hesablama modelləri müəyyən sayda atomdan ibarətdir. Hesablamada hər bir analoqa uyğun ikiüzlü fırlanma bucaqları göstərilmişdir. Kimyəvi quruluşuna görə Phe-Arg-Pro-Trp, Phe-Arg-Pro-Phe, Phe-Arg-Pro-Tyr, Phe-Arg-Pro-Met tetrapeptid analoqlar müxtəlif tipli aminturşusu qalıqlardan təşkil olunub. Birinci fenilalanin (Phe) qalıqın benzol həlqəli yan zənciri var. İkinci arqinin (Arg) qalıqın nisbətən uzun müsbət yüklü yan zənciri var. Üçüncü (prolin Pro) qalıqın yan zənciri əsas zəncirə qapalıdır. Prolin qalıqı əsas zəncirdə qapalı quruluş əmələ gətirdiyinə görə, onun daxili fırlanması məhduddur. Bundan başqa məlumdur ki, prolin qalıqı özündən əvvəl yerləşən qalıqın konformasiya imkanlarını məhdudlaşdırır və bu qalıq üçün yalnız B konformasiya vəziyyəti mümkün olmur.

Məlumdur ki, dörd qalıqdan ibarət olan peptid molekulu 8 optimal fəza quruluşu tipi yarada bilər: *eee*, *efe*, *eef*, *eff*, *ffe*, *fef*, *fee* və *fff*. Phe-Arg-Pro-Trp molekulunda üçüncü vəziyyətdə Pro qalıqı yerləşdiyinə görə, burada Arg qalıqı üçün R forması qadağandır.

Cədvəl 1.

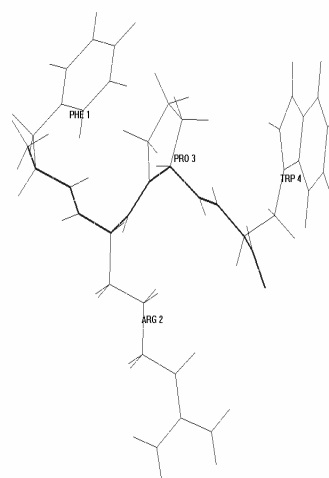
Baktenetsin 5 (OaBac5) molekulunun Phe-Arg-Pro-Trp, Phe-Arg-Pro-Phe, Phe-Arg-Pro-Tyr, Phe-Arg-Pro-Met analoqlarının ən optimal konformasiyalarının enerji parametrləri

Analoq	Şeyp	Konformasiya	Qarşılıqlı təsir qüvvələrin payları (kkal/mol)				
			$E_{qval}$	$E_{els}$	$E_{tor}$	$E_{ümumi}$	$E_{nisbi}$
Phe-Arg-Pro-Trp	eef	$B_1B_{22}RB_1$	-16,1	-4,8	1,4	-19,6	0
	fef	$R_3B_{32}RB_3$	-13,5	-3,2	1,3	-15,4	4,2
	eee	$B_2B_{22}BB_3$	-16,2	-0,2	1,2	-15,2	4,4
	fee	$R_3B_{12}BB_1$	-14,1	0,5	2,1	-11,5	8,1
Phe-Arg-Pro-Phe	eef	$B_2B_1RB_1$	-16,31	-1,66	0,66	-17,31	0,0
	fef	$R_3B_1RB_1$	-15,01	-1,63	0,86	-15,77	1,54
	eee	$B_2B_2BB_3$	-15,02	0,3	1,22	-13,68	3,63

	fee	R <sub>3</sub> B <sub>2</sub> BB <sub>3</sub>	-12,16	0,93	1,75	-9,5	-9,5
Phe-Arg-Pro-Tyr	eef	B <sub>2</sub> B <sub>1</sub> RB <sub>1</sub>	-15,12	-2,66	0,87	-16,91	0,0
	fef	R <sub>3</sub> B <sub>1</sub> RB <sub>1</sub>	-13,53	-2,34	0,86	-15,01	1,9
	eee	B <sub>2</sub> B <sub>2</sub> BB <sub>3</sub>	-13,94	0,14	1,34	-12,46	4,45
	fee	R <sub>3</sub> B <sub>1</sub> BB <sub>3</sub>	-11,67	0,96	1,09	-9,62	7,29
Phe-Arg-Pro-Met	eef	B <sub>1</sub> B <sub>2</sub> RB <sub>3</sub>	-12,41	-1,82	0,87	-13,36	0,0
	fef	R <sub>3</sub> B <sub>1</sub> RB <sub>2</sub>	-10,68	-1,57	0,99	-11,27	2,09
	eee	B <sub>2</sub> B <sub>2</sub> BB <sub>3</sub>	-13,57	1,48	1,82	-10,27	3,09
	fee	R <sub>3</sub> B <sub>1</sub> BB <sub>1</sub>	-13,30	2,07	4,14	-7,08	6,28

Buna görə, bu tetrapeptidinin əsas zənciri üçün yalnız 4 quruluş forması mümkündür: *eee*, *eef*, *fee* və *fef*. Hesablama variantlarını təşkilində hər bir qalığın sərbəst, yəni monopeptid halda olan stabil konformasiya vəziyyətlərinin fırlanma bucaqlarının qiymətlərindən istifadə olunmuşdur. İlk variantlarda əsas zəncirin hər bir forması üçün qalıqların yan zəncirlərinin müxtəlif orientasiyaları nəzərə alınmışdır: 1=60°, 2=180° və 3=-60°. Nəticədə hesablamada hər bir analoq üçün 108 ilkin tetrapeptid variantları seçilib minimizə olunmuşdur. Həm təcrübə həm də aldığımız nəzəri nəticələrə görə bu analoqlardan ən güclü antibakterial təsirə və ən az toksik təsirinə görə Phe-Arg-Pro-Trp molekulu müəyyən olunmuşdur. Belə ki, Phe-Arg-Pro-Trp molekulu dörd aminurşusu qalığından ibarətdir. 1N<sub>2</sub>-li şəkildə bu molekulunun hesablama modeli verilibdir. Hesablama modeli 85 atomdan ibarətdir. Hesablamada 18 ikiüzlü fırlanma bucağı göstərilmişdir. Dördüncü triptofan (Trp) qalığının böyük qeterotciklik yan zənciri vardır.

Aminurşusu	Bucaq	Aşağı enerjili konformasiyalar			
		B <sub>1</sub> B <sub>22</sub> RB <sub>1</sub>	B <sub>2</sub> B <sub>12</sub> RB <sub>1</sub>	B <sub>2</sub> B <sub>22</sub> RB <sub>1</sub>	B <sub>2</sub> B <sub>32</sub> RB <sub>3</sub>
Phe	φ	-107	-109	-109	-108
	ψ	167	145	150	146
	ω	179	180	182	179
	χ <sub>1</sub>	69	179	181	178
	χ <sub>2</sub>	84	87	89	87
Arg	φ	-115	-124	-120	-124
	ψ	105	151	116	151
	ω	175	176	182	175
	χ <sub>1</sub>	180	63	183	62
	χ <sub>2</sub>	182	178	180	178
	χ <sub>3</sub>	179	182	181	183
Pro	ψ	-59	-51	-54	-50
	ω	172	170	173	174
Trp	φ	-155	-150	-151	-140
	ψ	158	159	160	159
	χ <sub>1</sub>	57	57	59	-60
	χ <sub>2</sub>	78	78	79	95
E <sub>ni</sub> (kcal/mol)		0,0	2,7	3,0	3,1



a)

b)

**Şəkil 1.** a) Phe-Arg-Pro-Trp tetrapeptidinin ən aşağı enerjili konformasiyaların ikiüzlü bucaqlarının və nisbi enerjilərinin qiymətləri cədvəldə göstərilmişdir; b) B<sub>1</sub>B<sub>22</sub>RB<sub>1</sub> konformasiyasının bucaqları əsasında modelləşdirilmiş tetrapeptidin fəza quruluşu.

Ən aşağı enerjili konformasiyaların ikiüzlü bucaqları əsasında atomların üç ölçülü koordinatları müəyyən edilmiş və molekulun fəza modelləri qurulmuşdur. Aparılan tədqiqat bu molekulun mühüm quruluş əlamətlərini müəyyənləməyə və bu məlumatlar əsasında dərman əhəmiyyətli preparatların yaranmasına imkan verə bilər.

## ƏDƏBİYYAT

1. Narendra Babu S.N., Rangappa K.S., Design, synthesis, antibacterial and antitubercular activity of cationic antimicrobial peptide, ovine bactenecin 5, Indian Journal of Chemistry, vol. 47B, 2008, pp.297-304.
2. Попов Е.М., Дашевский В.Г., Липкинд Г.М. Архипова С.Ф. Метод расчета конформаций пептидных цепей. Молек. биолог. 1968, таб. 2 стр. 612-620.
3. IUPAC-IUB Commission on Biochemical Nomenclature Abbreviations and symbols for description of conformation of polypeptide chains. Pure Appl. Chem. 1974, v. 40, p. 291-308.
4. Максумов И.С., Исмаилова Л.И., Годжаев Н.М. Программа полуэмпирического расчета конформаций молекулярных комплексов на ЭВМ. Журнал Структурной Химии, 1983, том 24, №4, стр.147-148

## КОБАЛТ VƏ DƏMİRİN MAQNİTYUMŞAQ ƏRİNTİLƏRİ

T.M. Pənahov, V.İ. Əhmədov, N.M. Rəfiyev

AzMIU Fizika kafedrası

[valik.ahmadov@gmail.com](mailto:valik.ahmadov@gmail.com)

*Dəmir-kobalt ərintiləri texnikada yaxşı məlumdur və çox maraqlı maqnit xassələri ilə yanaşı eyni zamanda adi temperaturda çox yüksək kövrəkliyə malikdirlər ki, bu da onlardan istifadəni çətinləşdirir. Çox yüksək kövrəklik 730<sup>0</sup>C temperaturdan aşağıda nizamlı –nizamsız keçid nəticəsində yaranan nizamlanmış α-fazanın əmələ gəlməsi nəticəsi hesab olunur. İndiyə qədər bu nizamlı –nizamsız keçid vanadiumun əlavə edilməsi ilə ləngidilirdii ki, bu da çox kəskin soyumadan sonra soyuq yayma üçün yararlı olanda dəmir-kobalt tip ərintilər hazırlamağa imkan verirdi. Müəyyən edilmişdir ki, vanadiumun niobium və ya tantalla əvəz edilməsi dənə sərhəddi boyunca dənənin böyüməsinə mane olan fazalar əmələ gətirir ki, bu da plastikliyi əhəmiyyətli dərəcədə yaxşılaşdırmadan elastiklik həddini xeyli dərəcədə artırır.*

49% Co –49%Fe-2%V nisbətində götürülmüş kobalt –dəmir ərintiləri bütün maqnitiumşaq ərintilər içərisində ən yüksək doyma maqnit induksiyasına malikdir. Buna görə də onlar yüksək FİƏ və böyük məxsusi gücə malik elektrik generatorlarının və mühərriklərinin istehsalı üçün ən yaxşı iddiası olan ərintiləridir. Dəmir-kobalt ərintiləri əsasında xüsusilə, yüksək tezlikli çevricilər üçün hazırlanan yeni materiallar işlənmişdir ki, bu materiallar böyük elektrik müqavimətinə malikdirlər. Kobaltın miqdarı sayəsində ərintinin doyma maqnit induksiyası çox yüksəkdir ki, bu da bu materialların istifadəsi zamanı elektrik maşınlarının işçi boşluğunda böyük intensivlikli maqnit sahəsi yaratmağa imkan verir. Bu cür materiallar yanacaq klapanları və ya yanacaq injektor qurğularının istehsalı üçün çox cəlbəedici dir.

Öyrənilən ərintilərin tərkibi aşağıdakı kimidir, kütlə %:

$35\% \leq Co \leq 55\%$ ;  $0,5\% \leq V \leq 2,5\%$ ;  $0,02\% \leq Ta + 2Nb \leq 0,2\%$ ;  $0,0007\% \leq B \leq 0,007\%$ ;  $C \leq 0,05\%$

qalanı –dəmir və hazırlanma zamanı meydana çıxan aşqarlar. Təklif edilən dəmir-kobalt ərintisi plastikliyə, yaxşı maqnit xassələrinə və yaxşılaşdırılmış mexaniki xarakteristikalara malikdir (cədvəl 1-5).

Beləliklə, təqribən 49% kobalt, 2% vanadium, qalanı dəmir və aşqarlar olan təklif edilən ərinti soyuq yayma və 720<sup>0</sup>C və 870<sup>0</sup>C arasında tab almadan sonra çox yaxşı maqnit

xassəsinə malikdir. Lakin, kəskin soyumadan əvvəl qızma zamanı xüsusi ehtiyat tədbirləri görmək lazımdır ki, plastikliyi pisləşdirən dənələrin böyüməsi məhdudlaşsın.

Kəskin soyumadan əvvəl qızmanı asanlaşdırmaq üçün 0,02%-dən 0,5% –ə qədər niobium və bir sıra hallarda 0,07%-dən 0,3%-ə qədər sirkonium əlavə edilməsi təklif olunur ki, qızma zamanı dənənin böyüməsi məhdudlaşsın. Bu üsulla alınmış ərinti yalnız 2% vanadiuma malik ərintinin xassələri ilə müqayisə edilən (yalnız ondan yaxşı deyil) maqnit xassələrinə və plastikliyə malikdir. Kəskin soyumadan əvvəlki qızma daha asan həyata keçiriləndir.

Digər tərəfdən, müəyyən edilmişdir ki, vanadium niobium və ya tantal ilə əvəz edilə bilər. Məsələn, niobium və tantalın cəmi 0,15%-dən 0,5%-ə qədər olan ərinti yuxarıdakı ərintinin plastikliyi ilə müqayisə edilən plastikliyə malik olsa da daha yüksək temperaturda tablamaya məruz qala bilər ki, bu da daha yaxşı maqnit xassələri almağa imkan verir. Lakin, bu ərinti nisbətən kiçik elektirk müqavimətinə malikdir ki, bu da induksiya cərəyanları hesabına itkiləri artırır və onun tətbiqinin mümkünlüyünü məhdudlaşdırır.

Nəhayət, bütün bu ərintilər bəzi tətbiqlərdə məsələn, çox yüksək sürətlə fırlanan maşınların fırlanan maqnit dövrlərində kifayət etməyən dartılmada möhkəmlik mexaniki xarakteristikasına malikdir. Əslində demək olar ki, 480 MPa-dan yuxarı elastiklik həddi almaq mümkün deyil.

Mexaniki xarakteristikaların yaxşılaşdırılması üçün 48-50% kobalt, 1,8-2% vanadium, 0,15-0,5% niobium və 0,003 %-dən 0,02 %-qədər karbon, qalanı dəmir və digər aşqarlar olan ərinti seçilmişdir. Göstərilmişdir ki, bir atom tantalın bir atom niobiumla əvəz edilməsi hesabı ilə niobium tamamilə və ya qismən tantal ilə əvəz edilə bilər. Tantal və niobiumun uyğun atom çəkirlərinə diqqət etməklə 1 kütlə % niobiumun 2 kütlə % və daha çox tantal ilə uyğun gəldiyini nəzərə almaq lazımdır. Bu ərintidə niobium (və ya tantal) dənə sərhəddi boyunca dənənin böyüməsinə mane olan Lave Fazaları əmələ gətirir ki, bu da plastikliyi əhəmiyyətli dərəcədə yaxşılaşdırmadan elastiklik həddinin xeyli dərəcədə artırır. Məsələn, 720<sup>0</sup>C temperaturda tab almadan sonra elastiklik həddi 600 MPa qədər yüksələ bilər. Lakin, bu mexaniki xarakteristikalar niobium və ya tantalın yalnız əhəmiyyətli dərəcədə əlavə edilməsi ilə əldə edilə bilər.

Niobium və ya tantalın əhəmiyyətli dərəcədə əlavə edilməsi ona görə zəruridir ki, yenidən kristallaşmanın temperatur diapazonunun yuxarı oblastında tab alma zamanı elastiklik həddinin yüksəlməsinə nail olunsun. Bu, tabalmanın effektiv temperaturunda alınmış aşağı həssaslıqlı nəticələrə nisbətən, üstünlüyə malikdir. Məsələnin bu cür həlli ərintinin qaynar yayılmasına yararlığın azalmasından ibarət olan çatışmazlığa malikdir.

Burada məqsəd eyni zamanda plastikliyə, yaxşı maqnit xassələrinə və yaxşılaşdırılmış mexaniki xarakteristikalara malik elə dəmir –kobalt ərintisinin işlənilməsi hazırlanmasıdır ki, bu zaman soyuq yaymaya yararlıq yaxşı olsun.

Müqayisə və nümunə üçün A, B və V ərintilərindən (cədvəl 1) təqribən 1200<sup>0</sup>C temperaturda qaynar yayma ilə 2 mm qalınlıqlı lentlər hazırlanmış, 800<sup>0</sup>C –dən 100<sup>0</sup>C –dək 1 saniyədən az müddətdə kəskin soyutmaqla tablanmışlar. Bu cür alınmış lentlərdən soyuq yayma ilə 0,35 mm qalınlıqlı lentlər hazırlanmışdır. Bu cür soyuq yayılmış lentlərə tətbiq üçün zəruri olan xassələr vermək üçün onlar 700<sup>0</sup>C -dən 900<sup>0</sup>C -dək temperaturalarda tab almaya məruz qalmışlar.

Alınmış mexaniki və maqnit xarakteristikaları ölçülmüşdür. Müəyyən edilmişdir ki, A və B ərintiləri çətinlik çəkmədən yəni, çatlar meydana gəlmədən qaynar yaymaya məruz qalırlar. Ərintilərin kimyəvi tərkibləri (qalanları dəmir) cədvəl 1-də verilmişdir.

Cədvəl 1

	Co	V	Ta	Nb	B	C	Mn	Si	Cr	Ni	Cu	S	P
A	48,5	1,98	-	0,044	0,0022	0,011	0,102	0,06	0,04	0,11	0,01	0,004	0,005
B	48,1	1,9	0,17	-	0,0012	0,005	0,05	0,05	0,02	0,2	0,01	0,002	0,005
V	48,7	1,97	-	0,064	-	0,010	0,09	0,05	0,04	0,12	0,01	0,003	0,005

725<sup>0</sup>C, 760<sup>0</sup>C və 850<sup>0</sup>C temperaturlarda tabaldan sonra alınmış mexaniki xarakteristikalar (Re<sub>0,2</sub>-elastiklik həddi; HV-Vickersə görə bərklik) cədvəl 2-də verilmişdir.

Cədvəl 2

	Re <sub>0,2</sub> (MPa)			HV		
	725 <sup>0</sup> C	760 <sup>0</sup> C	850 <sup>0</sup> C	725 <sup>0</sup> C	760 <sup>0</sup> C	850 <sup>0</sup> C
A	530	470	390	260	250	230
B	675	475	330	315	263	222
V	480	420	310	250	240	220

Ölçülən maqnit xarakteristikaları:

- 20 e=1600 A/m, 50e=4000A/m və 100e=8000A/m sabit cərəyanla yaradılan H maqnit sahəsində maqnit induksiyanın B (Tesla);
  - Koersitiv qüvvənin H<sub>c</sub>, A/m;
  - sinusoidal induksiyanın maksimal qiyməti 2Tesla və 400 Hs olduqda, ferromaqnit itkilərinin (Vt/kq);
- qiymətləri cədvəl 3 (725<sup>0</sup>C), cədvəl 4 (760<sup>0</sup>C) və cədvəl 5-də (850<sup>0</sup>C) verilmişdir:

Cədvəl 3

	B (20 e)	B (50 e)	B (100 e)	H <sub>c</sub>	İtkilər
A	2,04	2,18	2,25	296	131
B	2,00	2,15	2,25	488	158
V	2,01	2,21	2,26	184	94

Cədvəl 4

	B (20 e)	B (50 e)	B (100 e)	H <sub>c</sub>	İtkilər
A	2,09	2,20	2,27	216	110
B	2,07	2,20	2,26	232	104
V	2,12	2,22	2,28	152	87

Cədvəl 5

	B (20 e)	B (50 e)	B (100 e)	H <sub>c</sub>	İtkilər
A	2,14	2,23	2,28	120	86
B	2,12	2,23	2,30	88	74
V	2,11	2,21	2,26	96	75

Nəticələr göstərir ki, məlum V ərintisinin xassələrinə çox yaxın olan maqnit xassələrinə malik A və B ərintiləri açıq aşkar daha yüksək mexaniki xassələrə malikdir. Belə ki, elastiklik həddi 500 MPa-dan yüksək ola bilər. Bu xarakteristikalar 0,3% niobyə malik ərintilər üçün alınmış xarakteristikalarla müqayisə olunandır.

## ƏDƏBİYYAT

- 1.Т.М.Рənahov, G.Ə.Quliyeva, N.Т.Рənahov. Dəqiq ərintilərin fiziki metalşunaslığı. Ali məktəblər üçün dərs vəsaiti,-Bakı,2000,556 səh
2. Диаграммы состояния двойных металлических систем ред. Лякишева Н.П.Машиностроение, 1996-2000 г

## ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ВОДНОГО РАСТВОРА $MgSO_4$

Э.А. Масимов, Г.Ш. Гасанов, Б.Г. Пашаев, Н.М. Бахшиева

*Бакинский Государственный Университет*

*В работе удельная электропроводность водного раствора  $MgSO_4$  исследована в интервале температур 283,15-323,15 К и концентрации 5-25%. Показано, что удельная электропроводность раствора увеличивается до концентрации 20%  $MgSO_4$ , и затем уменьшается. Из зависимости удельной электропроводности водного  $MgSO_4$  сделан вывод о том, что для приема внутрь организма водного раствора  $MgSO_4$ , целесообразно использовать раствор  $MgSO_4$  до концентрации 20 %.*

В отличие от других жидкостей термодинамика воды аномальна [1]. Аномальные свойства воды играют ключевую роль в энергетике живых систем. Надмолекулярные и кооперативные свойства воды очень важны для адаптации живых систем к условиям окружающей среды. Энергетический обмен живых систем с внешней средой эффективен в условиях повышенной влажности и температуры 3-5°C. Именно в этом интервале (около 4°C) воды имеет аномалию плотности и молярного объема.

Для воды характерно образование за счет водородных связей (Н-связи) надмолекулярных динамических структур –кластеров с временем перестройки порядка  $10^{-10}$ – $10^{-11}$ с. Согласно кластерной модели воды, в области между кластерами существуют и свободные молекулы воды. Считают что, структурированная вода в основном состоит из кластеров. Кластерная структура воды играет важную роль в процессе самоорганизации живых систем. Поэтому, исследование влияния внешних факторов, в том числе растворенных веществ, на структуру воды представляет интерес исходя из того, что все процессы в организме происходят при присутствии воды.

Всякое вещество, растворенное в воде, существенно влияет на структуру воды. В данной работе нами было исследовано влияние соли  $MgSO_4$  на структуру воды. Магний сульфат бесцветные призматические кристаллы, легко растворимы в воде (1:1 в холодной и 3:1 в кипящей). Магний сульфат оказывает многогранное влияние на организм.

При приеме внутрь он плохо всасывается, действует как слабительное средство и оказывает также желчегонное действие. Одной из особенностей магния сульфата является его угнетающее влияние на нервно –мышечную передачу. Это и другие действия магния сульфата на организм, по-видимому, прежде всего, связаны с взаимодействием между молекулами воды и ионами  $Mg^{2+}$  и  $SO_4^{2-}$  в водных растворах магния сульфата. Эти ионы в водном растворе подвергаются гидратации. Ясно, что при этом структура воды должна изменяться. Мы исследовали электропроводимость, вязкость и другие свойства раствора для уточнения влияния магния сульфата на структуру воды. В данной работе мы приводили только электрические данные.

### **Объекты и методы измерения**

Объектом исследования является водный раствор магния сульфат: Для приготовления растворов использовали бидистиллированную воду и магний сульфат гептагидрат  $MgSO_4 \cdot 7H_2O$  ООО "Тульская фармацевтическая фабрика" Россия.

Для измерения электропроводности растворов использовали ячейки из платиновых электродов. Измерения силы тока и напряжения проводили в переменных токах. Частота переменного тока была 1000Гц. Удельную электропроводность вычисляли по формуле:

$$\sigma = 43,1 \frac{J}{U_{\text{пр}} - U_{\text{раств}}}, \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}, \quad (1)$$

где  $J$  – сила тока в амперах;  $U_{\text{пр}}$  и  $U_{\text{раств}}$  напряжение в вольтах;  $43,1 \text{ м}^{-1}$  является постоянной ячейки. Постоянной ячейки называют отношение  $\frac{\ell}{S}$ , где  $\ell$  – расстояние между электродами,  $S$  – площадь поверхности электрода. Постоянная ячейки найдена с использованием стандартного водного раствора KCl с молярной концентрацией  $0,01 \frac{\text{моль}}{\text{л}}$ .

Для измерения температуры раствора использовали дифференциальный термопар из хромель-алюмель. Точность измерения температур составляла  $0,05^\circ\text{C}$ .

Определение удельной электропроводности было выполнено при концентрациях 5-25% или  $0,44-2,67 \frac{\text{моль}}{\text{л}}$  и в диапазоне температур  $10-50^\circ\text{C}$ .

### ***Полученные результаты и их обсуждения***

Экспериментальные данные по удельной электропроводности водного раствора  $\text{MgSO}_4$  в интервале  $283,15-327,15\text{K}$  и концентрации 5-25% приведены в таблице.

Концентрация, %	Электропроводность раствора $\sigma$ , $\text{Ом}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}$								
	283,15	288,15	293,15	298,15	303,15	308,15	313,15	318,15	323,15
5	1,475	1,575	1,685	1,825	1,995	2,170	2,365	2,590	2,835
10	1,935	2,178	2,418	2,658	2,898	3,143	3,381	3,615	3,849
15	2,668	2,992	3,298	3,610	3,910	4,199	4,483	4,754	4,998
20	2,813	3,301	3,752	4,165	4,531	4,848	5,126	5,362	5,551
25	2,001	2,465	2,905	3,312	3,681	4,018	4,308	4,569	4,788

Из таблицы видно, что при данной температуре удельная электропроводность раствора с увеличением концентрации  $\text{MgSO}_4$  увеличивается, достигает максимума при концентрации 20%, а затем уменьшается. Поскольку водный раствор  $\text{MgSO}_4$  широко применяется в медицине, из данных по электропроводности раствора следует, что для приема внутрь водный раствор  $\text{MgSO}_4$  лучше использовать раствор до концентрации 20%.

### **ЛИТЕРАТУРА**

1. Chaplin M.F. Water: its structure and importance. South Bank University, London, 2001, 76p.



## TYR-SER-LEU ANTİXƏRÇƏNG TRIPEPTİD MOLEKULUNUN KONFORMASIYA XASSƏLƏRİ

T.İ.Binnətova<sup>1</sup>, G.Ə.Ağayeva<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Qafqaz Universiteti

<sup>2</sup>Bakı Dövlət Universiteti, Fizika Probleməri İnstitutu,

[binnatova@inbox.ru](mailto:binnatova@inbox.ru)

*Nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə antixərçəng Tyr-Ser-Leu tripeptid molekulunun fəza quruluşu və konformasiya xassələri polyar mühit üçün tədqiq edilmişdir. Hesablamalar nəticəsində molekulun aşağı enerjili konformasiyalarının ikiüzlü bucaqların qiymətləri, qalıqlararası qarşılıqlı təsir qüvvələrinin enerji payları və molekulun optimal fəza quruluşunun modeli müəyyən edilmişdir*

Son illər dərman əhəmiyyətli peptidlərə elmi maraq artmışdır. Məlumdur ki, kiçik peptid molekuluları sərbəst halda fizioloji mühitdə özlərinəməxsus stabil konformasiya vəziyyətlərində bioloji təsir göstərə bilirlər. Peptidlərin təsir mexanizmlərini öyrənmək üçün ilk növbədə onların konformasiya vəziyyətlərini müəyyən etmək vacibdir.

Təqdim olunan işdə H-Tyr-Ser-Leu-OH tripeptid molekulunu nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə tədqiq olunmuşdur. Bir sıra bioloji tədqiqatlardan məlum olunub ki, Tyr-Ser-Leu tripeptid molekulunu qaraciyərdə BEL-7402 xərçəng hüceyrələrinin inkişafını dayandırır [1-4]. Bu keyfiyyətinə görə tripeptidin farmakoloji xüsusiyyətləri maraqlı kəsb edir və onun xərçəng xəstəliyinin müalicəsində istifadəsi nəzərdə tutulur. Bu baxımdan molekulun konformasiya imkanlarının öyrənilməsi onun təsir mexanizminin aşkarlanmasına və yeni daha təsirli analogların yaranmasına səbəb ola bilər.

