

CHAPTER I I I

BIOLOGICAL SYSTEMS AND MOLECULAR PHYSICS

**BDU-nun Fizika Problemləri İnstitutunun yaradılmasının 10 illiyinə həsr olunmuş
Beynəlxalq konfrans**

**ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ, НЕКОТОРЫХ ДОБАВОК И МОЛЕКУЛЯРНОЙ
МАССЫ ПОЛИЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ НА ФАЗОВОЕ РАССЛОЕНИЕ В
ДВУХФАЗНОЙ СИСТЕМЕ ПЭГ-ЦИТРАТ НАТРИЯ-ВОДА**

Э.А. Масимов, Т.О. Багиров, С.Я. Оджагвердиева, Я.Х. Шахвердиев

Бакинский Государственный Университет,

baghirov-t@mail.ru

Получены уравнения зависимости плотности и показателя преломления бинарных водных растворов от концентрации ПЭГ и цитрата натрия. Показано что, мольные объемы этих растворов являются линейной функцией мольной доли компонентов, что позволяет через кажущиеся мольные объемы вычислить парциальные мольные объемы компонентов. Установлено, что уменьшение и некоторое постоянство значения парциального мольного объема ПЭГ-6000 с увеличением содержания его в растворе должно быть связано с образованием в ней относительно стабильной пространственной, структуры. Изучено влияние молекулярной массы полиэтиленгликолей, температуры и различных добавок на фазовое расслоение в системе ПЭГ-цитрат натрия-вода.

Применение для разделения и очистки веществ на промышленном уровне водных двухфазных систем вода-полимер-неорганические соли, такие как фосфаты, сульфаты и т.д. является не желательным ибо приводит к загрязнению окружающей среды. Используя так называемые биоразлагаемые соли природных органических кислот, такие как цитраты, тартраты, сукцинаты и т.д., можно избежать указанную проблему. Следует отметить, что в последнее время исследованию водных двухфазных систем полиэтиленгликоль – натриевые соли органических кислот и применению их для разделения и очистки биологических объектов посвящается достаточно много работ. Однако, механизм разделения таких систем на две водные фазы недостаточно изучен. А между тем, исследования физико-химических свойств сопряженных фаз водных двухфазных систем, так и водных растворов отдельных компонентов с применением различных методов физико-химического анализа могут оказаться весьма полезными в решении указанной проблемы.

Методами рефрактометрии и волюмометрии изучены водные растворы полиэтиленгликоля (ПЭГ-6000) и лимоннокислого натрия ($C_6H_5O_7Na_3$ – в дальнейшем цитрат натрия). В сравнительно широком интервале концентраций изучены показатель преломления (n_D^{20}) и плотность (ρ^{20}) водных растворов ПЭГ-6000 и цитрата натрия. Были использованы полиэтиленгликоли фирмы “Panreac” (Испания), цитрат натрия марки ЧДА, перекристаллизованный из водных растворов, бидистиллированная вода. Показатель преломления определили на рефрактометре марки ИРФ-454Б с точностью $\pm 0,0001$, плотность в пикнометрах около 10 мл, объемы которых предварительно были определены с точностью $\pm 0,005$ мл при $20 \pm 0,02^\circ C$.

Были построены фазовые диаграммы двухфазной системы ПЭГ-6000-цитрат натрия-вода при различных температурах (283,15; 298,15; 313,15 и 333,15 К). Бинодали были построены методами титрования и определения составов сопряженных фаз. Изучено влияние молекулярной массы ПЭГ в системах ПЭГ-цитрат натрия-вода при 298,15 К, а также различных добавок (карбамид, тиокарбамид и этиловый спирт) на фазовую диаграмму водной двухфазной системы ПЭГ-6000-цитрат натрия. Этиловый спирт был очищен по известной методике, приведенной в литературе.

Получены уравнения зависимости парциального мольного объема ПЭГ-6000 (\bar{V}_p) и цитрата натрия (\bar{V}_s) от концентрации их в водном растворе (мл/моль)

$$\bar{V}_p = 5046 + 339,4 \cdot 10^3 X_p + 184,1 \cdot 10^6 X_p^2 \quad (R^2=0,9866) \quad (1)$$

где X_p – мольная доля ПЭГ в растворе;

$$\bar{V}_s = 73,65 + 8,11 m_s + 5,08 m_s^2 \quad (2)$$

где m_s – моляльность соли в водном растворе.

Следует отметить, что уменьшение и некоторое постоянство значения парциального мольного объема ПЭГ-6000 с увеличением содержания его в растворе возможно связано с образованием в растворах относительно стабильной пространственной структуры, где молекулы полимера соединены между собой свободными молекулами воды за счет водородных связей. Образование такой пространственной структуры, сохраняющей в определенной мере кооперативность связей, по всей вероятности, служит причиной некоторого постоянства парциального мольного объема ПЭГ-6000 при повышенных концентрациях его в водном растворе. Увеличение парциального мольного объема цитрата натрия с возрастанием концентрации его в растворе возможно связано с наличием поворотной изомерии у цитрат иона с одной стороны и образованием водородных связей между цитрат ионами с увеличением содержания соли в растворе.

Построены бинадали водных двухфазных систем, образованных ПЭГ различной молекулярной массы и цитратом натрия. Получено, что увеличение молекулярной массы ПЭГ приводит к увеличению области гетерогенности. Этот экспериментальный факт можно объяснить следующим образом. Хотя при постоянной весовой концентрации полиэтиленгликоля число мономерных звеньев ($-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O}-$) на единицу массы водного раствора будет одинаково независимо от молекулярной массы полимера, однако, число молекул будет тем больше, чем меньше молекулярная масса ПЭГ. Вследствие того, что клубкообразные молекулы ПЭГ с меньшей молекулярной массой имеют большую вероятность к более полному раскрытию и гидратации, то все это делает молекулы полимера со своим водным окружением более совместными с водно-солевым раствором. Эта совместимость должна уменьшаться по мере увеличения молекулярной массы ПЭГ и расслоение наступит при меньшем содержании полимера в растворе.

Изучено также влияние температуры на фазовую диаграмму водной двухфазной системы ПЭГ-6000-цитрат натрия. Увеличение температуры также смещает бинадальные кривые влево, увеличивая области гетерогенности системы. Влияние температуры, как и любого другого фактора, влияющего на положение равновесия, должно быть в соответствии с принципом смешения равновесия Ле Шателье – Брауна.

В работе указано, что в водных растворах полиэтиленгликолей образуются двухфазные системы с двумя критическими температурами растворения – верхней (ВКТР) и нижней (НКТР). Следовательно, тот факт, что увеличение температуры смещает бинадали указанной системы в направлении увеличения области гетерогенности системы, указывает на близость рассматриваемого интервала температур к нижней критической температуре растворения. Кроме того, повышение температуры способствует процессу дегидратации как ионов соли, так и полиэтиленгликоля, изменяя водное окружение молекул последнего, что в итоге также приводит к уменьшению совместимости молекул ПЭГ и ионов соли, способствующее более раннему расслоению системы на две водные фазы с отличающимися структурами.

Нами также изучено влияние карбамида, тиокарбамида и этилового спирта на фазовую диаграмму водной двухфазной системы ПЭГ-6000-цитрат натрия. Добавление карбамида заметно изменяет положение бинодали указанной системы, увеличивая при этом область гомогенности системы, т.е. фазовое расслоение имеет место при больших концентрациях фазообразующих компонентов, чем в отсутствие мочевины. Ввиду того, что добавление карбамида к воде и водным растворам сопровождается разрушением структуры воды то должно быть ясно, что увеличение доли свободных молекул воды в системе должно привести к повышению степени гидратации полиэтиленгликоля и привести к изменению ближайшего водного окружения молекулы ПЭГ, благоприятствующего совместимости полиэтиленгликоля и водно-солевого раствора. Добавление в систему этилового спирта (в интервале концентраций 10-30 вес %) приводит к расслоению исследуемой системы на две фазы при более низких концентрациях фазообразующих компонентов, что находится в согласии с результатами измерения структурной температуры этих растворов. Как было показано ранее этанол в указанном интервале концентраций структурирует воду, что должно отразиться на изменении водного окружения молекулы полиэтиленгликоля и, как следствие, на более раннем расслоении системы на две водные фазы. Добавление тиокарбамида практически не сказывается на положении бинодали водной двухфазной системы ПЭГ-6000-цитрат натрия. Ранее было показано, что тиокарбамид не влияет на состояние воды, чем и объясняется отсутствие влияния его на положение бинодали указанной системы. Полученные данные подтверждают ранее высказанное предположение, что фазовое расслоение в водных системах ПЭГ- соль происходит вследствие возникновения в них двух различных водных структур, образующихся за счет разной ориентации молекул воды вблизи молекул фазообразующих компонентов и их ионов. Добавление к таким водным системам веществ, разрушающих структуру воды, будет препятствовать возникновению таких различных водных структур, в то время как добавление веществ, структурирующих воду, должно благоприятствовать образованию двух различных не совместимых друг с другом водных структур, служащих основой водных фаз, на которые распадается система.

ЛИТЕРАТУРА

1. Альбертсон П. Разделение клеточных частиц и макромолекул. М.: Мир, 1974, 381с.
2. *Красноперова А.П., Ткаченко В.В., Юхно Т.Д.* Нетрадиционные экстракционные системы // Ученые записки Таврического национального университета им. В. И. Вернадского, серия «Биология, химия», 2011, том 24 (63), № 3, с. 132-137.
3. *Масимов Э.А., Багиров Т.О., Гасанова Х.Т.* // Известия высших учебных заведений. Химия и химическая технология, Иваново, 2008, том 51, вып.2, с. 123-126.
4. *Масимов Э.А., Багиров Т.О., Оджагвердиева С.Я.*, // Фундаментальные исследования, 2014, №11, с.2411-2415.
5. *Masimov E.A., Bagirov T.O., Mammadov I.Q., Bagirov A.A., Hasanova G.Z.*// V International Conference. «Modern problems of physics», Baku, 2008, p.158-160.
6. *Salabat A., Absoni M.H., Bahar A.R.* // J. Chromatogr.: B, 2007, vol. 858, p 234-238.
7. *Zafarani-Moattar M.T., Emamian S., Hamzehzadeh S.* // J. Chem. Eng. Data, 2008, vol. 53, p. 456-461.
8. *Zaslavsky B.Yu., Bagirov T.O., Borovskaya A.A., Gasanova G.Z., Gulaeva N.D., Levin V.Yu., Masimov E.A., Mahmudov A.U., Mestechkina N.M., Miheeva L.M., Osipov N.N. and Rogozhin S.V.*// J.Colloid and Polymer Science, 1986, v. 264, №12, p.1066-1071.

**POLİMER-SU İKİFAZALI SİSTEMLƏRİNDƏ PAYLANMA METODUNUN
BIOTEXNOLOGİYADA VƏ TİBBİ DİAQNOSTİKADA TƏTBİQİ**

E.Ə. Məsimov, T.O. Bağırov, S.Y. Ocaqverdiyeva, X.T. Həsənova, S.R. Bağırova

Bakı Dövlət Universiteti

baghirov-t@mail.ru

Bir sıra polimer-su ikifazalı sistemlərinin ayırma qabiliyyəti təyin edilmişdir. PEQ-C₄O₆H₄Na₂-H₂O ikifazalı sisteminin ayırma qabiliyyətinin nisbətən kiçik olması həmin sistemin bioloji maddələrin «incə» ayrılması üçün istifadə oluna bilməsini müəyyənləşdirir. Polimer-su ikifazalı sistemlərdə qeyri-bərabər paylanma metodu vasitəsilə qanda patoloji dəyişikliklərlə müşayiət olunan xəstəliklərin erkən diaqnozunu vermək məqsədi ilə tibbi diaqnostikada istifadə olunması mümkün sayılan ikifazalı sistemlər (PEQ-Al₂(SO₄)₃-H₂O, PEQ-MgSO₄-H₂O) təklif olunmuşdur. Göstərilmişdir ki, bu metodu tətbiq etməklə eyni zamanda həmin xəstəliklərin yaranması və müalicəsi mexanizmi haqqında mülahizələr yürütmək olar.

İşdə əsasını su təşkil edən polimer-su ikifazalı sistemlərdə maddələrin qeyri-bərabər paylanmasına əsaslanan metodun nəzəri əsasları, analitik, preparativ və diaqnostik məqsədlərlə biotexnologiyada və təbabətdə tətbiqi perspektivləri təhlil edilmişdir. Bioloji sistemin fraqmentlərinin, polimerlərin fraksiyalarının ikifazalı sistemin eyni zamanda mövcud olan fazalarına olan hərisliklərinin müxtəlifliyi onları həmin sistemlərdə ayırmağa imkan verir.

İkifazalı polimer-polimer-su və polimer-duz-su sistemlərdə maddələrin qeyri-bərabər paylanma metodu praktiki əhəmiyyət kəsb edən fiziki-kimyəvi metodlardan biridir. Bu metod müxtəlif kimyəvi maddələrin, o cümlədən biopolimerlərin sistemin müxtəlif hidrofobluğa malik fazalarının su mühitlərinə hərisliklərinin müxtəlifliyinə əsaslanır.

Məlum olduğu kimi, suya daxil edilmiş istənilən maddə suyun strukturunu və/və ya halını dəyişmiş olur və bu da öz növbəsində su mühitinin hidrofobluğunu dəyişmiş olur. Ona görə də təbiidir ki, su-polimer ikifazalı sistemlərdə (SPİS-də) həll edilən maddə özünə yaxın olan mühitdə (hidrofobluğa həmin maddənin hidrofobluğuna yaxın olan fazada) cəmləşmiş olacaq. Biopolimerlərin və kiçik molekullu birləşmələrin ikifazalı sistemlərdə paylanmasının fiziki-kimyəvi qanunauyğunluqları tədqiq olunarkən göstərilmişdir ki, bu maddələrin paylanmasını hidrofob və ion hidratlaşması terminləri daxilində izah etmək olar. Bu qarşılıqlı təsirləri kəmiyyətə xarakterizə etmək üçün marker maddələrin –dinitrofenilləşdirilmiş DNF- α -aminturşularının natrium duzları homoloji sırasının paylanmasına baxılmışdır.

Həmin homoloji sıranın paylanma əmsalı ilə yan alifatik zəncirin uzunluğu (metilen qruplarının sayı) arasında aşağıdakı asılılıq vardır:

$$\ln K = C + E \cdot n_{CH_2},$$

burada K –homoloji sıranın verilmiş üzvünün ikifazalı sistemdə paylanma əmsalı, n_{CH_2} – paylanan marker molekulundakı metilen qruplarının sayı, C və E isə uyğun olaraq molekulun polyar (ion hidratlaşması) və qeyri-polyar hissələrinin (hidrofob hidratlaşma) paylanma əmsalındakı payını xarakterizə edən sabitlərdir. K=1 olarsa $\ln K=0$ və $C=E \cdot n^*$ olur. Burada $n^* \equiv -n_{CH_2}$ metilen qruplarının elə hipotetik sayıdır ki, bu zaman maddə fazalar arasında bərabər paylanmış olur. Başqa sözlə ion hidratlaşması və hidrofob qarşılıqlı təsirlərin effektləri bir-birini kompensasiya etmiş olur. Bu kəmiyyət fazaların hidrofobluqların arasındakı fərqi, yəni sistemin bioloji obyektləri bir-birindən ayırma qabiliyyətini xarakterizə edir və ikifazalı sistemin ayırma qabiliyyəti adlanır. Bir sıra SPİS-in ayırma qabiliyyətləri təyin edilmişdir və alınmışdır ki, PEQ-

$Al_2(SO_4)_3-H_2O$ ikifazlı sistemi ən böyük ayırma qabiliyyətinə malikdir ($n^*=11,08$). Qeyd edək ki, sistemləri «incə» və «kobud» ayırma nöqtəyi-nəzərindən seçmək olar. Belə ki, «incə» ayırma üçün ayırma qabiliyyəti kiçik olan ikifazlı sistem (məsələn, $PEQ-C_4O_6H_4Na_2-H_2O$ ikifazlı sistemi, $n^*=2,8$), «kobud» ayırma üçün isə böyük ayırma qabiliyyətinə malik olan sistem əlverişlidir.

Polimer-duz-su ikifazlı sistemlərində paylanma metodu vasitəsi ilə radioaktiv şüalanmanın qan zərdabı zülallarının nisbi hidrofobluqlarına təsirinə baxılmışdır. Radioaktiv mənbə kimi ^{60}Co götürülmüş və təcrübə heyvanları müxtəlif dozalarda (200, 350, 450 və 500 rentgen) şüalandırılmışlar. Heyvanlardan 7, 14, 21 və 28-ci günlər qan götürülmüş və onların paylanmasına baxılmışdır. Sağlam qanın paylanma əmsalı ilə müqayisələr aparıldıqda məlum olmuşdur ki, kiçik dozalarla şüalandırılmış heyvanların qan zərdabının paylanma əmsalı birinci həftə ərzində dəyişsə də, dördüncü həftəyə qədər əvvəlki qiymətini alır və heyvanlar sağalır. Böyük dozalarla şüalandırılmış heyvanların qan zərdabının paylanma əmsalında isə bu müşahidə olunmur və heyvanlar ölür. Aparılmış tədqiqatlar bir daha təsdiq edir ki, radioaktiv şüalanmanın təsiri ilə qandakı zülalların konformasiyasında müəyyən dəyişiklik baş verir və bu konformasiya dəyişikliyi polimer-su ikifazlı sistemlərində paylanma metodu vasitəsi ilə böyük dəqiqliklə aşkar etmək mümkündür.

Digər bir təcrübədə radioaktiv şüalanmanın albuminin $PEQ-MgSO_4-H_2O$ ikifazlı sistemində paylanma əmsalına təsiri tədqiq olunmuşdur. Müxtəlif dozalarla şüalandırılmış albuminin paylanma əmsalları bir-birindən fərqli alınmışdır. Bu təcrübələrin nəticəsi kimi qeyd etmək olar ki, maddələrin SPİS-də qeyri-bərabər paylanması metodundan qanda patoloji dəyişikliklərlə müşayiət olunan xəstəliklərin ilkin diaqnostikasında istifadə etmək olar.

Elmi ədəbiyyatda polietilenqlikolu səthi aktiv maddə kimi götürərək nazik təbəqələrin sulu məhluldan kimyəvi çökdürməsi metodu ilə nano ölçülü hissəciklərin alınmasına tez-tez rast gəlinir. Bu metodun nanotexnologiyada tətbiqi PEQ-in bir sıra qeyri-üzvi duzlarla ikifazlı sistem əmələ gətirməsinə əsaslanır. Qeyd edək ki, PEQ-dən istifadə olunması digər səthi aktiv maddələrdən istifadə zamanı rast gəlinmiş bəzi problemləri həll edə bilər. Təqdim olunmuş işdə molekulyar kütləsi 6000 olan PEQ istifadə olunmuşdur. PEQ-in digər molekulyar kütlələrindən istifadə olunması ilə daha maraqlı nəticələrin alınması gözlənilir. Bu istiqamətdə tədqiqat işləri davam etdirilir.

ƏDƏBİYYAT

1. Məsimov E.Ə., Bağırov T.O. // AMEA-nın Xəbərləri, fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya, 2006, XXVI cild, №5, s.132-140.
2. Масимов Э.А., Алиева Н.И., Багиров Т.О., Масимова Н.Э. // Bakı Universitetinin xəbərləri, fizika-riyaziyyat elmləri seriyası, 2001, №2, s. 19-24.
3. Albertsson P.A. Partition of cell particles and macromolecules, 3rd Ed., Willey Press: New York, 1986, 396 p.
4. Salabat A., Absoni M.H., Bahar A.R. // J. Chromatogr.: B, 2007, vol. 858, p 234-238.
5. Zafarani-Moattar M.T., Emamian S., Hamzehzadeh S. // J. Chem. Eng. Data, 2008, vol. 53, p. 456-461.
6. Zaslavsky B. Aqueous Two-Phase Partitioning: Physical Chemistry and Bioanalytical Applications, Marcel Dekker, New York, 1994, -212 p.

**ELEKTRİK KEÇİRİCİLİYİNƏ GÖRƏ
İONLARIN HİDRATLAŞMA ƏDƏDİNİN TƏYİNİ
E.Ə. Məsimov, H.Ş. Həsənov, B.G. Paşayev, X.F. Əliyeva**

Bakı Dövlət Universiteti

p.g.bakhtiyar@gmail.com

İşdə $MgSO_4$ duzunun sulu məhlulunun xüsusi elektrik keçiriciliyinin təcrübi qiymətlərinə görə məhlulda Mg^{+2} ionunun hidratlaşma ədədi təyin edilmişdir. Müəyyən olunmuşdur ki, $25^{\circ}C$ temperaturda Mg^{+2} ionunun hidratlaşma ədədi $n=26$ olur.

Məlumdur ki, elektrolitlərin sulu məhlullarında elektrik cərəyanı ionların istiqamətlənmiş hərəkəti hesabına yaranır. Adətən qüvvətli elektrolitlər kiçik konsentrasiyalarda suda tam dissosiasiyaya məruz qalırlar. Odur ki, belə elektrolitlərin duru sulu məhlullarının xüsusi ion elektirik keçiriciliyi, müsbət və mənfi yüklü ionların xüsusi elektrik keçiriciliklərinin cəminə bərabər olur:

$$\sigma = \sigma_+ + \sigma_- \quad (1)$$

Burada σ_+ və σ_- uyğun olaraq, kationların və anionların xüsusi elektrik keçiriciliyidir.

Məhlulun molyar elektrik keçiriciliyi (Λ_m)

$$\Lambda_m = \frac{\sigma}{c} \quad (2)$$

düsturu ilə təyin olunur [1,2]. Burada c (mol/l) molyar konsentrasiyadır. Kationların və anionların molyar elektrik keçiriciliyini, uyğun olaraq, λ_+ və λ_- ilə işarə etsək, (1) və (2) düsturlarına görə

$$\Lambda_m = \lambda_+ + \lambda_- \quad (3)$$

olur.

$MgSO_4$ duzunun sulu məhlulunda Mg^{2+} və SO_4^{2-} ionları yaranır. SO_4^{2-} ionu zəif hidratlaşmaya məruz qaldığından onun molyar ion keçiriciliyi Mg^{2+} ionunun keçiriciliyindən təqribən 1,5 dəfə böyükdür [3]. Odur ki, yaza bilirik:

$$\lambda_- \approx 1,5\lambda_+ \quad (4)$$

(4) ifadəsini (3)-də nəzərə alsaq, məhlulun molyar elektrik keçiriciliyi üçün

$$\Lambda_m \approx 1,5\lambda_+ \quad (5)$$

ifadəsini alırıq. Digər tərəfdən, elektrolitlərdə baxılan ionun (məs. kationun) xüsusi elektrik keçiriciliyi (σ_+)

$$\sigma_+ = \frac{nq^2}{m} \tau \quad (6)$$

ifadəsi ilə təyin olunur [2]. Burada n -vahid həcmdəki kationların sayı, q -ionun yükü, m -hidrat təbəqəsi ilə birlikdə ionun kütləsi, τ -ionun su molekulu ilə növbəti toqquşmaya qədər getdiyi məsafəyə sərf olunan zamanın orta qiyməti, yəni sərbəst qaçış müddətinin orta qiymətidir.

$MgSO_4$ duzunun sulu məhlulunda kationların və anionların sayı bərabər olduğundan ionların tam sayı

$$N = N_+ + N_- = 2N_+ \quad (7)$$

olar. Onda vahid həcmdəki kationları sayı

$$n = \frac{N_+}{V} = \frac{N}{2V} = \frac{1}{2} \cdot cN_A \quad (8)$$

olar. Burada N_A -Avoqadro ədədidir. İonun yükünün $q = Ze$ olduğunu və (8) ifadəsini (6)-da nəzərə alsaq, kationun xüsusi elektrik keçiriciliyi üçün

$$\sigma_+ = \frac{cN_A Z^2 e^2}{2m} \cdot \tau \quad (9)$$

ifadəsini alırıq. Burada Z -ionun ionlaşma dərəcəsi (məs. Mg^{2+} ionu üçün $Z=2$), e -elementar yüküdür. Su mühitində hərəkət edən ionun sərbəst qaçış müddətinin orta qiyməti

$$\tau = \frac{1}{n_1 s \bar{v}_{nis}} \quad (10)$$

ifadəsi ilə təyin oluna bilər [2]. Burada n_1 -vahid həcmdəki su molekulların sayı, s -ionun maye molekulundan səpilməsinin tam en kəsiyinin sahəsi, \bar{v}_{nis} -ionun hər hansı su molekuluna nəzərən nisbi sürətidir. Sərbəst qaçış müddətinin orta qiymətinin təyinində əsas çətinlik \bar{v}_{nis} sürətinin təyin olunmasıdır. Bu məqsədlə bir neçə yaxınlaşmalar qəbul edək: birincisi, qəbul edək ki, ionun dreyf sürəti onun istilik hərəkətinin sürətindən çox kiçikdir. Bu fərziyə mümkündür, çünki (6) düsturu ionu istiqamətləndirən xarici elektrik sahəsinin intensivliyinin kiçik qiymətlərində doğrudur. Bu halda ionun dreyf sürəti istilik hərəkətinin sürətinin üstünə otuzdurulur. Bu isə o deməkdir ki, ionun dreyf sürəti istilik hərəkətinin sürətindən çox kiçikdir; ikincisi, ionun hidrat təbəqəsi ilə birlikdə kütləsi su molekulunun kütləsindən çox böyük olduğundan onun istilik hərəkətinin sürəti su molekulunun istilik hərəkətinin sürətindən çox kiçik olacaq.

İonun su molekuluna nəzərən nisbi sürəti

$$\vec{v}_{nis} = \vec{v}_{ion} - \vec{v}_{su} \quad (11)$$

kimi təyin olunur. (11) ifadəsini kvadrata yüksəldək.

$$v_{nis}^2 = v_{ion}^2 + v_{su}^2 - 2v_{ion}v_{su} \cdot \cos \alpha \quad (12)$$

(12) ifadəsindən orta qiymət götürüldükdə $\cos \alpha$ həm müsbət, həm də mənfi qiymət aldığından axırıncı ifadə sıfıra bərabər olur və (12) düsturu aşağıdakı şəkildə düşür.

$$\overline{v}_{nis}^2 = \overline{v}_{ion}^2 + \overline{v}_{su}^2 \quad (13)$$

Yuxarıdakı mülahizələrə əsasən

$$\overline{v}_{ion}^2 \ll \overline{v}_{su}^2$$

olduğundan, yekunda ionun su molekuluna nəzərən nisbi orta sürətini su molekulunun istilik hərəkətinin orta sürətinə bərabər götürmək olar:

$$\overline{v}_{nis} = \overline{v}_{su} = \sqrt{\frac{3RT}{M_{su}}} \quad (14)$$

Burada R universal qaz sabiti, T mütləq temperatur, M_{su} suyun molyar kütləsidir.

Vahid həcmdəki su molekullarının n_1 sayını

$$n_1 = \frac{N}{V} = \frac{N_A}{V_m} \quad (15)$$

ifadəsilə təyin etmək olar. Suyun molyar həcmi (V_m)

$$V_m = \frac{M_{su}}{\rho_{su}} \quad (16)$$

olur. (16) ifadəsini (15)-də nəzərə alsaq

$$n_1 = \frac{N_A \rho_{su}}{M_{su}} \quad (17)$$

olar. İonun su molekulundan səpilməsini tam en kəsiyinin sahəsini

$$S = \pi(r_{ef} + r_{mol})^2 \quad (18)$$

düsturu ilə hesablamaq olar. Burada r_{ef} ionun suda effektiv radiusu, r_{mol} isə su molekulunun radiusudur. (14), (17) və (18) ifadələrini (10) da nəzərə alsaq

$$\tau = \frac{M_{su}^{3/2}}{\pi N_A \rho_{su} (r_{ef} + r_{mol})^2 \sqrt{3RT}} \quad (19)$$

ifadəsini alarıq. (19) ifadəsini (9)-da nəzərə alsaq, ionun xüsusi elektrik keçiriciliyi üçün aşağıdakı ifadəni alarıq:

$$\sigma_+ = \frac{1}{2\sqrt{3RT}} \cdot \frac{cZ^2 e^2 M_{su}^{3/2}}{m\rho_{su} \pi (r_{ef} + r_{mol})^2} \quad (20)$$

Onda

$$\lambda_+ = \frac{\sigma_+}{c} = \frac{1}{3\sqrt{RT}} \cdot \frac{Z^2 e^2 M_{su}^{3/2}}{m\rho_{su} \pi (r_{ef} + r_{mol})^2} \quad (21)$$

olar. (21) ifadəsini (5)-də nəzərə alsaq,

$$\Lambda_m = \frac{2.5}{2\sqrt{3RT}} \cdot \frac{Z^2 e^2 M_{su}^{3/2}}{m \rho_{su} \pi (r_{ef} + r_{mol})^2} \quad (22)$$

ifadəsini alarıq. Buradan ionun hidrat təbəqəsilə birlikdə kütləsi üçün

$$m = \frac{2.5}{2\sqrt{3RT}} \cdot \frac{1}{\Lambda_m} \cdot \frac{Z^2 e^2 M_{su}^{3/2}}{\rho_{su} \pi (r_{ef} + r_{mol})^2} \quad (23)$$

ifadəsini alarıq.

5% $MgSO_4$ duzunun sulu məhlulunun $T=298,15^\circ C$ temperaturda molyar elektrik keçiriciliyi $\Lambda_m = 4,148 \cdot 10^{-3} Om^{-1} m^2 mol^{-1}$, Mg^{2+} ionunun suda effektiv radiusu $r_{ef} = 0,44 \cdot 10^{-9} m$, su molekulunun radiusu $r_{mol} = 1,38 \cdot 10^{-10} m$ [4], suyun molyar kütləsi $M_{su} = 18 \cdot 10^{-3} \frac{kq}{mol}$, elementar yük $e = 1,6 \cdot 10^{-19} Kl$ və həmin temperaturda suyun sıxlığı $\rho_{su} = 997,07 \frac{kq}{m^3}$ olduğunu bilərək, (23) düsturuna əsasən ionun hidrat təbəqəsilə birlikdə kütləsi üçün $m = 828 \cdot 10^{-27} kq$ qiymətini alarıq.

İonun ətrafında n sayda su molekulunun hidratlaşmış olduğunu qəbul etsək, onda ionun hidrat təbəqəsilə birlikdə m kütləsini

$$m = m_{ion} + n m_{mol} \quad (24)$$

kimi yazı bilərik. Burada m_{ion} -ionun kütləsi, m_{mol} -su molekulunun kütləsidir. (24)-dən

$$n = \frac{m - m_{ion}}{m_{mol}} \quad (25)$$

ifadəsini alarıq. $m = 828 \cdot 10^{-27} kq$, $m_{ion} = 24 \cdot 1,66 \cdot 10^{-27} kq$ və $m_{mol} = 18 \cdot 1,66 \cdot 10^{-27} kq$ qiymətlərini (25) düsturunda yerinə yazaraq, Mg^{2+} ionunun hidratlaşma ədədi üçün $n = 26$ qiymətini alarıq. (23) düsturundan görüldüyü kimi, ionun hidratlaşma ədədi bilavasitə konsentrasiyadan asılı deyil. Lakin (23) düsturunda molyar elektrik keçiriciliyi konsentrasiyadan asılıdır və konsentrasiyanın artması ilə molyar elektrik keçiricilikdə artır. Bundan başqa temperaturun artması ilə də elektrik keçiriciliyi artır. Beləliklə, (24) düsturundan alınır ki, konsentrasiyanın və temperaturun artması ilə ionun hidrat təbəqəsi ilə birlikdə kütləsi azalmalıdır. Bu isə öz növbəsində, (25) düsturuna əsasən, hidrat ədədinin qiyməti də azalmalıdır. Bu məsələnin araşdırılması gələcək tədqiqat işlərində nəzərdə tutulur.

Onuda qeyd edək ki, $MgSO_4$ duzu təbabətdə mədə bağırsağın təmizlənməsi üçün geniş istifadə olunur. Bizim apardığımız tədqiqatlar göstərir ki, $MgSO_4$ duzu suda 20% -ə qədər yaxşı həll olur, sonra doymuş məhlul alınır və duz çöküntü verir.

Beləliklə, bu nəticəyə gəlirik ki, $MgSO_4$ duzunun sulu məhlulunda Mg^{+2} ionunun hidratlaşma ədədi 26-dır və bu duzun təbabətdə 20%-ə qədər sulu məhlulundan istifadə etmək olar.

