

III BÖLMƏ

MOLEKULAR FİZİKA BİOLOJİ SİSTEMLƏR FİZİKASI

UZUNUNA MAQNIT SAHƏSINDƏ YERLƏŞDIRILMIŞ QAZ BOŞALMASI PLAZMASI RƏQSLƏRİNİN TƏDQIQI

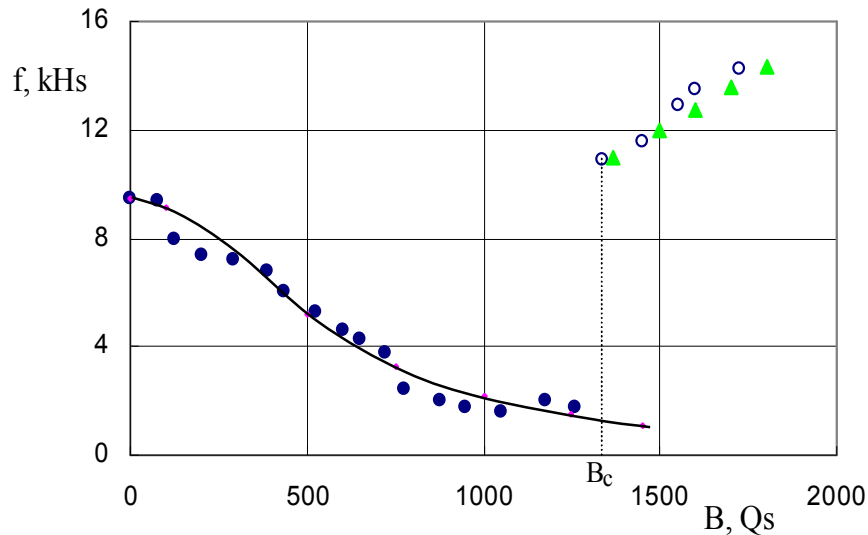
Qəribov Q. İ.

Bakı Dövlət Universiteti Fizika Problemləri İnstitutu

Məlumdur ki, qaz boşalması plazması müxtəlif növ dayanıqsızlıqlarla zəngin olan mühitdir. Bu dayanıqsızlıqlar sırasında stratlar xüsusi yer tutur. Belə ki, boşalmada təbii stratlar sütunda heç bir xarici periodik həyəcanlaşdırıcı mənbə olmadan yaranırlar. Plazmanın makroskopik dayanıqsızlıqlarından olan vint dayanıqsızlığı isə maqnit sahəsinin təsiri ilə yaranır. Vint dayanıqsızlığı və sütunda stratların yaranması hadisələri yüklü zərrəciklərin diffuziyası ilə birbaşa bağlı olduqları üçün onların birlikdə öyrənilməsi müəyyən maraq doğurur. Təqdim olunan işdə qaçan stratlarla həyəcanlanmış plazmanın vint dayanıqsızlığı öyrənilir və vint və strat rəqslərinin təcrübi tədqiqinin nəticələri nəzəri hesablamalarla müqayisə edilir.

Tədqiqat neon qazında yaradılmış boşalmanın müsbət sütununda maqnit sahəsinin 0–3000 Qs və boşalma cərəyanı şiddətinin 20 –300 mA intervalında aparılmışdır. Təcrübələrdə uzunluğu 1 m və daxili diametri 3,2 sm olan boşalma borusundan istifadə edilmişdir. İşçi qazın təzyiqi 0,1 –1,0 mm cv. st. intervalında dəyişdirilmişdir. Plazma sütununun rəqs spektrini öyrənmək üçün spektr analizatorundan və fotoçoxaldıcıdan istifadə olunub. Ölçmələrin bir hissəsində plazma rəqslərinin ötürücüsü kimi plazmada yerləşdirilmiş elektrik zondlarından istifadə edilmişdir. Maqnit sahəsində ölçmələrdən əvvəl zond üsulu ilə plazmanın əsas parametrlərindən elektronların T_e temperaturu və n_e konsentrasiyası təyin olunub və bu kəmiyyətlərin ədəbiyyatdan məlum olan nəticələrlə uyğunluğu müəyyən edilib.

Təsvir olunan təcrübələrdə boşalma şəraiti elə seçilib ki, maqnit sahəsinin təsirinə qədər plazmada qaçan stratlar mövcud olub. Maqnit sahəsinin təsir etdiyi sütunda stratlar sahənin vint dayanıqsızlığının yaranmasına uyğun olan B_c kritik qiymətinə qədər mövcud olurlar. Maqnit sahəsinin təsiri ilə stratların tezliyi monoton olaraq azlır. Şəkildə neonun təzyiqinin 0,45 mm cv. st. və boşalma cərəyanı şiddətinin 100 mA qiymətində alınmış nəticələr təsvir olunub.



Strat və vint rəqsləri tezliklərinin maqnit sahəsinin induksiyaşından asılılığı.

•••• — strat rəqsləri. Bütöv xətt —stratların tezliyinin hesablanmış asılılığı.

○○○○ — vint rəqsləri. ▲▲▲ —vint rəqsləri tezliyinin hesablanmış asılılığı.

Yüklü zərrəciklərin boşalma borusunun divarlarında rekombinasiyası ilə tənzim olunan proseslər üçün xarakterik zaman ölçüsü yüklü zərrəciklərin τ_D diffuziya yaşama müddətidir. R

radiuslu silindrik boşalma borusu üçün τ_D kəmiyyəti

$$\tau_D = \left(\frac{R}{2,4} \right)^2 \cdot \frac{1}{D_a} \quad (1)$$

düsturu ilə ifadə olunur. Burada D_a –ambipolyar diffuziya əmsalındır. Deməli, stratların f_s xarakterik tezliyi üçün

$$f_s = \frac{1}{\tau_D} = \left(\frac{2,4}{R} \right)^2 \cdot D_a \quad (2)$$

alırıq.

Bu münasibətdən görünür ki, maqnit sahəsində stratların tezliyinin azalması ambipolyar diffuziya əmsalının azalması ilə mütənasibdir. D_a kəmiyyətinin maqnit sahəsində dəyişməsi $[1+(b_i/b_e) \cdot (\Omega\tau_e)^2]^{-1}$ vuruğu ilə müəyyən olunur. Burada b_i , b_e – ion və elektronların yürüklüyü, Ω –elektronların tsiklotron tezliyidir. Stratların tezliyinin bu düstura əsasən aparılan hesablamaların nəticələri şəkildə bütöv xətlə göstərilib. Göründüyü kimi, bu əyri təcrübədə alınmış asılılığa kifayət qədər yaxındır.

Maqnit sahəsinin müəyyən $B=B_c$ qiymətində plazma sütunu vint dayanıqsızlığı halına keçir, plazma yüklü zərrəciklərinin maqnit qüvvə xətlərinə perpendikulyar istiqamətdə boşalma borusunun divarına diffuziyası güclənir və plazmada müntəzəm vint rəqsləri yaranır. Ölçmələr göstərir ki, bu rəqslərin tezliyi qazın təzyiqindən asılı olaraq 10–50 kHs arasında yerləşir və təzyiq artdqda rəqslərin tezliyi azalır. Vint rəqslərinin yaranması ilə stratların amplitudu kəskin azalır, spektri genişlənir və nəhayət stratlar sönürlər.

Maqnit sahəsinin $B=B_c$ qiymətində vint rəqslərinin tezliyi

$$f_c \approx \frac{10 \text{ kmc}}{e^2 R^2} \frac{b_i T_e}{B_c \tau_e} \quad (3)$$

ifadəsi ilə təyin olunur. Burada $\frac{1}{\tau_e}$ –elektronun neytral zərrəciklərlə toqquşma tezliyi, digər

simvollar kəmiyyətlərin ümumi qəbul olunmuş işarələridir. Şəkildən göründüyü kimi, sahənin B_c kritik qiymətindən böyük ($B>B_c$) olan oblastda maqnit sahəsinin artması ilə vint rəqslərinin tezliyi artır. Təcrübə asılılığın bu xarakteri (1) düsturuna uyğun gəlmir. Uyğunsuzluğun səbəbini düsturun təqribi olması ilə izah etmək olar. Dəqiqləşdirilmiş hesablamalar vint rəqslərinin tezliyi üçün

$$f = \frac{\omega}{2\pi} \approx \frac{kT_e}{e} \left[4,2 \frac{b_i}{R^2} \frac{1}{(\Omega\tau_e)} - 2,8 \frac{b_i}{R^2} S \sin \delta + 0,48 b_i K^2 \cdot (\Omega\tau_e) \right] \quad (4)$$

ifadəsini verir. Burada K – dalğa ədədi, S – həyəcanlanmaların amplitudu tərtibli kiçik kəmiyyət, δ –vint dayanıqsızlığında elektronların konsentrasiyasının və potensialın rəqsləri arasında faza sürüşməsidir. $S \cdot \sin \delta$ hasilini kiçik kəmiyyət olduğundan $f(B)$ funksiyasının vidi $\frac{1}{(\Omega\tau_e)}$ və $(\Omega\tau_e)$ hədlərinin əmsallarından və f tezliyinin təyin edildiyi maqnit sahəsinin

intervalından asılıdır. Vint rəqslərinin tezliyinin (4) düsturuna əsasən maqnit sahəsinin $B>B_c$ oblastında sahədən asılılığının hesablanmış qiymətləri şəkildə göstərilib. Bu nəticələrin tezliyin təcrübədən təyin edilmiş qiymətləri ilə müqayisəsi onlar arasında yaxşı yaxınlıq olduğunu göstərir. Hesablamalarda $K = \frac{2\pi}{\lambda}$ – nin qiymətini 10^{-1} sm^{-1} qəbul etmiş və elektron

qazının T_e temperaturu olaraq onun təcrübədə maqnit sahəsi olmadıqda ölçülmüş qiymətlərini götürmüşük. $S \cdot \sin \delta$ kəmiyyətinin qiyməti məlum olmadığından onu aşağıdakı kimi təyin etmişik. (4) ifadəsində f – in yerinə tezliyin $B=B_c$ nöqtəsində ölçülmüş qiymətini yazıb, məlum T_e və $(\Omega\tau_e)$ – yə görə $S \cdot \sin \delta$ təyin etmişik. Şəkildən göründüyü kimi, hesablamaların nəticələri eksperimentlə nəinki keyfiyyətə, həm də kəmiyyətə yaxşı uzlaşır.

**PRO-MET-SER-MET VƏ MET-LEU-ARG-LEU-NH₂ TETRAPEPTID
FRAQMENTLƏRİNİN KONFORMASIYA ANALIZI**

N.A.Əhmədov, R.M.Abbashı, L.İ.İsmayılova, E.M.Həsənov
Bakı Dövlət Universiteti, Fizika Problemləri İnstitutu

Maymodulin sensor neyronlarının elektrofizioloji effektlərini ingibirləşdirən neuropeptid molekullarındandır. Onların yerinə yetirdikləri funksiyaları başa düşmək üçün, onlara məqsədyönlü təsir göstərmək üçün, təbii molekulun yalnız müəyyən funksiyalarını özündə saxlayan süni analoqlarını sintez etmək üçün ilk növbədə peptid molekullarının üçölçülü fəza quruluşunu müəyyən etmək lazımdır. Biomolekulların fəza quruluşlarını tədqiq etmək üçün istifadə edilən üsullardan biri də nəzəri konformasiya analizi üsuludur. Nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə heptapeptid Pro1-Met2-Ser3-Met4-Leu5-Arg6-Leu7-NH₂ molekulunun fəza quruluşu onu fraqmentlərə ayırmaqla öyrənilmişdir. Bu tədqiqat işi heptapeptid maymodulin molekulunun N-tərəf tetrapeptid Pro1-Met2-Ser3-Met4 və C-tərəf tetrapeptid Met4-Leu5-Arg6-Leu7-NH₂ fraqmentlərinin konformasiya imkanlarının öyrənilməsinə həsr olunmuşdur [1].

Molekulun fəza quruluşunu öyrənmək üçün sistemin potensial enerjisi qeyri-valent, elektrostatik, torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinin və hidrogen rabitəsi enerjisinin cəmi şəklində secilmişdir. Qeyri-valent qarşılıqlı təsir enerjisi Lennard-Cons potensialı ilə Momani və Şeraqanın təklif etdiyi parametrlərlə hesablanmışdır. Molekulun konformasiya imkanları su mühitində öyrənilmişdir. Hidrogen rabitəsinin enerjisi Morze potensialı ilə hesablanmışdır. Torsion qarşılıqlı təsiri hesablamaq üçün potensial funksiyalar, atomlardakı parsial yüklərin qiymətləri, valent bucaqlarının qiymətləri və valent rabitələrinin uzunluqları Momani və Şeraqanın məqaləsindən götürülmüşdür. Bunlar haqqında [2-5] işlərində ətraflı məlumat verilmişdir.

Cədvəl 1

Pro-Met-Ser-Met və Met-Leu-Arg-Leu-NH₂ fragmentlərinin konformasiyalarının enerjilərinə görə paylanması

Pro-Met-Ser-Met fragmenti							Met-Leu-Arg-Leu-NH ₂ fragmenti				
№	Əsas zəncirin forması	Enerji intervalı (kkal/mol)					Enerji intervalı (kkal/mol)				
		0-1	1-2	2-3	3-4	4>	0-1	0-2	0-3	0-4	4>
1	BBBB	-	-	-	1	62	-	-	-	1	35
2	RRRR	4	1	2	6	50	-	1	1	3	31
3	BBRR	-	-	-	-	36	-	-	-	2	7
4	BRRR	-	-	-	--	36	-	5	2	2	9
5	BRBR	-	-	-	-	36	3	1	4	4	6
6	RBBB	-	-	1	1	34	-	6	4	3	5
7	RRBR	-	-	-	-	36	-	4	4	-	10
8	RBRR	-	-	-	2	34	1	4	2	1	1

Pro1-Met2-Ser3-Met4 tetrapeptid fraqmentinin fəza quruluşu onu əmələ gətirən metilamid-N-asetil-L-prolin, L-metionin və L-serinin alçaqenerjili konformasiyaları əsasında öyrənilmişdir. Əsas zəncirin R və B formalarının konformasiyaları torsion potensiala görə mümkün ola bilən bütün kombinasiyalarda hesablanmışdır. Hesablanmış konformasiyaların əsas zəncirin müxtəlif formalarında enerjilərinə görə paylanması cədvəl 1-də göstərilmişdir.

Cədvəl 1-dən görünür ki, əsas zəncirin formalarının enerjilərinə görə kəskin diferensiasiya gedir. 0-4,0 kkal/mol enerji intervalına əsas zəncirin dörd formasının konformasiyaları düşür. Bu enerji intervalına əsas zəncirin RRRR formasının 13 konformasiyası, RBBB və RBRR formalarının 2 konformasiyası, BBBB formasının isə 1 konformasiyası düşür. Pro1-Met4 fraqmentində Pro1-in yan zəncirinin dövrü, Ser3-ün yan zəncirinin kiçik olması, Met2 və Met4-ün yan zəncirləri özlərinin potensial imkanlarından həmişə istifadə edə bilməmişdir ki, bu da əsas zəncirin formalarının enerjilərinə kəskin diferensiasiyanın getməsinə səbəb olmuşdur.

Met4-Leu5-Arg6-Leu7-NH₂ tetrapeptid fraqmentinin fəza quruluşu onu əmələ gətirən metil-amid-N-asetil-L-metionin, L-arginin və L-leysin stabil konformasiyaları əsasında öyrənilmişdir. Hesablanmış konformasiyaların əsas zəncirin müxtəlif formalarında enerjilərinə görə paylanması cədvəl 1-də göstərilmişdir. Cədvəl 1-dən görünür ki, əsas zəncirin formalarının enerjilərinə görə diferensiasiya getmir. 0-4,0 kkal/mol enerji intervalına əsas zəncirin bütün səkkiz formasının konformasiyaları düşür. Tetrapeptid fraqmentə çoxatomlu, yüklənmiş yan zəncirli aminturşu qalıqları daxil olduğu üçün əsas zəncirin bütün formalarında müxtəlif aminturşu qalıqları arasında əlverişli qarşılıqlı təsirlər yaranır. Buna görə də bütün formaların konformasiyaları alçaqenerjili olmuşlar.

Pro1-Met4 və Met4-Leu7-NH₂ tetrapeptid fraqmentlərinin stabil konformasiyaların müəyyən edilməsi tərkibinə bu fraqmentlərin daxil olduğu heptapeptid molekulun fəza quruluşunu hesablamağa imkan verir.

ƏDƏBİYYAT

1. Tobin A.E., Calabrese R.L.//J.Neurophysiol.-2006, V.94, №6, P.3938-3950
2. Akhmedov N.A., Tagiyev Z.H., Hasanov E.M., Akverdieva G.A. J.Molecular Structure, 2003, V.646, p.75-80
3. Ахмедов Н.А., Исмаилова Л.И., Аббаслы Р.М., Ахмедов Н.Ф., Годжаев Н.М. //Биооргани.химия. 2005, Т.31, №1, С.31-38.
4. Исмаилова Л.И., Ахмедов Н.А., Аббаслы Р.М., Годжаев Н.М. //Биооргани.химия. 2005, Т.31, №2, С.140-146.
5. Исмаилова Л.И., Ахмедов Н.А., Аббаслы Р.М. //Биофизика, 2008, Т.53, Вып.1, С.14-21.

ДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГЕПТАПЕПТИДНОЙ МОЛЕКУЛЫ

Т.И.Исмаилова, Р.М.Аббаслы, Л.И.Исмаилова

Бакинский Государственный Университет, Институт Физических Проблем

На сегодняшний день одной из самых важных задач на стыке физики, биологии и химии является определение особенностей функционирования биомолекул в живых организмах. Понимание и использование этих механизмов взаимодействия на молекулярном уровне составляют основу нанонауки. Отсюда важность исследований взаимосвязи пространственной структуры пептидных молекул и их функциональной активности. Регуляторные пептидные молекулы принимают участие во всех известных биологических процессах, протекающих в организме человека, и не имеют конкурентов по эффективности действия. В связи с этим перспективным становится создание новых эффективных лекарственных препаратов на их основе.

Гептапептидную молекулу Семакс Met1-Glu2-His3-Phe4-Pro5-Gly6-Pro7 называют лекарством XXI века, улучшающим память и умственные способности человека [1,2]. Ярко выраженное нейропротекторное и ноотропное действие синтетического гептапептида лежит в основе препаратов, которые на сегодняшний

день широко применяются в неврологической и офтальмологической практике [3]. Экспериментальные исследования показали, что Семакс является эндогенным регулятором функций центральной нервной системы, обладает адаптивным и ноотропным эффектом. В больших дозах он защищает нервные клетки от гибели в условиях нервного стресса. Высокая протеолитическая устойчивость Семакса и его фрагментов может лежать в основе пролонгированных эффектов этого пептида. Показана важная роль N-концевого аминокислотного остатка в молекуле Семакса в сохранении и выраженности нейротропных эффектов пептида.

Для выяснения механизма действия пептидной молекулы необходимо знание ее пространственного строения и структуры ее аналогов, знание конформационной подвижности боковых цепей аминокислот, входящих в эту молекулу. Особый интерес представляет молекулярная динамика гептапептидной молекулы. На первом этапе с помощью метода теоретического конформационного анализа была исследована пространственная структура и конформационные свойства боковых цепей аминокислотных остатков, входящих в гептапептидную молекулу Met1-Glu2-His3-Phe4-Pro5-Gly6-Pro7 [4]. Расчет проводился в рамках механической модели молекул с учетом невалентных, электростатических и торсионных взаимодействий и энергии водородных связей. Для молекулы Семакса были найдены низкоэнергетические конформации, значения двугранных углов основной и боковых цепей аминокислот, входящих в нее (табл.1).

Таблица 1. Геометрические параметры конформаций молекулы Семакс

Углы	BRRBBLB	BRRBBPR	RRRBRRR	BRRBRLR	RRRBRRB
φ_1	-177	-178	-163	-177	-161
χ^1_1	177	-172	-179	180	-172
χ^1_2	179	-73	59	-71	-179
χ^1_3	176	176	179	177	176
χ^1_4	180	180	180	178	180
ψ_1	124	120	-58	120	-51
ω_1	-179	-174	-178	-178	180
φ_2	-114	-105	-77	-117	-74
χ^2_1	-66	-73	-60	-66	-75
χ^2_2	69	66	-75	69	62
χ^2_3	58	66	80	58	59
ψ_2	-64	-67	-46	-72	-50
ω_2	179	-160	-179	-179	-176
φ_3	-117	-126	-105	-106	-117
χ^3_1	178	176	177	61	-174
χ^3_2	90	-93	-86	91	96
ψ_3	-58	-54	-54	-45	-54
ω_3	179	176	-178	-178	-177
φ_4	-92	-110	-87	-96	-92
χ^4_1	180	71	-59	177	-60
χ^4_2	86	94	95	71	97
ψ_4	131	144	131	119	140
ω_4	177	-171	-178	-178	169
ψ_5	111	143	-52	-64	-59
ω_5	-174	180	170	-173	173
φ_6	71	145	-77	70	-126
ψ_6	71	-75	-81	73	85
ω_6	-178	179	173	177	-178
ψ_7	133	-52	-44	-53	135
Еотн	0	0,9	2,3	4,4	4,3

Динамические свойства гептапептидной молекулы были изучены методом молекулярной динамики. Для проведения расчетов использовалась демонстрационная версия программы HyperChem, доступная на сайте [5]. Расчеты проводились при

условии, что исследуемая молекула находится в вакууме. Геометрия низкоэнергетических конформаций гептапептидной молекулы (Табл.1) использовалась в качестве начальной для молекулярно-динамического расчета, который проводился в потенциалах полуэмпирического метода ММ⁺ без учета симметрии. Оптимизация геометрии молекулы проводилась с параметром сходимости 0,01 (рис.1,2).

Метод молекулярной динамики дает возможность моделировать детальную микроскопическую картину внутренней подвижности пептидной молекулы. Он позволяет рассчитывать классические траектории движения пептидной молекулы в силовом поле эмпирического атом-атомного потенциала.