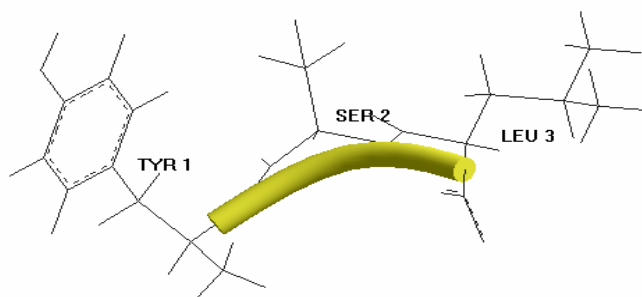
Nəzəri konformasiya analizi üsulunda atomlar arasındakı qarşılıqlı təsirin ümumi enerjisi Van-der-Vaals, elektrostatik, torsion qarşılıqlı təsir enerjiləri və hidrogen rabitəsi enerjisinin cəmi kimi hesablanır [5]. Bucaqların hesablanması İUPAC–İUB nomenklaturasına əsasən aparılıb [6]. Quruluş məsələlərin həlli zamanı N.M. Qocayev və İ.S. Maksumov tərəfindən tərtib edilmiş universal proqram və alqoritm bütün tələbləri tamamilə nəzərə alır və müxtəlif peptidlərin fəza quruluşlarının tədqiqində istifadə edilir [7-9]. Enerjinin minimumlaşması birinci tərtib törəmələrə görə gradient üsulu ilə aparılır. Molekulun əsas zəncirin müxtəlif formaları iki sinfə ayrılır: bükülü ( $f$ ) və açıq ( $e$ ) şeyplər. Tripeptid üçün yalnız dörd şeyp yaranır. Hesablamada tədqiq olunan tripeptidin atom modeli 54 atomdan ibarətdir və bu modeldə 18 ikiüzlü bucağı nəzərə alınmışdır. Peptidin əsas zəncirində birqat  $C^{\alpha}$ -N,  $C^{\alpha}$ -C', N-C' rabitələri və yan zəncirlərin bucaqları ətrafında fırlanma nəticəsində həndəsi parametrlər, qarşılıqlı təsirin enerji payları, qalıqlararası qarşılıqlı təsirin enerji payları, optimal konformasiya vəziyyətlərin ikiüzlü bucaqların qiymətləri və ümumi enerji təyin edilmişdir. R, B, L əsas zəncirin ikiüzlü bucaqlarının qiymətlərinin konformasiya vəziyyətlərini əks etdirən işarələrdir: R ( $\varphi, \psi = -180^{\circ} - 0^{\circ}$ ), B ( $\varphi = -180^{\circ} - 0^{\circ}, \psi = 0^{\circ} - 180^{\circ}$ ), L ( $\varphi, \psi = 0^{\circ} - 180^{\circ}$ ). İlkin variantlarda əsas zəncirin hər bir forması üçün qalıqların yan zəncirlərinin müxtəlif orientasiyaları nəzərə alınmışdır: 1,2,3 rəqəmləri müvafiq olaraq daxili fırlanma bucaqlarının  $60^{\circ}, 180^{\circ}$  və  $-60^{\circ}$  qiymətlərini ifadə edir. Cədvəldən göründüyü kimi ən stabil konformasiya tam bükülü ff şeypinə aiddir. Stabil konformasiyalarda hidrogen rabitələri yaranır. Tripeptidin ən stabil konformasiyasında tirozinin  $NH_3^+$  qrupunun hidrogeni ilə

leysinin  $COO^-$  qrupunun oksigeni arasında hidrogen rabitəsi yaranır və onun enerjisi  $E = -1.42$  kkal/mol, rabitənin uzunluğu  $2.53 \text{ \AA}$  təşkil edir. Müşahidə olunan hidrogen rabitəsi ən aşağı enerjili konformasiyaya əlavə stabillik verir. Hesablamalar nəticəsində qalıqlar arası qarşılıqlı təsirdə dispersiya qarşılıqlı təsirlərin daha böyük rol oynadığı müəyyən olunmuşdur. Ən optimal konformasiyada bu təsirin enerji payı  $-11.4$  kkal/mol təşkil edir. Cədvəl 1 dən görünürki, hər 4 şeypə məxsus olan ən stabil konformasiyalar  $0-1$  kkal/mol nisbi enerji intervalına daxil olurlar. Bu onu göstərir ki, tripeptid molekulu çox böyük konformasiya çevikliyinə malikdir. 1 nömrəli şəkildə tripeptid molekulunun qlobal konformasiya vəziyyətlərinin hesablanmış ikiüzlü bucaqlar (Cədvəl 2) əsasında fəza quruluşunun modeli göstərilmişdir.

Cədvəl 1.

Tyr-Ser-Leu molekulunun optimal konformasiyalarının qarşılıqlı təsir qüvvələrinin enerji payları.

N	Konformasiya	Şeyp	Qarşılıqlı təsirin enerji payları (kkal/mol)				
			$E_{q.v}$	$E_{el}$	$E_{tor}$	$E_{ümumi}$	$E_{nisbi}$
1	$R_{222} R_{32} R_{3322}$	ff	-11.37	2.84	2.48	-6.05	0.0
2	$R_{222} R_{12} R_{3222}$	ff	-10.21	2.84	1.39	-5.98	0.07
3	$B_{222} R_{12} R_{3322}$	ef	-10.81	3.27	2.34	-5.20	0.85
4	$B_{222} R_{32} R_{3222}$	ef	-9.73	3.45	3.00	-3.29	2.76
5	$R_{222} B_{32} R_{3222}$	fe	-10.05	2.82	1.62	-5.60	0.45
6	$R_{222} B_{12} R_{3222}$	fe	-8.50	2.94	1.31	-4.25	1.8
7	$L_{322} B_{32} R_{3222}$	ee	-10.00	2.82	1.84	-5.34	0.71
8	$B_{322} B_{32} R_{3222}$	ee	-8.99	2.91	1.23	-4.84	1.21



Şəkil 1. Tyr-Ser-Leu tripeptid molekulunun qlobal konformasiya vəziyyətlərinin hesablanmış ikiüzlü bucaqlar əsasında fəza quruluşunun modeli.

## Tyr,Ser və Leu aminturşu qalıqlarının ikiüzlü fırlanma bucaqlarının ilkin hesablamə qiymətləri

Amin turşu qalığı	Əsas zəncirin bucaqları			Yan zəncirin bucaqları			
	$\varphi$	$\psi$	$\omega$	$\chi_1$	$\chi_2$	$\chi_3$	$\chi_4$
Tyr <sup>1</sup>	-43	-68	180	172	57	180	-
	-57	-60	179	172	48	180	-
	-63	-65	182	170	55	180	-
Ser <sup>2</sup>	-108	-67	178	54	179	-	-
	-92	-54	178	-61	179	-	-
	-103	-65	181	54	179	-	-
Leu <sup>3</sup>	-102	-79	180	197	174	189	180
	-101	-77	180	198	172	189	180
	-103	-57	180	-51	177	186	180

Beləliklə, nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə Tyr-Ser-Leu tripeptid molekulunun optimal fəza quruluşu və konformasiya xassələri polyar mühit( $\epsilon=10$ ) üçün tədqiq edilmişdir. Hesablamalar nəticəsində molekulun aşağı enerjili konformasiyalarının ikiüzlü bucaqların qiymətləri və qalıqlarası qarşılıqlı təsir qüvvələrinin enerji payları müəyyən edilmişdir

## ƏDƏBİYYAT

1. Wang C, Wang S, Lu R, Zhao L, Zhu ZF, Xu Q, Lv JQ, Wang LL, Fu Z, Lin G, Yao Z. Effects of a novel tripeptide, tyroserleutide (YSL), on cell cycle progression of human hepatocellular carcinoma. *Anticancer Drugs*. 2009 Aug;20(7):534-42.
2. Wang HY, Yi WJ, Qin SY, Li C, Zhuo RX, Zhang XZ. Tyroserleutide-based gene vector for suppressing VEGF expression in cancer therapy. *Biomaterials*. 2012 Nov;33(33):8685-94.  
Jian X, Fu Z, Zhang Y, Che X, Lu R, Yao Z. Subcellular location of antitumor tripeptide-tyroserleutide in human hepatocellular carcinoma cells. *Exp Ther Med*. 2012 Feb;3(2):195-199.
3. Li PC, Li Y, Tang ZY, Wang L, Lu R, Xue Q. Study on the inhibitory effect of tyroserleutide on tumor growth and metastasis in nude mice model of human hepatocellular carcinoma metastasis. *Hepatogastroenterology*. 2007 Jul-Aug;54(77):1359-63.
4. Попов Е.М., Дашевский В.Г., Липкинд Г.М. Архипова С.Ф. Метод расчёта конформаций пептидных цепей. *Молек. Биол.*, 1968, N. 2, стр. 612-620.
5. IUPAC-IUB Commission on Biochemical Nomenclature Abbreviations and symbols for description of conformation of polypeptide chains. *Pure Appl. Chem*. 1974, v. 40, p. 291-308.
6. Годжаев Н.М., Максумов И.С. Алгоритм расчёта конформаций биополимеров. *Уч.Записки*
7. АГУ,серия физ-мат. Наук,1979, №5,стр.157- 162.
8. Agaeva G.A., Kerimli N.N., Godjajev N.M. Structure-function organization of neurokinin A and neurokinin B molecules. I.Theoretical conformational analysis of neurokinin A. *Biofizika*, v.50, N 2, p.203-14, 2005.
9. Agaeva G.A., Kerimli N.N., Godjajev N.M. Structure-function organization of neurokinin A and neurokinin B molecules. II.Theoretical conformational analysis of neurokinin B. *Biofizika*, v.50, N 3, p.404-12, 2005.

## L-VAL-LVAL-D-VAL ANTİBAKTERIAL TRIPEPTİD MOLEKULUNUN KONFORMASIYA XASSƏLƏRİ

**F.Ə. İsmayılzadə<sup>1</sup>, G.Ə. Ağayeva<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Qafqaz Universitetinin*

<sup>2</sup>*Bakı Dövlət Universiteti, Fizika Probleməri İnstitutu*

fidan\_ismayilova @bk.ru

*Nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə antibakterial L-Val-L-Val-D-Val tripeptid molekulunun konformasiya xüsusiyyətləri müəyyən olunmuşdur. Hesablamalar nəticəsində tripeptid molekulun ən optimal konformasiya vəziyyətləri aşkar olunmuşdur. Bu konformasiyaları stabilləşdirən qüvvələrin təbiəti və enerji payları müəyyən olunmuşdur. L-Val-L-Val-D-Val molekulunu üçün bütün optimal fəza quruluşlarının ikiüzlü həndəsi və enerji parametrlərin qiymətləri alınmışdır.*

Peptid təbiətli antibakterial təsirə malik olan molekulara son illər elmi maraq kəskin artmışdır. Adi antibiotiklərdən fərqli olaraq peptid molekulaları geniş antibakterial və nisbətən az toksik təsirə malikdirlər. Bioloji təcrübələr əsasında müəyyən edilmişdir ki, bir sıra hidrofob aminturşularından təşkil və sintez olunmuş tripeptid molekullarından yalnız L-Val-L-Val-D-Val molekulunu yüksək antibakterial effektdə malikdir [1]. Bu tripeptid bir neçə xəstəlik törədici bakteriyaların inkişafını dayandırır. Bu molekul iki L –valin və bir D–valin izomerindən ibarətdir. Məlumdur ki, valin amin turşusu orqanizmin toxuma və hüceyrələrinin sintez olunması və böyüməsi üçün ən vacib komponentdir. L-Val- L-Val-D-Val molekulunun təsir mexanizmini öyrənmək və onun yeni analoqlarının yaradılması məqsədi ilə ilk növbədə onun fəza quruluşunun və konformasiya imkanlarının öyrənilməsi çox böyük elmi maraq kəsb edir.

Təqdim edilmiş işdə antibakterial L-Val-L-Val-D-Val tripeptidinin fəza quruluşu nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə polyar mühit üçün (dielektrik sabiti  $\epsilon=10$ ) tədqiq olunmuşdur. Enerjinin minimumlaşması birinci tərtib törəmələrə görə gradient üsulu ilə aparılır. Konformasiya analizi zamanı molekulun Van der Vaals ,elektrostatik,torsion qarşılıqlı təsirlərin enerji payları və hidrogen rabitəsi enerjisi nəzərə alınmışdır [2]. Quruluş məsələlərin həlli zamanı N.M.Qocayev və İ.S.Maksumov tərəfindən tərtib edilmiş universal proqram və alqoritmdən tripeptidin konformasiya analizində istifadə edilmişdir [3]. Bu proqram və alqoritm bir çox tədqiqatlarda özünü doğrulduğunu göstərmişdir [4,5]. Məlumdur ki, tripeptid molekulunun əsas zəncirində yalnız dörd şeyp yarana bilər: ee,ef,fe,ff. Əsas zəncirin  $\varphi$  və  $\psi$  bucaqları aşağıdakı intervalda dəyişir: ( $\varphi, \psi$ ) are: R ( $\varphi, \psi = -180^\circ - 0^\circ$ ), B ( $\varphi = -180^\circ - 0^\circ, \psi = 0^\circ - 180^\circ$ ), L ( $\varphi, \psi = 0^\circ - 180^\circ$ ) and P ( $\varphi = 0^\circ - 180^\circ, \psi = -180^\circ - 0^\circ$ ). Yan zəncirlərinin müxtəlif vəziyyətləri nəzərə alınmışdır: 1,2,3 rəqəmləri müvafiq olaraq daxili fırlanma bucaqlarının  $60^\circ, 180^\circ$  və  $-60^\circ$  qiymətlərini ifadə edir [6].

Cədvəl 1.

L-val-L-val-D-val molekulunun optimal konformasiyalarının  
0-5 kkal/mol nisbi enerji intervalında paylanması

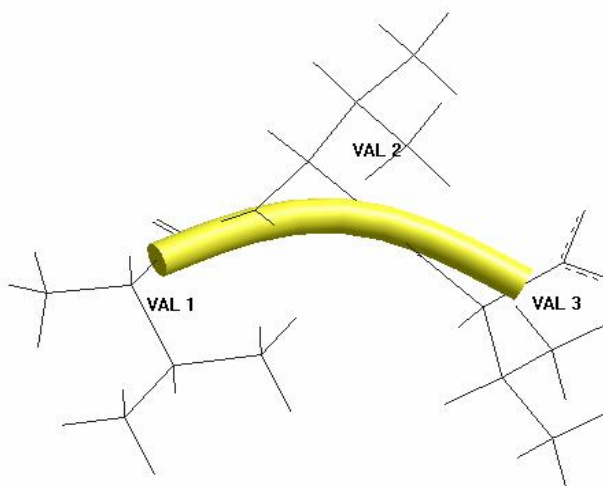
eyp	Əsas zəncirin forması	Nisbi enerji intervalı (kkal/mol)					
		0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5>
ef	BBL	-	2	4	2	-	-
	LBL	-	1	1	3	3	-
ee	BRL	2	2	1	-	1	
	LRL	-	-	1	3	2	2
ff	RBL	-	1	2	1	-	4
fe	RRL	-	-	-	2	-	6

Hesablamalar nəticəsində tripeptid molekulun bir yığım optimal konformasiya vəziyyətləri müəyyən edilmişdir. 0-5 kkal/mol nisbi enerji intervalına daxil olan konformasiyalar cədvəl 1 –də göstərilmişdir. Bu cədvəldən görünür ki, tripeptidin ən aşağı enerjili konformasiya vəziyyəti BRL formasında əmələ gəlir və bu forma ee şeypinə aiddir. Tripeptidin ən optimal konformasiyasında güclü dipeptid və tripeptid əlaqələri yaranır. Cədvəl1-dən görürük ki, tripeptidin həm şeypləri, həm də əsas zəncirin formasına görə güclü diferensasiya mövcuddur.

Cədvəl 2. L val-L val-D val molekulunun optimal konformasiyalarında qalıqlar daxili və qalıqlararası qarşılıqlı təsir qüvvələrin enerji payları.

Konformasiya	L -Val	L-Val	D-Val	Amin turşu qalığı
B <sub>3</sub> R <sub>2</sub> L <sub>3</sub>	0.82	-2.1	-2.6	L-Val
R <sub>2</sub> B <sub>2</sub> L <sub>2</sub>	0.91	-2.8	-1.0	
B <sub>2</sub> B <sub>2</sub> L <sub>2</sub>	0.51	-2.1	-1.6	L-Val
		0.5	-3.2	
		0.5	-1.9	
		0.41	-2.0	D-Val
			0.23	
			-0.42	
			-0.4	

Qeyd etmək lazımdır ki, 0-2 qədər enerji intervalına yalnız 3 şeypin konformasiyaları daxildir. fe şeypin konformasiyaları isə qeyri stabildirlər və onların nisbi enerjisi 3 kkal/mol qədər qalan şeyplərin konformasiyalarından fərqlənir. Tripeptid molekulunda aşağı enerjili konformasiyaların stabilləşməsində onu təşkil edən aminturşuların rolunu müəyyən etmək üçün qarşılıqlı təsir matrisindən istifadə olunur. L-Val-L-Val-D-Val molekulun ən stabil konformasiyaların qalıqlar-arası qarşılıqlı təsir enerjilərin payları cədvəl 2-də göstərilmişdir.



Şəkil 1. Tripeptid L-Val-L-Val-D-Val molekulunun optimal fəza quruluşunun modeli

Ən stabil konformasiyada dipeptid qarşılıqlı təsirlərin enerji payının cəmi -4.7 kkal/mol təşkil edir. Birinci L-Val qalığın üçüncü D-Val qalığı ilə qarşılıqlı təsirlərin enerji

payının isə cəmi  $-2,6$  kkal/mol təşkil edir. Belə qarşılıqlı təsirlər başqa konformasiyalarda əmələ gəlmir və yaxud nisbətən zəif olur. Hesablamalar nəticəsində molekulun ikiüzlü bucaqlarının qiymətləri əsasında molekulun fəza quruluşunun modeli qurulmuşdur. Şəkil 1-də tripeptid molekulun enerji cəhətdən ən əlverişli konformasiyasının fəza modeli göstərilmişdir.

Beləliklə, aparılan hesablamalar göstərdi ki, tədqiq olunmuş L-Val-L-Val-D-Val tripeptid molekulunun əsas zəncirin açıq formasına aid olan konformasiya vəziyyəti enerji cəhətdən ən əlverişlidir. Bu da valin qalıqlarının şaxəli olmasının nəticəsidir.

#### ƏDƏBİYYAT

1. Shankman S., Higa S., Makineni S., Noll W. Synthesis and antibacterial properties of some tripeptides, J. Med. Chem., 1963, v.6, 748-751.
2. Попов Е.М., Дашевский В.Г., Липкин Г.М. Архипова С.Ф. Метод расчёта конформаций пептидных цепей. Молек. Биол., 1968, N. 2, стр. 612-620.
3. Годжаев Н.М., Максумов И.С. Алгоритм расчёта конформаций биополимеров. Уч.Записки АГУ, серия физ-мат. Наук, 1979, №5, стр.157- 162.
4. Agaeva G.A., Kerimli N.N., Godjayevev N.M. Structure-function organization of neurokinin A and neurokinin B molecules. I.Theoretical conformational analysis of neurokinin A. Biofizika, v.50, N 2, p.203-14, 2005.
5. Agaeva G.A., Kerimli N.N., Godjayevev N.M. Structure-function organization of neurokinin A and neurokinin B molecules. II.Theoretical conformational analysis of neurokinin B. Biofizika, v.50, N 3, p.404-12, 2005.
6. IUPAC-IUB Commision on Biochemical Nomenclature Abbreviations and symbols for description of conformation of polypeptide chains. Pure Appl. Chem. 1974, v. 40, p. 291-308.

#### ГИДРОГЕОХИМИЧЕСКАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ПОДЗЕМНЫХ ВОД ПРИКАСПИЙСКОЙ НИЗМЕННОСТИ

**Т.А. Имамова**

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

*Статья посвящается физико-химической характеристике подземных минеральных и термальных вод Прикаспийской низменности.*

*С целью установления этих подземных вод нами изучены более 50 скважин, которые пробурены на термальные воды в этом регионе Во всех этих скважинах, которые прбурены на структурах Ялама, Худат, Набрань, 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 больнеологических активных компонентов.*

*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.*

**Ключевые слова:** *гидрохимическая характеристика, минеральные и термальные подземные воды*

Учение В.И.Вернадского о геохимии природных вод и газов получило более широкое развитие во многих исследованиях по геохимии вод многих стран мира, в том числе в странах СНГ и в Азербайджане.

Установлено, что изучаемое междуречье Самур –Атачай весьма богат минеральными и термальными водами. Большинство минеральных и термальных вод встречаются здесь в предгорной части равнины. Причем, они приурочены к крупным тектоническим разломам и трещинам. Эти воды особенно часто накапливаются в местах пересечения тектонических разломов, а также в пониженных частях рельефа местности. Они имеют региональное и локальное распространение.

С целью изучения гидрохимической характеристики подземных термальных вод нами изучены данные более 50 скважины, которые пробурены на термальные воды в этом регионе. Эти скважины пробурены в пределах конкретных тектонических структур (Ялама, Худат, Хачмас, Кусары и др.). Во всех скважинах, которые пробурены на структурах Худат, Ялама, Набрань, Хачмас и Дивичинского районов, были выявлены термальные воды, которые характеризуются разнообразием не только по ионно-солевому и газовому составу, но и по степени минерализации, температуре, дебиту, микрокомпонентному составу, условиям формирования и распространения ресурсов, а также содержанием болезнетворных активных компонентов.

С целью установления закономерности формирования химического состава минеральных и термальных вод сбор, систематизация и обобщения данных анализов вод по гидрогеохимической характеристике имело большое научно-практическое значение и все это легло в основу разработки гидрогеохимии вод изучаемого региона.

Ионно –солевой состав минеральных и термальных вод по сравнению с газовым составом лучше всего характеризует химические свойства воды и отражает геологическую историю региона. Формирование солевого состава минеральных и термальных вод происходит в течение длительного геологического времени.

Как известно, к настоящему времени из 87 стабильных химических элементов, известных в земной коре, более 70 обнаружены в подземных водах и нет никаких сомнений в том, что остальные элементы также будут выявлены в будущем по мере усовершенствования аналитических методов.

В основном химическим компонентом подземных минеральных и термальных вод относятся Cl, SO<sub>4</sub>, HCO<sub>3</sub>, Na, K, Ca, Mg, которые характеризуют типы вод и присутствуют в самых разнообразных сочетаниях и отношениях. Ниже в таблице (таб. 1) приведены результаты химического анализа минеральных и термальных вод междуречья Самур –Атачай.

Таблица 1

Результаты химических анализов междуречья Самур-Атачай

Место Рождение	№ скв.	Глубина м	Cl	SO <sub>4</sub>	HCO <sub>3</sub>	Na +K	Ca	Mg
Ялама-Набран	1/80	1205	87	12	-	93	-	-
Ялама-Набран	12		82,6	16,2	0,99	79,4	14,5	6,05
Ялама-Набран	7	1245	57,1	1,3	41,6	93,1	3,4	3,5
Ялама-Набран	10	2461	92,7	6,0	1,3	86,5	4,7	8,8
Ялама	111	1140	85,8	13,1	0,9	88,9	6,0	5,1
Ялама	14	1164	54,1	42,4	3,0	62,7	6,7	3,6
Ялама	5		60,5	20,2	18,5	91,1	6,4	2,5
Ялама-Набран	9	1852	70,6	24,7	4,7	93,0	3,9	3,1
Худат	20	1926	99,5	0,1	0,4	82,4	14,6	3,0
Худат	112	2877	99,7	-	0,3	85,5	12,6	1,9

Худат	113	1594	79,0	18,8	2,2	76,4	18,8	4,8
Худат	116 <sup>3</sup>	1853	95,7	2,14	1,76	91,3	8,35	0,35
Хачмас	115	1615	77,2	18,6	4,20	85,0	8,7	6,3
Хачмас (Б.Тегчай)	15	3350	36,1	38,0	2,6	91,0	6,2	2,6
Хачмас	1 <sup>a</sup>	2497	99,0	0,3	1,0	87,0	10,7	2,7
Дивичи	45		54,6	7,8	3,7	96,0	2,4	1,9
Дивичи	54		43,3	1,0	5,7	96,1	0,6	3,0
Гусар	9	1067	-	16	80	85	96	29

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.

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.

Минеральные и термальные воды Прикаспийской низменности имеют минерализацию, колеблющуюся от 0,3 (скв. № 5, 7, 9, 10, 12, 14, 3) до 106,56 г/л (скв. № 112, 20 – Худат).

По степени минерализации минеральные и термальные воды региона собраны нами в 3 группы:

1. воды со слабой и средней минерализацией - до 10 г/л;
2. воды с высокой минерализацией - от 10 до 35 г/л;
3. воды рассольные - более 35 г/л.

К первой группы относятся: минеральные и термальные воды с минерализации до 10 г/л из скв. №№ 5, 7, 9, 10, 12, 14, 3/65, 113, 55, 14.

Вторая группа представлена водами с минерализацией от 10-35 г/л выявленные в скв. №№ 1/80, 33, 34, 30, 43, 35, 54, 58, 115, 111, 110, 36, 115.

К третьей группе минеральных и термальных вод отнесены воды - рассольные, с минерализацией более 35 г/л скважин №№ 112, 115, 20, 6, 116, 10, 7, 111, 43, 34, 1, 2, 4, 10.

Температура минеральных и термальных вод является одним из основных показателей для их бальнеологического применения и использования в курортном деле, а также характеристика ее солевого и газового составов.

Н.И. Толстихин [3, 4], А.М. Овчинников [5, 6, 7] и др. по температурным признакам различают минеральные источники:

- А. Холодные: 1. весьма холодные (ниже 4°C);  
2. холодные (от 4 до 20°).
- Б. Термальные: 1. теплые (субтермальные - от 20 до 37°C);  
2. горячие (термальные - от 37 до 42°C);



3. очень горячие (гипотермальные-свыше 42°C);

А.Г. Аскеров [2], с целью удобства практического применения минеральных вод с лечебной целью с учетом восприятия человеческим организмом тепловых свойств воды, подразделил минеральные источники по температурному признаку на следующие категории и группы (Таб. 2):

Таблица 2

КАТЕГОРИЯ	ГРУППА	ТЕМПЕРАТУРА
1. Холодные	1. Очень холодные	От 0 до 7°C
	2. Холодные	От 7 до 12 °C
2. Умеренно-теплые	3. Умеренные	От 12 до 20°C
	4. Теплые	От 20 до 37°C
3. Термальные	5. Горячие	От 37 до 42°C
	6. Очень горячие	От 42 до 100°C
4. Кипящие	7. Паровыделяющие	Свыше 100°C

Из вышеизложенного следует, что температура термальных вод междуречья Самур-Атачай является весьма характерным их свойством. В большинстве скважин исследуемого региона, где выявлены термальные воды уже известны температурные режимы, за исключением некоторых отнесенных к гипотермам. Воды скважин обычно имеют температуру от 22 до 85°C, и пригодны для использования в деле теплофикации жилищ и общественных объектов и сооружений.

Радиоактивность минеральных и термальных вод давно привлекает внимание бальнеологов, пытающихся установить причину лечебного действия минерализованных термальных вод на организм человека.

Установлено, что повышенной радиоактивностью обладают лишь незначительные количество термальных вод. Кроме того, высокая радиоактивность, как правило, устанавливается в холодных минеральных водах.

Критерии радиоактивности минеральных вод с целью их практического использования в различных странах мира весьма различны.

Изучая радиоактивность вод исследуемого региона, мы пришли к выводу, что необходимо совершенствовать методы анализов и выявления микроэлементов в минеральных и термальных водах региона. Тогда обнаружение в том или ином количестве солей радиоактивных металлов в водах будет более точным, достоверным и детальным.

Одним из важных показателей оценки химического состава и геохимических условий формирования подземных минеральных и термальных вод является их кислотность и щелочность, выражаемая величиной рН.

Величина рН определяет формы нахождения в водах слабых кислот, а также возможность присутствия в них некоторых тяжелых металлов. рН является также важным критерием при оценке вод с целью практического использования в лечебных, промышленных и теплоэнергетических объектах.

Единого общепринятого деления вод по величине рН не существует. Различные авторы предлагают в этом отношении разные градации: обычно выделяют 6-7 групп вод по их кислотности и щелочности от сильно-кислых до сильно-щелочных.

Базируясь на классификацию минеральных вод по величине рН, предложенной А.Д. Аслановым ранее предлагаем следующую классификацию минеральных и термальных вод по величине рН исследуемой территории:

1) воды слабо-кислые (рН от 5,5 до 6,8);

- 2) воды нейтральные (рН от 6,8 до 7,2);
- 3) воды слабо-щелочные (рН от 7,2 до 8,5);
- 4) воды щелочные с рН более 8,5.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Вернадский В.И., Труды по биогеохимии и геохимии почв Москва, 1992, с.193.
2. Аскеров А.Г., Факторы и процессы, формирующие химический состав ократерм. В кн: Проблемы теоретической и региональной гидрогеохимии. Изд-во МГУ, 1979, с.109-111
3. Толстихин Н.И. К вопросу о графическом изображении анализов вод. Мат. Исследований и опробования жидких полезных ископаемых, 1932
4. Толстихин Н.И. К вопросу о провинциях минеральных вод СССР. Записки Ленинградского Горного инс-та, т.ХII, вып.2, 1939
5. Овчинников А.М. Гидрогеохимия, Изд-во "Недра", Москва, 1970, с.200
6. Овчинников А.М. Минеральные воды. Госгеолитдат, 1963
7. Овчинников А.М. Минеральные воды. Изд-во "Госгеотехиздат", Москва, 1963, с.375
8. Гольдберг В.М. Гидрогеологические прогнозы качества подземных вод на водозаборах, Москва, «Недра» 1986, 153 стр.
9. Имамova Т.А. Закономерности размещения минеральных и термальных вод междуручье Самур-Атачай. Диссертационная работа, Баку, 2007, 145 стр.