ƏDƏBİYYAT

1. Atkins P., De Paula J. Physical chemistry. Oxford University Press. 2006. 1067 p.
2. Məsimov E.Ə., Həsənov H.Ş., Paşayev B.G. Maye məhlulların elektrik keçiriciliyi. Monoqrafiya, Bakı 2011, 84 s.
3. David R. Lide. CRC Handbook of Chemistry and Physics. CRC Press, 2005, p.936-942. David R. Lide. CRC Handbook of Chemistry and Physics. CRC Press, 2005, p.936-942.
4. M. Chaplin. Water Structure and Behavior. <http://www.lsbu.ac.uk/water/chaplin.html>. South Bank University, London 2008, 576p.

AQAROZA MƏHLULUNDA GELƏMƏLƏGƏLMƏ PROSESİNİN İŞIĞIN DİNAMİK SƏPİLMƏSİ METODUDU İLƏ TƏDQIQI

E.Ə. Məsimov, A.R. İmaməliyev, A.H. Əsədova

Bakı Dövlət Universiteti

Maddənin gel halı həm elmi, həm də praktik tətqiq baxımından maraq doğurur. Orqanizmlə uyuşan olduğundan polisaxarid hidrogelləri son vaxtlarda biotexnologiyada, təbabətdə, yeyinti sənayesində və kosmetologiyada geniş tətqiq olunur. Gelin tətbiqi zamanı onun fiziki-kimyəvi xassələrini idarə etməyi bacarmaq zərurəti meydana çıxır. Bu xassələr gelin strukturundan - geldəki assosiatların sayından və ölçüsündən asılıdır.

Müasir modellərə görə aqaroza gelinin fəza toru ikiqat spirallardan və çoxlu sayda ikiqat spirali özündə birləşdirən daha yuxarı tərtibli assosiatlardan (supraliflərdən) ibarətdir. Aqaroza gelinə bulanıqlıq verən bu assosiatlardır.

Gelin strukturunun öyrənilməsində ən effektiv metodlardan biri işığın dinamik səpilməsi metodudur. Bu işdə HORIBA SZ-100 Nanoparticle potential Analyzer cihazının köməyi ilə aqaroza gelində assosiatların ölçüyə görə paylanması öyrənilmişdir. Aqarozanın suda məhlulunda geləmələgəlmənin kritik konsentrasiyasının 0,15 % olduğunu nəzərə alaraq iki konsentrasiyaya baxılmışdır: 0,1 %-li aqaroza məhlulu (gel əmələ gətirməyən hal); 0,5 %-li aqaroza məhlulu (gel əmələ gətirməyən hal).

Ölçmələrin nəticələri göstərir ki, gel əmələ gətirməyən halda da (0,1 %-li məhlul) məhlulda assosiatlar mövcuddur. Bu assosiatların orta ölçüsü 42 nm, ölçüyə görə paylanmanın yarımni isə təxminən 65 nm-dir. Bu assosiatlar arasındakı məsafə kifayət qədər böyük olduğundan onların birləşərək vahid fəza toru əmələ gətirməsi mümkün deyil. 0,5 %-li aqaroza məhlulunda isə assosiatların orta ölçüsü 104 nm, ölçüyə görə paylanmanın yarımni isə təxminən 21 nm olur. Bu halda assosiatların sayı da böyük olduğundan onlar arasındakı məsafə kiçik olur və müəyyən temperaturda onlar birləşərək vahid fəza toru əmələ gətirir, yəni məhlul gel halına keçir.

**BALIQ PULCUQLARINDA FLÜORESENSİYA
SPEKTRLƏRİNİN TƏDQIQI**

E.M. Qocayev, Ş.V. Əliyeva
Azərbaycan Texniki Universitet
serefxanim@mail.ru

Təqdim olunan işdə Kütüm balığının yan səthlərindən götürülmüş pulcuqların 200 – 600 nm dalğa uzunluğu intervalında flüoressensiya spektrinin tədqiqinin nəticələri verilmişdir. Aşkar edilmişdir ki, 396,96, 388, 265,93 və 253,64 dalğa uzunluqlu siqnallarla həyəcanlanma zamanı müvafiq olaraq 541,02, 528,96, 362,00 və 495,97 dalğa uzunluqlarında flüoressensiya spektrləri aşkar edilir. Flüoressensiya spektrlərinin intensivlikləri həyəcanlandırıcı siqnalların intensivlikləri ilə müqayisə olunan tərtibdə olur. Kütüm balığının pulcuqlarının flüoressensiya spektrinin tədqiqi aparılaraq aşkar edilmişdir ki, bu materialdan çoxfunksiyalı elektron qurğularında unikal xassəli yeni tip kompozit kimi istifadə etmək olar.

Balıqların bədəni pulcuqlarla örtülüdür. Pulcuqlar balıqların xarici strukturunda çox mühüm yer tutur. Onun əsas funksiyası qoruyucu olmasıdır. Bəzi balıqların (məsələn, naxanın) bədənində pulcuqlar olmur. Hər bir pulcuq dairəvi formalı, nazik sümük lövhəcikdən ibarət olub, ön hissəsi ilə dəriyə birləşir. Pulcuqlar arxa hissələri ilə bir-birinin üzərini kirəmit kimi örtür. Balıqların pulcuqlarının üzəri daima selik maddəsi ilə örtülü olur. Seliyi dəri vəziləri vəzisi ifraz edir. Selik örtüyü balığın bədəninin suda sürünməsinə əlverişli edir, xəstəlik törədiciləri bakteriyaya və göbələklərdən qoruyur.

Balıqlar böyüdükcə onun pulcuqları da böyüyür. Hər bir pulcuğun üzərində dairəvi rəngli tünd zolaqlar əmələ gəlir. Bu halqaları saymaqla balığın yaşını təyin etmək olar. Qıgırdaqlı balığın döş üzgəcinin tikan şüasının ən kəsiyində olan dairələrin sayına görə balığın yaşı müəyyən edilir. Pulcuqların üzərində onun yaşını müəyyən edən illik üzüklər var (Şəkil 1.).

Balıq pulcuqlarının üç əsas növü var. Onlar formasına görə seçilir. Plakoid, qanoid və sümüklər.

Plakoid pulcuq geniş əsasdan və onda oturan tikandan ibarətdir. Oturacaq romb şəkilində plastinkadan ibarətdir. Daxili boşluğu qan-damarları ilə təmin olunur. Plakoid pulcuqlar bərk maddələrdən ibarətdir. Qanoid pulcuqlar romb şəkilində və bir-birinə bağlı formada olur və bütün bədəni əhatə edir. Onlara nərə quyruq balıqları aiddir. Sümüklü pulcuqlar dərialtı vəzidə yerləşir. Onlar dairəvi illik plastinkadan ibarətdir.

Təyin edilmişdir ki, pulcuq mürəkkəb çoxkomponentli sistem olub əsasən mineral maddələrdən və kollagenlərdən ibarətdir. Balıqların müxtəlif növlərinin pulcuqları kimyəvi tərkiblərinə, ölçülərinə, qalınlıqlarına, düzülüşlərinə və spesifik xüsusiyyətlərinə görə bir - birindən fərqlənir. Balıq pulcuqlarının tərkibinin 60% -dən çoxunu kollagenlər təşkil edir. Kollagen -skleroprotein qrupuna aid olan təbii polimerdir. Amin turşularının növbələşən qalıqlarından ibarət olan polipeptid zəncir kollagenin ilkin strukturudur. Onların tədqiqatı üçün fraktal struktur-sistemin təşkili, fəaliyyəti idarə etmənin əsası ola bilər [1-2].

Balıqların pulcuqlarının səthlərinin (atom-molekulyar səviyyədə) mikrostrukturlarının optik və elektron mikroskopları ilə tədqiqi göstərir ki, pulcuqların səth quruluşları ilə təbii kristalların səth quruluşları arasında heyrətamiz oxşarlıqlar mövcuddur. Bundan əlavə balığın müxtəlif nayihələrindən götürülmüş pulcuqların dielektrik nüfuzluqlarının və dielektrik itki bucağının tangensinin tezlikdən asılılığının tədqiqi aparılmış və aşkar edilmişdir ki, tezliyin kiçik



Şəkil 1. Pulcuğun səthində onun yaşını müəyyən edən illik üzüklər

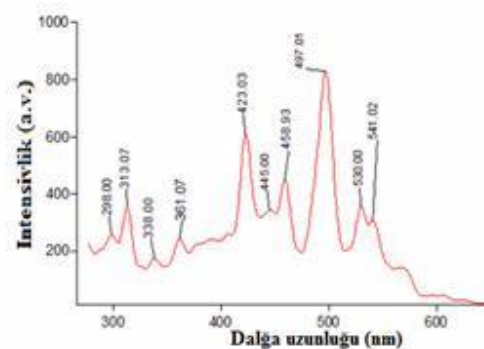
qiymətlərində həm dielektrik nüfuzluğunun həm də dielektrik itki bucağının azalması sonra isə praktiki olaraq sabit qalması müşahidə edilmişdir. Qeyd olunanlardan görünür ki, uzun illər açıq havada qalmaqla müxtəlif təbiətli aqressiv təsirlərə baxmayaraq formalarını və xassələrini pratiki olaraq saxlayan balıq pulcuqları həm ayrılıqda, həm də digər materiallarla qarşılıqlı təsirdə həm sırf elmi, həm də praktiki cəhətdən maraq kəsb edən tədqiqat obyektinə ola bilər. Bunu nəzərə alaraq təqdim olunan məruzədə balıq pulcuqlarında aşkar edilmiş flüoressensiya effekti barədə məlumat vermək istərdim.

Balıq pulcuqlarının lüminessent xassələri Cary Eclipse flüorimetri vasitəsilə tədqiq edilmişdir [3]. Cary Eclipse flüorimetri müxtəlif təbiətli nümunələrin spektral xassələrini öyrənmək üçün universal cihazdır. Cihaz bioloji və materialşünaslıq sahəsində tədqiqat üçün uyğunlaşdırılmışdır. Həyəcanlandırma mənbəyi kimi texniki göstəriciləri aşağıdakı kimi olan impuls ksenon lampasından istifadə edilmişdir. Saniyədə 80 parıltı və piklər arasında ekvivalent güc 75kVt.

Fokuslayıcı optik qurğu kimi Şvardşil kollektorundan istifadə edilmişdir. Çerni – Turner konstruksiyasının köməyi ilə monoxromatorlar və üfqi yarıqlar idarə edilir. Seçilmiş 6 yarıq: 1.5, 2.5, 5, 10, 20, 10mm mövcuddur. Eclipse cihazının iki monoxromatoru var və hər monoxromatorla biri digərindən asılı olmadan skan əməliyyatı aparmaq olur. Əgər həyəcanlanma və skanetmə emissiya monoxromatoru vasitəsilə qeyd edilibsə onda emission spektr və ya bir çox hallarda fluoressensiya spektri alınır. Emissiyon spektri materialın təbiəti və molekulyar quruluşu haqqında məlumat daşıyır. Fluoressensiya spektrinin forması həyəcanlandırıcı işığın dalğa uzunluğundan asılı deyil belə ki, emissiya ən aşağı həyəcanlanmış hal tərəfindən yaranır. Fluoressensiya spektri adətən özünü udulma spektrinin güzgü əksi kimi göstərir. Emissiya monoxromatoru ilə fiksə edib, həyəcanlanma monoxromatoru vasitəsilə skanetməklə fluoressensiyanın həyəcanlanma spektrini almaq olar. Həyəcanlanma spektri verilmiş dalğa uzunluğunda emissiya intensivliyinin skanə edilən həyəcanlandırıcı işığın dalğa uzunluqlarından asılılığıdır. Hər iki monoxromatorla eyni zamanda həm təcrübə aparıb həm də skanetməklə sinxron skanetmə spektrləri almaq olar.

Flüoressensiya spektrinin xarakterik xüsusiyyəti nümunənin kimyəvi tərkibi ilə elementar quruluş və nümunənin digər dinamik dəyişikliklərlə bağlı olan proseslərlə yüksək ayırdetmə xüsusiyyətinə malik olmasıdır. Flüoressensiya spektri kifayət qədər kiçik zaman diapazonuna malikdir. Çünki, işığın udulmasından 10^{-8} san sonra fluoressensiya baş verir. Bu zaman kəsiyində bütün proseslər molekulyar səviyyədə başa çatır. Fluoressensiya spektrində enerjinin şüalanması, daşınması, həmçinin komponentlər arasında yüklərin və enerjilərin mübadiləsi qısa müddətli dinamik proseslərdə öz əksini tapır. Bütün bunlar materialın statik xassələrinin və quruluş xüsusiyyətlərinin öyrənilməsində və dar lüminessensiya zolaqlarında işıq siqnalları vasitəsilə aşkar edilən proseslərdə özünü göstərir.

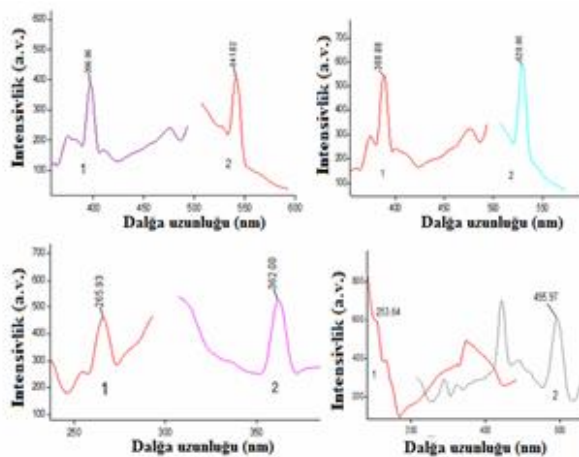
Balıq pulcuqlarının həyəcanlanma spektrinin tədqiqinin nəticələri şəkil 2-də göstərilmişdir. Alınmış spektr pulcuqların dalğa uzunluğu 230nm olan işıqla həyəcanlanması nəticəsində alınmışdır. Spekrdə müxtəlif piklər alınmışdır. Onların bəziləri balıq pulcuqlarının flüoressensiyasını xarakterizə edir və şəkil 3-də göstərilmişdir. Şəkil 3-dən görüldüyü kimi 396,96, 388, 265,93 və 253,64 dalğa uzunluqlu siqnallarla həyəcanlanma zamanı müvafiq olaraq 541,02, 528,96, 362,00 və 495,97 dalğa



Şəkil 2 Balıq pulcuqlarının həyəcanlanma spektri

uzunluqlarında flüoressensiya spektrləri aşkar edilir. Aşkar edilmiş bütün FS-lərin intensivlikləri həyəcanlandırıcı siqnalların intensivlikləri ilə müqayisə olunan tərtibdə olur. Beləki, 396,96nm dalğa uzunluqlu həyəcanlanmada flüoressensiya pikinin intensivliyi 28 atom enerji vahidi, 380 nm dalğa uzunluqlu həyəcanlanmada flüoressensiya pikinin intensivliyi 40 atom enerji vahidinə qədər artır. Uyğun olaraq 265,95nm dalğa uzunluğunda flüoressensiya pikinin intensivliyi 63 atom enerji vahidinə qədər artır. 253,64nm dalğa uzunluqlu həyəcanlanmada isə flüoressensiya pikinin intensivliyi 13 atom enerji vahidinə azalır.

İntensivliyin dəyişməsi bir tərəf-dən ksenon lampası spektrində intensivliklərin qeyri bərabər paylanması ilə digər tərəfdən isə flüoressensiyanın kvant çıxışlarının fərqli olması ilə əlaqədardır. Həyəcanlandırıcı siqnalların intensivlikləri ilə alınmış flüoressensiya piklərinin intensivliklərinin müqayisəsindən aşağıdakı nəticəyə gəlmək olar ki, tədqiq olunan material özünü kəskin şəkildə biruzə verən flüoressensiya xassəsinə malikdir.



Şəkil 3. Balıq pulcuqlarında flüoressensiyasını xarakterizə edən bəzi intensivlikli piklər

ƏDƏBİYYAT

1. Eldar Godzhaev, Abbasali Abasov, Sharafkxanim Aliyeva, David Charuxcev // The Surface Fractal Structure of Fish Scales //Open Journal of Inorganic Non-Metallic Materials,2014,4,7-11.
- 2.Э.М.Годжаев, К.Ш. Кахраманов, Ш.В.Алиева, А.Б. Нагиев Квазифрактальная поверхность чешуи рыб Известия вузов. Прикладная химия и биотехнология, 2014, №1, (6), с.56-61.
- 3.Э.М.Годжаев, Н.С.Набиев, Ш.А.Зейналов, С.С.Османова, Э.А.Аллахьяров, А.Г.Гасанова, Исследования спектров флуоресценции и диэлектрических свойств композитов ПЭВП +х об.% TiGaSe2 Электронная обработка материалов, 2013, 49(3), 14 –18.

ИЗМЕРЕНИЯ ВЫСОКЧАСТОТНЫХ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ЖИДКОСТЕЙ (ϵ^{\uparrow} и ϵ^{\wedge}) ПРИ ДЛИНЕ ВОЛНЫ $\lambda = 3,21$ см (СВЧ)

С.М. Усейнова

Бакинский Государственный Университет

moonsun8486@mail.ru

Проводились измерения высокочастотной диэлектрической проницаемости ϵ^{\uparrow} и диэлектрических потерь ϵ^{\wedge} чистого циклопентанона (C_5H_8O) и его концентрированных растворов в циклопентане (C_5H_{10}) в широком температурном интервале (от $-40^{\circ}C$ до $+40^{\circ}C$).

Измерялось толщина слоя жидкости l_m при первом экстремальном значении η_m . С применением номограмм вариационного метода непосредственно определялись значения $\varepsilon^{\wedge'}$ и $\varepsilon^{\wedge''}$.

Диэлектрическая проницаемость ε' и потери $\varepsilon^{\wedge'}$, ($\varepsilon = \varepsilon' - i\varepsilon''$) исследуемой жидкости циклопентанона (C_5H_8O) и его концентрированных растворов в циклопентане (C_5H_{10}) были измерены в широком интервале температур (от $-40^\circ C$ до $+40^\circ C$) в диапазоне сверхвысоких частот (СВЧ) при длине волны $\lambda = 3,21$ см, принципиально новым вариационным методом [1-5], используя следующие уравнения для расчета $\varepsilon^{\wedge'}$ и $\varepsilon^{\wedge''}$:

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

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

где: λ – длина электромагнитной волны в свободном пространстве при отсутствии среды, λ_0 – критическая длина электромагнитной волны, определяемая размерами волновода ($\lambda_0 = 2a$, a – внутренний размер волновода), λ_b – длина электромагнитной волны в пустом волноводе, λ_g – длина электромагнитной волны в волноводе заполненной исследуемой жидкостью, Δ – параметр, характеризующий степень затухания электромагнитных волн в волноводе, заполненной исследуемой жидкостью.

Согласно теории волноводных линий передач [6, 7], коэффициент стоячей волны η в волноводе определяется выражением:

$$\eta = \frac{1 + |\hat{\rho}|}{1 - |\hat{\rho}|}$$

где: $|\hat{\rho}|$ – модуль комплексной величины коэффициента отражения

$$|\hat{\rho}| = \left| \frac{z \cdot th \hat{\gamma} l - z_0}{z \cdot th \hat{\gamma} l + z_0} \right|;$$

z_0 и z – волновые сопротивления, соответственно, пустого волновода и волновода, заполненного исследуемой средой.

Так как фиксация экстремальных точек осуществляется с высокой степенью точности, то целесообразнее было в качестве измеряемых параметров, использовать величины l_m и η_m , соответствующие экстремальным значениям зависимости η от l .

После преобразований уравнений (1) и (2) имеет, что экстремальные значения коэффициента стоячей волны в волноводе η_m при толщине слоя жидкости в волноводной секции равном l_m описываются двумя уравнениями.

$$\eta_m = \sqrt{\frac{cth(2\pi x y) + y ctg(2\pi x)}{th(2\pi x y) - y tg(2\pi x)}}; \quad (4)$$

и

$$\eta'_m = \sqrt{\frac{th(2\pi x y) - y tg(2\pi x)}{cth(2\pi x y) + y ctg(2\pi x)}} \quad (5)$$

при $\eta m = 1$ оба уравнения приводятся к выражению вида:

$$sh(\pi x y) = -y \sin(\pi x) \quad (6)$$

где: $x = l_m / \lambda_g$, $y = tg \Delta / 2$;

Полученные уравнения (3)–(6) содержат лишь функции двух вспомогательных параметров x и y и в принципе устанавливают связь между величиной диэлектрической проницаемости ϵ' , диэлектрических потерь ϵ'' и длины электромагнитной волны жидкости λ_g и экспериментально определяемым значением толщины слоя жидкости в ячейке l_m , при котором обнаруживается экстремум $|\hat{\rho}|$ или η_m при этой толщине жидкости, при условии, что значения λ и λ_b известны. Однако, получить эту связь в явной форме не представляется возможным из-за наличия в исходных уравнениях (5) и (6) трансцендентных функций. В этой связи предложенный новый, вариационный метод измерения диэлектрических параметров в диапазоне СВЧ, предлагая новый, графический метод (номограммами) решения не только устранил данный недостаток существующих методов, но открыл новые возможности для исследования полярных жидкостей с большими потерями;

Так как у таких жидкостей в зависимости η от l получался лишь один максимум, а один максимум позволял определить значения ϵ' и ϵ'' уже существующими методами (Эти методики требовали знание трех и более значений максимумов в $\eta = f(l)$) [2, 3] это, следующие номограммы: 1) Номограммы к графическому методу вычисления λ_g и $tg \Delta / 2$ по экспериментальным значениям l_m и η_m при толщине слоя жидкости в волноводной ячейке, при которой имеет место первый минимум зависимости η от l , в плоскости координат $[x = l_m / \lambda_g; y]$; 2) Номограммы к графическому методу вычисления λ_g и $tg \Delta / 2$ по экспериментальным значениям l_m и η_m , при толщине слоя жидкости в волноводной ячейке, при которой имеет место первый минимум зависимости η от l в плоскости координат $[\lambda_g / \lambda_b; tg \Delta / 2]$; 3) Номограммы к графическому методу вычисления ϵ' и ϵ'' по экспериментальным значениям l_m и η_m при толщине слоя жидкости в которой имеет место первый минимум зависимости η от l , в плоскости координат $[\epsilon''; \epsilon']$ [1-5].

Именно с применением вариационного метода были исследованы циклопентанон и его растворы в циклопентане. Результаты даны в таблице 1.

Таблица 1

Диэлектрическая проницаемость ϵ' и показатель поглощения ϵ''
растворов циклопентанон-циклопентан $\lambda = 3,21$ см

Темп ература t°C	Концентрация циклопентанона в мольных долях											
	0	0,1724	0,3572	0,5556	0,7692	1,0						
	ϵ'	ϵ'	ϵ'	ϵ'	ϵ'	ϵ'	ϵ'	ϵ'	ϵ'	ϵ'	ϵ'	ϵ'
-40	2,05	4,16	0,94	6,52	2,34	8,47	4,02	9,39	5,76	9,70	6,36	
-20	2,02	4,20	0,85	6,50	2,06	8,63	3,48	10,11	5,18	10,73	5,74	
0	2,00	4,21	0,76	6,53	1,82	8,86	3,06	10,81	4,24	11,81	4,91	
20	1,97	1,97	0,72	6,63	1,51	8,90	2,70	10,58	3,45	11,75	3,78	
40	1,94	1,94	0,65	6,70	1,44	8,81	2,34	10,20	2,91	10,86	2,72	

Циклопентан не полярная жидкость ($\epsilon^{\uparrow} = 0$). С прибавлением концентрации циклопентанола также и температуры значения ϵ^{\uparrow} и ϵ^{\downarrow} плавно увеличиваются.

ЛИТЕРАТУРА

1. Касимов Р.М., Нагизаде Н.С. Вестник МГУ, сер. хим., 2, 1967, с. 101
2. Касимов Р.М., Усейнова С.М. Измерительная техника, 2, 1975, с. 76-82
3. Касимов Р.М., Усейнова С.М. Изд. АН Азерб. ССР серия физика-техн. и матем. наук, I, 1973, с. 111-117
4. Усейнова С.М. О вариационном методе исследования диэлектрических свойств жидкостей и растворов. BDU, V resp. Konfransın materialları, Bakı 2011, s. 200-202
5. Усейнова С.М. Графические способы применения вариационного метода. BDU, V resp. Konfransın materialları, Bakı 2011, s. 202-205
6. Брандт А.А. Исследования диэлектриков на СВЧ. М., физматгиз, 1963
7. Харвей А.Ф. Техника сверхвысоких частот, М. Изд. «сов.радио», 1965

РАВНОВЕСНЫЕ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЦИКЛОПЕНТАНОНА

С.М.Усейнова

Бакинский Государственный Университет

moonsun8486@mail.ru

На основании проведенных экспериментов и полученных данных рассчитаны статическая проницаемость и ее зависимость от температуры, предельно высокочастотная ϵ_{∞} диэлектрическая проницаемость и её температурная зависимость. Рассчитаны молекулярные q параметры $\mu_{\text{жс}}$ - дипольный момент молекулы циклопентанола и g - корреляционный фактор.

Температурные зависимости статической диэлектрической проницаемости ϵ_0 исследованной жидкости (циклопентанон C_5H_8O или $CH_2(CH_2)_3CO$) приведены на рис 1.

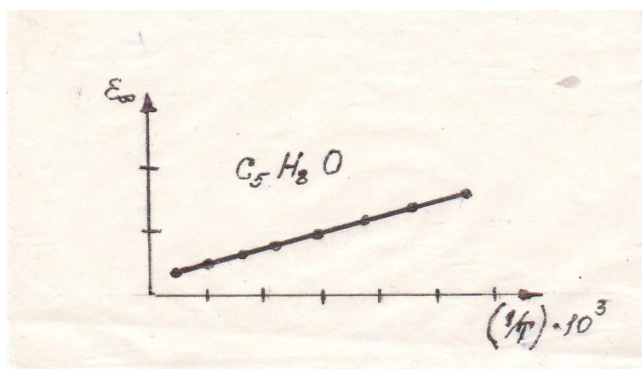


Рис.1. Температурная зависимость статической диэлектрической проницаемости ϵ_0 циклопентанола.

Анализ данных низкочастотных (НЧ) измерений проведен с использованием уравнения Онзагера-Кирквуда-Фрелиха (1), вывод его из статической теории диэлектрической поляризации [1-4]:

$$g\mu_r^2 = \frac{(\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty)(2\varepsilon_0 + \varepsilon_\infty)}{3\varepsilon_0} \left(\frac{3}{\varepsilon_\infty + 2} \right)^2 \frac{3V k T}{4\pi n} = \mu_{жс}^2 \quad (1)$$

где: ε_0 – предельно низкочастотная, т.е. статическая диэлектрическая проницаемость, ε_∞ - предельно высокочастотная т.е. измеряемая в оптическом диапазоне волн диэлектрическая проницаемость вещества.

Параметр

$$g = 1 + z \cos \gamma \quad (2)$$

Структурный фактор, являющейся постоянной величиной для данном молекулы, z – среднее координационное молекулы полярной жидкости, $\cos \gamma$ – среднее значение косинуса угла между направлениями диполей соседних молекул; g – может служить мерой отклонения эффективного дипольного момента $\mu_{жс}$ молекулы в жидкой фазе от

значения её момента μ_r в газовой фазе: $\sqrt{g} = \frac{\mu_{жс}}{\mu}$. При $g = 1$ эффективный дипольный

момент совпадает с моментом изолированной молекулы, что указывает на отсутствие в исследуемой жидкости ориентационного влияния короткодействующих сил. При $g > 1$, как следует из уравнения (2), $\cos \gamma > 0$, что эквивалентно параллельному выстраиванию диполей, т.е. преобладанию открытых цепочечных структур; при $g < 1$, $\cos \gamma < 0$, что эквивалентно антипараллельному выстраиванию диполей или преобладанию закрытых цепочечных структур.

В таблице 1 приведены результаты расчета $\mu_{жс}$ и g циклопентанона, и для сравнения, ацетона. В качестве ε_∞ , входящего в расчетное уравнение (1), взяты значения высокочастотного предела дисперсионной области, полученное экстраполяцией данных микроволновых измерений. Значения моментов изолированных молекул μ_0 выбраны на основе анализа большого объема экспериментальных данных.

Таблица 1

Эффективные дипольные моменты $\mu_{жс}$ и корреляционные параметры g полученные по уравнению (1), при $t=20^\circ\text{C}$.

Соединение	Химическая формула	ε_0	ε_∞	$\mu_{жс, D}$	$\mu_{0, D}$	g
Циклопентано н	$\text{C}_5\text{H}_8\text{O}$	13,24	13,13	2,45	3,00	0,67
Ацетон	$(\text{CH}_3)_2\text{CO}$	21,03	1,90	3,03	2,85	1,09

По данным таблицы 2, величины высокочастотных пределов дисперсионных областей циклопентанона, несколько превышают значения квадрата оптических показателей преломления, что свидетельствует о вероятном существовании в циклопентаноне дополнительной высокочастотной области поглощения. Анализ температурных зависимостей ε_∞ , показывают, что незначительное возрастание ε_∞ с уменьшением температуры создается изменением плотности d и количественно

описывается уравнением Клазиуса–Моссотти, записанного в виде $\frac{\epsilon_{\infty} - 1}{\epsilon_{\infty} + 2} \cdot \frac{M}{d} = const$, где

M - молекулярный вес. Это свидетельствует о том, что дополнительная область дисперсии связана с атомной поляризацией, которая сопровождается поглощением резонансного типа следует также отметить, что найденные значения ϵ_{∞} , во всем исследованном температурном интервале, находятся в хорошем приближении с величинами рассчитанных по формуле Смайса [5].

$$\frac{\epsilon_{\infty} - 1}{\epsilon_{\infty} + 2} = 1,05 \cdot \frac{n_D^2 - 1}{n_D^2 + 1}, \quad (3)$$

где: n_D – коэффициент преломления, измеренный в оптическом диапазоне волн; коэффициент 1,05 учитывает вклад в ϵ_{∞} , обусловленный атомной поляризацией.

Таблица 2

Высокочастотные пределы дисперсии ϵ_{∞} циклопентанона
при различных температурах.

Температура, °C	-40	-30	-20	-10	0	10	20	30	40
Высокочастотный предел ϵ_{∞}	2,240	2,225	2,190	2,165	2,140	2,115	2,090	2,065	2,040

У ацетона величина g близка к 1; из чего следует, что чистый ацетон характеризуется хаотическим распределением молекул. Этот вывод подкрепляется данными оптических исследований релеевского рассеяния света [6, 7]

У циклопентанона величина эффективного дипольного момента $\mu_{\text{ж}}$, определенная по уравнению (1), меньше чем значение дипольного момента молекулы $\mu_{\text{г}}$, определенного в газовой фазе; это указывает на то, что в чистом циклопентаноне имеет место локальные образования с антипараллельной ориентацией в них близкорасположенных диполей. Существование таких образований, по-видимому, не связано с действием специфических межмолекулярных сил, таких как, например, водородных связей, а объясняется действием сферических факторов [6, 7].

ЛИТЕРАТУРА

1. Дебай П. Полярные молекулы. М.-Л., 1951. с.
2. Smuth C.P. DielectrikBehauvor and Structure. №4, 1955
3. Onzager L., J.Am.Chem. Soc, 58, 1486, 1938.
4. Kirwood J.G., Goldberd R.J., J.Phys. Chem. 18, 54, 1950.
5. Cole R.H., J.Chem. Phys. 23, 3, 1955; 23, 1767, 1955.
6. Френкель Я.И. Кинетическая теория жидкостей, М., 1980. с.
7. Богородицкий Н.Н. и др. Теория диэлектриков. М.-Л., 1965. с. 146-278

**GEPTİLBENZOL DOYMUŞ BUXARI ELASTİKLİYİNİN TEMPERATURDAN
ASILILIĞININ TƏCRÜBİ TƏDQIQI VƏ ANALİTİK İFADƏSİ**

F.Q. Abdullayev, Y.A. Cəbiyev, H.Ş. Həsənov¹

Azərbaycan Dövlət Neft və Sənaye Universiteti

¹*Bakı Dövlət Universiteti*

T=(273,15 – 712,85) K temperatur intervalında geptilbenzol doymuş buxarı təzyiqi təc- rübi tədqiq olunmuş. Alınmış təcrübi nəticələr əsasında geptilbenzolun P_s- T_s asılılığını ifadə etmək üçün yeni tənlik təklif olunur. Hesablama xətasının qiyməti ± 0,01% -dən böyük olmur.