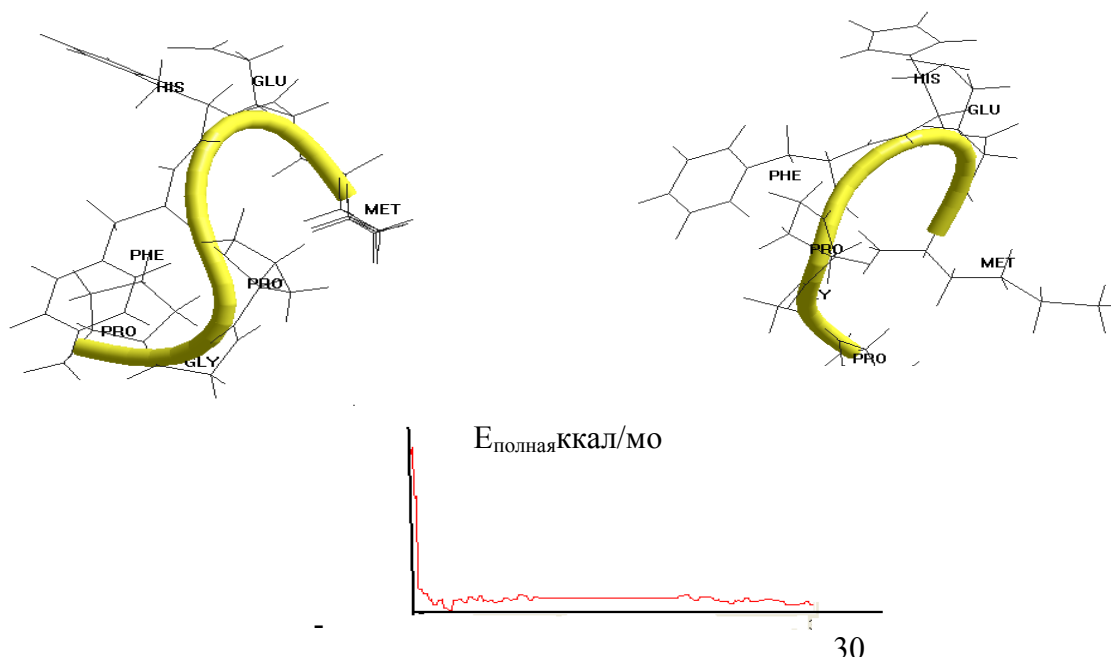


Рис1. Конформационные перестройки в структуре BRRBVLV молекулы Семакс в процессе молекулярной динамики

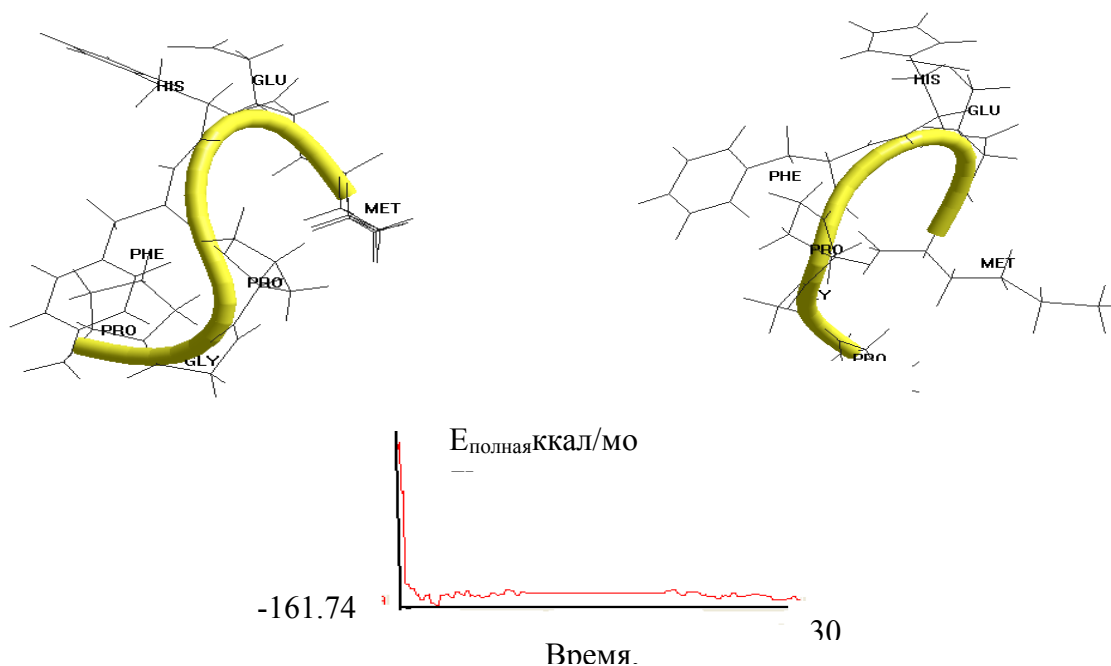


Рис. 2 Конформационные перестройки в структуре BRRBVRP молекулы Семакс в процессе молекулярной динамики

ЛИТЕРАТУРА

1. Kaplan A.Ya., Kochetova A.G., Nezavibatko V.N., Rjasina T.V., Ashmarin I.P. Neurosci. Commun., 1996, V.19, P.115-123
2. Гривенников И.А., Долотов О.В., Гольдина Ю.И. Молекулярная биология, 1999, Т.33, С. 120-126
3. Долотов О.В., Золотарёв Ю.А., Дорохова Е.М., Андреева Л.А. Алфеева Л.Ю., Гривенников И.А., Мясоедов Н.Ф. Биоорганическая химия, 2004, Т. 30, N 3, С.241-246
4. Исмаилова Т.И. Journal of Qafqaz University, 2007, N 19, P. 61-69
5. <http://www.hyper.com>

SER-VAL-GLN-ASP-ASN PENTAPEPTID FRAQMENTININ KONFORMASIYA ANALIZI

Ş.N. Hacıyeva, N.F. Əhmədov, N.A. Əhmədov
Bakı Dövlət Universiteti, Fizika Problemləri İnstitutu

Peptid hormonları canlı orqanizmlərdə müxtəlif bioloji funksiyaları başa düşmək üçün molekulların üçölçülü fəza quruluşlarını atom səviyyəsində təyin etmək lazımdır.

Kardiofəal peptidlər əsasən orqanizmlərin ürək fəaliyyətinin düzgün rejimini tənzimləyir. Bir çox orqanizmlərdən kardiofəal peptidlər ayrılmış, onların analoqları sintez edilmiş, yerinə yetirdikləri funksiyaları öyrənilmişdir [1-3].

Ser1-Val2-Gln3-Asp4-Asn5-Phe6-Met7-His8-Phe9-NH₂ molekulunun fəza quruluşu onu fraqmentlərə ayırmaqla öyrənilmişdir. İlk mərhələdə molekulun N-tərəf pentapeptid Ser1-Val2-Gln3-Asp4-Asn5 fraqmentinin fəza quruluşu hesablanmışdır.

Kardiofəal peptidlər fəsiləsinə daxil olan peptidlərin quruluş-funksiya əlaqələri bir neçə müddətdir ki, tədqiq olunur və bu iş də həmin işlərin davamıdır [4-6].

Molekulun fəza quruluşunu öyrənmək üçün sistemin potensial enerjisi qeyri-valent, elektrostatik, torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinin və hidrogen rabitəsi enerjisinin cəmi şəklində seçilmişdir. Qeyri-valent qarşılıqlı təsir enerjisi Lennard-Cons potensialı ilə Mōmani və Şeraqanın təklif etdiyi parametrlərlə hesablanmışdır. Torsion qarşılıqlı təsiri hesablamaq üçün potensial funksiyalar, atomlardakı parsial yüklərin qiymətləri, valent bucaqların qiymətləri və valent rabitələrinin uzunluqları Mōmani və Şeraqanın məqaləsindən götürülmüşdür. Bunlar haqqında [4-6] işlərində ətraflı məlumat verilmişdir.

Ser1-Val2-Gln3-Asp4-Asn5 pentapeptid fraqmentinin fəza quruluşu onu əmələ gətirən metil-amid-N-asetil-L-serin, L-valin, L-qlutamin, L-asparagin və L-asparagin turşusunun stabil konformasiyaları əsasında öyrənilmişdir. Ona görə də pentapeptid fraqmentin 16 şeypinə mənsub konformasiyalar yığılı hesablanmışdır. Hesablamaların nəticəsi göstərdi ki, 0-10 kkal/mol enerji intervalına əsas zəncirin 15 formalarının konformasiyaları düşür. Əsas zəncirin hər bir formasının ən stabil konformasiyası, onu qeyri-valent, elektrostatik, torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinin verdikləri pay və nisbi enerjiləri cədvəl 1-də verilmişdir.

Cədvəl 1.

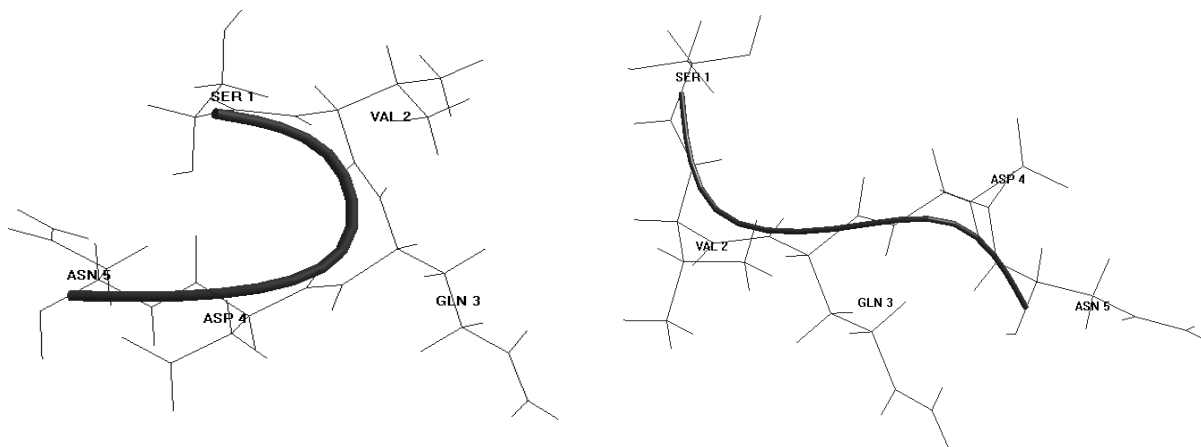
Ser-Val-Gln-Asp-Asn fraqmentinin stabil konformasiyaları

№	Konforasiya	U _n	Enerji payı		
			U _{q.v}	U _{el}	U _t
1	R ₁₂ R ₂ R ₃₂₁ B ₁ B ₃₁	0	-20.8	2.9	2.6
2	R ₁₂ R ₂ B ₁₃₁ R ₁ R ₃₁	3.3	-19.4	4.8	2.6
3	R ₁₂ R ₁₁ B ₁₃₁ B ₃ B ₃₁	3.4	-20.2	4.1	4.2
4	R ₁₂ R ₂ R ₁₂₁ R ₂₁ B ₂₁	3.4	-16.9	3.3	1.7
5	B ₁₂ R ₂ R ₂₁₁ R ₂ R ₂₁	3.9	-17.1	3.9	1.7

6	$R_{12}B_2B_{121}B_1B_{31}$	4.1	-19.4	4.9	3.3
7	$R_{12}B_{22}R_{131}R_1R_{31}$	4.2	-19.4	5.6	2.7
8	$R_{12}B_2R_{331}B_1B_{31}$	4.3	-18.6	5.2	2.3
9	$B_{23}R_{11}B_{211}B_3B_{31}$	4.5	-17.9	5.2	2.0
10	$R_{12}B_2R_{131}R_1R_{31}$	4.9	-18.7	5.3	2.9
11	$R_{12}B_2B_{131}B_3B_3R_{31}$	5.6	-18.2	5.8	2.7
12	$B_2R_{33}B_{211}R_3R_{31}$	5.6	-17.7	4.0	3.9
13	$B_{32}B_{21}B_{122}B_3B_{31}$	6.2	-16.4	5.4	1.9
14	$B_{21}B_{21}R_{311}B_3B_{31}$	6.9	-16.9	6.4	2.1
15	$B_{12}B_2R_{211}R_3R_{31}$	7.7	-13.5	5.7	1.3

Cədvəl 1-dən görüldüyü kimi hesablanmış konformasiyaların nisbi enerjiləri 0-7.7 kkal/mol enerji intervalında dəyişir. Fraqmentin ən stabil konformasiyası $R_{12}R_2R_{321}B_1B_{31}$ – dir. Bu konformasiya həm qeyri-valent, həm də elektrostatik qarşılıqlı təsirə görə ən əlverişlidir. Konformasiyanın stabilləşməsinə qeyri-valent qarşılıqlı təsir enerjisi -20.8 kkal/mol, elektrostatik qarşılıqlı təsir enerjisi 2.9 kkal/mol, torsion qarşılıqlı təsir enerjisi 2.6 kkal/mol qədər pay verir (cədvəl 1). Fraqmentin aminturşu qalıqlarının fəzada yerləşməsi şəkil 1-də göstərilmişdir. Bu konformasiyada fraqmentin ilk üç aminturşu qalığı fəzada spiralvari fırlanmış halda, sonrakı iki aminturşu qalığı isə açılmış halda yerləşir. Pentapeptid fraqmentin ikinci stabil konformasiyası nisbi enerjisi 3.3 kkal/mol olan $R_{12}R_2B_{131}R_1R_{31}$. Bu konformasiya həm qeyri-valent, həm də elektrostatik qarşılıqlı təsirə görə qlobal konformasiyadan geri qalır (cədvəl1). Konformasiyada aminturşu qalıqlarının fəzada yerləşməsi şəkil 1-də göstərilmişdir. Fraqmentin ilk iki aminturşu qalıqları fəzada spiralvari fırlanmış halda yerləşir, mərkəzi aminturşu qalığı Gln3 isə B konformasiyasında olaraq onları bir-birindən ayırır. Hesablanmış konformasiyaların ən yüksək enerjisi $BB_2RR_3R_{31}$ –dir.

Ser-Val-Gln-Asp-Asn fraqmentinin konformasiyalarının hesablanması tərkibinə belə fraqment daxil olan nonapeptid molekulun fəza quruluşunun öyrənilməsinə asanlaşdırır.



Şəkil 1.a) $R_{12}R_2R_{321}B_1B_{31}$ konformasiyasının fəza quruluşu b) $R_{12}R_2B_{131}R_1R_{31}$ konformasiyasının fəza quruluşu

ƏDƏBİYYAT

1. Cazzamali G., Cornelis J.P. Grimmelikhuijzen //Proc.Natl.Acad.Sci USA., 2002, v99(19), p.12073-12078
2. Johnson et.al.// J. Insect Physiol., 2000, v46(8), p.1229-1234
3. Hewes et.al.// J. Neurosci, 1998, v.18(18), p.7138-7151
4. Akhmedov N.A., Tagiyev Z.H., Hasanov E.M., Akhverdiyeva G.A. //J.Molecular Structure, 2003, v.646, p.75-80
5. Ахмедов Н.А., Исмаилова Л.И., Аббаслы Р.М., Ахмедов Н.Ф., Годжаев Н.М. //Биоорган. Химия, 2005, т.31, вып.1, с.31-38
6. Исмаилова Л.И., Ахмедов Н.Ф., Аббаслы Р.М.//Биофизика, 2008, т.53, вып.1, с.14-21

**NOQISEPTİN MOLEKULUNUN C-SONLUQLU Gly-Glu-Lys-Glu-Leu-Glu
FRAQMENTİNİN KONFORMASIYA XÜSUSIYYƏTLƏRİ.**

S.H. Abbasov, R.E. Əliyev

Bakı Dövlət Universiteti, Optika və molekulyar fizika kafedrası

Noqiseptin reseptoru da opioid təbiətli neyropeptid olub, 17 amin turşusundan ibarətdir. [1]. Bu neyropeptidin C-uclu heqsapeptid fragmenti Gly-Glu-Lys-Gln-Leu-Glu xətti ardıcılığa malik olub, digər opioid təbiətli noqstatin molekulundan məhz 1-ci yerdə duran Glu amin turşusunun Gly amin turşusu ilə əvəz olunması ilə fərqlənir. Ona görə də ilk öncə noqiseptin reseptorunun heqsapeptid fraqmenti hesablanmış və alınan nəticələr noqstatin molekulunun nəticələri ilə müqayisə edilmişdir. Hesablamalar əvvəlcə nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə aparılmışdır. Bu üsulun əsasında ixtiyari molekulun ikiüzlü bucaqlar ətrafında fırlanması nəticəsində molekul daxili enerjinin minimizasiyası prosesi durur. Hesablamaları aparmaq üçün reseptorun noqiseptin reseptorunun C-uclu fraqmentinin fəzada tuta biləcəyi bütün mümkün hallar nəzərə alınmış və ilkin olaraq 651 variant yığılmışdır [2,3].

Cədvəl 1. Noqiseptin reseptorunun C-uclu fraqmentinin enerji parametrlərinin 30 pikosaniyə ərzində dəyişmə qiymətləri.

Pikosaniyə	Epot (kkal/mol)	Etam (kkal/mol)
1	632.0599	1005.049
2	625.9721	976.1203
3	431.8269	653.3779
4	231.861	442.5247
5	137.16545	232.4365
6	84.8233	121.5762
7	52.2740	118.4667
8	44.4303	105.9379
9	37.25979	914.9416
10	33.6531	141.3507
11	28.74237	132.8091
12	40.8646	131.4167
13	30.60472	127.2562
14	26.8445	126.8157
15	35.00636	127.4275
16	33.58161	128.7545
17	36.12380	127.2518
18	23.37873	122.6573
19	12.78990	121.3767
20	-2.95827	111.987
21	-2.866218	104.0099
22	-8.1089	80.4781
23	-11.2576	86.8192

24	-10.7172	78.6785
25	-27.6279	69.3124
26	-41.2710	62.3862
27	-26.3459	60.48254
28	-20.4637	64.7321
29	-21.613	67.9450
30	-43.989	42.19856

Bu konformasiyaların enerji və həndəsi parametrləri müəyyən edilmişdir. Yalnız bundan sonra alınan kiçikenerjili konformasiyalar molekulyar dinamika üsulu ilə vakuumda və su mühitində tədqiq edilmiş və nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə alınan nəticələr dəqiqləşdirilmişdir. Bunun üçün proqrama ikiüzlü bucaqların ilkin qiymətləri olaraq nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə tapılmış kiçikenerjili konformasiyaların qiymətlərindən istifadə edilmişdir. Ardıcıl olaraq noqiseptin reseptorunun C-uclu fraqmentinin həm vakuumda, həm də suda dayanıqlı hallarının tədqiqi aparılmış və temperatur intervalı (270 - 300⁰)k götürülmüşdür. [3]

Otuz pikosaniyə müddətində istilik enerjisinin aldığı 15.000 qiymət hesabına alınan nəticələrə görə aşağıdakılar aşkarlanmışdır:

– Reseptorun C-sonluqlu heqsapeptid fraqmentinin optimizasiyadan əvvəlki və sonrakı fəza quruluşları tam fərqlənir; belə ki, optimizasiyadan əvvəl Gly1 amin turşusu ilə Glu amin turşusunun yan zəncirləri bir-birindən aralıdırlar. Lakin, optimizasiyadan sonra onlar bir-birinə yaxınlaşaraq daha kompakt quruluş yaradırlar. [4].

– Çoxsaylı hesablamalara ki, cəmi 30 pikosaniyə ərzində həm potensial, həm də tam enerji özlərinin ən minimal qiymətlərini almış olurlar. Birinci pikosaniyədəki 633..06 kkal/mol əvəzinə Erot = -43.989 kkal/mol və 1005 kkal/mol əvəzinə Etam = 42.19 kkal/mol. Aparılan tədqiqatlar göstərir ki, məhz bu vaxt kifayət edir ki, molekul fəzada özünün tam dayanıqlı vəziyyətini almış olsun.

ƏDƏBİYYAT

1. E.O. Ashitaka, T.Minami, S.Ito Paint transmission regulated by novel neuropeptides nocistatin and nociseptin/orphanin FQ// J. Biol. Macromol, 2002, V 2(1), p.3-10
2. Momamy F.A., Mc Guire R.E., Burgess A.W. Scharaga// J. Phys.Chem., 1975, V 179, no 11, p. 1371-1378
3. S/H/Abbasov, R.E. Aliyev, Noqiseptin reseptorunun C-uclu heqsapeptid fraqmentinin tədqiqi. ATU, Elmi əsərlər, fundamental elmlər, № 2, cild V (18), Bakı-2006
4. Allinger N.L., Yuh Y., MM2 program, QCPE 395, Quantum Chemistry Program Exchange, Indiana, Univ., Indiana 1982

NOQSTATIN MOLEKULUNUN N-SONLUQLU FRAQMENTİNİN KONFORMASIYA XÜSUSİYYƏTLƏRİ

S.H. Abbasov, R.E. Əliyev

Bakı Dövlət Universiteti, Optika və molekulyar fizika kafedrası

Neyropeptidlər də digər bioloji molekullar kimi öz xassələrini onların kimyəvi quruluşuna yəni, amin turşu qalıqlarının ardıcılığına əsaslanaraq biruzə verirlər. Belə ki, molekulları təşkil edən amin turşu qalıqlarının konformasiyasının öyrənilməsi həmən neyropeptidin üçölçülü fəza quruluşunun necə formalaşmasını bu işə öz növbəsində

molekulunun xassaləri ilə onun bioloji funksiyaları arasında hansı əlaqənin olmasını öyrənməyə imkan verir. [1]

Verilmiş materialda 17 amin turşusundan ibarət olan, həm insan, həm də heyvan (məs. Öküz, sışovul, siçan) orqanizmində identik olaraq rast gələ bilən neyropeptid molekulundan – noqstatindən söhbət gedir. [2,3,4]. Konkret olaraq neyropeptidin N-sonluqlu Thr-Glu-Pro-Gly-Leu pentapeptid və C-sonluqlu Glu-Glu-Lys-Glu-Leu-Glu heqsapeptid fraqmentlərinin konformasiya halları (imkanları) öyrənilmişdir. Nəzəri konformasiya analizi metodu vasitəsilə Thr-Glu-Pro-Gly-Leu pentapeptid fraqmentinin həm həndəsi, həm də energetik parametrləri hesablanmışdır. Hesablamaların nəticələri (cədvəl 1) ən kiçik enerjili konformasiyalar üçün verilmişdir. Təqdim olunan 12 kiçikenerjili konformasiyada nisbi enerji (0 – 3.8) kkal/mol intervalında dəyişir. Əsasən konformasiyaların stabilləşməsi qeyrivalent qarşılıqlı təsir enerjisinin minimumunun böyük olduğu hallarda (-17.8 kkal/mol, -17.6 kkal/mol, -17.5 kkal/mol və s.) rast gəlinir. Digər enerjilərə (məs. elektrostatik) nisbətən torsion enerjinin destabilizasiya faktoru daha azdır.