#### LYS-GLY DIPEPTID MOLEKULUNUN FƏZA QURULUŞU

**Е.М. Сəфəров**

*Qafqaz Universiteti*

[elshad\\_ceferov@hotmail.com](mailto:elshad_ceferov@hotmail.com)

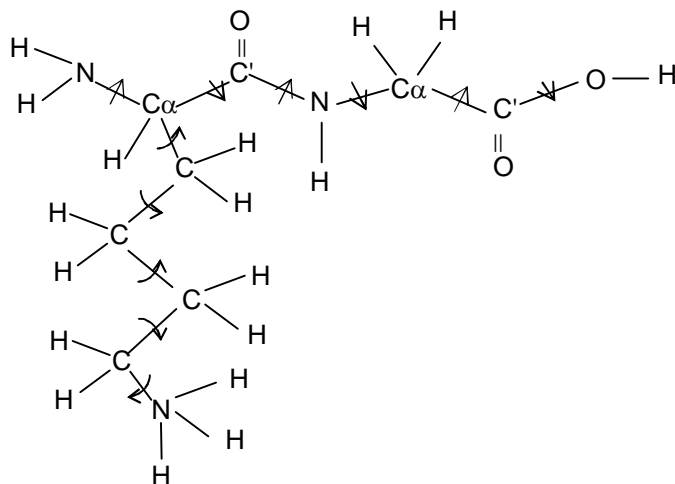
*Nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə Lys-Gly dipeptid molekulunun konformasiya xüsusiyyətləri müəyyən olunmuşdur. Hesablama nəticəsində Lys-Gly dipeptidinin məhdud sayda ən optimal konformasiya vəziyyətləri aşkar olunmuş və bu konformasiyaları stabilləşdirən qüvvələrin təbiəti və enerji payları müəyyən olunmuşdur. Lys-Gly dipeptid üçün bütünlükdə optimal fəza quruluşlarının ikiüzlü fırlanma bucaqlarının qiymətləri və atomların üçölçülü koordinatları alınmışdır.*

Dipeptid molekullarının bioloji sınaqları göstərdi ki, onların bəzilərinin müəyyən farmakoloji xüsusiyyətləri var. Yüklü radikalları olan amin turşularının qalıqlarından təşkil olunmuş dipeptidlər müxtəlif reseptorlara qarşı aqonist və antaqonist aktivliyinə malikdirlər. Lys-Gly dipeptidi belə dipeptidlərdən biridir. Bu Lys-Gly dipeptidinin sinir sisteminin xəstəliklərinin müalicəsində istifadə edilməsi nəzərdə tutulur [1].

Peptid molekullarının təsir mexanizmini tədqiqi üçün ilk növbədə onların fəza quruluşunu və konformasiya imkanlarını öyrənmək vacibdir. Məlumdur ki, peptidlər fizioloji şəraitdə bir yığım oxşar stabil konformasiya vəziyyətlərində olurlar. Təcrübi üsullar vasitəsi ilə peptid molekulun kristalda və ya məhlulda yalnız bir ortalaşmış konformasiya vəziyyətindən məlumat verilir. Hazırda təcrübi üsullarla yanaşı peptid molekulların quruluş tədqiqində nəzəri yarımpiririk hesablama üsullarından geniş istifadə edilir. Nəzəri konformasiya analizi üsulu bu üsullardan biridir. Nəzəri konformasiya analizi üsulu peptid

molekulun bütün optimal konformasiya vəziyyətlərinin enerji və həndəsi parametrlərini, konformasiyalarda qarşılıqlı təsir qüvvələrin təbiətini və rolunu müəyyən etməyə imkan verir.

Təqdim edilmiş məqalədə Lys–Gly dipeptidin fəza quruluşu nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə tədqiq olunmuşdur.



Şəkil 1. Lys-Gly molekulunun atom hesablama modeli və fırlanma bucaqları.

İlkin hesablama variantlarının seçilməsində Lys qalığı üçün 2 mümkün olan əsas zəncirin konformasiya vəziyyətləri B,R və Gly üçün isə 4 B,R,L,P formalı variantlardan istifadə olunmuşdur. Məlumdur ki, iki qalıqdan ibarət olan peptid molekulu 2 optimal fəza quruluşu tipi yarada bilər: e və f. Şəkil 1-də Lys-Gly molekulunun atom hesablama modeli və fırlanma bucaqları göstərilmişdir.

Cədvəl 1.

Lys-Gly molekulunun e və f şəypinə aid olan optimal konformasiyalarının qarşılıqlı təsir qüvvələrinin enerji payları.

S.S	Konformasiya	Şeyp	Müxtəlif qarşılıqlı təsirlər və nisbi enerji qiymətləri				
			$E_{qv}$	$E_{el}$	$E_{tor}$	$E_{üm}$	$E_{nisbi}$
1	B <sub>23222</sub> B	e	-6,39	5,34	2,06	1,01	0
2	R <sub>22222</sub> P	e	-5,52	6,32	0,55	1,35	0,34
3	R <sub>23222</sub> L	e	-5,79	5,56	1,61	1,37	0,36
4	R <sub>22222</sub> L	e	-5,41	6,39	0,47	1,45	0,44
5	R <sub>22222</sub> B	f	-5,07	6,57	0,54	2,04	1,03
6	B <sub>22222</sub> P	f	-4,96	6,49	0,62	2,15	1,14
7	R <sub>22222</sub> R	f	-5,01	6,65	0,49	2,19	1,18
8	B <sub>22222</sub> L	f	-4,92	6,53	0,62	2,23	1,22

Quruluş məsələlərin həlli zamanı N.M. Qocayev və İ.S. Maksimov tərəfindən tərtib edilmiş universal proqram və alqoritm bütün tələbləri tamamilə nəzərə alır [3,4]. Enerjinin minimumlaşması birinci tərtib törəmələrə görə gradient üsulu ilə aparılır. İkiüzlü bucaqların hesablanması İUPAC–İUB nomenklaturasına əsasən aparılmışdır [5]. Hesablamalar vasitəsi ilə molekulun mövcud olan parametrlərini stabilləşdirən Van-der-Vaals, elektrostatik, torsion qarşılıqlı təsir qüvvələrinin, əmələ gələn hidrogen rabitələrinin enerji paylarını müəyyən etmək mümkün olmuşdur. Dipeptidin fəza quruluşu 2 şeyp ilə təsvir olunduğuna baxmayaraq,

hesablanmış konformasiyaların enerji differensasiyası müşahidə olunur. Müəyyən edildi ki, *e* şeypinə aid olan konformasiyalar *f* şeypinin konformasiyalarından enerji cəhətdən daha əlverişlidir. Cədvəl 2-də isə dipeptidin qalıqlar arasındakı qarşılıqlı təsir qüvvələrinin enerji payları verilmişdir. Buradan aydın görmək olur, tam bükülü *e* şeypinə aid olan  $B_{23222}B$  konformasiyada Lys və Gly qalıqları arasında ən əlverişli qarşılıqlı təsir əmələ gəlir və onun enerji payı -5,93 kkal/mol təşkil edir. Qeyd etmək lazımdır ki,  $R_{22222}P$  konformasiyada Gly və Gly qalıqları arasındakı qarşılıqlı təsir fərqlidir və -0,23 kkal/mol təşkil edir. Cədvəl 2-dən görüldüyü kimi  $B_{23222}B$  və  $R_{22222}P$  konformasiyalarda başqa qalan şeyplərin optimal konformasiyalarından fərqli olaraq effektiv qaləqlararası qarşılıqlı təsirlər əmələ gəlir. Bu onunla izah olunur ki, dipeptidin konformasiya enerjisi amin turşularının əsas zəncirlərinin formasına, həmçinin yan zəncirlərinin vəziyyətlərinə qarşı çox həssasdır. Müqaisə üçün hər şeypin amin turşusunun konformasiyalarının ən aşağı enerjili nümayəndələrinin nisbi enerjilərinə nəzər salaq: *e*-şeyp - BB (1.01 kkal/mol), *f*-şeyp - RB (2.04 kkal/mol)

Cədvəl 2.

Lys-Gly molekulunun optimal konformasiyalarında qalıqlar daxili və qalıqlararası qarşılıqlı təsir qüvvələrinin enerji payları.

e	Konformasiya	LYS	GLY	Aminturşusu qalığı
	$B_{23222}B$	5,07	-5,93	
$R_{22222}P$	3,8	-2,7		
			-0,19	GLY
			-0,23	

f	Konformasiya	LYS	GLY	Aminturşusu qalığı
	$R_{22222}B$	3,71	-1,95	
$B_{22222}P$	3,49	-1,72		
			-0,26	GLY
			-0,24	

Onu da qeyd etmək ki, dipeptidin ən dayanıqlı üç konformasiyası məhz *e* şeypə aiddirlər:  $B_{23222}B$  (0.0 kkal/mol),  $R_{22222}P$  (0.3 kkal/mol) və  $R_{23222}L$  (0.4 kkal/mol).

Göründüyü kimi, konformasiyaların qeyri-valent qarşılıqlı təsir enerjisinin payı orta hesabla -5 kkal/mol təşkil edir.

Beləliklə, hesablama nəticəsində Lys-Gly dipeptidinin məhdud sayda ən optimal konformasiya vəziyyətləri aşkar olunmuş və bu konformasiyaları stabilləşdirən qüvvələrin təbiəti və enerji payları müəyyən olunmuşdur. Lys-Gly dipeptid üçün bütün optimal fəza quruluşlarının ikiüzlü fırlanma bucaqlarının qiymətləri və atomların üçölçülü koordinatları alınmışdır.

## ƏDƏBİYYAT

1. Gudasheva T.A., Zaitseva N.I., Pharmaceutical Chemistry Journal (2005), 39, 5, 6-11
2. Е.М.Попов, В.Г.Дашевский, Г.М. Липкинд, С.Ф. Архипова, Молек. биолог. 1968, т.2 стр. 612-620.
3. Н.М Годжаев., И.С. Максумов Уч. Записки АГУ, серия физ-мат. Наук, 1979, №5, стр.157- 162.
4. И.С.Максумов, Л.И.Исмаилова, Н.М Годжаев, Журнал Структурной Химии, 1983, т.24, №4, стр.147-148.
5. IUPAC-IUB, Biochem. J. (1971) 121,577-585.

## ВЛИЯНИЕ САХАРОЗЫ НА РЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА РАСТВОРОВ АГАРА

Э.А. Масимов, В.В. Прудько

*Бакинский государственный университет*

*В данной работе исследованы упруго-пластично-вязкие характеристики водных студней *Vasto-agara* при добавлении сахарозы. Экспериментальные результаты показали, что при добавлении сахарозы в водный раствор агара студень становится более прочным и более эластичным.*

Студни и студнеобразное состояние имеют чрезвычайно важное практическое значение и играют огромную роль в биологии, медицине, различных производствах. Важность этих состояний определяется уже тем, что из студней разной степени оводнения состоят животные и растительные организмы. Все отрасли промышленности, связанные с переработкой материалов животного и растительного происхождения, промышленность синтетических полимерных материала имеют к указанным вопросам прямое отношение.

Студни –это структурированные системы со свойствами эластических твердых тел [1]. Студнеобразное состояние вещества можно рассматривать как промежуточное состояние между жидким и твердым состояниями. Студень –это система, состоящая из пространственной сетки, образованной макромолекулами и их агрегатами, в которой распределены молекулы низкомолекулярной жидкости.

Структурно –механические свойства студней и высокополимеров аналогичны. Поэтому особенности поведения полимеров под действием приложенной внешней силы присущи и студням.

Специфика полимерных студней, связанная с наличием в них достаточно устойчивого пространственного каркаса, проявляется в их реологических свойствах. Реологические свойства студней могут изменяться при изменении температуры и концентрации системы, но наиболее характерно для процесса застудневания изменение их во времени при неизменных концентрации и температуры.

Цель данной работы состояла в исследовании деформационно-прочностных и релаксационных свойств водных студней *Vasto-agara* при добавлении сахарозы. Концентрация агара составляла 2%, а концентрация сахарозы –1 моль.

Для изучения реологических (механических) свойств студней использовали метод тангенциального смещения пластинки (метод Вейлера–Ребиндера [2]), который заключается в измерении усилия, необходимого для сдвига пластинки, погруженной в студень.

Приложение внешней силы к студням высокополимеров вызывает проявление как упругих, так и вязких деформаций. Упругая деформация состоит из начальной или просто упругой и высокоэластической. Обе они полностью обратимы, но если в первом случае после снятия напряжения тело быстро возвращается в прежнее состояние, то во втором случае восстановление происходит медленно. Это объясняется тем, что начальная упругая деформация состоит в раздвижении молекул, в увеличении атомных расстояний и углов связи. Этот процесс происходит со скоростью звуковых волн. Высокоэластичная же деформация –это результат изменения конформации полимерной цепи, её растяжения и выпрямления. Третий тип деформации –пластическая –представляет сочетание упругой и вязкой деформации и обусловлена необратимым перемещением молекул на расстояния превышающие размеры молекул.

Поскольку студни некоторых полимеров образуются в результате застудневания их растворов, а процесс возникновения и развития пространственных структур в них протекает во времени, то кинетические закономерности являются основными.

Для исследования вышеуказанных деформаций снимали кинетику деформации сдвига при постоянном заданном напряжении ( $P$ ) и кинетику обратного спада деформации после мгновенной разгрузки ( $P=0$ ).

По полученным кинетическим зависимостям  $\varepsilon = f(t)$  ( $\varepsilon$  – деформация,  $t$  – время), определяли следующие основные упруго-вязкие характеристики [3]: условно-мгновенный модуль упругости ( $E_1$ ); модуль эластичности ( $E_2$ ); предел упругости или предел текучести  $P_k$  (при  $P < P_k$  в системе имеют место только упругие деформации, при  $P > P_k$  – наблюдается пластическое течение); степень эластичности  $\lambda$  (определяет долю высокоэластической деформации в общей обратимой деформации); истинная релаксационная вязкость  $\eta_1$ ; вязкость эластичности  $\eta_2$ ; предельное напряжение сдвига, при котором происходит разрушение структуры  $P_m$ .

Как известно, малые добавки сахарозы стабилизируют структуру свободной воды в растворе [4]. Стабилизация же структуры свободной воды должна препятствовать растворению третьей компоненты в водном растворе, а разрушение структуры свободной воды должно способствовать растворению в таком водном растворе третьей компоненты. Ухудшение растворимости третьей компоненты (в данном случае снижение растворимости агара) должно способствовать студнеобразованию.

Эксперименты проведенные с системами агар-вода и агар-вода-сахароза при использовании метода Ребиндера показали, что при добавлении сахарозы студни становятся более прочными ( $E_1$ ,  $P_k$ ,  $P_m$  и  $\eta_1$  увеличиваются) и более эластичными ( $E_2$  и  $\eta_2$  уменьшаются). Результаты приводятся в таблице 1.

Исследования проведенные методами вискозиметрии и дисперсии оптической плотности [5, 6] показали, что температуры застудневания и плавления для системы агар-вода-сахароза возрастают, что свидетельствует об интенсификации процесса застудневания (таблица 2).

Сравнивая результаты, полученные разными методами, можно утверждать, что добавление сахарозы делает студни более прочными (модуль упругости, предел текучести, предельное напряжение сдвига, релаксационная вязкость, температуры студнеобразования и плавления, теплота активации вязкого течения возрастают) и эластичными (модуль эластичности и вязкость эластичности уменьшаются).

Таблица 1.

Упруго-пластично-вязкие характеристики для 2%-ого водного раствора агара при добавлении сахарозы

Концентрация	$E_1 \cdot 10^{-4}$ , н/м <sup>2</sup>	$E_2 \cdot 10^{-4}$ , н/м <sup>2</sup>	$P_k \cdot 10^{-2}$ , н/м <sup>2</sup>	$\eta_1 \cdot 10^{-5}$ , Па·с	$\eta_2 \cdot 10^{-5}$ , Па·с	$\lambda$	$P_m \cdot 10^{-2}$ , н/м <sup>2</sup>
-	1,9	2,9	4,9	3,6	4,9	0,40	15
1	2,3	2,6	8,8	7,0	3,8	0,48	20

Таблица 2.

Система агар-вода-сахароза

Концентрация сахарозы, моль	Метод вискозиметрии			Метод дисперсии оптической плотности	
	$t_{студ.}$ , °C	$t_{пл.}$ , °C	$\Delta H$ , ккал/моль	$t_{студ.}$ , °C	$t_{пл.}$ , °C
-	39,5	81,0	5,1	39,0	80,5
1	41,0	82,5	5,6	41,5	82,0

## ЛИТЕРАТУРА

1. Тагер А.А. Физикохимия полимеров. М.: Химия, 1978, 544 с.
2. Вейлер С.Я. Ребиндер П.А. Докл. АН СССР, 49, 354, 1975.
3. Гликман С.А. Введение в физическую химию высокополимеров. Изд-во Саратовского ун-та, 1959.
4. Рязанов М.А. Укр. Хим. ж., 1978, т.44, с.811-816.
5. Прудько В.В. БДУ, ХƏВƏRLƏR, Fizika riyaziyyat elmlər seriyası. 2005, №4, s.161-167.
6. Масимов Э.А., Прудько В.В. Растворы. Баку-2011, 367с.

**ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ НЕПОЛЯРНОГО РАСТВОРИТЕЛЯ  
НА ТЕМПЕРАТУРНУЮ ЗАВИСИМОСТЬ СТАТИЧЕСКОЙ  
ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ ЖИДКОСТЕЙ**

**С.М. Усейнова**

*Бакинский Государственный Университет*

К числу эффективных методов исследования жидкостей современной физики, занимающихся изучением структурных особенностей и молекулярного движения наряду с такими методами, как релеевское рассеивание света, инфракрасная и ЯМР – спектроскопия могут быть причислены методы диэлектрической релаксации.

Диэлектрические методы исследования вещества обосновываются на изучении возникновения диэлектрической поляризации и процессов ее установления во времени под действием внешнего электрического поля. Притом, если равновесные (статистические) диэлектрические свойства отражают суммарный вклад всех кинетических составляющих вещество, то динамические диэлектрические свойства наглядно демонстрируют долю каждого из них, обусловленного структурными, фазовыми и конформационными особенностями и агрегатным состоянием вещества.

Именно по этим причинам данная работа была посвящена определению статической диэлектрической проницаемости  $\epsilon_0$  чистых жидкостей –органической полярной жидкостей циклопентанона  $[C_5H_8O]$ , циклопентана  $[C_5H_{10}]$ , а также их бинарных растворов, в которых концентрация циклопентанона увеличивалась в процентном соотношении от 0 % до 100 % (0 %, 20 %, 40 %, 60 %, 80 %, 100 %), а в мольных долях соответственно от 0 до 1,0 (0; 0,1724; 0,3572; 0,5556; 0,7692; 1,0).

Для приготовления исследуемых веществ и их концентрационных растворов были использованы чистые компоненты: циклопентанон и циклопентан обладающие высокой степенью чистоты. Циклопентанон получался путем синтеза из адипиновой кислоты, а циклопентан синтезировался из циклопентена за счет его гидрогенизации. Полученные компоненты очищались от примесей путем четкой ректификации. Степень чистоты циклических углеводородов контролировалась. Для этого были сняты их хроматограммы до и после очистки этих веществ на ректификационной колонке. После химической очистки и перегонки индивидуальные жидкости имели физико-химические константы, приведенные в таблице 1. Там же приведены для сравнения физико-химические константы тех же соединений по справочным данным.

Таблица 1.

Сравнение экспериментальных и литературных данных /1/ измерения  
коэффициента преломления  $n_4^{20}$ , плотности  $d_4^{20}$ , температуры кипения  $t_k^0$  C,

при нормальном атмосферном давлении циклопентанона и циклопентана

Вещество, хим.формула	Мол. вес	Экспер.данные				Литерат. данные /1/			
		$d_4^{20}$	$n_4^{20}$	$t_k^0C$	$\epsilon_0^{20}$	$d_4^{20}$	$n_4^{20}$	$t_k^0C$	$\epsilon_0^{20}$
Циклопентанон $C_5H_8O$	84,119	1,4395	129	129	13,2 4	0,94 8	1,4312	129	13,49
Циклопентан $C_5H_{10}$	70,135	0,7450	1,4080	49,2 5	1,95 5	0,74 5	1,4065	49,3	1,965

В таблице 2 приведены расчетные данные, вышеуказанных исследований статической диэлектрической проницаемости  $\epsilon_0$  растворов циклопентанон-циклопентан

Таблица 2.

Статическая диэлектрическая проницаемость  $\epsilon_0$  растворов циклопентанон – циклопентан (концентрационные и температурные зависимости)

Температура $t^0C$	Концентрация циклопентанона в мольных долях					
	0	0,1724	0,3572	0,5536	0,7692	1,0
- 40	2,05	4,81	8,36	11,95	14,82	17,67
- 30	2,04	4,74	8,10	11,63	14,42	16,87
- 20	2,02	4,68	7,95	11,34	13,93	16,08
- 10	2,01	4,63	7,76	11,07	13,47	15,35
0	2,00	4,58	7,59	10,82	13,05	14,52
10	1,98	4,52	7,44	10,51	12,55	13,85
20	1,97	4,49	7,30	10,28	12,08	13,24
30	1,96	4,45	7,16	10,02	11,71	12,53
40	1,94	4,42	7,00	9,73	11,28	11,68

Как показывает анализ экспериментальных данных, с повышением температуры от  $-40^0C$  до  $+40^0C$ , значение статической диэлектрической проницаемости  $\epsilon_0$  для чистого циклопентанона понижается на 34%, а для циклопентанона на  $\approx 5,4\%$ . Данная тенденция наблюдается и для растворов циклопентанона в циклопентане при любой температуре. С увеличением значения концентрации циклопентанона в растворе значение статической диэлектрической проницаемости  $\epsilon_0$  самого раствора уменьшается также в пределах 8-34 %-ов, что указывает на явное влияние в бинарном растворе полярного циклопентанона на диэлектрические свойства всего раствора.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Осипов О.А., Минкин В.И. «Справочник по диэлектрикам», М., 1995
2. Богородицкий Н.П. и другие. «Теория диэлектриков», М., -1995
3. Касимов Р.М., Усейнова С.М. «Электрические и оптические свойства вещества». Баку, -1984, стр.125-132
4. Усейнова С.М. «Молекулярно-релаксационные процессы в циклических углеводородах», Вестник БГУ, Баку, -1997, стр.60-63
5. Усейнова С.М. «Исследование молекулярных параметров циклопентанона резонансным методом», Вестник БГУ, Баку, -2002, стр.77-80
6. Усейнова С.М. «Изучение молекулярно-релаксационных процессов в растворах циклопентанонацетон», Вестник БГУ, Баку, -2009, стр.166-170



## РАВНОВЕСНЫЕ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЧИСТОГО ЦИКЛОПЕНТАНОНА

С.М. Усейнова

*Бакинский Государственный Университет*

В данной работе изучались зависимости статической диэлектрической проницаемости  $\epsilon_0$  чистого циклопентанона ( $C_5H_8O$ ) от температуры  $t=-40^0C\div+40^0C$ . Данные низкочастотных измерений  $\epsilon_0$  были применены для расчета эффективного дипольного момента  $\mu_{ж}$  молекул исследуемых соединений в жидкой фазе; вычисления выполнены с использованием уравнения Онзагера-Кирквуда –Фрелиха, выводимого из статической теории диэлектрической поляризации /1, 2, 3, 4/ и связывающее макроскопический параметр  $\epsilon_0$  с дипольным моментом полярной молекулы:

$$\mu_{ж} = g \mu_0^2 = \frac{(\epsilon_0 - \epsilon_\infty)(2\epsilon_0 + \epsilon_\infty)}{\epsilon_0(\epsilon_\infty + 2)} \cdot \frac{9 \text{ лЕ}}{4\pi N}; \quad (1)$$

где  $k$  – постоянная Больцмана,  $T$  – абсолютная температура,  $\epsilon_0$  – статическая диэлектрическая постоянная вещества,  $\epsilon_\infty$  – диэлектрическая постоянная вещества в оптическом диапазоне,  $N$  – постоянная Авогадро, здесь

$$g = (1 + Z \overline{\cos \gamma}) \quad (2)$$

структурный фактор, являющийся постоянной величиной для молекулы,  $Z$  – среднее координационное число молекулы полярной жидкости,  $\overline{\cos \gamma}$  – среднее значение косинуса угла между направлениями диполей двух соседних молекул. Согласно /1, 3, 4/, определяемый из (1) эффективный дипольный момент  $\mu_{ж}$ , связан с дипольным моментом изолированной молекулы  $\mu_0$  того же вещества соотношением

$$\mu_{ж} = \mu_0 \sqrt{g} \quad (3)$$

где  $g$  – имеет тот же смысл, что и в (1), но является также мерой короткодействующих взаимодействий в среде. Совместное использование уравнений (1), (2), (3) дает возможность установить на основании опытных значений тип взаимного расположения дипольных молекул и, следовательно, судить о молекулярном строении вещества. При  $g = 1$  – эффективный дипольный момент совпадает с моментом  $\mu_0$  изолированной молекулы, что указывает на отсутствие в исследуемой жидкости ориентационного влияния короткодействующих сил. При  $g > 1$  из уравнения (2) следует  $\overline{\cos \gamma} > 0$ , что эквивалентно параллельному выстраиванию диполей, то есть преобладанию открытых цепочечных структур. При  $g < 1$ ,  $\overline{\cos \gamma} < 0$ , что эквивалентно антипараллельному выстраиванию диполей или преобладанию закрытых цепочечных структур.

В таблице 1 приведены результаты расчета  $\mu_{ж}$  и  $g$  циклического углеводорода, полярной жидкости в изученном интервале температур. Величина  $\epsilon_\infty$ , входящая в расчетное уравнение (1) определялась из соотношения

$$\frac{\epsilon_\infty - 1}{\epsilon_\infty + 2} = 1,05 \frac{n_D^2 - 1}{n_D^2 + 1} \quad (4)$$

где:  $n_D$  – коэффициент преломления, измеренный в оптическом диапазоне волн; а коэффициент 1,05 учитывает вклад в  $\epsilon_\infty$ , обусловленный атомной поляризацией. В

качестве  $\mu_0$  в уравнении (1) использовались литературные значения дипольных моментов  $\mu_{\Gamma}$  молекул исследуемой жидкости, измеренных в газовой фазе [6].

У циклопентанона величина эффективного дипольного момента молекулы  $\mu_{ж}$ , определенная по уравнению (1), меньше чем значение дипольного момента  $\mu_{\Gamma}$ , определенного в газовой фазе; (таблица 1).

Таблица 1

Эффективные дипольные моменты  $\mu_{ж}$  и корреляционные параметры  $g$  циклопентанона ( $C_5H_8O$ ), полученные по уравнению (1).

Вещество	$t^{\circ}C$	$\epsilon_0$	$\epsilon_{\infty}$	$\mu_{ж}, Д$	$\mu_{\Gamma}, Д$	$g$
Циклопентанон ( $C_5H_8O$ )	-40	17,67	2,22	2,44	3,00	0,66
	-20	16,08	2,19	2,46	/8/	0,67
	0	14,52	2,16	2,45		0,67
	20	13,24	2,14	2,44		0,66
	40	11,68	2,39	2,39		0,63

Однако, величина  $g$  не зависит от температуры. Различие между  $\mu_{ж}$  и  $\mu_{\Gamma}$  указывает на то, что в чистом циклопентаноне имеют место локальные образования с антипараллельной ориентацией в них близкорасположенных диполей; однако, существование таких образований, по-видимому, не связано с действиями специфических межмолекулярных сил, таких как, например, водородных связей, а определено действием стерических факторов. Роль стерических факторов на процесс ориентации молекул циклопентанона должна снижаться при разбавлении циклопентанона инертных неполярным растворителем. Последнее предположение подтверждается приведенной на рис.1 концентрационной зависимостью параметра корреляции  $g$  растворов циклопентанон–циклопентан. Расчет величины  $g$  этих растворов проводился по уравнению:

$$\mu_{ж}^2 = \mu_{\Gamma}^2 \cdot g = \frac{(\epsilon_0 - \epsilon_{\infty})(2\epsilon_0 + \epsilon_{\infty})}{\epsilon_0(\epsilon_{\infty} + 2)^2} \cdot \frac{9kT}{4\pi N_A} \cdot \frac{M_1 x_1 + M_2 x_2}{\alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2}; \quad (5)$$

где  $M_1, M_2$  –молекулярные веса;  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  плотности,  $x_1, x_2$  –мольные доли, соответственно циклопентана и циклопентанона.

Как следует из рис. 1, для указанных растворов с повышением концентрации циклопентана величина  $g$  для раствора приближается к единице.

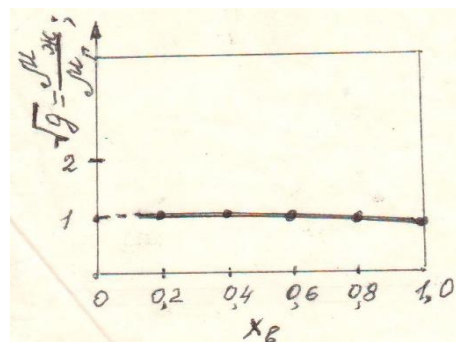


Рис.1. Зависимость параметра корреляции  $g$  от концентрации циклопентанона в растворах циклопентанон–циклопентан при  $t = 20^{\circ}C$ . Концентрация  $X_B$  в весовых долях полярного компонента

## ЛИТЕРАТУРА

1. Фрелих Г. «Теория диэлектриков», М., 1960
2. Шахпаронов М.И. «Методы исследования теплового движения молекул и строение жидкостей», М., 1963

3. Onzager L., Am.Chem.Soc., 58, 1486, 1938
4. Kirkwood J.G., Goldberg R.J., J.Phys.Chem. 18, 54, 1960
5. Осипов О.А., Минкин В.И. «Справочник по диэлектрикам», М., 1995
6. Le Fevre R.J.W., Williams A.J.; J.Chem.Soc., 108, 1960
7. Grant E.H. J.Chem.Phys., 26, 1575, 1977
8. Шахпаронов М.И. ДАН СССР, 175, 5, 1967
9. Dople H.L., Volkert G.Z. Phys.Chem. B8, 60, 1980

## GLU-LYS DİPEPTİD MOLEKULUNUN KONFORMASIYA ANALİZİ

**T.E. Kərimli, N.M. Qocayev**

*Qafqaz Universiteti*

[turane.kerimli.1990@mail.ru](mailto:turane.kerimli.1990@mail.ru)

*Nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə Glu-Lys bioloji aktiv dipeptid molekulunun konformasiya xüsusiyyətləri tədqiq olunmuşdur. Hesablama nəticəsində bu molekulun məhdud sayda ən optimal konformasiya vəziyyətləri aşkar olunmuşdur. Glu-Lys dipeptidi üçün bütün optimal fəza quruluşlarının ikiüzlü fırlanma bucaqlarının qiymətləri və atomlarının üç ölçülü koordinatları alınmışdır.*

Bir sıra dipeptid molekullarının sintezi və bioloji sınaqları nəticəsində onların neyroprotektor və antidepressiv təsirləri aşkar olunmuşdur. Hüceyrə modellərində müəyyən olunmuşdur ki, yüklü reaksiya qrupları olan amin turşularının qalıqlarından təşkil olunmuş dipeptidlər neyrotrofinlərə qarşı aqonist və antaqonist aktivliyinə malikdirlər [1,2]. Glu-Lys dipeptidi belə dipeptidlərdən biridir. Müxtəlif kimyəvi qruplar əhatəsində Glu-Lys dipeptidinin beyində qan dövranının pozulması ilə bağlı xəstəliklərin müalicəsində istifadə edilməsi tövsiyə olunur. Glu-Lys dipeptidinin təsir mexanizmini öyrənmək üçün öncə bu molekulun fəza quruluşunun və konformasiya imkanlarının öyrənilməsi çox böyük elmi maraq kəsb edir.