Aromatik karbohidrogenlər müasir sənayenin demək olar ki, bütün sahələrində geniş istifadə olunurlar. Bu maddələrin iştirak etdikləri proseslərin əksəriyyəti temperatur və təzyiqin çox geniş dəyişmə intervalında baş verirlər. Belə proseslərin elmi cəhətdən düzgün lahiyələndirilməsi və iqtisadi səmərəsinin yüksək olması üçün geniş temperatur və təzyiq intervalında aromatik karbohidrogenlərin istilikfiziki xassələrinin dəqiq qiymətlərinin məlum olması mühüm əhəmiyyət kəsb edir. Deyilənləri nəzərə alaraq, biz maye geptilbenzolun doymuş buxarı təzyiqini T=(273,15 – 712,85) K temperatur intervalında təcrübi tədqiq etmişik.

Təcrübələr benzol, toluol, etilbenzol və s. maddələrin P_s-T_s asılılıqlarının tədqiqində istifadə olunmuş P –v –T qurğusunda [1] aparılmışdır. Təcrübələrdə temperatur, xüsusi sifarişlə hazırlanmış PTS-10 tipli, nümunəvi platin müqavimət termometri ilə ölçülür. Temperaturun ölçülməsində buraxılan mütləq xəta ± 0,01 K -dən böyük olmur. Nisbi xətanın qiyməti bundan da kiçik olur.

Təzyiq standartlaşdırma mərkəzlərində xüsusi yoxlama keçmiş, nümunəvi MP-60 və MP-600 tipli, pistonlu manometrlər vasitəsilə ölçülür. Təzyiqin ölçülməsində buraxılan nisbi xətanın ən böyük qiyməti ±0,01%-dən böyük olmur.

Tədqiqat üçün istifadə olunan “ÇDA”(çистый дlya анализа) markalı geptilbenzol nümunəsi, yüksək həssaslığa malik rektifikasiya kalonunda təkrar təmizlənmişdir. Tədqiqatda istifadə olunan geptilbenzol mayesi təmizliyinin 99,9% olması müəyyən edilmişdir.

273,15 – 523K temperatur intervalında doymuş buxarın təzyiqi, bu məqsəd üçün hazırlanmış xüsusi U-şəkilli manometrlə ölçülür. 523 – 598K temperatur intervalında təcrübənin təzyiqi MP-60 tipli, pistonlu manometrlə ölçülür. 598 – 639K temperatur intervalında təcrübənin təzyiqi həm MP-60, həm də MP-600 tipli, pistonlu manometrlərlə ölçülmüşdür.

Təcrübi qurğu doymuş buxarın təzyiqini həm nümunəni qızdıraraq, həm də soyudaraq ölçməyə imkan verir. Bu imkandan istifadə edərək geptilbenzol doymuş buxarının təzyiqi iki dəfə, həm qızma prosesi zamanı, həm də soyuma prosesi zamanı ölçülmüşdür. Müxtəlif təcrübələrdə təzyiqin ölçülmüş qiymətləri arasındakı fərq ±0,01%-dən böyük olmur.

Geptilbenzol doymuş buxarı təzyiqinin təcrübi ölçülmüş qiymətləri aşağıdakı cədvəl 1-də verilir:

Cədvəl 1

t, °C	T, K	τ	P _s , bar	t, °C	T, K	τ	P _s , bar
0	273,15	0,3832	0,4476 x 10 ⁻⁵	432	705,15	0,8992	21,1351
25	298,15	0,4182	5,0546 x 10 ⁻⁵	433	706,15	0,9906	21,6483
50	323,15	0,4533	3,6413 x 10 ⁻⁴	434	707,15	0,9920	21,9086
75	348,15	0,4884	1,8665 x 10 ⁻³	435	708,15	0,9934	22,1711

**BDU-nun Fizika Problemləri İnstitutunun yaradılmasının 10 illiyinə həsr olunmuş
Beynəlxalq konfrans**

100	373,15	0,5235	$7,3539 \times 10^{-3}$	436	709,15	0,9948	22,4362
125	398,15	0,5585	$2,3555 \times 10^{-2}$	437	710,15	0,9962	22,7032
150	423,15	0,5936	$6,3930 \times 10^{-2}$	438	711,15	0,9976	22,9732
175	448,15	0,6287	$1,5173 \times 10^{-1}$	438,2	711,35	0,9979	23,0274
200	473,15	0,6637	$3,22549 \times 10^{-1}$	438,4	711,55	0,9982	23,0816
225	498,15	0,6988	0,6258596	438,6	711,75	0,9985	23,1363
250	523,15	0,7339	1,127130	438,8	711,95	0,9987	23,1908
275	548,15	0,7690	1,896054	439,0	712,15	0,9990	23,2453
300	573,15	0,8040	3,048004	439,1	712,25	0,9992	23,2727
325	598,15	0,8391	4,709264	439,2	712,35	0,9993	23,3002
350	623,15	0,8742	7,026300	439,3	712,45	0,9994	23,3275
375	648,15	0,9092	10,164806	439,4	712,55	0,9996	23,3548
400	673,15	0,9443	14,307231	439,5	712,65	0,9997	23,3822
425	698,15	0,9794	19,650807	439,6	712,75	0,9999	23,4099
430	703,15	0,9864	20,881895	439,65	712,80	0,99993	23,4236
431	704,15	0,9878	21,135080	439,70	712,85	1,0000	23,4373

Təcrübi nəticələr əsasında $T=(273 - 712)K$ temperatur intervalında geptilben- zol doymuş buxarı təzyiqinin temperaturdan asılı olaraq dyişilməsini əks etdirən P_s-T_s qrafiki qurulmuşdur. Bu qrafikdə hər iki seriya təcrübələrdə təyin olunmuş qiymətlər qeyd olunur. Bütün təcrübi nəticələrin ümumiləşdirici əyridən kənara çıxması $\pm 0,01\%$ -dən böyük olmur.

Qrafoanalitik araşdırmalar nəticəsində müəyyən olunmuşdur ki, geptilbenzol doymuş buxarı təzyiqinin $\lg P_s^{gb}(\tau)$ asılılığı ilə etilbenzol doymuş buxarı təzyiqinin $\lg P_s(\tau)$ [2] asılılıqları arasında

$$\lg P_s^{gb}(\tau) = M + N \lg P_s^{eb}(\tau) \quad (1)$$

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

$$\lg P_s^{gb}(\tau) = -0,525221 + 1,232125 \lg P_s^{eb}(\tau) \quad (2)$$

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

$$\lg P_s^{gb}(\tau) = -0,517423 + 1,203516 \lg P_s^{eb}(\tau) \quad (3)$$

şəklində yazılır.

Bütün tədqiq olunan $\tau = 0,47 - 1,00$ temperatur oblastı üçün geptilbenzol doymuş buxarı təzyiqinin (2) və (3) tənlikləri ilə hesablanmış qiymətləri və onların təcrübədə alınmış nəticələrlə müqayisəsi cədvəl 2-də verilmişdir.

Cədvəl 2

$t, ^\circ C$	T,K	τ	$P_s^{t\text{ac}}, \text{bar}$	$P_s^{(2);(3)}, \text{bar}$	$(\Delta P_s/P_s^{\text{t\text{ac}}}) \times 100\%$
61,89	335,04	0,47	$0,824246 \times 10^{-3}$	$0,824849 \times 10^{-3}$	- 0,0732
69,02	342,17	0,48	$1,300186 \times 10^{-3}$	$1,300186 \times 10^{-3}$	- 0,0008
76,15	349,30	0,49	$2,003974 \times 10^{-3}$	$2,003974 \times 10^{-3}$	0
83,28	356,42	0,50	$0,302318 \times 10^{-2}$	$0,302318 \times 10^{-2}$	0
90,40	363,55	0,51	$0,447100 \times 10^{-2}$	$0,447094 \times 10^{-2}$	+0,0013
97,53	370,68	0,52	$0,649090 \times 10^{-2}$	$0,649090 \times 10^{-2}$	0

**BDU-nun Fizika Problemləri İnstitutunun yaradılmasının 10 illiyinə həsr olunmuş
Beynəlxalq konfrans**

104,66	377,81	0,53	$0,926193 \times 10^{-2}$	$0,926192 \times 10^{-2}$	+0,0001
111,79	384,94	0,54	0,0130075	0,0130075	0
118,92	392,07	0,55	0,0179723	0,0179723	0
126,05	399,20	0,56	0,0245516	0,0245516	0
133,17	406,32	0,57	0,0330583	0,03305823	-0,0002
140,30	413,45	0,58	0,0439674	0,04396736	0
147,43	420,58	0,59	0,0578042	0,0578043	-0,0002
154,56	427,71	0,60	0,0752673	0,0752674	-0,0001
190,20	463,35	0,65	0,243436	0,2434355	0
225,84	499,00	0,70	0,646561	0,646561	0
261,49	534,64	0,75	1,450015	1,450014	+0,0001
297,13	570,28	0,80	2,905446	2,905445	0
332,77	605,92	0,85	5,338704	5,338693	+0,0002
368,42	641,56	0,90	9,176672	9,1766432	+0,0003
404,06	677,21	0,95	14,98683	14,986789	+0,0003
418,31	691,46	0,97	18,02941	18,029376	+0,0002
425,44	698,54	0,98	19,73543	19,735376	+0,000
432,57	705,72	0,99	21,57170	21,571636	+0,0003
436,14	709,29	0,995	22,54436	22,544315	+0,0009
438,27	711,42	0,998	23,14549	23,14545	+0,0002
439,70	712,85	1,000	23,55394	23,553867	+0,0003

$$\Delta P_s = P_s^{\text{tac}} - P_s^{(2);(3)}$$

Cədvəl 2-dən göründüyü kimi bütün tədqiq olunan temperatur intervalında (2) və (3) düsturları ilə hesablanmış qiymətlər ilə təcrübi nəticələr arasındakı fərq təcrübənin nisbi xətasından, yəni $\pm 0,01\%$ -dən böyük olmur. Yalnız $T = 335,04\text{K}$ temperaturda nisbi xəta $-0,07\%$ -ə bərabər olur. Nisbi xətanın orta qiyməti $\pm (0,001 - 0,002)\%$ -dən böyük olmur.

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

$$P_s^{\text{eb}} = P_k \exp (s_0 + s_1/T^{\text{æ}}) \quad (4)$$

şəklində düstur müəyyən etmişik. Burada $\tau = T_s/T_k$, $T_k = 619,55\text{ K}$ kritik temperatur; $\pi = P_s/P_k$, $P_k = 37,195\text{ bar}$ kritik təzyiq, æ , s_0 və s_1 müxtəlif temperatur intervalları üçün sabit əmsallardır, qiymətləri də cədvəl 3-də verilir:

Cədvəl 3

	Temperatur intervalı	æ	s_0	s_1	$T_k^{\text{æ}}$	$S = s_1 \times T_k^{\text{æ}} / T_k^{\text{æ}}$
1	$\tau = 0,47 - 0,55$	1,44	3,95522	-4,16447	10485,52	-43666,671
2	$\tau = 0,50 - 0,63$	1,40	4,22889	-4,38446	8107,876	-35548,69
3	$\tau = 0,64 - 0,79$	1,30	4,84304	-4,92634	4262,842	-2100,221
4	$\tau = 0,71 - 0,86$	1,20	5,44813	-5,49857	2241,256	-12323,712
5	$\tau = 0,80 - 0,95$	0,90	7,76903	-7,77839	325,7382	-2533,7179
6	$\tau = 0,94 - 1,00$	0,80	8,94733	-8,94931	171,2620	-1532,6772

Etilbenzol doymuş buxarı təzyiqinin, əmsalların 3-cü cədvəldə göstərilən qiymət- lərindən istifadə edərək, (4) tənliyi vasitəsilə hesablanmış qiymətlərini təcrübi nəticələrlə müqaisə etməklə müəyyən olunmuşdur ki, bütün tədqiq olunmuş $\tau = (0,47 - 1,00)$ temperatur intervalında nisbi xətanın maksimum qiyməti $\pm 0,05\%$ -dən böyük olmur. Nisbi xətanın orta qiyməti isə $\pm 0,01\%$ -ə bərabər olur.

ƏDƏBİYYAT

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

İON PARAMAQNİT REZONANSININ KÖMƏYİ İLƏ SİNİR LİFİ MEMBRANINDA İON NƏQLİ İNTENSİVLİYİNİN ÖYRƏNİLMƏSİ

N.İ. Quliyev, E.X. İsmayılov, R.M. Veysova, V.S. Zərbəliyeva¹

Gəncə Dövlət Universiteti, ¹Azərbaycan Dövlət Aqrar Universiteti

Canlı orqanizm hüceyrələrində membran keçiriciliyinin tədqiqi üçün ion paramaqnit rezonans üsulundan istifadə etmək təklif edilmişdir və bu üsulun üstünlükləri göstərilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, toxumalardan buraxılan cərəyanın kəskin azaldığı tezliyə görə membrandan keçən ionun növü barədə cərəyanın dəyişən qiymətinə görə isə verilmiş ion nəqlinin normaya nəzərən intensivliyinin dəyişməsi haqqında mülahizə yürütmək olar.

Sinir impulsunun sinir lifi boyunca yayılması lifin membranından ionların hərəkəti ilə müşayiət olunan prosesdir. Bunlar əsasən Na^+ və K^+ ionlarıdır. Bundan başqa membrandan diffuziya hesabına daima Cl^- ionları da hərəkət edirlər və bu ionlar üçün membran kifayət qədər keçiricidir. Bu və ya digər fizioloji proseslərdə sinir və əzələ membranlarından H^+ protonların daşınması, xüsusilə də ATF sintezi üçün böyük əhəmiyyət kəsb edir.

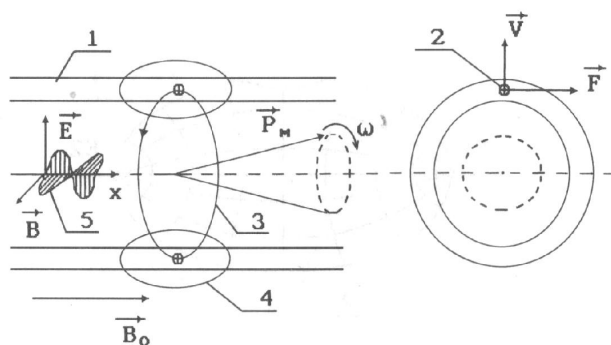
Sinir və əzələ lifi membranının funksional halı ionların daşınma intensivliyi ilə təyin edilir. İon daşınması intensivliyinin azalması, orqanizmdə metabolizmin pozulmasını göstərir. Bu isə öz növbəsində bir çox patologiyalara səbəb olur. Digər tərəfdən, ion daşınması intensivliyinin normadan çox olması membranın əngəl funksiyasının pozulmasını göstərir ki, bu da həmçinin patoloji proseslərə gətirib çıxarır.

Ona görə də həm fəal, həm də qeyri-fəal ion nəqlinin intensivliyinin səviyyəsinin izah edilməsi və onun norma ilə müqayisəsi mümkün diaqnostika məsələsidir. Bu zaman diaqnostika məqsədləri üçün müxtəlif növ ionların daşınması intensivliyinin seçmə qayda ilə təyin edilməsi böyük maraq kəsb edir ki, bu da hazırkı məqalənin nəticələrini əks etdirdiyi tədqiqat işinin məqsədini təşkil edir.

Qarşıya qoyulmuş məsələ, orqanizmi sabit maqnit sahəsində (SMS) yerləşdirdikdə yaranan ion paramaqnit rezonansının köməyi ilə həll edilə bilər.

Rezonansın yaranmasının mahiyyəti aşağıdakı kimidir (Şəkil 1).

Sabit maqnit sahəsinin təsir göstərdiyi 1 sinir lifi boyunca sinir impulsunun yayılması prosesinə nəzər yetirək. Xarici sabit maqnit sahəsinin B_0 induksiyası lifə paralel yönəlmişdir. Belə vəziyyət aşağı ətrafları sabit maqnit sahəsi yaradan selenoidin oxuna paralel yerləşmiş insanın oturaq sinirlərində yaranır.



Şəkil 1. Sinir lifində ion paramaqnit rezonansının yaranması (1-sinir lifi membranı, 2-membranda hərəkət edən ion, 3-dairəvi cərəyan, 4-toroidal maqnit sahəsi, 5- xarici elektromaqnit sahəsi

Neyromembrana perpendikulyar V sürəti ilə hərəkət edən 2 ionuna SMS-də F Lorens qüvvəsi təsir edir. Bu qüvvə membranın səthi boyunca yönəlmişdir və vektoru lifin oxuna perpendikulyardır. Bu qüvvə həm membranın lipid molekulları arasında diffuziya edən, həm də ion kanallarında hərəkət edən ionların hərəkət sürətinin tangensial toplanmasını yaradır. İonların tangensial hərəkəti sinir lifində 3 dairəvi cərəyan yaradır. Bu cərəyan təsir potensialının keçdiyi an maksimum qiymətə malik olur ki, məhz bu zaman ionların daşınması daha intensiv olur. 3 dairəvi cərəyan və onunla bağlı olan 4 torşəkilli maqnit sahəsi lif boyunca təsir potensialı ilə birlikdə hərəkət edirlər. Dairəvi cərəyanla bağlı olan maqnit sahəsinin xarakteristikası P_M maqnit momenti ola bilər. Kvant fizikasının ümumi müddəalarına əsasən, P_M maqnit momenti istiqamətcə xarici maqnit sahəsi ilə üst-üstə düşə bilməz [28].

Larmor teoreminə yğun olaraq P_M maqnit momenti xarici maqnit sahəsinin B_0 maqnit induksiya vektoru ətrafında ω larmor tezliyi ilə presessiya edəcəkdir. ω tezliyini aşağıdakı düsturla hesablamaq olar:

$$\omega = \frac{qB}{2m}. \quad (1)$$

Burada q - dairəvi cərəyan yaradan ionun yükü, m – onun kütləsidir. Qeyd etmək lazımdır ki, dairəvi cərəyanın ümumi maqnit momenti P_M müxtəlif növ ionların neyromembranlardan hərəkəti ilə təyin olunan maqnit momentlərinin vektor cəmindən ibarətdir. İonların hər bir növünə presessiyanın müəyyən larmor tezliyi uyğun gəlir. Aşağıdakı cədvəldə, xarici SMS-nin induksiyası $B_0=10$ mTl olduqda müxtəlif növ ionlar üçün $\nu = \omega/2\pi$ larmor tezliyinin hesablanmış qiymətləri verilmişdir.

Cədvəl 1.

	1	2	3	4	5	6
İon	Na^+	K^+	H^+	Cl^-	Ca^{++}	Mg^{++}
ν, Hz	3340	1970	76836	2195	3841	6403

$B_0=10\text{mTl}$ induksiyası, maqnit terapiyada tətbiq olunan qiymətlərin diapazonuna düşür. Əgər sinirlifini 5 elektromaqnit sahəsində yerləşdirsək onda xarici SMS ətrafında P_M maqnit momentinin presessiya tezliyi ilə elektromaqnit sahəsinin tezliyi üst-üstə düşdükdə paramaqnit rezonans yaranır. Rezonans tezliyi presessiyanın larmor tezliyinə uyğun gəlir və membrandan hərəkət edən ionun fərdi xarakteristikasıdır.

Orqandan dəyişən tezlikli dəyişən cərəyan buraxmaqla həmin orqanda elektromaqnit sahəsi yaratmaq olar. Dəyişən cərəyanın tezliyi ilə presessiyanın larmor tezliyi üst-üstə düşdükdə yaranmış rezonans elektromaqnit sahəsi enerjisinin orqan toxumaları tərəfindən udulmasının artmasına gətirib çıxarır və bunun da nəticəsində toxumaların impedansı artır. Bu verilmiş gərginlikdə larmor rezonans tezliyində dəyişən cərəyanın qiymətinin azalmasına səbəb olur.

Toxumalardan buraxılan cərəyanın kəskin azaldığı tezliyə görə membrandan hərəkət edən ionun növü barədə cərəyanın dəyişmə qiymətinə görə isə verilmiş ion nəqlinin normaya nəzərən intensivliyinin dəyişməsi haqqında mülahizə yürütmək olar.

İon paramaqnit rezonans və elektron paramaqnit rezonans hadisələri arasında formal oxşarlıq qeyd etmək olar [28].

Bioloji sistemlərdə, təcrübi olaraq Ca^{++} və Mg^{++} ionlarının maqnit rezonansı aşkar olunmuşdur.

Beləliklə təsvir olunan üsul hüceyrə membranından ion nəqlinin seçmə intensivliyinin diaqnostikasını aparmaq üçün qurğu yaratmağa imkan verir. Bu bir çox patalogiyaların həqiqi səbəblərini açmağa və onların müalicəsi üçün təsirli üsullar yaratmağa imkan verəcəkdir.

Bir çox patoloji proseslərin yaranma səbəbi hüceyrə membranlarından ionların daşınması prosesinin pozulmasıdır. Bu pozulmaların xarakteri müxtəlif ola bilər. Hər şeydən əvvəl, onlar membranın əngəl funksiyasının pisləşməsi ilə əlaqədardır ki, bu da hüceyrəyə artıq miqdarda ionların məsələn, natrium ionlarının daxil olmasına və ya hüceyrədən artıq miqdarda kalium ionlarının çıxmasına gətirib çıxarır. Nəticədə, membranın elektrokimyəvi potensialının azalması baş verir və hüceyrə öz funksiyasını yerinə yetirə bilmir. Məsələn, sinir hüceyrəsi təsir potensialını ötürmür, sekresiya hüceyrəsi orqanizmə lazım olan maddələri sintez edə bilmir.

Membranın keçiriciliyinin dəyişməsi həm də ion kanallarının və müxtəlif daşıyıcıların işinin pozulması ilə əlaqədar ola bilər. Bu hüceyrənin normal fəaliyyəti üçün lazım olan ionların axınlarının azalmasına gətirib çıxarır. Orqanizmdə ümumi metabolizm prosesi aşağı düşür. bütün bu hadisələr barədə ion paramaqnit rezonansının köməyi ilə əvvəlcədən məlumat almaq olar.

Beləliklə ion paramaqnit rezonans üsulu bir çox xəstəliklərin səbəblərini aşkar etmək üçün yeni imkanlar açır və yalnız xəstəliyin əlamətləri ilə əlaqədar olmayan daha dəqiq müalicə üsulu təyin etmək üçün şərait yaradır.

Bu üsulun tətbiqi üçün, konkret patalogiyalarla müxtəlif orqanların toxumalarında ion daşınmasının intensivliyi arasındakı əlaqənin aşkar olunması üzrə klinik tədqiqatlar davam etdirilməlidir.

ƏDƏBİYYAT

1. A.M. Paşayev, E.M. Qocayev, H. Orucov Ümumi fizika kursu, Bakı, 2012, 2-ci cild
2. Z.M.Zeynalov, N.İ.Quliyev Biofizika, Bakı, 2009
3. A.K.Seyidov, N.İ.Quliyev Biofizikadan praktiki məşğələlər, Bakı, 2008, 108 s.
4. N.İ.Quliyev, Y.B. Namazov, A.M.Orucov Bioloji sistemlər fizikası, Bakı, 2014, 197 s.

**PASSİV ELASTİKİ BORU MODELİNİN KÖMƏYİ İLƏ QAN
DAMARLARININ TƏXMINİ TƏSVİRİ**

N.İ. Quliyev¹, Y.B. Namazov¹, G.M. Vəliyeva²

1-Gəncə Dövlət Universiteti

2-Azərbaycan Dövlət Aqrar Universiteti

Məqalə iri damarlarda qan axınının izahı üçün biomexaniki modellərdən istifadəyə həsr edilmişdir. Göstərilmişdir ki, biomexaniki modellərin müəyyən məhdudiyyətləri olsa da onların köməyi ilə damarlarda yüksək tezlikli rəqslərin yaranması, nəbz dalğasının yayılması kimi fizioloji hadisələri izah etmək mümkündür. Passiv elastiki boru modelinin tətbiqi sayəsində elastiki boruda əlavə təzyiqdən asılı olmayan sürətlə yayılan dispersiya etməyən təklənmiş dalğa alınmışdır.

Mayenin nazik elastiki divarlı boruda hərəkəti maraqlı və kifayət qədər mürəkkəb fiziki məsələdir. Fransız alimi Puazeyldən başlayaraq bir çox tədqiqatçılar, xüsusilə də qan dövranının biomexanikası sahəsində, bu məsələyə dəfələrlə müraciət etmişlər [1,2]. Maraqlı nəticələr alınmışdır. Ən çox nailiyyətlər mayenin reoloji xassələrinin axının hidrodinamikasına təsirinin öyrənilməsi və müxtəlif elektrik analoqlarından istifadə ilə əlaqədardır. Bu elektrik analoqlarında axının və elastiki divarın xarakteristikaları elektrik parametrləri: potensiallar fərqi, tutum, induktivlik və s. ilə əvəz edilir. Hazırkı işdə diqqət mayenin elastiki boruda axını zamanı hidrodinamika tənliklərinin qeyri-xəttiliyinə yönəldilmişdir. İstifadə edilən passiv elastiki borunun real qan damarına yaxınlaşma dərəcəsinə baxılır. Qarşıya qoyulmuş məsələ ilə əlaqədar olaraq, tədqiq olunan hidrodinamiki modeldə sadələşmələrə yol verilmişdir. Birincisi ideal mayenin təxminiliyi qəbul edilmiş, ikincisi elastiki boru üçün ətalətsizlik nəzəriyyəsi istifadə edilmişdir.

Nazikdivarlı elastiki boruda maye axınına şərti olaraq üç nisbətən sərbəst hidrodinamik hadisəyə bölmək olar: maye həcmnin boruda daşınması, nəbz dalğasının yayılması və yüksək tezlikli rəqslərin yaranması. Hazırkı işdə bu hadisələrdən birincisinə baxılır.

Orqanizmin vena və arteriya qan damarlarında qan axınının nəzəri məsələlərinə həsr olunmuş tədqiqatlar uzun tarixə malikdir. Onlar əsasən iki istiqamətdə inkişaf edirlər: birinci və daha geniş fizioloji istiqamət, zəngin təcrübi materiallara söykənən problemin nəzəri dərk edilməsidir. [4] Digər daha dar biofiziki istiqamətdir ki, burada əsas məsələ damarlarda qan selinin təxmini hesablanmasıdır [3,4]. Bu iki istiqamət arasında dəqiq sərhəd yoxdur və bir çox tədqiqatçılar bu istiqamətlərin hər ikisindən eyni zamanda istifadə edirlər [1].

Canlı orqanizmdə damarlarda qanın hərəkəti hər şeydən əvvəl qan axınının tənzimlənməsi prosesləri ilə bağlı olan mürəkkəb hadisədir. Bu tənzimlənmə çox səviyyəli xarakter daşıyır: öz-özünə tənzimlənmə, neyroreflektor avtotənzimlənmə və s. Ona görə də qan damarının passiv elastiki boru kimi təsviri reallıqdan kifayət qədər uzaqdır.

Qan axınının ikinci mühüm xüsusiyyəti ondan ibarətdir ki, qan qeyri-Nyuton quruluşa malik, özülü-plastiki mayedir. İdeal mayələr üçün tənliklərdən istifadə də həmçinin yuxarıda qeyd edilən modelləşdirməni gerçəkliyə yaxınlaşdırma bilmir. Bunun da nəticəsində burada demək lazımdır ki, qanın iri damarlarda hərəkətinin təklif olunan biomexaniki modeli yalnız ürək-damar sistemində müşahidə edilən bəzi hadisələri təsvir edə bilər. Onlardan bəzilərinə baxaq.

Göstərilmişdir ki, passiv elastiki boruda axının avtorəqs rejimi müşahidə oluna bilər. Doğrudan da bir sıra şəraitlərdə canlı orqanizmin damarlarında oxşar hadisələr inkişafı 10 Hz-dək mümkündür. Məsələn, atın arteriyalarında nisbətən yüksək tezlikli rəqslər müşahidə olunmuşdur

ki, bu da nəbz dalğasına əlavə olunmuşdur. Oxşar hadisə qan axınının tənzimlənməsi mexanizminin pozulması zamanı itin də aortasında müşahidə edilmişdir. [5]. Lakin görünür ki, damarlarda axının avtorəqs rejiminin ən geniş yayılmış təzahürü Korotkov üsulu ilə arterial təzyiğin ölçülməsi zamanı arteryada yaranan yüksək tezlikli rəqslərdir. Korotkov yüksəkliklərinin (tonun) tezliyinin dəyişməsinin analizi, canlı orqanizmdə damarın divarının elastiklik modulunun dəyişməsinə qiymətləndirməyə imkan verir.

Hemodinamikada digər mühüm hadisə-nəbz dalğasının yaranmasıdır. Modelləşdirmənin nəticələri göstərir ki, bu hadisə bütövlükdə hidrodinamika tənliklərinin qeyri-xətti xarakteri ilə müəyyən edilir. Nəbz dalğasının təsviri zamanı əsas rolu hemodinamika tənliklərinin birinci tərtibayrılışı oynadığından sıfır tərtiblə əlaqəli olan “Bernulli effekti” damarlarda qanın nəbzi hərəkəti zamanı həlledici olmur. Damarlarda təzyiq, damarın en kəsiyinin sahəsi və qanın sürəti, ümumilikdə sinxron dəyişməsi məlum fizioloji qanunauyğunluqdur.

Qanın iri damarlarda axınının təsvir olunan biomexaniki modellərinin məhdudiyətlərinə baxmayaraq, onlar bəzi fizioloji hadisələri izah etməyə imkan verir: damarlarda yüksək tezlikli rəqslərin yaranması, hidrodinamika tənliklərinin qeyri-xətti xarakteri ilə bağlı olan nəbz dalğasının yayılması xüsusiyyətləri .

Elastiki boruda ideal maye axınının modelləşdirilməsi zamanı Eylerin şəkli dəyişdirilmiş tənliyindən istifadə etmək lazımdır.

Passiv elastiki borularda axının avtorəqs rejiminin mövcudluğu və bu zaman hidravlik müqavimətin artması protez damarlara əlavə tələblər qoyur. Bu protez damarlar kifayət qədər sərt materialdan hazırlanmalıdır. Axının avtorəqs rejiminin olmasına sübut müxtəlif akustik hadisələr: sınıltı, səs-küy və s. ola bilər.

Nazik divarlı elastiki boruların istifadə olunma biləcəyi qurğuların məsələn, biotexnologiyada döyünən nasosların, süni qan dövrəni aparatının quraşdırılması zamanı, seldə borunun tutulmasına gətirib çıxaran rezonans hadisəsini nəzərə almaq lazımdır. Bu zaman qurğunun işinin pozulmasına gətirib çıxara bilən qayıdan dalğalar da ola bilər.

Beləliklə, elastiki boruda təklənmiş dalğanın qeyri-xətti modelləşdirilməsi belə bir müddəanı sübut edir ki, qeyri-xətti proseslərin xüsusiyyəti modelin parametrlərinin çox kiçik kəmiyyət dəyişmələri zamanı yeni keyfiyyət əlamətlərinin yaranmasıdır. Bunun əyani sübutu, Korteveq və Friz modelinin köməyi ilə nəbz dalğasının modelləşdirilməsinin və qeyri-xətti Şredinger tənliyinin müqayisəsi ola bilər. Hük qanununun elastiki boru daxilində əlavə təzyiqlə borunun en kəsiyinin sahəsi arasındakı əlaqəni təsvir edən formasından istifadə, elastiki boruda əlavə təzyiqdən asılı lmayan sürətlə yayılan, dispersiya etmədən təklənmiş dalğanın alınmasına gətirib çıxardır.

ƏDƏBİYYAT

1. Zeinalov Z.M., Quliyev N.İ. Biofizika, Bakı, 2009, 242 s.
2. Каро К., Педли Т., Шротер Р., Сид У. Механика кровообращения. Пер. с. англ. М.: Мир, 1981, 624 с.
3. Педли Т., Гидродинамика крупных кровеносных сосисдов. Пер. с. англ. М.: Мир, 1983, 400 с.
4. Бранков Г. Основы биомеханики Пер. с. болг. М.: Мир 1981, 624 с.
5. Волобуев А.Н. Биофизика, М. 1999, 166 с.