Cədvəl 1. Noqstatin molekulunun N-sonluqlu pentapeptid fraqmentinin aşağıenerjili konformasiya halları.

Konformasiya	Enerji payları kkal/mol				
	Eq.v	E el.	E tors.	E tam	E nisbi
1	-17.8	4.2	1.6	-11.9	0.0
2	-17.6	4.5	1.6	-11.5	0.4
3	-17.5	3.4	3.7	-10.4	1.6
4	-16.0	3.9	2.1	-10.1	1.8
5	-15.3	3.7	1.9	-9.7	2.2
6	-15.3	3.8	1.9	-9.6	2.3
7	-15.6	3.6	2.4	-9.6	2.3
8	-15.3	3.6	2.2	-9.5	2.4
9	-15.4	3.4	2.8	-9.2	2.7
10	-14.7	3.4	2.6	-8.8	3.2
11	-14.4	3.7	2.5	-8.1	3.8
12	-14.1	3.9	2.1	-8.1	3.8

Alınan əsas zəncirin kəskin olaraq dönməsi halları əsasən Glu-Pro-Gly olan hissələrdə rast gəlinir ki, bu da normal sayılır. Çünki bu amin turşu qalıqlarının yanaşı olduğu hissələr yəni, zəncirgə hər zaman Glutamin turşusu ikinci və Gly turşu qalığı dördüncü yerdə yerləşərkən polipeptid zəncirlərdə kəskin dönmələr müşahidə olunur. Bu xüsusiyyəti də Glutamin turşusunun yan zəncirinin (COO⁻) karboksil qrupu ilə Glysinin əsas zəncirinin NH⁺ qrupu arasında əmələ gələn hidrogen rabitəsini yaranması ilə izah etmək olar. Belə rabitənin uzunluğu 2.0⁰ Å – tərtibə qədər ola bilər.

Digər uyğun tədqiqat isə C-sonluqlu Glu-Glu-Lys-Gln-Leu-Glu anim turşu qalıqları ardıcılığı üçün aparılmışdır. Bu molekul üçün konformasiya analizi metodundan başqa həm də molekulyar dinamika üsulu tətbiq edilmişdir. Noqistatin molekulunun Glu-Glu-Lys-Gln-Leu-Glu heqsapeptid fraqmentinin fəza quruluşunun tədqiq etmək üçün ikiüzlü bucaqların ilkin qiymətləri nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə tapılmış kiçikenerjili konformasiyaların qiymətləri götürülmüşdür. [5]. Əvvəlcə noqistatin molekulunun həndəsi parametrləri optimizasiya edilmişdir. Optimizasiyadan əvvəl və sonrakı fəza quruluşlarına nəzər salsaq

görürük ki, əvvəl Glu1 və Glu6 anim turşu qalıqlarının yan zəncirləri bir-birindən aralı olduqları halda optimizasiyadan sonra onlar bir-birinə yaxınlaşaraq daha kompakt quruluş yaradırlar. Eyni optimizasiya su mühiti də nəzərə alınmaqla aparılmış və məlum olmuşdur ki, vakuumdakı halı ilə müqayisədə niqstatin molekulunun atomları su molekulları ilə hidrogen rabitəsi əmələ gətirərək üzünü elə dayanıqlı halı alır ki, belə konformasiyaları heç bir digər xarici təsir dəyişə bilməz.

ƏDƏBİYYAT

1. Попов Е.М. «Белки и пептиды» М/Наука/, 1995, т. 24, стр. 5
2. Allinger N.L., Yuh Y., MM2 program, QCPE 395, Quantum Chemistry Program Exchange, Indiana, Univ., Indiana 1982
3. White D. Kuddock L., Edginton R., CHEMMIN program in computer aided molecular design, in Richards W.G. (Ed) IBS Technical Services/1982.
4. Macromodel W.C. Still Columbia University NY, 1982.
5. Abbasov S.H., Vəliyeva L.İ. Noqstatin molekulunun fəza quruluşunun konformasiya analizi üsulu ilə tədqiqi. Azərbaycan Texniki Universiteti Elmi əsərləri kitabı (fundamental elmlər) № 2/ cild II (6)/səh./115-118/2003.

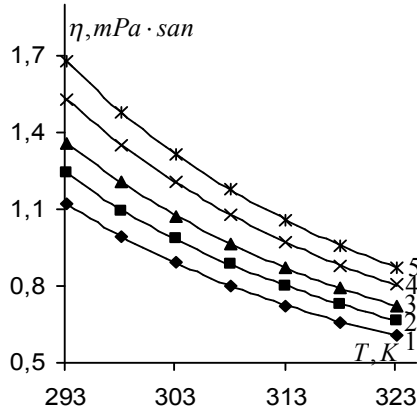
SU-POLİETİLENQLİKOL (3000)-NaOH (0.1 mol/l) SİSTEMİNİN REOLOJİ XASSƏLƏRİNİN TƏDQIQI

H.Ş. Həsənov, B.G. Paşayev, Ç.İ. İbrahimov, R.Ş. Əhmədova
Bakı Dövlət Universitetinin Fizika Problemləri İnstitutu
bakhtiyarpashayev@yahoo.com

Polietilenqlikol (PEQ) $(HO(-CH_2 - CH_2 - O)_n H)$ iki atomlu etilenqlikol $(HO - CH_2 - CH_2 - OH)$ spirtinin polimerləşməsindən alınır. Polimerləşmə dərəcəsi (n-dən) asılı olaraq istənilən molyar kütləli polietilenqlikol almaq mümkündür. PEQ molekulyar biologiyada, biokimyada, təbabətdə və s. geniş istifadə olunur. Bu polimer suda yaxşı həll olur. Su-PEQ sistemə qələvi və ya duz əlavə edildikdə maddənin dissosiasiyası nəticəsində yaranan metal ionu PEQ molekulu ilə qarşılıqlı təsirdə olur. Belə qarşılıqlı təsirlərin öyrənilməsində su-PEQ-qələvi (duz) sistemlərinin reoloji xassələrinin tədqiqi zəruridir.

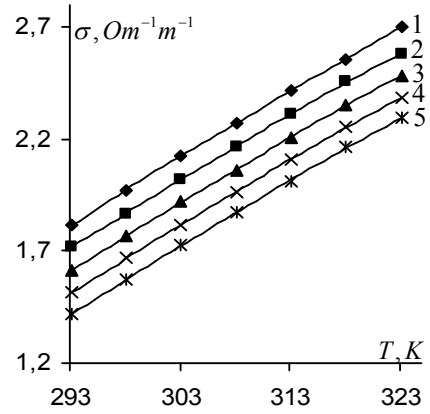
Təqdim olunan işdə su-PEQ-NaOH sisteminin 293.15-323.15 K temperatur və PEQ-in 0-5% konsentrasiya intervalında dinamik özlülüüyü, elektrik keçiriciliyi və sıxlığı ölçülmüşdür. İşdə molyar kütləsi 3000 olan PEQ-dən istifadə olunmuşdur. Həllədiçi olaraq NaOH-ın 0.1 mol/l konsentrasiyalı məhlulu götürülmüşdür. Tədqiq olunan məhlulun baxılan temperatur və konsentrasiyalarda özlü axının aktivləşmə parametrləri (ΔG_η^\ddagger , ΔS_η^\ddagger , ΔH_η^\ddagger) məhlulda PEQ-in parsial molyar həcmi (\tilde{V}) və xarakteristik özlülüünün ([η]) temperaturdan asılılığı təyin edilmiş, Valden qanunu ($\sigma\eta = const$) yoxlanılmışdır. Bunlara əsasən məhlulda baş verən struktur xüsusiyyətləri təhlil edilmişdir.

Su-PEQ (3000)-NaOH (0.1 mol/l) sisteminin dinamik özlülüünün və elektrik keçiriciliyinin temperaturdan asılılıqları şəkil 1 və 2-də, özlü axının aktivləşmə parametrlərinin (ΔG_η^\ddagger , ΔS_η^\ddagger , ΔH_η^\ddagger) və məhlulda PEQ-in parsial molyar həcmi (\tilde{V}) PEQ-in konsentrasiyasından asılılıqları uyğun olaraq şəkil 3, 4, 5 və 6-da, xarakteristik özlülüünün ([η]) və $\eta\sigma$ hasilinin temperaturdan asılılıqları isə şəkil 7 və 8-də göstərilmişdir.

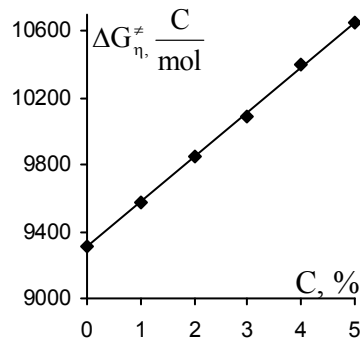


Şəkil 1. Su-PEQ (3000)-NaOH (0.1 mol/l) sisteminin müxtəlif konsentrasiyalarda dinamik özlülüyünün temperaturdan asılılığı.

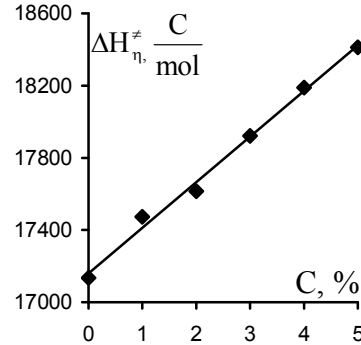
1-1%, 2-2%, 3-3%, 4-4%, 5-5%



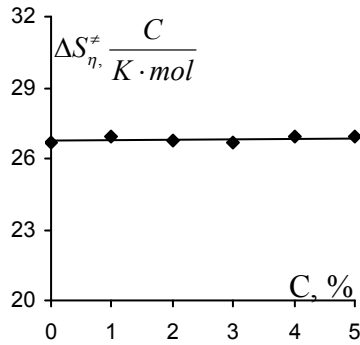
Şəkil 2. Su-PEQ (3000)-NaOH (0.1 mol/l) sisteminin müxtəlif konsentrasiyalarda elektrik keçiriciliyinin temperaturdan asılılığı.



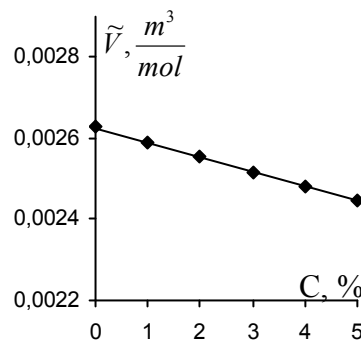
Şəkil 3. Su-PEQ (3000)-NaOH (0.1 mol/l) sisteminin özlü axınının aktivləşmə Gibbs enerjisinin PEQ-in konsentrasiyasından asılılığı (T=293.15 K).



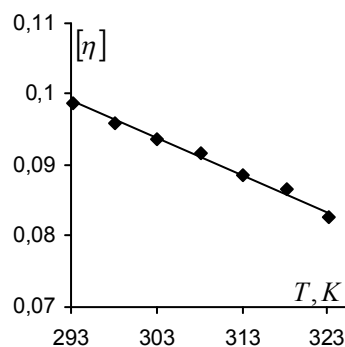
Şəkil 4. Su-PEQ (3000)-NaOH (0.1 mol/l) sisteminin özlü axınının aktivləşmə entalpiyasının PEQ-in konsentrasiyasından asılılığı (T=293.15 K).



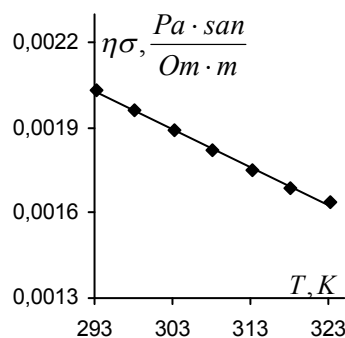
Şəkil 5. Su-PEQ (3000)-NaOH (0.1 mol/l) sisteminin özlü axınının aktivləşmə entropiyasının PEQ-in konsentrasiyasından asılılığı (T=293.15 K).



Şəkil 6. Su-PEQ (3000)-NaOH (0.1 mol/l) sistemində PEQ-in parsial molyar həcmının PEQ-in konsentrasiyasından asılılığı (T=293.15 K).



Şəkil 7. Su-PEQ (3000)-NaOH (0.1 mol/l) sisteminin xarakteristik özlülüynün temperaturdan asılılığı.



Şəkil 8. Su-PEQ (3000)-NaOH (0.1 mol/l) sistemində $\eta\sigma$ hasilinin temperaturdan asılılığı (C=1%).

Şəkil 1 və 2-dən görünür ki, baxılan məhlulun temperatur artdıqca dinamik özlülüynü azalır elektrik keçiriciliyi artır, konsentrasiya artdıqca isə dinamik özlülüynü artır, elektrik keçiriciliyi azalır. Şəkil 3, 4, 5 və 6-dan görünür ki, məhlulda PEQ-in konsentrasiyası artdıqca $\Delta G_{\eta}^{\ddagger}$ və $\Delta H_{\eta}^{\ddagger}$ kəmiyyətlərinin qiymətləri artır, $\Delta S_{\eta}^{\ddagger}$ -in qiyməti demək olar ki, dəyişmir, \tilde{V} -nin qiyməti isə azalır. Şəkil 7 və 8-dən görünür ki, temperaturun artması ilə $[\eta]$ kəmiyyəti və $\eta\sigma$ hasilini azalırlar. Qeyd edək ki, $\Delta G_{\eta}^{\ddagger}$, $\Delta H_{\eta}^{\ddagger}$, $\Delta S_{\eta}^{\ddagger}$ və \tilde{V} parametrlərinin baxılan temperaturlarda konsentrasiyadan asılı olaraq dəyişmələri, $\eta\sigma$ hasilinin isə baxılan konsentrasiyalarda temperaturdan asılı olaraq dəyişməsi eyni xarakterlidir.

ИССЛЕДОВАНИЕ КОНФОРМАЦИОННОГО ПОВЕДЕНИЯ АНАЛОГОВ МОЛЕКУЛЫ КАССИНИНА

Агаева Г.А.

Институт физических проблем, Бакинский государственный университет,
AZ-1148, ул.З.Халилова, 23, gulshen@mail.ru

Как известно, осуществление и эффективность фармакологических воздействий пептидного биорегулятора, так или иначе, связаны со структурной комплементарностью, взаимодействующих молекул пептида и рецептора. Поэтому, для выяснения механизма биологического эффекта, необходимо знание пространственного строения пептидного биорегулятора и его структурно-функциональных взаимосвязей. Применение в решении структурной проблемы различных теоретических методов расчета и программ с графическим изображением, позволяет предсказывать пространственные модели исследуемых пептидных молекул.

В настоящей работе представлены результаты сравнительного исследования конформационного поведения молекул кассинина и его структурных аналогов методами молекулярной механики и молекулярной динамики. Кассинин впервые был обнаружен в центральной нервной системе амфибии *Kassina senegalensis*. Молекула кассинина состоит из 12 остатков, H-Asp¹-Val²-Pro³-Lys⁴-Ser⁵-Asp⁶-Gln⁷-Phe⁸-Val⁹-Gly¹⁰-Leu¹¹Met¹²NH₂. По своей первичной структуре и ряду функциональных свойств кассинин относят к тахикининовым нейропептидам [1,2]. Исследование конформационных свойств молекулы кассинина и его глицин-монозамещенных аналогов проводилось методом молекулярной механики с использованием стандартной геометрии. При конформационном расчете пептидов учитывались невалентные и электростатические взаимодействия, водородные связи и торсионные потенциалы. Для расчета была составлена атомная модель и выбраны переменные

двугранные углы молекул кассинина и его аналогов. Результаты исследования показали, что N-концевая пентапептидная последовательность пептидов является относительно подвижным участком и способным образовывать бета- и гамма-изгибы, благодаря наличию в цепи остатка пролина. Однако существенно различаются относительные ориентации боковых цепей остатков. Расчет показал, что C-концевая гексапептидная часть молекул в стабильных конформационных состояниях энергетически предпочтительно формирует альфа-спиральную структуру. Сопоставление конформационных возможностей пептидов позволило определить наиболее важные специфические контакты, необходимые для стабилизации пространственных форм. В результате расчетов были определены энергетически предпочтительные области величин двугранных углов и взаимное расположение остатков в стабильных конформациях молекул. Энергетически предпочтительное и многочисленное семейство конформаций для кассинина составляют структуры, содержащие α -спираль на C-концевом гептапептиде. Внутри каждого семейства конформации различаются структурным типом N-концевого тетрапептидного фрагмента, который продолжен относительно жестким участком последовательности. Расчет показал, что молекулы кассинина и его аналогов могут формировать ограниченный набор практически похожих низкоэнергетических структур, относящиеся к нескольким семействам. Одни из них содержит один β -изгиб и α -спиральный сегмент, а другие представляет собой свернутую структуру с несколькими β -изгибами, переходящую в небольшой виток α -спирали на C-конце. Ниже приведены стереоизображения наиболее оптимальных пространственных структур молекул кассинина и его аналогов (рис.1).

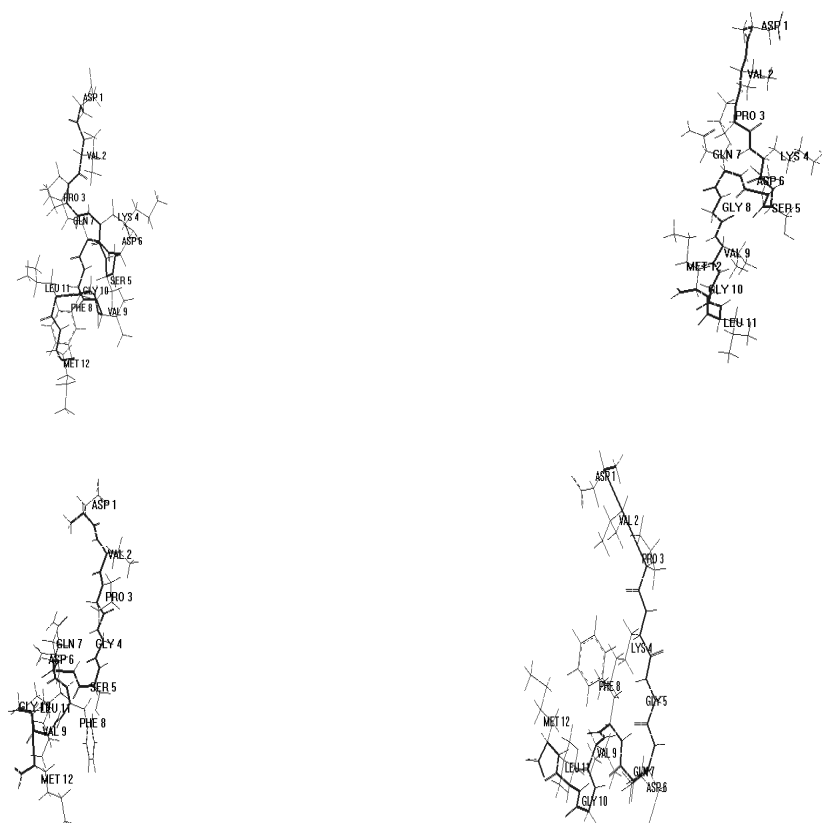


Рис.1. Стереоизображения низкоэнергетических конформационных состояний некоторых аналогов кассинина

Сопоставление результатов расчета молекул кассинина и его аналогов свидетельствуют о существенном их конформационном сходстве, т.е. наряду со

структурной гомологией этих двух молекул наблюдается существенная аналогия в их пространственной организации. Исследование конформационного поведения аналогов кассинина методом молекулярной динамики с использованием в качестве стартовых приближений низкоэнергетических конформационных состояний молекул, показало, что аналоги с точечными заменами остатков, расположенных в С-концевой части молекулы демонстрируют значительную консервативность конформационно-динамических свойств, тогда как аналоги с заменами в N-концевом тетрапептиде проявляют большую конформационную подвижность как основной, так и боковых цепей остатков.

ЛИТЕРАТУРА

1. Anastasi A., Montecucchi P.C., Erspamer V., Vinner J., *Experientia*, 1977, v.33, p.847-848
2. Maggi C.A. ,*General Pharmacology*, 1995, v.26, N.5, p.911-944

ВЛИЯНИЕ КОРОННОГО РАЗРЯДА НА СПЕКТРЫ ТОКОВ ТЕРМОСТИМУЛИРОВАННОЙ ДЕПОЛЯРИЗАЦИИ

Ш.М.ГАСАНЛИ, У.Ф.САМЕДОВА, М. А.НУРИЕВ¹, М.Р.АЛЛАЗОВ²

Институт Физики АНА, 1-Институт радиационных проблем, 2-Бакинский Государственный Университет

Одним из новых направлений в области создания активных диэлектриков является разработка двух- и много фазных композитных материалов, в частности композитов на основе системы полимер-полупроводник, обладавших варисторными и пьезо-резистивными свойствами. Известно, что частичный разряд, возникающий в воздушных прослойках на границе с диэлектриком, с одной стороны, приводит к модификации поверхности полимерных пленок, а с другой — моделирует влияние частичных разрядов в изоляции. Этот разряд имеет дискретный характер и представляет собой множество микрозарядов, возникающих в промежутке между диэлектрическими барьерами [1]. Под действием таких разрядов на поверхности полимерной пленки образуется тонкий модифицированный слой, свойства которого отличаются от свойств толщи материала .

Работа посвящена изучению влияния коронного разряда на спектры токов термостимулированной деполяризации(ТСД) для композитов на основе халькопиритных соединений $CuInSe_2 - MnSe$ и неполярного полимера (ПЭ). Композиты были получены из гомогенной смеси порошков компонентов путем горячего прессования(см. таблицу). Толщина образцов была равна 150 мкм. Обработка пленок в разряде производилась на высоковольтной установке при переменном напряжении $U=-6$ кВ и частоте $f= 50$ Гц. Коронный разряд был проведен согласно методике из работы [2]. Обработка пленок проводилась в течение 5 минут при нормальном атмосферном давлении без принудительной вентиляции воздуха.