Təqdim olunan işdə Glu-Lys dipeptid molekulunun fəza quruluşu və konformasiya xassələri nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə tədqiq olunaraq modelləşdirilmişdir. Nəzəri konformasiya analizi üsulunda molekulun tam daxili potensial enerjisi onun tərkibində valent rabitəsində olmayan hər cüt atomların qarşılıqlı təsirlərin enerji qiymətlərinin cəminə bərabərdir. Peptid molekullarının konformasiya enerjisi mexaniki model əsasında valent bucaqları və rabitələri dəyişməz olmaq şərti ilə, qeyri-valent, torsion, elektrostatik qarşılıqlı təsirlərin və hidrogen rabitələrinin enerjilərinin cəmi kimi təyin olunmuşdur.

Hesablamalarda qeyri-valent qarşılıqlı təsir enerjisi «6-12» potensialla ifadə olunmuş və Skott və Şeraga tərəfindən təklif olunmuş parametrlər sistemi ilə hesablanmışdır [3]. Mexaniki model əsaslanaraq peptidlərdə elektrostatik qarşılıqlı təsir enerjisini monopol yaxınlaşması əsasında, yəni ayrı-ayrı atomların parsial yüklərin qiymətini bilməklə, Kulon qanununa müvafiq olaraq hesablanmışdır. Peptid molekullarında polyar mühit üçün  $\epsilon \sim 10$  nəzərdə tutulmuşdur. Peptidin əsas zəncirində birqat  $C^\alpha-N(\varphi)$  və  $C^\alpha-C'$  rabitələri və yan zəncirlərin ikiüzlü bucaqları ətrafında fırlanmalar üçün torsion potensiallardan istifadə olunmuşdur. Peptidlərdə qismən ikiqat  $C=N$  peptid rabitəsi ətrafında fırlanma nəzərə alınmır. Hidrogen rabitəsinin donor-akseptor təbiətini nəzərə alaraq bu rabitənin enerjisini Morze potensialı ilə hesablanmışdır. Bütün hesablamalar polyar mühit üçün aparıldığından dielektrik sabiti  $\epsilon=10$  götürülüb [3,4]. Quruluş məsələlərin həlli zamanı N.M. Qocayev və İ.S. Maksumov tərəfindən tərtib edilmiş universal program və alqoritm

bütün tələbləri tamamilə nəzərə alır [5]. Enerjinin minimumlaşması birinci tərtib törəmələrə görə gradient üsulu ilə aparılır. İkiüzlü bucaqların hesablanması İUPAC-İUB nomenklaturasına əsasən aparılmışdır [6]. Molekulun əsas zəncirin mümkün formalarının qruplaşması iki sinfə ayrılır: bükülü (f) və açıq (e) şəypləri.

Məlumdur ki, dipeptid üçün iki şəyp yarana bilər. Peptidin ilkin variantlarında əsas zəncirin hər bir forması  $R(\varphi, \Psi=-180-0)$ ,  $B(\varphi=-180-0, \Psi=0-180)$ ,  $L(\varphi, \Psi=0-180)$  üçün qalıqların yan zəncirlərinin müxtəlif orientasiyaları nəzərə alınmışdır.

Glu-Lys dipeptidinin hesablama modeli 40 atomdan ibarətdir. Hesablamada 14 ikiüzlü fırlanma bucağı nəzərə alınmışdır. Molekulun konformasiya analizi onu təşkil edən amin turşusu qalıqlarının optimal konformasiya vəziyyətləri əsasında aparılmışdır. Glu-Lys dipeptidinin konformasiyalarının hesablanması nəticəsində 0-5 kkal/mol nisbi enerji intervalına daxil olmuş ən stabil konformasiyalarının enerji parametrlərinə görə bükülü quruluşlar bu dipeptid üçün ən əlverişlidir. Molekulun stabil konformasiyaların ikiüzlü bucaqların qiymətləri və qalıqlararası qarşılıqlı təsir qüvvələrinin enerjilərinin qiymətləri təyin edilmişdir. Cədvəl 1-də nisbi enerjilərin 0-5 kkal/mol intervalında şəyplərin paylanması təsvir olunmuşdur. Burada şəyplər və əsas zəncirlərin formaları arasında kəskin differensasiya müşahidə olunmuşdur. Tam bükülü *f* şəypinə aid olan konformasiyalar Glu-Lys dipeptidi üçün enerji cəhətdən daha əlverişlidir.

Cədvəl 1.

Glu-Lys dipeptid molekulunun optimal konformasiyalarının 0-5 kkal/mol nisbi enerji intervalında paylanması

Şeyp	Əsas zəncirin forması	Nisbi enerji intervalı (Kkal/mol)					
		0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5>
e	RL	-	-	-	1	-	8
	LR	-	-	-	-	1	8
	BR	-	-	-	-	-	9
f	BL	-	1	-	-	1	7
	RR	2	1	1	2	1	2

Cədvəl 2.

Glu-Lys dipeptid molekulunun optimal konformasiyalarında qalıqlar daxili və qalıqlararası qarşılıqlı təsir enerji qüvvələrinin enerji qüvvələri

Konformasiya	Glu	Lys	Amin turşu qalığı
$R_{221}R_{12222}$	1.98	0	Glu
$B_{121}L_{32222}$	1.9	0.7	
$R_{221}R_{32222}$	1.88	0.2	
		-9.6 -9.1 -8.5	Lys

Cədvəl 2-də dipeptidin ən optimal konformasiyalarının qalıqlararası qarşılıqlı təsirlərin enerji payları göstərilmişdir. Bu cədvəldə Glu və Lys qalıqlar arasındakı qarşılıqlı təsirin enerjisi ən optimal konformasiyası üçün -9,6 kkal/mol təşkil edir. Qeyd etmək lazımdır ki, Glu-Lys dipeptid stabil konformasiyalarında bir neçə hidrogen rabitələri əmələ gəlir, onların vəziyyətləri və enerji payları hesablanmışdır.

Beləliklə, hesablamalar nəticəsində Glu-Lys dipeptid molekulunun optimal fəza quruluşu və konformasiya xassələri polyar mühit üçün müəyyən edilmişdir. Nəticə olaraq aparılan tədqiqat Glu-Lys molekulunun mühüm quruluş əlamətlərini müəyyənləşdirməyə və əldə edilən bu araşdırmalar dərman əhəmiyyətli preparatların yaranmasına imkan verə bilər.

## ƏDƏBİYYAT

1. Gudasheva T.A., Rosantsev G.G., Ostrovskaya R.V., Trofimov S.S., Voronina T.A., Sklodinov A.P., Seredenin S.B. ,Pharmaceutical Chemistry Journal (1995) , 29, 1, 14-17.
2. Gudasheva T.A., Zaitseva N.I., Pharmaceutical Chemistry Journal (2005), 39, 5, 6-11
3. Popov E.M.,Molec.biol.(Russian) (1985), 19, 1107-1118.
4. Popov E.M., Godjaev N.M.,Ismailova L.I.,Musaev S.M., Aliev R.E., Akhmedov N.A., Maksumov I.S., Bioorgan. Chem. (Russian)(1982), 8, 776-791.
5. Godjaev N.M., Maksumov I.S.,Ismailova L.I., J.Chem.Struc. (Russian), 24, (1983)147-152.
6. IUPAC-IUB, Biochem. J. (1971) 121,577-585.

## ВЛИЯНИЕ ВНЕШНИХ ФАКТОРОВ НА РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ПОЛИЭТИЛЕНЕ

**М.Дж. Тагиева, Н.И. Гулиев, Н.А. Вердиева**  
*Гянджинский Государственный Университет*

Релаксационные процессы играют существенную роль в процессе электрического и механического разрушения полимерных диэлектриков. Структурные изменения происходящие в полимерных образцах под воздействием внешних факторов (электрические разряды) приводит к смещению температурных интервалов релаксационных переходов. Причем с увеличением длительности воздействия разряда степень снижения прочности увеличивается, релаксационные переходы смещаются в сторону низких температур.

Одним из главных эксплуатационных показателей полимеров при её применении является её физико –механические свойства. В зависимости от условий технического применения полимерные диэлектрики подвергаются воздействию механического напряжения, электрических разрядов, температуры и т.д.

Структурные изменения образовавшиеся в полимерах под воздействием внешних факторов (электрические разряды) приводит к ухудшению его прочностных свойств. Можно предположить, что эти изменения отражаются в процессах молекулярной релаксации полимеров в электрическом поле (в том числе в процессе

освобождения зарядов из ловушек при релаксации). Доказано, что тип молекулярного движения вещества определяется химическим строением и структурой её молекулы [1]. Каждый тип молекулярного движения обычно связан с определённым релаксационным процессом. Прочностные характеристики тесно связаны с этими явлениями [2]. Значит, структурные изменения в полимере, возникшие под действием внешних факторов, приводит к изменению температурных интервалов релаксационных переходов, т.е. происходит смещение минимумов и максимумов на температурных зависимостях долговечности  $\tau_{\sigma E} = f(T)$ . Поэтому важными являются вопросы изучения влияния внешних факторов на релаксационные переходы в полиэтилене.

В результате исследований были сняты температурные зависимости механической долговечности  $\tau_{\sigma E} = f(T)$  исходных и состаренных полиэтиленовых плёнок при одновременном воздействии электрического поля  $E$  и механического напряжения  $\sigma$ .

Испытуемый образец полимерной плёнки помещали в специальную ячейку, состоящего из металлической пластины, воздушного зазора  $1.5 \cdot 10^{-3}$  м, стеклянной пластины и верхнего высоковольтного электрода [3]. Здесь производилось электрическое старение образца. Затем полимерную пленку охлаждали до температуры измерения, выдерживали в течении 15-20 минут при этой температуре, после чего последовательно прикладывали электрическое поле и механическое напряжение и измеряли время до механического разрушения.

Сравнение экспериментальных результатов показало, что как для исходных, так и для состаренных пленок на температурных зависимостях долговечности при приложении электрического поля наблюдаются максимумы и минимумы. Для состаренного образца наблюдается смещение максимумов и минимумов в сторону низких температур относительно исходного образца. Причем с увеличением длительности воздействия разряда степень снижения прочности увеличивается, релаксационные переходы смещаются в сторону низких температур.

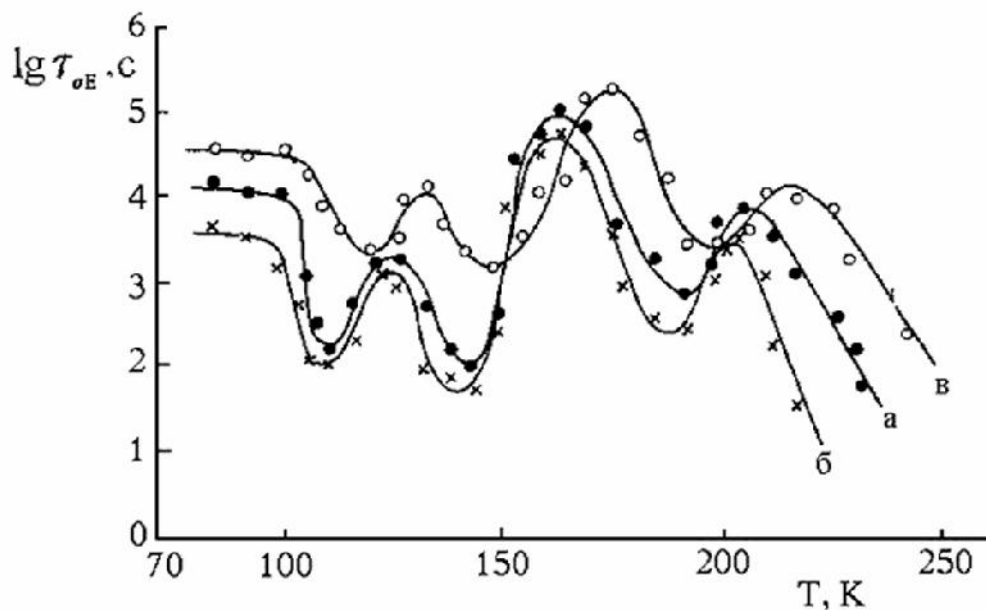


Рис.1. Температурные зависимости логарифма механической долговечности ПЭВП при одновременном воздействии электрического поля при  $E = 3 \cdot 10^7$  В/м,  $\sigma = 55$  МПа; а-после старения в воздухе при  $U_{ст} = 9 \cdot 10^3$  В и  $t_{ст} = 5$  час; б-тоже .  $U_{ст} = 9 \cdot 10^3$  В и  $t_{ст} = 10$  час. в-исходная пленка

Зависимость положения максимумов и минимумов на кривой механической долговечности от длительности воздействия электрического разряда свидетельствует о влиянии структурных изменений на молекулярную подвижность цепей, и следовательно, на процесс опустошения ловушек. Воздействие электрических разрядов на полимерные диэлектрики приводит к разупорядочению структуры в результате окислительно-деструктивных процессов [3–5]. По мере нагревания ПЭ при определенных температурах в нём размораживаются молекулярные движения различного вида, способствующие развитию процесса опустошения ловушек, в результате чего образуются свободные заряды. Предположительно разупорядоченная структура ускоряет этот процесс и приводит к смещению релаксационных переходов, тем самым смещаются экстремальные точки температурных зависимостей механической долговечности полиэтилена в сторону низких температур.

### ЛИТЕРАТУРА

1. И.И. Тугов, Г.И. Костыркина Химия и физика полимеров. М., Химия 1989
2. Р.М. Алигулиев. Релаксационная спектроскопия полимерных диэлектриков. Баку, Элм, 1997
3. М.А. Багиров, В.П. Малин, С.А. Абасов. Воздействие электрических разрядов на полимерные диэлектрики. Баку, Элм, 1975
4. Т.Ф. Абасов Тезисы докладов Республиканской научно-технической конференции «Модификация полиофелинов, их переработка, свойства и применение», Баку, 1990, с.13
5. Е.Ә. Мәсимов Polimerlərin fiziki kimyası. Bakı, 2010
- 6.

### LYS – GLU DİPEPTİD MOLEKULUNUN FƏZA QURULUŞUNUN XÜSUSİYYƏTLƏRİ

**A.B. Nuriyeva, N.M. Qocayev**  
*Qafqaz Universiteti*  
[aysel.nuriyeva5@gmail.com](mailto:aysel.nuriyeva5@gmail.com)

*Nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə immunstimullaşdırıcı təsir göstərən Lys-Glu dipeptid molekulunun fəza quruluşu tədqiq edilmişdir. Lys-Glu dipeptid molekulunun fəza quruluşunun tədqiqi nəticəsində onun məhdud sayda stabil konformasiya vəziyyətləri, onları sabitləşdirən qarşılıqlı təsir qüvvələrinin enerji payları, molekulardaxili və molekullarası enerji qiymətləri müəyyən edilmişdir. Hər bir optimal konformasiyanın ikiüzlü bucaqlarının qiymətləri hesablanmışdır. Bu dipeptid molekulu bükülü formalara meyl edir və onun enerji cəhətdən ən əlverişli konformasiyası kvaziqapalı quruluş əmələ gətirir.*

Peptid molekullarının yerinə yetirdikləri funksiyalar onların fəza quruluşları ilə əlaqədardır. Bu peptidlərin təsir mexanizminin öyrənilməsi üçün onların quruluş-funksiya əlaqələrinin tədqiqi zəruridir. Bu məqsədlə təqdim olunmuş işdə bir çox farmakoloji təsirlərə malik olan Lys-Glu dipeptidinin fəza quruluşunun xüsusiyyətləri nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə tədqiq olunmuşdur. Bioloji testlər vasitəsi ilə göstərilmişdir ki, insanın qan

plazmasından alınmış Lys–Glu peptid molekulu canlı orqanizimlərdə sağlam hüceyrə artımını təmin edir, reperativ prosesləri stimullaşdırır. Bu dipeptid molekuluna vilon adı verilmişdir. Bundan başqa göstərilmişdir ki, vilon molekulun əzələdaxili istifadəsi zamanı oynaq xəstəliklərində mühüm irəliləyişlər əldə edilir, şəkər xəstəliyinin 1-ci mərhələsində immunitet sisteminə, qan laxtalanmasına müsbət təsir göstərir, xərçəng xəstəliyində humoral immunitet sisteminə və hüceyrə immunitetinə təsir edir [1, 2]. Nəzəri konformasiya analizi modeli üsulunda peptid molekulunun tam potensial enerjisinin hesablanması zamanı Van-der-Vaals, elektrostatik, torsion qarşılıqlı təsirlərin və hidrogen rabitələrinin enerji paylarının cəmi kimi nəzərə alınmışdır. [3, 4]. Quruluş məsələlərin həlli zamanı N.M. Qocayev və İ.S. Maksimov tərəfindən tərtib edilmiş universal proqram və alqoritm bütün tələbləri tamamilə nəzərə alır [5]. Enerjinin minimumlaşması birinci tərtib törəmələrə görə gradient üsulu ilə aparılır. İkiüzlü bucaqların hesablanması İUPAC–İUB nomenklaturasına əsasən aparılmışdır [6]. Lys–Glu dipeptid molekulunun hesablanma modeli 40 atomdan ibarətdir. Hesablamada 14 ikiüzlü fırlanma bucağı göstərilmişdir. Kimyəvi quruluşuna görə Lys-Glu dipeptidi müxtəlif tipli aminturşu qalıqlarından təşkil olunub. Birinci, lizin (Lys) qalığının nisbətən uzun müsbət yüklü yan zənciri var, ikinci isə Glu turşusunun (Glu) qalığının yan zənciri isə mənfi yüklüdür.

Cədvəl 1.

Lys-Glu dipeptid molekulunun optimal konformasiyalarının 0-5 kkal./mol nisbi enerji intervalında paylanması

Şeyp	Əsas zəncirin forması	Nisbi enerji intervalı					
		0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5>
e	RL	-	-	-	-	-	9
	BR	-	-	-	-	3	6
	LR	-	-	-	1	2	6
f	RR	2	-	-	2	2	3
	BL	-	-	2	-	-	7

Dipeptid molekulun əsas zəncirinin mümkün formaları iki şeyp təşkil edir : açıq (e) və bükülü (f) [4]. Peptidin ilkin variantlarında əsas zəncirin hər bir forması  $R(\varphi=-180-0, \Psi=-180-0)$ ,  $B(\varphi=-180-0, \Psi=0-180)$ ,  $L(\varphi, \Psi=0-180)$  üçün qalıqların yan zəncirlərinin müxtəlif orientasiyaları nəzərdə tutulmuşdur [4.5]. Hər bir peptidin fəza quruluşu onun konformasiya vəziyyəti ilə, əsas zəncirin forması, şeyplərlə xarakterizə olunduğundan bunu cədvəld 1-də daha dəqiq görə bilərik. Bu cədvəldə Lys-Glu dipeptid molekulunun optimal konformasiyalarının 0-5 kkal./mol nisbi enerji intervalında paylanması göstərilmişdir. Cədvəldən görünür ki, molekulun şeypləri və əsas zəncirin formaları arasında differensasiya müşahidə olunur. Tam bükülü f şeypinə aid olan konformasiyalar Lys-Glu dipeptidi üçün enerji cəhətdən daha əlverişlidir. Onu da qeyd etmək lazımdır ki, Lys-Glu dipeptid molekulu stabil konformasiyalarında bir sıra hidrogen rabitələri əmələ gəlir. Nəticədə hesablanmış optimal fəza quruluşları arasında çox kəskin enerji fərqi müşahidə olunmuşdur. Dipeptid molekulun ən stabil  $R_{22222}R_{121}$  konformasiyasında Lys-nin  $NH_2$  və Glu-nin  $COO^-$  yan zəncirlərinin qruplarındakı atomlar arasında spesifik hidrogen rabitəsi əmələ gəlir. Bu hidrogen rabitəsi  $R_{22222}R_{121}$  konformasiyada kvaziqapalı vəziyyətinə səbəb olur.



Cədvəl 2.

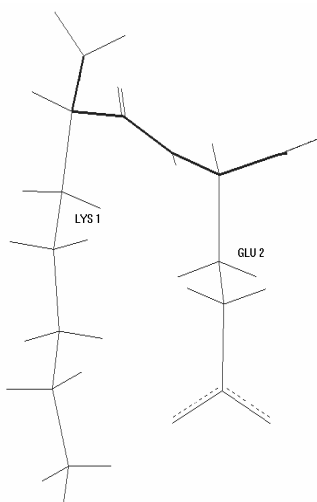
Lys-Glu dipeptidinin stabil konformasiyaların qalıqdaxili və qalıqlararası qarşılıqlı təsirlərin enerji payları

Konformasiya	Lys	Glu	Amin turşu qalığı
$R_{12222}R_{121}$	4.4	-11.4	Lys
$R_{22222}R_{221}$	4.2	-14.2	
$R_{22222}R_{321}$	4.1	-13.8	
		3.3 3 2.8	Glu

Cədvəl 2-də Lys-Glu dipeptidinin stabil konformasiyaların qalıqdaxili və qalıqlararası qarşılıqlı təsirlərin enerji payları göstərilib. Bu cədvəldən görünür ki, ən stabil bükülü RR formalı konformasiyalarda birinci və ikinci qalıqlar arasında çox güclü elektrostatik qarşılıqlı təsirlər əmələ gəlir. Misal üçün  $R_{22222}R_{221}$  konformasiyada bu qarşılıqlı təsir -14,2 kkal/mol təşkil edir. Hesablama nəticəsində alınan optimal konformasiyaların ikiüzlü fırlanma bucaqları müəyyən edilmişdir. Ən əlverişli konformasiyanın ikiüzlü bucaqların əsasında dipeptid molekulunun fəza modeli alınmışdır. Şəkildə dipeptid molekulunun ən əlverişli konformasiyasının modeli göstərilmişdir.

Beləliklə, Lys-Glu dipeptid molekulunun fəza quruluşunun tədqiqi nəticəsində onun məhdud sayda stabil konformasiya vəziyyətləri onları sabitləşdirən qarşılıqlı təsir qüvvələrinin enerji payları, molekulardaxili və molekullarası enerji qiymətləri və hər bir konformasiyaların ikiüzlü bucaqlarının qiymətləri hesablanmışdır.

Aparılan tədqiqat onu göstərdi ki, Lys-Glu dipeptid molekulunu 0-5 kkal/mol nisbi enerji intervalında məhdud sayda konformasiya vəziyyətləri yaradır. Bu molekul bükülü formalara meyl edir və onun enerji cəhətdən ən əlverişli konformasiyası kvaziqapalı qululuş əmələ gətirir. Alınan nəticələr gələcəkdə yeni daha selektiv dərman əhəmiyyətli preparatlarının yaranmasında istifadə edilə bilər.



Şəkil. Lys-Glu dipeptid molekulunun polyar mühiti üçün ən stabil konformasiyanın proyeksiyası

## ƏDƏBİYYAT

1. Gudasheva T.A., Rosantsev G.G., Ostrovskaya R.V., Trofimov S.S., Voronina T.A., Sklodinov A.P., Seredenin S.B. ,Pharmaceutical Chemistry Journal (1995) , 29, 1, 14-17.
2. Gudasheva T.A., Zaitseva N.I., Pharmaceutical Chemistry Journal (2005), 39, 5, 6-11
3. Popov E.M.,Molec.biol.(Russian) (1985), 19, 1107-1118.
- 4.Popov E.M.,Molec.biol.(Russian) (1985), 19, 1107-1118.
- 5.Godjaev N.M., Maksumov I.S.,Ismailova L.I., J.Chem.Struc. (Russian), 24, (1983)147-152.
6. IUPAC-IUB, Biochem. J. (1971) 121,577-585.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА( КАТИОНЫ) ВОДНЫХ РЕСУРСОВ РЕКИ КУРА АЗЕРБАЙДЖАНА

**С.Ш. Бабаева**

*Азербайджанская Государственная Нефтяная Академия*

В данной статье приводятся экспериментальные исследования химического состава (катионы) водных ресурсов реки Кура Азербайджана. Опыты были проведены на лабораториях кафедры Техническая Термодинамика Ростокского Университета Германии с использованием атомно-эмиссионного спектрометра с индуктивно-связанной плазмой IRIS Intrepid II Optical Emission Spectrometer производства Великобритании.

Природные воды –это очень сложные растворы различных веществ, в отличие от химически чистой воды. Они различаются по своему химическому составу, по общей концентрации растворенных веществ и формам их соединений, по общей количественному соотношению между компонентами состава. Это обусловлено сложностью состава веществ, находящихся в природе, и от условий, в которых происходили взаимодействия этих веществ с водой. В природных водах, кроме химических соединений, присутствуют живые организмы, жизнедеятельность которых изменяет химический состав воды. Происходит создание органического вещества в процессе извлечения растительными и животными организмами из воды химических элементов и возврат химических элементов в воду после отмирания этих организмов. Существенно изменяет состав воды и деятельность человека.

Людей с давнего времени интересовал химический состав природных вод. Первые работы появились еще в древней Греции и в эпоху Римской империи. Этому вопросу уделял внимание древнегреческий мыслитель Аристотель (ему принадлежит мысль, что вода такова, каковы породы, через которые она протекает), подобные мысли, высказывал и римский естествоиспытатель Плиний Младший (23-79 гг. н. э.). Углубленное изучение природных вод берет начало с работами М. В. Ломоносова (1711- 1765 гг.)

В 30-е годы наиболее выдающиеся работы созданы одним из наиболее гениальных людей XXв. –русским ученым В.И. Вернадским (1863-1945гг.). Его труд «История природных вод», опубликованный в 1933-1936 гг. занимает выдающееся место в науке в целом. В этой работе В.И.Вернадский наиболее полно показал значение природных вод в геологической истории Земли. На основании большого количества эмпирических фактов он обосновал положение о единстве природных вод, что является крупнейшим вкладом в мировую науку.

История исследований природных вод дает возможность сказать, что не смотря на столь древний возраст изучения данного объекта, еще остается много неизученных вод рек, морей, океанов и т. д.

Природным водам относятся воды океан, подземные воды, льды и снега (главным образом Антарктиды, Гренландии и Арктики), поверхностные воды суши (реки, озера, болота).

Бассейн рр. Кура –Аракс представляет собой речную систему международного значения. Бассейн охватывает почти всю территорию Армении и Азербайджана, значительную часть населенных и урбанизированных районов Грузии. Эти страны совместно с Ираном и Турцией в значительной степени зависят от системы рр. Кура-Аракс, которая является основным источником воды для всех отраслей экономики и пользователей: промышленности, сельского хозяйства, энергетики и населения. Необходимо отметить, что в бассейне рр. Кура –Аракс проживает большая часть населения региона, зависящего от вод бассейна.

Реки Кура и Аракс имеют большое значение для регионального сотрудничества, поскольку пересекают территории соседствующих государств и образуют большую часть границ между ними.

Кура является главной водной артерией Кавказа. Ее общая длина составляет 1,364 км. Она берет начало на высоте 2,700 м в Анатолийском нагорье в Северной Турции, на горном хребте Кизыл-Гядык, течет по извилистому руслу по горным регионам Турции, Грузии и Азербайджана и впадает в Каспийское море. Она питается снегом (36%), таежной водой с ледников (14%), подземными источниками (30%) и дождевой водой (20%). Притоки текут на север с Армении и впадают в Куру в Грузии и в Азербайджане. Главным притоком Куры является Аракс.

Высота бассейна реки Кура над уровнем моря колеблется в пределах от 4,500 м до Каспийского моря (-27 м). Сток в периоде весенних паводков составляет 58-64% от общего годового стока, 19-22% общего стока приходится на летне-осенний период, а 17-20% на зимний[1].

Для рационального комплексного использования природных вод необходим определенный объем, качество и оперативность гидрохимической информации. Определение химического состава вод относится к одному из основных определений. В течение нескольких лет между кафедрами «Тепло- и хладотехника» Азербайджанского Технического Университета и «Техническая Термодинамика» Ростокского Университета Германии развиваются научные направления, одна из этих является исследования теплофизических свойств геотермальных, минеральных и питьевых ресурсов различных стран (Германия, Азербайджан, Россия, Турция и т.д.). Эта работа является частью этих исследований и приводится результаты химического состава (катионы) водных ресурсов реки Кура Азербайджана.

Исследования для определения количество катионов в водных пробах проводилась на лабораториях кафедры Техническая Термодинамика Ростокского Университета Германии с использованием атомно-эмиссионного спектрометра [2] с индуктивно-связанной плазмой IRIS Intrepid II Optical Emission Spectrometer производства Великобритании (рис. 2). Методы, основанные на изучении спектров, приобрели такую популярность по нескольким причинам. Прежде всего, спектральные методы практически универсальны и обеспечивают высокую чувствительность определения. Они позволяют анализировать содержание интересующего компонента в диапазоне 5-6, а при использовании масс-спектрометров –в диапазоне 8-9 порядков. Использование спектрометров позволяет измерить содержание нескольких десятков примесных элементов одновременно. И –самое главное –оперативность получения

информации о составе исследуемой пробы. На современной аппаратуре для проведения спектрального анализа требуется от нескольких секунд до 2-3 минут.