**BİOLOJİ VƏ FİZİKİ SİSTEMLƏRİN TƏKAMÜLÜ NƏZƏRİYYƏLƏRİ ƏSASINDA
BİOLOJİ SİSTEMLƏRİN ENTROPIYASININ ÖYRƏNİLMƏSİ**

N.İ. Quliyev, R.M. İmanov, K.R. Həsənova

Gəncə Dövlət Universiteti

Bioloji sistemlərdə entropiyanın yaranması sürəti üçün alınmış tənlik əsasında bioloji sistemlərin ümumi xassələri analiz olunmuş və orqanizmlərin davranışı ilə klassik termodinamikanın 2-ci qanunu arasındakı ziddiyyət izah edilmişdir. Göstərilmişdir ki, bu ziddiyyət zahirən elə görünür. Əslində öz-özünə proseslərin istiqaməti açıq sistemlər üçün deyil, yalnız təcrid olunmuş sistemlər üçün entropiyanın artması ilə təyin edilir.

Fizikada öyrənilən hadisələrə iki cür yanaşma, onların tədqiqinin iki səviyyəsi mövcuddur. Birinci səviyyə hadisələrin təbiəti barədə daha ümumi qanunauyğunluqların öyrənilməsinə əsaslanan fenomenoloji səviyyədir. İkinci səviyyə - yekun nəticədə hadisənin elementar əsasını üzə çıxarmağa və onların kəmiyyət xarakteristikalarını təyin etməyə imkan verən atom molekul səviyyəsidir. Bu iki yanaşma bir-biri ilə heç cür ziddiyyət təşkil etmir. XIX əsrin başlanğıcında iki dahi təkamül nəzəriyyəsi yaradılmışdır - Darvinin bioloji təkamül nəzəriyyəsi və təcrid olunmuş fiziki sistemin təkamül nəzəriyyəsi. İkinci təkamül nəzəriyyəsi termodinamikanın ikinci qanununda formalaşdırılmışdır. Bu qanun S.Karno, R.Klauzius, L. Bolsman və C.Gibbs tərəfindən kəşf edilmiş və onların əsərlərində əsaslandırılmışdır. Elm tarixçiləri tərəfindən heç də həmişə nəzərə alınmayan bir məsələni qeyd edək. Nəticə etibarlı ilə təbiətşünaslığın bütün sahələri qarşılıqlı əlaqəlidirlər, bundan başqa bəşər mədəniyyəti bütöv şəkildə inkişaf edir. Təkamül haqqında məsələ təkcə bioloqlar qarşısında deyil, eləcə də fiziklər qarşısında deyil, eləcə də fiziklər qarşısında qalxmışdır. Termodinamikanın ikinci qanunu ilə əlaqədar tədqiqatlar məhz fiziki sistemin dönməyən təkamülünə həsr edilmişdir. Termodinamikanın ikinci qanununa uyğun olaraq, təcrid olunmuş fiziki sistem (yəni ətraf mühitlə nə enerji, nə də maddələr mübadiləsində olan) öz-özünə və dönməz olaraq tarazlıq vəziyyətinə can atır. Bu vəziyyətə maksimum qeyri-nizamlılıq və maksimum entropiya uyğun gəlir. Qeyri-nizamlılıq ölçüsü entropiyadır. Təcrid edilmiş fiziki sistem özünün ən ehtimalı, qeyri-nizamlı, maksimum entropiya halına doğru təkamül edir. Bioloji təkamül mürəkkəbliyin yəni nizamlılığın artması istiqamətində baş verir. Görəsən, bioloji və fiziki təkamüllər arasında ziddiyyət yoxdur ki? Ziddiyyət ilk baxışdan elə görünür. Canlı orqanizm açıq sistemdir və entropiyanın maksimum qanunu yalnız təcrid olunmuş sistemlər üçün doğrudur. Açıq sistemdə entropiya orta və sabit qala bilər. Lakin, belə sistemin daxilində istehsal olunan entropiyanın miqdarından, onun xaricdən daxilə və ya daxildən xaricə axınından asılı olaraq entropiya hətta azala bilər. Əgər biz canlı orqanizmin termodinamik balansını təyin etmək istəyiriksə, onda bu canlı sistemdən ibarət təcrid olunmuş sistemi və bu canlılığın qidalandığı maddəni, suyu və havanı öyrənməliyik. Əlbəttə termodinamikanın ikinci qanunu, canlı orqanizmdən ibarət təcrid olunmuş sistemdə də ödənilir. Bütövlükdə sistemin entropiyası artır, ona görə ki, kosmonavtın ayırdığı maddələrin entropiyası, onun qidalandığı maddələrin entropiyasından çoxdur. E.Şredingerin yazdığı kimi canlı orqanizm mənfi entropiya ilə qidalanır. Kosmonavt açıq sistemdir. Onun entropiyasının dəyişməsi iki hissədən ibarətdir - orqanizm daxilində baş verən proseslər nəticəsində istehsal olunan entropiyadan $d_i S$ və daxilə və ya xaricə entropiya axınından $d_e S$

$$dS = d_i S + d_e S \quad (1)$$

$d_i S$ kəmiyyəti müsbətdir, o kosmonavtı onu əhatə edən mühitdən təcrid etdikdə də saxlanılır. $d_e S$ – in işarəsi konkret vəziyyətdən asılıdır. Açıq sistemin entropiyasının dəyişməsinin məhz iki toplanana $d_e S$ və $d_i S$ bölünməsi, açıq və təcrid olunmuş sistemlərin xassələrindəki fərqi öyrənməyə imkan verir. (1) ifadəsini differensiallayaq:

$$dS/dT = d_e S/dt + d_i S/dt \quad (2)$$

Alınmış tənlik o deməkdir ki, sistemin entropiyasının dəyişməsi $d_e S/dt$ sistemlə ətraf mühit arasında entropiya mübadiləsinin sürəti ilə sistem daxilində entropiyanın yaranma sürətinin cəminə bərabərdir. Sistemin ətraf mühitlə mübadilə prosesini nəzərə alan $d_e S/dt$ toplananı həm müsbət, həm də mənfi ola bilər ki, bunun da nəticəsində sistemin ümumi entropiyası həm arta həm də azala bilər. Müsbət $d_e S/dt > 0$ kəmiyyəti, ətraf mühitlə enerji və maddələr mübadiləsi nəticəsində sistemin entropiyasının artması ilə əlaqədardır. Mənfi $d_e S/dt < 0$ kəmiyyəti ona uyğun gəlir ki, sistemdən ətraf mühitə müsbət entropiya axını, xaricdən sistemə müsbət entropiya axınından çox olur. Nəticədə sistemlə ətraf mühit arasında entropiya mübadiləsinin ümumi balans kəmiyyəti mənfi olur.

(2) tənliyi əsasında bioloji sistemlərin ümumi xassələrinin analizi orqanizmlərin davranışı ilə klassik termodinamikanın ikinci qanunu arasındakı zahiri ziddiyyəti izah etməyə kömək etdi. Doğrudan da, orqanizmlərin böyümə və inkişafı onların təşkilinin mürəkkəbləşməsi ilə müşayiət olunur və klasik termodinamika nöqtəyi-nəzərindən canlı sistemlərin entropiyasının öz-özünə azalması kimi görünür ki, bu da əlbətdə ki, ikinci qanunla açıq ziddiyyət təşkil edir. Lakin, bu ziddiyyət yalnız elə görünür belə ki, öz-özünə proseslərin istiqaməti bioloji sistemlərin aid olduğu açıq sistemlər üçün deyil, yalnız təcrid olunmuş sistemlər üçün entropiyanın artması ilə təyin edilir.

Ümumilikdə, canlı sistemlərin böyümə prosesində entropiyasının azalması, xaricdən daxil olan qida maddələrinin parçalanması zamanı ayrılan sərbəst enerji və ya günəş enerjisi hesabına baş verir. Bu eyni zamanda onların sərbəst enerjisinin artmasına gətirib çıxarır. Beləliklə, mənfi entropiya seli, müsbət entropiyanın yaranması prosesini kompensasiya etmək üçündür. Orqanizmlərin böyümə və inkişafının baş verməsini şərtləndirən məhz bu proseslər, canlı sistemlərin həyat fəaliyyəti və onların entropiyasının dəyişməsi arasındakı əlaqəyə baxan zaman böyük maraq kəsb edir. Orqanizmdə işçi proseslərin baş verməsi özü-özlüyündə həmçinin istiliyin ayrılması ilə müşayiət olunur. Lakin bu istilik aydındır ki, ümumi termogenezin yalnız bir hissəsini təşkil edir. Bundan başqa, nəzərə çarpacaq hallardan biri termodinamik bağlılığın olmasıdır. Bu bağlılıq bioloji quruluşlarda dönməyən işçi proseslərin gedişində ayrılan enerjinin bir hissəsinin ehtiyat şəklində toplanmasını təmin edir.

Beləliklə, orqanizmin bioloji quruluşlarında ehtiyat şəklində toplanmış enerjinin bir hissəsi entropiyanın azalmasına gətirib çıxarır və reaksiyaların bağlılıq dərəcəsi ilə təyin edilir. Bundan başqa, bioloji proseslərin mühüm xüsusiyyəti odur ki, reaksiyalarda iştirak edən maddələrin özləri nəzərə çarpacaq quruluş dəyişikliklərinə uğrayır. Bu dəyişikliklər hüceyrənin dinamik quruluşlarının fasiləsiz sintezi və parçalanmasını müşayiət edir. Bu isə məhz ona gətirib çıxara bilər ki, reaksiyada iştirak edən maddələrin özlərinin entropiyası reaksiyanın gedişində nəzərə çarpacaq dərəcədə dəyişə bilər. Beləliklə, bioloji sistemlərdə entropiyanın yaranmasının sürətinin sadə kalorimetrik təcrübələr əsasında təyin edilməsi cəhdi, bütöv orqanizmlərin termodinamik xassələrinin öyrənilməsi üçün birmənalı nəticələr verə bilməz.

ƏDƏBİYYAT

1. Z.Zeynalov, N.Quliyev Biofizika, Bakı 2009, 242 s.
2. Рубин А.Б Термодинамика биологических процессов М. из - во, МГУ 1979
3. Пригожин И. введение в термодинамику необратимых процессов, М.1961
4. Глансдорф П., Пригожин П., Термодинамическая теория структуры, стабильности и флуктуаций, М. Мир, 1973
5. Волькенштейн М.В., Наука и жизнь, М.1970, № 1.

**METİLKARBOMATLARDA HİDROGEN ƏLAQƏSİNİN İNFAQIRMIZI
SPEKTROSKOPIYA (İQS) ÜSULU İLƏ TƏDQIQI**

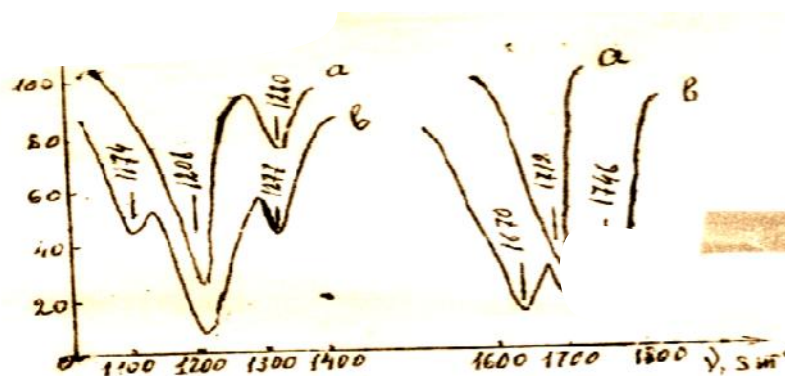
S.İ. Vəliyev, Z.M. Zeynalov, S.İ. Əliyev, S.X. Musayev. S.A. Abdiyeva

Gəncə Dövlət Universiteti

Metalikarbomatlarda (uretilanlarda) hydrogen əlaqəsinin öyrənilməsi müasir elmdə hydrogen əlaqəsinin öyrənilməsi müasir elmdə xüsusi əhəmiyyətə malik olan məsələlərdən birisidir. Matilkarbomatlar NH_2COOR -kimyəvi quruluşa malik olub, sərbəst halda olan karbamin NH_2COOR turşusunun efridir. Spirt, fenol və bir çox tibbi dərmanların alınmasında geniş istifadə olunur. Bundan başqa uretanların, yəni karbomatların törəməsi olan poliuretandan sənayedə polimerliflərin, penoplast, yapışqan və lakların, həmçinin kauçuk və çox davamlı rezinlərin istehsalında mühüm rol oynayır.

Təqdim etdiyimiz bu işdə metilkarbomatlarda (uretan) hydrogen əlaqəsinin yaranması və onun bəzi xüsusiyyətlərinin araşdırılmasına cəhd göstərilmişdir. Beləki, əvvəla uretan molekullarında bir neçə qrup var ki, onlar H-əlaqəsi yarada bilər. Ona görə də müxtəlif növ H-əlaqəsinin mövcud olması ehtimalı ortaya çıxır. İkincisi bu birləşmələrdəki, sis izomerlərinə hydrogen əlaqəsinin təsirini müəyyən etmək böyük əhəmiyyət kəsb edir. Nəhayət qeyd etmək lazımdır ki, poliuretan elamesterlərinin bir çox xassələri H-əlaqəsinin müxtəlif olmasından asılıdır.

Tədqiqat işinə N,N-dimetil və N-metil uretilanlarının $1800-1100\text{sm}^{-1}$ oblastında infraqırmızı spektrləri (İQ), İKS-14 və UR-10 spektrofotometrleri vastəsilə əldə edilmişdir. Göstərilən intervalda proton akseptoru rolunda olan qruplarla əlaqədə olan rəqslərin udma zolaqları yerləşir. Spektrlər alınarkən bu maddələrin CCL_4 və dixlarsirkə turşusunun məhlullarından istifadə olunmuşdur.



**BDU-nun Fizika Problemləri İnstitutunun yaradılmasının 10 illiyinə həsr olunmuş
Beynəlxalq konfrans**

a) Şəkildə dimetiluretilanın təmiz halda və onun həlledici məhlulundakı infraqırmızı spektri verilmişdir. Dimetiluretilan və CCl_4 qatışıqı, $C \sim 0,2 \frac{\text{mol}}{\text{l}}$

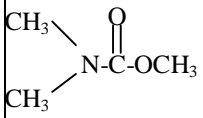
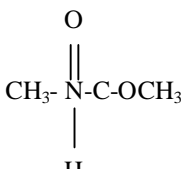
b) Dimetiluretilan və $\text{CHCl}_2 \text{COOH}$, $C \sim 0,2 \frac{\text{mol}}{\text{l}}$

Spektrlərdən görüldüyü kimi 1700 sm^{-1} və 1200 sm^{-1} oblastlarında dəyişikliklər meydana çıxır. 1700 sm^{-1} oblastında iki yeni udma zolaqları yaranır. Bunlardan 1746 sm^{-1} hidrogen ələqi olmayan $\text{C}=\text{O}$ turşu qruplarına və 1670 sm^{-1} isə hidrogen ələqi yarada bilən $\text{C}=\text{O}$ uretilan qurğularına uyğun gəlir.

Spektrin 1200 sm^{-1} oblastında yeni 1174 sm^{-1} udma zolağının yaranması və həmçinin 1208 sm^{-1} zolağının daha yüksək tezliklərə doğru sürüşməsi müşahidə olunur. Quruluş etibarlı ilə uretronlara oxşayan mürəkkəb efiirlərdəki $\text{C}-\text{O}-\text{C}$ valent rəqslərinin 1200 sm^{-1} oblastında yerləşməsi [1] və həmçinin $\text{C}=\text{O}$ deformasiya rəqslərinin spektrin 900 sm^{-1} oblastından aşağıda yerləşməsi onu sübut edir ki, $\text{C}-\text{O}-\text{C}$ valent rəqslərindəki dəyişiklərə səbəb H -ələqəsinin yaranmasıdır.

Azotla əvəz edilmiş (N-əvəz edilmiş) uretonlarda $\text{N}-\text{H}$ qrupları $\text{C}=\text{O}$ və $\text{C}-\text{O}-\text{C}$ ilə ələqəyə girərək molekullar arası H -ələqəsini yaradırlar. Bunun nəticəsində infraqırmızı spektrdə $\text{C}=\text{O}$ valent rəqsləri böyük tezliklərlə, $\text{N}=\text{H}$ deformasiya rəqsləri isə aşağı tezliklərə doğru sürüşürlər (cədvəl 1.) Spektirdəki bu cür dəyişikliklər bir qayda olaraq H - ələqəsinin $\text{N}-\text{H}$ və $\text{C}=\text{O}$ qruplarından ayrılması ilə izah edilir [2].

Cədvəl 1.

Kimyəvi birləşmələr	$\nu(\text{C}=\text{O}), \text{sm}^{-1}$				$\nu(\text{C}-\text{O}-\text{C}), \text{sm}^{-1}$			
	Təmiz halda	Həlledicidə	Sürüşmə $\Delta\nu, \text{sm}^{-1}$		Təmiz halda	Həlledicidə.	Kiçik tezliklərə doğru	Böyük tezliklərə doğru.
			Kiçik tezliklərə doğru.	Böyük tezliklərə doğru.				
<p><i>N,N</i> Dimetiluretan.</p> 	1712	1670 1746	42	34	1208	1174 1226	34	18
<p>N-metilureton</p> 	1720	1742		22	1266	1282		6 1

Tədqiqatlar nəticəsində H-əlaqəsinin yaranmasında protonun güclü və yaxud zəif donor olması və həmçinin protonun güclü və yaxud zəif akseptor olması mühüm əhəmiyyət kəsb edir. Beləki, dixlorsirkə turşusu CHCl_2COOH kimi güclü donorlarla alınan İQ spektrlərdə udma zolağının kiçik tezliklərə doğru sürüşməsi, metal spirit CH_3OH kimi zəif donora nisbətən daha güclü olur.

İQ-spektrlərin araşdırılması onu göstərdi ki, proton akseptoru yalnız alkoksil (sadə efirlər) qrupları ilə H-əlaqəsi yaratdıqda udma zolaqları həmişə kiçik tezliyə doğru yerini dəyişir. Buradan da belə nəticəyə gəlmək olar ki, uretanlarda H-əlaqəsi həm karbonit və həm də alkoksil qrupları ilə yarana bilər. Lakin proton donoru zəif olduqda (məsələn metil spirti) H-əlaqəsi yalnız karbonil qrupları ilə yaranır. Udma zolağının böyük tezliklərə doğru sürüşməsinə isə H-əlaqəsi yaranarkən karbonil qruplarına təsiri ilə elektron sıxlığının paylanması nəticəsində baş verdiyini qəbul etmək olar.

Nəticə olaraq aşağıdakıları söyləmək olar.

1. Metilkarbomatlarda aşağıdakılarda (uretilanlarda) $\text{C}=\text{O}\dots\text{H}-\text{N}$ tipli H-əlaqəsinin yaranması nəinki $\text{C}=\text{O}$ karbonil qruplarına, hətta alko0ksil $\text{C}-\text{O}-\text{C}$ qruplarının udma zolaqlarına təsir edir.

2. Uretilanlarda H-əlaqəsi yalnız dixlorsirkə turşusunda OH poton donoru qrupları olan molekullar ilə yarana bilər.

3. Azotla əvəz edilmiş (N-alkiləvəz edilmiş) uretilanlarda yalnız $\text{C}=\text{O}\dots\text{H}-\text{N}$ Tipli H-əlaqəsi yaranır.

ƏDƏBİYYAT

1. Белламил. Инфракрасные спектры сложных молекул. Москва, 1993.
2. Пиментал Д.И. Мак-Клеллан О. Водородная связь. Москва, 2004.
3. Гинзбург И.М. Оптика и спекроскопия. Сборник статей, 2001.

BƏZİ NEFT MƏHSULLARININ FİZİKİ XASSƏLƏRİNİN DİAQNOSTİKASI

Q.T. Həsənov, Ə.Ə. Əliyev, İ.C. İsmayılov, A.N. Cəfərova

Azərbaycan Dövlət Neft və Sənaye Universiteti

aymin@mail.ru

Təqdim olunan bu işdə neft məhsullarından olan ağ neft, dizel yağı və qazolin nümunələrində səpilmə nəticəsində işıq şüasının intensivliyinin dəyişməsinin temperatur və dalğa uzunluğundan asılılığı və həmçinin onların kinematik və dinamik əmsalların, sıxlığın temperaturdan asılılığına baxılmışdır. Işıq şüasının intensivliyinin temperaturdan asılı olaraq dəyişməsi ağ neft nümunəsində Reley səpilməsinə, dizel yağı və qazolin nümunəsində isə dipol səpilməsinə uyğun gəlir.

Son illərdə neft və neft məhsullarının nəqli ilə əlaqədar onların fiziki xassələrinin öyrənilməsi sahəsində bir çox nəzəri [1,2] və təcrübi işlər görülmüşdür [3]. Təqdim olunan bu məqalədə neft məhsullarından olan dizel yağı, ağ neft və qazolinin istilik fiziki və optik xassələrinin diaqnostikasına baxılmışdır.

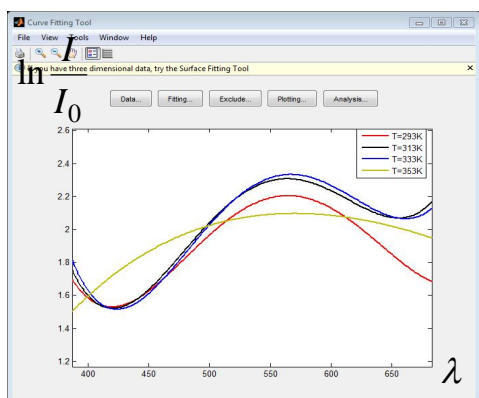
Nümunələrin optik xassələrindən olan işıq şüasının səpilmə nəticəsində intensivliyinin müxtəlif temperatur üçün dalğa uzunluğundan asılı olaraq dəyişməsi fotoelektrokəlimetr vasitəsilə yerinə yetirilmişdir. Tədqiq olunan nümunələrin kinematik və dinamik özlülük

**BDU-nun Fizika Problemləri İnstitutunun yaradılmasının 10 illiyinə həsr olunmuş
Beynəlxalq konfrans**

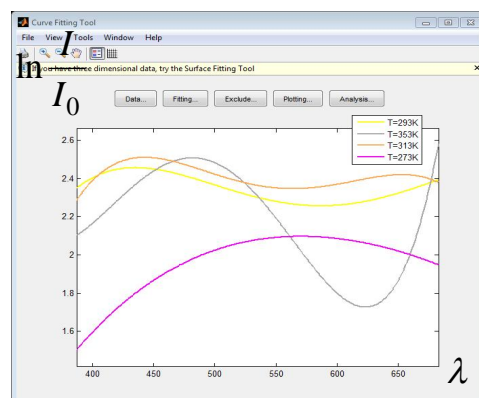
əmsallarının və sıxlıqlarının temperaturdan asılılığı isə diametrinin ölçüsü 0,56 mm olan viskozimetr vasitəsilə yerinə yetirilmişdir. Dizel yağı, qazolin və ağ neft nümunələrində işıq şüasının udulması nəticəsində intensivliyinin müxtəlif temperaturlar üçün dalğa uzunluğundan asılı olaraq dəyişməsi qrafikləri uyğun olaraq şəkil 1, 2 və 3-də verilmişdir. Müəyyən olunmuşdur ki, tədqiq olunan nümunələrin intensivliyinin $\left(\ln \frac{I}{I_0}\right)$ müxtəlif temperatur üçün dalğa uzunluqlarından dəyişməsi eyni bir qanuna uyğunluğa malik olub aşağıdakı empirik düsturla ifadə olunurlar:

$$\left(\ln \frac{I}{I_0}\right)_\lambda = \sum_{i=0}^n a_i \lambda^i$$

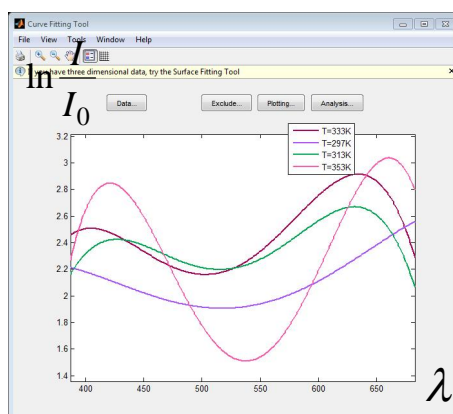
Burada, a_i -əmsalları Matlab proqramında ən kiçik kvadratlar üsulu ilə hesablanmışdır. Hesablamalar göstərir ki, tələb olunan xəta daxilində dizel yağı, qazolin və ağ neft üçün aproksimasiya edici çoxhədlinin dərəcəsi $n=4$.



Şəkil 1. Dizel yağı nümunəsində işıq intensivliyinin $\left(\ln \frac{I}{I_0}\right)$ müxtəlif temperaturda dalğa uzunluğundan (λ) asılılığı.



Şəkil 2. Qazolin nümunəsində işıq intensivliyinin $\left(\ln \frac{I}{I_0}\right)$ müxtəlif temperaturda dalğa uzunluğundan (λ) asılılığı.



Şəkil 3. Ağ neft nümunəsində işıq intensivliyinin $\left(\ln \frac{I}{I_0}\right)$ müxtəlif temperaturda dalğa uzunluğundan (λ) asılılığı.

Şəkil 1-dən görüldüyü kimi dizel yağında işıq şüasının səpilməsi nəticəsində intensivliyin dalğa uzunluğundan asılı olaraq müxtəlif temperaturda dəyişməsi eyni xarakterlidir. Ağ neft və qazolin nümunələrində də işıq şüası intensivliyinin dalğa uzunluğundan asılı olaraq müxtəlif temperatur üçün dəyişməsi dizel yağı nümunəsindəki kimi olub eyni xarakterə malikdirlər.

İşdə ən maraqlı cəhət nümunələrdən səpilən işıq şüasının intensivliyinin dəyişməsinin temperatur asılılıqları olmuşdur. Dizel yağı və qazolin nümunələrindən səpilən işıq şüasının intensivliyinin temperaturdan asılı olaraq dəyişməsi eyni xarakterli olub, əvvəlcə temperaturun artması ilə o da artır, temperaturun sonrakı artımında isə intensivlik yenidən azalmağa başlayır. Lakin ağ neft nümunəsindəki bu asılılıq qrafiki tamamilə başqa cür dəyişir. Beləki ağ neft nümunəsində səpilmə nəticəsində işıq şüası intensivliyinin dəyişməsi temperaturun artması ilə o əvvəlcə azalır, temperaturun sonrakı artımında isə o kəskin olaraq artmağa başlayır. Beləliklə, bu araşdırmalardan belə güman etmək olarki, ağ neft nümunəsində səpilmə intensivliyinin dəyişməsi Reley səpilməsinə uyğun gəlicə, dizel və qazolin nümunələrindəki bu dəyişmə çox güman ki, dipol səpilməsinin nəticəsi kimi izah etmək olar.

Neft məhsullarından olan dizel yağı, ağ neft və qazolin üçün işığın intensivliyinin temperaturdan asılılığını çoxhədli şəkildə yazmaq olar:

$$\left(\ln \frac{I}{I_0} \right)_\lambda = \sum_{i=0}^n b_i T^i .$$

Burada, b_i -əmsallarında Matlab paketindən istifadə olunaraq təyin olunur və nümunələrin tələb olunan xəta daxilində ağ neft və qazolin üçün aproksimasiya edici çoxhədlinin dərəcəsi $n=3$, dizel yağı üçün isə $n=2$.

Tədqiq olunan nümunələrin udma əmsalının diaqnostikası üçün qəbul olunur ki, udulma Buqer qanununa uyğundur və qərarlaşmış temperatur sahəsi üçün ətraf mühitlə temperatur mübadiləsi olmayan hallarda istilikkeçirmə tənliyi aşağıdakı kimi olur:

$$c\rho v \frac{dT}{dx} = \alpha(x) I_0 \exp\left[-\int \alpha(x) dx\right] \quad (1)$$

Udulma əmsalının $\alpha(x) = \alpha_0(1 + \beta x)$ qanunu üzrə dəyişməsinə nəzərə alaraq (1) həllindən onun dəyişmə tempini xarakterizə edən β əmsalını tapırıq:

$$\beta = \frac{2}{x} \left[\frac{1}{\alpha_0 x} \ln \frac{I_0}{c\rho v \Delta T} - 1 \right]$$

Düsturdan görüldüyü kimi udma əmsalının dəyişmə tempini xarakterizə edən β əmsalı nöqtədən nöqtəyə dəyişir.

ƏDƏBİYYAT

1. H.Q. Həsənov, Ə.Əliyev. Температурное поле жидкости по сечению цилиндрической трубы под действием лазерного излучения. Az.TU. Elmi əsərlər. Fundamental elmlər, №3, cild XII (45), 2002, s. 73-79
2. Ə.Ə. Əliyev. Neftin istilik tutumunun və sıxlığının təyini. Az.TU. Elmi əsərlər. Fundamental elmlər, №2, cild IX (34), 2010, s. 12 -13
3. Q.T. Həsənov, Ə.Əliyev, A.N Cəfərova. Bəzi neft məhsullarının optik xassələrinin tədqiqi. Fizikanın müasir problemləri institutu, VIII Respublika konfransının materialları. BDU. 2014. s. 71

MAYELƏRDƏ OPTOAKUSTİK DALĞALARIN
YARANMASI VƏ YAYILMASININ TƏDQIQI

Q.T. Həsənov, M.A. Musayev, A.N. Cəfərova, N.N. Həşimova

Azərbaycan Dövlət Neft və Sənaye Universiteti

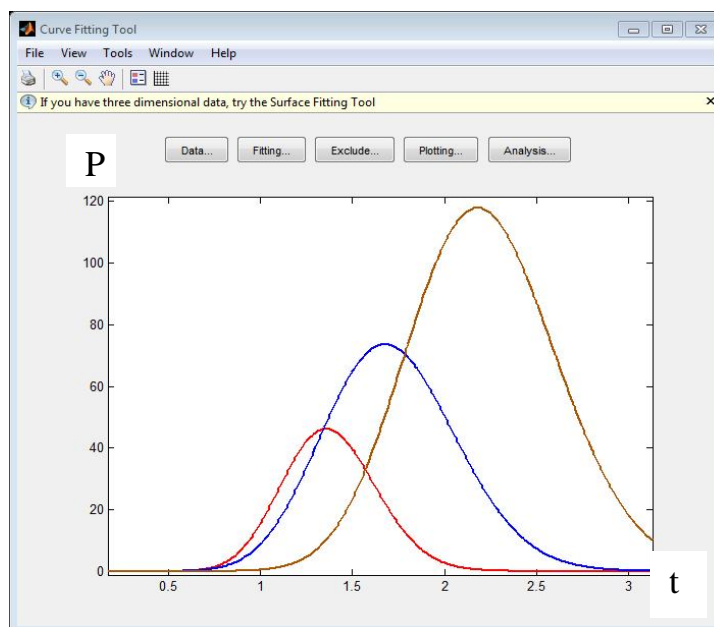
aymin@mail.ru

Təqdim olunan məruzədə optoakustik dalğaların müxtəlif neft nümunələrində yayılması təcrübi tədqiq olunmuşdur. Mayenin istilik fiziki və akustik xassələri ilə dalğanın periodu arasında əlaqə yaradılmışdır.

Optoakustika elektromaqnit dalğalarının mayelərdə qarşılıqlı təsiri zamanı səs dalğalarının yaranması prosesidir. Elektromaqnit dalğalarının mayelərə qarşılıqlı təsiri zamanı səs dalğalarının yaranma mexanizmi müxtəlifdir. Elektromaqnit dalğalarının udma əmsalı böyük olan mayelərdə səs dalğaları istilik effekti hesabına yaranır. Lazer şüalarının maye daxilində qısa məsafədə tam udulması həmin məsafədə mayenin güclü qızmasına və nəticədə mühitdə mexaniki gərginliyin yaranmasına səbəb olur. Bu gərginlik isə öz növbəsində akustik dalğa mənbəyinə çevrilir.

Optoakustik dalğaların mayelərdə yaranması və yayılması nəzəri olaraq [1] araşdırılmış, müxtəlif neft məhsullarında təcrübi tədqiqi isə [2] aparılmışdır. Təcrübələr nəticəsində udma əmsalının mayenin qalınlığından asılılığı müəyyən olmuşdur.

Təqdim olunan məruzədə optoakustik dalğaların müxtəlif neft nümunələrində (udma əmsalı müxtəlif olan nümunələrdə) yayılması təcrübi tədqiq olunmuşdur. Mayenin fiziki xassələri haqqında həqiqi məlumatı təhrif olunmamış dalğa cəbhəsi özü ilə apardığından hesablamalar dalğa cəbhəsinə nəzərən aparılır. Müxtəlif neft nümunələri üçün dalğa cəbhəsinin forması aşağıdakı şəkil 1-də göstərilmişdir.