Таблица

№ образцов	Образцы	$\sigma_{ост}, 10^{-6}$ Кл/м ²	$\tau_m, сек$	$T_m, К$	$W_y,$ кДж/мол	$W_m,$ кДж/мол	E_a, eV
1	10mol%MnSe	3.2	23.5	408	155	705	0.7
2	20mol%MnSe	2.5	38.4	403	140	435	0.63
3	40mol%MnSe	0.34	11.4	409	130	1463	0
4	100%PE	0.19	14.7	407	123	1124	0.55

Спектры термостимулированной деполяризации(ТСД) снимались стандартным способом, а именно, образцы композиций помещались между двумя закороченными через электрометрический усилитель У5-11 электродами в измерительную ячейку. Кривые ТСД в диапазоне температур 273-433К. были получены при линейном нагреве образцов с постоянной скоростью 5 К/мин.

Результаты экспериментов показаны на рис.1-2. Из рисунков видны следующие закономерности: 1. На спектрах композиций №1, №2 и №4 с ростом температуры прорисовываются устойчивые максимумы с противоположными знаками накопленного заряда (гомозаряд и гетерозаряд). В том числе для образцов №1, №3 и №4 отрицательные максимумы наблюдаются при $T=393\text{K}$ и $T=401\text{K}$, а положительные $T=407\text{K}$ и $T=408\text{K}$, $T=409\text{K}$ соответственно. Максимум ТСД для образца №2 наблюдается при $T=403\text{K}$. 2. Величина тока ТСД с ростом объемного содержания бинарного компонента (MnSe) увеличивается, а максимумы спектров ТСД смещаются в область высоких температур.

Для всех образцов были рассчитаны релаксационные параметры спектров ТСД(см. таб). Расчеты параметров были проведены на основе ГОСТ 25209-82. Энергия активация E_a ловушек была определена по методу Гарлика –Гибсона (метод начального подъема).

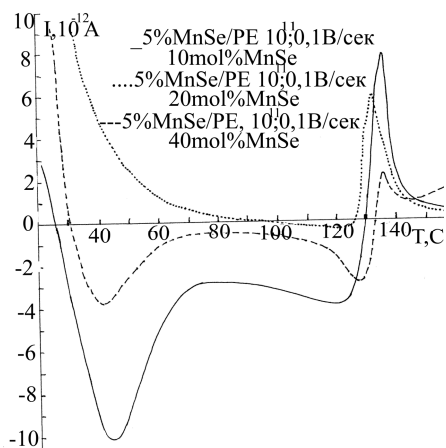


Рис.1.Зависимость термостимулированного тока от температуры.

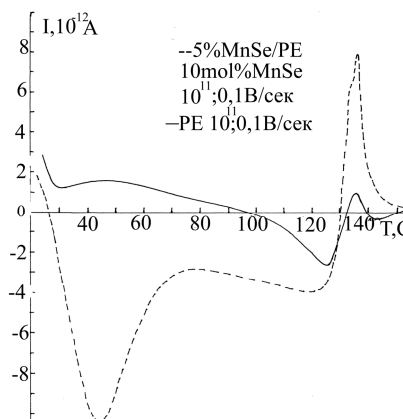


Рис.2. Зависимость термостимулированного тока от температуры.

Сопоставление результатов показанных, в таблице позволяет сделать следующие выводы.1. Наибольшее время релаксации наблюдается для композита №2, а наибольшая эффективная плотность остаточных зарядов для композита № 1 соответственно.2. Добавка наполнителя приводит к сильному росту величины эффективного заряда.

Согласно работам [1,3] наблюдаемая инверсия тока ТСД, может быть обусловлена изменением соотношения между электропроводностями отдельных слоев в неоднородных материалах(в нашем случае композита).. Дело в том, что в процессе действия коронного разряда в композите образуется объемный заряд и в поле объемных зарядов (ОЗ) на границах частиц наполнителя и полимера образуется межфазная поляризация (МП) [1,3-4].

Отрицательные пики(об.№1 и №3) в области низких температур соответствуют поляризации Максвелла–Вагнера. По-видимому, она происходит из-за смещения в образце свободных носителей заряда к границе раздела наполнитель-полимер. Положительные пики соответствуют релаксацию объемного положительного заряда, сформировавшегося в поле гомозаряда.

Таким образом, изучены процессы накопления и релаксации объемного заряда в композитах на основе халькопиритных соединений типа $\text{CuInSe}_2 - \text{MnSe}$ и неполярного

полимера (ПЭ).

Литература

1. Л.С.Пинчук., С.В.Зотов, В.А.Гольдаде и др. // ЖТФ, 2000, том 70, вып. 2. стр.38-42.
2. ГОСТ 25209-82
3. А.Ф.Пономарев, М.Васильев, А.Н. Лачинов. // ЖТФ, 2003, том 73, вып. 11. стр.138-140.
4. A. Fridman. //J.Phys. D.Appl. Phys. 2005. №38, p.1-24.

О НЕКОТОРЫХ ПРОЦЕССАХ, ПРОИСХОДЯЩИХ В ОЗОНАТОРАХ БАРЬЕРНОГО РАЗРЯДА

Н.А.Мамедов, Б.Б. Давудов, К.М.Дашдамиров, Г.М.Садыхзаде, Ш.Ш.Алекберов
Бакинский Государственный Университет

В работе изучаются двухбарьерные разряды переменного тока между двумя коаксиальными цилиндрами, осуществляемые в реальных озонаторах. Основное внимание уделяется роли объемного заряда, образующегося в каждый полупериод подаваемого напряжения во внешней зоне разряда и влияющего на его напряжение зажигания, в зависимости от того, успевает ли произойти деионизация разрядного промежутка в каждом полупериоде. Для возникновения такого разряда, необходимо, чтобы напряжение, приложенное к данной системе электродов, превосходило по величине определенный уровень, называемый начальным или критическим напряжением. Величина этого напряжения зависит от рода и плотности газа, геометрических размеров и состояния поверхности электродов.

Особенностью конструкции озонаторов являлось то, что разряд происходил между двумя коаксиальными диэлектрическими барьерами (диэлектрическая проницаемость $\epsilon=4$), внутренний электрод озонатора помещался внутри барьера с малым радиусом кривизны, внешний же электрод был расположен поверх второго. Это создавало дополнительную ёмкость, которую приходилось учитывать при расчете напряженности электрического поля [1]:

Проведенные расчеты показывают, что в исследуемом рабочем диапазоне давлений озонаторов время жизни τ почти не меняется с изменением давления P , а, следовательно в указанном диапазоне, невозможно управлять объемным зарядом в озонаторе с помощью давления.

С другой стороны видно, что время жизни остаточных ионов (время деионизации) существенно различается у разных типов озонаторов и следовательно, успевает ли плазма деионизироваться между двумя вспышками микрозарядов (МР), происходящими каждый полупериод, зависит, как показывают расчеты, от параметров озонаторов. Судя по всему, с увеличением частоты подаваемого напряжения, время между двумя полупериодами уменьшается, и плазма не успевает деионизироваться, что приводит к увеличению объемного заряда и, следовательно, под его воздействием, уменьшению напряжения зажигания МР, аналогично тому, как это происходило, как указано выше, при увеличении амплитуды подаваемого напряжения.

Учитывая вышеизложенное, по-видимому, варьируя не только амплитудой, но и частотой подаваемого напряжения, можно найти оптимальные условия для зажигания МР переменного тока, а следовательно осуществить наиболее энергетически выгодную модель озонатора.

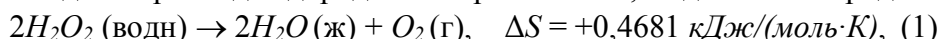
В различных высоковольтных неоднородных разрядных промежутках при атмосферном давлении протекают процессы, изучение которых необходимо как с точки

зрения усовершенствования озонаторов так и при разработке технологий очистки воды. Поскольку в двухбарьерных разрядах отсутствуют металлические электроды, то процессы, сопровождающиеся окислительно-восстановительными реакциями, происходят в объеме и поверхностными эффектами можно пренебречь. Эти процессы основаны на генерировании химически активных частиц: озона O_3 , атомарно-активного кислорода O и радикалов OH . Указанные частицы синтезируются также в реакторах – активной зоне озонаторов, при воздействии на воду ионизирующего излучения высокой энергии, $УФ$ – излучения или электрических разрядов.

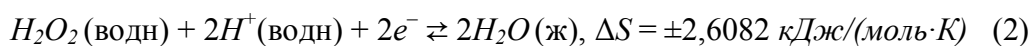
В [2] показано, что из рассмотренных процессов образования озона наиболее важную роль играют диссоциация молекулы кислорода при соударениях с молекулами азота и столкновения атомов кислорода с молекулами O_2 . Важны также процессы образования молекул озона при тройных соударениях. В этих процессах участвуют атомарный и молекулярный кислород, а роль третьей частицы может играть любая из присутствующих в газовой смеси молекул. Без исследования вышеизложенных элементарных процессов в барьерном разряде, невозможно и создание озонного генератора с хорошими выходными параметрами.

Кроме того, наиболее существенным недостатком существующих реакторов является сильная зависимость количества производимого, озона, от влажности поступающего в объем воздуха.

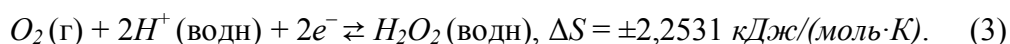
При разряде в водных субстанциях образуются H_2O_2 – перекись водорода, которая увеличивает вязкость воды. Пероксид водорода легко разлагается, выделяя кислород:



что необходимо при синтезе озона. Пероксид водорода может также являться окислителем:



и восстановителем:

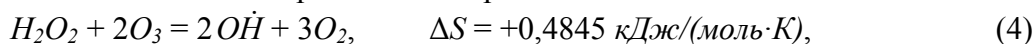


Кислотность раствора способствует проявлению окислительного действия H_2O_2 .

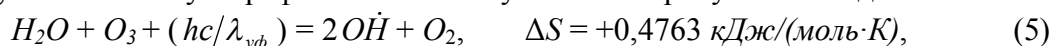
Поскольку процессы, описываемые реакциями (2) и (3) обратимы, то изменением энтропии в них можно пренебречь.

Наиболее реакционно-способной частицей, окисляющей большинство органических соединений, является гидроокислительный радикал OH (не окисляет только фторопласт, поэтому металлические электроды барьерных разрядов покрывают тонким слоем фторопласта). Концентрация OH радикалов в каналах микрозарядов, характерных для барьерных разрядов, имеет порядок $10^{14} \div 10^{15} \text{ см}^{-3}$ [3], что сравнимо по порядку величины с концентрацией атмосферного кислорода. OH – радикалы могут образоваться:

при взаимодействии озона с перекисью водорода



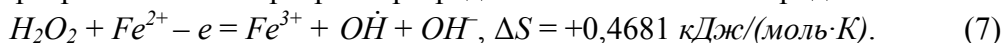
при облучении озона ультрафиолетовым излучением в присутствии воды



при воздействии $УФ$ – излучения на H_2O_2



а в однобарьерном или безбарьерном разрядах с железными электродами



Кроме того, в разрядных промежутках H_2O + (электрический разряд) синтезируются O_3 , \dot{O} , OH , HO_2 . В этом ряду относительно энергоемким является синтез озона O_3 .

Для оценки затрат при производстве озона необходимо учитывать, что внешняя энергия, затрачиваемая на производство озона, уходит на диссоциацию молекул кислорода, а реакция образования O_3 идет с выделением тепла. Следовательно, при механизме образования через диссоциации принципиально нужно вложить энергии больше, чем теплота образования озона: 5,16 эВ (по другим данным 5,12 эВ) против 2,96 эВ на 2 молекулы O_3 . Разность 2,2 эВ бесполезно теряется при тройном столкновении. При подсчете эффективности озонаторов обычно полагают даже, что минимальные возможные затраты энергии составляют $5,16\text{эВ}/(2\text{молекулы } O_3) = 1,44 \text{ кВт}\cdot\text{час}/\text{кг}$.

Обычно затраты на производство 1 кг озона составляют $\sim 2 \text{ кВт}\cdot\text{час}$ энергии. Минимальные затраты можно находить также через теплоту образования O_3 , равную 1,48 эВ/молекул. Пересчитав эту энергию на производство 1 кг озона, получим $\sim 0,83 \text{ кВт}\cdot\text{час}/\text{кг}$.

Примерно то же самое получим из диаграмм электронных состояний кислорода. Для процесса диссоциации молекул O_2 наиболее существенными являются полосы Герцберга $\sim (250 - 300) \text{ нм}$. Эти полосы очень слабые, имеют предел сходимости 242,4 нм, что соответствует диссоциации молекул кислорода на атомы в состоянии $O(^3P)$. Отсюда обычно находят «теоретический» энергетический выход озона, т. е. энергию, необходимую для образования единицы массы озона: $E = (1/2)(hc/\lambda) \cong 4,098 \text{ Дж}/\text{молекул} \cong 2,468 \cdot 10^5 \text{ Дж}/\text{моль}$. Учитывая, что $1 \text{ Дж} = 2,78 \cdot 10^{-7} \text{ кВт}\cdot\text{ч}$ и молярная масса озона равна $M = 48 \cdot 10^{-3} \text{ кг}/\text{моль}$, минимально возможные затраты энергии составляют $E \cong 1,43 \text{ кВт}\cdot\text{час}/\text{кг}$.

Отметим, что активная мощность, вкладываемая в разрядный промежуток, перестает зависеть от частоты приложенного напряжения в определенном интервале (500-900 Гц), а затем убывает с ростом частоты и разряд гаснет.

Таким образом, полученные в данной работе результаты и их анализ показывают, что для эффективной работы озонаторов с двухбарьерным разрядом в каждом конкретном случае, для каждого интервала давления и в зависимости от чистоты подаваемого в разрядный промежуток воздуха, необходимо выбирать интервал частот приложенного напряжения, при котором обеспечивается максимальный коэффициент полезного действия установки.

Литература

1. Мамедов Н.А., Джабаров Дж.Н. Некоторые электростатические характеристики озонных генераторов. Вестник БГУ, №2, 1999. стр.91-96.
2. Давудов Б.Б., Дашдамиров К.М. Элементарные процессы в барьерном разряде. AMEM-nin Fizika Institutunun Elmi hesabatı, Fizika №1-2, cild XIII, 2007, s.310-311.
3. Ono R., Oda T. // J. Electrostatics, 2002, vol. 55, No.3-4, pp.333 – 342.

POLIMER-POLIMER-SU və PEQ-C₄O₆H₄Na₂-H₂O İKİFAZALI SİSTEMLƏRİNDƏ FAZALARA AYRILMA PROSESİNƏ Ag və Cu İONLARININ TƏSİRİ

Bağirov T.O., Həsənova X.T., Məmmədov N.Ə., Davudov B.B., Bağirova S.R.
BDU, “Fizika Problemləri” ETİ, E-mail:baghirov-t@mail.ru

Polimer-polimer-su və polimer-duz-su ikifazalı sistemlərində fazalara ayrılmanın molekulyar aspektləri araşdırılarkən son dövrlərdə ədəbiyyatda maraqlı fikirlərə rast gəlinir ki [1-3], bunların da əsasında fazaəmələgətirən komponentlərin (polimer cütünün

və ya polimer və duzun) suyun strukturuna təsiri durur. Belə ki, fazaəmələgətirən komponentlər suyun strukturunu özlərinə məxsus şəkildə dəyişərək sistemdə müxtəlif strukturlu su yaradır və həmin strukturlar əmələ gələcək fazaların özəyini təşkil edir. Bu halda fazaəmələgətirən komponentlər bir-biri ilə bilavasitə qarşılıqlı təsirdə olmur və bu qarşılıqlı təsir yalnız su vasitəsilə həyata keçirilir. Beləliklə, Zaslavski və Məsimov tərəfindən irəli sürülmüş aşağıdakı hipotez [4] təsdiq olunur ki, polimer-su ikifazalı sistemlərinə fazalara ayrılma həmin sistemlərdə iki müxtəlif strukturlu suyun yaranması hesabına baş verir.

Təqdim olunan işdə PEQ - C₄O₆H₄Na₂ - H₂O ikifazalı sisteminin fiziki-kimyəvi xassələri tədqiq olunmuş və bu sistemdə fazalara ayrılmanın molekulyar aspektləri araşdırılmışdır. Bu məqsədlə polietilenqlikol (PEQ)-6000, dekstran, çaxır turşusunun Na duzu (kimyəvi təmiz) və bidistillə su istifadə olunmuşdur. Sistemlərin binodal əyrisi qurulmuş, birləşdirici xəttin meyl bucağı təyin edilmişdir. PEQ - C₄O₆H₄Na₂ - H₂O ikifazalı sistemində fazalara ayrılma prosesində suyun strukturunun həlledici rol malik olmasını göstərmək üçün xarici amillərin və bəzi əlavələrin sistemin binodal əyrilərinə təsirinə baxılmışdır. Polimerin molekulyar kütləsinin fazaəmələgəlmə prosesinə təsiri tədqiq olunarkən alınmışdır ki, polimerin molekulyar kütləsi artdıqca fazalara ayrılma prosesi sürətlənir, başqa sözlə fazaəmələgətirən komponentlərin daha kiçik konsentrasiyalarında ikifazalı sistem alınır.

Suyun strukturuna dağıdıcı təsir göstərən karbomidin iştirakı ilə həmin sistemin binodal əyrisi qurulmuşdur. Alınmış nəticələrin təhlilindən məlum olmuşdur ki, 1,0 mol/l karbamidin təsiri ilə sistemin hal diaqramında homogen oblastın sahəsi böyüdüyü halda tiokarbamid demək olar ki, binodal əyrisini dəyişmir. Bu nəticə bəzi maddələrin sulu məhlullarının struktur temperaturunun tədqiqi zamanı alınmış [5] nəticələrlə uyğun gəlir. Digər təcrübələrdə bəzi şəkərlərin və spirtlərin tədqiq olunmuş sistemin hal diaqramına təsiri tədqiq olunmuşdur. Alınmışdır ki, şəkərlərin təsiri ilə və etil spirtinin kiçik konsentrasiyalarında sistemin binodal əyrisi koordinat başlanğıcına tərəf sürüşür, ikifazalı sistem fazaəmələgətirən komponentlərin daha kiçik konsentrasiyalarında baş verir. Eyni zamanda temperaturun dəyişməsinin sistemin fiziki-kimyəvi xassələrinə təsiri öyrənilmişdir.

Təqdim olunan işdə eyni zamanda PEQ - C₄O₆H₄Na₂ - H₂O və dekstran-PEQ-su ikifazalı sistemlərinin hal diaqramlarına Ag və Cu ionlarının təsiri tədqiq olunmuşdur. İonlar sistemə elektroliz metodu ilə daxil edilmişdir. Elektroliz hadisəsinin baş verməsi üçün sistemlərin hal diaqramları qurularkən bidistillə su əvəzinə “aquavita” suyu götürülmüşdür və elektroliz qurğusu və şərtləri elə seçilmişdir ki, su molekullarının sayının gümüş və ya mis ionlarının sayına nisbəti $6 \cdot 10^6 \left(\frac{N(H_2O)}{N(Ag)} \equiv \frac{N(H_2O)}{N(Cu)} = 6 \cdot 10^6 \right)$

olsun, başqa sözlə 6 mln su molekuluna bir gümüş və ya mis ionu düşsün. Cədvəllərdə alınmış nəticələr verilmişdir. Nəticələrdən məlum olmuşdur ki, təmiz aquavita və Cu ionlarının iştirakı ilə olan sistemlərdə fazaların polimer və duz tərkibi üst-üstə düşür və yalnız birləşdirici xəttin meyl bucağı dəyişir (Cu-in iştirakı ilə olan sistem üçün $tg\alpha_{BX} = 2,35$ -dir). Cədvəl 2-də Ag ionlarının iştirakı ilə olan ikifazalı sisteminin fazalarının tərkibi verilmişdir. Cədvəldən göründüyü kimi bu halda fazalara ayrılma həm polimerin və duzun daha böyük konsentrasiyasında baş verir, həm də birləşdirici xəttin meyl bucağı dəyişir. Bu təcrübi faktları izah etmək üçün qeyd edək ki, hər iki halda birləşdirici xəttin meyl bucağı dəyişdiyindən ionlar suyun strukturuna bu və ya digər dərəcədə təsir göstərir, Ag ionlarının iştirakı ilə olan sistemdə isə bununla yanaşı, fazalara ayrılma fazaəmələgətirən komponentlərin böyük konsentrasiyasında baş verir.

Cədvəl 1

PEQ(6000)-C₄O₆H₄Na₂-H₂O(aquavita) ikifazalı sisteminin fazalarının tərkibi
(bütün konsentrasiyalar %-lə verilmişdir, ±0,1% dəqiqliklə)

№	İlkin sistem		Yuxarı faza		Aşağı faza		$\overline{tg\alpha_{BX}}$
	PEQ	Duz	PEQ	Duz	PEQ	Duz	
1	8,0	14,0	15,8	9,0	2,5	17,4	-2,05
2	10,5	13,0	19,8	8,1	2,2	18,3	
3	11,4	13,2	20,6	7,5	2,0	18,8	
4	12,1	13,4	22,0	7,1	1,8	19,6	
5	13,0	13,4	24,4	6,4	1,6	20,4	
6	15,0	13,5	28,5	5,0	1,4	21,7	

Cədvəl 2

PEQ-C₄O₆H₄Na₂-H₂O(aquavita+ Ag) ikifazalı sisteminin fazalarının tərkibi
(bütün konsentrasiyalar %-lə verilmişdir, ± 0,1% dəqiqliklə)

№	İlkin sistem		Yuxarı faza		Aşağı faza		$\overline{tg\alpha_{BX}}$
	PEQ	Duz	PEQ	Duz	PEQ	Duz	
1	9,1	16,0	18,6	9,4	3,6	19,5	-2,80
2	10,1	16,0	20,8	9,0	2,1	21,2	
3	11,0	16,1	21,8	8,4	1,0	23,2	
4	13,5	16,1	25,6	7,2	0,8	25,4	
5	14,4	16,2	27,8	6,4	0,6	26,4	
6	16,0	16,4	28,6	6,2	0,4	28,6	

Beləliklə, xarici amillərin və bəzi əlavələrin, o cümlədən Ag və Cu ionlarının PEQ-C₄O₆H₄Na₂-H₂O və dekstran-PEQ-su ikifazalı sistemlərinin binodal ayrılmasına təsiri sistemli tədqiq olunmuş və göstərilmişdir ki, bu amillər suyun strukturuna dağıdıcı və strukturlaşdırıcı təsir göstərərək prosesin bu və ya digər istiqamətdə getməsinə tənzimləyir.