**Рис. 1:** Карта, показывающая географические особенности речного бассейна Кура-Аракс



Также в результате усовершенствования аппаратуры появился такой источник возбуждения спектра, как высокочастотная индукционно-связанная плазма (ИСП). ИСП в настоящее время превосходит по своим аналитическим возможностям все использовавшиеся ранее источники оптической эмиссии.

Развитие фотоприемников привело к появлению фотодиодных матриц, работа которых основана на светочувствительных свойствах кремния.

Химический состав водных ресурсов реки Кура Азербайджана измерены на атомно-эмиссионном спектрометре с индуктивно-связанной плазмой IRIS Intrepid II Optical Emission Spectrometer [2] (Рис.2) и результаты приведены в таблице 1. Подробное описание установки дана в [5].

Химические элементы, которые почти не существуют в составе водных ресурсов реки Кура Азербайджана помечены в таблице как <0.01 мг/литр. Это означает что, количество этих веществ в составе водных ресурсов реки Кура Азербайджана не действуют на их общих термодинамических свойств.

Большую часть химических элементов в составе водных ресурсов реки Кура Азербайджана составляет натрий (Na). Он составляет примерно от 21,6 мг/л до 126,0 мг/л.

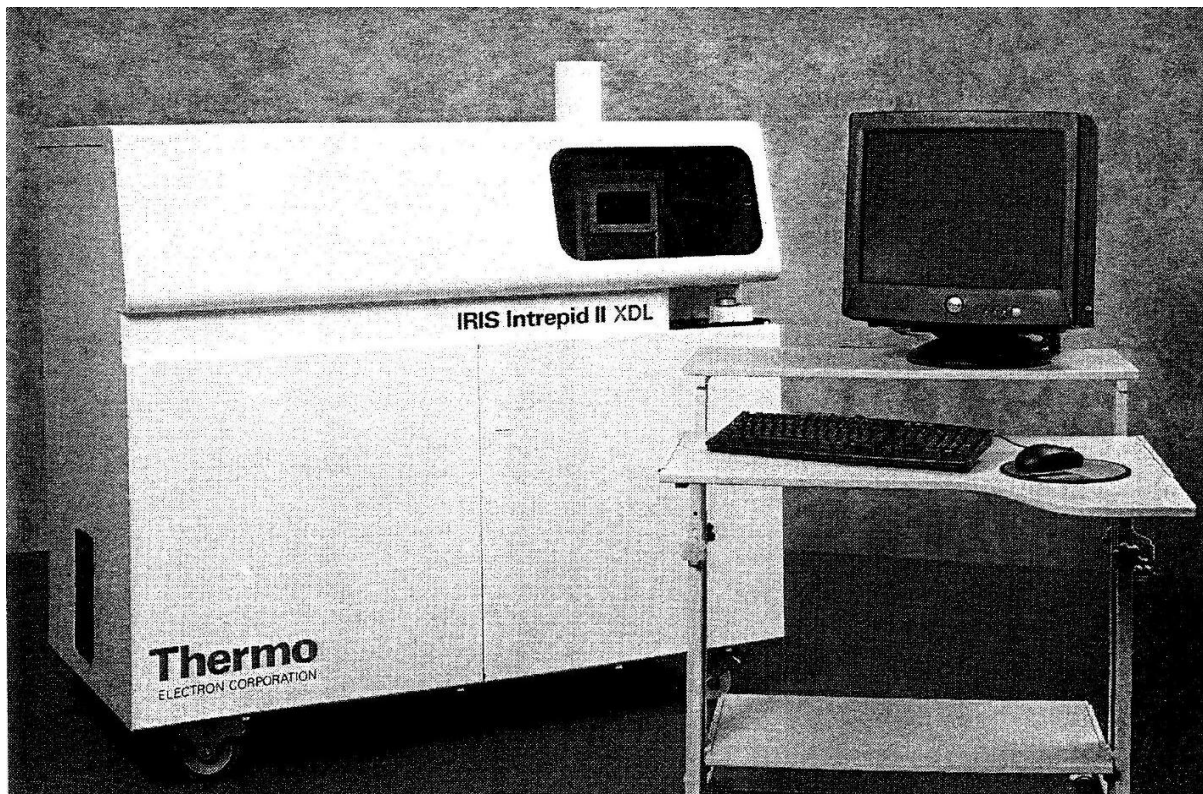
Натрий является одним из главных компонентов химического состава природных вод, определяющих их тип. Основным источником поступления натрия в поверхностные воды суши являются изверженные и осадочные породы и самородные растворимые хлористые, сернокислые и углекислые соли натрия. Большое значение имеют также биологические процессы, протекающие на водосборе, в результате которых образуются растворимые соединения натрия. Кроме того, натрий поступает в

природные воды с хозяйственно-бытовыми и промышленными сточными водами и с водами, сбрасываемыми с орошаемых полей. После натрий, как основных химических элементов водных ресурсов реки Кура Азербайджана можно считать кальций (Ca) и сера (S). Количество кальций (Ca) в водных ресурсов реки Кура Азербайджана колеблется от 35.9 мг/л до 93.3 мг/л, а серы от 25.7мг/л до 119.0 мг/л.

Главными источниками поступления кальция в поверхностные воды являются процессы химического выветривания и растворения минералов, прежде всего известняков, доломитов, гипса, кальцийсодержащих силикатов и других осадочных и метаморфических пород. Растворению способствуют микробиологические процессы разложения органических веществ, сопровождающиеся понижением рН.

Большие количества кальция выносятся со сточными водами силикатной, металлургической, стекольной, химической промышленности и со стоками сельскохозяйственных угодий, особенно при использовании кальцийсодержащих минеральных удобрений.

**Рис. 2.** Спектрометр IRIS Intrepid II Optical Emission [2].



Магний (Mg), калий (K), силициум (Si) и стронциум (Sr) тоже составляют основную часть химических веществ водных ресурсов реки Кура Азербайджана:

Mg от 9,3 мг/л до 44,2 мг/л; K от 1,4 мг/л до 5,1 мг/л; Si от 3,1 мг/л до 12,8 мг/л и Sr от 0.4 мг/л до 1,2 мг/л.

Калий – один из главных компонентов химического состава природных вод. Источником его поступления в поверхностные воды являются геологические породы (полевой шпат, слюда) и растворимые соли. Различные растворимые соединения калия образуются также в результате биологических процессов, протекающих в коре выветривания и почвах. Для калия характерна склонность сорбироваться на высокодисперсных частицах почв, пород, донных отложений и задерживаться растениями в процессе их питания, роста. Это приводит к меньшей подвижности калия по сравнению с натрием, и поэтому калий находится в природных водах, особенно поверхностных, в более низкой концентрации, чем натрий.

В природные воды калий поступает также с хозяйственно-бытовыми и промышленными сточными водами, а также с водой, сбрасываемой с орошаемых полей, и с поверхностным водным стоком с сельскохозяйственных угодий.

В поверхностные воды магний поступает в основном за счет процессов химического выветривания и растворения доломитов, мергелей и других минералов. Значительные количества магния могут поступать в водные объекты со сточными водами металлургических, силикатных, текстильных и **других предприятий**.

Таблица 1. Химический состав водных ресурсов реки Кура Азербайджана.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. <http://www.pandia.ru>
2. <http://www.thermoscientific.com>
3. Свиридов В. Спектральный анализ: точность и скорость // ТехСовет, 2004, № 8(18).
4. Вульфсон Н.С., Заикин В.Г., Микая А.И. Масс-спектрометрия органических соединений, М.: Химия, 1986, 312 с.
5. Талибов М. А. Химический состав (катионы) геотермальных, минеральных и питьевых вод Ярдымлинского района Азербайджана. Мониторинг. наука и технологии. Рецензируемый и реферируемый научно-технический журнал. вып. N1, 2012
6. [www.eclife.ru/data/tdata/td4i.php](http://www.eclife.ru/data/tdata/td4i.php) Т.В. Гусева, Я.П. Молчанова, Е.А. Заика, В.Н. Виниченко, Е.М. Аверочкин "Гидрохимические показатели состояния окружающей среды".



Таблица 1. Химический состав водных ресурсов реки Кура Азербайджана

Катионы	Клях	Тавуз	Шамкыр	Йеникенд ГЭС	Самух	Мингечаур ГЭС	Мингечаур (город)	Евлах	Саатлы (Новрузлу)	Сабирабал (Сугогушан)	Сабир-абад (город)	Ширван (город)	Сальяны (город)	Нефчала (Банке)
	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]	[mg/l]
Al 1670	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1
As 1890	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1
B 2089	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	0,2	0,6	0,3	0,3	0,3	0,3
Ba 2304	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1
Ca 3181	57,1	67,3	66,6	68,6	66,4	48,8	49,0	53,8	58,5	93,3	67,7	69,6	70,9	66,5
Cd 2288	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	0,0
Co 2286	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1
Cr 2055	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1
Cu 3247	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1
Fe 2599	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1
Hg 1849	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1
K 7664	1,8	2,1	2,1	2,1	2,1	1,8	1,8	2,1	2,2	5,1	3,3	3,0	3,1	3,5
Li 6707	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1
Mg 2790	12,4	15,1	15,2	15,6	15,4	12,0	12,2	13,9	22,6	44,2	29,4	28,8	28,4	29,8
Mn 2939	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	0,1	<0,1
Mo 2045	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1
Na 8183	23,2	31,0	30,6	31,4	31,1	26,4	26,3	32,5	58,4	126,0	79,3	77,7	76,3	79,9
Ni 2316	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1
P 2136	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1
Pb 2203	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1
S 1820	31,5	43,5	45,3	45,7	45,1	33,9	33,6	38,5	60,7	119,0	78,5	76,6	68,3	77,2
Sb 2175	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1
Se 1960	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1
Si 2124	7,5	6,8	6,4	6,5	6,1	4,4	4,5	4,6	4,9	12,8	7,3	7,6	7,4	7,0
Sn 1899	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	0,0	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1
Sr 4077	0,4	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,7	1,2	0,9	0,9	0,8	0,9
Tl 3349	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1
V 2924	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1
Zn 2062	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1	<0,1

## ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ АССОЦИИРОВАННЫХ ЖИДКОСТЕЙ

**Р.К. Керимова, В.С. Эльдаров**

*Азербайджанская государственная нефтяная академия*

**Ключевые слова:** теплопроводность, формамид, глицерин, вода, водные растворы

Изучение термических и переносных свойств индивидуальных жидкостей и растворов является самым актуальным из вопросов теплофизики. Как известно, для нормальных жидкостей коэффициент теплопроводности с увеличением температуры уменьшается. Особое внимание представляют ассоциированные жидкости и их растворы, которые не подчиняются общим закономерностям. Среди этих жидкостей с теоретической и практической стороны важное значение имеют вода, глицерин, формамид и их растворы.

По теплофизическим свойствам воды, в частности, по теплопроводности, в литературе [1,2] дается подробный анализ имеющихся данных, и предложены международные скелетные таблицы. Однако теплопроводность глицерина и формамида мала изучена.

С целью исследования теплопроводности этих жидкостей нами создана модифицированная установка, реализующая относительный метод коаксиальных цилиндров. Принцип измерения теплопроводности жидкостей относительным методом цилиндрического слоя основывается на том факте, что при заданной температуре и постоянном напряжении на нагревателе электродвижущая сила  $\Delta E$  дифференциальной термопары однозначно определяется теплопроводностью  $\lambda$  исследуемой жидкости. Вид этой зависимости устанавливается градуировкой прибора, т. е. нахождением  $\Delta E$  для жидкостей с известными теплопроводностями. Однако на практике удобно использовать не функцию  $\Delta E = \Delta E(\lambda)$ , а функцию  $y = y(x)$ , где

$$y = \frac{x}{\lambda}, \quad x = \frac{U^2}{\Delta E}.$$

Здесь  $U$  -напряжение на нагревателе. В этих переменных градуировочная кривая почти не зависит от величины напряжения  $U$  и близка к пологой прямой.

В наших исследованиях установка была градуирована по воде в области температур от 20 до 300<sup>0</sup>С. Данные по теплопроводности взяты из [2]. Подробное описание установки дано в работе [3].

В настоящей работе изучена теплопроводность глицерина  $C_3H_8O_3$  в области температур 20-300<sup>0</sup>С. При измерениях теплопроводности веществ от 20 до 80<sup>0</sup>С в качестве начального было принято атмосферное давление, при 100-300<sup>0</sup>С - (0.5...10)МПа. Погрешность опытных данных оценивается 1.5%.

Представляет интерес исследование теплопроводности глицерина при более высоких температурах с целью более полного определения характера кривой  $\lambda=f(T)$  возможности прохождения ее через максимум подобно кривой для теплопроводности воды.



В таблице 1 приведены значения теплопроводности жидкого глицерина полученные в настоящей работе.

Таблица 1

Значения теплопроводности жидкого глицерина,  $\lambda \cdot 10^3 \frac{Вт}{м \cdot К}$

Т, λ	λ	Т, λ	λ	Т, λ	λ	Т, λ	λ
293	286	343	295	403	304	463	312
303	288	363	299	423	332	483	341
323	301	383	309	443	316	503	324

Из таблицы видно, что теплопроводность глицерина увеличивается по мере повышения температуры и температурный коэффициент теплопроводности  $\alpha = 1/\lambda \left( \frac{\partial \lambda}{\partial T} \right)_p$  положителен в исследованном интервале температур.

Анализ данных показал, что значения теплопроводности глицерина примерно в 2.1 раза меньше теплопроводности воды. Аналитическое описание полученных данных и зависимость теплопроводности жидкого глицерина от давления будет изложена в последующих работах.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Варгафтик Н.Б., Филиппов Л.П., Тарзиманов А.А., Тоцкий Е.Е. Теплопроводность жидкостей и газов. М.: Изд-во стандартов, 1978, 472 с.
2. Александров А.А., Григорьев Б.А. Таблицы теплофизических свойств воды и водяного пара. М.: Изд-во МЭИ, 2006, 165с.
3. Абдуллаев К.М., Эльдаров В.С., Мустафаев А.М. Теплопроводность водных растворов системы NaCl-CaCl<sub>2</sub>. –Теплофизика высоких температур. -1998, №3.с. 397-400.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ ОЛИГОМЕРОВ ПОЛИЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ PEG4+Cl И PEG5+Cl С АТОМОМ ХЛОРА

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

*Институт физических проблем Бакинского Государственного Университета*

В данной работе проведено исследование пространственной структуры олигомеров органического полимера –полиэтиленгликоля (PEG) и его комплексов с атомом хлора на основе неэмпирического квантово-химического *ab initio* расчета неограниченным методом Хартри –Фока с использованием базиса 6-31G. Проанализированы основные структурные перестройки в комплексах, состоящих из различного числа мономерных звеньев полиэтиленгликоля.

В настоящее время, благодаря бурному развитию нанотехнологий, большое внимание уделяется исследованиям различных комплексов, созданных на основе полимерных пленок с наночастицами. Путем управляемого введения наночастиц

другого материала в полимерную цепочку становится возможным менять свойства исходного материала. Использование в качестве органических полимеров полиэфигов, в частности, полиэтиленгликоля (PEG), определяется их способностью к пространственной самоорганизации вокруг заряженных групп, образуя комплексы с ионами щелочных металлов, что имеет большое практическое применение [1, 2].

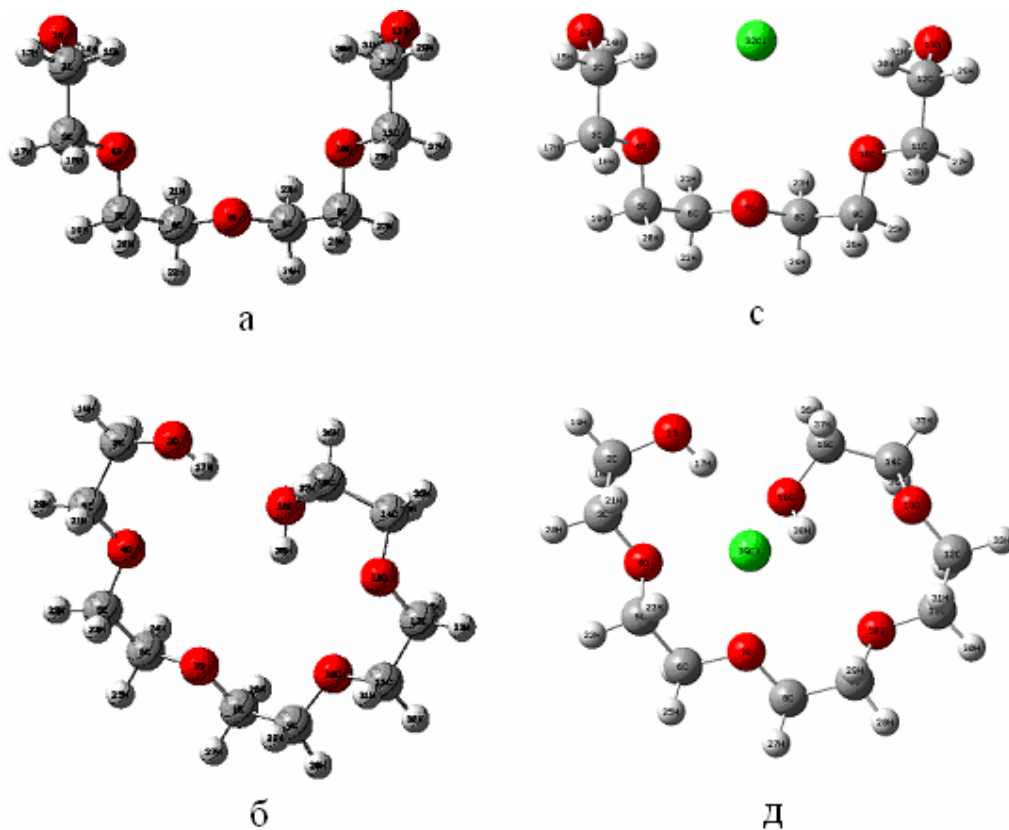


Рис. 1. Пространственные структуры моделей полиэтиленгликоля: (а) чистый PEG4, (б) чистый PEG5, (с) PEG4+Cl, (д) PEG5+Cl

Ранее нами были исследованы пространственные структуры комплексов олигомеров полиэтиленгликоля с атомами натрия и калия [3-7]. Настоящая работа посвящена изучению пространственной структуры комплексов атома Cl с олигомерами полиэтиленгликоля  $\text{HO}-(\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{O})_n-\text{H}$ , длина которого выбиралась состоящей из четырех и пяти повторяющихся звеньев (PEG4+Cl и PEG5+Cl). Первоначально в окне программы ChemOffice методом компьютерного моделирования были созданы развернутые модели олигомеров полиэтиленгликоля, состоящие из 4 и 5 мономерных звеньев. К полученным структурам добавлялся атом хлора и проводилась оптимизация методом молекулярной динамики. При этом цепочки полиэтиленгликоля определенным образом закручивались вокруг атома хлора. Оптимизированные в результате расчета структуры взяты в качестве исходных данных для дальнейшей оптимизации *ab initio* методом Хартри-Фока программой Gaussian-09 с использованием базиса 6-31G (p,d).

По результатам расчета оказывается, что длины связей при образовании комплексов не меняются, валентные углы меняются только в десятых долях градусов, а двугранные углы могут незначительно измениться, не больше чем на  $5^\circ$ . Но даже такие небольшие повороты структуры PEG приводят к образованию стабильных комплексов олигомеров полиэтиленгликоля с атомом хлора. Для интерпретации изменений в

Таблица 1.

 Межатомные расстояния ( $\text{Å}$ ) между атомами кислорода и хлора в исследуемых комплексах

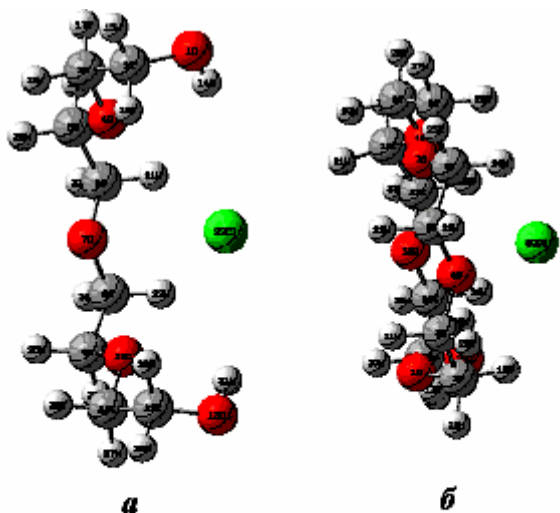
PEG-4		PEG-4+Cl		PEG-5		PEG-5+Cl	
O <sub>1</sub> -O <sub>4</sub>	2.78	O <sub>1</sub> -O <sub>4</sub>	2.78	O <sub>1</sub> -O <sub>4</sub>	2.69	O <sub>1</sub> -O <sub>4</sub>	2.85
O <sub>4</sub> -O <sub>7</sub>	2.87	O <sub>4</sub> -O <sub>7</sub>	2.87	O <sub>4</sub> -O <sub>7</sub>	2.83	O <sub>4</sub> -O <sub>7</sub>	2.93
O <sub>7</sub> -O <sub>10</sub>	2.87	O <sub>7</sub> -O <sub>10</sub>	2.87	O <sub>7</sub> -O <sub>10</sub>	2.82	O <sub>7</sub> -O <sub>10</sub>	2.89
O <sub>10</sub> -O <sub>13</sub>	2.78	O <sub>10</sub> -O <sub>13</sub>	2.78	O <sub>10</sub> -O <sub>13</sub>	2.85	O <sub>10</sub> -O <sub>13</sub>	2.77
				O <sub>13</sub> -O <sub>16</sub>	3.60	O <sub>13</sub> -O <sub>16</sub>	2.78
O <sub>1</sub> -O <sub>7</sub>	5.38	O <sub>1</sub> -O <sub>7</sub>	5.38	O <sub>1</sub> -O <sub>7</sub>	5.06	O <sub>1</sub> -O <sub>7</sub>	4.99
O <sub>1</sub> -O <sub>10</sub>	6.59	O <sub>1</sub> -O <sub>10</sub>	6.76	O <sub>1</sub> -O <sub>10</sub>	5.65	O <sub>1</sub> -O <sub>10</sub>	6.02
O <sub>1</sub> -O <sub>13</sub>	7.31	O <sub>1</sub> -O <sub>13</sub>	7.63	O <sub>1</sub> -O <sub>13</sub>	5.70	O <sub>1</sub> -O <sub>13</sub>	5.30
O <sub>4</sub> -O <sub>13</sub>	6.59	O <sub>4</sub> -O <sub>13</sub>	6.78	O <sub>1</sub> -O <sub>16</sub>	2.99	O <sub>1</sub> -O <sub>16</sub>	2.90
O <sub>7</sub> -O <sub>13</sub>	5.38	O <sub>7</sub> -O <sub>13</sub>	5.39	O <sub>16</sub> -O <sub>10</sub>	5.01	O <sub>16</sub> -O <sub>10</sub>	3.55
O <sub>4</sub> -O <sub>10</sub>	4.86	O <sub>4</sub> -O <sub>10</sub>	4.98	O <sub>16</sub> -O <sub>7</sub>	5.97	O <sub>16</sub> -O <sub>7</sub>	3.81
		Cl-O <sub>1</sub>	3.90	O <sub>16</sub> -O <sub>4</sub>	4.73	O <sub>16</sub> -O <sub>4</sub>	3.56
		Cl-O <sub>4</sub>	3.55	O <sub>4</sub> -O <sub>13</sub>	5.91	O <sub>4</sub> -O <sub>13</sub>	5.84
		Cl-O <sub>7</sub>	3.69	O <sub>7</sub> -O <sub>13</sub>	5.32	O <sub>7</sub> -O <sub>13</sub>	4.78
		Cl-O <sub>10</sub>	3.52	O <sub>4</sub> -O <sub>10</sub>	5.16	O <sub>4</sub> -O <sub>10</sub>	5.15
		Cl-O <sub>13</sub>	3.88			Cl-O <sub>1</sub>	4.58
						Cl-O <sub>4</sub>	4.48
						Cl-O <sub>7</sub>	4.83
						Cl-O <sub>10</sub>	4.77
						Cl-O <sub>13</sub>	4.92
						Cl-O <sub>16</sub>	2.94

геометрических параметрах при образовании комплексов PEG4+Cl и PEG5+Cl по сравнению с чистыми олигомерами рассмотрим межатомные расстояния между несвязанными атомами-атомами кислорода и хлора в исследуемых комплексах. В табл.1 приведены межатомные расстояния между атомами кислорода и хлора, полученные после проведенных расчетов.

Как следует из табл.1, расстояния между всеми соседними парами кислородов O<sub>1</sub>-O<sub>4</sub>, O<sub>4</sub>-O<sub>7</sub>, O<sub>7</sub>-O<sub>10</sub> и O<sub>10</sub>-O<sub>13</sub> при образовании комплекса PEG4+Cl не изменяются. Наибольшее изменение наблюдается в увеличении расстояния между концевыми атомами кислорода O<sub>1</sub>-O<sub>13</sub> на 0,32Å. Расстояния между несмежными внутренними кислородами O<sub>4</sub> и O<sub>10</sub> увеличивается на 0,12Å, а диагонально расположенные атомы кислорода O<sub>4</sub>-O<sub>13</sub> и O<sub>1</sub>-O<sub>10</sub> отдаляются на 0,19Å и 0,17Å, как бы раздвигая свою полость для захвата частицы. Эти геометрические изменения позволяют атому хлора проникнуть в полость PEG4 и расположиться ближе всего к внутренним атомам

кислорода  $O_4$  и  $O_{10}$ . От концевых атомов кислорода  $O_1$  и  $O_{13}$  атом хлора находится на  $0,4\text{Å}$ , а от атома  $O_7$ , лежащего в самой глубине полости на  $0,2\text{Å}$  дальше.

Но если мы развернем полученную структуру в профиль, как бы налагая атомы углерода друг на друга, то увидим, что при связывании атома хлора с олигомером PEG4 в полученном комплексе атом хлора выступает из плоскости комплекса, как бы паря над ним (рис.2, а).



**Рис.2** Расчетные модели комплексов полиэтиленгликоля с атомом натрия (а) PEG4+Cl, (б) PEG5+Cl

При образовании комплекса PEG5 с атомом хлора наблюдается очень сильное взаимодействие концевого атома кислорода  $O_{16}$  с атомом хлора, расстояние между которыми становится наименьшим, равным  $2.94\text{Å}$ . Это приблизительно на  $0,6\text{Å}$  ближе, чем к атомам  $O_1$  и  $O_4$ . Дальше всего атом хлора отстоит от атомов  $O_{13}$ , затем следуют атомы  $O_7$  и  $O_{10}$  (соответственно на  $2\text{Å}$ ,  $1.8\text{Å}$  и  $1.9\text{Å}$  дальше, чем от атома  $O_{16}$ ). Таким образом, атом хлора располагается от всех атомов кислорода кроме  $O_{16}$  на расстоянии в два раза большем, порядка  $4,5\text{Å}$ . При этом концевой атом кислорода  $O_{16}$  захватывая атом хлора в «карман» полости разворачивается так, как бы обхватывая атом хлора, что приближается на  $0.82\text{Å}$  к атому  $O_{13}$ . Приближаются друг к другу и соседние атомы кислорода  $O_{10}$  и  $O_{13}$ , но всего на  $0.08\text{Å}$ . Остальные соседние кислороды немного расталкиваются:  $O_1$ - $O_4$  на  $0.16\text{Å}$ , а  $O_4$ - $O_7$  и  $O_7$ - $O_{10}$  всего на  $0.1$  и  $0.07\text{Å}$ . Структура полости после захвата атома хлора становится более компактной. Практически все атомы кислорода, кроме  $O_1$  и  $O_{10}$ , отдалившихся друг от друга на  $0.37\text{Å}$ , сближаются. Концевой атом кислорода  $O_{16}$  при образовании комплекса с атомом хлора сворачивается так, что расстояние между ним и атомом  $O_7$  уменьшается на  $2.16\text{Å}$ , на  $1.46\text{Å}$  с атомом  $O_{10}$  и на  $1.17\text{Å}$  с атомом  $O_4$ . Атом кислорода  $O_{13}$  также приближается к атомам  $O_7$  и  $O_1$  на  $0.54\text{Å}$  и  $0.4\text{Å}$  соответственно. Как видно из другой проекции расположения комплекса PEG5+Cl (рис.2, б) атом хлора Cl то же расположен на некотором расстоянии от плоскости структуры PEG5.

Таблица 2 .