Şəkil 1. Akustik dalğa cəbhəsinin zamandan asılılığı

Təcrübələr aparılmış qurğunun prinsiplial sxemi və iş prinsipi [2] verilmişdir. Şəkildəki ayrıları

$$P(t) = At^n \exp(-Bt^2) \quad (1)$$

düsturu ilə ifadə etmək olar. Bu düsturdakı A, B və n sabit kəmiyyətlərdir və onların qiyməti təcrübi ölçmələrin əsasında təyin olunur.

Şəkildən istifadə edərək dalğa amplitudunun maksimumuna uyğun gələn zaman ($t_{\max} = \frac{T}{4}$, T-dalğanın periodudur) ilə mayenin udma əmsalını xarakterizə edək. B sabiti arasında əlaqə yazmaq olar. Əyrinin maksimum şərtindən istifadə edərək alarıq

$$\frac{T^2 \alpha}{n} = 8 \quad \text{yaxud} \quad \frac{T^2 \alpha}{n} = \text{const} \quad (2)$$

Bu düsturda T-optoakustik dalğanı, α və n isə mayenin istilik fiziki və akustik xassələrini xarakterizə edən parametrlərdir. Başqa sözlə (2) düsturu mayenin istilik fiziki və akustik xassələri ilə dalğanın periodu arasında əlaqə yaradır.

Təcrübi nəticələrin (1) düsturuna əsasən A, α, n, t_{\max} parametrlərinin müxtəlif neft nümunələri üçün tapılan qiymətləri aşağıdakı cədvəl 1-də verilmişdir.

Cədvəl 1

	3	1	1
	,86	,93	,54
	1	1	1
	4,2	0,87	4,59
	7	6	2
	39,5	1,16	,02
	1	1	2
	,35	,68	,78

İstilik keçirən özlü mühitdə optoakustik dalğaların yaranma və yayılması tənliyi aşağıdakı kimi yazıla bilər [1]:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} - C_0^2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} - \frac{1}{\rho} \left(\xi + \frac{4}{3} \eta \right) \frac{\partial^3 \varphi}{\partial t \partial z^2} = - \frac{\alpha C_0^2 \beta}{\rho_0 C_p} I_0 \exp^{-\alpha t} f(t) \quad (3)$$

Burada φ -sürətlər sahəsinin skalyar potensialıdır, $v = -grad\varphi$, I_0 -ışığın intensivliyi, $f(t)$ -ölçüsüz funksiya olub, intensivliyin zamandan asılılığını xarakterizə edir, β -həcmi genişlənmə əmsalı, C_p -sabit təzyiqdə istilik tutumu, ρ_0 -mayenin tarazılıq vəziyyətindəki sıxlığı, C_0 -akustik dalğanın mühitdə adiabatik yayılma sürəti, α -ışığın udulma əmsalı, ξ və η mayenin həcmi və sürüşmə özlülük əmsalıdır. Zamana görə Laplas çevrilməsi tətbiq edərək (3) tənliyi üçün tərs məsələ həll edib ışığın udulma əmsalı təyin edilir. (3) tənliyinin həllinə əsasən mayenin iatilik fiziki və optik parametrləri arasında əlaqə yaradılır.

ƏDƏBİYYAT

1. В.Э. Гусев, А.А. Карабутов. Лазерная оптоакустика. М. Наука, 1994, s. 304

**BDU-nun Fizika Problemləri İnstitutunun yaradılmasının 10 illiyinə həsr olunmuş
Beynəlxalq konfrans**

2. Г.Т. Гасанов, М.А. Мусаев и др. Оптоакустические исследования масляных эмульсий. Нефть и газ. №8,1991

ДИССОЦИАЦИЯ НУКЛОННЫХ АССОЦИАЦИЙ ПРИ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЯХ

И.К. Эфендиева

Азербайджанский Государственный Университет Нефти и Промышленности

irada.e@mail.ru

Исследуется сечение диссоциационных процессов с ассоциациями с точки зрения s и t канальной унитарности. Получено уравнение для матрицы амплитуды рассеяния и выписаны формулы для сечений диссоциации ассоциаций. Обсуждается зависимость сечения от радиуса взаимодействия.

В теории диссоциации реакция рассматривается как квантово-механический процесс, обусловленный тем, что разные компоненты волновой функции налетающего адрона имеют разную вероятность взаимодействия с ассоциациями в ядре [1]. В результате волновая функция искажается. Если разложить ее по полному набору функций, после соударения она содержит не только начальную функцию адрона и другие состояния, на которые диссоциирует падающая частица. Для этого надо использовать «точечную» компоненту волновой функции налетающего адрона.

В данной работе обсуждается амплитуда упругого рассеяния для области больших прицельных параметров b .

Предполагается, что, пренебрегается внутренняя структура ассоциации, то есть ассоциация ведет себя как единое бесструктурное целое, а не как комбинация индивидуальных нуклонов [2].

Выберем нуклон-нуклонное взаимодействие в виде потенциала Гаусса:

$$V(s, r) = is \left(\frac{\pi}{a} \right)^{3/2} \exp(-r^2 / 4a), \quad (1)$$

соответствующего чисто мнимой амплитуде дифракционного рассеяния. В (1) параметр a характеризует эффективный радиус взаимодействия, который зависит от энергии. С увеличением энергии параметр a возрастает логарифмически: $a = a_0 + \ln s$.

В представлении инвариантных переменных (переменные Мандельстама) стандартная связь амплитуды рассеяния f с дифференциальным сечением упругого рассеяния имеет вид

$$\frac{d\sigma_{el}(s, t)}{dt} = |F(s, t)|^2, \quad s = 4(k^2 + m^2) = 4E^2, \quad t = -(\mathbf{p} - \mathbf{k})^2. \quad (2)$$

Для амплитуды рассеяния с выбиванием ассоциаций, при высоких энергиях очень удобно переходит от разложения по парциальным волнам к представлению прицельного параметра b :

$$f(s, b) = i \int b db (1 - \exp[i\chi(s, b)]) J_0(b\sqrt{s}). \quad (3)$$

где, эйконал $\chi(s, b)$ имеет следующий вид [2]:

$$\chi(s, b) = i \left(\exp(-\mu \sqrt{b^2 + a^2}) - \exp(-2\mu \sqrt{b^2 + a^2}) \right), \quad (4)$$

здесь параметры μ_0 и a_0 имеют смысл приведенной массы и радиуса взаимодействия:

$$\mu = \mu_0 / \sqrt{1 + \ln s - i\pi/2}; \quad a = a_0 / \sqrt{1 - \ln s - i\pi/2}. \quad (5)$$

В эйкональном приближении не накладываются никаких ограничений на массы и координаты частиц. В этом приближении и конечный радиус, и отдача считаются точно. Кроме того, в эйкональном приближении влияние искажений учитывается только в фазе плоской волны.

При высоких энергиях условие унитарности имеет вид

$$2 \operatorname{Im} f(s, b) = |f(s, b)|^2 + A_{in}(s, b). \quad (6)$$

Здесь $A_{in}(s, b)$ - вклад неупругих каналов, т.е. вероятность неупругого взаимодействия адрона с ассоциацией в точке b .

Полное сечение столкновения и сечение неупругого рассеяния ассоциации определяются следующим образом

$$\sigma_{tot} = 4\pi \int \operatorname{Im} f(s, b) b db, \quad \sigma_{in} = 2\pi \int A_{in}(s, b) b db. \quad (7)$$

Надо отметить, что расстояние, на котором вероятность соударения еще не мала, увеличивается с ростом по закону

$$r(\ln s) = a \ln s + d - c \ln s, \quad (8)$$

где a, d, c – константы. Сечение с амплитудой $f(s, b)$ и с радиусом (8) представляет собой диск радиуса $r \propto \ln s$. Внутри диска ($b < r$) вероятность соударения $\operatorname{Im} f \rightarrow 1$, а на периферии диска ($b > r$) – уменьшается, как $f \propto \exp(-2m_\pi(b - r))$. Такое поведение обеспечивает правильное положение ближайшей особенности t -канала - $t = 4m_\pi^2$.

Мы рассматривали эйкональное приближение в рамках так называемой s -канальной картины рассеяния, в которой обращение к геометрическим размерам эффективной области взаимодействия адрона и ассоциации и степени их непрозрачности кажется вполне естественным. В такой картине дифракция генерируется поглощением волн адронной материи рассеивателем, геометрическими размерами которого и определяется структура дифференциального сечения по t .

ЛИТЕРАТУРА

1. В.Н. Грибов // ЯФ.1996, Т.8, 1002 с.
2. S.G. Abdulvahabova, R.A. Ahmedov, I.K. Afandiyeva. *Association in the two-Nucleon transfer reactions*. Journal of Physical Science and Application. (US), 2015, V 5, N.2, p 158-162.

**MÜHİTDƏ NaCl-un MÜXTƏLİF QATILLIQLARI VƏ XRONİKİ OZONLAŞMA
ŞƏRAİTİNDƏ BECƏRİLMİŞ MİKROYOSUNLARIN BİOMƏHSULDARLIĞI VƏ
FOTOSİNTETİK AKTİVLİYİ**

M.N. Nəcəfli, R.Ə. Musayev

Bakı Dövlət Universiteti

Məlumdur ki, ozonun canlı orqanizmlərə təsiri, onun dozəsindən asılıdır. Belə ki, kiçik və orta dozalarda ozon hüceyrələrin antioksidant komponentləri tərəfindən udulur və müxtəlif məhsulların (ozonidlərin, peoksidlərin) əmələ gəlməsinə səbəb olur [1, 2]. Ozonun yüksək dozaları, antioksidant sistemlərin udma qabiliyyətinin yetmədiyi hallarda, hüceyrələrdə bir çox zədələnmələrə səbəb olur. Nəticədə ozon mikroyosunların bioməhsuldarlığına və fotosintetik aktivliyinə ciddi təsir göstərir [3, 4].

Təqdim olunan işin məqsədi duzluluğun dəyişməsi və xroniki ozonlaşma rejimlərində intensiv becərilmiş mikroyosunların bioməhsuldarlığının və fotosintetik aktivliyinin tədqiqidir.

Tədqiqat obyektini kimi mikroyosunlardan (dəniz halofiti) istifadə edilmişdir. Mikroyosun hüceyrələrini çoxaltmaq üçün tərkibində NaCl-un üç müxtəlif qatılığı olan (0,5M; 0,75 M; 1,0M NaCl) süni qidalı mühitdən istifadə olunmuşdur. Hazırlanmış qidalı mühitlərdə hüceyrələr daimi işıqlanma (16vt/m^2), 27°C temperaturda, tərkibində 2,0% CO_2 olan hava qarışığı verilməklə 250 ml-lik fotoreaktorlarda intensiv becərilmişdir. Tədqiqatda ozonun 5, 10 və 15 dəq/saat xroniki dozalarından istifadə olunmuşdur. Fotoreaktorlara ozon saat mexanizmlə xüsusi qurğunun köməyiylə, ozonatır vasitəsilə verilmişdir.

Mikroyosunların gündəlik çoxalması KFK-2 tipli fotokalorimetrdə optiki sıxlığı ölçməklə təyin edilmişdir. Fotosintetik aktivliyi tədqiq etmək üçün sıxlığı $d=0,8 \text{q/sm}^3$ olan hüceyrə suspenziyaları hazırlanmış və termostatda 27°C temperatur şəraitində saxlanmışdır. 50 ml-oz. hüceyrə suspenziya nümunələrinin fotosintetik aktivliyi polyaroqrafik qurğuda ölçülmüş və nümunə ilə müqayisə edilmişdir.

Alınmış nəticələrin analizi göstərir ki, müxtəlif xroniki ozonlaşma rejimində becərilmiş mikroyosunların qidalı mühitdəki NaCl-un qatılığından asılı olaraq yaşama qabiliyyəti və bioməhsuldarlığı fərqli göstəricilərə malikdir.

Alınmış nəticələrə görə 0,5M NaCl tərkibli qidalı mühitdə becərilmiş hüceyrələr ozonun müxtəlif xroniki dozalarına qarşı daha həssas olub, 15 dəq./saat xroniki dozada, nümunə ilə müqayisədə 64% yaşama qabiliyyətinə malikdir. Qidalı mühitdə NaCl-un qatılığı artdıqca mikroyosunların xroniki ozonlaşma dozalarına qarşı davamlılığı artır. 0,75M NaCl qatılıqlı qidalı mühitdə becərilmiş hüceyrələrin 15 dəq/saat xroniki ozonlaşma şəraitində yaşama qabiliyyəti kontrollu müqayisədə 81%, 1,0M NaCl qidalı mühitində becərilmiş hüceyrələrdə isə uyğun olaraq 89,5% təşkil etmişdir.

Müxtəlif NaCl qatılıqlı qidalı mühitlərdə və xroniki ozonlaşma şəraitində becərilmiş mikroyosunların fotosintetik aktivliyinin göstəriciləri cədvəl 1-də verilmişdir.

Cədvəl 1

Qidalı mühitdə NaCl-un qatılığı	Hüceyrələrin fotosintetik aktivliyi (nümunə ilə müqayisədə, faizlə)			
	nümunə	5 dəq/saat xroniki ozonlaşma	10 dəq/saat xroniki ozonlaşma	15 dəq/saat xroniki ozonlaşma
0,5 M	100	87,5	82,6	80,7
0,75 M	100	95	92,8	89,7
1,0 M	100	84	79,3	76,5

Cədvəldən göründüyü kimi xroniki ozonlaşmanın dozası artdıqca mikroyosunların fotosintetik aktivliyi azalır. 0,75 M NaCl tərkibli qidalı mühitdə intensiv becərilən hüceyrələrin, müxtəlif xroniki ozonlaşma dozalarından asılı olaraq, fotosintetik aktivliyə daha yüksək olmuşdur.

ƏDƏBİYYAT

1. Наджафли М.Г. Влияние солености среды на рост, пигментный состав и функциональную активность клеток *Dunaliella salina*. Экология в тьяррцфаты журналы, №5, декабр, 2011-ъи ил. сящ.18-22.
2. Ali-zadeh G., Abdullayev X., Nadjafov M. *Dunaliella salina* IPPAS D-295 as a New Hiperproductive, Multibranch Photobiotexnological Producer/ XI Kükem-Biotexnoloji kongresi, Türkiye, 1999, p.273-278.
3. Щяъяфли М.Щ., Мьяррямова Х.Х., Ялийева Ф.К., Ялийев И.И. Нефт в я нефт мяцсулларынын термофил А-ы эюй-йашыл йосунларын чохапмасына в я фотосинтетик активлийиня тьясири. Экология в я су тьяррцфаты журналы, №4 октябрь, 2011-ъи ил. сящ. 29-32.
4. Карнухов В.Н. Функции каротиноидов- объект биофизических исследований. Биофизика, 2000, том 45, вып-1, стр.364-384.

MAYE FORMIATLARIN DİNAMİK ÖZLÜLÜYÜ İLƏ SIXLIĞI ARASINDA ƏLAQƏ

H.A. Aslanov, Ş.X. Xəlilov, A.B. İbrahimli, N.V. İbrahimli

Azərbaycan Dövlət Pedaqoji Universiteti

Aygunibrahimli@yahoo.com

Maye formiatların dinamik özlülüyü ilə sıxlığı arasında asılılıq müəyyən edilmişdir. Bu asılılığa əsasən empirik tənlik tərtib olunmuşdur. Onun vasitəsilə maye formiatların dinamik özlülük əmsalını 2% xəta ilə hesablamaq olur.

Açar sözlər: *dinamik özlülük, sıxlıq, formiat, temperatur, təzyiq, maye, buxar.*

Təqdim edilən elmi işdə maye formatların bizim tərəfimizdən təcrübi olaraq tədqiq edilən dinamik özlülüklərinin nəticələri [1-2] onların sıxlığından asılılığı araşdırılmış və həmin mayelərin dinamik özlülüyünü hesablamağa imkan verən tənliklər müəyyən edilmişdir.

Mayelərin özlülüyünün sıxlığından asılılığı aşağıdakı şəkildə bir çox tədqiqatçılar tərəfindən [2-5] araşdırılmışdır:

$$\Delta\eta = \eta_{P,T} - \eta_T = f(\rho) \quad (1)$$

(1) ifadəsindəki $\eta_{P,T}$ - mayenin P təzyiqində və T- temperaturundakı dinamik özlülüyünü; η_T - mayenin buxarının T- temperaturundakı dinamik özlülüyü, ρ - isə mayenin P-təzyiqində və T- temperaturundakı sıxlığıdır.

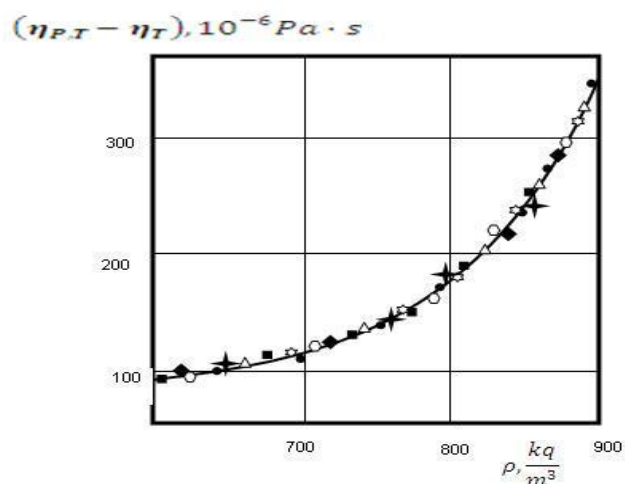
Formiatların dinamik özlülük əmsalının sıxlıqlarından asılılığı bizim tərəfimizdən (1) tənliyinə əsasən tədqiq edilmişdir. Təcrübi nəticələrin $\Delta\eta - \rho$ kordinatlarında araşdırılması göstərdi ki, formiatların dinamik özlülük əmsalı onların sıxlığından asılılığı kənarçıxmaları

nəzərə almasaq birqiyətli olaraq təyin edilə bilər. Aparılan araşdırmanın nəticələri formiatlar üçünsə şəkil 1-2-də verilmişdir.

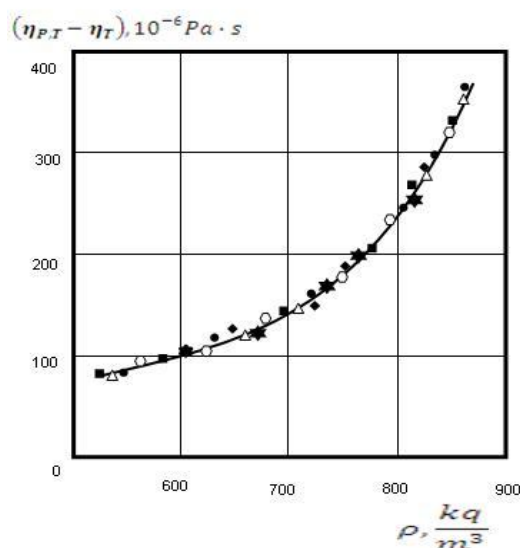
Şəkil 1-2-dən göründüyü kimi izotermələr üzrə $\Delta\eta$ - ρ asılılığının əyrisindəki xətalərin $\pm 2\%$ olduğunu nəzərə alsaq (1) tənliyi formiatlar üçün:

$$\Delta\eta = \sum_{i=0}^2 \alpha_i \rho^i \quad (2)$$

tənliyi kimi alınır. (2) tənliklərindəki α_i -lərin qiymətləri müvafiq olaraq 1 cədvəlinə verilmişdir.



Şəkil.1. Etilformiatın dinamik özlülüyünün ($\Delta\eta = \eta_{P,T} - \eta_T$), izotermələr üzrə sıxlığından (ρ) asılılığı



Şəkil.1. Propillformiatın dinamik özlülüyünün ($\Delta\eta = \eta_{P,T} - \eta_T$), izotermələr üzrə sıxlığından (ρ) asılılığı

Formiatlar üçün (2) tənliyindəki a_i –lərin qiymətləri

Formiatlar	a_0	a_1	a_2
Etil formiat	1331,8807	-3,9318	0,003128
Propil formiat	1211,72	-3,8474	0,003301
Amil formiat	-796,31	0,4219	0,001235
Heksil formiat	-3123,49	6,9046	-0,0013
Heptil formiat	-1948,01	23,5436	-0,01443
Oktil formiat	-1948,01	4,2529	-0,001596

(2) tənliyi vasitəsilə müvafiq olaraq formiatların dinamik özlülük əmsalı $\pm 2\%$ xəta ilə hesablanmışdır.

ƏDƏBİYYAT

1. Асланов Г.А. Исследование P-V-T зависимости и динамической вязкости формиатов в широком интервале параметров состояния, Автореф. дисс. канд. тех. наук, Баку, 1981.
2. Филиппов Л.П.-О кинетических свойствах газов и жидкостей.- В кн. Физика и физико- химия жидкостей. М., Изд-во МГУ, 1976, с.23-34.
3. Люстерник В.Ю. Обобщение опытных данных по вязкости водорода в широкой области температур и давлений. В кн. Теплофизические свойства газов. М, Наука, 1970, с. 46-50.
4. Алтунин В.В. Теплофизические свойства двуокиси углеводорода. М, 1975.с.551
5. Геллер В.З., Крон Берг А.В. О связи вязкости с термическими свойствами. Инженерно-физический журнал, 1973, т.225, №5,с.837-841

ENDOMORFIN 1 MOLEKULUNUN FƏZA QURULUŞU

N.F. Əhmədov^{*}, L.N. Ağayeva^{*}, S.R. Əhmədova^{}, N.M. Şükürov^{**}**

^{*}Bakı Dövlət Universiteti, ^{**}Azərbaycan Texniki Universiteti

asimnara@mail.ru

Nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə Tyr1-Pro2-Trp3-Phe4-NH₂ endomorfin molekulunun fəza quruluşu onu əmələ gətirən aminturşu qalıqlarının aşağıenerjili konformasiyaları əsasında tədqiq olunmuşdur. Endomorfin molekulunun stabil konformasiyaları toplusu, onların ikiüzlü fırlanma bucaqları, onları stabilləşdirən aminturşu qalıqları arası və daxili qarşılıqlı təsir enerjiləri müəyyən edilmişdir.

Endomorfin molekulu məməlilərin beyin iliyindən ayrılmışdır, enkefalinlərin və dinorfinin opiat reseptorlarının endogen aqonisti hesab edilir. Opioid reseptorları müxtəlif mərkəzi və periferik əsəb sistemlərində endogen liqandlarının köməyi ilə təsir edərək morfin molekulunun göstərdiyi effektə malik olurlar. Bu molekul μ -opioid reseptoru üçün güclü və selektiv hərisliyi ilə digərlərindən fərqlənir. Endomorfin də morfin kimi güclü ağrıkəsici xassəsinə malikdir.

**BDU-nun Fizika Problemləri İnstitutunun yaradılmasının 10 illiyinə həsr olunmuş
Beynəlxalq konfrans**

Bundan başqa, soyuqlama zamanı alınmış opioid peptidləri opioid reseptorlarını stimullaşdırma bilirlər [1-3].

Endomorfın molekulunun fəza quruluşu nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə tədqiq edilmişdir. Molekulun fəza quruluşunu hesablamaq 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 Momani və Şeraqanın verdiyi parametrlərlə hesablanmışdır. Elektrostatik qarşılıqlı təsir enerjisi atomların parsial yüklərini nəzərə almaqla monopol yaxınlaşma Kulon qanununa əsasən hesablanmışdır. Əsas və yan zəncirlərin ikiüzlü fırlanma bucaqları ətrafında torsion qarşılıqlı təsir enerjisini hesablamaq üçün ifadələr və potensial çəpərlərin hündürlükləri Momani və Şeraqanın məqaləsindən götürülmüşdür. Hidrogen rabitəsinin enerjisi Morze potensialı ilə hesablanmışdır.

Tyr1-Pro2-Trp3-Phe4-NH₂ molekulunun fəza quruluşu onu əmələ gətirən uyğun aminturşu qalıqlarının aşağıenerjili konformasiyaları əsasında hesablanmışdır. Məlumdur ki, qlisindən başqa digər aminturşu qalıqları prolin aminturşu qalığından əvvəl gəldikdə onlar üçün əsas zəncirin R formasının konformasiyaları yüksəkenerjili olur. Ona görə də endomorfın molekulunun fəza quruluşunu hesablamaq üçün başlanğıc variantlar seçildikdə Tyr1 üçün əsas zəncirin R formasının konformasiyalarına baxılmamışdır. Bu səbəbdən də başlanğıc variantlar peptid zəncirin eee, eef, efe və eff şeyplərinin konformasiyaları əsasında formalaşmışdır.

Endomorfın molekulunun hesablanmış konformasiyalarının şeyplər üzrə paylanması cədvəl-də göstərilmişdir. Cədvəl 1-dən görüldüyü kimi 0-5 kkal/mol enerji intervalına eee, eef, eff şeypinin konformasiyaları düşür. Eee şeypi daha çox aşağıenerjili konformasiyalarla təmsil olunmuşdur. Molekula aromatik yan zəncirli aminturşu qalıqları daxil olduqlarına görə əsas zəncirin açılmış formasında n-ci və (n-2)-ci aminturşu qalıqların yan zəncirləri və n-ci və (n+1)-ci aminturşu qalıqlarının əsas və yan zəncirləri arasında əlverişli qarşılıqlı təsir yaranır. efe şeypinin konformasiyalarının nisbi enerjiləri 5,0 kkal/mol-dan yüksək olmuşdur.

Cədvəl 1.

Endomorfın molekulu konformasiyalarının enerjilərinə görə paylanması.

№	Şeyp	Əsas zəncirin forması	Enerji intervalı					
			0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	≥5
1	eee	BBBB	3	5	2	6	2	23
2	eef	BBRR	3	1	-	6	-	26
3	efe	BRBB	-	-	-	-	-	32
4	eff	BRRR	-	1	-	2	-	33

Endomorfın molekulunun aşağıenerjili formalarının ən stabil konformasiyası seçilmiş, onlara qeyri-valent, elektrostatik, torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinin verdikləri pay, ümumi və nisbi enerjiləri cədvəl 2-də göstərilmişdir.

Cədvəl 2.

Endomorfın molekulunun aşağıenerjili konformasiyaları, onlara qeyri-valent, elektrostatik, torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinin verdikləri pay, ümumi və nisbi enerjiləri.

№	Şeyp	Konformasiya	U _{qv}	U _{el}	U _{tor}	U _{üm}	U _{nis}
1	eee	B ₂ BB ₂₃ B ₁	-19.1	-0.1	2.9	-16.3	0
2	eef	B ₁ BR ₁₁ R ₁	-18.6	-0.1	3.2	-15.5	0.8
3	eff	B ₃ RR ₃₃ R ₂	-18.0	0.6	2.7	-14.8	1.5

**BDU-nun Fizika Problemləri İnstitutunun yaradılmasının 10 illiyinə həsr olunmuş
Beynəlxalq konfrans**

Cədvəl 3-də həmin konformasiyalarda aminturşu qalıqları daxilində və arasında qarşılıqlı təsir enerjiləri, cədvəl 4-də ikiüzlü fırlanma bucaqlarının qiymətləri göstərilmişdir. Molekulun ən stabil konformasiyası $B_2BB_{23}B_1$ -dir, onun stabilləşməsinə qeyri-valent qarşılıqlı təsir -19,1 kkal/mol, elektrostatik qarşılıqlı təsir enerjisi -0,1 kkal/mol, torsion qarşılıqlı təsir enerjisi 2,9 kkal/mol qədər pay verir. Göründüyü kimi bu konformasiya qeyri-valent və elektrostatik qarşılıqlı təsir enerjisinə görə ən əlverişlidir.

Konformasiyanın stabilləşməsinə Tyr1-in digər aminturşu qalıqları ilə qarşılıqlı təsiri -10,6 kkal/mol qədər, Pro2-nin digər aminturşu qalıqları ilə qarşılıqlı təsiri -1,2 kkal/mol qədər, Trp3-ün qığır aminturşu qalıqları ilə qarşılıqlı təsiri -7,1 kkal/mol qədər pay verir (cədvəl 3).

Cədvəl 3.

Endomorfin molekulunun aşağıenerjili $B_2BB_{23}B_1$ ($U_{nis}=0$ kkal/mol, 1-ci sətir),

$B_1BR_{11}R_1$ ($U_{nis}=0.8$ kkal/mol, 2-ci sətir), $B_3RR_{33}R_2$ ($U_{nis}=1.5$ kkal/mol, 3-cü sətir)
konformasiyalarında aminturşu qalıqları daxilində və arasında qarşılıqlı təsir enerjiləri.

Tyr1	Pro2	Trp3	Phe4	
2.0	-5.6	-3.2	-1.8	Tyr1
1.6	-4.8	-3.6	-0.2	
2.6	-3.9	-3.0	-3.7	
	0.3	-0.8	-0.4	Pro2
	0.8	-1.2	-4.0	
	0.2	-3.6	-1.5	
		-0.2	-6.9	Trp3
		-0.3	-5.0	
		-0.4	-1.4	
			-2.4	Phe4
			-1.9	
			-2.9	

Cədvəl 4.

Endomorfin molekulunun aşağıenerjili konformasiyalarının həndəsi parametrləri (ikiüzlü fırlanma bucaqlarının qiymətləri φ ψ ω χ_1 , χ_2 ardıcılığı ilə dərəcələrlə verilmişdir).

Amin turşusu	$B_2BB_{23}B_1$	$B_1BR_{11}R_1$	$B_3RR_{33}R_2$
Tyr1	-65 121 172 171 75 0	-68 149 171 63 88	-77 145 176 -75 112 0
Pro2	-60 119 -171	-60 95 174	-60 -44 -178
Trp3	-85 146 -179 180 -120	-64 -36 175 65 88	-68 -42 -179 -58 -83
Phe4	-98 147 180 60 86	-74 -31 179 59 81	-64 -46 180 -177 89
U_{nis}	0	0.8	1.5

Endomorfin molekulunun ikinci aşağıenerjili şeypi eef-dir, onun ən stabil konformasiyası nisbi enerjisi 0,8 kkal/mol olan $B_1BR_{11}R_1$ -dir. Bu konformasiya qlobal konformasiyaya geyri-valent və torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinə görə 0,8 kkal/mol qədər udur (cədvəl 2). Konformasiyanın stabilləşməsinə Tyr1-in digər aminturşusu qalıqları ilə qarşılıqlı təsir -8,6 kkal/mol qədər, Pro2-nin -5,2 kkal/mol qədər, Trp3-ün isə -5,0 kkal/mol qədər pay verərək onu aşağıenerjili etmişdir (cədvəl 3). Endomorfin molekulunun eef şeypinin ən stabil konformasiyası $B_3RR_{33}R_2$ -dir, onun nisbi enerjisi 1,5 kkal/mol-dur.

Endomorfın molekulunun fəza quruluşunun öyrənilməsi göstərir ki, elə fəza quruluşları yığılmasına malik olur ki, o müxtəlif bioloji funksiyaları yerinə yetirə bilər və müxtəlif reseptor molekulları ilə əlaqəyə girə bilər.

ƏDƏBİYYAT

1. Zadina J.E, Hackler L, Ge L.J, Kastin A.J. A potent and selektiv endogenous agonist for the mu-opiate reseptor. *Natur.* 1997, V.386,P.499-502.
2. Podlogar B.L., Paterini M.G., Ferguson D.M., Leo G.C., Demeter D.A., Brown F.K., Reitz B.A. Conformational analysis of the endogenous μ -opioid agonist endomorfın-1 – using NMR spectroscopy and molecular modeling. *Febs Letters*, 1998, V.439, №13, P.13-20
3. Azuma Y., Ohura K. Endomorphins 1 and 2 Inhibit IL-10 and IL-12. Production and Innate Immune Functions and Potentiate NF-kB DNA Binding in THP-1 Differentiated to Macrophage-Like Cells. *Scand.J. Immunol.* 2002, V.56, P.260-269.