Ədəbiyyat

1. Bağırov T.O. İkifazalı sulu polimer sistemləri və onların əsas xarakteristikaları, Bakı, BDU, 2005, 56 s.
2. Тагер А.А. Некоторые новые представления в области растворов полимеров - Высокомолекулярные соединения, А, 1984, т.26, № 4, с.659-674.
3. Chethana, S., Rastogi, N. K., Raghavarao, K. S. M. S., Biotechnol. Letters., 2006, v.28, pp.25-28.
4. Zaslavsky B.Y., Aqueous Two-Phase Partitioning: Physical Chemistry and Bioanalytical Applications, Marcel Dekker, New York, 1994, -212 p.
5. Məsimov E.Ə., Bağırov T.O., Mahmudov A.Ü., Zaslavski B.Y. Maye məhlullarda fazalara ayrılma // Journal of Qafqaz Universitu, 2008, №21, s.77-88.

POLİMER-SU İKİFAZALI SİSTEMLƏRİNDƏ PAYLANMA METODUNUN TƏTBİQ SAHƏLƏRİ

Məsimov E.Ə., Bağirov T.O., Ocaqverdiyeva S.Y., Bağirov Ə.A., Mehdiyev H.F.
BDU, Maddə quruluşu kafedrası, E-mail:baghirov-t@mail.ru

İkifazalı su–polimer sistemlərin ən geniş tətbiq sahəsi onların preparativ məqsədlərlə istifadə olunmasıdır. Müxtəlif bioloji strukturların və hissəciklərin təmizlənməsi, bir-birindən ayrılması və bircins hissəciklərin fraksiyalara ayrılması biokimyəvi, biofiziki, farmokoloji və s. istiqamətlərdə tədqiqatlar üçün həlledici rol oynayır. Məsələn, hüceyrənin daxilindəki formalarına, ölçülərinə, yükünə, kimyəvi tərkiblərinə görə fərqlənən çox mürəkkəb hissəciklər toplusunu bir-birlərindən ayırmaq öyrənmək çox vacibdir. Dissosiasiyaya uğrayan və aqreqasiya edən bioloji hissəcikləri bir-birindən yalnız müəyyən fiziki-kimyəvi xassələrinə görə bir metodla ayırmaq mümkün deyil. Hissəciklərin ayrılması metodları onların xassələrinin (səthi gərginliklərinin, ölçülərinin, sıxlıqlarının, yüklərinin və s.) müxtəlifliyinə əsaslanır [1].

Bu metodlardan ən optimalı hissəciklərin ikifazalı maye-maye sistemlərində qeyri bərabər paylanması metodudur. İkifazalı maye sistemlər yuxarıda qeyd olunduğu kimi xassələri ilə bir-birindən fərqlənən iki polimeri bir həlledicidə həll etdikdə alınır. Bioloji sistemlərin ayrılmasında istifadə olunan ikifazalı sistemləri almaq üçün həlledici kimi su götürülür. Belə halda hər iki fazanın əsasını su təşkil etdiyi üçün (70-90%) bu cür ikifazalı sistemlərdə bioloji mayələrin komponentlərinin bir-birindən ayrılması çox əlverişlidir. Bioloji hissəciklərin ikifazalı sistemin fazalarında qeyri–bərabər paylanmalarının səbəbi onların səthlərinin fazalardakı mühitlə müxtəlif cür qarşılıqlı təsirdə olmalarıdır. Bəzi hallarda böyük miqdarda biopolimerlərin təmizlənməsi və ayrılması zəruriyyəti yaranır. Belə hallarda elə metodlar seçilməlidir ki, onlar “yumşaq” və effektiv olmaqla yanaşı eyni zamanda böyük miqdarda materialın alınması üçün yararlı olsunlar. Bu nöqtəyi nəzərdən ən əlverişli metodlardan biri biopolimerlərin ikifazalı su–polimer sistemlərində qeyri–bərabər paylanması metodudur [1-3].

İdeal halda maddələrin sistemdə paylanma əmsalı maddənin konsentrasiyasından və fazaların həcmələrinin nisbətindən asılı olmur və hər iki fazanın və maddənin xassələrindən və temperaturdan asılı olur. Əgər paylanan maddələr emulsiya, suspenziya və s. asılmış halda olan hissəciklərdən ibarətdirsə, onda iki fazanı ayıran təbəqəni nəzərə almamaq olmaz. Bu halda sistemə ikifazalı deyil, üçfazlı sistem kimi baxmaq lazımdır.

Qeyd etmək lazımdır ki, ikifazalı sistemlərdə bioloji hissəcikləri təmizlədikdə və ayırdıqda bu sistemlərin seçilməsi çox vacibdir. Belə sistemlər “yumşaq” olmalıdır, yəni fazalarda suyun miqdarı çox olmalıdır, sistemin ion tərkibi, osmotik təzyiqi, PH-ın qiyməti və denaturasiyaedici effektlər mütləq nəzərə alınmalıdır. Bioloji hissəciklər çox zərif olurlar və yuxarıda adları çəkilən kəmiyyətlərin müəyyən qiymətlərində onların yerinə yetirdikləri bioloji funksiyaları müəyyən edən konformasiyaları və molekulüstü strukturları çox zərif olduqlarından öz bioloji funksiyalarını itirirlər. Elə bu səbəbdən ayırma qabiliyyətləri böyük olan su–üzvi birləşmə ikifazalı sistemlər bioloji hissəcikləri ayırmaq üçün yararsızdır. Su–üzvi birləşmədən ibarət ikifazalı sistemlərdə bioloji hissəciklərin əksəriyyəti su fazasına yığılırlar və ona görə də paylanma əmsalını tapmaq mümkün olmur. Digər tərəfdən bu cür sistemlərdə fazaları ayıran sərhədin səthi gərginmə əmsalı böyük olduğundan ($1 \div 20$ dn/sm) zərif bioloji hissəciklərin (məsələn, hüceyrə strukturları) dağılma ehtimalı böyük olur. Bu çətinlikləri aradan qaldırmaq üçün ikifazalı su–polimer sistemlərindən istifadə olunur. İkifazalı su–polimer sistemlərində fazalara ayıran sərhədin səthi gərginmə əmsalı $0,0001 \div 0,1$ dn/sm tərtibində olur.

İkifazalı su–polimer sistemlərində paylanan bioloji hissəcikləri xarakterizə edən hər hansı bir xassəsinin dəyişməsi (hissəciyin yükü, səthinin sahəsi və s.) paylanma əmsalının kəskin dəyişməsinə səbəb olur və bu da metodun böyük ayırma qabiliyyətinin olduğunu

göstərir. Digər separasiya metodları hissəciklərin yalnız bir xassəsinə əsaslandığı halda, paylanma metodu bütün deyilən xassələrin hamısı ilə əlaqədardır.

Müxtəlif ikifazalı su–polimer sistemlərinin ayırma qabiliyyətləri müxtəlif olur. Ayırmanın effektiv olması üçün belə sistemlərin fazalara ayrılması sürəti böyük olmalı, fazaların optik sıxlıqları görünən və VK oblasta kiçik olmalı, fazaəmələgətirən komponentlər paylanan maddələrə qarşı inert olmalı və sözsüz ki, ayırma qabiliyyətləri böyük olmalıdır. Belə sistemlərin axtarışı, tapılması və tədqiqi (binodal ayrılıqlarının və birləşdirici xətlərin qurulması və s.) çox vacibdir. Bu sahədə görülən tədqiqat işlərinin nəticəsi olaraq qeyd etmək lazımdır ki, son zamanlar polimer–duz–su ikifazalı sistemlərindən üzvi duzların iştirakı ilə olan sistemlər tədqiq olunmuş, onların digər karakteristikaları ilə yanaşı ayırma qabiliyyəti tapılmışdır.

PEQ - $C_4O_6H_4Na_2$ - H_2O ikifazalı sisteminin ayırma qabiliyyəti ~2,8-ə bərabər alınmışdır. Ayırma qabiliyyətinin (n^*) nisbətən kiçik olması (dekstran–fikoll–su sistemi üçün $n^*=8,3$, PEQ - $Al_2(SO_4)_3$ - H_2O sistemi üçün $n^*=11,08$ [2]). sistemin eyni zamanda mövcud olan fazalarının nisbi hidrofoqluqlarının az fərqlənməsi ilə izah olunur. Qeyd etmək lazımdır ki, bioloji hissəciklərin «incə» və «kobud» ayrılması nöqtəyi nəzərindən bu sistem «incə» ayrılma üçün məqsədə uyğundur. Belə ki, ayırma qabiliyyəti böyük olan ikifazalı sistemdə paylanma metodu vasitəsi ilə bir-birindən hidrofobluqlarına görə kəskin fərqlənən maddələri ayırdıqdan sonra («kobud» ayırma) hidrofobluqlarına görə bir-birindən az fərqlənən maddələri ayırmaq üçün («incə» ayırma) ayırma qabiliyyəti kiçik olan ikifazalı sistemdən istifadə etmək məqsədəuyğundur.

Ədəbiyyat

1. Məsimov E.Ə. Bioloji sistemlərdə suyun rolu. Hidrofobluq, monoqrafiya, Bakı, 2008, - 328 s.
2. Bağırov T.O. İkifazalı sulu polimer sistemləri və onların əsas karakteristikaları, Bakı, BDU, 2005, - 56 səh.
3. Масимов Э.А., Багиров Т.О., Алиева Н.И. Влияние ионизирующей радиации на изменение относительной гидрофобности белков сыворотки крови// Журнал изв. вузов «Химия и химическая технология», 2006, том 49, вып. 9, стр. 103-106

МОДЕЛИРОВАНИЕ И АБ ІNІТІО ІССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И КОЛЕБАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА МОЛЕКУЛЫ КАРНОЗИНА

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

Институт Проблем Физики, Бакинский Государственный Университет

В данной работе проведено квантовохимическое исследование структуры и колебательного спектра молекулы карнозина для двух таутомерных форм ее имидазольного кольца, модели которых показаны на рис.1. Расчет проводился по программе Gaussian98, встроенной в универсальный программный пакет ChemOffice. В отличие от эксперимента, теоретические расчеты на основе квантовохимического подхода позволяют не только провести оценку структурных и спектральных параметров, но и явно рассчитать распределение электронной плотности. Особое место в исследованиях занимают *ab initio* расчеты-строго непараметрическое рассмотрение молекулярных орбиталей на базе основных физических и математических законов. Основой неэмпирических расчетов, также как и полуэмпирических является приближение Борна-Оппенгеймера. Точность неэмпирических расчетов зависит от “ширины” используемого базиса: количества гауссовых (слэтеровских) базисных орбиталей, наличия поляризующих или диффузных функций, электронной корреляции.

Неэмпирические расчеты не включают никаких экспериментально определяемых параметров, кроме фундаментальных физических постоянных. Неэмпирические методы при их корректном использовании дают большую надежность оценки свойств известных и неизвестных химических соединений, однако требуют несравнимо больших ресурсов РС и времени расчета.

Для получения корректных данных по различным свойствам исследуемых молекул была проведена минимизация энергии с использованием волновой функции для закрытых оболочек по ограниченному (RHF) методу Хартри-Фока, в котором электронная оболочка в молекуле рассматривается как замкнутая. В качестве базисного набора был выбран средний **Standard basis: 6-31G (6D, 7F)**. Оптимизация геометрии проводилась процедурой оптимизации Berny, для расчета зарядового распределения применялась модель Малликена.

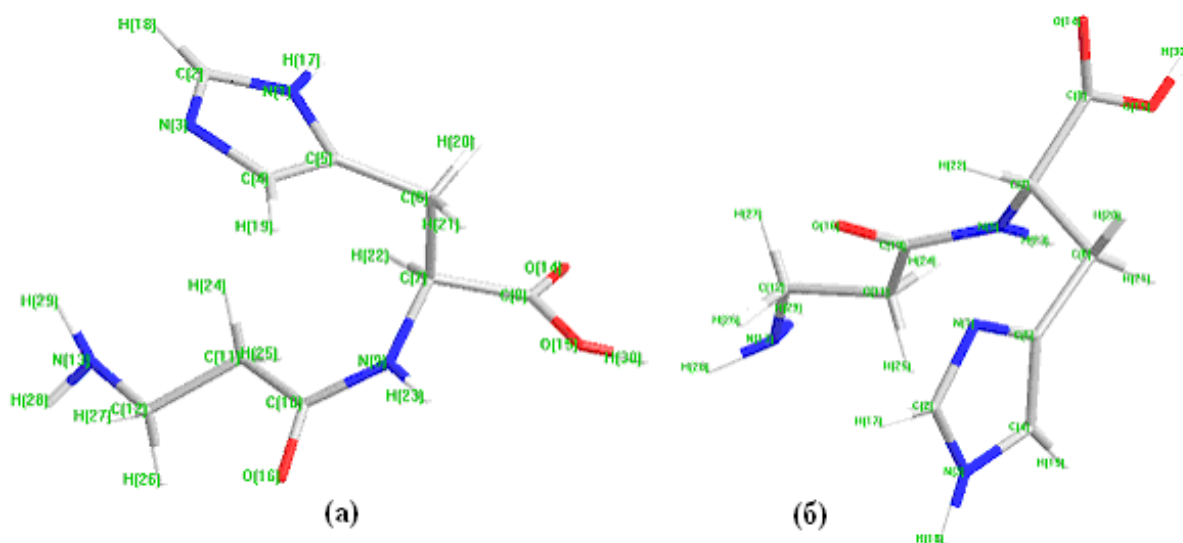


Рис. 1. Модели карнозина N¹H (а) и N³H (б) после оптимизации методом HF/6-31G

После оптимизации были получены геометрические параметры исследуемых моделей—длины связей, валентные и торсионные углы, энергии моделей, зарядовое распределение, дипольные моменты и анализ заселенностей орбиталей. Затем был проведен спектральный анализ обоих таутомерных форм карнозина, получены частоты нормальных колебаний колебательного спектра моделей, интенсивности полос поглощения и другие характеристики. Были построены теоретические ИК-спектры моделей (рис.2), из которых наглядно видно различие в колебательных спектрах двух таутомерных форм карнозина.

В работе приведены также энергетические параметры и дипольные моменты для обоих таутомерных форм карнозина, рассчитанные методом HF/6-31G (табл.1).

Таблица 1. Энергетические параметры по данным метода HF/6-31G

	Карнозин N ³ H	Карнозин N ¹ H
Энергия	-791.00917 A.U.	-791.00141 A.U.
Энергия отталкивания ядер	1114.36 Hartrees	1130.14 Hartrees
Дипольный момент (D)	7.06	4.75

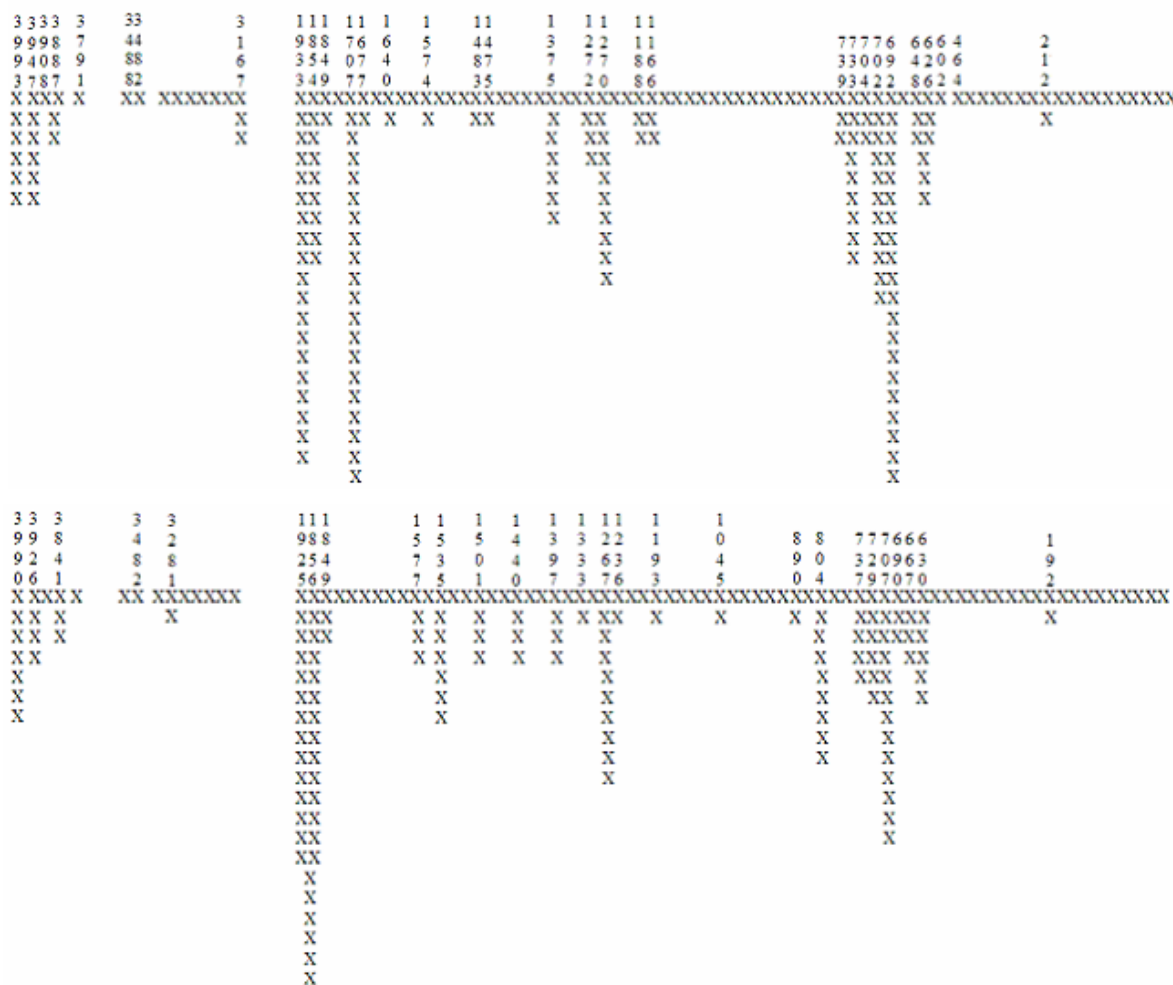


Рис. 2. Теоретические ИК спектры молекул карнозина N^3H (верхний) и карнозина N^1H (нижний)

Как следует из результатов расчета, реализация свободного карнозина в обоих таутомерных формах энергетически равнозначна с незначительным выигрышем в пользу формы N^3H .

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ЭЛЕКТРЕТНЫХ СВОЙСТВ ПЛЁНОК ПОЛИЭТИЛЕНА НИЗКОЙ И ВЫСОКОЙ ПЛОТНОСТИ

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

Перспективы практического использования полимерных электретов в преобразовательной технике, микроэлектронике, радиационной дозиметрии и в других областях во многом определяются величиной электретных зарядов и стабильностью характеристик при различных воздействиях[1]. Улучшение электретных, пьезоэлектрических, антистатических свойств полимерных электретов является актуальной задачей. В работе [2] показано, что величина электретных зарядов и их стабильность существенно зависят от особенностей надмолекулярной структуры (НМС) и условий кристаллизации полиолефинов. Было показано, что изменение электретных свойств полиэтилена (ПЭ) высокой плотности (ПЭВП) связано со степенью кристалличности (К), ориентации макромолекул, структурной релаксацией и

модифицирующими факторами. Изучение закономерностей этих процессов (стабилизации избыточных электронов, свободных радикалов и парамагнитных центров, образование, релаксация и накопление объемных зарядов) может привести к разработке более эффективных электретных материалов.

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

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

Электретное состояние в образцах ПЭНП и ПЭВП создавалось путем воздействия на них коронного разряда при напряжении 8 кВ в течение времени 5 мин. Значение электретной разности потенциалов $U_э$ определены методом вибрирующего электрода [2], поверхностная плотность зарядов $\sigma_э$ рассчитана по формуле;

$$\sigma_э = \epsilon \epsilon_0 U_э / h, \quad (1)$$

где ϵ – диэлектрическая проницаемость электрета, ϵ_0 - диэлектрическая постоянная, h –толщина плёнок ПЭ.

Токи термостимулированной деполяризации (ТСД) электрета снимали в режиме короткого замыкания при скорости нагрева образца 4 град/ мин. Зависимости поверхностной плотности электретных зарядов коронно поляризованных плёнок ПЭНП и ПЭВП от времени хранения приведены на рис.1.

Видно, что электреты на основе ПЭВП более стабильны. Величина σ для ПЭНП в течении времени до $t_{xp}=5 \div 10$ часов снижается на 80 %, а у пленок ПЭВП (кривая 1) при значениях $t_{xp}= 10$ суток значения σ составляет $(2 \div 3) \cdot 10^{-4}$ Кл/м². Наблюдаемое значительное различие стабильности электретных зарядов плёнок ПЭНП, ПЭВП могут быть связаны со структурными особенностями этих полимеров и различием кинетики элементарных электронно-ионных процессов в них. Кроме того, на величину электретных зарядов и их стабильность при нормальных условиях хранения могут повлиять также процессы структурной релаксации различных участков полимерной цепи и стабилизация зарядов в ловушках разной природы, (диэлектрические полости, радикалы, наличие разветвлений и примесей и т.д.)