Энергетические параметры и дипольные моменты исследуемых комплексов

	PEG-4	PEG-4+Cl	PEG-5	PEG-5+Cl
SCF Done: E(UHF) (ат.ед.)	-687.708	-1147.159	-840.636	-1300.087
nuclear repulsion energy (Hartrees)	855.947	1087.141	1249.965	1498.227
Total Dipole moment (Debye)	4.778	4.755	4.298	4.272

В таблице 2 приведены энергетические параметры и дипольные моменты исследуемых комплексов. Как видно из табл. 2 при образовании комплексов полиэтиленгликоля с атомом хлора энергии обоих комплексов PEG-4+Cl и PEG-5+Cl уменьшаются по сравнению с чистыми олигомерами PEG-4 и PEG-5 одинаково на  $459.451$  ат.ед. Таким образом, процесс образования комплексов с атомом хлора в обоих случаях оказывается энергетически выгодным. Дипольные моменты при образовании

обоих комплексов немного уменьшаются - на 0.023 D при образовании комплекса PEG-4+Cl и на 0.026 D при образовании комплекса PEG-5+Cl. Структура комплекса PEG5+Cl оказывается более компактной, так как его дипольный момент на 0.483 D меньше, чем дипольный момент комплекса PEG-4+Cl.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Chen J., Spear S.K., Huddleston J.G., Rogers R.D. Polyethylene glycol and solutions of polyethylene glycol as green reaction media // Green Chem. 2005, vol.7, № 2, p.64-82.
2. Chen J., Spear S.K., Huddleston J.G., Holbrey J.D., Swatloski R.P., Rogers R.D. Application of poly(ethylene glycol)-based aqueous biphasic systems as reaction and reactive extraction media // Ind. Eng.Chem.Res. 2004, vol. 43,N 17, p.5358-5364.
3. Демухамедова С.Д., Гаджиев З.И., Алиева И.Н., Годжаев Н.М. Пространственная структура олигомеров полиэтиленгликоля с атомом натрия. "Опто-,nanoelektronika kondensə olunmuş mühit və yüksək enerjilər fizikası" respublika elmi-praktik konfransı, Bakı, 14-15 dekabr 2012, s. 234-237
4. Демухамедова С.Д., Гаджиев З.И., Алиева И.Н., Годжаев Н.М. Пространственная структура олигомеров полиэтиленгликоля с атомом калия. I<sup>st</sup> International chemistry and chemical engineering conference CCE 2013, Abstracts & Proceedings, 17-21 aprel 2013, Baku, Azerbaijan, p.834-837
5. Гаджиев З.И., Демухамедова С.Д., Алиева И.Н., Годжаев Н.М. Электронная и пространственная структура олигомеров полиэтиленгликоля PEG4 и PEG5 с атомом натрия. Journal of Qafqaz University, 2013
6. Демухамедова С.Д., Гаджиев З.И., Алиева И.Н., Годжаев Н.М., Нуриева Л.А. Квантовохимическое *ab initio* исследование ИК спектров олигомеров полиэтиленгликоля с атомом натрия. I<sup>st</sup> International scientific conference of young researchers, Proceedings, QafqazUniversity, 26-27 aprel 2013, Baku, Azerbaijan, p.250-252
7. Демухамедова С.Д., Гаджиев З.И., Алиева И.Н., Годжаев Н.М. Квантовохимическое *ab initio* исследование структуры и ИК спектров олигомеров полиэтиленгликоля с атомом калия. // «Fizikanın aktual problemləri» VII Respublika elmi konfransının Materialları, 26 noyabr, Bakı -2012-ci, s.100-101

### POLİVİNİLPIRROLİDONUN İŞTIRAKI İLƏ ALINMIŞ POLİMER-SU İKİFAZALI SİSTEMLƏRİ VƏ ONLARIN FİZİKİ-KİMYƏVİ XASSƏLƏRİ

**T.O. Bağirov, A.Ə. Həsənov, A.E. Hacıyeva, N.F. Əhmədov, X.T. Həsənova**  
*Bakı Dövlət Universiteti, [baghirov-t@mail.ru](mailto:baghirov-t@mail.ru)*

*Polivinilpirrolidonun (PVPD) iştirakı ilə alınmış polimer-su ikifazalı sistemlərindən dekstran-PVPD-su, PVPD–duz-su sistemlərində fazalara ayrılmanın molekulyar aspektləri araşdırılmış, sistemlərin hal diaqramları qurulmuşdur. Həmin sistemlərin oxşar və fərqli cəhətləri müəyyənləşdirilərək göstərilmişdir ki, istər iqtisadi səmərəliliyinə görə, istərsə də əlverişlilik baxımından PVPD-duz-su, o cümlədən, PVPD-üzvi turşuların Na duzu–su ikifazalı sistemləri daha məqsədəuyğundur.*

Məlumdur ki, termodinamik uyuşmaz elə polimer cütləri vardır ki, bəzi həlledicilərdə bu polimerlərin konsentrasiyasının müəyyən qiymətlərindən böyük qiymətlərdə fazalara ayrılma prosesi baş verir və fazaların hər biri polimerlərdən hər hansı biri ilə zənginləşmiş

olur [1]. Polimerlərin bir həlledicidə termodinamik uyumsuzluğu barədə ədəbiyyatda ziddiyyətli fikirlərə rast gəlinir. Bəzi müəlliflər komponentlərin həlledici rolunu irəli sürürlər. Onlar iddia edirlər ki, əgər iki polimer hər hansı həlledicidə ikifazalı sistem verirsə, onda bu hadisə digər həlledicilərlə də müşahidə olunmalıdır. Son zamanlar isə E. Məsimov, B. Zaslavski və digərləri elmi tədqiqat işlərində ikifazalı sulu polimer sistemlərinin yaranmasında suyun həlledici rola malik olmasını irəli sürür [2, 3] və bunu təcrübi faktlarla təsdiq edirlər. Dekstran-polietilenqlikol(PEQ)-su ikifazalı sistemlərdə fazalara ayrılma prosesinə xarici amillərin 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 qiymətlərində sistemin fazalara ayrılması baş verir [3].

Polimer-su ikifazalı sistemlərinin tədqiqinin aktuallığı belə sistemlərdə gedən proseslərin canlı orqanizmdə gedən proseslərin modeli kimi qəbul oluna bilməsi ilə əlaqədardır. Doğrudan da, sistemin bir-birindən hidrofobluqlarına görə fərqlənən eyni zamanda mövcud olan fazaları arasında bioloji maddələrin paylanması araşdırılması orqanizmdə daşınması qanla həyata keçirilən maddələr mübadiləsi mexanizmini başa düşməyə kömək edə bilər. Fazaların çox hissəsini su təşkil etdiyindən belə mühitdə biomakromolekulların konformasiyasını və strukturunu formalaşdıran qarşılıqlı təsirlərin kəmiyyətə öyrənilməsi çox əhəmiyyətlidir.

İşdə İspaniyanın “Panreac” firmasının istehsal etdiyi polietilenqlikol (PEQ)-HO(C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>O)<sub>n</sub>H, Almaniyanın “Applichem” firmasının istehsal etdiyi polivinilpirrolidon, Rusiyanın istehsalı olan dekstran və polivinilspirti, «kimyəvi təmiz» qeyri-üzvi duzlar və üzvi turşuların duzları istifadə olunmuşdur. Bütün təcrübələr kvarts qablarda iki dəfə distillə olunmuş su ilə aparılmışdır. İkifazalı sistemlərin əsas xarakteristikalarından olan binodal əyrisini qurulmuş və birləşdirici xəttin meyl bucağı tapılmışdır.

Polimer-polimer-su ikifazalı sistemlərinə fazalara ayrılma mexanizminin molekulyar aspektlərini araşdırmaq üçün dekstranla bəzi ion daşımayan polimerlərin-polietilenqlikol, polivinilpirrolidon, fikoll və polivinilspirtinin sulu qarışığında alınmış ikifazalı sistemlərin hal diaqramları tədqiq olunmuşdur. Həmin sistemlərin binodal əyrilərini təhlil etdikdə məlum olur ki, hal diaqramında homogen oblastın sahələri aşağıdakı ardıcılığa malikdir:  $S_{PVPD} > S_{PEQ} > S_{PVS}$ . Bu faktı onunla izah etmək olar ki, PVS-in suda həllolma qabiliyyəti digər polimerlər, PEQ və PVPD-yə nisbətən kiçikdir, onun sulu məhluluna dekstranı əlavə etdikdə məhlulda ikinci fazanın özəyini təşkil edən su strukturu yaranır və fazalara ayrılma baş verir.

PVPD ilə suyu strukturlaşdıran qeyri-üzvi duzların sulu məhlullarında alınmış ikifazalı sistemlərin fiziki-kimyəvi xassələri tədqiq edilərək göstərilmişdir ki, suya daxil edilən faza əmələ gətirən komponentlərin hər biri suyun strukturuna və/və ya termodinamik halına təsir edərək iki müxtəlif struktura (termodinamik hala) malik olan su əmələ gətirir və həmin müxtəlif strukturlu sular konsentrasiyanın müəyyən qiymətindən böyük qiymətlərində ayrı-ayrı fazalara yığılaraq termodinamik tarazlıq halında olan ikifazalı sistem əmələ gətirirlər.

Yeni ikifazalı sistemlərin axtarışı nəticəsində məlum olmuşdur ki, polivinilpirrolidonla (PVPD) bəzi üzvi duzların-çaxır, limon və kəhrəba turşularının Na duzunun sulu məhlulu ikifazalı sistem verir.

Qeyd edək ki, qeyri-üzvi duzlar və üzvi turşuların Na duzunun sulu məhlulu ilə dekstran və fikollun sulu qarışığında ikifazalı sistemin alınması da araşdırılmış və bu qarışıqlarda komponentlərin müxtəlif konsentrasiyalarında ikifazalı sistem alınmamışdır. İkifazalı sistem tədqiq olunmuş polimerlərdən PVPD və polietilenqlikolla üzvi turşuların Na duzunun sulu qarışığında alınır. Bizim fikrimizcə, polimer-duz-su sistemlərində ikifazalı sistemin alınması polimer molekulu suda yaratdığı hidrat təbəqənin fəza ölçüləri ilə duzun suda həll olması nəticəsində alınan ionların ətrafındakı hidrat təbəqənin ölçüləri

arasındakı uyğunsuzluqla bağlıdır. Bu uyğunsuzluq PVPD və PEQ olan halda daha çox olduğundan müxtəlif strukturlu suların bir-birində qeyri məhdud həll olması nəticəsində fəzalara ayrılma baş vermir.

Suyun ikili struktura malik olmasını nəzərə aldıqda termodinamik tarazlıq halında fazaəmələgətirən komponentlərin müəyyən konsentrasiyadan böyük qiymətlərində heterogen sistem alınmasını asanlıqla izah etmək olur. Suyun termodinamik halını molekulların fəza orientasiyasının müxtəlifliyi və molekullar arasındakı hidrogen rabitələrinin intensivliyi müəyyən edir. Belə ki, molekullar arasındakı hər bir hidrogen rabitəsinə düşən enerjinin və molekulların fəza orientasiyasının dəyişməsi suyun halının və/və ya strukturunun dəyişməsini göstərir. Bu mülahizələr müxtəlif maddələrin - həm yüksəkmolekullu, həm də kiçikmolekullu birləşmələrin - təsiri ilə suyun strukturunun dəyişməsini izah etməyə imkan verir.

PVPD-duz-su ikifazalı sistemləri faza əmələgətirən komponentlərin konsentrasiyalarını və ya temperaturu dəyişməklə alınır. Polimer-polimer-su ikifazalı sistemlərdən fərqli PEQ-duz-su ikifazalı sistemlərinə analogi olaraq, bu sistemlərdə də fazalara ayrılma temperaturu artdıqca daha tez baş verir. Başqa sözlə, PVPD –duz–su ikifazalı sistemləri fazalara ayrılmanın aşağı kritik nöqtəsinə (FAAKN) malik olan sistemlərdəndir.

PVPD –nin duru məhlulları üçün (0,04÷0,1qr/l) 13 qeyri-üzvi duzla 25÷85°C temperatur intervalında qarışıqda termodinamik uyuşmazlıq hadisəsi müşahidə olunmuşdur. Məlum olmuşdur ki, müxtəlif duzlar üçün sistemdə fazalara ayrılma müxtəlif temperaturlarda baş verir və duzların konsentrasiyası artdıqca fazalara ayrılma prosesi baş verən temperatur azalır.

Analogi tədqiqatlar 13 qeyri-üzvi duzla PVPD–nin beş fiksə olunmuş həcmi payları üçün aparılmışdır. Müqayisə üçün bir sıra natrium və kalium duzları üçün  $\text{Na}_2\text{CO}_3$ ,  $\text{Na}_3\text{PO}_4$ ,  $\text{Na}_2\text{HPO}_4$ ,  $\text{NaH}_2\text{PO}_4$  və  $\text{K}_2\text{CO}_3$ ,  $\text{K}_3\text{PO}_4$ ,  $\text{K}_2\text{HPO}_4$ ,  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  – PVPD-duz-su sistemlərində fazalara ayrılma temperaturu  $T_{f.a.}$  tapılmışdır. Məlum olmuşdur ki, natrium duzlarının iştirakı ilə olan duzlarda fazalara ayrılma kalium duzlanma nisbətən azdır və fazalara ayrılma temperaturları arasındakı fərq  $\Delta T_n$  tədqiq olunmuş duzların anionlarından asılı olaraq dəyişir.

$$\Delta T_{f.a.} = T_{f.a.}(\text{K anion}) - T_{f.a.}(\text{Na anion})$$

Müəyyən olunmuşdur ki, natrium və kalium ionları xarici elektron örtüklərinə görə oxşardır və eyni yükə malikdirlər. Onlar bir–birindən ancaq radiuslarına görə fərqlənirlər ( $r_{\text{Na}}=0,98 \text{ \AA}$ ,  $r_{\text{K}}=1,33 \text{ \AA}$ ) və bu səbəbdən radiusu kiçik olan ionun hidratlaşma ədədi böyük olur, uyğun olaraq  $n_{\text{Na}}=7\div9$  və  $n_{\text{K}}=4\div6$ -dir. Tədqiq olunmuş ionların su molekulları ilə qarşılıqlı təsir ehtimalları da fərqlənir və bu fərq özünü sistemlərin fiziki–kimyəvi xassələrinə müxtəlif cür təsir etməkdə biruzə verir. Qeyd edək ki, Na və K kationlarının su molekulları ilə qarşılıqlı təsir enerjiləri uyğun olaraq  $\Delta E_{\text{Na}}=-101,2\text{kC/mol}$ ,  $\Delta E_{\text{K}}=-75,7\text{kC/mol}$ -dur. Ədəbiyyatdan məlumdur ki, eyni yükə və oxşar xarici elektron quruluşuna malik olan ionun polyarizasiya və diffuziya xassələri ionun radiusu azaldıqca artır [4]. Alınmışdır ki,  $\text{NaH}_2\text{PO}_4$  duzundan fərqli olaraq, digər tədqiq olunmuş natrium duzlarında fazalara ayrılma temperaturu kaliuma nisbətən kiçikdir.  $\text{NaH}_2\text{PO}_4$  və  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  duzlarındakı kənarçıxmanı isə duzların turşu xassələrinin kalium duzunda çox olması ilə əlaqələndirmək olar.

$\text{Na}_2\text{HPO}_4$ ,  $\text{K}_2\text{HPO}_4$ ,  $(\text{NH}_4)_2\text{PO}_4$  duzlarının iştirakı ilə PVPD-duz-su sistemləri üçün tapılmış fazalara ayrılma temperaturunun qiymətləri yuxarıdakı nəzəri mülahizələrdən alınmış qiymətlərə uyğundur. PVPD- $(\text{NH}_4)_2\text{PO}_4$ - $\text{H}_2\text{O}$  sisteminin fazalara ayrılma temperaturu PVPD- $\text{Na}_2\text{HPO}_4$ - $\text{H}_2\text{O}$  və PVPD- $\text{K}_2\text{HPO}_4$ - $\text{H}_2\text{O}$  sistemlərinə nisbətən böyükdür və bu fakt  $(\text{NH}_4)$  ionunun nisbətən böyük olması ilə ( $1,43\text{\AA}$ ) izah olunur.

Analogi nəticələr  $\text{Na}_2\text{SO}_4$  və  $\text{Li}_2\text{SO}_4$  duzları ilə olan sistemlər üçün də alınmışdır. Li ionunun radiusu ( $0,78\text{\AA}$ ) Na ionunun radiusundan kiçik olduğundan PVPD- $\text{Li}_2\text{SO}_4$ - $\text{H}_2\text{O}$  sistemində fazalara ayrılma komponentlərin daha kiçik konsentrasiyalarında baş verir.

Qeyd etmək lazımdır ki, qeyri-üzvi duzların suyun strukturuna (halına) bu və ya digər istiqamətdə təsiri daha çox anionun təbiəti ilə izah olunur. Bu mənada natrium və kalium



duzlarının anionlarının fazalara ayrılma prosesinə təsiri tədqiq edilməklə onların suyun strukturuna təsiri haqqında mülahizələr yürüdülmüşdür.

### ƏDƏBİYYAT

1. Альбертсон П.А. Разделение клеточных частиц и макромолекул. - М.: Мир, 1974, 381 с.
2. Заславский Б.Ю., Левин В.Ю., Махмудов А.У., Местечкина Н.М., Михеева Л.М., Рогожин С.В., Родникова М.Н. Образование водных полимерных двухфазных систем // Докл. АН СССР, 1987, т.293, № 3, с.649-653.
3. Масимов Э.А., Багиров Т.О., Гасанова Х.Т. Определение параметра взаимодействия между фазаобразующими компонентами двухфазных водно-полимерных систем // Журнал изв. вузов «Химия и химическая технология», 2008, том 51, вып.2, с.123-126
4. Dreyer S. and Kragl U. Ionic liquids for aqueous two-phase extraction and stabilization of enzymes. // Biotechnology and Bioengineering, 2008, v. 99, p. 1416-1424.

### СТОЙКОСТЬ ФИБРОИНА НАТУРАЛЬНОГО ШЕЛКА НА ИСКРОВОЙ РАЗРЯД

**Ю. Г. Шукюрлу**

*Шекинский филиал Азербайджанский Институт Учителей*

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

Установлено, что при обогащении фиброина селеном повышается его стойкость к внешним воздействиям, обусловленная тем, что атомы селена, захватывают мигрирующие по цепи макромолекул фиброина электроны, из-за большого сродства их к электрону, и замедляют скорость генерации свободных радикалов. При высоких температурах Se, играя роль превентивного антиоксиданта, разлагает перекиси, образующиеся в начальной стадии термодеструкции фиброина.

Известно, что при высоких давлениях газа (порядка атмосферного и выше), при больших расстояниях между электродами, при высоковольтном, но маломощном источнике тока (например, индукционная катушка) возникает искровой разряд, сопровождающийся высокой температурой, развивающийся в искровом канале [1]. При этом молекулы газа разлагаются на атомы и радикалы. Попадая затем в среду с более низкой температурой и взаимодействуя с исходными и встречными молекулами, а также между собой, эти активные частицы могут инициировать различные реакции. Основным преимуществом искрового разряда, при излучении старения фиброина, является высокая скорость протекания процесса и сравнительно быстрое и детальное проведение эксперимента.

Для исследования стойкости фиброина электрическому разряду была приготовлена специальная ячейка из кварцевой трубки внутренним диаметром 4мм, внутри которой были расположены палочкообразные стержни (электроды) из нержавеющей стали диаметром 3,8мм. Расстояние между плоскими и острыми концами электродов составляло 8мм, а напряжение между ними –20кВ. При этом ток, проходящий через разрядный промежуток, был ограничен сопротивлением.

Электрическое воздействие образца фиброина состояло из искрового разряда, приложенного к одному концу трубки. При изучении ЭПР поглощения, образец после воздействия разряда, переносился на другой конец трубки для устранения влияния



загрязнения самого кварца при разряде. После каждой процедуры разряда продолжительностью  $5 \div 30c$ , трубка с образцом взвешивалась для определения остаточной массы образца. Начальная масса образцов ( $m_0$ ) равнялась 15 мг.

Было выявлено, что во всех образцах после действия разряда возникает синглетный сигнал с  $g = 2,003$   $g=2,003$  и  $\Delta B_m = 0,8 мТл$ . Он насыщается при малых мощностях СВЧ поля, сверхтонкая структура не наблюдается. С увеличением времени действия разряда форма,  $g$  – фактор и  $\Delta B_m$  практически не меняются. Эти данные позволяют заключить, что в системе углеродных колец образуются и стабилизируются свободные радикалы. При развитии разряда, в материале, основную роль играют тепловые и химические процессы. Атомы углерода образуют структуры конденсированных колец, т.е. свободные радикалы стабилизируются за счет образования резонанско-кольчатых структур.

Во время разряда материал подвергается УФ –и световому облучению, возникающему в разрядном пространстве. Однако, ввиду их слабой интенсивности и малого времени воздействия разряда, ими практически можно пренебречь.

На рис 1 приведена зависимость относительной интенсивности сигнала ЭПР, приведенной к единице массы, от времени действия искрового разряда для контрольных (кривая а) и опытных (кривая б) образцов. Здесь  $J_0$  –интенсивность сигнала от стандартного образца,  $J_t$  и  $m_t$  интенсивность сигнала и масса образцов после воздействия разряда в течение времени  $t$ .

Из этих кинетических кривых, разрушения фиброина под действием искрового разряда видно, что скорость накопления свободных радикалов для опытных образцов существенно меньше по сравнению с контрольными, и это заметно проявляется на начальной стадии воздействия разряда.

На рис.2 представлена зависимость  $\lg[J_t / (J_0 \cdot m_t)]$  от времени действия искрового разряда

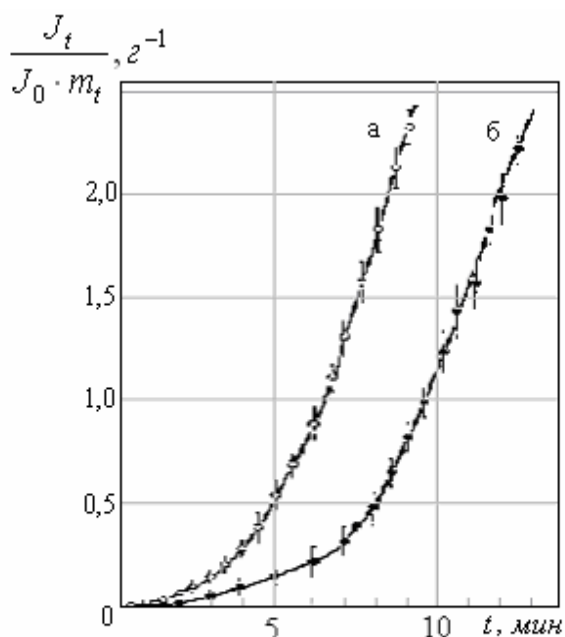


Рис. 1. Зависимость относительной интенсивности сигнала ЭПР в фиброине, к единице массы от времени действия искрового разряда: а – для контрольных, б – для опытных образцов.

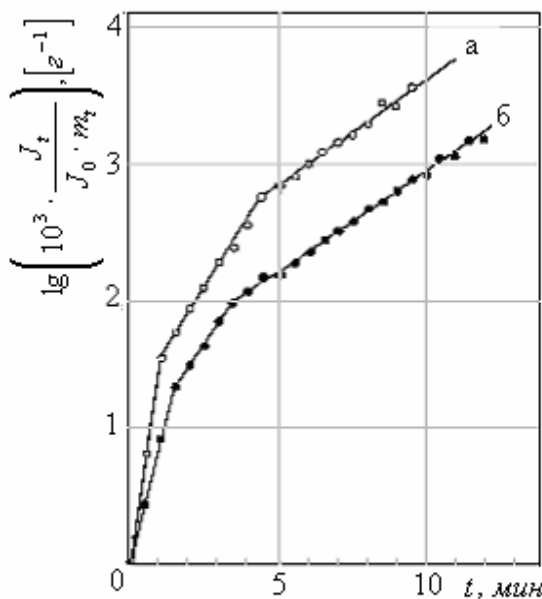


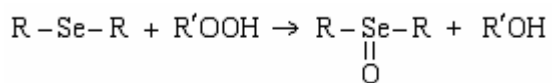
Рис. 2. Зависимость логарифм относительной интенсивности сигнала ЭПР в фиброине, к единице массы от времени действия искрового разряда: а – для контрольных, б – для опытных образцов.

$t$ . По наклону кривых зависимости можно сказать, что при старении фиброина под действием искрового разряда в нем могут образоваться несколько типов свободных радикалов, причем константы скоростей процесса накопления каждого из них для контрольных (кривая *a*) образцов намного больше, чем для обогащенных селеном (кривая *б*, рис.2).

Под действием разряда процессы разложения и улетучивания легких продуктов приводят к потере массы. На рис. 3 показана зависимость потери массы  $m_t/m_0$  от времени действия разряда  $t$ . Видно, что при воздействии разряда потери массы для контрольных образцов значительно больше, чем опытных.

Известно, что при нагревании фиброин начинает буреть уже при температуре немного выше 420K, а при 500K начинается уже обугливание – образование карбонизированного остатка в результате пиролиза или неполного сгорания. Следовательно, физико – химические эффекты искрового разряда могут быть следующие: химические изменения белка (образование двойных связей и новых функциональных групп, например,  $-OH$ ;  $-CN$ ;  $=NH$ ;  $-C=O$ ;  $-NH_2$ ;  $-COOH$ ; сшивка полимерных цепей); процессы деструкции (разрывы цепей макромолекул; разрушение функциональных групп; образование газообразных продуктов горения); другие изменения (изменение эффективной степени полимеризации и средней молекулярной массы).

Таким образом, полученные результаты эксперимента позволяют предполагать, что при введении селена в структуру фиброина фиброин становится более устойчивым к действию электрического разряда, т.е. замедляется развитие окислительных реакций. Se, действуя как превентивный антиоксидант, при высоких температурах, разлагает перекиси, образующиеся на начальных этапах окисления фиброина под действием разряда, до неактивных продуктов по схеме:



На основе полученных результатов по исследованию свободнорадикальных процессов в фиброине, происходящих под действием облучения и разряда, и, по представлению, выдвинутое академиком Н.М. Эмануэлем, о механизме старения полимерных материалов [2], можно предположить, что Se образует дополнительные боковые разветвления в аморфных прослойках фиброина, его приводит к замедлению скорости диффузии кислорода в полимер. Это связано с тем, что фиброин является аморфно-кристаллическим полимером (рис. 4) и, в нем, в первую очередь,

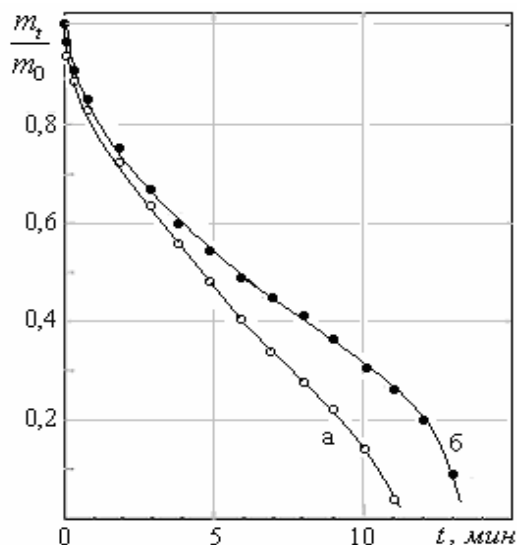


Рис. 3. Зависимость потери массы фиброина от времени действия искрового разряда: а-для контрольных; б - для опытных образцов.

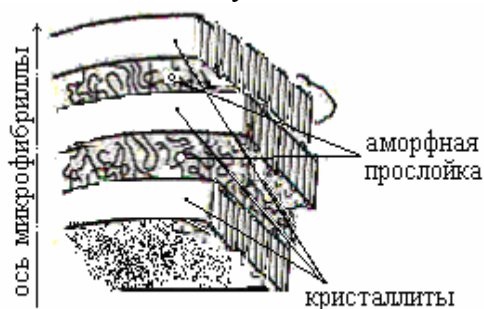


Рис. 4. Схема укладки кристаллических лепестков и аморфных областей в микрофибрилле.

протекает процесс окисления в аморфных областях [3].

## ЛИТЕРАТУРА

1. Балданов Б.Б. Два типа токовых пульсаций слабotoчного искрового разряда в неоднородном электрическом поле // ЖТФ, 2011, том 81, в. 4, стр. 135-137.
2. Эмануэль Н.М. Структурно-кинетические аспекты старения и стабилизация полимера // Высокомолекул. соед., 1978, т. А20(12), с. 2653-2661.
3. Найман Н.Б., Лихтенштейн Г.И., Константинов Ю.С. и др. Исследование термоокислительной деструкции полипропилена методом ядерного магнитного резонанса // Высокомолекул. соед., 1963, т. 5(11), с.1706-1710.

## BIOLOJİ AKTİV MOLEKULLARIN QURULUŞ-FUNKSIYA ASPEKTLƏRİNİN NƏZƏRİ TƏDQIQATLARI

**G. Ə. Haqverdiyeva**

*Fizika Problemləri İnstitutu, Bakı Dövlət Universiteti,*

[Hagverdiguynara@gmail.com](mailto:Hagverdiguynara@gmail.com)

Nəzəri yanaşma ilə bir sıra bioloji aktiv molekulların quruluş-funksiya münasibətlərinə aydınlıq gətirilmişdir. Molekulyar mexanika, molekulyar dinamika, kvant kimyəvi metodlardan və müasir kompüter proqramlarından istifadə edərək peptid molekullarının konformasiya imkanları, elektron quruluşları, dinamik xassələri öyrənilmiş və bioloji aktiv fəza quruluşları modelləşdirilmişdir. Aparılmış tədqiqatların əsasında ümumiləşdirilmiş nəticələr əldə edilmişdir.

**Açar sözlər:** bioloji aktiv molekullar, fəza quruluşu, molekulyar mexanika, molekulyar dinamika, kvant-kimyəvi metodlar, molekulyar modelləşdirmə

Orqanizmdə bioloji aktiv molekulların fizioloji təsirləri onların fəza quruluşları, elektron və dinamik konformasiya xassələri ilə bağlıdır. Təqdim olunmuş işdə nəzəri yanaşma ilə [1-3] peptid T-nin, dermorfin, deltorfin, kiotorfin, neokiotorfin, hemorfin molekullarının quruluş-funksiya problemlərinə baxılmışdır. Birinci mərhələdə mexaniki model çərçivəsində bu peptidlərin və onların analoqlarının stabil konformasiyalarının enerji və həndəsi parametrləri müəyyənəşdirilmişdir. Sonrakı mərhələlərdə kvant-kimyəvi metodların köməyi ilə bu konformasiyaları xarakterizə edən elektron quruluşlarının parametrləri hesablanmış, molekulyar dinamika metodu ilə müəyyənəşmiş lokal minimumlar ətrafındakı ehtimal vəziyyətlər araşdırılmışdır. Alınmış nəticələri bioloji testlər ilə müqaisə edərək tədqiq olunmuş molekulların bioloji aktiv konformasiyaları HyperChem proqramlar paketinin köməyi ilə modelləşdirilmişdir (<http://www.hyper.com/>).