OKTARFİN MOLEKULUNUN N-KƏNAR PENTAPEPTİD FRAQMENTİNİN KONFORMASIYA ANALİZİ

N.A. Əhmədov, R.M. Abbaslı, L.İ. İsmayılova

Bakı Dövlət Universiteti, Fizika Problemləri İnstitutu

Namiq.49@bk.ru

Nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə kardiofəal Thr1-Pro2-Leu3-Val4-Thr5-Leu6-Phe7-Lyz8 oktarfın molekulunun N-kənar pentapeptid molekulunun fəza quruluşu tədqiq edilmişdir. Oktarfın molekulu sintez edilmişdir və β -endorfin molekulunun 12-19 fraqmentinə uyğundur. Pentapeptid fraqmentinin aşağıenerjili konformasiyaları toplusu müəyyən edilmişdir ki, bunlar da oktapeptid molekulun fəza quruluşu öyrənildikdə başlanğıç konformasiyalar olacaqdır.

Thr1-Pro2-Leu3-Val4-Thr5-Leu6-Phe7-Lyz8 oktapeptid oktarfın molekulu sintez edilmişdir. Bu molekul β -endorfin molekulunun 12-19 fraqmentinə uyğundur. Göstərilmişdir ki, o β -endorfin reseptorunun selektiv aqanistidir. Oktarfinin işarəedilmiş tritiyumun köməyi ilə reseptorun orqanizmdə paylanması öyrənilmişdir. Müəyyən olunmuşdur ki, o immun hüceyrələrində, endokrin, ürək-damar sistemlərində mövcüd olur. Oktarfinin hüceyrələrdə təsirinin öyrənilməsi göstərdi ki, mitogenlə induksiyanmış insan əzələsinin T- və B-limfositlərini artırır, əzələnin peritoneal makrofaqını aktivləşdirir, insanın limfoblast hüceyrələrinin inkişafını stimullaşdırır, böyrəküstü membran qabığına adenilazsiklazasının aktivliyini ingibirləşdirir və böyrəkdən qlükokortikoidlərin qana sekresiyasını zəiflədir. Oktarfinin orqanizmdə aktivliyi onun dozasından asılıdır [1, 2].

Məlumdur ki, β -endorfin molekulunun fəza quruluşu nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə öyrənilmişdir [3]. Oktarfin molekulunun fəza quruluşu tədqiq olundaqdan sonra alınan nəticələr müqayisə ediləcəkdir. Biomolekulun yerinə yetirdiyi funksiyaları başa düşmək, onlara məqsədyönlü təsir göstərmək və təbii molekulun yalnız müəyyən funksiyalarını yerinə yetirə bilən süni analogların sintez üçün təklif etmək üçün onun aşağıenerjili konformasiyaları toplusunu təyin etmək lazımdır.

**BDU-nun Fizika Problemləri İnstitutunun yaradılmasının 10 illiyinə həsr olunmuş
Beynəlxalq konfrans**

Oktarfin molekulunun fəza quruluşu nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə tədqiq olunmuşdur. Molekulun fəza quruluşunu öyrənmək üçün sistemin potensial enerjisi qeyri-valent, elektrostatik, torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinin və hidrogen rabitəsi enerjisinin cəmi şəklində seçilmişdir. Qeyri-valent qarşılıqlı təsir enerjisi Lennard-Cons potensialı ilə Skott və Şeraqanın təklif etdiyi parametrlərlə hesablanmışdır. Molekulun konformasiya imkanları su mühitində öyrənilmişdir. Hidrogen rabitəsinin enerjisi Morze potensialı ilə hesablanmışdır. Torsion qarşılıqlı təsir enerjilərini hesablamaq üçün potensial funksiyalar, atomlardakı parsial yüklərin qiymətləri, valent bucaqlarının qiymətləri və valent rabitələrinin uzunluqları Momani və Şeraqanın məqaləsindən götürülmüşdür.

Oktarfin molekulunun fəza quruluşu onu fraqmentlərə ayırmaqla hesablanmışdır. İlk mərhələdə molekulun N-kənar Thr1-Pro2-Leu3-Val4-Thr5 pentapeptid fraqmentinin fəza quruluşu onu əmələ gətirən aminturşu qalıqlarının aşağıenerjili konformasiyaları əsasında öyrənilmişdir. Bunun üçün treonin, prolin, leysin və valin aminturşularının aşağıenerjili konformasiyalarına uyğun ikiüzlü fırlanma bucaqlarının qiymətləri uyğun ədəbiyyatlardan götürülmüş və onlar başlanğıc konformasiyalar olmuşdur. Məlumdur ki, pentapeptid fraqment üçün ümumi halda zəncirin 16 şeypi mümkündür. Pentapeptid fraqmentin aminturşu ardıcılığından görüldüyü kimi ikinci yerdə prolin aminturşu qalığı durur. Ədəbiyyatda qeyd edildiyi kimi prolin aminturşu qalığı özündən əvvəl gələn aminturşu qalığının konformasiya imkanlarını məhdudlaşdırır, onun əsas zəncirinin R forması yüksək enerjili olur. Ona görə də hesablamalarda birinci treonin yalnız əsas zəncirin B formasında götürülmüşdür və pentapeptid fraqmentin 16 şeypi əvəzinə 8 şeypinin konformasiyaları hesablanmışdır. Pentapeptid fraqmenti hesablanmış konformasiyalarının enerjilərinə görə paylanması cədvəl 1-də göstərilmişdir.

Cədvəl 1.

**Oktarfin molekulunun N-kənar pentapeptid fraqmenti
konformasiyalarının enerjilərinə görə paylanması.**

	Əsas zəncirin forması	Enerji intervalı (kkal/mol)					
		0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	≥5
	BBBBB	-	2	1	2	1	22
	BBBRR	1	2	3	1	-	21
	BBRRR	-	1	1	-	1	25
	BRRRR	-	-	-	2	1	25
	BRBRR	-	-	-	1	2	25
	BBRBB	-	-	2	2	2	22
	BRBBB	-	1	1	-	1	25
	BRRBB	-	-	1	1	3	23

Cədvəldən görüldüyü kimi əsas zəncirin formalarının enerjilərinə görə kəskin diferensiasiya getməmişdir, kəskin diferensiasiya yalnız konformasiyaların enerjilərinə getmişdir. Fraqmentin aşağıenerjili konformasiyaları ən çox olan forması BBBRR-dir. Bu formada 0-4,0 kkal/mol enerji intervalına yeddi konformasiya düşür və fraqmentin ən stabil konformasiya B₁₂BB₂₁R₁R₁₂-dir. Görüldüyü kimi bu konformasiyada ilk üç aminturşu qalığı əsas zəncirin B formasında sonrakı iki aminturşu qalığı əsas zəncirin R formasındadır. Bu formada müxtəlif

aminturşu qalıqları arasında effektiv qarşılıqlı təsirlər yaranır və onu aşağı enerjili edir. Əsas zəncirin BBBBB, BBRRR və BRBBB formalarının konformasiyaları arasında aşağıenerjili konformasiyalar daha çoxdur.

Hesablamaların nəticəsinə əsasən demək olar ki, oktapeptid oktarfin molekulun fəza quruluşunu hesabladıqda cədvəl 1-də göstərilmiş əsas zəncirin bütün formalarının konformasiyalarını başlanğıc konformasiyalar kimi götürmək lazımdır.

ƏDƏBİYYAT

1. Некрасова Ю.Н., Садовников В.Б., Золотарев Ю.А., Наволоцкая Е.В. Свойства и механизм действия синтетического пептида октарфина. Биоорган.химия, 2010, Т.36, №5, с.638-645
2. Наволоцкая Е.В. Октарфин-неопиоидный пептид опиоидного происхождения. Международная конференция по биорганической химии, биотехнологии и бионанотехнологии. Москва, ИБХ, 2014, с.38-39.
3. Ахмедов Н.А., Годжаев Н.М., Сулейманова Е.В., Попов Е.М. Структурная организация молекул [Met]-энкефалина и эндорфинов. III. Теоретический конформационный анализ β -эндорфина. Биоорган.химия, 1990, Т.16, №5, с.661-667.

СТРУКТУРНАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ ГЕКСАПЕПТИДНОЙ МОЛЕКУЛЫ

Л.И. Исмаилова, Р.М. Аббаслы, Н.А. Ахмедов

Институт Физических Проблем, Бакинский Государственный Университет

Larisa_Ismailova@yahoo.com

С помощью метода молекулярной механики были исследованы пространственное строение и конформационные свойства гексапептидной молекулы селезенки Arg-Lys-Asp-Val-Tyr-Arg. Этот гексапептид индуцирует дифференцировку Т-лимфоцитов, обладает иммуностимулирующей активностью. Потенциальная энергия молекулы выбиралась как сумма невалентных, электростатических, торсионных взаимодействий и энергии водородных связей. Найденны 8 низкоэнергетических конформаций для гексапептидной молекулы, значения двугранных углов основной и боковых цепей аминокислотных остатков, входящих в эту молекулу, оценена энергия внутри - и межостаточных взаимодействий.

Для поддержания стабильного состояния организма важное место занимает иммунная система. Известно, что низкомолекулярные пептиды участвуют в регуляции иммунного ответа. Они проявляют себя как препараты с иммуностимулирующим действием. Гексапептидная молекула Arg-Lys-Asp-Val-Tyr-Arg является синтетическим аналогом молекулы тимопентина Arg-Lys-Asp-Val-Tyr. Сравнение аминокислотных последовательностей показывает, что цепь увеличена на одну аминокислоту Arg на С-конце молекулы. Проведенные экспериментальные исследования показали, что увеличение аминокислотной последовательности на одну аминокислоту Arg, то есть гексапептид Arg-Lys-Asp-Val-Tyr-Arg, полностью воспроизводит биологическую активность природной молекулы тимопентина [1, 2].

Целью выполненной работы является определение пространственной структуры и конформационных возможностей гексапептидной молекулы Arg-Lys-Asp-Val-Tyr-Arg. Для

нахождения ее пространственного строения использовалась разработанная нами компьютерная программа [3]. Используемый в нашем случае теоретический подход позволяет определить пространственную структуру гексапептида исходя из известной аминокислотной последовательности. Он дает возможность описать с достаточной точностью геометрию молекулы, определить значения двугранных углов основной цепи и боковых цепей аминокислот, входящих в молекулу, а также энергетические взаимодействия атомов в этой молекуле. Специально введенная классификация (шейп, форма основной цепи, конформация) позволяет четко разделить рассматриваемые структуры, предполагая, что низкоэнергетическая структура пептида формируется из отдельных структурных блоков меньшей длины. Формы аминокислотных остатков определялись низкоэнергетическими областями В, R и L двугранных углов основной цепи ϕ - ψ . Отсчет двугранных углов вращения производился согласно стандартной номенклатуре IUPAC-IUB [4].

Аминокислотная последовательность молекулы Arg-Lys-Glu-Val-Tyr-Arg включает в себя гидрофильный отрицательно заряженный остаток аспарагиновой кислоты Asp, слабо гидрофобные и положительно заряженные аминокислоты Arg и Lys и сильно гидрофобный остаток Tyr. Исходя из этого, можно сделать предположение о том, что присутствие кислотно-основных аминокислот может определять биологическую активность молекулы. Сложная задача нахождения пространственной структуры гексапептидной молекулы была сведена к фрагментарному расчету. Сначала были определены конформационные возможности трипептида Arg-Lys-Asp и тетрапептида Arg-Lys-Asp-Val, потом были изучены конформационные свойства пентапептида Arg-Lys-Asp-Val-Tyr и, наконец, всей гексапептидной молекулы. Такая схема расчета пространственной структуры молекулы была продиктована самой аминокислотной последовательностью и интересными данными об ее биологической активности. Отметим, что, первичная структура гексапептида содержит аминокислотные остатки Arg, Lys с длинными, объемными и положительно заряженными боковыми цепями, а также остатки Val и Tyr, которые имеют объемные боковые цепи. Остаток аспарагиновой кислоты Asp имеет отрицательно заряженную боковую цепь.

Гексапептид Arg-Lys-Asp-Val-Tyr-Arg отличается от молекулы тимопентина наличием на С-конце пептида еще одного остатка аргинина. Про эту молекулу известно, что добавление аминокислоты Arg к С-концу молекулы не изменяет иммуномодулирующей активности, то есть биологическая активность гексапептидного аналога такая же, как и молекулы тимопентина Arg-Lys-Asp-Val-Tyr.

Гексапептидная молекула насчитывала 122 атома и 38 двугранных углов основной и боковых цепей аминокислот, входящих в эту молекулу. Начальные приближения для нахождения пространственной структуры гексапептида были составлены с учетом всех возможных низкоэнергетических конформаций, число которых превысило 250. Все рассчитанные конформации принадлежали 34 формам основной цепи. Выбранные начальные приближения были проминимизированы по энергии. Расчет обнаружил наличие резкой энергетической дифференциации пространственных структур молекулы гексапептида, так в энергетический интервал 0-7 ккал/моль попадают всего 30 конформаций, принадлежащих восьми формам основной цепи. Самые низкоэнергетические конформации с энергетическими вкладами невалентных, электростатических и торсионных взаимодействий, а так же относительной энергией представлены в таблице 1.

Таблица1.

Энергетические вклады (ккал/моль) низкоэнергетических конформаций
гексапептидной молекулы Arg-Lys-Asp-Val-Tyr-Arg

№	Конформация	$E_{нев}$	$E_{эл}$	$E_{торс}$	$E_{отн}$
1	$B_{2222}R_{22222} R_{31}R_{222}R_{312}R_{3322}$	-34.8	1.4	3.1	0.0
2	$B_{2222}R_{22222} R_{31}R_{222} R_{312}B_{3322}$	-34.5	1.5	3.2	0.5
3	$B_{2122}R_{23222} R_{31} B_{322} B_{212} B_{3322}$	-32.9	2.1	4.2	3.8
4	$B_{2122}R_{23222} B_{31} B_{222} R_{312}R_{3322}$	-32.4	1.9	4.1	3.9
5	$B_{1222} B_{21222} R_{11}B_{122} B_{312}B_{3122}$	-36.3	4.9	5.1	4.1
6	$B_{1222} R_{21222} B_{31}B_{122}R_{312}B_{3222}$	-31.4	2.4	4.0	5.4
7	$B_{2222} R_{22222} B_{31} R_{222} B_{312}B_{3322}$	-33.6	5.6	3.2	5.6
8	$B_{2122} R_{23222} B_{31}B_{222} B_{112}B_{2222}$	-30.0	1.4	4.3	6.0

Глобальной конформацией данной молекулы является $B_{2222}R_{22222} R_{31}R_{222}R_{312}R_{3322}$, в которой пространственная структура N-концевого пентапептида полностью совпадает с низкоэнергетической конформацией молекулы тимопентина. Отсюда и одинаковая биологическая активность обеих молекул. Важно отметить, что присутствие конформационно свободных аминокислот Arg1, Asp3 и Tyr5 в молекуле синтетического гексапептида Arg-Lys-Asp-Val-Tyr-Arg является важным моментом при взаимодействии данного аналога с рецептором. Расположение аминокислот в низкоэнергетической конформации гексапептида представлено на рисунке 1.

Низкоэнергетическими конформациями для гексапептидной молекулы являются также BRRRRB, BRRBBB и BBRBBB, пространственные структуры которых напоминают регулярные участки α - и β - структур. В этих конформациях присутствуют все возможные для гексапептидной молекулы взаимодействия, но основной вклад принадлежит дипептидным, трипептидным и тетрапептидным взаимодействиям между остатками.

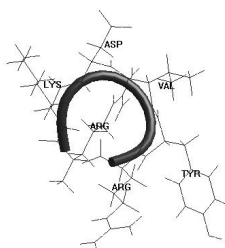


Рисунок 1. Пространственная структура конформации BRRRRR
Молекулы Arg-Lys-Asp-Val-Tyr-Arg.

ЛИТЕРАТУРА

1. G.M.Bobiyev Immunoaktivnie peptide I ix koordinacionnie soedineniya v medicine, Izd.dom "Russkiy vrach", 228 s., 2009
2. B.M.Xolnazarov, A.N.Shaxmatov, G.M.Bobiyev. Poluchenie substancii timofera i ee kolichestvennoe opredelenie, Ximiko-pharmrcevticheskiy jurnal, Tom48, N11, s.34-36, 2014
3. I.S.Maksumov, L.I.Ismailova, N.M. Godjaev, A computer program for calculation of conformations of molecular systems, J. Struc. Chem., Vol. 24, p. 147-148, 1983
4. IUPAC-IUB, Quantity, Units and Symbols in Physical Chemistry Blackwell Scientific Publications, Oxford, p. 39, 1988

MOLECULAR MECHANICS AND DYNAMICS STUDY OF THE UPEROLEIN MOLECULE

G.A. Agaeva

Institute for Physical Problems, Baku State University

gulshen@mail.ru

The conformational properties of the uperolein molecule has been studied by molecular mechanics and dynamics method in vacuum and in environment with water molecules. It is shown that uperolein is observed in vacuum and in water with some flexibility of the N-terminal part of its amino acid sequence. In the middle and C-terminal parts of this molecule is saved a helical conformation in all conditions.

Introduction

The major aim of the present article is the investigation of conformational dynamics for uperolein, with the purpose of getting insight into basic structural requirements that determine ligand-receptor interaction. The conformational behaviour of uperolein and conformational dynamics of its side chains at the present article have been investigated by molecular mechanics and dynamics method, which allow to determine a whole sets of energetically preferred conformers of peptide molecule. Uperolein, an undecapeptide of frogs skin, with the sequence pGlu-Pro-Asp-Pro-Asn-Ala-Phe-Tyr-Gly-Leu-Met-NH₂, is a member of the tachykinin family of neuropeptides [1]. All tachykinin peptides share the same consensus C-terminal sequence, that is, Phe-Xxx-Gly-Leu-Met-NH₂. This common region, often referred as the message domain, is believed to be responsible for activating the receptor. Tachykinin peptides exhibit a wide and complex spectrum of pharmacological and physiological activities such as powerful vasodilation, hypertensive action, and stimulation of extravascular smooth muscle. Uperolein is a tachykinin closely related to physalaemin and possessing the same spectrum of biological activity. The wide range of physiological activity of tachykinins has been attributed to the lack of specificity of tachykinins for a particular receptor type. Hence there is considerable interest in uperolein as potential target for drug design. The major aim of the present article is the investigation of conformational dynamics for uperolein, with the purpose of getting insight into basic structural requirements that determine ligand-receptor interaction. The determined structures of uperolein may be used as the basis for the design of further peptidic selective antagonists.

Molecular mechanics (MM) study of uperolein conformation involves step by step extensive computations of even-increasing fragments, with a set stable forms of each preceding step used as a starting set in the next step. Only those conformations are retained whose energies are smaller than some cut-off values. This cut-off value is usually taken as 5 kcal/mol above the lowest energy. But it can be varied to make sure that higher energy states can justifiably be neglected. The sequential method was used, combining all low-energy conformations of constitutive residues. The conformational potential energy of a molecule is given as the sum of the independent contributions of nonbonded, electrostatic, torsional interactions and hydrogen bonds energies. The first term was described by the Lennard-Jones 6-12 potential with the parameters proposed by Scott and Scheraga. The electrostatic energy was calculated in a monopole approximation corresponding to Coulomb's law with partial charges of atoms as suggested by Scott and Scheraga. An effective dielectric constant value $\epsilon=1$ for vacuum, $\epsilon=4$ for membrane environment and $\epsilon=80$ for water surrounding is typically used for calculations with peptides and proteins, which create the effects of various solutions on the conformations of peptides by MM method. The torsional energy was calculated using the value of internal rotation barriers given by Momany et al. The hydrogen bond energy is strong, its maximum value being 1.5 kcal/mol; it is calculated based on Morse potential. Bonding lengths and angles are those given by Corey and Pauling [2] and are kept invariable; the ω angle of the peptide bond was fixed at 180° .

Molecular mechanics study of eledoisin has shown that its spatial structure may be described by some families of low-energy conformations with identical structure of the C-terminal heptapeptide. The C-terminal part (residues 5-11) of the uperolein can adopt a partially helical structures, but the N-terminal part is flexible and different in each family. The lowest energy structures of uperolein exhibit the most favourable dispersion contacts and therefore may be expected to become the most preferred in a strongly polar medium, when electrostatic interactions do not play a significant role. The lowest energy α -helical structure at the C-terminal fragment is stabilized by network of hydrogen bonds. Conformational analysis of uperolein have been indicated some families of low-energy conformations with similar C-terminal heptapeptide.

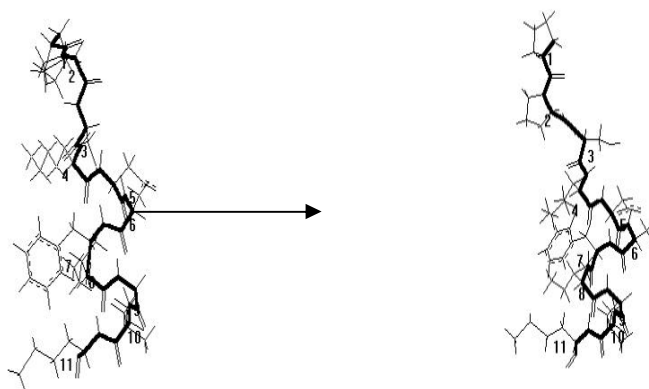


Fig.1. Conformational reorganization of the uperolein molecule at the molecular dynamic simulation in vacuum.

Molecular dynamics (MD) simulations generate trajectories of atomic positions and velocities and some general thermodynamic properties. MD involves the calculation of solutions to Newton's equations of motions MD is widely applied to the study of biological systems, providing insight into the structure, function, and dynamics of biological molecules [3,4]. The

quality of the results from a standard MD simulation is extremely dependent on the starting conformation of the molecule. Runs were performed for 300 ps at 300K. The force field parameters were those of the all atom version of AMBER by Cornell et al [3,4]. The nonbonded cutoff distance was 12Å. The time step was 0,5fs. The program Hyper. Chem. 8.0 [4] was used for the MD simulations. MD simulation, using the four starting lowest energy structures of uperolein were shown the significant differences in the conformations of the molecule in a vacuum and in an aqueous environment. Structural reorganization of the global conformation of uperolein at the molecular dynamic simulation in vacuum and in water solution are shown in Fig.1 and Fig.2. accordingly. The MD simulations revealed the possible deviation by $\pm 10^\circ$ from the optimal values of φ , ψ , ω , χ dihedral angles in vacuum as compared to $\pm 20^\circ$ in water. MD simulations for eledoisin 300ps indicate that ψ angle for pGlu1 have a noticeable conformational flexibility. The deviations of ψ for pGlu1 by $\pm 20^\circ$ from its optimal values are allowed in all calculated structures in vacuum and water environment.

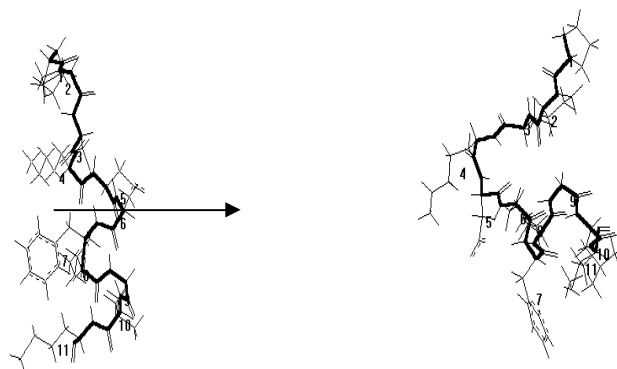


Fig.2. Conformational reorganization of the uperolein molecule at the molecular dynamic simulation in water .

The deviations by $\pm 20^\circ$ from minimal values are possible for χ_1 angle. The rotation of the χ_2 angle for Phe7 and Tyr8 is considerably limited due to the effective interactions between these amino acids. In contrast to water simulations, where the φ angle for Asp3 may be changed by retained, generally the bond stretching frequency of water, the trajectory has to be recorded at an interval no larger than 4 femtoseconds. MD simulations show that the molecule backbone can adopt only a limited number conformations while the side chains of the residues may populate different rotamers. The Asn5-Met11 heptapeptide fragment was found to be rigid in the conditions studies. The Pro4 fluctuates by $\pm 20^\circ$ from its optimal value i.e. Pro4 is very flexible in water. So, the flexibility of residues in the 5th and 7th positions is limited by 10° as compared to the preceding part of molecule. This fact can be explained due to the important role of these residues in the formation of β -turn.

The obtained results and discussion confirm the relative flexibility of the N-terminal part and rigidity of helical structure of the C-terminal part of uperolein molecule.

REFERENCES

1. Anastasi, A., Erspamer, V., Endean, R., 1975. *Experientia* 31 (4), 394–395.
2. G.A.Agaeva, U.T.Agaeva, N.M.Godjaev, (2015) *Biophysics (Biofizika)*, 60, 365-377.
3. S.Weiner, P. Kolman, D.Neuven, D.Case, (1986), *J.Comput.Chem.* 7, 230-233.
4. J.A. McCammon, S.C. Harvey,(1987) *Dynamics of Proteins and Nucleic Acids*, Cambridge Univ. Press, New York.

**Uperolein molekulunun molelulyar mexanika və
molekulyar dinamika üsulları ilə tədqiqi.**

G.Ə.Ağayeva

Uperolein molekulunun konformasiya imkanları molekuluyar mexanika və molekuluyar dinamika üsulları ilə müxtəlif mühitlərdə öyrənilmişdir. Bunun üçün peptidlərin konformasiya dəyişmələri əvvəlcə vacuumda ,sonra su molekullarından ibarət qutuda müəyyən olunmuşdur. Hesablamalar nəticəsində göstərilmişdir ki, hər iki mühitdə molekulun N-uclu hissəsinin əsas və yan zəncirlərinin çəvikliyi mövcuddur, lakin molekulun mərkəzi və C-uclu hissəsinin əsas zəncirinin alfa spiral quruluşu daha dayanıqlıdır.

**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ *AB INITIO* ИССЛЕДОВАНИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА
КОМПЛЕКСА ОЛИГОМЕРА ПОЛИЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ ПЭГ5
С АТОМОМ ХЛОРА**

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

Институт Проблем физики, Бакинский Государственный Университет

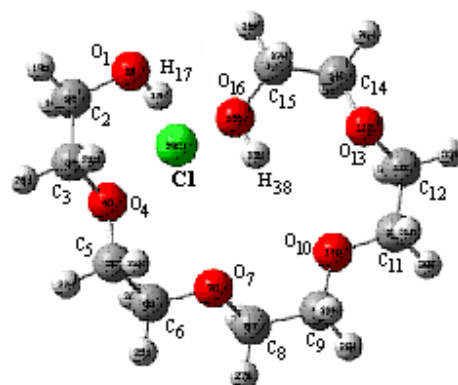
svetlanabest@mail.ru

*В работе квантово-химическим *ab initio* методом Хартри–Фока с использованием базиса 6-31G проведен расчет колебательного спектра комплекса олигомера полиэтиленгликоля ПЭГ5 с атомом хлора. Получены частоты, интенсивности, построен теоретический колебательный спектр комплекса и произведена его теоретическая интерпретация по распределению потенциальной энергии по колебательным координатам.*

Ключевые слова: олигомеры, полиэтиленгликоль, комплекс, квантово-химические неэмпирические расчеты, колебательный спектр, частоты, интенсивности

Настоящая работа посвящена квантово-химическому исследованию колебательного спектра комплекса олигомера полиэтиленгликоля, состоящего из 5 повторяющихся звеньев с атомом хлора. Расчетная модель молекулы (рис.1) была получена после предварительного моделирования структуры методом молекулярной динамики.

Ранее нами было проведено исследование пространственной [1] и электронной [2] структуры комплекса ПЭГ5+Cl. Расчет колебательного спектра этого комплекса произведен квантовохимическим *ab initio* методом HF в базисном наборе 6-31G (p,d) по программе Gaussian-09. В результате проведенного



**Рис.1. Расчетная модель
комплекса ПЭГ5+Cl**

расчета были получены частоты и интенсивности колебательных полос и построен теоретический спектр поглощения, который приведен на рис. 2. Для более точной интерпретации частот нормальных колебаний полученного колебательного спектра был проведен расчет распределения потенциальной энергии по колебательным координатам по программе VEDA-4.

Результаты расчета частот и интенсивностей полос поглощения теоретического спектра комплекса полиэтиленгликоля ПЭГ5 с атомом хлора и интерпретация появления этих полос, основанная на подробном анализе распределения потенциальной энергии по колебательным координатам представлены в таблице.

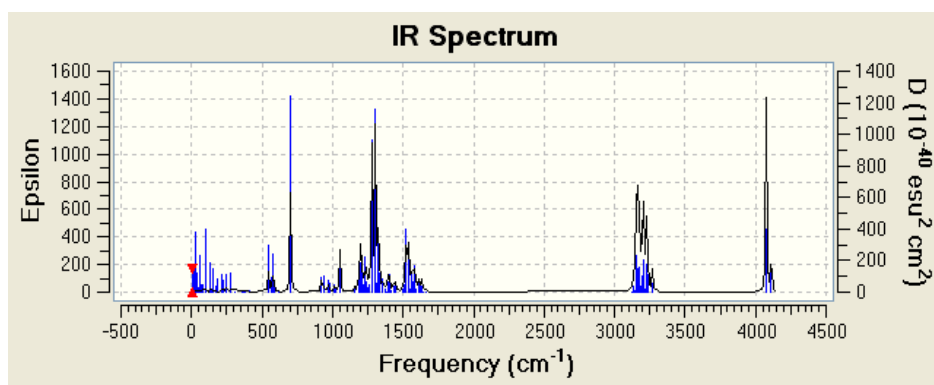


Рис. 2. Теоретический колебательный спектр комплекса ПЭГ5+Cl

Таблица.