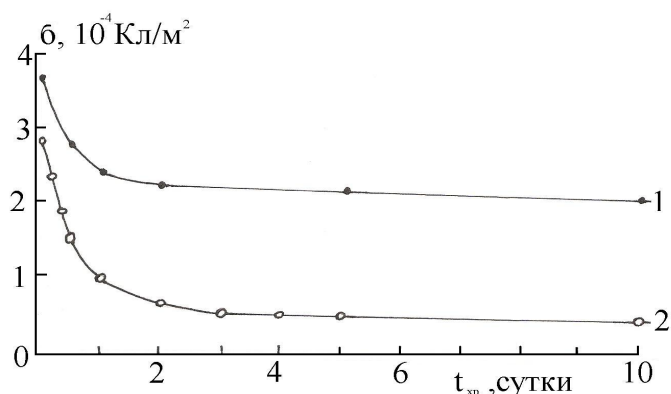


Рис.1 Временные зависимости относительного значения поверхностной плотности электретных зарядов плёнок ПЭВП (1) и ПЭНП (2)

Для установления причин разности термической стабильности и глубину залегания электретных зарядов в ПЭНП и ПЭВП рассмотрим результаты ТСД анализа этих полимеров. (рис.2)

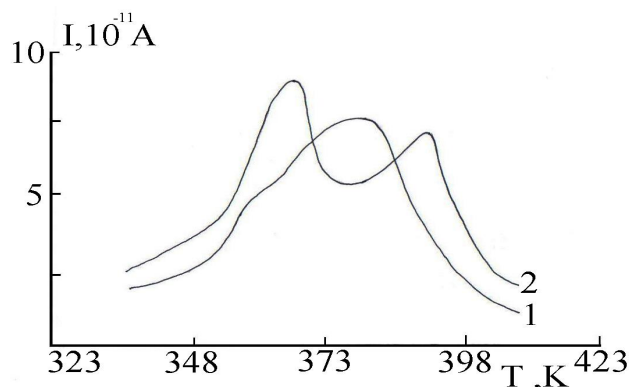


Рис. 2 Кривые ТСД короноэлектретов из плёнок ПЭНП (1) и ПЭВП (2); $U_k=8$ кВ, $T_k=5$ min

Как видно, для электретов из плёнок ПЭНП характерная температура деполяризации составляет 380-390 (кривая 1), а для плёнок ПЭВП наблюдается два максимума ТСД при температурах 360-365 К и 385-390 К (кривая 2). Наличие двух температурных областей деполяризации объясняется двухступенчатым характером спада электретных зарядов в ПЭВП. В отличие от ПЭВП для плёнок ПЭНП характерна меньшая стабильность (рис.1), которая обуславливает деполяризационный пик с одним максимумом.

Наблюдаемые различия величины плотности электретных зарядов и их стабильность ранее объяснены нами со структурными особенностями и конформационными различиями пленок ПЭНП и ПЭВП. Различие структурных “неоднородностей” типа С=О, С=С и т.п, которые могут быть ловушками для электретных зарядов в ПЭНП и ПЭВП (концентрация этих ловушек в ПЭ может достигать в среднем по объему $\sim 10^{19}$ см⁻³). В заключении можно сказать, что стабильность электретных зарядов в плёнках полиэтилена и полипропилена (ПП) определяется не только условиями и режимом поляризации, но и обуславливается другими факторами; например структурными факторами, образованием радикалов и их подвижностью, а также конкуренцией разных релаксационных процессов.

1. Драчёв А.И. Образование полимерных электретов под воздействием низкотемпературной плазмы тлеющего разряда. ХВЭ, 2003, т.37, №5, с. 342-347.
2. А.М. Магеррамов. Структурное и радиационное модифицирование электретных, пьезоэлектрических свойств полимерных композитов. Баку, Элм, 2001, 327с.

PbSe BİRLƏŞMƏSİ ƏSASINDA BƏRK MƏHLUL ƏRİNTİLƏRİNİN FİZİKİ-KİMYƏVİ VƏ TERMoeLEKTRİK XASSƏLƏRİNİN TƏDQIQI

G.M.ƏHMƏDOVA, N.M.ABBASOVA
AZƏRBAYCAN DÖVLƏT İQTİSAD UNİVERSİTETİ

A^{IV} B^{IV} tip birləşmələr defekt guruluşa malik olmaqla əsasən stexiometrik tərkibdən kənarında alınır. Bu tip birləşmələr üçün kub quruluş xarakterikdir. PbTe və PbSe birləşmələri də həmin qrupa daxil olmaqla termo və fotoçeviricilər kimi yarımkeçiricilər texnikasında tətbiq olunurlar. Onların əsasında olan bərk məhlul ərintiləri yüksək termoelektrik və fotohəssas materiallar kimi daha geniş tətbiq olunurlar. (1.2).

Yuxarıda deyilənlərə əsasən PbSe – FeSe sistemi ərintilərinin alınması onların fiziki – kimyəvi və termoelektrik xassələrinin öyrənilməsi məqsədəuyğundur.

Bu məqsədlə PbSe – FeSe sistemi ərintiləri tətqiq edilmiş və onların fiziki – kimyəvi, termoelektrik xassələri öyrənilmişdir. Bunun üçün kompleks fiziki – kimyəvi analiz metodlarından istifadə edərək (PbSe)_{1-x} (FeSe)_x sistemi ərintilərinin bərk məhlul sahəsi müəyyən olunmuşdur. Müəyyən edilmişdir ki, PbSe birləşməsi əsasında 10 mol•% FeSe gədər həll olma sahəsi mövcuddur.

PbSe birləşməsi və onun əsasında 3.5 və 10mol•% FeSe tərkibli fiziki xassələri cədvəldə verilmişdir.

(PbSe)_{1-x} (FeSe)_x bərk məhlul ərintilərinin fiziki xassələri.

Pb _{1-x} Fe _x Se	Termo e.h.q. mkV/dər	Elektrik keçirmə σ Om ⁻¹ Sm ⁻¹	Istilik keçirmə χ Vt/sm.dər	Konsen trasiya n, sm ⁻³	Qəfəs sabiti θ A	Qadağan olunmuş zolağın eni ΔE , eV	μ Sm ² / V•san	Keçirici liyin tipi p, n,
0,00	160	260	12,58	$6,2 \cdot 10^{18}$	6.41	0.26	1200	p
0,03	140	220	12,15	$8,8 \cdot 10^{18}$	6.08	0.31	6800	n
0,05	131	203	11,57	$4,2 \cdot 10^{19}$	6.02	0.46	5400	n
0,10	100	173	10,45	$9,8 \cdot 10^{19}$	5.97	0.53	2600	n

Rentgen faza analizinin nəticəsinə əsasən qəfəs sabitinin tərkibdən asılı olaraq dəyişməsi Vegard qanununa tabe olduğundan PbFe-FeSe sistemində PbSe tərəfdə bərk məhlul sahəsinin 10mol•% FeSe - ə qədər olduğunu təsdiq edir.

$L\sigma \sim f(10^3/T)$ asılılığından istifadə edərək qadağan olunmuş zolağın eni hesablanmış və müəyyən edilmişdir ki, $\Delta E = 0,26 \div 0,53$ eV intervalında dəyişərək artır.

PbSe birləşməsi və onun əsasında olan 3,5,7,10mol•% FeSe tərkibli nümunələrin termoelektrik parametrləri (α , σ , χ) 300K temperaturda ölçülmüşdür.

Ölçmələrə əsasən demək olar ki, elektrikkeçirmə və termoelektrik hərəkət qüvvəsi tərkibdən asılı olaraq azalır və bu azalma bərk məhlul sahəsindəki nümunələrdə yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının dəyişməsi ilə izah olunur. Istilikkeçirmə $\chi_{üm} = \chi_{el} + \chi_{qəfəs}$ və $\chi_{el} = L\sigma T$ ifadəsindən hesablanmışdır. Istilikkeçirmə tərkibdən asılı olaraq azalır. Istilikkeçirmənin tərkibdən asılı olaraq azalması isə ümumi istilik keçirmənin ($\chi_{ümumi}$) elektron hissəsinə düşən ($\chi_{e=L\sigma T}$) hissəsinin azalması ilə ($\chi_{üm} = \chi_{el} + \chi_{qəfəs}$) göstərilə bilər.

Beləliklə, alınan nəticələri təhlil edərək demək olar ki, orta temperatur intervalında işləyə bilən yüksək effektivlə malik termoelektrik materiallar alınmışdır.

Ədəbiyyat

1.Н.Х.Абрикосов, Л.Е.Шелимова. Полупроводниковые материалы на основе соединений А^{IV} В^{IV}. М.: Изд. Наука 1995, 199с.

2.М.А.Алиджанов. закономерность свойства в соединениях А^{IV} В^{IV}. Инстит. ПФХАНАзССР. М.Деп.ВИНИТИ № 4909-В.87,1987,74с.

ИССЛЕДОВАНИЕ СИСТЕМЫ АГАР-ВОДА-ХЛОРИД НАТРИЯ

В.В.Прудько, Р.Ш.Ахмедова

*Бакинский Государственный Университет
Азербайджанский Технический Университет*

Полимерные изделия часто формируют из растворов или студней, структура которых в значительной степени определяет структуру формируемого изделия [1]. Поэтому изучение структуры раствора и студня не менее важно, чем изучение структуры самого полимера.

Прежде чем раствориться высокомолекулярный полимер набухает [2]. Набухание на всегда заканчивается растворением. Очень часто после достижения некоторой степени набухания процесс прекращается, что можно объяснить ограниченным смещением полимера и растворителя, а также существованием между молекулами полимера поперечных связей.

В процессе ограниченного набухания твердых линейных полимеров или из растворов полимеров при соответствующем изменении термодинамических условий образуются студни. В случае неограниченного растворения студень не образуется.

Студень – бинарная система, состоящая из пространственной сетки, образованной макромолекулами или их агрегатами (НМЧ), в которой распределены молекулы низкомолекулярной жидкости [1]. Такие сетки при достаточно высокой концентрации полимера могут образовываться и в растворах. Основное отличие студня от раствора состоит в том, что в растворах такие сетки имеют флуктуационный характер, а в студне сетка имеет нефлуктуационный характер. При изменении температуры сетка может разрушаться тепловым движением и тогда она приобретает флуктуационный характер, т.е. студень переходит в состояние раствора. В подавляющем большинстве студней узлы сетки образованы надмолекулярными структурными элементами, размеры которых изменяются с температурой и природой растворителя [3].

В данной работе проведено исследование водных растворов агара при добавлении NaCl, с использованием метода дисперсии оптической плотности. Метод основан на измерении оптической плотности при разных длинах волн падающего света. Обработка экспериментальных данных проводилась по методике, разработанной Клениным [4] на основании теории Ми. Концентрация агара составляла 0,5%, а NaCl – 0,01; 0,2 и 1 моль.

Были получены температурные зависимости оптической плотности, которые позволили определить температуры застудневания и плавления. Температура застудневания – это температура, начиная с которой становится возможным образование студня и определяется в данном случае как температура начала резкого возрастания оптической плотности при понижении температуры (при некотором выбранном времени выдерживания в условиях каждой температуры) [3]. Температура плавления – это температура перехода студня в текучее состояние при нагревании студня с разрушением образующего студень пространственного каркаса. Температуры застудневания и плавления не совпадают друг с другом, что приводит к образованию петли гистерезиса кривыми охлаждения и нагревания. Это связано с существенным различием механизмов образования и плавления студня. Температура плавления студня в ряде случаев зависит от времени и особенно от температуры формирования студня.

Переход раствор-студень, т.е. процесс застудневания, характеризуется резким возрастанием оптической плотности во времени [1]. Это обусловлено постепенным образованием более прочных связей, не разрушающихся под действием теплового движения и малых напряжений сдвига.

Особенность растворения полимера, в сравнении с растворением низкомолекулярных веществ, состоит в том, что смешиваются компоненты, размеры молекул которых различаются в тысячи раз; отсюда и разная подвижность молекул. При соприкосновении полимера с низкомолекулярной жидкостью её молекулы начинают быстро проникать в фазу полимера, а огромные макромолекулы за это время не успевают перейти в фазу растворителя. Медленная диффузия огромных макромолекул и их ассоциатов, обладающих очень большими временами релаксации, приводит к тому, что равновесие в растворах полимеров устанавливается очень медленно. Поэтому для правильной оценки свойств растворов полимеров следует изучать их изменения во времени и считать достоверными только те результаты,

которые во времени уже больше не меняются. Поэтому для установления температуры застудневания в работе были получены кинетические зависимости оптической плотности и за температуру застудневания принимали температуру, ниже которой оптическая плотность изменялась со временем. На время релаксации влияет термодинамическое качество растворителя. В плохих растворителях время релаксации больше, чем в хороших. Для концентрированных растворов это связано с образованием ассоциатов и более крупных надмолекулярных структур, размеры которых тем больше, чем хуже качество растворителя.

Плотность флуктуационной сетки зависит от качества растворителя. В среде растворителей плохого качества вероятность контактов полимер-полимер значительно больше, чем в среде хороших растворителей. Поэтому плотность ассоциатов и флуктуационной сетки в первом случае больше, чем во втором.

На процесс структурообразования влияют следующие факторы: концентрация, форма и размер макромолекул полимера или надмолекулярных частиц, температура, время и присутствие электролитов. Влияние электролитов очень сложно. Как известно, при растворении электролитов в воде может наблюдаться либо положительная гидратация ионов (что соответствует стабилизации структуры воды), либо отрицательная (что соответствует разрушению, структуры воды). Влияние соли на структуру воды, в свою очередь, сказывается на поведении макромолекул в растворе и на процессе студнеобразования. Разрушение структуры воды способствует повышению растворимости полимера, а стабилизация структуры воды, наоборот, снижает растворимость полимера. Снижение растворимости полимера – это одно из условий образования студня.

Данные, полученные для системы агар-вода-NaCl показали, что при данных концентрациях соли оптическая плотность, температуры застудневания и плавления, площади петель гистерезиса, размеры надмолекулярных частиц увеличиваются, что свидетельствует о положительном влиянии NaCl на процесс студнеобразования и об упрочнении студня. Это происходит вероятно за счет того, что структура воды при добавлении NaCl в раствор агара стабилизируется и растворимость агара ухудшается.

Литература

1. Тагер А.А. Физикохимия полимеров. М.: Химия, 1978, 544с.
2. Практикум по химии и физике полимеров (под ред. Куренкова В.Ф.) М.:Химия, 1990, 304с.
3. Роговина Л.З., Слонимский Г.Л. Природа студнеобразования, структура и свойства студней полимеров. Успехи химии, т.XLIII, вып.6, 1974, с.1102-1135.
4. Кленин В.И., Щеголев С.Ю., Лаврушин В.И. Характеристические функции светорассеяния дисперсных систем. Изд-во Саратовского уни-та, 1977, 177с.

РЕОЛОГИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РАСТВОРОВ И СТУДНЕЙ АГАРА

Э.А.Масимов, В.В.Прудько

Бакинский Государственный Университет

Реология изучает течение жидкостей, в которых наряду с вязкой необратимой деформацией существует и заметная обратимая эластическая деформация [1,2]. Реология полимеров является теоретической основой их переработки. Только зная основы реологии, можно обеспечить получение изделий нужного качества. Некоторые полимеры невозможно перевести в вязкотекучее состояние из-за их склонности к термодеструкции и механодеструкции при высоких температурах. Такие полимеры

перерабатываются в виде растворов. Поэтому предметом реологии полимеров являются не только их расплавы, но и растворы.

Реологическое поведение полимеров и их растворов определяется не только температурой, но и природой полимера, его молекулярной массой и молекулярно-массовым распределением, а также напряжением и скоростью сдвига, при которых осуществляется течение раствора или расплава [1,3,4]. Поэтому нельзя характеризовать реологические свойства полимера по одной величине, например, по вязкости. Охарактеризовать реологическое поведение полимера можно, лишь установив зависимость вязкости от напряжения или от скорости сдвига, либо зависимость напряжения сдвига от скорости сдвига и получив при этом кривые течения.

Наиболее простым является случай, когда напряжение сдвига пропорционально скорости сдвига [4]:

$$\tau = \eta \dot{\gamma}$$

Выражение представляет собой закон Ньютона, где τ - напряжение сдвига, $\dot{\gamma}$ - скорость сдвига; η - коэффициент пропорциональности, называемый коэффициентом вязкости или просто вязкостью.

Если закон Ньютона соблюдается, то зависимость напряжения сдвига от скорости сдвига имеет вид прямой линии [4,5,6]. Если с ростом напряжения сдвига скорость течения начинает расти быстрее, чем это следует из закона Ньютона, что обусловлено изменением структуры полимера (раствора полимера) в процессе течения, приводящим к падению вязкости, то прямолинейная зависимость нарушается. Чем больше напряжение сдвига, тем меньше вязкость. Падение вязкости с ростом напряжения сдвига называют аномалией вязкости, а величину вязкости, зависящую от напряжения сдвига, – эффективной или структурной вязкостью

Для получения кривых течения в данной работе использовали ротационный вискозиметр [7]. В данном вискозиметре образец раствора полимера помещается в зазор между двумя цилиндрами, из которых один вращается, а другой – неподвижен. К внутреннему подвижному цилиндру приложен определенный крутящий момент действием грузов, перекинутых через блоки. Главное преимущество ротационных вискозиметров перед капиллярными при измерении вязкости заключается в постоянстве скорости сдвига в зазоре между цилиндрами. Для температурных измерений неподвижный цилиндр снабжен термостатируемой рубашкой, которую подсоединяют к термостату. Точность термостатирования $\pm 0,5^\circ\text{C}$. Температуру образца определяли с помощью термопары. Измерения проводили через 20-30 минут после установления нужной температуры. Этого достаточно для установления в системе равновесного состояния.

Исследования проводили с водными растворами агара, концентрации которого составляли 0,5% и 2%. Поскольку агар является студнеобразующим полимером, то температурные измерения с водными растворами агара начинали с высокой температуры, а затем температуру понижали. Исследования проводили при температурах как выше температуры студнеобразования, когда мы имеем дело с раствором, так и ниже неё, т.е. при температурах когда раствор превращается в студень.

Исследования показали, что при высоких температурах, т.е. при температурах выше температуры студнеобразования, растворы агара ведут себя как ньютоновские жидкости, подчиняющиеся закону вязкого течения Ньютона, и при росте напряжения сдвига вязкость остается постоянной. Для 0,5%-ого раствора подобные зависимости $\eta = f(\tau)$ были получены при 60° и 70°C , а для 2%-ого раствора – при 75°C .

При температурах ниже температуры студнеобразования зависимости вязкости от напряжения сдвига имеют вид кривой течения, состоящей из трех участков. Такие

кривые были получены для 0,5%-ого раствора при 30°C, а для 2%-ого – при 35°C.

Полученные полные кривые течения можно объяснить следующим образом. В области малых значений напряжения сдвига кривая течения имеет прямолинейный участок, т.е. раствор в этих условиях течет как ньютоновская жидкость, обладающая большой вязкостью. Постоянство значения вязкости на этом участке объясняется тем, что при малых значениях напряжения сдвига процессы ориентации и деформации макромолекул не влияют на вязкость жидкости. Этот начальный участок кривой (I) может быть настолько малым, что его не всегда удается получить. Вязкость, соответствующая малым значениям напряжения сдвига, может быть настолько велика, что не обнаруживается течение при напряжениях сдвига меньших некоторого предельного напряжения. Такое предельное напряжение для 0,5%-ого раствора равно ≈ 38 Па, а для 2%-ого ≈ 40 Па.

При возрастании напряжения сдвига всё в большей степени начинают происходить процессы разрушения надмолекулярной структуры, ориентации и деформации макромолекул (II-ой участок кривой течения). При этом вязкость уменьшается и в некоторой точке достигает постоянного минимального значения – предельной вязкости при напряжении сдвига равном ≈ 47 Па (для 0,5% раствора агара) и ≈ 50 Па (для 2% -ого раствора).

При дальнейшем росте напряжения сдвига вязкость остается постоянной (III участок). В этом случае надмолекулярная структура предельно разрушена, клубки макромолекул предельно ориентированы, структура раствора больше не меняется и вязкость снова перестает зависеть от напряжения сдвига.

Таким образом, на I и III участках раствор ведет себя как ньютоновская жидкость, однако надмолекулярная структура системы столь различна в этих двух состояниях, что по вязкости они могут сильно отличаться. На II-ом участке раствор ведет себе как неньютоновская аномально – вязкая среда.

Литература

1. Энциклопедия полимеров. М.: Сов. энци., 1972, т. I, 1224 г.
2. Тернер Р.В. Теоретические основы переработки полимеров. М.: Химия, 1977, 464 с.
3. Кулезнев В.М., Шершнева В.В. Химия и физика полимеров. М.: Высшая школа, 1988.
4. Тагер А.А. Физикохимия полимеров. М.: Химия, 1978, 544 с.
5. Урьев Н.Б., Трофимов Л.Е. Коллоид. ж., 2003, т.65, № 3, с 411.
6. Хилько С.Л., Титов Е.В., Федосеева А.А. и др. Коллоид ж., 2006, т.68, №1, с 114.
7. Рабек Я. Экспериментальные методы в химии полимеров. Мир: т. I, 1983, 384 с.

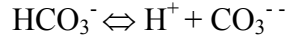
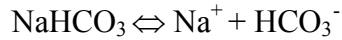
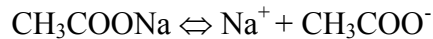
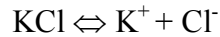
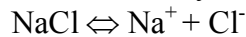
"KVARTASOL" MƏHLULUNUN BƏZİ FİZİKİ-KİMYƏVİ XASSƏLƏRİNİN TƏDQIQI

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

Praktikada izotonik və hipertonic məhlullar orqanizmdə qan dövranını gücləndirmək, kiçik kapilyarlarda qan dövranını bərpa etmək, orqanizmi toksin maddələrdən təmizləmək və onda qan təzyiqini normal vəziyyətə gətirmək üçün geniş istifadə olunur. Bunlardan biri də Kvartasol izotonik duru duz-su məhluludur.

Kvartasol 1 litr həcmində 4,75q NaCl, 1,5q KCl, 1q NaHCO₃ və 2,6q CH₃COONa duzları olan izotonik məhluldür [1]. Bu məhlul orqanizmdə qana hemodinamik təsir göstərir, qanın qatılmasına mane olur, onu toksin maddələrdən təmizləməyə kömək edir.