QİÇS-ə qarşı təsir göstərən farmakoloji preparat olan peptid T (Ala1-Ser2-Thr3-Thr4-Thr5-Asn6-Tyr7-Thr8) insan immundefisit virusunu əhatə edən gp 120 qlipoproteidin kiçik seqmentidir və limfositlərdə, beyində yüksək konsentrasiyada mövcud olan CD4 antigen reseptorlarına bağlanan mediator kimi tanınır. Peptid T-nin inyeksiyaları davamlı olmadığından istənilən fizioloji effektin alınması çətinləşir. Bu səbəbdən spesifik reseptorlarla bağlanmağa qadir olan və peptidazaların deqradasiyasına məruz qalmayan peptid T-nin analoqlarının əldə edilməsi zəruridir. Hesablamalar göstərir ki, bu molekulun fəza quruluşu iki tip konformasiya ilə təsvir oluna bilər, siklik və spiralvari [4,5]. Birinci konformasiya

molekulun N- və C- uclarında yerləşən əks yük daşıyan atom qruplarının elektrostatik qarşılıqlı təsirləri üçün əlverişlidir, ikincisi isə polipeptid skeletinin atomlarının effektiv dispersion kontaktlarını təmin edir. Siklik konformasiya molekulun C-uclu fizioloji aktiv pentapeptid fraqmentinin Thr4-Tyr7 seqmentində beta-dönüşün olması ilə xarakterizə olunur. Peptid T-nin və onun bioloji testlər keçmiş analoqlarının konformasiya xüsusiyyətlərini müqaisəli analizi [6] əsasında müəyyən edilmişdir ki, fizioloji aktiv pentapeptidə daxil olan qalıqlar buradaki requlyar quruluşun- beta-dönüşün və eləcə də molekulun bütövlükdə fəzada formalaşmasında əsas rol oynayırlar. Belə ki, bu fraqmentdə aparılan modifikasiyalar əsas zəncirin bucaqlarının dəyişməsinə səbəb olaraq  $\beta$ -dönüşün dağılmasına gətirib çıxarır. Peptid T-nin NMR tədqiqatlarında göstərir ki, onun aktiv və qeyri-aktiv analoqları konformasiya müxtəlifliyi ilə xarakterizə olunurlar. [D-Ala1]- peptid T amid QİÇS-ə qarşı təsir göstərən terapeutik preparat kimi kliniki sınaqlardadır. Bu analoq peptid T-dən daha yüksək hemotaktik aktivlik nümayiş etdirir, HIV-nun neyrotoksik və immunotoksik effektlərini blokada edir. Aparığımız hesablamalar göstərir ki, bu əvəz etmə peptid T-nin iki xarakterik konformasiyalarını istisna etməsədə, siklik konformasiyada elektrostatik kontaktları daha da gücləndirir. Bu onunla izah olunur ki, analoq molekulunun ucları fəzada yaxınlaşmış olur və təbii peptidə nəzərən daha kompakt forma alır. Bu model nativ peptididdəki Thr4 və Tyr7 qalıqlar arasında mövcud olan hidrogen rabitəsindən başqa Thr4 və Thr8 qalıqlar arasında hidrogen rabitəsinin qurulması ilə xarakterizə olunur. Bu model konformasiya keçidlərini istisna etməsə də, peptid T-nin fizioloji aktiv quruluşunu təsvir edir. Hesablamalar göstərir ki, siklik quruluş biopotensiyası az olan [D-Ala1, D-Thr8]-peptid T amid üçün qeyri-mümkündür. Treoninin modifikasiyası peptid zəncirindəki stabil kontaktların itməsinə səbəb olaraq bioloji aktiv quruluşun dağılması ilə nəticələnir. Bu tədqiqatlar onu göstərir ki, peptid T-nin fizioloji aktiv konformasiyasını onun [D-Ala1]-analoqunun optimal quruluşu olan siklik konformasiya modelləşdirir. Qeyd edək ki, peptid T-nin xarakterik konformasiyaların hər birisi elektron sıxlığının spesifik paylanması ilə xarakterizə olunur [7]. Yük paylanmasının dəyişməsi əsasən Thr4 amin turşusu qalığının əsas və yan zəncirlərində baş verir, bu da ki baxılmış konformasiyaların xüsusiyyətlərilə bağlıdır. Siklik konformasiyada bu qalıq başqa OH qrupu daşıyan qalıqlardan fərqli olaraq molekulun mərkəzinə yönələrək, sikl-dövrəni deformasiyaya edir və onun N – və C-uc hissələrinə fəzada yaxınlaşmış olur. Nəticədə Thr4, Thr8 qalıqların OH qruplarındakı və molekulun uclarındakı karbon, oksigen və hidrogen atomlarının yük dəyişmələri müşahidə olunur. Konformasiya fərqliliyi peptid T molekulunun dipol momenti kimi molekulyar xassəsinə təsir edir. Siklik konformasiyada molekulun yük daşıyan uc hissələrin fəzada yaxınlaşmış vəziyyətdə olduğu üçün dipol momenti daha kiçik qiymət alır, bu da molekulun daha stabil vəziyyətdə olmasından xəbər verir. Aparılmış tədqiqatlar ətraf mühitin polyarlığından asılı olaraq baxılmış konformasiyaların reallaşmasını proqnozlaşdırmağa imkan verir. Peptidin T-nin C-uclu petapeptid hissəsində  $\beta$ -dönüşün formalaşmasının enerji üstünlüyü onun spesifik reseptorlarla bağlanması üçün zəruridir. Alınmış nəticələr HIV-sə qarşı effektiv təsir göstərən davamlı farmakoloji preparatların hazırlanmasında istifadə oluna bilər.

Dermorfin (H-Tyr-D-Ala-Phe-Gly-Tyr-Pro-Ser-NH<sub>2</sub>), deltorfin I (H-Tyr-D-Ala-Phe-Asp-Val-Val-Gly-NH<sub>2</sub>) və deltorfin II (H-Tyr-D-Ala-Phe-Glu-Val-Val-Gly-NH<sub>2</sub>) Phyllomedusa ailəsinə aid olan qurbağaların dərisindən alınmış endoqen xətti neyropeptidlərdir. Onlar, müvafiq olaraq,  $\mu$ -,  $\delta$ 1- və  $\delta$ 2-opiat reseptorlarla bağlanaraq mərkəzi və periferik sinir sistemlərinə təsir edirlər. Bu peptidlərin ardıcılığında fizioloji əhəmiyyətli olan ağrıkəsici təsirə malik oxşar N-uclu tetrapeptid Tyr-D-Ala-Phe-Xaa (harada Xaa- dermorfində Gly, deltorfin I-də Asp, deltorfin II -də isə Glu- dir) mövcuddur. Bu peptidlərin ardıcılığında aromatik halqalar daşıyan Tyr və Phe amin turşuları qalıqlarının arasında D- Ala amin turşusu yerləşir. Bu cür quruluş onların bioloji aktivliyinə cavab verir.

Hesablamalar əsasında bu peptidlərin fəza quruluşlarının müqaisəli analizi aparılmış, onların analqetik effektə cavab verən ümumi konformasiya xassələri və hər birinə xas olan quruluş xüsusiyyətləri araşdırılmışdır [8, 9]. Müəyyən edilmişdir ki, dermorfinin qlobal konformasiyasında Tyr1-Cly4 seqmenti spiralvari quruluşa malikdir. Bu konformasiyada D-Ala2 amin turşusu qalığının və molekulun C-ucunda yerləşən NH<sub>2</sub> amid qrupunun atomlarının fəzada yaxınlaşması ilə kvazisiklik quruluş əmələ gəlir. Qeyd edək ki, dermorfin molekulunun və onun guclu ağrıkəsici təsirə malik [D-Arg2]-tetrapeptid analoqlarının optimal konformasiyaları N-üclu dipeptid seqmentinin əsas zəncirinin bükülü quruluşda olması ilə xarakterizə olunurlar. Görünür, belə bir minimal struktur tələb bu peptidlərin və onların analoqlarının aktivliyi üçün əhəmiyyət kəsb edir. Deltorfinlərin optimal quruluşlarında Val5 amin turşusundan başlayaraq peptid zəncirinin dönməsi müşahidə olunur, bu da ki molekulun bükülü quruluşa malik olan N-üclu fizioloji aktiv tetrapeptid və dartılmış vəziyyətdə olan C-üclu Val-Val-Gly tripeptid fraqmentlərinin yaxınlaşmasını təmin edir. Bu konformasiyalarda effektiv elektrostatik və intensiv dispersion kontaktlar, bir neçə molekul daxili hidrogen rabitələrinin yaranması müşahidə edilir. Bundan başqa bu quruluşlar dipol momentin kiçik qiyməti ilə xarakterizə olunurlar. Beləliklə, hər iki deltorfin molekulunun optimal konformasiyaları N-üclu tetrapeptid seqmentinin əsas zəncirinin bükülü quruluşda olması ilə xarakterizə olunurlar. Belə nəticəyə gəlmək olar ki, deltorfinlərin analqetik effektinə onların N-üclu tetrapeptidlərinin quruluşları cavabdehdir.

Analqetik effekt göstərən digər peptidlərin, kiotorfinin (Tyr-Arg), neokiotorfinin (Thr-Ser-Lys-Tyr-Arg) [D-Arg]-bioloji aktiv analoqları uzun müddətli aktivlik göstərərək, ətraf mühitin təsirinə qarşı daha dayanıqlıdırlar. Bununla yanaşı neokiotorfin peptidi insan orqanizminə xoşagəlməz təsirlər də göstərir: son təcrübələr göstərir ki, neokiotorfin və onun 1-4 fraqmenti insan orqanizmində L 929 adlanan karsinoma hüceyrələrinin artmasında iştirak edir. Beləliklə neokiotorfin polifunksionaldır, bu da ki bilavasitə bu peptidin konformasiya xüsusiyyətləri ilə bağlıdır. Hesablamalar nəticəsində müəyyən olmuşdur ki, arqininin D-izomerləşməsi bu peptidlərin konformasiya imkanlarını məhdudlaşdırır və onların yalnız tirozin-arqinin seqmentinin bükülü quruluşa malik olan konformasiyalarını reallaşdırır [10, 11]. Bu cür əvəz etmə hər iki molekulda arqininin yan zəncirində və molekulun sonluqlarında elektron sıxlığının paylaşmasının dıyışməsinə səbəb olaraq, bu peptidlərin daha dayanıqlı vəziyyət almasını təmin edir və bu da ki onların aktivliyinə təsir göstərir. Hesablamalar nəticəsində aşkar olunmuşdur ki, spiralvari konformasiyalar neokiotorfin molekulunun daha stabil vəziyyətlərinə cavab verir. Bu onunla izah olunur ki, belə quruluşlarda lizin və arqinin amin turşuları qalıqlarının müsbət yük daşıyan yan zəncirləri fəzada uzaqlaşmış, molekulun C-ucunda yerləşən mənfi yük daşıyan karboksil atom qrupu isə onlara nəzərən mərkəzi vəziyyət alır, tərkibində hidrosil qrupları olan qalıqlar isə molekulun periferiyasında yerləşərək ətrafdakı su məhlulunun atomları ilə əlverişli hidrogen rabitələrinin yaranmasında iştirak etmək imkanı əldə edirlər. Bioloji tədqiqatlar göstərir ki, Tyr-DArg kimyəvi rabitə aminospeptidazaların dağıdıcı təsirinə məruz qalmır. Apardığımız hesablamalar göstərir ki, dermorfin, kiotorfin və neokiotorfinin analoqlarının Tyr-D-Arg dipeptid seqmentinin bükülü quruluşları bu rabitənin ekranlaşmasını təmin edir, bununla onların güclü və uzunmüddətli ağrıkəsici effekti izah oluna bilər.

Hemorfin molekulaları «qeyri-klassik» opioid peptidlər sinfinə aiddirlər. İnqibitor xassələrinə görə hemorfinlər bir çox bioloji aktiv molekulaların fəaliyyətini tənzimləyirlər. Hemorfin sinfinə mənsub olan Leu-Val-Val-Tyr-Pro-Trp-Thr-Gln-Arg-Phe ardıcılığın muxtəlif seqmentlərini təşkil edən peptidlərin fəza quruluşlarının nəzəri tədqiqatları [12-15] göstərir ki, molekulun N- və C-uc hissələrinə nəzərən bioloji aktiv hemorfin-4 peptidinin ardıcılığına uyğun gələn mərkəzi Tyr-Pro-Trp-Thr tetrapeptid fraqmenti konformasiya sərtliyinə malikdir və optimal elektron quruluşu ilə xarakterizə olunur. Bu tetrapeptidin dönüş olan konformasiyaları polipeptid zəncirini uzatdıqda digər hemorfin peptidlərinin enerji

cəhətdən əlverişli quruluşlarını təşkil edirlər. Bu tip konformasiyalarda Tyr və Trp qalıqları Pro-nə nəzərən sis-pozisiyada yerləşirlər və onların yan zəncirlərindəki halqaların müstəviləri bir birinə nəzərən  $90^0$  və ya  $0^0$  bucaq vəziyyət olaraq fəzada maksimal yaxınlaşırlar. Bu səbəbdən Tyr, Trp və Thr qalıqları bir-birilə və digər qalıqlar ilə effektiv qarşılıqlı təsirlərdə iştirak edirlər. Hesablamalar göstərir ki, peptidlərin bu hissəsindəki əsas zəncirinin  $C^{\alpha}$  atomlarının koordinatlarının orta-kvadratik kənara çıxmaları cüzidir. Bu ondan xəbər verir ki, qeyd olunmuş tetrapeptid hemorfinlərin konservativ, konformasiya dəyişikliyinə məruz qalmayan hissəsidir. Dönüş nəticəsində qeyd olunan peptidlərin global quruluşlarında Val<sup>3</sup> amin turşusu qalığının yan zənciri peptid zəncirinin mərkəzi hissəsinin atomları ilə fəzada maksimal yaxınlaşaraq qırmaqvarı quruluş əmələ gətirir. Quruluş-funksiya analizi nəticəsində aşkar olunmuşdur ki, Tyr<sup>4</sup> və Trp<sup>6</sup> qalıqlarının alanin ilə əvəz edilməsi LVV-hemorfin-7 peptidinin bu molekulun İRAP-a komplementarlığını 10 dəfə azaldır. Hesablamalar göstərdi ki, Tyr qalığının alanin ilə əvəz edilməsi nəticəsində peptidin aktivliyinin azalması konformasiya faktoru ilə yox, yalnız tirozinin yan zəncirində lokallaşan kimyəvi qrupun itirilməsi ilə izah oluna bilər. Trp qalığının alanin ilə əvəz edilməsi isə qeyd olunan tetrapeptid fraqmentindəki dönüşü deformasiya edir. Bu onu göstərir ki, triptofanın ikihalqalı yan zənciri peptidin Tyr<sup>4</sup>-Thr<sup>8</sup> hissəsindəki dönüşün stabilləşməsinə təmin edir. Belə nəticəyə gəlmək olar ki, Tyr-Pro-Trp-Thr tetrapeptid fraqmenti hemorfinlərin spesifik təsirlərinə cavab verən aktiv mərkəz olaraq onların fizioloji aktiv quruluşlarının formalaşmasında əsas rol oynayır. Bu fraqmentin fəza quruluşunu daha dərindən öyrənmək məqsədi ilə onun elektron quruluşunu və molekulyar dinamikasını tədqiq etmişik. Hesablamalar göstərdi ki, tetrapeptidin optimal elektron quruluşuna polipeptid zəncirinin Pro-Trp seqmentində dönüş olan konformasiya cavab verir. Qeyd edək ki, tetrapeptidin bu quruluşu elektron sıxlığının, müsbət və mənfi yüklərin bərabər paylanması ilə və dipol momentin kiçik qiyməti ilə xarakterizə olunur. Optimal quruluşlar arasında konformasiya keçidləri həm əsas zəncirin, həm də yan zəncirlərin atomlarının yüklərinin dəyişməsi ilə müşayiət olunur. Yüklərin daha çox dəyişməsi yan zəncirlərində aromatik halqa daşıyan Tyr və Trp qalıqlarının və fəzada onlara yaxınlaşan Thr qalığının əsas zəncirinin atomlarında baş verir. Qeyd edək ki, temperaturun dəyişməsi yan zəncirlərin atomlarının dinamikasında öz əksini tapır. Trp amin turşu qalığı Tyr qalığından fərqli olaraq vakuumda daha dinamikdir, su mühitinə keçdikdə isə enerjinin daha intensiv stabilləşməsi baş verir və atomların fluktuasiyasının amplitudu azalır. Belə nəticəyə gəlmək olar ki, triptofanın yan zəncirindəki atomlar müəyyən sayda su molekulları ilə bağlanaraq, bu qalığın sərbəstliyini və eləcə də peptid molekulunun hərəkətini bütövlükdə məhdudlaşdırır. Belə guman etmək olar ki, müəyyən fermentləri inqibirləşdirmək üçün hemorfinlərin bu qalığının yan zənciri su molekullarından azad olaraq molekullararası kontaktlarda substrat rolunda iştirak edir.

Aparılmış tədqiqatlar göstərir ki, bioloji aktiv molekulların fəzada stabilləşməsinin vacib şərtlərindən biri onların fizioloji fəaliyyəti üçün önəmli olan aktiv mərkəzin nizamlı quruluşa malik olması, digəri isə farmakofor qalıqların müəyyən dərəcədə dinamikaya sahib olması və konformasiya-elektron münasibətlərində iştirak etməsidir. Alınmış nəticələr bioloji aktiv molekulların quruluş-funksiya əlaqələrinin araşdırılmasında, onların təsir mexanizminin başa düşülməsində və bunun əsasında yeni dərman preparatların hazırlanmasında istifadə oluna bilər.

## ƏDƏBİYYAT

1. Максумов И.С., Исмаилова Л.И., Годжаев Н.М. // Ж. Структ. Химии. 24(1983)147-148.



- Allinger N.L., Yuh Y. QCPE 395, Quantum chemistry program exchange, Indiana Univ., Indiana, 1982.
- Шайтан К.В., Сарайкин С.С. Метод молекулярной динамики. <http://www.moldyn.ru>
- Akverdieva G.A., Godjajev N.M., Akyuz S.A. Molecular Mechanics Conformational Study of Peptide T. Journal of Molecular Structure, v. 403, p.95-110, 1997
- Akverdieva G.A. , Godjajev N.M. , Akyuz S. Conformational dynamics of peptide T molecule, Journal of Molecular Structure, v. 609, p.115-128, 2002
- Akverdieva G.A., Godjaev N.M., Akyuz S. Comparative conformational analysis of peptide T analogs. Journal of Molecular Structure, v. 917, p. 21-26, 2009
- Ахвердиева Г.А., Годжаев Н.М., Набиев Н.С. Квантовомеханические расчеты электронных параметров пептида Т. Bakı Universitetinin xəbərləri, fizika-riyaziyyat elmləri seriyası, N.2, p.46- 51, 2002
- Haqverdiyeva G.Ə., Nəbiyev N.S., Qocayev N.M, Eminzadə Ü.T. Dermorfinin tetrapeptid analoqlarının quruluş-funksiya əlaqələri. Bakı Universitetinin xəbərləri, fizika-riyaziyyat elmləri seriyası, N. 3, p.197-203, 2005
- Qocayev N.M, Nəbiyev N.S., Haqverdiyeva G.Ə. Dermorfin, deltorfin-I və deltorfin-II peptidlərinin fizioloji aktiv mərkəzlərinin konformasiya xüsusiyyətləri. Journal of Qafqaz University, N.19, p.51-54, 2007
- Ахвердиева Г.А., Годжаев Н.М., Набиев Н.С. Конформационные исследования киоторфина и его биологически активного аналога. Биофизика, т.50, №1, с.5-12, 2005
- Haqverdiyeva G.Ə. Neokiotorfinin quruluş tədqiqatları. Journal of Qafqaz University, N.14,p.7-14, 2004
- N.M. Qocayev, G.Ə. Haqverdiyeva, Ə.M. Nəbiyev, Hemorfin-4 peptidinin fəza quruluşu, Journal of Qafqaz University, N 17, p. 107-111, 2006
- Ə.M. Nəbiyev, G.Ə. Haqverdiyeva, N.M. Qocayev, VV-hemorfin-4 peptidinin fəza quruluşu, Journal of Qafqaz University, N 17, p. 63 -69, 2006
- Nəbiyev Ə.M., Haqverdiyeva G.Ə., Qocayev N.M. LVV-hemorfin-7 peptidinin quruluş-funksiya xassələri, AMEA-nın Fizika jurnalı,cild XVI, № 2, seriya: Az, s.70-72, 2010
- M.Набиев, Г.А.Ахвердиева. Исследование электронной структуры пептида геморфин-4. Journal of Qafqaz University, N 30, p. 25-32, 2010

**ПРОСТРАНСТВЕННОЕ СТРОЕНИЕ ГЕПТАПЕПТИДНОГО ФРАГМЕНТА Glu-Gln-Arg-Leu-Gly-Asn-Gln -Trp-Ala-Val-Gly-His-Leu-Met АМИНОКИСЛОТНОЙ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ**

**Г.Д. Аббасова, Н.А. Ганифаева, Л.П.Алиев**  
*Бакинский Государственный Университет*  
[gomesh2006@mail.ru](mailto:gomesh2006@mail.ru)

*Методом теоретического конформационного анализа установлены низкоэнергетические конформационные состояния гептапептидного фрагмента Glu1-Gln2-Arg3-Leu4-Gly5-Asn6-Gln7. Показано, что в пептидной цепи есть два возможных участков связывания с рецепторами гормонов фрагмента Glu1-Gln7.*

Гастроинтестинальные гормоны (от греч. Gaster-желудок и лат. intestinum-кишка), группа биологически активных веществ пептидной природы, вырабатываемых в слизистой оболочке желудочно-кишечного тракта у позвоночных; участвуют в

регуляции деятельности пищеварительной системы, а также оказывают специфическое действие на некоторые другие органы и системы. В отличие от «классических» гормонов гастроинтестинальные гормоны секретируются не эндокринными железами, а специальными клетками, рассеянными в поверхностном эпителиальном слое антрального отдела желудка и тонкой кишки. Поэтому их иногда называют парагормонами, гормоноидами, тканевыми гормонами или энтеритами. К гастроинтестинальным гормонам относятся гастрин, секретин, холецистокинин, мотилин и химоденин. В кишечнике вырабатываются также вазоактивный интестинальный полипептид (ВИП), расширяющий кровеносные сосуды, понижающий кровяное давление, усиливающий секрецию воды и электролитов поджелудочной железой и желчевыделение; гастроингибирующий полипептид (ГИП), способный подавлять секрецию кислоты в желудке; глюкагон, известный как гормон поджелудочной железы; гормон гипоталамуса соматостатин; бомбезин, выделенный впервые из кожи лягушек и по биологической активности сходный с холецистокинином.

Аминокислотная последовательность Glu-Gln-Arg-Leu-Gly-Asn-Gln-Trp-Ala-Val-Gly-His-Leu-Met получена из кожи амфибий. Данная аминокислотная последовательность обладает биологической активностью как в центральной нервной системе, так и в гастроинтестинальном тракте (1).

Схема поэтапного расчета низкоэнергетических состояний гептапептидного фрагмента включает изучение конформационных возможностей последовательно наращиваемых и перекрывающихся участков молекулы. Известно, что при наличии согласованности всех видов внутримолекулярных взаимодействий способ разбиения аминокислотной последовательности на отдельные фрагменты не имеет принципиального значения и не может влиять на конечные результаты исследования.

Были рассмотрены конформационные возможности N-концевых ди-, три-, тетра-, и гептапептидных фрагментов молекулы. На основе результатов независимых расчетов указанных фрагментов были рассчитаны конформационные возможности всей аминокислотной последовательности.

Набор полученных структур анализировали с использованием следующих параметров: относительной конформационной энергии  $E_{\text{отн.}}$ , элементов пространственной структуры ( $\alpha$  –спираль и  $\beta$  –повороты), форм и шейпов пептидной цепи, а также водородных связей. Критерием возможности образования связи является наличие расстояния между донором и акцептором менее  $2\text{Å}$ .

Метод теоретического конформационного анализа основан на поиске устойчивых конформационных состояний фрагмента посредством минимизации полной энергии молекул. Последняя представляется в виде аддитивной суммы вкладов от невалентных ( $E_{\text{нев}}$ ), электростатических ( $E_{\text{эл}}$ ), торсионных взаимодействий ( $E_{\text{торс}}$ ) атомов и энергии образования водородных связей ( $E_{\text{в.с.}}$ ). Полуэмпирические потенциальные функции для описания указанных видов взаимодействий и их параметризации заимствованы из (2). Минимизация энергии с целью поиска локальных минимумов полной конформационной энергии ( $E_{\text{конф}}$ ) фрагмента проводилось методом сопряжённых градиентов по программе, описанной в (3). Расчёты проводились применительно к условиям водного окружения, моделируемого с помощью величины  $\epsilon=10$ .

Для описания конформационного состояния как фрагментов различной длины, так и всего полипептида в работе использована стандартная система идентификаторов. Она включает понятие форм аминокислотного остатка и шейпов пептидного скелета. В соответствии со значениями углов  $\phi$  и  $\psi$  пептидной цепи различают R, B, L и P формы



основной цепи остатка: R ( $\varphi, \psi = -180 \div 0^\circ$ ); B ( $\varphi = -180 \div 0^\circ, \psi = 0 \div 180^\circ$ ); L ( $\varphi, \psi = 0 \div 180^\circ$ ); и P ( $\varphi = 0 \div 180^\circ, \psi = -180 \div 0^\circ$ ) (4).

Сочетание форм аминокислотных остатков в полипептидной цепи образует форму самой цепи. Способ укладки двух смежных остатков пептидной цепи в пространстве независимых координат X, Y, Z описывается шейпами двух типов: *e* и *f*. Они описывают развернутый и свёрнутый типы структуры полипептидной цепи, соответственно. Структурные типы различаются углом  $\theta$ , значения которого при всех возможных формах остатков близко к нулю в шейпе *e* или равно  $180^\circ$ , в шейпе *f*. Конформационные состояния боковой цепи аминокислотных остатков обозначаются символами  $\chi_i$ , где  $i=1,2$  или  $3$  для значений угла  $\chi$  в интервале  $0^\circ \div 120^\circ$ ;  $-120^\circ \div 120^\circ$  и  $-120^\circ \div 0^\circ$ , соответственно.

Расчет стабильных конформаций гептапептидного фрагмента Glu1-Gln2-Arg3-Leu4-Gly5-Asn6-Gln7 был проведен на основе сочетания структурных вариантов, составленных из низкоэнергетических конформаций N-концевого тетрапептида Glu1-Gln2-Arg3-Leu4 и трипептида Gly5-Asn6-Gln7. Согласно результатам расчёта фрагмент в условиях неявно заданного водного окружения может реализовывать 113 конформационных состояний, относительная энергия которых лежит в интервале 0-7 ккал/моль. В таблице приведено распределение низкоэнергетических конформаций этих структур по энергиям основной цепи. Более половины рассчитанных конформаций (~53%) благодаря лабильному N-концевому фрагменту Glu1-Gln2-Arg3-Leu4 принадлежит к неупорядоченным типам структур, что свидетельствует о конформационной подвижности молекулы в водной среде.

**Таблица**

Энергетические параметры оптимальных конформаций гептапептидного фрагмента Glu1-Gln2-Arg3-Leu4-Gly5-Asn6-Gln7

№	Шейп	Конформация остатка	Энергетические вклады, ккал/моль			
			$E_{\text{конф.}}$	$E_{\text{нев.}}$	$E_{\text{тор.}}$	$E_{\text{отн.}}$
1	eeefef	B B B R B R B	-34.3	-46.8	5.9	0.0
2	eeefef	B B B R B R R	-34.3	-50.6	6.2	0.3
3	eeeeef	L B B B B R R	-33.6	-45.9	5.3	0.7
4	efefef	B R B R B R R	-32.9	-48.5	6.1	1.3
5	eeeeef	L B B B B R B	-32.7	-43.0	4.5	1.6
6	effeef	B R R B B R B	-32.2	-44.5	5.5	2.0
7	efeeef	B R B B B R B	-31.9	-42.1	4.3	2.3
8	efeeef	B B L R L R R	-31.9	-47.1	5.1	2.4
9	efefef	B R B R B R B	-31.9	-43.2	4.5	2.5
10	eeefee	B B B R B B B	-31.7	-44.8	5.3	4.6
11	eeeeee	L B B B B B R	-30.7	-40.1	4.5	6.2
12	efeeef	B B R B B R B	-29.9	-41.2	4.6	6.8

Низкоэнергетические конформации гептапептидного фрагмента стабилизированы рядом внутримолекулярных водородных связей. Несмотря на то, что водородные связи дают небольшой вклад в общую энергию, они весьма важны для сохранения устойчивости пространственной структуры фрагмента и ограничения подвижности. Расчет расстояний между потенциальными донорами и акцепторами

таких связей позволил вычислить вероятность образования внутримолекулярных водородных связей во фрагменте.

Результаты расчетов C- и N –концевых фрагментов гептапептидного фрагмента были использованы для изучения пространственного строения и конформационной подвижности всей молекулы.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Coles, M., Diercks, T., Muehlenweg, B. **et al.** (1999) J. Mol. Lett., 330, 165-168.
2. Momany F.A., McGuire R.F., Burgess A.W., Scheraga H.A. "Energy parameters in polypeptides: Geometric parameters, partial atomic charges, nonbonded interaction for naturally occurring amino acid" //Phys. Chem., 1975, v.79, p.2361-2381.
3. Максумов И.С., Исмаилова Л. И., Годжаев Н. М. "Программа полуэмпирического расчёта конформаций молекулярных комплексов на ЭВМ"// Журнал структурной химии, 1983, т.24, №4, с.147-148
4. Попов Е.М. "Структурная организация белков" // М., Наука, 1989, 352с.

#### ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА КОМПЛЕКСОВ ПЕПТИДА Т7 С ОКСИДОМ ТРЕХВАЛЕНТНОГО ЖЕЛЕЗА

**Г.Д. Аббасова, И.Н. Алиева, М.А. Рамазанов, А.И. Омарова**

*Кафедра оптики и молекулярной физики,  
Бакинский государственный университет*

В последнее десятилетие многие направления нано-исследований связаны с поиском путей и методов использования наноразмерных соединений в процессах, регулирующих жизненно важные функции человеческого организма. К их числу можно отнести использование нагруженных лекарственными препаратами наночастиц, участвующих в транспорте и их доставке к пораженным раковым клеткам организма. В механизмах транспорта используются также небольшие пептидные молекулы, которые способны в больших концентрациях накапливаются около пораженных раковой опухолью тканях организма [1-2]. К числу таких пептидных молекул относится и пептид HAIYPRH, известный также под названием пептида Т7. Способность пептида Т7 накапливаться вблизи опухолевых клеток позволяет использовать его в комплексах, нагруженных оксидом железа и молекулой лекарственного вещества для целенаправленной доставки к пораженным участкам тканей животного организма.

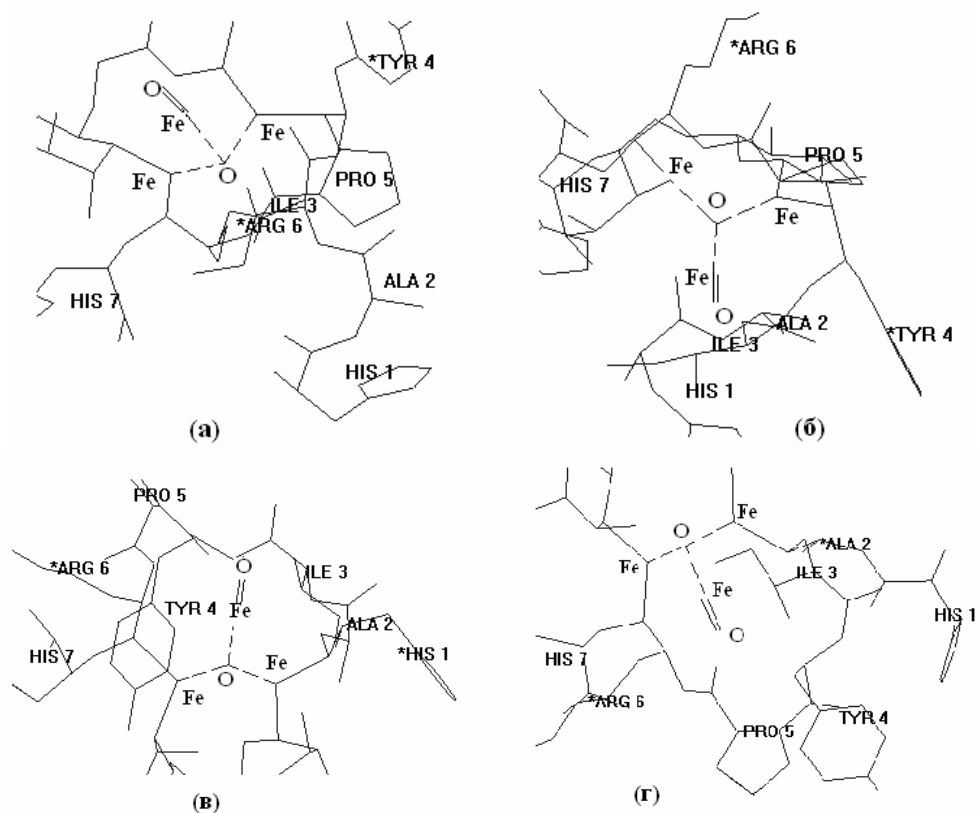
Ранее нами методами молекулярной механики, основанными на силовом поле полуэмпирических потенциальных функций, были подробно исследованы молекулярно-динамические свойства пептида Т7 и установлены пределы изменения двугранных углов в основной и в боковых цепях аминокислотных остатков, формирующих структуру пептида, рассчитаны величины парциальных зарядов на отдельных атомах и изучено распределение электронной плотности на функциональных группах аминокислотных остатков в различных конформационных состояниях молекулы. Для изучения комплексных соединений, участвующих в целенаправленном транспорте нагруженных наночастицами лекарственных препаратов была использована модель, предложенная ранее в работе [3-5].

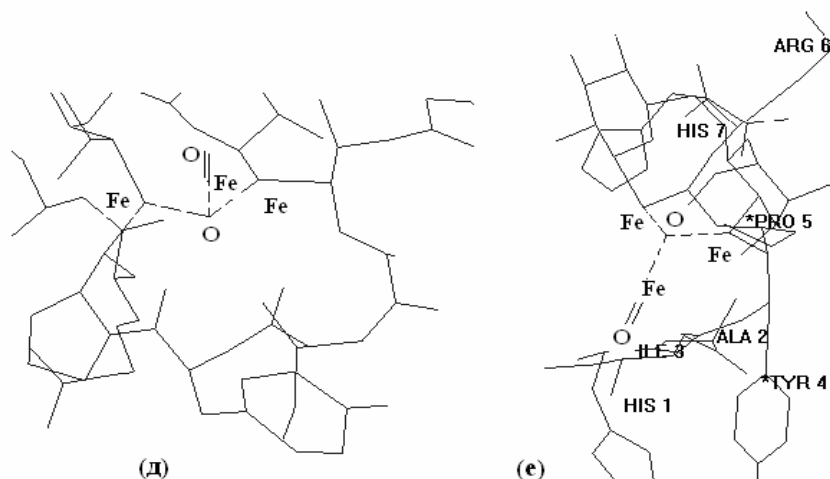
## МЕТОДЫ РАСЧЕТА

Электронная структура комплексов пептида Т7 с оксидом трехвалентного железа ( $Fe_3O_4$ ), включающая парциальные заряды на атомах, электрический дипольный момент и другие параметры были исследованы полуэмпирическим методом квантовой химии CNDO. Для проведения расчетов использовалась демонстрационная версия программы HyperChem 7.5, доступная на сайте корпорации Hypercube (<http://www.hyper.com>). При оптимизации электронной энергии молекулы в качестве нулевых приближений были рассмотрены равновесные конфигурации ядер, соответствующие геометрии шести предпочтительных конформаций, рассчитанных ранее методом теоретического конформационного анализа.

## РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Пространственная структура и энергетические параметры низкоэнергетических структур комплексов после оптимизации полной энергии приведены на рис.1 и в табл.1-2. Наиболее низкое значение квантово-химической энергии принадлежит комплексу, содержащему пептид Т7 в конформации 5 (рис.1, д), а наибольшей - в конформации 2 (рис.1,б). Сравнение полученных структур позволяет сделать вывод, что именно свернутые участки основной цепи играют важную роль в стабилизации пространственной структуры и способствуют химической стабильности комплекса. Эффективные заряды на атомах железа в различных конформационных состояниях комплекса варьируют в пределах от  $-0.127e$  до  $-0.299e$ , достигая максимального значения в структурах с наиболее низким значением электронной энергии (таб.2).





**Рис.1** Пространственная структура комплексов пептида T7 с Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> в конформационных состояниях 1-6 (а-е) пептида T7.

**Таблица 1.**

Электронные (в ккал/моль) характеристики и величины дипольных моментов (в дебай) комплексов в различных конформационных состояниях пептида T7

Энергия (ккал/моль)	Конформация комплекса Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub> + пептид T7					
	1	2	3	4	5	6
Еполн	-385679.1	-385704.7	-385653.2	-385593.9	-384816.2	-385588.4
Дипольный момент, Дб	33.7	39.2	50.2	30.0	45.6	32.0

Самое низкое значение полной электронной энергии обеспечивается благоприятным балансом энергии стабилизации электронных облаков и отталкивания атомных остатков. Несмотря на то, что электронная энергия этой структуры уступает по значению некоторым другим конформациям, благоприятное расположение атомных ядер компенсирует этот проигрыш. Сравнительный анализ электронной структуры низкоэнергетических конформаций проведен на основе значений эффективных зарядов, орбитальной энергии, дипольных моментов. Изменение этих параметров при переходе от одной конформации к другой позволяет определить конформационно-электронную обусловленность низкоэнергетических структур. Так, эффективный заряд на атоме железа Fe1 варьирует в пределах от -0.127e до -0.299e, достигая максимального значения в наиболее устойчивых состояниях комплекса.

**Таблица 2.**

Величины парциальных зарядов на атомах железа комплексов в различных конформационных состояниях пептида T7

Атом	Конформация комплекса Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub> + пептид T7					
	1	2	3	4	5	6
Fe1	-0.151	-0.142	-0.257	-0.202	-0.260	-0.209

Fe3	-0.172	-0.159	-0.180	-0.196	-0.299	-0.378
Fe4	-0.153	-0.150	-0.127	-0.165	-0.160	-0.141
O2	-0.242	-0.186	-0.220	-0.272	-0.133	-0.123
O5	-0.362	-0.393	-0.402	-0.474	-0.416	-0.308

На основе анализа численных значений выявлены основные закономерности конформационно-электронной обусловленности параметров комплекса.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Han L., Huang R., Liu S., Huang S., Jiang C. // Mol. Pharm., 2010, vol.7 (6), p.2156-2165.
2. Han L., Li J, Huang R., Liu S., Hu X., Yi P., Shan D., Wang X., Lei H., Jiang C.// Biomaterials, 2011, vol.32 (11), p.2989-2998.
3. Аббасова Г.Д., Алиева И.Н., Омарова А.И., Годжаев Н.М. // Известия НАНА (серия физ.-мат. и технических наук), 2010, том XXX , № 5, с.112-120.
4. Г.Дж.Аббасова, И.Н.Алиева, А.И.Омарова // Fizikanin üasir Problemləri, VI Respublika Konfransının Materialları, Bakı-2012, s.218-221.
5. G.C.Abbasova, İ.N.Əliyeva, A.İ.Ömərova, M.Ə.Ramazanov, N.S.Nəbiyev // Azerbaijan Journal of Physics, Fizika, vol. XVI, Number 2, 2010, p.47-50.

### РЕЛАКСАЦИЯ ФОТОТОКА В ОРГАНИЧЕСКОМ ПОЛУПРОВОДНИКЕ РОДАМИН 6Ж

**С.Х. Халилов\*, А.С. Рзаева\*, С.Дж. Мамедов\*, Б. Дж. Алиев\*\***

*\*Сумгаитский Государственный Университет, Сумгаит, Азербайджан*

*\*\*Азербайджанский Нефтяной Академии*

[sdu@azeronline.az](mailto:sdu@azeronline.az)

*Исследован процесс релаксации фототока в органическом низкомолекулярном полупроводнике родамин 6Ж. Теоретически и экспериментально показано, что в данном процессе основную роль в области температур ниже 330 К играет рекомбинация с захватом электронов на локальные уровни, а при температурах выше 330 К – обратные переходы под воздействием тепла.*

Органическое соединение родамин 6Ж является полупроводниковым материалом, обладающим высокой фоточувствительностью. В работах [1-4] были изучены термостимулированная проводимость, стационарная фотопроводимость, фотоиндуцированные сигналы ЭПР и фотодиэлектрический эффект в родамине 6Ж.

В настоящей статье приводятся результаты исследования релаксации фототока в тонких аморфных слоях родамин 6Ж.

Образцы получались термической возгонкой в вакууме ( $10^{-6}$  Торр) порошка полупроводника на кварцевую пластинку с платиновыми электродами. Расстояние

между электродами  $\sim 0,1$  мм. Освещение образцов производилось светом лампы накаливания мощностью 500 Вт. Изменения тока записывались на двухкоординатном самопишущем приборе. Температура образцов поддерживалась постоянной с помощью специальной электронной схемы с точностью 0,1 К.

На рис. 1 приведена кривая спада фототока после выключения света в родамине 6Ж при 377 К. На кривой можно выделить три участка. Начальный, быстрый спад, связанный с рекомбинацией свободных электронов и дырок постепенно переходит в область, где спад существенно экспоненциален; на этой дальней стадии спада фототока определяющими являются процессы захвата и выброса электронов из уровней прилипания.

На вставке рис. 1 представлены кривые релаксации на дальних стадиях спада фототока для различных температур. Как видно из рис. 1, с понижением температуры спад становится менее крутым, а при температурах ниже 330 К скорость спада от температуры не зависит.

Для объяснения полученных результатов проанализируем энергетическую модель органического полупроводника с одним уровнем ловушек, через которые может осуществляться рекомбинация (рис. 2); кроме того, в модели учитывается возможность межзонной рекомбинации.

На вставке рис. 2, где изображены основные переходы и указаны их интенсивности, использованы следующие обозначения:  $N_{ct} = N_c \exp(E_t/kT)$  – приведенная плотность состояний в зоне проводимости,  $\gamma$  – коэффициент захвата,  $\beta$ ,  $\delta$  – коэффициенты рекомбинации,  $N_t$ ,  $E_t$  – глубина ловушек и их концентрация,  $n_c$ ,  $n_p$  – концентрация свободных электронов и дырок,  $n_t$  – концентрация захваченных электронов.

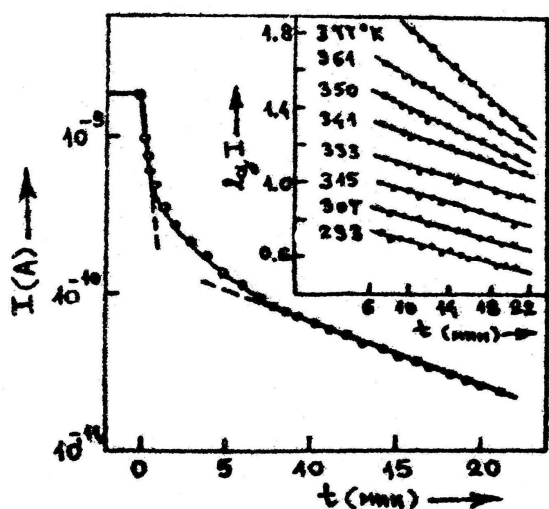


Рис.1. Изотермический спад фототока после выключения освещения при 377 К. На вставке показаны дальние стадии релаксации фототока при различных температурах

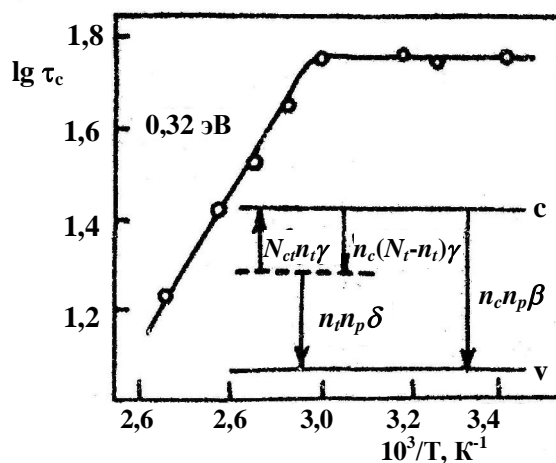


Рис. 2. Температурная зависимость постоянной времени спада фототока. На вставку энергетическая модель полупроводник с одним уровнем ловушек.

Система дифференциальных уравнений, описывающих изменение концентрации электронов в зоне проводимости и на ловушках, будет иметь следующий вид:

$$\frac{dn_c}{dt} = n_t N_{ct} \gamma - n_c (N_t - n_t) \gamma - n_c n_p \beta, \quad (1)$$

$$\frac{dn_t}{dt} = n_c(N_t - n_t)\gamma - n_t N_{ct}\gamma - n_t n_p \delta. \quad (2)$$

Как обычно делается [5], предположив  $dn_c/dt \approx 0$ , в квазистационарном приближении из (1) получим:

$$n_c = \frac{n_t N_{ct} \gamma}{(N_t - n_t)\gamma - n_p \beta}, \quad (3)$$

Заметим, что справедливость такого (квазистационарного) приближения следует из того, что скорость изменения  $n_c$ , достигаемая экспериментально, значительно меньше скорости релаксаций  $n_c$ , определяемой меньшим из времен жизни и перезахвата. Электроны не могут накапливаться в зоне проводимости, так как они сразу же либо рекомбинируют, либо перезахватываются.

Подстановка выражения (3) для  $n_c$  в (2) приводит к нелинейному дифференциальному уравнению относительно  $n_t$ . Решение его в общем виде представляет значительные математические трудности. Однако, для некоторых частных случаев решение получается достаточно просто.

Если  $n_t \approx N_t$ , то (3) дает;

$$n_c = \frac{N_{ct} \gamma}{n_p \beta} n_t, \quad (4)$$

а выражение (2) упрощается, и принимает вид:

$$\frac{dn_t}{dt} = -n_t N_{ct} \gamma - n_p \delta. \quad (5)$$

Решение уравнения (5) при начальном условии  $n_t|_{t=0} = n_{t0}$ , имеет вид:

$$n_t = n_{t0} \exp[-(N_{ct} \gamma + n_p \delta)t]. \quad (6)$$

Подставив (6) в (4), для  $n_c$  получаем следующее выражение:

$$n_c = \frac{N_{ct} m_{t0}}{n_p \beta} \exp[-(N_{ct} \gamma + n_p \delta)t]. \quad (7)$$

Если же рассматривать случай  $n_t \ll N_t$ , то для  $n_c$  получаем решение в виде:

$$n_c = \frac{N_{ct} m_{t0}}{N_t \gamma + n_p \beta} \exp[-(\frac{N_{ct} \gamma}{1 + N_t \gamma / n_p \beta} + n_p \delta)t]. \quad (8)$$

Легко видеть, что при  $N_t \gamma \ll n_p \delta$  (перезахват незначителен или отсутствует), уравнение (8) переходит в (7). Из полученного выражения (7) следует, что величина постоянной времени распада  $\tau_c$  определяется двумя процессами: тепловым забросом электронов из ловушек в зону проводимости и рекомбинацией с неравновесными дырками валентной зоны. Из рассмотрения выражения для постоянной времени релаксации

$$\tau_c = (\gamma N_{ct} + \delta n_p)^{-1} \quad (9)$$

следует, что при низких температурах ( $\gamma N_{ct} \ll \delta n_p$ ) интенсивность тепловых забросов мала, и постоянная времени спада будет определяться единственным процессом - рекомбинацией захваченных электронов с неравновесными дырками. Если при этом концентрация последних слабо зависит от температуры, то на этом участке температурной зависимости  $\tau_c \approx \text{const}$ . Напротив, в области высоких температур, когда  $\gamma N_{ct} \gg \delta n_p$  в процессе опустошения ловушек преобладают тепловые забросы в зону проводимости, и постоянная времени спада экспоненциально зависит от температуры:

$$\tau_c \approx (\gamma N_{ct})^{-1} = \frac{1}{\gamma N_c} \exp\left(-\frac{E_t}{kT}\right). \quad (10)$$

Rezultatları izmereniy temperaturnoy zavisimosti  $\tau_c$  dlya rodamina bZh privedeny na ris.2. Iz rysunka vidno, chto v oblasti nizkix temperatur  $\tau_c$  postoyanna. Pri povyshenii temperatury vyshе 330K imet mesto eksponenatsionalnyy spad  $\tau_c$ , chto nayoditsya v xorošem sootvetstviy s privedennyymi vyshе rassuzhdeniyami.

Энергетическое положение уровня  $E_t=0.32$  эВ, определенное из высоко-температурного участка зависимости  $\lg \tau_c$  от  $1/T$  хорошо согласуется с глубиной ловушек, обнаруженных в родамине бЖ ранее методом термостимулированной проводимости [1], а также с литературными данными по исследованию ЭПР [3] и фотодиэлектрического эффекта [4].

1. B.Sh. Barkhalov, E.L. Lutsenko, Phys. Stat. Sol., 2002, v.11, p. 433
2. Н.В.Дубинин, Б.Ш. Бархалов, Э.Л. Луценко, ФТТ, 2003, с. 870
3. А. М. Мешков, В.Е. Холмогоров, ДАН СССР, 1995, т. 160, с. 394
4. V.V. Sinitski, Yu.A. Vidadi, L.D. Rozenstein, Phys. Stat. Sol., 1971, v.5, p. 327
5. Э.И. Адирович. Некоторые вопросы теории люминесценции кристаллов, ГИТТЛ, М., 1996

## ***d<sup>n</sup> ELEKTRON TƏBƏQƏSİNƏ MALİK BƏZİ KEÇİD METALLARININ HƏCMİ KLASTERLƏRİNİN KVANT-KİMYƏVİ TƏDQIQI***

**D.B. Bayramova**

*Bakı Dövlət Universiteti, Fizika Problemləri ETİ*

Keçid metallarının iştirakı ilə meydana gələn kasterlərin fiziki-kimyəvi xassələrinin təcrübi və nəzəri üsullarla öyrənilməsi materşünaslığın əsas məsələləindən biridir. Bu klasterlərin elektron-fəza quruluşunun kvant-mexaniki tədqiqi bu istiqamətdə aparılan nəzəri tədqiqatların ön sıralarında durur. Bu ilk növbədə belə klasterlərin maqnit xassələrinin təcrübi tədqiqat üsulları ilə əldə edilmiş nəticələrin sistemləşdirərək izah edilməsi zərurətindən yaranmışdır. Bilindiyi kimi maddənin maqnit xassələri yalnız kvant mexanikası şərcivəsində izah edilə bilinər. təqdim olunan məruzədə *Sc*-scandium (N=21), *Ti* –titan (N=22), *V*-vanadium (N=23) keçid metallarının həcmi quruluşa malik ilk klasterlərin  $X_4$  elektron –fəza quruluşunun yarımempitik kvant kimyəvi metodlarla hesablamalarının nəticələri təqdim olunur. Hesablama modelləri qurularkən başlanğıc variantlar atomların ion radiusları nəzərə alınmaqla təşkil olunmuşdurş hər bir klasterin fəza quruluşu ilk mərhələdə molekulyar mexaniki, ikinci mərhələdə kvant-mexaniki üsullarla optimallaşdırılmışdır. Optimallaşmış elektron quruluşuna uyğun, orbital enerjilər, rabitə enerjisi, elektron buludunun paylanma zərbələri, spinlərə görə orbitalların məskunlaşma xüsusiyyətləri və s. təyin edilmişdir. Stabil klasterlərdə metal atomlarının koordinatları hesablanmışdır.

Hesablama modlerin qurarkən bərabər üçbucaqlı sətlərə malik düzgün piramida təpələrinde yerləşən klasterlərin  $z$  matris atomlar kavalent radiusları nəzərə alınib



qurulmuşdur. Valent elektron VAX-da metal atomların bütün  $nd$  və  $m+ls$  orbitalları nəzərə alınmış kimyəvi rabitənin tamamlanması üçün vallaşmayan rabitələr H ilə birləşir. Hər bir klasterləri d orbitalların məskunlaşması əsas götürülərək atom orbitalları istiqamət və növünə görə elektron buludun paylanmasını müəyyənləşdirir. Nəticələr göstərilmişdir. Sıra nömrəsi artdıqca enerji səviyyələri kəskin dərinləşməsi baş verir. İonlaşma enerji T sonlu tutulmuş molekulyar orbitallar enerjisi bütün klasterlər üçün təqribən eyni qiymətə malikdir. 6-7 eV S kanal valent elektor yerləşdiyi ilk və “-li molekullar orbita arasında enerji fərqi 1,5 Titan üçün təqribən 1,2 olduğu halda Vanadium üçün təqribi 3 eV-ə bərabərdir. Səviyyə enerjiyə görə paylanması bütün klasterlər üçün oxşar xarakterə malikdir.

Klasterlərin energetik parametrləri

	$S_{c4}$	$V_{u4}$	$Ti_4$
$E_{tot}$	-3937.960	-17461.589	-11303.114
$E_{vin}$	187.502	-110.425	-11303.114
$E_{Ivol}$	-4125.461	-17351.164	-9776.111
$E_{ee}$	-9914.934	-61552.141	-29803.610
$E_{cc}$	5976.974	-44090.551	-18500.496

$E_{tot}$  - ümumi enerji,

$E_{Fol}$  - izole olunmuş atomların enerjisi,

$E_{ee}$  - elektron enerjisi,

$E_{bin}$  - rabitə enerjisi,

$E_{cc}$  - atom qalıqlarının qarşılıq təsir enerjisi

Cədvəldən görüldüyü kimi  $S_{c4}$  klasterinin rabitə enerjisi müsbət 187.502 kəla bərabərdir. Buna əsasən güman etmək olarki, Scandium atomlarından təşkil ilk həcmi  $S_{c4}$  klasteri dayanıqsız olacaq. Digər iki klaster kifayət qədər böyük rabitə enerjisinə malikdir və güman etmək olar ki, bu metalların ilk həcmi klasterləri dayanıqlı olacaq.

## BUTİL BUTİRATIN ÖZLÜLÜYÜ

Ş.X. Xəlilov, A.B. İbrahimli, İ.M. Əlmərdanova

*Azərbaycan Dövlət Pedaqoji universiteti*

*Yağ turşusunun mürekkəb efiri olan butilbutiratın dinamik özlülük əmsalının molekulyar mexanizminin izahına cəhd edilmiş və özlülük əmsalının müxtəlif temperatur və təzyiqlərdə hesablanmasına dair empirik düstür verilmişdir.*

Mayələrin istilik -fiziki xassələrinin geniş temperatur və təzyiq intervalında tədqiqi müasir mayələr fizikasının qarşısında duran əsas məsələlərdəndir. Belə ki, kimyəvi texnologiya və aparatların hazırlanmasında istilik-fiziki kəmiyyətlərin təcrübi qiymətlərinin olması praktik əhəmiyyət kəsb edir və digər tərəfdən kəmiyyətlərin molekulyar mexanizminin öyrənilməsinə köməklik edir.

Butilbutirat mürəkkəb quruluşlu mayələrə aiddir, onun molekulyar kütləsi  $M=144,21$  kq/kmol olur. O, praktikada boyayıcı maddələrin alınmasında istifadə olunur. Həmin maddənin özlülük və istilik keçirməsinin molekulyar mexanizmin öyrənilməsi və praktikada geniş istifadə olunması məqsədilə geniş temperatur və təzyiq intervalında təcrübi tədqiq edilmişdir. Dinamik özlülük əmsalı Y.F. Qolubeyev (v-variant) metodu ilə istilik keçirmə əmsalı ilə silindrik bikalorimetr üsulu ilə 297-499 temperatur 1-491 bar təzyiq intervalında təcrübi

tədqiq edilmişdir. Alınan təcrübi nəticələrdən müəyyən edilmişdir ki, hər iki əmsal temperaturdan asılı olaraq azalır və təzyiqdən asılı olaraq isə artır. Buradan aydın olur ki, hər iki hadisələrin molekulyar mexanizmləri oxşardır. Lakin onların parametrlərdən asılılığının (P,T) dəyişməsi müxtəlifdir. Belə ki, özlülük əmsalının temperaturdan asılı olaraq dəyişməsi eksponensial qanunla, istilikkeçirmə əmsalının temperatur asılılığı isə zəif azalır. Təzyiqdən asılı olaraq artmaları xətti qanuna tabedir. Buradan aydın olur ki, özlülüynün molekulyar translyasiya qaydasında bir oruraqlıq vəziyyətindən digərinə keçməsi nəticəsində yaranır. Yəni Frenkel Eyrinqin aktivatsiya nəzəriyyəsinə tabe olur, keyfiyyət baxımından düzgün təsvir olunur. Bu aşağı temperaturlarda özünü daha yaxşı göstərir [1].

### Dinamik özlülük $\eta.Pa \cdot s$

T,K	297,41	325,42	358,66	373,16	405,16	439,16	46766
P,MPa							
0,1	954	651	456	396	299	-	-
5,0	1024	695	489	420	323	245	200
10,0	1099	744	614	440	352	256	211
20,0	1253	636	555	484	380	275	241
30,0	1390	930	607	531	490	309	263
40,0	1509	1719	704	628	499	373	319

Butilbutiratın dinamik özlülüynünün təzyiqdən asılılığı təklif olunmuş düsturla ifadə olunmuşdur. Müxtəlif təzyiq və temperaturlarda dinamik özlülük əmsalının ölçmə intervalında düz xətt verdiyindən, alarıq [2]:

$$\eta_{P,T} = \eta_T + \left( \frac{\partial \eta}{\partial P} \right)_t^{ort} (P - P_0)$$

$\eta_{P,T}$  - müxtəlif təzyiq və temperaturlardan dinamik özlülük əmsalı,  $\eta_T$  - atmosfer təzyiqində

T-yə uyğun özlülük əmsalı,  $\left( \frac{\partial \eta}{\partial P} \right)_t^{ort}$  - orta barik düzəlişidir.

$\left( \frac{\partial \eta}{\partial P} \right)_t^{ort} = b_0 + b_1 T + b_2 T^2 + b_3 T^3$  şəklində hesablanır. b-əmsalları EHM köməyi ən kiçik kvadratlar üsulundan istifadə edilərək təyin olunur. Butilbutirat üçün temperaturdan asılı olaraq  $\left( \frac{\partial \eta}{\partial P} \right)_t^{ort}$  qiymətləri cədvəldə verilmişdir.

T	$\left( \frac{\partial \eta}{\partial P} \right)_t^{ort}$	T	$\left( \frac{\partial \eta}{\partial P} \right)_t^{ort}$
297,41	14,6	405,16	5,35
325,42	9,4	439,16	3,31
358,66	5,86	467,66	2,61
373,16	5,44	499,06	2,55

Cədvəldən görünür ki,  $\left( \frac{\partial \eta}{\partial P} \right)_t^{ort}$  -ni temperaturdan asılı olaraq azalır. Yəni izotermlərdə  $\eta$  -nın P-dən asılılığının dəyişməsi azalır.

### ƏDƏBİYYAT

1. E.Ə.Eyvazov Molekulyar köçürmə hadisələri. Bakı 2013. s.93-108
2. Риди Щервуд Свойства газов и жидкостей изд. и.л. химия 1972 .с.412