Теоретические частоты (cm^{-1}), интенсивности (KM/Mole) и интерпретация ИК спектра комплекса ПЭГ5+Cl по данным метода HF/6-31G

ν	I	Отнесение и степень участия			
4111	122.27	q(O ₁₆ H ₃₈) 96			
4076	407.52	q(O ₁ H ₁₇) 96			
3268	45.92	q(C ₁₅ H ₃₆) 84	q(C ₁₅ H ₃₇) 14		
3233	92.17	q(C ₂ H ₁₈) 11	q(C ₂ H ₁₉) 86		
3225	139.93	q(C ₁₂ H ₃₂) 34	q(C ₁₄ H ₃₄) 36	q(C ₁₄ H ₃₅) 11	
3218	13.02	q(C ₁₂ H ₃₂) 37	q(C ₁₄ H ₃₄) 22	q(C ₁₄ H ₃₅) 13	
3208	163.58	q(C ₆ H ₂₄) 27	q(C ₆ H ₂₆) 30	q(C ₉ H ₂₆) 23	
3204	24.94	q(C ₅ H ₂₃) 14	q(C ₆ H ₂₄) 40	q(C ₆ H ₂₆) 13	q(C ₉ H ₂₆) 20
3199	21.29	q(C ₁₄ H ₃₄) 17	q(C ₁₅ H ₃₇) 71		
3194	27.59	q(C ₁₁ H ₃₀) 14	q(C ₁₁ H ₃₁) 59		
3191	85.24	q(C ₃ H ₂₀) 10	q(C ₃ H ₂₁) 37	q(C ₅ H ₂₃) 14	
3190	27.62	q(C ₃ H ₂₁) 14	q(C ₆ H ₂₆) 27	q(C ₉ H ₂₆) 29	
3186	3.09	q(C ₃ H ₂₁) 12	q(C ₅ H ₂₂) 10	q(C ₅ H ₂₃) 49	q(C ₆ H ₂₄) 13
3174	125.90	q(C ₁₂ H ₃₃) 35	q(C ₁₄ H ₃₅) 38		
3167	41.92	q(C ₂ H ₁₈) 72	q(C ₃ H ₂₁) 19		
3163	118.70	q(C ₁₁ H ₃₀) 10	q(C ₁₂ H ₃₃) 21	q(C ₁₄ H ₃₄) 13	q(C ₁₄ H ₃₅) 35
3158	183.70	q(C ₆ H ₂₅) 17	q(C ₈ H ₂₇) 26	q(C ₉ H ₂₈) 20	
3151	85.70	q(C ₅ H ₂₂) 27	q(C ₆ H ₂₅) 20	q(C ₉ H ₂₈) 19	
3143	5.76	q(C ₈ H ₂₇) 17	q(C ₁₁ H ₃₀) 47	q(C ₁₁ H ₃₁) 10	q(C ₁₂ H ₃₃) 10
3137	27.24	q(C ₃ H ₂₀) 36	q(C ₆ H ₂₅) 20	q(C ₉ H ₂₈) 13	
3133	7.35	q(C ₃ H ₂₀) 22	q(C ₈ H ₂₇) 29	q(C ₉ H ₂₈) 23	
3127	0.70	q(C ₃ H ₂₀) 15	q(C ₅ H ₂₂) 34	q(C ₆ H ₂₅) 27	
1661	1.18	α (H ₃₃ C ₁₂ H ₃₂) 28	α (H ₃₅ C ₁₄ H ₃₄) 31		
1660	0.95	α (H ₂₁ C ₃ H ₂₀) 36	α (H ₂₅ C ₅ H ₂₂) 31		

**BDU-nun Fizika Problemləri İnstitutunun yaradılmasının 10 illiyinə həsr olunmuş
Beynəlxalq konfrans**

1659	0.70	$\alpha(\text{H}_{25}\text{C}_6\text{H}_{24})$ 25	$\alpha(\text{H}_{27}\text{C}_8\text{H}_{26})$ 30
1658	0.24	$\alpha(\text{H}_{25}\text{C}_6\text{H}_{24})$ 11	$\alpha(\text{H}_{29}\text{C}_9\text{H}_{28})$ 20 $\alpha(\text{H}_{31}\text{C}_{11}\text{H}_{30})$ 20
1641	0.41	$\alpha(\text{H}_{37}\text{C}_{15}\text{H}_{36})$ 73	
1639	1.82	$\alpha(\text{H}_{19}\text{C}_2\text{H}_{18})$ 70	$\alpha(\text{H}_{23}\text{C}_5\text{H}_{22})$ 10
1637	5.52	$\alpha(\text{H}_{29}\text{C}_9\text{H}_{28})$ 36	$\alpha(\text{H}_{31}\text{C}_{11}\text{H}_{30})$ 32
1636	5.76	$\alpha(\text{H}_{21}\text{C}_3\text{H}_{20})$ 21	$\alpha(\text{H}_{23}\text{C}_5\text{H}_{22})$ 24 $\alpha(\text{H}_{25}\text{C}_6\text{H}_{24})$ 12 $\alpha(\text{H}_{27}\text{C}_8\text{H}_{26})$ 13
1635	14.06	$\alpha(\text{H}_{25}\text{C}_6\text{H}_{24})$ 10	$\alpha(\text{H}_{33}\text{C}_{12}\text{H}_{32})$ 19 $\alpha(\text{H}_{35}\text{C}_{14}\text{H}_{34})$ 20
1633	3.25	$\alpha(\text{H}_{25}\text{C}_6\text{H}_{24})$ 14	$\alpha(\text{H}_{27}\text{C}_8\text{H}_{26})$ 14 $\alpha(\text{H}_{33}\text{C}_{12}\text{H}_{32})$ 17 $\alpha(\text{H}_{35}\text{C}_{14}\text{H}_{34})$ 14
1626	14.44		
1609	31.76		
1593	6.41		
1584	66.76		
1573	25.59	$\mu(\text{H}_{17}\text{O}_1\text{C}_2)$ 15	$\chi(\text{H}_{19}\text{C}_2\text{C}_3\text{O}_4)$ 13
1564	48.60	$\chi(\text{H}_{33}\text{C}_{12}\text{O}_{13}\text{C}_{14})$ 10	
1551	5.99		
1542	66.46	$\mu(\text{H}_{17}\text{O}_1\text{C}_2)$ 24	$\eta(\text{H}_{18}\text{C}_2\text{O}_1)$ 28
1535	101.15	$\chi(\text{H}_{27}\text{C}_8\text{O}_7\text{C}_6)$ 10	
1522	151.37	$\chi(\text{H}_{33}\text{C}_{12}\text{O}_{13}\text{C}_{14})$ 11	
1512	18.39		
1493	8.54	$\gamma(\text{H}_{38}\text{O}_{16}\text{Cl}_{39})$ 24	$\eta(\text{H}_{36}\text{C}_{15}\text{O}_{16})$ 28 $\chi(\text{H}_{37}\text{C}_{15}\text{O}_{16}\text{Cl}_{39})$ 18
1444	23.61	$\eta(\text{H}_{22}\text{C}_5\text{O}_4)$ 14	$\eta(\text{H}_{24}\text{C}_6\text{O}_7)$ 20 $\eta(\text{H}_{26}\text{C}_8\text{O}_7)$ 11 $\eta(\text{H}_{28}\text{C}_9\text{O}_{10})$ 19
1432	14.21	$\eta(\text{H}_{22}\text{C}_5\text{O}_4)$ 14	$\eta(\text{H}_{26}\text{C}_8\text{O}_7)$ 11 $\eta(\text{H}_{28}\text{C}_9\text{O}_{10})$ 19
1417	3.18	$\eta(\text{H}_{30}\text{C}_{11}\text{O}_{10})$ 17	$\eta(\text{H}_{32}\text{C}_{12}\text{O}_{13})$ 13 $\chi(\text{H}_{33}\text{C}_{12}\text{O}_{13}\text{C}_{14})$ 10
1402	38.41	$\eta(\text{H}_{30}\text{C}_{11}\text{O}_{10})$ 17	$\eta(\text{H}_{32}\text{C}_{12}\text{O}_{13})$ 13 $\eta(\text{H}_{34}\text{C}_{14}\text{O}_{13})$ 36
1398	21.81	$\eta(\text{H}_{20}\text{C}_3\text{O}_4)$ 54	
1390	22.27	$\eta(\text{H}_{22}\text{C}_5\text{O}_4)$ 17	$\eta(\text{H}_{24}\text{C}_6\text{O}_7)$ 15 $\eta(\text{H}_{28}\text{C}_9\text{O}_{10})$ 14 $\eta(\text{H}_{34}\text{C}_{14}\text{O}_{13})$ 14
1381	0.73	$\eta(\text{H}_{22}\text{C}_5\text{O}_4)$ 17	$\eta(\text{H}_{24}\text{C}_6\text{O}_7)$ 15 $\eta(\text{H}_{30}\text{C}_{11}\text{O}_{10})$ 11 $\eta(\text{H}_{32}\text{C}_{12}\text{O}_{13})$ 11 $\eta(\text{H}_{34}\text{C}_{14}\text{O}_{13})$ 14
1375	5.25	$\eta(\text{H}_{26}\text{C}_8\text{O}_7)$ 17	$\eta(\text{H}_{28}\text{C}_9\text{O}_{10})$ 15 $\eta(\text{H}_{32}\text{C}_{12}\text{O}_{13})$ 11
1358	29.62	$\eta(\text{H}_{18}\text{C}_2\text{O}_1)$ 27	$\eta(\text{H}_{20}\text{C}_3\text{O}_4)$ 11 $\chi(\text{H}_{18}\text{C}_2\text{C}_3\text{O}_4)$ 11 $\chi(\text{H}_{19}\text{C}_2\text{C}_3\text{O}_4)$ 11
1332	39.17	$\gamma(\text{H}_{38}\text{O}_{16}\text{Cl}_{39})$ 20	$\eta(\text{H}_{36}\text{C}_{15}\text{O}_{16})$ 18 $\chi(\text{H}_{37}\text{C}_{15}\text{O}_{16}\text{Cl}_{39})$ 12
1323	118.30	$q(\text{O}_{10}\text{C}_9)$ 12	$q(\text{O}_{13}\text{C}_{12})$ 31 $q(\text{O}_{13}\text{C}_{14})$ 25
1313	18.20	$q(\text{O}_4\text{C}_5)$ 20	$q(\text{O}_4\text{C}_3)$ 13 $q(\text{O}_7\text{C}_6)$ 16
1303	377.74	$q(\text{O}_4\text{C}_5)$ 20	$q(\text{O}_{10}\text{C}_9)$ 18 $q(\text{O}_4\text{C}_3)$ 13 $q(\text{O}_{10}\text{C}_{11})$ 15
1279	310.66	$q(\text{O}_7\text{C}_8)$	$q(\text{O}_7\text{C}_6)$ 17 $q(\text{O}_{10}\text{C}_{11})$ 15
1276	21.64		
1263	13.94		
1248	8.95	$q(\text{O}_1\text{C}_2)$ 22	
1241	20.90		
1234	70.12	$q(\text{O}_1\text{C}_2)$ 20	
1218	14.45	$q(\text{O}_{16}\text{C}_{15})$ 30	
1206	46.19	$q(\text{O}_1\text{C}_2)$ 11	$q(\text{C}_2\text{C}_3)$ 20 $\chi(\text{O}_1\text{C}_2\text{C}_3\text{O}_4)$ 11
1198	50.01	$q(\text{C}_9\text{C}_8)$ 12	
1195	54.56	$q(\text{O}_{16}\text{C}_{15})$ 23	$q(\text{C}_{15}\text{C}_{14})$ 14
1183	23.19	$q(\text{O}_4\text{C}_3)$ 12	$q(\text{C}_9\text{C}_8)$ 10 $q(\text{C}_5\text{C}_6)$ 17
1156	8.58	$q(\text{O}_{13}\text{C}_{12})$ 11	$q(\text{O}_{13}\text{C}_{14})$ 22 $q(\text{C}_{12}\text{C}_{11})$ 15
1055	45.77	$q(\text{C}_5\text{C}_6)$ 13	$\chi(\text{H}_{22}\text{C}_5\text{O}_4\text{C}_3)$ 11
1052	56.79	$q(\text{C}_9\text{C}_8)$ 14	
1025	4.64		
1010	11.56	$q(\text{C}_{12}\text{C}_{11})$ 24	
983	13.73	$q(\text{O}_1\text{C}_2)$ 12	$q(\text{C}_2\text{C}_3)$ 33 $\chi(\text{H}_{20}\text{C}_3\text{O}_4\text{C}_5)$ 13
968	17.78	$q(\text{O}_{16}\text{C}_{15})$ 24	$q(\text{C}_{15}\text{C}_{14})$ 35 $\chi(\text{H}_{35}\text{C}_{14}\text{O}_{13}\text{C}_{12})$ 26
944	5.20		
934	23.55		
923	21.22	$q(\text{O}_4\text{C}_5)$ 10	$q(\text{O}_4\text{C}_3)$ 12 $\chi(\text{H}_{18}\text{C}_2\text{C}_3\text{O}_4)$ 14
920	17.47	$q(\text{O}_{13}\text{C}_{12})$ 15	$q(\text{O}_{13}\text{C}_{14})$ 19 $\chi(\text{H}_{36}\text{C}_{15}\text{O}_{16}\text{Cl}_{39})$ 12

**BDU-nun Fizika Problemləri İnstitutunun yaradılmasının 10 illiyinə həsr olunmuş
Beynəlxalq konfrans**

702	218.44	$\chi(\text{H}_{17}\text{O}_1\text{C}_2\text{C}_3)$ 66 $\chi(\text{H}_{38}\text{O}_{16}\text{C}_{15}\text{C}_{14})$ 28
618	1.34	$\zeta(\text{C}_8\text{O}_7\text{C}_6)$ 14 $\zeta(\text{C}_{11}\text{O}_{10}\text{C}_9)$ 11
584	8.77	$\varepsilon(\text{O}_{13}\text{C}_{12}\text{C}_{11})$ 18 $\varepsilon(\text{C}_{12}\text{C}_{11}\text{O}_{10})$ 17
579	35.44	$\varepsilon(\text{O}_{16}\text{C}_{15}\text{C}_{14})$ 34 $\varepsilon(\text{C}_{15}\text{C}_{14}\text{O}_{13})$ 18
571	2.20	$\varepsilon(\text{O}_1\text{C}_2\text{C}_3)$ 31 $\varepsilon(\text{C}_2\text{C}_3\text{O}_4)$ 18
562	12.73	$\varepsilon(\text{O}_4\text{C}_5\text{C}_6)$ 13 $\varepsilon(\text{O}_{10}\text{C}_9\text{C}_8)$ 10 $\varepsilon(\text{C}_9\text{C}_8\text{O}_7)$ 14 $\varepsilon(\text{C}_5\text{C}_6\text{O}_7)$ 21
545	40.93	$\chi(\text{H}_{17}\text{O}_1\text{C}_2\text{C}_3)$ 21 $\chi(\text{H}_{38}\text{O}_{16}\text{C}_{15}\text{C}_{14})$ 44
410	0.98	$\zeta(\text{C}_{14}\text{O}_{13}\text{C}_{12})$ 37 $\varepsilon(\text{O}_{16}\text{C}_{15}\text{C}_{14})$ 15
380	0.06	$\varepsilon(\text{O}_4\text{C}_5\text{C}_6)$ 15 $\varepsilon(\text{C}_2\text{C}_3\text{O}_4)$ 11 $\varepsilon(\text{C}_5\text{C}_6\text{O}_7)$ 11
372	0.37	$\varepsilon(\text{O}_1\text{C}_2\text{C}_3)$ 14 $\varepsilon(\text{O}_{10}\text{C}_9\text{C}_8)$ 10
358	0.06	$\varepsilon(\text{O}_{13}\text{C}_{12}\text{C}_{11})$ 15
308	0.24	$\zeta(\text{C}_8\text{O}_7\text{C}_6)$ 15
275	8.02	$\varepsilon(\text{O}_{13}\text{C}_{12}\text{C}_{11})$ 16 $\varepsilon(\text{C}_{15}\text{C}_{14}\text{O}_{13})$ 22
250	1.79	$\zeta(\text{C}_8\text{O}_7\text{C}_6)$ 14 $\zeta(\text{C}_3\text{O}_4\text{C}_5)$ 12 $\chi(\text{O}_1\text{C}_2\text{C}_3\text{O}_4)$ 13
245	6.80	$\zeta(\text{C}_8\text{O}_7\text{C}_6)$ 16 $\zeta(\text{C}_3\text{O}_4\text{C}_5)$ 11 $\chi(\text{O}_4\text{C}_5\text{C}_6\text{O}_7)$ 15
228	4.16	$\zeta(\text{C}_{11}\text{O}_{10}\text{C}_9)$ 15 $\chi(\text{O}_{10}\text{C}_9\text{C}_8\text{O}_7)$ 27
216	6.15	$\chi(\text{O}_{13}\text{C}_{12}\text{C}_{11}\text{O}_{10})$ 16 $\chi(\text{O}_{16}\text{C}_{15}\text{C}_{14}\text{O}_{13})$ 41
181	3.81	$\zeta(\text{C}_3\text{O}_4\text{C}_5)$ 10 $\varepsilon(\text{C}_2\text{C}_3\text{O}_4)$ 12 $\chi(\text{O}_1\text{C}_2\text{C}_3\text{O}_4)$ 10
172	1.42	$\chi(\text{O}_{13}\text{C}_{12}\text{C}_{11}\text{O}_{10})$ 20 $\chi(\text{O}_{16}\text{C}_{15}\text{C}_{14}\text{O}_{13})$ 16
154	5.57	$\chi(\text{O}_4\text{C}_5\text{C}_6\text{O}_7)$ 12 $\chi(\text{C}_8\text{O}_7\text{C}_6\text{C}_5)$ 20 $\chi(\text{C}_3\text{O}_4\text{C}_5\text{C}_6)$ 15
146	0.38	$\chi(\text{O}_4\text{C}_5\text{C}_6\text{O}_7)$ 28 $\chi(\text{C}_{12}\text{C}_{11}\text{O}_{10}\text{C}_9)$ 15
132	6.19	$\chi(\text{C}_3\text{O}_4\text{C}_5\text{C}_6)$ 23 $\chi(\text{C}_{12}\text{C}_{11}\text{O}_{10}\text{C}_9)$ 10
98	9.69	$q(\text{Cl}_{39}\text{O}_{16})$ 23 $\chi(\text{C}_8\text{O}_7\text{C}_6\text{C}_5)$ 10 $\chi(\text{C}_9\text{C}_8\text{O}_7\text{C}_6)$ 10
80	1.01	$q(\text{Cl}_{39}\text{O}_{16})$ 18 $\chi(\text{O}_{10}\text{C}_9\text{C}_8\text{O}_7)$ 15 $\chi(\text{C}_9\text{C}_8\text{O}_7\text{C}_6)$ 12
68	0.86	$q(\text{Cl}_{39}\text{O}_{16})$ 10 $\chi(\text{C}_3\text{O}_4\text{C}_5\text{C}_6)$ 10 $\chi(\text{C}_{11}\text{O}_{10}\text{C}_9\text{C}_8)$ 10 $\chi(\text{C}_2\text{C}_3\text{O}_4\text{C}_5)$ 24
58	3.32	$\chi(\text{C}_{14}\text{O}_{13}\text{C}_{12}\text{C}_{11})$ 12 $\chi(\text{C}_{12}\text{C}_{11}\text{O}_{10}\text{C}_9)$ 19
52	0.42	$q(\text{Cl}_{39}\text{O}_{16})$ 30 $\chi(\text{C}_{14}\text{O}_{13}\text{C}_{12}\text{C}_{11})$ 12 $\chi(\text{C}_9\text{C}_8\text{O}_7\text{C}_6)$ 13
39	1.18	$\chi(\text{C}_3\text{O}_4\text{C}_5\text{C}_6)$ 11 $\chi(\text{C}_{15}\text{C}_{14}\text{O}_{13}\text{C}_{12})$ 19 $\chi(\text{Cl}_{39}\text{O}_{16}\text{C}_{15}\text{C}_{14})$ 11
29	2.69	$\gamma(\text{Cl}_{39}\text{O}_{16}\text{C}_{15})$ 12 $\chi(\text{C}_{11}\text{O}_{10}\text{C}_9\text{C}_8)$ 16 $\chi(\text{C}_9\text{C}_8\text{O}_7\text{C}_6)$ 11
20	0.11	$\gamma(\text{Cl}_{39}\text{O}_{16}\text{C}_{15})$ 12 $\chi(\text{C}_8\text{O}_7\text{C}_6\text{C}_5)$ 11 $\chi(\text{C}_{11}\text{O}_{10}\text{C}_9\text{C}_8)$ 18 $\chi(\text{C}_{15}\text{C}_{14}\text{O}_{13}\text{C}_{12})$ 12
13	0.45	$\gamma(\text{Cl}_{39}\text{O}_{16}\text{C}_{15})$ 39 $\chi(\text{C}_{14}\text{O}_{13}\text{C}_{12}\text{C}_{11})$ 30 $\chi(\text{Cl}_{39}\text{O}_{16}\text{C}_{15}\text{C}_{14})$ 14
12	0.43	$\chi(\text{C}_{15}\text{C}_{14}\text{O}_{13}\text{C}_{12})$ 24 $\chi(\text{Cl}_{39}\text{O}_{16}\text{C}_{15}\text{C}_{14})$ 38

Проведенный анализ распределения потенциальной энергии колебаний по внутренним колебательным координатам показывает, что очень интенсивные полосы поглощения 4111 и 4076 см^{-1} определяются чисто характеристическими валентными колебаниями ОН связей, а высокочастотные колебания, лежащие в интервале частот 3268÷3127 см^{-1} сосредоточены в чисто валентных колебаниях различных СН связей. Валентные колебания СО и СС связей располагаются в области 1323-923 см^{-1} . Частоты в области 1661÷1633 см^{-1} являются чисто характеристическими колебаниями изменения валентных углов НСН различных СН_2 групп. Деформационные колебания валентных углов НСО отвечают за появление полос 1444, 1432, 1402, 1398, 1320, 1381, 1375 и 1358 см^{-1} и входят в состав полос поглощения 1542 см^{-1} наряду с деформационными колебаниями угла $\text{H}_{17}\text{O}_1\text{C}_2$ и 1417 см^{-1} наряду с торсионным колебанием двугранного угла $\text{H}_{33}\text{C}_{12}\text{O}_{13}\text{C}_{14}$. Колебание угла $\text{H}_{17}\text{O}_1\text{C}_2$ встречается еще в полосе 1573 см^{-1} наряду с торсионным колебанием $\text{H}_{19}\text{C}_2\text{C}_3\text{O}_4$. Деформационные колебания валентных углов ОСС и СОС самой полиэтиленглюколевой цепочки проявляются в области частот 618÷181 см^{-1} . Чисто характеристическими деформационными колебаниями валентных углов ОСС являются полосы поглощения 584, 579, 571, 562, 380, 372, 358 и 275 см^{-1} , а углов СОС – частоты 618 и 308 см^{-1} . Неплоские колебания изменения двугранных углов НСОС являются характеристическими для полос поглощения 1564, 1535 и 1522 см^{-1} , также колебания этого типа встречаются в смеси с колебаниями изменения валентных углов НСО (1417 см^{-1}) и

растяжения связи CC (1055 см^{-1}). Неплоские колебания изменения двугранных углов $HCCO$ в смеси с другими колебаниями наблюдаются в полосах 1573 , 1358 и 923 см^{-1} . Полосы поглощения 702 и 545 см^{-1} являются характеристическими для неплоских торсионных колебаний изменения концевых двугранных углов $H_{38}O_{16}C_{15}C_{14}$ и $H_{17}O_1C_2C_3$ цепочки ПЭГ5. Неплоские торсионные колебания самой полиэтиленовой цепочки $OCCO$ отвечают за появление частот 216 и 172 см^{-1} , а колебания $CCOC$ за частоты 132 и 58 см^{-1} и в смеси друг с другом в полосах 154 и 146 см^{-1} . Также торсионные колебания такого типа колебания в смеси с колебаниями другого типа проявляются в полосах поглощения 1206 , 250 , 29 и 12 см^{-1} .

Рассмотрим колебания, обусловленные присутствием в комплексе атома хлора. 1493 и 1332 см^{-1} -это частоты, обусловленные изменением угла, образующегося при колебаниях концевой группы $H_{38}O_{16}$ полиэтиленгликолевой цепочки и атомом хлора. В этих же частотах присутствуют неплоские колебания двугранного угла $H_{37}C_{15}O_{16}Cl$. Торсионное колебание $H_{36}C_{15}O_{16}Cl$ проявляется в полосе 920 см^{-1} . Другие колебания, обусловленные наличием атома хлора, расположены в низкочастотной области спектра. Изменение при колебаниях расстояния между атомом кислорода O_{16} и хлором проявляются в частотах 98 , 80 , 68 и 52 см^{-1} , в которых также присутствуют неплоские колебания двугранных углов $COCC$ цепочки ПЭГ. Изменение при колебании угла, образованного атомом хлора с атомом кислорода $O_{16}C_{15}$ конца цепочки ПЭГ5 проявляются в частотах 13 , 20 и 29 см^{-1} , а неплоское торсионное колебание $ClO_{16}C_{15}C_{14}$ – в частотах 12 , 13 и 39 см^{-1} .

Проведенный анализ теоретического колебательного спектра комплекса ПЭГ5+Cl по данным расчета HF/6-31G(p,d) может помочь экспериментаторам для идентификации частот колебаний при исследовании экспериментальных спектров поглощения аналогичных комплексов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Демухамедова С.Д., Гаджиев З.И., Алиева И.Н., Годжаев Н.М. Исследование пространственной структуры олигомеров полиэтиленгликоля PEG4+Cl и PEG5+Cl с атомом хлора. "Opto,-nanoelektronika kondensə olunmuş mühit və uksək enerjilər fizikası" VII Respublika elmi-praktik konfransı, Bakı, 20-21 dekabr, 2013, s.259-263
2. Демухамедова С.Д., Гаджиев З.И. Электронная структура комплексов олигомеров полиэтиленгликоля ПЭГ4 и ПЭГ5 с атомом хлора. "Теоретические и прикладные аспекты современной науки" Сборник научных трудов по материалам VI Международной научно-практической конференции. г.Белгород, 2015, с.18-21

КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОГО СТРОЕНИЯ АНЗЕРИНА И ЕГО МОНОМЕРНЫХ КОМПЛЕКСОВ С ЦИНКОМ

С.Д. Демухамедова

Институт Проблем физики, Бакинский Государственный Университет

svetlanabest@mail.ru

В работе полуэмпирическим квантовохимическим методом РМ3 изучено строение природного дипептида анзерина и его мономерных комплексов с атомом цинка. Получены геометрические и энергетические параметры для изученных молекул.

Ключевые слова: анзерин, комплекс, структура, квантово-химические расчеты

Природный дипептид анзерин выполняет важные биологические функции, обладает способностью модулировать иммунную реакцию человека и во многих случаях оказывается в 2–3 раза эффективнее карнозина, от которого отличается наличием метильной группы у одного из атомов азота в имидазольном кольце. Карнозин и его производные признаны высокоэффективными антиоксидантами [1]. Анзерин в большом количестве находится в мышечных тканях человека и позвоночных животных, клеточные структуры которых предохраняет от изменений, наступающих при старении тканей. Анзерин обладает способностью образовывать координационные комплексы с различными атомами переходных металлов. В работе [2] было показано, что анзерин и особенно его комплексы с цинком обладают способностью защищать клетки ДНК от повреждений, вызванных ионизирующими излучениями.

Ранее нами была исследована пространственная и электронная структура двух таутомерных форм карнозина и их различных комплексов с атомами цинка [3–6]. Данная работа посвящена исследованию пространственной структуры молекул анзерина и их мономерных комплексов с атомом цинка в двух таутомерных формах N^1H и N^3H имидазольного кольца.

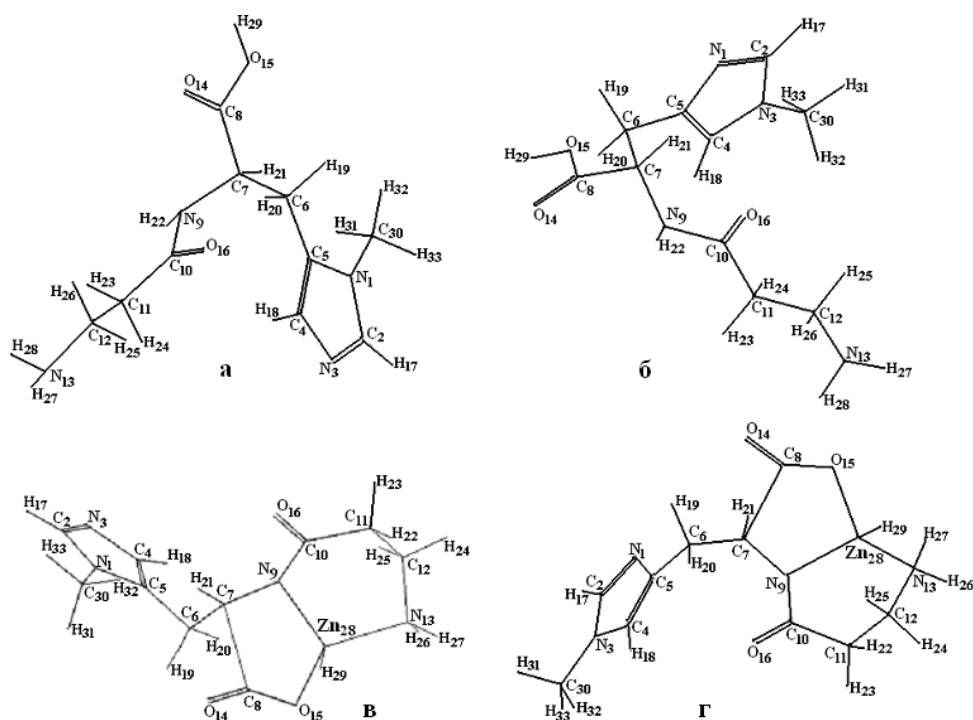


Рис.1. Низкоэнергетические конформационные состояния моделей молекулы анзерина (а,б) и ее мономерных комплексов с Zn(II) (в,г) в двух таутомерных формах N^1H и N^3H

На рис.1 приведены расчетные модели исследуемых молекул.

Расчеты проводились с использованием программы HyperChem.8.06 полуэмпирическим квантово-химическим методом PM3. Для расчета комплексов анзерина с цинком был использован нейтральный атом цинка, создающий координационные связи с атомами кислорода и двумя атомами азота гистидиновой цепочки анзерина, образуя координационную полость, состоящую из двух хелатных колец – пяти и шестичленных. Результаты расчета оптимизированных геометрических параметров - значения длин связей, валентных и торсионных углов вращения обобщены в табл.1-3.

Таблица 1.

Длины связей (Å) 2-х таутомерных форм анзерина
и их комплексов с цинком после оптимизации РМЗ

Связь	Анзери н		Комплекс анзерина с Zn		Связь	Анзери н		Комплекс анзерина с Zn	
	N ¹ H	N ³ H	N ¹ H+Zn	N ³ H+Zn		N ¹ H	N ³ H	N ¹ H+Zn	N ³ H+Zn
N1-C2	1.39	1.34	1.40	1.34	C11-C12	1.53	1.52	1.52	1.53
C2-N3	1.35	1.40	1.35	1.40	C12-N13	1.48	1.48	1.51	1.50
N3-C4	1.39	1.41	1.39	1.41	C8-O14	1.22	1.22	1.19	1.19
C4-C5	1.39	1.39	1.39	1.39	C8-O15	1.35	1.35	1.24	1.24
N1-C5	1.41	1.40	1.41	1.40	C10-O16	1.22	1.22	1.23	1.23
C5-C6	1.48	1.48	1.49	1.48	N1-C30		-	1.46	-
C6-C7	1.54	1.54	1.51	1.50	N3-C30		1.46	-	1.46
C7-C8	1.53	1.53	2.25	2.26	N9-Zn			2.04	2.03
C7-N9	1.48	1.49	1.37	1.36	O15-Zn			2.21	2.18
N9-C10	1.43	1.43	1.43	1.42	N13-Zn			2.07	2.08
C10-C11	1.52	1.52	1.53	1.53					

Добавление метильной группы к одному из атомов азота в имидазольном кольце приводит к растяжению практически всех длин связей имидазольного кольца анзерина по сравнению с ранее изученным нами карнозином [3-5] на ~0.05Å. Все длины валентных связей в имидазольном кольце анзерина ~1.39÷1.41 Å за исключением связи C₂N₃ в таутомерной форме анзерина N¹H и связи N₁C₂ в таутомерной форме N³H, которые не меняются.

Как видно из табл.1, при комплексообразовании с цинком в обоих моделях анзерина наблюдается значительная деформация в длинах валентных связей, образующих координационную полость - на 0.72Å увеличивается расстояние между атомами C₇-C₈ и на 0.11Å уменьшаются длины связей C₇N₉ и C₈O₁₅. Незначительная деформация на 0.03Å характерна для длин валентных связей C₆C₇(↓), C₈O₁₄(↓) и C₁₂N₁₃(↑).

Таблица 2.

Валентные углы (град) 2-х таутомерных форм анзерина
и их комплексов с цинком после оптимизации РМЗ

Угол	Анзерин		Комплекс анзерина с Zn		Угол	Анзерин		Комплекс анзерина с Zn	
	N ¹ H	N ³ H	N ¹ H+Zn	N ³ H+Zn		N ¹ H	N ³ H	N ¹ H+Zn	N ³ H+Zn
C ₅ -C ₆ -C ₇	113.4	112.5	111.4	111.7	N ₁ -C ₂ -N ₃	108.1	107.9	108.0	107.9
C ₆ -C ₇ -C ₈	107.7	108.0	97.4	106.8	C ₂ -N ₃ -C ₄	108.9	108.9	109.0	108.9
C ₆ -C ₇ -N ₉	113.7	112.9	117.5	126.2	N ₃ -C ₄ -C ₅	109.0	105.7	109.0	105.7
C ₇ -N ₉ -C ₁₀	121.2	121.2	121.8	129.7	C ₄ -C ₅ -N ₁	105.5	108.8	105.5	108.8
N ₉ -C ₁₀ -C ₁₁	116.0	115.5	119.5	112.8	C ₅ -N ₁ -C ₂	108.5	108.8	108.6	108.8
C ₁₀ -C ₁₁ -C ₁₂	112.2	112.5	117.8	111.9	C ₈ -O ₁₅ -Zn	-	-	110.0	111.5
C ₁₁ -C ₁₂ -N ₁₃	109.8	109.9	113.1	111.1	O ₁₅ -Zn-N ₉	-	-	89.3	90.9
C ₇ -C ₈ -O ₁₄	129.3	129.1	104.9	107.5	C ₇ -N ₉ -Zn	-	-	105.8	109.7
C ₇ -C ₈ -O ₁₅	114.5	115.0	109.3	109.6	C ₈ -C ₇ -N ₉	107.6	107.1	100.9	101.3
O ₁₄ -C ₈ -O ₁₅	116.2	116.0	145.7	142.9	O ₁₅ -Zn-N ₁₃	-	-	103.4	97.74
N ₉ -C ₁₀ -O ₁₆	118.9	119.3	120.4	124.9	C ₁₂ -N ₁₃ -Zn	-	-	100.3	108.8
O ₁₆ -C ₁₀ -C ₁₁	125.0	125.1	120.0	122.3	N ₁₃ -Zn-N ₉	-	-	98.6	106.4
C ₁₂ -N ₁₃ -H ₂₇	109.3	109.2	-	-	Zn-N ₉ -C ₁₀	-	-	121.2	113.5
C ₁₂ -N ₁₃ -H ₂₈	109.8	109.7	-	-	C ₅ -N ₁ -C ₃₀	126.2	-	126.0	-
H ₂₇ -N ₁₃ -H ₂₈	109.1	109.0	-	-	C ₂ -N ₁ -C ₃₀	125.1	-	125.5	-

**BDU-nun Fizika Problemləri İnstitutunun yaradılmasının 10 illiyinə həsr olunmuş
Beynəlxalq konfrans**

N ₁ -C ₅ -C ₆	126.5	122.7	126.0	123.3	C ₂ -N ₃ -C ₃₀		126.1	-	125.7
C ₄ -C ₅ -C ₆	127.9	128.5	128.5	127.8	C ₄ -N ₃ -C ₃₀		125.0	-	125.4

При комплексообразовании анзерина с атомом цинка образуется координационная полость, состоящая из двух хелатных колец –пяти- и шестичленного, имеющих общую координационную связь Zn-N₉. Согласно результатам расчета (табл.1) хелатные кольца в обоих комплексах согнуты относительно общей связи Zn-N₉ таким образом, что валентный угол C₇N₉C₁₀ с одной стороны связи ~125°, а угол O₁₅ZnN₁₃ с другой стороны связи Zn-N₉ ~100°, формируя структуру, в которой полость имеет вид «кресла». Отличие в валентных углах хелатных колец анзеринаN¹H+Zn и анзеринаN³H+Zn не превышает 10°. Валентные углы полости N₉-Zn-O₁₅ и N₉-Zn-N₁₃ в исследуемых комплексах принимают, как и в комплексах карнозина, значения, близкие к прямому углу. В имидазольных кольцах при комплексообразовании валентные углы не претерпевают изменений.