Qeyd etmək lazımdır ki, kvartasol məhlulu duru məhluldur. Onun tərkibində olan duzlar demək olar ki, suda tam dissosiasiya edərək ionlara ayrılırlar:



Bu məhlul qanın tərkibinə daxil edildikdə bu ionların (anion və kationların) hesabına qanın tərkibində ion zənginliyi yaranır ki, o da öz növbəsində qanda gedən kimyəvi proseslər nəticəsində kiçik kapilyarlarda qan dövranını gücləndirir. Bunun sayəsində orqanizmdə mövcud olan toksin maddələr qanın tərkibinə qarışaraq qara ciyər və böyrəyə keçərək onların vasitəsilə parçalanır və orqanizmdən kənar olur.

Deyilənlərdən belə nəticəyə gəlmək olar ki, kvartasol məhlulunun reoloji xassələrinin temperaturdan asılılığının öyrənilməsi onun tədqiqi üçün əhəmiyyət kəsb edər.

Bu işdə kvartasol izotonik məhlulunun dinamik özlülüyü, sıxlığı və elektrik keçiriciliyinin (normal atmosfer təzyiqində) temperatur asılılığı öyrənilmişdir. Tədqiq olunan məhlulun özlülüyünün və sıxlığının temperatur asılılığından isə özlü axının aktivləşmə parametrləri (ΔG_η^* , ΔH_η^* , ΔS_η^*) [2] sıxlığın temperatur asılılığından isə istidən genişlənmə əmsalı (α_p) [3] hesablanmışdır.

Aparılan ölçmələr göstərmişdir ki, kvartasol məhlulu üçün istidən genişlənmə əmsalı temperaturun artması ilə qiymətcə böyüyür. Lakin aktivləşmə parametrləri temperaturun artması ilə azalır. Hər bir duru duz - su məhlullarında olduğu kimi kvartasol məhlulu üçün də $\eta \cdot \sigma$ hasili temperaturdan sərbəst olaraq sabit qalır, yəni baxılan temperatur intervalında ($10^\circ\text{C} \div 50^\circ\text{C}$) Valden qanunu ödənilir.

Bu məhlul orqanizmə daxil edilməmişdən əvvəl su hamamında ($+36 - +38^\circ\text{C}$) qızdırılır və orqanizmdə kaliumun miqdarının artması ehtimalı nəzarətdə saxlanılmalıdır.

ƏDƏBİYYAT

1. M.D.Машковский. Лекарственные средства МООО. Издательство Новая Волна. 2000. 600с
2. Məsimov E.Ə., Həsənov H.Ş., Paşayev B.G., Həsənov N.H. Özlü axının aktivləşmə parametrlərinin təyini üsulları. Bakı Dövlət Universitetinin xəbərləri, fizika-riyaziyyat elmləri seriyası. 2005, N 2. s.138-150
3. Paşayev B.G., Həsənov N.H., Musayeva S.İ. N-amil spirtinin özlü axının aktivləşmə parametrləri və termik xassələri. "Fizikanın müasir problemləri" II Respublika Elmi konfransının Materialları. BDU, Bakı, 28-29 noyabr, 2008.s.143-146.

QEYRİ-ÜZVİ ƏLAVƏLƏRİN KÖMƏYİ GELİN REOLOJİ XASSƏLƏRİNİN İDARƏ OLUNMASI

Məsimov E.Ə., İmaməliyev A.R.

Bakı Dövlət Universiteti, Fizika Problemləri İnstitutu

Gelin praktik tətbiqləri onun reoloji xassələrinin məqsədyönlü şəkildə idarə oluna bilməsini zəruri edir. Bu xassələr gelatorun təbiətindən və konsentrasiyasından başqa, həm də gelə daxil edilən əlavələrin təbiətindən asılıdır. Gelə daxil edilən əlavələr gelin əmələ gəldiyi mühitin xassələrini dəyişməklə onun reoloji xassələrini də əhəmiyyətli dərəcədə dəyişə bilər. Bu işdə koaksial silindrik viskozimetr vasitəsi ilə bəzi metalların duzlarının (NaCl , KCl və CaCl_2) və əsaslarının (NaOH , KOH və Ca(OH)_2) aqar gelinin

reoloji xassələrinə (gelin axmasının astana gərginliyi σ_0 və ən kiçik Nyuton özlülüü η_∞) təsiri öyrənilmişdir. Bu kəmiyyətlər münüm reoloji parametrlər olub gelin mikrostrukturunda haqqında qiymətli informasiya daşıyır. Onların qiymətləri gelin axın əyrisindən alınır. Axın əyrisi dedikdə sürüşmə deformasiyasının sürətinin gələ tədbiq olunan mexaniki gərginlikdən asılılığı ($\dot{\gamma}(\sigma)$) nəzərdə tutulur. Bu asılılıq $\sigma = \sigma_0 + \eta\dot{\gamma}$ Binqam qanunu şəklindədir. σ_0 - axının astana gərginliyi gelin möhkəmlik ölçüsü kimi götürülə bilər.

Cədvəl 1

Gelin tərkibi	σ_0 , Pa	η_∞ , Pa·san
1.5%-li aqar	20.9	0.75
1.5%-li aqar +0.1% NaCl	17.9	2
1.5%-li aqar +0.1% KCl	37.5	0.6
1.5%-li aqar +0.1 %CaCl	25.8	5.5

Cədvəl 2

Gelin tərkibi	σ_0 , Pa	η_∞ , Pa·san
1%li aqar	17	0.28
1%aqar+0.1% NaOH	20	0.28
1%aqar+0.1% KOH	16	0.28
1%aqar+0.05%Ca(OH) ₂	16	0.25

Duzların qeyd olunan kəmiyyətlərin qiymətlərinə təsiri Cədvəl 1 də verilmişdir. Cədvəldən aşağıdakı qanunauyğunluqları görmək olar:

- NaCl duzu gelin möhkəmliyini bir qədər azaldır, özlülüyünü isə artırır;
- KCl duzu gelin möhkəmliyini kəskin artırır, özlülüyü bir qədər azaldır;
- CaCl₂ duzu gelin möhkəmliyini azca artırır, özlülüyünü isə kəskin artırır.

Cədvəl 2 göstərir ki, duzlarla müqayisədə əsaslar gelin reoloji xassələrini əhəmiyyətli dərəcədə dəyişir.

Gelin möhkəmliyi fəza torunu əmələ gətirən assosiatlar arasındakı tikişlərin sayı və enerjisi ilə, özlülüyü isə bu assosiatların sayı və ölçüsü ilə müəyyən olunur. Alınan nəticələrə əsasən deyə bilərik ki, natrium duzunun əlavə olunması assosiatların ölçüsünün artmasına səbəb olur. Kalium duzu assosiatların ölçüsünü azaldır, lakin onlar arasındakı rabitələrin sayını artırır. Kalsium duzu isə assosiatların ölçüsünü və sayını kəskin artırmaqla onlar arasındakı tikişlərin sayını da bir qədər artırır. Əsaslar haqqında onu deyə bilərik ki, onlar gelin mikrostrukturunu zəif dəyişirlər.

Nəticələrin müqayisəsi göstərir ki, gelin mikrostrukturundakı bu dəyişikliklər ionların, əsasən də anionların (baxılan halda Cl⁻ ionlarının) təsiri ilə bağlıdır. Əsasların gələ zəif təsirinin əsas səbəbi onların suda duzlarla müqayisədə zəif dissosiasiyaya uğramasıdır. Bunu qeyd olunan sistemlərin sulu məhlullarının elektrik keçiriciliyinin ölçülməsi ilə bağlı təcrübə verilənlər təsdiq edir.

Görülən işin nəticələrinin təhlili göstərir ki, gələ daxil edilən əlavələrin köməyi ilə gelin mikrostrukturunu dəyişmək, bunun əsasında isə gelin reoloji parametrlərini müəyyən hədlərdə idarə etmək mümkündür.

OPIOİD PEPTİDLƏRİNİN FƏZA QURULUŞLARININ KOMPYUTER MODELƏŞDİRİLMƏSİ

G.Ə.Haqverdiyeva

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

Bakı, Azərbaycan, E-mail: HagverdiGulnara@mail.ru

Opioid peptidləri mərkəzi və periferik sinir sistemlərinə təsir edən xüsusi neyropeptidlərdir. Orqanizmdə bioloji aktiv molekulların fizioloji təsirləri onların fəza quruluşları, elektron və dinamik konformasiya xassələri ilə bağlıdır. Dermorfin, deltorfin,

kiotorfin, neokiotorfin, hemorfin peptidlərinin və onların analoqlarının fəza quruluşları kompyuterdə modelləşdirilmişdir. Birinci mərhələdə mexaniki model çərçivəsində bu peptidlərin kiçik enerjili konformasiyalarının enerji və həndəsi parametrləri müəyyənəndirilmişdir. Sonrakı mərhələdə AM1 kvantkimyavi metodunun köməyi ilə bu quruluşları xarakterizə edən elektrik dipol momenti, atomların parsial yükləri, elektron sıxlığının paylanması kimi elektron parametrləri hesablanmışdır. Son mərhələdə peptidlərin molekulyar dinamikası tədqiq olunmuşdur, su mühitini nəzərə alaraq dinamik xassələri araşdırılmışdır. Alınmış nəticələri bioloji testlər ilə müqaisə edərək peptidlərin bioloji aktiv konformasiyaları modelləşdirilmişdir.

Dermorfin (H-Tyr-D-Ala-Phe-Gly-Tyr-Pro-Ser-NH₂), deltorfin I (H-Tyr-D-Ala-Phe-Asp-Val-Val-Gly-NH₂) və deltorfin II (H-Tyr-D-Ala-Phe-Glu-Val-Val-Gly-NH₂) Phyllomedusa ailəsinə aid olan qurbağaların dərisindən alınmış endoqen xətti peptidlərdir. Onlar, müvafiq olaraq, μ -, δ 1- və δ 2-opiat reseptorlarla bağlanırlar. Bu 3 peptidin hamısında 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. Təqdim olunmuş işdə qeyd olunan peptidlərin fəza quruluşlarının müqaisəli analizi aparılmış, onların analqetik effektə cavab verən ümumi konformasiya xassələri və hər birinə xas olan quruluş xüsusiyyətləri araşdırılmışdır. Müəyyən edilmişdir ki, dermorfinin qlobal konformasiyasında Tyr1-Cly4 seqmenti spiralvari quruluşa malikdir. Bu konformasiyada D-Ala2 amin turşusu qalığının və molekulun C-ucunda yerləşən NH₂ amid qrupunun atomlarının fəzada yaxınlaşması ilə kvazisiklik quruluş əmələ gəlir. Molekulun başqa kiçik enerjili konformasiyalarında isə 3-cü və 6-cı qalıqların yaxınlaşması nəticəsində kvazisiklik quruluş əmələ gəlir və fenol halqası konformasiya cəhətdən sərt olan prolin halqasına koplana vəziyyət alır. Qeyd edək ki, dermorfin molekulunun ən stabil konformasiyaları Tyr1-DAla2 dipeptid seqmentinin əsas zəncirinin bükülü quruluşda olması ilə xarakterizə olunur. Görünür, belə bir minimal struktur tələb bu peptidin aktivliyi üçün əhəmiyyət kəsb edir. Deltorfinlərin optimal quruluşlarında Val5 amin turşusundan başlayaraq peptid zəncirin dönməsi müşahidə olunur, bu da ki molekulun N-uclu fizioloji aktiv tetrapeptid və C-uclu Val-Val-Gly tripeptid fraqmentlərinin yaxınlaşmasını təmin edir. Bu konformasiyalar effektiv elektrostatik kontaktlar və bir neçə molekul daxili hidrogen rabitələrinin yaranması ilə xarakterizə olunurlar. Bundan başqa bu quruluşlarda əsas zəncirin intensiv dispersion kontaktları müşahidə olunur. Dönüş nəticəsində Val5 amin turşusu molekulun periferiyasında lokallaşır və bu səbəbdən onun yan zənciri müəyyən konformasiya sərbəstliyinə malikdir. Beləliklə, hər iki deltorfin molekulunun ən stabil konformasiyaları N-uclu tetrapeptid seqmentinin əsas zəncirinin bükülü quruluşda olması ilə xarakterizə olunurlar. Belə nəticəyə gəlmək olar ki, deltorfinlərin analqetik effektinə onların N-uclu tetrapeptidlərinin quruluşları cavabdehdir.

Analqetik effekt göstərən kiotorfinin (Tyr-Arg), neokiotorfinin (Thr-Ser-Lys-Tyr-Arg) və onların [D-Arg]-bioloji aktiv analoqlarının tədqiqi aparılmışdır. Bu analoqlar 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. Hər iki peptidin fəza quruluşlarını təsvir edən stabil konformasiyalar yığımı müəyyən edilmişdir, onların həndəsi, enerji parametrləri və bu quruluşları stabilləşdirən qüvvələr təyin edilmişdir. Müəyyən olunmuşdur ki, arqininin D-izomerləşməsi bu peptidlərin konformasiya imkanlarını məhdudlaşdırır və onların yalnız tirozin-arqinin seqmentinin bükülü quruluşa malik olan konformasiyalarını reallaşdırır. Bu cür əvəz etmə hər iki molekulda arqininin yan zəncirində

və molekulların sonluqlarında elektron sıxlığının paylaşmasının diyişməsinə səbəb olaraq, bu peptidlərin daha dayanaqlı vəziyyət almasını təmin edir və bu da ki onların aktivliyinə təsir göstərir. Hesablamalar nəticəsində aşkar olunmuşdur ki, spiralvari (tam spiral, N- və ya C-ucardan başlayaraq spirallaşan) 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 zəcirləri 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.

Qeyri-tipik opioid peptidlər sinfini təşkil edən hemorfinlər mərkəzi və periferik sinir sistemində geniş yayılmışlar, onlar beyində, plazmada, onurğa sümüyünün iliyində müstəqil şəkildə aşkar olunmuşlar. Bu peptidlərin quruluşları, əldə edilmə mexanizmləri, bioloji aktivliyi bir çox alimlərin marağına səbəb olaraq geniş tədqiq olunur. Hemorfinlər bir sıra fizioloji funksiya yerinə yetirirlər. Onlar bioloji aktiv molekulların fəaliyyətini tənzimləyirlər. Belə ki, hemorfinlər enkefalini parçalayan fermentləri ingibirləşdirirlər. Bu keyfiyyət onların analgetik effekt göstərdiyini təsdiqləyir. Ağrıkəsiçi təsirdən başqa, onlar ürək-damar sisteminin fəaliyyətinin tənzimlənməsində və orqanizmin təzyiqinin yuxarı həddinin qərarlaşmasında böyük rol oynayırlar. Bundan başqa hemorfinlər angiotenzinin AT4 reseptoru ilə bağlantısını və ona identik olan insulin-tənzimləyici N aminopeptidazanın və IV dipeptidazanın katalitik aktivliyini ingibirləşdirirlər. Hemorfinlər illtihaba, şiş hüceyrələrinə qarşı effekt göstərir, immun sistemin fəaliyyətində iştirak edirlər. Təqdim olunmuş işdə hemorfin sinfinə mənsub olan müxtəlif uzunluqda olan (4–10 amin turşularından ibarət) peptidlərin fəza quruluşlarının nəzəri tədqiqatı aparılmışdır. Müəyyən olunmuşdur ki, molekulların N- və C-uc hissələrinə nəzərən hemorfin-4 peptidinin ardıcılığına uyğun mərkəzi Tyr-Pro-Trp-Thr tetrapeptid fraqmenti konformasiya sərtliyinə malikdir. Tədqiq olunmuş peptidlərin optimal quruluşlarının bu seqmentində peptid zəncirinin dönüşü aşkar olunmuşdur. Atomların parsial yüklərinin analizi göstərir ki, bu hissəyə daxil olan Tyr və Trp qalıqlarının atomlarında elektron sıxlığının dəyişməsi baş verir. Bu onunla izah olunur ki, başqa quruluşlara nəzərən dönüş olan konformasiyalarda qeyd olunan qalıqların aromatik halqaları koplana vəziyyət alır və molekulların daha kompakt forma almasına səbəb olurlar. Alınmış nəticələr Tyr-Pro-Trp-Thr fraqmentinə hemorfinlərin spesifik təsirlərinə cavab verən aktiv mərkəz kimi baxmağa imkan verir.

POLIETİLENQLIKOLUN SULU MƏHLULLARIN MOLEKULÜSTÜ QURULUŞUNA TƏSİRİ

E.Ə. Məsimov, H.F. Abbasov

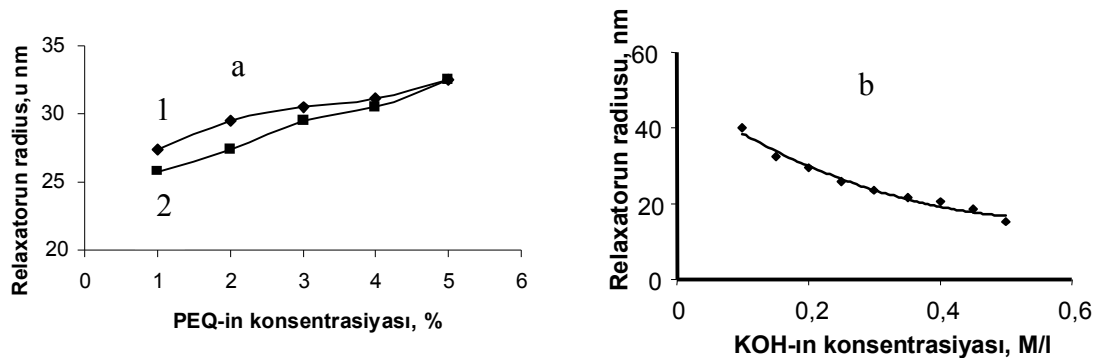
Baki Dövlət Universiteti, Fizika Problemləri İnstitutu

Polietilenqlikol (PEQ) bir çox vacib xassələrinə görə təbabətdə, kimya, neft, qida və kosmetika sənayesində və digər sahələrdə geniş tətbiq olunur. Belə ki, polietilenqlikollardan bağlayıcı, qatılaşdırıcı, stabilləşdirici, məmulatın matrisi kimi, hidrofob molekullarla kovalent əlaqə yaratmaqla qeyri-ion səthi aktiv maddələrin alınmasında, asılqan hissəciklərinin koagulyasiyası üçün, texnika və təbabətdə inyeksiya zamanı hidrodinamik müqavimətin azaldılması məqsədilə, yeyinti məhsullarının, aqroximikatlarda suda həlloluna bilən zəhərli olmayan örtüklə örtülməsi üçün, boya və lateklərdə bağlayıcı və qatılaşdırıcı kimi istifadə olunur. Əksər hallarda polietilenqlikolun birbaşa özündən yox, onun sulu məhlulundan istifadə olunduğundan müxtəlif molekulyar kütləli polietilenqlikolların sulu məhlullarının tədqiqi böyük əhəmiyyət kəsb edir [1,2]. İşdə polietilenqlikolun müxtəlif molekulyar kütləli fraksiyalarının ($M_n = 1500, 3000, 6000$ və 20000) KOH və NaOH-ın 0.1 mol/l sulu

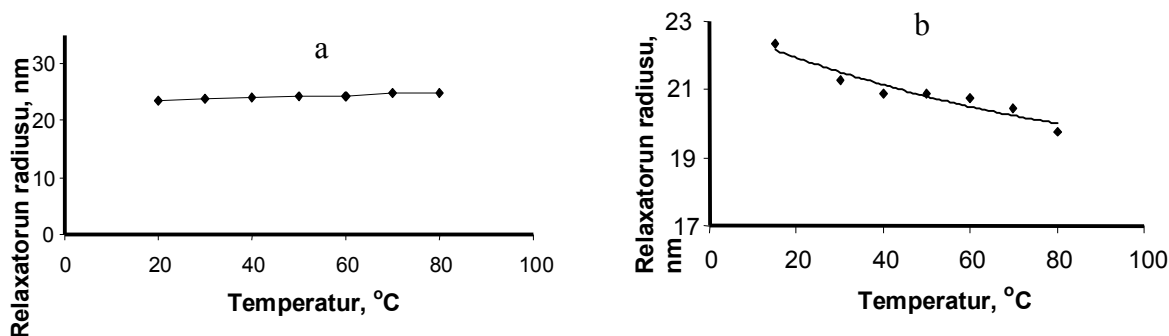
məhlullarının termodinamik halına və bu məhlulda mövcud olan bəzi strukturlara (klatratlara, klasterlərə və s.) stabilizasiya təsirləri tədqiq edilmişdir [3]. Tədqiqatlar 293-323 K temperatur intervalında polimerlərin və qələvilərin müxtəlif konsentrasiyaları üçün alçaqtezlikli dielektrik spektroskopiyaya metodu ilə aparılmışdır. Məhlulların hər biri üçün Koul-Koul diaqramları [4] qurulmuş və diaqramlardan relaksasiya tezlikləri təyin edilmişdir. Debay modeli əsasında məhlullarda mövcud olan uyğun relaksatorların ölçüləri qiymətləndirilmişdir və bu relaksatorların nanoölçülərə malik olduğu aşkarlanmışdır (Şəkil 1,2). Qeyd edək ki, son zamanlar intensiv tədqiqat obyektləri olan və çeşidli sahələrdə geniş tətbiq olunan nanohissəcikləri almaqla yanaşı onların stabilliyini, o cümlədən, termostabilliyini təmin etmək çox vacib problemlərdəndir.

Müəyyən olunmuşdur ki, polietilenqlikolun konsentrasiyasının artması (Şəkil 1a, 1 əyrisi PEQ 1500-ə, 2 əyrisi PEQ 3000-ə aiddir) suyu strukturlaşdırır, yəni polimerin konsentrasiyası artdıqca aqreqlərin ölçüləri böyüyür. Zənnimizcə bu ona görə baş verir ki, polietilenqlikol makromolekulları uclardakı OH qrupları vasitəsi ilə sərbəst su molekullarını özünə hidrogen rabitəsilə bağlayır, su daha çox strukturlaşır. Məhlulda PEQ-in konsentrasiyası, yəni vahid həcmdəki makromolekulların sayı artdıqca OH qruplarının sayı artdığına görə strukturlaşma güclənir.

Temperatur artdıqca polimer məhlullarındakı aqreqlərin ölçüləri dəyişir (Şəkil 2a), yəni polimer məhluldakı aqreqlərin temperaturun dəyişməsi ilə dağılmasına mane olur, stabilizasiya təsir göstərir. Polimerin stabilizasiya təsiri yüksək temperaturlarda özünü daha qabarıq şəkildə biruzə verir. Müqayisə üçün onu da qeyd edək ki, polimer olmadıqda KOH və NaOH – in sulu məhlullarındakı aqreqlər temperaturun artması ilə dağılırlar (Şəkil 2b). Bu tip məhlullarda qələvinin konsentrasiyasının artması da məhlulun strukturuna dağıdıcı təsir göstərir (Şəkil 1b). Maraqlıdır ki, PEQ-in molekulyar kütləsinin çox böyüməsi (20000) onun stabilizasiya təsirini zəiflədir. Fikrimizcə makromolekulun orta kvadratik uzunluğu suda mövcud olan relaksatorların (klasterlərin) çevrəsinin uzunluğu ilə eyni olduqda polietilenqlikol makromolekulu öz zənciri ilə relaksatoru əhatə edərək daxilinə alır. Beləliklə, makromolekul relaksatoru istiliyin təsirindən qoruyur. Makromolekul zənciri böyüdükcə onun daxilinə birdən çox relaksator girdiyindən temperaturun artması ilə onlar rahatca dağılırlar.



Şəkil 1. 0.1M KOH + PEG + su sistemində relaksatorların ölçülərinin polietilenqlikolun (a) və KOH-in konsentrasiyasından (b) asılılığı



Şəkil 2. 0.1M KOH + PEG + su sistemi üçün (a) və 0.1M KOH + su sistemi üçün (b) relaxatorların ölçülərinin temperaturdan asılılığı

Ədəbiyyat:

1. Məsimov E.Ə., Abbasov H.F., Bakı Universitetinin xəbərləri, fiz.-riy.elm. seriyası, 2007, №2, s.109-127
2. Məsimov E.Ə., Abbasov H.F., J.of Qafqaz University, № 21, 2008. s.73-76
3. Məsimov E.Ə., Abbasov H.F., AMEA-nın “Xəbərlər” jurnalı, 2008, №3, s.79-92
4. G. Schwarts, *J.Phys. Chem.*, 66, 1962, 2636-2642.

ВОЛНЫ ИОНИЗАЦИИ ПРИ ПРОБОЕ ДЛИННОЙ ТРУБКИ В АРГОНЕ

Г.М.Садыгзаде

Бакинский Государственный Университет

В последние годы значительное внимание уделяется экспериментальным исследованиям волн ионизации в длинных газоразрядных трубках. Волны ионизации – области повышенной ионизации частиц, отделенные узкой переходной областью (фронтом волны) от областей с более низкой степенью ионизации. В пределах фронта волны происходит резкий скачок степени ионизации частиц газа. Структуру волны определяют процессы ионизации, рекомбинации и переноса энергии. Ионизационные волны могут быть уединенными, периодическими, стационарными, бегущими и т.д. По характеру физических явлений в переходной области и механизму перемещения, они близки к волнам горения и детонации.

Волны ионизации могут возникать при электрическом пробое газов в разрядном промежутке и обычно наблюдаются как движущиеся фронты свечения. Скорость распространения таких волн зависит от ряда экспериментальных условий и может принимать значения в широком диапазоне от 10^5 до 10^{10} см s^{-1} .

Волны ионизации с невысокими скоростями распространения 10^5-10^7 см s^{-1} ,

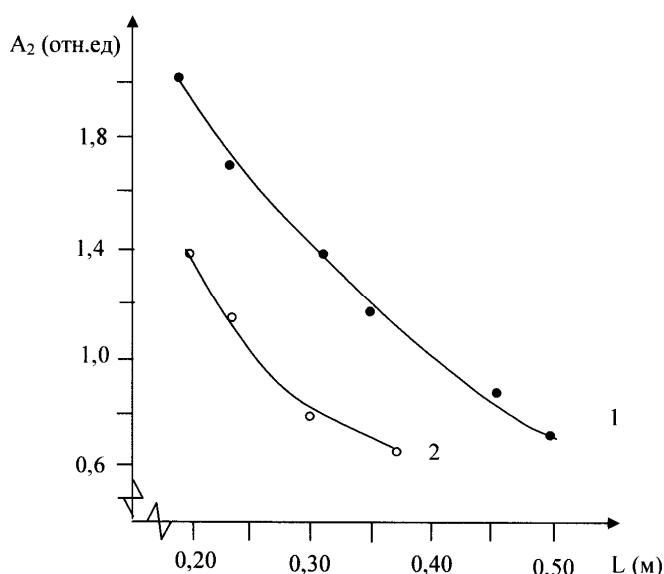


Рис.1. Зависимость амплитуды второго максимума A_2 от длины L до поджигающего электрода при давлении $P=1$ Тор: 1 – при $f=200$ Гц; $U=800$ В. 2 – при $f=150$ Гц; $U=700$ В.

изучаемые в данной работе, чаще всего возникают в промежутках с однородным электрическим полем, где скорость фронта ионизации определяется дрейфом электронов. Такие волны также возникают при участии в процессе развития ионизационного пробоя тяжелых частиц.

Эксперимент проводился в разрядной трубке длиной 80 см и внутренним диаметром 3,2 см. На трубку снаружи по всей ее длине нанизываются обкладки, представляющие собой одинаковые кольца шириной 3,2 см из алюминиевой фольги, отстоящие друг от друга на расстоянии 1 см. Эти обкладки образуют вдоль трубки емкость $C_1 - C_n$. Питающее напряжение подавалось между одним из внутренних электродов, называемым поджигающим (п.э.), и обкладками. По мере удаления от п.э. емкость обкладок уменьшалась в 20 раз относительно первой.

Изучались колебания на заднем фронте ионизационной волны, для чего измерялась амплитуда второго, после пробойного, максимума колебаний A_2 и их частота ν , изменяющиеся вдоль разрядной трубки.

Эти параметры замерялись по показаниям осциллографа.

Все измерения проводились за фронтом ионизации, распространяющимся в сторону уменьшения емкости.

На рис.1 показана зависимость амплитуды второго максимума A_2 от расстояния до п.э. L . Измерения проводились при частоте $f = 200$ Гц и подаваемом напряжении $U = 800$ В (кривая 1); и при частоте $f = 150$ Гц и напряжении $U = 700$ В (кривая 2).

Зависимость частоты колебаний ν от длины волны L представлена на рис.2.

Показания снимались при постоянном значении напряжения $U = 900$ В и частоты $f = 180$ Гц. График показывает, что при удалении от п.э. в сторону уменьшения емкости C_0 происходит уменьшение частоты ν .

Зависимость амплитуды второго максимума A_2 и частоты колебаний ν на заднем фронте от расстояния L можно объяснить следующим образом.

Согласно теории, при определенных условиях за фронтом волны ионизации в экранированной трубке должны возникать колебания электрического поля, тока и объемного заряда. При этом были обнаружены режимы, в которых затухающим колебаниям тока предшествует конечное число осцилляций с нарастающей амплитудой. Увеличение концентрации электронов n_0 приводит к формированию большего числа нарастающих осцилляций.

По мере удаления от п.э. уменьшается емкость C_0 . С уменьшением C_0 уменьшается также величина заряда и соответственно концентрация n_0 , падают интенсивность ионизации и плотность образующейся плазмы, а следовательно растет сопротивление единицы длины столба.

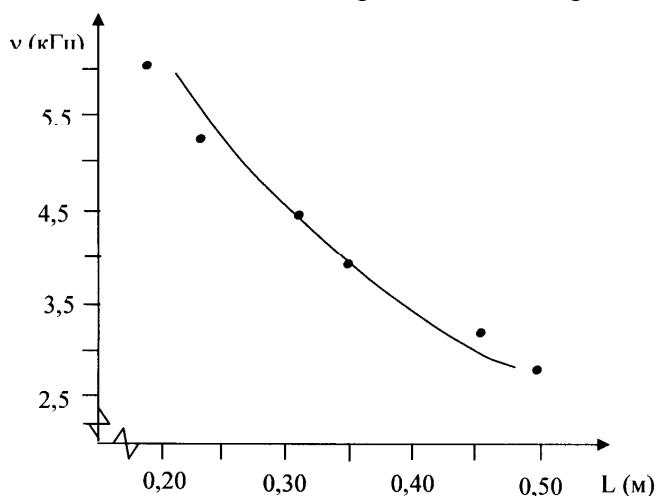


Рис.2. Зависимость частоты колебаний ν на заднем фронте ионизационной волны от длины L до поджигающего электрода при давлении $P=1$ Тор: $f=180$ Гц; $U=900$ В.

В самом деле, при удалении от п.э. амплитуда колебаний второго максимума A_2 и частота колебаний ν действительно уменьшаются, что находится в качественном согласии с результатами теории.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ КАРБОНАТОВ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Г.Г.Нуруллаев

Институт Химических Проблем НАН, Азербайджана

Для определения энтальпии образования твердых соединений, в том числе карбонатов редкоземельных элементов развит метод сжигания. Вещество сжигается в виде таблетки в смеси с азотнокислым калием, который приводит к полному сгоранию вещества в кислородной калориметрической бомбе.

Сложная смесь продуктов реакций сгорания вещества и разложения KNO_3 и превращения последних переводится в вещества простого состава, что сильно облегчает вопрос установления степени превращения. Эти реакции проводятся путем применения калориметра с вращающейся бомбой. Таким образом для термохимического исследования карбонатов редкоземельных соединений, не содержащих галогенов, также необходимо наличие калориметра с вращающейся бомбой, изготовленной из коррозионностойкого металла-тантала или платины.

Будут сообщены подробности методики, ход экспериментов и результаты измерений.

TEXNOGEN FİZİKİ ÇİTKLƏNMƏLƏR VƏ ONLARIN ATMOSFERDƏ PAYLANMASI

Nazim Məhəmməd oğlu Məsimov, Mahirə Səməd qızı Muradova

Azərbaycan Dövlət Pedaqoji Universiteti

Məlumdur ki, atmosferin aşağı hissəsini, hidrosfer və litosferin yuxarı hissəsini özündə birləşdirən aktiv həyat oblastı biosfer adlanır. Biosfer bütöv, mürəkkəb bir dinamik sistem olduğundan onun bütün canlı orqanizmləri və onların yaşayış mühiti üzvü surətdə bir-birilə bağlıdır və öz aralarında qarşılıqlı təsirdə olur.

Biosferdə dönməz proseslər milyon illər ərzində baş verir. Canlı orqanizmlər isə milyon illərlə ətraf mühitə uyğunlaşmaq xüsusiyyəti qazanır, adaptasiya olunurlar.

İnsan və təbiətin dialektik birliyinə baxmayaraq onların qarşılıqlı münasibəti ziddiyətli xarakter daşıyır. Belə ki, insan bir tərəfdən təbiətin bir üsürüdür, təbiətin ehtiyatlarından istifadə edir, digər tərəfdən həyat fəaliyyəti ilə özünün ekosistemini yaratmışdır. Biosferdə insanın təsərrüfat fəaliyyəti nəticəsində yaranan yeni tullantılar antropogen "çirklənmə" ilə xarakterizə olunur. Bu insanın təsərrüfat fəaliyyəti nəticəsində əmələ gələn əlavə tullantılar atmosferə düşərək canlıların normal inkişafına mane olur, müxtəlif xəstəliklər törədir.

Fiziki çirklənmələrə antropogen fəaliyyət nəticəsində yaranan səs-küy, vibrasiya, elektromaqnit sahəsi, radioaktiv maddələrin yaratdığı şüalanmalar, ultrabənövşəyi və görünən şüalanmalar aid edilir. Bu çirklənmələr texniki ədəbiyyatda energetik çirklənmə adlanır.

Ümumiyyətlə texnogen fiziki çirklənmələr ən çox böyük şəhərlərin əraziləri, sənaye rayonları və intensiv istifadə olunan ərazilər üçün xarakterikdir. Belə ərazilərdə çoxlu sayda istehsal, emal və digər sənaye sahələri yerləşir ki, onlar da ətraf mühiti çirkləndirir.

Alimlər müəyyənləşdirmişdilər ki, planetimizdə hər il 7 milyard ton yanacaq yandırılır və bu məqsədlə 8-13 milyard ton oksigen sərf edilir.

Atmosfer havasında oksigendən fərqli olaraq karbon qazının miqdarı insanların istehsal fəaliyyəti nəticəsində daim artır ki, bu da həmin qazın bolluğundan yaranan acı nəticələr doğura bilər. Hər il yanacaq prosesində atmosfərə 23 milyard ton karbon qazı qarışır.

Atmosfer havasının keyfiyyətinin pisləşməsində yalnız oksigenin azalması və karbon qazının artması deyil, metan, karbon 2 oksid, kükürd qazı, müxtəlif bərk maddələr də rol oynayır.

Atmosferin çirklənməsinin qarşısını almaq üçün fabrik və zavodlarda zərərli toz və qazları tutub saxlayan xüsusi qurğular qoyulur. Beləliklə, fabrik və zavodların insan, heyvan və bitkilərin tənəffüsü üçün lazım olan havanı çirkləndirməsinin qarşısını alınmış olur.

Sənaye şəhərlərində sənaye istehsalının geniş miqyas və intensiv temp alması ətraf mühitin çirklənməsinin əsas səbəbidir. Hazırda sənaye proseslərinə cəlb edilən xammalın yalnız 5 %-ə qədər son məhsula çevrilir, qalanı tullantı kimi ətraf mühitə atılır. Deməli ənənəvi sənaye məhsula yox, tullantılara xidmət edir. Ona görə ekolojiləşmiş istehsala böyük ehtiyac var. Bu cür istehsalın məqsədi tullantıların ləğv edilməsi, az tullantılı, hətta tullantısız istehsal yaratmaqdır.

Qaz molekulları nizamsız hərəkətdə olduğu üçün bir-biri ilə arasıkəsilmədən toqquşur. Normal şəraitdə hər bir molekul bir saniyədə 10^9 dəfə toqquşmaya məruz qalır. Ona görə də molekullar olduqca müxtəlif sürətlərlə hərəkət edir. Onların sürəti geniş intervalda dəyişir. Bu səbəbdən ayrı-ayrı molekulların hansı sürətlə hərəkət etməsini təyin etmək çox çətindir. Maksvelə görə sürətlərin paylanma qanunu dedikdə müəyyən şəraitdə verilmiş qazda nə qədər molekulun hansı sürətlə hərəkət etməsini təyin etmək nəzərdə tutulur. Maksvel müəyyən temperaturda ümumi sayı “n” olan molekullardan, sürətləri u ilə u+du intervalında qiymət alan molekulların dn sayını hesablamışdır:

$$Dn = \frac{4}{\sqrt{\pi}} n u_0^2 e^{-u_0^2} du_0 \quad (1)$$

(1) düsturunda n - molekulların sayı, e - natural loqarifmanın əsası, u_0 isə nisbi sürətdir.

$$\left(u_0 = \frac{u}{u_0}, u_0 - \text{verilmiş anda molekulların sürəti, } u \text{ isə ən çox ehtimallı sürət adlanır} \right).$$

Müəyyən şəraitdə verilmiş qazın, ən çox molekulunun malik olduğu sürətə ən çox ehtimallı sürət (u) deyilir.

Atmosferi çirkləndirən molekulların sürətlərə görə paylanmasında qazın təzyiq və həcmnin rolu yoxdur.

Sürətlərin paylanma qanununa görə ən çox ehtimallı sürət belə ifadə olunur.

$$u_c = \sqrt{\frac{2RT}{\mu}}, \quad (2)$$

(2) düsturunda μ - qazın molekulyar çəkisi, T- onun mütləq temperaturu, R- qaz sabitidir.

Müasir texnoloji proseslər iki hissədən ibarətdir : istehsal və neytrallaşdırıcı hissə. İkinci hissə tullantıları parçalayıb təmizləməkdən ibarətdir. Bu iki hissə arasında balans olmalıdır. Neytrallaşdırıcı texnologiya tullantıları dağıtmaqla onların tərkibində olan kimyəvi elementləri biosferdə geokimyəvi dövriyyəyə qaytarır.

Müasir sənayedə tullantılar o qədər çoxdur ki, təmizləyici qurğular tikilməsinə böyük ehtiyac var. Lakin təmizləyici qurğuların tikilməsi çox vəsait tələb edir, hətta istehsalın dəyərini üstələyir. Ona görə tullantıları parçalamaq yox, müxtəlif məqsəd üçün istifadə etmək üstün tutulur.

Tullantılardan tam istifadə edilməsi qapalı texnoloji proseslər yaratmağı tələb edir. Bu o deməkdir ki, bir tullantı başqa istehsal üçün xammal olur, xırda müəssisələr iri istehsal komplekslərində birləşir. Belə halda ətraf mühitin çirkləndirilməsi azalır, təbii sərvətlərdən istifadənin də səmərəsi yüksəlir. İndiki dövrdə tullantıların 2/3 hissəsindən istifadə edilməsi

realdır. Bu sahənin gələcəyi daha çox inandırıcıdır. Texnikanın inkişafı tullantısız istehsala kömək etməyə doğru yönəlmişdir. Biosferin özünün də fəaliyyəti maddə, enerji və informasiyanın dövriyyəsində dayanıqlığını qorunub saxlamağa yönəlmişdir.

Havada ozon elektrik boşalmaları, yaxud havanın ultrabənövşəyi şüalanması zamanı yaranır. Atmosferdə ozon tufanlar zamanı, atmosferin daha yüksək qatlarında isə qatışıqların iştirakı ilə ultrabənövşəyi şüalanmanın təsiri altında əmələ gəlir.

Kiçik dozalarda mikroblardan sterilizasiya etmək üçün, suyun ozonlaşdırılması, kağızın ağardılması və i. üçün ozon tətbiq edilir. Ozonun alınması üçün elektrik (ozonator) və kimyəvi metodlardan istifadə olunur. Atmosferin tərkibində olan ozon Günəş radiasiyasının qısalğalı şüalarının udulma prosesi nöqtəyi nəzərindən, mühafizə funksiyasını yerinə yetirməklə Biosferin qorunmasında və atmosferin temperatur rejiminin tənzimlənməsi nöqtəyi nəzərindən əhəmiyyətli dərəcədə ciddi rol oynayır.

Elmi texniki tərəqqinin inkişafı ilə əlaqədar atmosfərə getdikcə daha çox buraxdığı zərərli qazlar və insanın ətraf mühitə təsirinin artması ilə əlaqədar atmosferin qorunması, atmosferdə hissəciklərin paylanması tədqiqinə diqqət artmışdır. Atmosfer havasının tərkibində toz və zərərli hissəciklərin artması ilə əlaqədar olaraq, iqlim yaradan üsürlərdən biri olan temperatur, təzyiq, radiasiya, rütubət dəyişir ki, bu da öz növbəsində havada durğunluğun, tüstü dumanının artmasına səbəb olur. Respublikamızda atmosferin çirklənməsi Bakı, Sumqayıt, Gəncə, Şirvan şəhərlərində çox olduğundan bir sıra yoluxucu xəstəliklərin oksigen çatışmamazlığı nəticəsində əmələ gəlməsi qeyd edilməlidir. Ölkəmizdə bunların qarşısını almaq üçün sənaye müəssisələrində tüstü udan qurğular yaradılır və bu tullantılar təkrar emal olunur.

ИССЛЕДОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ВОЛН В ВЯЗКО-УПРУГИХ ТРУБКАХ ЗАПОЛНЕННЫХ ЖИДКОСТЬЮ

М.М. Тагиев

Бакинский Государственный Университет

Известно, что многофазные системы представляют собой смеси твердых частиц, жидких капель или пузырей (дискретные фазы), распределенных в жидкости (непрерывная фаза). Рассматривается классическая задача гидроупругости о распространении волн малой амплитуды в вязкой жидкости, заключенной в вязко-упругую трубку.

Предложенная модель описывает процессы распространения нелинейных волн в двухфазных средах (одно фаза является твердой, другая жидкой). В модели двухфазного континуума обе фазы суспензии рассматриваются как две взаимопроницающие непрерывные среды, которые механически взаимодействуют.

При таком подходе движения дискретных фаз, при пренебрежении их взаимодействием, рассматриваются как простой перенос заданным потоком непрерывной фазы.

Подобные упрощение подразумевает полное пренебрежение влияния фаз на основную непрерывную («несущую») фазу. Это утверждение приближено верно при незначительных объемных концентрациях дискретных фаз.

В предлагаемой работе излагаются результаты теоретического исследования волнового течения дисперсной вязкой несжимаемой жидкости в вязко-упругой трубке.

Предполагается, что скорости жидкости и частиц одинаковы, а для смеси в целом задается усредненная плотность. Трубка жестко прикреплена к окружающей среде, вследствие чего материал стенки не может совершать движение вдоль ее оси. Вязко-

упругие свойства материала стенки описываются линейной теорией наследственной упругости Ю.Н. Работнова:

$$E^v W = E \left\{ W - \int_{-\infty}^t \Gamma(t-\tau) W(\tau) d\tau \right\}$$

Здесь $W(x,t)$ -радиальное перемещение трубки радиуса R и толщиной h , E - мгновенный модуль упругости трубки, а $\Gamma(t-\tau)$ -разностное ядро релаксации.

Численно, используя формулы Эйнштейна и Тейлора, выявлено влияние концентрации включений на волновые характеристики.

ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ ДВУОКИСИ КРЕМНИЯ

Г.Г.Нуруллаев

Институт Химических Проблем НАН, Азербайджана

Энтальпия образования SiO_2 является основной величиной в термохимии соединений кремния. На общепринятое значение ее, полученное Хемфри и Кингом и равное 209,9 ккал/моль стало сомнительным после того, как термохимики США нашли величины, равные 217, 50 и 217,72 ккал/моль. Ввиду того, что последние работы проведены косвенными методами сейчас существует необходимость определить эту величину прямым путем-сжиганием кремния в кислородной калориметрической бомбе. Но по известным причинам (не полноты сгорания) это определение представляет из себя трудную проблему.

Нами подобраны условия почти полного сжигания кристаллического кремния в кислороде, по методу, предложенному ранее который заключается в смешении сжигаемого образца с сильными неорганическими окислителями и сжигании этой смеси в кислороде при 20 атт.

Получена предварительная величина:

$$\Delta H_{f,298}^{\circ} SiO_2 (\text{аморф}) = -216,1 \pm 3 \text{ ккал/моль}$$

которая уточняется.