Таблица 3.

Торсионные углы (град) 2-х таутомерных форм
анзерина и их комплексов с цинком после оптимизации РМЗ

Угол	Анзерин		Комплекс анзерина с Zn		Угол	Анзерин		Комплекс анзерина с Zn	
C5-C6-C7-C8	178.3	174.5	152.1	156.5	N13-Zn-N9-C7	-	-	-151.8	139.3
C5-C6-C7-N9	-62.5	-67.3	101.5	-85.2	N13-Zn-N9-C10	-	-	-7.6	-14.3
C6-C7-C8-O15	-101.2	-115.4	92.1	159.0	O15-Zn-N9-C7	-	-	-48.4	41.0
C6-C7-N9-C10	102.4	118.0	158.1	-12.6	O15-Zn-N9-C10	-	-	95.8	-112.6
C7-N9-C10-C11	-164.2	122.8	166.2	-170.1	C7-C8-O15-Zn	-	-	-6.9	3.3
N9-C10-C11-C12	-149.9	-175.9	2.4	80.7	C8-O15-Zn-N9	-	-	28.0	-21.3
C10-C11-C12-N13	-176.4	-175.2	-66.5	-87.2	C8-O15-Zn-N13	-	-	126.7	-128.0
C11-C12-N13-H28	172.8	174.9	-	-	C6-C7-N9-Zn	-	-	-58.0	-160.5
C11-C12-N13-H29	-67.5	-65.8	-	-	C11-C10-N9-Zn	-	-	27.7	-23.1
N1-C5-C6-C7	-70.7	-78.9	-63.5	-64.6	C30-N1-C5-C4	-177.0	-	179.5	-
C4-C5-C6-C7	112.9	103.0	118.8	117.5	C30-N1-C2-C3	177.0	-	179.1	-
C11-C12-N13-Zn	-	-	78.7	-32.8	C30-N1-C5-C6	6.0			
C12-N13-Zn-N9	-	-	-39.5	8.8	C30-N3-C4-C5		178.1	-	-179.0
C12-N13-Zn-O15	-	-	-130.8	102.0	C30-N3-C2-N1		178.0	-	179.0

Различие в структуре двух таутомерных форм свободного анзерина и их комплексов с атомом цинка отражаются на величинах полной энергии и дипольного момента (табл.4).

Таблица 4.

Энергетические параметры и дипольные моменты 2-х таутомерных форм анзерина и их комплексов с цинком после оптимизации РМЗ

Карнозин и его комплексы с Zn	Энергетические параметры, ккал/моль				, D
	E _{полн.} *	E _{эл.}	E _{от.}	E _{св.}	
Анзерин N ¹ H	-	-	3	-	

**BDU-nun Fizika Problemləri İnstitutunun yaradılmasının 10 illiyinə həsr olunmuş
Beynəlxalq konfrans**

	68313.0	446600.7	78287.7	3282.1	.0
Анзерин N ³ H	- 68312.0	- 438295.1	3 69983.0	- 3281.2	.7
Анзерин N ¹ H+Zn	- 68548.7	- 449529.9	3 80981.2	- 3187.7	.3
Анзерин N ³ H+Zn	- 68550.8	- 442771.6	3 74220.8	- 3189.8	.2

Обе формы свободного анзерина почти равноправны по энергии, а небольшой выигрыш полной энергии на 1.0 ккал/моль в пользу формы N¹H дает электронная энергия. Комплексообразование анзерина с атомом цинка приводит к понижению энергии. Мономерные комплексы анзерина с цинком оказываются предпочтительней их свободных форм. При образовании мономерного комплекса карнозина N¹H с цинком полная и электронная энергия уменьшаются на 235.7 и 2929.2 ккал/моль соответственно, в то время как вследствие сильного отталкивания ядер атома цинка и атомов координационной полости, энергия связывания увеличивается на 94.4 ккал/моль. При образовании мономерного комплекса анзерина N³H с цинком полная и электронная энергии уменьшаются соответственно на 238.8 и 4476.5 ккал/моль, а энергия связывания увеличивается на 91.4 ккал/моль. Разность энергий между комплексами анзерина N³H+Zn и N¹H+Zn составляет 2,1 ккал/моль, что указывает на большую стабильность комплекса анзерина с цинком с формой имидазольного кольца N³H. Таким образом, полученные результаты свидетельствуют, что таутомерная форма анзерина N³H образует более устойчивый комплекс с цинком, несмотря на то, что в свободном анзерине более предпочтительной является структура с формой имидазольного кольца N¹H.

Как видно из табл.4, величина полного дипольного момента у мономерного комплекса анзерина N¹H+Zn равна 7.3 D, т.е. на 4.3 D выше величины дипольного момента свободного анзерина N¹H. Величина полного дипольного момента мономерного комплекса анзерина N³H+Zn на 1.5 D выше величины дипольного момента свободного анзерина N³H. Если у свободных молекул анзерина разница между величинами дипольных моментов двух форм составляет 2,7 D, что говорит о большей компактности молекулы анзерина N¹H, то после создания мономерных комплексов с цинком величины дипольных моментов приобретают практически одинаковые значения.

ЛИТЕРАТУРА

- 1 Болдырев А.А. Проблемы и перспективы исследования биологической роли карнозина. Биохимия, 2000, 65, № 7, 884-890
- 2 Nanan F. Ali, Laila M. Faddah, Maha Z. Rizk and Hisham El-Ebiary. Role of Anserine and/or Zinc in Modulating Nucleic Acid and Protein Disorders in Rats Exposed to Gamma Irradiation. Journal of Pharmacology and Toxicology, 2007, v.2, p.1-19
3. Демухамедова С.Д., Алиева И.Н., Годжаев Н.М., Набиев Н.С. Сравнительный анализ пространственного и электронного строения таутомерных форм карнозина и его комплексов с цинком. Journal of Qafqaz University, 2008, v.23, p.62-71
4. Демухамедова С.Д., Алиева И.Н., Годжаев Н.М., Набиев Н.С. Электронное строение молекулы карнозина и ее мономерных и димерных комплексов с цинком // Journal of Qafqaz University, 2009, v.25, p.114-126

5. S.D. Demukhamedova, I.N. Alieva and N.M. Godjayev. Spatial and electronic structure of monomeric and dimeric complexes of carnosine with zinc. J. Struct. Chem., 2010, v.51, 5, p.824-832
6. Демухамедова С.Д. Теоретическое исследование природного дипептида анзерина и его комплексов с цинком. Труды Международного форума “Клиническая иммунология и аллергология – междисциплинарные проблемы”, 2014, 14-17 мая, Казань

ЭЛЕКТРОННО-КОНФОРМАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ДЕРМОРФИНА

Г.А. Ахвердиева

Институт физических проблем, Бакинский Государственный Университет,

hagverdiguynara@gmail.com

Изучена молекулярная динамика молекулы дерморфина и определены наиболее вероятные конформационные состояния в окрестностях локальных минимумов с учетом водной среды с использованием силового поля AMBER. Электронная структура оптимальных конформаций данной молекулы исследована методом CNDO, параметризованным для расчета электронных структур биополимеров. В расчетах была использована демонстрационная версия пакета программ HyperChem.

Ключевые слова: дерморфин, конформация, молекулярная динамика, электронная структура

В предыдущих наших работах были изучены конформационные профили и конформационная динамика молекулы дерморфина (Tyr-DAla-Phe-Gly-Tyr-Pro-Ser-NH₂) [1, 2]. В представленной работе продолжено систематическое исследование пространственной структуры данной молекулы. С целью изучения устойчивости оптимальных конформационных состояний в условиях, моделирующих реальное водное окружение, была проведена молекулярная динамика дерморфина в гипотетическом объеме, содержащем молекулы воды. Молекулярная динамика выполнялась при постоянном числе частиц с использованием силового поля AMBER с помощью программного пакета HyperChem, доступного на сайте корпорации Hypercube (<http://www.hyper.com/>) [3, 4]. Была использована процедура сольватации с применением модели воды в заданном сферическом объеме TIP4P. В результате процесса симуляции определены пределы изменения двугранных углов вращения и межатомных расстояний между аминокислотными остатками. Количественная оценка межатомных расстояний показала, что при моделировании остаются неизменными дисперсионные контакты между аминокислотными остатками в первой и четвертой позициях пептидной цепи молекулы. N-концевой тетрапептидный участок молекулы сохраняет свернутую структуру на протяжении молекулярной динамики, за время симуляции расстояние между C^α-атомами указанных остатков не превышает 7Å. Структура данного участка по окончании процесса моделирования практически не отличается от начального этапа. Можно предположить, что конформационная устойчивость данного участка играет определенную роль в функциональной активности исследуемой молекулы. В то время как для N-концевого участка наблюдается жесткость, для C-концевого участка исследуемой молекулы характерен высокий уровень подвижности. За время симуляции происходит сближение атомов боковых цепей остатков Phe3 и Tyr5, в результате которого происходит образование водородной связи между гидроксильной группой остатка Tyr5 и основной цепью остатка Phe3. Такое конформационное поведение объясняется присутствием в пептидной цепи остатка Gly4, характеризующегося конформационной свободой вращения вокруг связей C^α-C^β и C^β-N, придающей определенную гибкость пептидной цепи. Отметим, что поскольку система находится в равновесном состоянии, возможные конформационные изменения являются обратимыми. Для дополнительной корреляции пространственной структуры и структурно-функциональной взаимосвязи дерморфина были изучены его электронно-конформационные свойства. С этой целью нами была исследована

электронная структура оптимальных конформаций дерморфина методом CNDO, параметризованным для расчета электронных структур биополимеров в приложении к демонстрационной версии пакета программ HyperChem [4]. При оптимизации электронной энергии в качестве нулевых приближений были рассмотрены равновесные конфигурации ядер, соответствующие геометрии оптимальных структур дерморфина. Были рассчитаны основные параметры, характеризующие электронную структуру молекулы: распределение электронной плотности, парциальных зарядов на атомах, энергий молекулярных орбиталей, электрический дипольный момент молекулы, а также ряд энергетических параметров, такие как полная энергия, энергия связывания, изолированная атомная энергия, электронная энергия, энергия ядерных взаимодействий, теплота образования, энергии высшей заполненной и низшей вакантной молекулярных орбиталей, дающих информацию об устойчивости молекулы. Установлено, что рассматриваемые конформаций характеризуется специфическим распределением электронной плотности. Следует отметить, что конформационные переходы в пределах малых значений энергии результируются флуктуациями плотности заряда на определенных группах атомов, не превышающим 18%. Во всех конформациях имеется зона высокой электронной плотности, подверженная атаке электрофильного реагента. Оптимальным конформациям дерморфина присущи низкие значения дипольного момента и энергии $E_{\text{НОМО}}$, характеризующей его электро-донорные свойства и высокие значения энергии $E_{\text{ЛУМО}}$, определяющей энергию активации. Можно сделать вывод, что низкоэнергетическим структурам свойственны незначительная химическая реакционная способность и слабые электродонорные свойства. Сопоставление рассчитанных параметров дает нам право утверждать, что наиболее устойчивому электронному состоянию дерморфина отвечают структуры, содержащие α -спираль на N-концевом пентапептидном участке, а также структуры, характеризующаяся двумя β -поворотами в полипептидной цепи. Несмотря на конформационные особенности исследуемых структур, различия в зарядах касаются в основном атомов боковых цепей остатков, входящих в трипептидный фрагмент Tyr5-Ser7 молекулы, а также атомов C-концевой амидной группы. Установлено, что распределение зарядов на атомах фармакофорных элементов (α -аминогруппы, боковых цепей остатков тирозина и фенилаланина) во всех оптимальных структурах схожее, что объясняется одинаковым их расположением в пространстве друг относительно друга. По-видимому, основным критерием биологически активных конформаций молекулы дерморфина являются общие закономерности в электронных свойствах фармакофорных элементов, связывающихся с рецептором и занимающих одинаковое пространственное расположение, что является причиной специфического распределения электронной плотности и парциальных зарядов на электроотрицательных атомах сблизившихся в пространстве участков молекулы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Haqverdiyeva G.Ə., Nəbiyev N.S., Qocayev N.M. Dermorfin molekulunun konformasiya imkanlarının tədqiqi. Elmi əsərlər-fundamental elmlər, № 4, 2002, 31-34
2. Haqverdiyeva G. Ə. Dermorfinin quruluş-dinamik xassələri. Journal of Qafqaz University, N 32, 2011, s.7-12
3. Шайтан К.В., Сарайкин С.С. Метод молекулярной динамики. [http:// www.moldyn.ru](http://www.moldyn.ru)
4. Allinger N.L., Yuh Y., QCPE 395, Quantum chemistry program exchange, Indiana Univ., Indiana, 1982

ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ ПОДХОД К РЕШЕНИЮ ПРОБЛЕМЫ СТРУКТУРА- ФУНКЦИЯ ДЕЛЬТОРФИНОВ

Г.А. Ахвердиева

Институт физических проблем, Бакинский Государственный Университет

hagverdiguynara@gmail.com

В работе представлены результаты исследования методами молекулярной механики, квантовой химии и молекулярной динамики важных аспектов структурно-функциональных отношений линейных опиоидных пептидов дельторфинов I и II. Предполагается, что механизм рецепторного связывания молекул дельторфинов заключается в образовании водородных связей с участием ионизируемых функциональных групп молекул.

Ключевые слова: дельторфины, конформация, структура-функция, фармакофорные элементы

В представленной работе применен теоретический подход к решению проблемы структура-функция опиоидных пептидов дельторфина I (Tyr-DAla-Gly-Asp-Val-Val-Gly-NH₂) и дельторфина II (Tyr-DAla-Gly-Glu-Val-Val-Gly-NH₂), имеющих высокое родство и избирательность к дельта-опиоид связывающим местам [1]. Методами молекулярной механики, квантовой химии и молекулярной динамики определены конформационные профили пептидов, геометрические, энергетические и электронные параметры стабильных состояний, а также наиболее вероятные конформационные состояния в окрестностях локальных минимумов. Полученные данные позволили изучить электронно-конформационные свойства, подвижность функциональных фрагментов и атомных групп исследованных молекул, а также влияние водного окружения на их динамические характеристики.

Установлено, что стабильность пространственной структуры дельторфинов определяется взаимным расположением фармакофорных элементов: α –аминогруппы, фенольного кольца остатка Tyr1, а также ароматического кольца остатка Phe3 и заряженных групп остатков Asp и Glu и характеризуется специфическим распределением электронной плотности, что играет важную роль при взаимодействии с рецептором. Можно предположить, что за анальгетическое действие дельторфинов ответственны стерически вероятные пространственные структуры их N-концевых тетрапептидных фрагментов, характеризующиеся конформационной жесткостью пептидного остова, стабилизирующуюся солевыми мостиками между N-концевым атомом азота и атомами кислорода боковых цепей заряженных остатков Asp и Glu, соответственно, в дельторфине I и дельторфине II. Установлено, что оптимальные структуры дельторфинов, как и дерморфина, характеризуются свернутостью основной цепи дипептидного сегмента Tyr1-DAla2. Указанное минимальное структурное требование, по-видимому, является важным для физиологической деятельности этих молекул и обеспечивает устойчивость соответствующей химической связи к действию ферментов в процессе метаболизма пептидов. Полученные данные подтверждаются работами, указывающими на то, что пептидная связь Tyr1–Xaa2 может быть ответственной за связывание опиоидных пептидов с рецептором [2]. Установлено, что в водной среде атомы в боковой цепи тирозина, связавшись с определенным числом молекул воды, ограничивают подвижность данного остатка и в целом всей молекулы. Можно предположить, что при ингибировании ферментов боковая цепь Tyr1, освобождаясь от молекул воды, участвует в

межмолекулярных контактах в роли субстрата. Это предположение подтверждается работой [3], в которой предполагается, что гидроксильная группа данного остатка может участвовать в роли донора или акцептора в установлении водородной связи с менее кислыми гидроксильными группами рецептора. Отметим, что боковые цепи остатков Val5 и Val6 проявили определенную динамичность в процессе симулирования, которая позволяет, по-видимому, участвовать им в рецепторной избирательности молекул дельторфинов. О возможной топографической роли указанных гидрофобных остатков С-концевого адресного домена, заключающейся в схожих конформационных эффектах их боковых цепей, обсуждается в работе [4].

Полученные структурные данные дают возможность предположить, что связывание молекул дельторфинов с рецепторами может осуществляться посредством водородных связей с участием протонированного атома азота, гидроксильной группы остатка Tyr¹ и карбонильных групп боковых цепей остатков Asp⁴ и Glu⁴. Похоже, что наличие отрицательно заряженной группы атомов в последовательности дельторфинов необходимо для электростатического притяжения к положительно заряженным связывающим местам δ-опиатных рецепторов (Arg292) и электростатического отталкивания от отрицательно заряженных мест μ-рецептора. Полученные структурные данные представляют интерес для объяснения на атомно-молекулярном уровне механизма физиологического действия, лежащего в основе анальгетического эффекта опиатоподобных пептидов, а также могут быть использованы при проектировании препаратов, проявляющих устойчивый и сильный анальгетический эффект.

ЛИТЕРАТУРА

1. Erspamer V., Melchiorri P., Falconieri-Erspamer G., Negri L., Corsi R., Severini C., Barra D., Simmaco M., Kreil G. Proceedings of the National Academy of Sciences of the USA, 1989, 86, N 13, P.5188-5192
2. Lodyga-Chruscinsca E., Oldziej S., Micera G. et al. Effects of tetrazole moiety on coordinating efficiency of deltorphin. Acta Biochimica Polonica, 2004, Vol. 51, N 1, p.93-106
3. Deborah L. Heyl, Stephen E. Schullery, Kutralanathan Renganathan et al. pK_a and Volume of residue one influence opioid binding: QSAR analysis of tyrosine replacement in a nonselective deltorphin analogue. Bioorganic & Medicinal Chemistry, 2003, Vol. 11 P. 3761-3768
4. Stephen E. Schullery, David W. Rodgers, David W. Rodgers, Sakambari Tripathy, et al. The role of backbone conformation in deltorphin II binding: A QSAR study of new analogues modified in the 5-, 6-positions of the address // Bioorganic & Medicinal Chemistry, 2001, Vol 9, Issue 10, p. 2633-2642

**КОНФОРМАЦИОННЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ МЕТИЛАМИДА
N – АЦЕТИЛ – L- СТАТИНА**

Р.Э. Алиев

Бакинский Государственный Университет

Кафедра оптики и молекулярной физики

rashid_aliev@mail.ru

В рамках механической модели молекулы методом атом-атомных потенциалов рассчитаны конформационные возможности метиламида N – ацетил – L – статина. Установлен набор низкоэнергетических конформаций метиламида N – ацетил – L – статина.

Статин (Sta) α- аминокислота, отличающаяся от лейцина химическим строением основной цепи и входит в состав природного ингибитора пенициллопепсина пепстатина (Iva- Val – Val – Sta – Ala –Sta) и его синтетического аналога (Iva – Val – Val – StaOEt). Для понимания стереохимических причин ингибирования пенициллопепсина необходимо знание конформационных возможностей свободной молекулы статина.

Конформационная энергия молекулы ($E_{\text{конф.}}$) представлялась нами как сумма невалентных ($E_{\text{невал.}}$), электростатических ($E_{\text{эл.}}$) взаимодействий, а также торсионных вкладов ($E_{\text{тор.}}$) и энергии водородных связей ($E_{\text{в.с.}}$)

$$E_{\text{конф.}} = E_{\text{невал.}} + E_{\text{эл.}} + E_{\text{тор.}} + E_{\text{в.с.}}$$

Невалентные взаимодействия рассчитывали по потенциалу Ленарда – Джонса с параметрами Скотта и Шераги. Электростатическую энергию рассчитывали по закону Кулона с зарядами на атомах, предложенных Момани и др. [1]. Все расчеты выполнены применительно к условиям полярной среды, поэтому величина диэлектрической проницаемости принята равной 10. Торсионные потенциалы, описывающие вращение вокруг связей основных и боковых цепей, взятые из работы Момани и др. Водородные связи, оцениваемые по потенциалу типа Морзе, предполагались ослабленными и энергии связи в воде на равновесном расстоянии принята равной 1.5 ккал/моль. Отсчет двугранных углов произведен согласно номенклатуре IUPAC – IUB [2]. Расчет оптимальных форм выполнен путем минимизации конформационной энергии при вариации двугранных углов вращения. Конформационная энергия метиламида N – ацетил – L – статина являлась функцией 11 двугранных углов вращения. Шесть углов ($\omega_1, \phi_1, \psi_1, \phi_2, \psi_2$ и ω_2) основной цепи и пять ($\chi^1, \chi^2, \chi^3, \chi^4$ и χ^5) боковой цепи статина.

Расчетная модель метиламида N- ацетил – L – статина приведена на рис.1. Длины связей и значения валентных углов взяты из данных рентгеноструктурного анализа [3]. Эта простейшая молекула, моделирующая взаимодействие основной и боковой цепей остатка, позволяет выявить конформационную специфику статина.

Расчет оптимальных форм выполнен путем минимизации конформационной энергии при вариации двугранных углов вращения. Конформационная энергия метиламида N – ацетил – L – статина являлась функцией 11 двугранных углов вращения. Шесть углов ($\omega_1, \phi_1, \psi_1, \phi_2, \psi_2$ и ω_2) основной цепи и пять ($\chi^1, \chi^2, \chi^3, \chi^4$ и χ^5) боковой цепи статина.

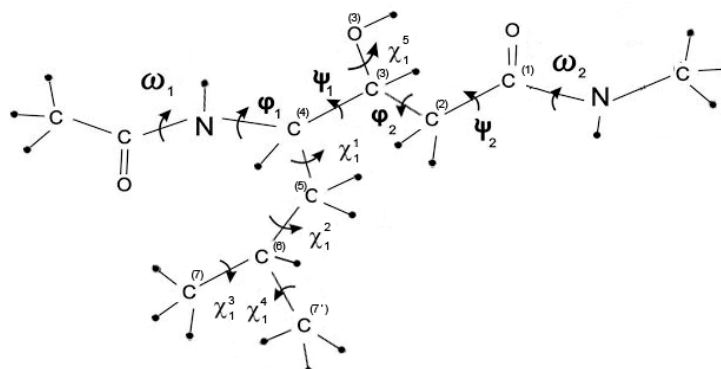


Рис.1. Расчетная модель метиламида N – ацетил – L – статина.

Таблица1.

Расчетные двугранные углы и относительные энергии оптимальных конформаций свободной молекулы метиламида N – ацетил – L – статина.

№	Конфор- мация	Двугранные углы									Энергия				
		φ_1	χ^1	χ^2	χ^3	χ^4	ψ_1	χ^5	φ_2	ψ_2	$E_{нев.}$	$E_{эл.}$	$E_{гор.}$	$E_{общ.}$	$E_{отг.}$
1	B ₂₁ - L	-126	176	61	180	170	58	176	57	67	-4.8	2.3	0.3	-6.8	0.0
2	B ₂₁ - P	-120	175	60	180	173	58	179	60	118	-4.5	2.5	0.4	-6.6	0.2
3	B ₃₂ - L	-120	-58	168	-172	180	62	178	59	66	-4.5	2.3	0.5	-6.3	0.5
4	B ₂₁ - L	-117	175	62	180	171	57	-79	176	85	-4.1	2.6	0.6	-6.1	0.7
5	B ₃₂ - P _A	-114	-57	169	-172	180	61	177	174	-88	-4.0	2.6	0.6	-6.0	0.8
6	B ₂₁ - P ₁₈₀	-117	175	62	180	171	55	176	173	-87	-3.9	2.6	0.6	-6.0	0.8
7	B ₃₂ - L _A	-115	-57	168	-171	180	61	160	177	89	-4.1	2.6	0.9	-5.9	0.9
8	B ₂₁ - L	-117	174	62	180	171	56	169	173	95	-3.8	2.5	0.6	-5.8	1.0
9	B ₃₂ - L	-114	-57	169	-172	180	61	170	174	95	-3.9	2.6	0.7	-5.8	1.0
10	R ₃₂ - L	-94	-58	172	-170	179	-63	-64	177	85	-3.9	2.5	0.7	-5.7	1.1
11	B ₃₂ - L _B	-113	-55	169	-172	179	179	-79	179	86	-3.9	2.5	0.8	-5.6	1.2
12	R ₃₂ - P ₁₈₀	-92	-55	171	-169	180	-62	177	174	-88	-3.9	2.4	0.9	-5.4	1.4
13	B ₃₂ - L	-112	-54	170	-172	179	179	168	178	95	-3.6	2.4	0.7	-5.4	1.4
14	B ₃₂ - P ₁₈₀	-113	-55	171	-173	179	179	175	178	-87	-3.6	2.3	0.5	-5.4	1.4
15	B ₂₁ - L ₁₈₀	-117	175	62	180	171	55	174	175	179	-3.1	2.6	0.4	-5.4	1.4

**BDU-nun Fizika Problemləri İnstitutunun yaradılmasının 10 illiyinə həsr olunmuş
Beynəlxalq konfrans**

16	B ₃₂ -L	-113	-56	168	-171	179	61	-	174	176	81	-3.3	-	2.7	0.6	-5.4	1.4
17	R ₃₂ -L ₁₈₀	-94	-57	172	-170	180	-63	-	170	174	94	-3.7	-	2.4	0.9	-5.2	1.6
18	B ₃₂ -L ₁₈₀	-113	-55	171	-172	179	179	-	174	179	180	-2.8	-	2.5	0.4	-4.9	1.9
19	R ₃₂ -P	-84	-62	166	-171	179	-71	-	172	66	122	-3.7	-	2.5	1.5	-4.8	2.0
20	R ₃₂ -L	-93	-55	171	-169	180	-63	-	175	176	179	-3.0	-	2.4	0.8	-4.7	2.1
21	B ₃₂ -P	-111	-52	172	-173	179	179	-	174	76	128	-3.1	-	2.4	1.1	-4.3	2.5
22	B ₃₂ -L	-108	-47	174	-172	179	179	-	171	81	64	-3.4	-	2.3	1.5	-4.2	2.6
23	R ₂₁ -L	-114	-	176	63	180	168	-83	-74	173	63	-3.0	-	2.6	1.6	-4.0	2.8

ω_1 и ω_2 придавалось значение 180° .

Поиск исходных для минимизации положений основной и боковой цепей статина был начат с построения конформационных карт $\phi_1 - \psi_1$ при девяти возможных минимумах торсионного потенциала χ^1 и χ^2 . Углы ϕ_1 и ψ_1 при расчете изменялись от -180° до 180° с шагом в 30° , а в областях низкой энергии с шагом в 5° . Причем, при вращении вокруг связей $\phi_1 - \psi_1$ не учитывались атомы C⁽¹⁾ и далее. Из девяти упомянутых конформационных карт $\phi_1 - \psi_1$ было найдено 16 низкоэнергетических значений ϕ_1 и ψ_1 были построены конформационные карты $\phi_2 - \psi_2$.

Во всех этих операциях углам ω_1 , ω_2 , χ^3 , χ^4 и χ^5 придавалось значение 180° . Из этих 16 карт были выбраны 57 нулевых приближений в качестве исходных при минимизации конформационной энергии. В таблице 1 приведены оптимальные конформации метиламида N – ацетил – L –статина. В интервал энергии 0 – 3 ккал/моль попадает 23 конформации статина. Низкоэнергетическими являются В и R формы основной цепи статина. Эти конформации могут служить исходными при изучении пространственного строения молекул, содержащих статины.

ЛИТЕРАТУРА

1. Momany F.A., Mc. Guire R. F. Burgess A.W., Sheraga H.A., Y.Chem. Phys., 1975, v.79, №22, p.2361 – 2381
2. IUPAC – IUB. Commission on Biochemical Nomenclature. Biochem. Biophys. Acta, 1971, v.229, p.1-17
3. Nakamura H., Morishima H., Takita T., Umezawa H., Titaka Y. J. Antibiotics, 1973, v.26, №4, p.255-256

КОНФОРМАЦИОННЫЙ АНАЛИЗ N-КОЦЕВЫХ ПЕНТАПЕПТИДОВ МОЛЕКУЛ ГЕМОКИНИНА-1 ЧЕЛОВЕКА И ГЕМОКИНИНА-1 МЫШИ/КРЫСЫ

У.Т. Агаева

Институт физических проблем, Бакинский Государственный Университет

ahaeva1976@mail.ru

Известно, что все процессы в живых организмах происходят с участием биологически активных молекул, содержащихся в них. Функции, выполняемые этими молекулами зависят от их пространственной структуры и возможностей их изменений. Следовательно, чтобы понять механизм процессов, происходящих в живых организмах необходимо исследовать пространственные структуры биомолекул и возможности их конформационных изменений. Исходя из этого, нами были исследованы конформационные возможности двух биологически активных молекул гемокинин -1 человека и гемокинин- 1 мыши/крысы.

Гемокинины относятся к семейству тахикининовых нейропептидов. Тахикинины играют важную роль в патогенезе бронхиальных, воспалительных и желудочно-кишечных болезней. Они обладают широким спектром физиологической активности: сокращение гладкой мускулатуры кишечника, бронхов, зрачков глаз, активация поведенческих и гормональных процессов, высвобождение других активных веществ и участвуют в переносе болевых ощущений. Известно также, что гемокинин-1 человека и его С-концевой октапептидный фрагмент угнетающе действуют на рост и дифференциацию клеток лейкемии человека и могут быть использованы при химиотерапии рака. Было показано также, что молекула гемокинина-1 человека, его фрагмент hНК-1(4-11) и гемокинина-1 мыши оказывают влияние на сердечную деятельность и на коронарные сосуды изолированной сердечной мышцы морской свинки. Изучение пространственной организации гемокининов, позволит создать препараты способные или стимулировать или блокировать физиологические процессы в лечении ряда заболеваний.

Исследование конформационных свойств молекул гемокининов проводилось методом молекулярной механики [1-6]. В данном докладе будут излагаться результаты расчета конформаций фрагмента Thr¹-Gly²-Lys³-Ala⁴-Ser⁵ молекулы гемокинина- 1 человека и Arg¹-Ser²-Arg³-Thr⁴-Arg⁵ гемокинин- 1 мыши/крысы. Этот фрагмент содержит лизин с положительно заряженным боковым радикалом, подвижный остаток глицина и два полярных остатка треонина и серина. Результаты расчета представлено в таблице 1. Как следует из этой таблицы, в интервал относительной энергии 0-1 ккал/моль вошли конформации двух шейпов- *efff* и *efef*, в интервал 0-3 ккал/моль попали конформации уже десяти шейпов, и наконец, в интервал 0-5 ккал/моль попали конформации всех 16 возможных шейпов. Такое энергетическое распределение конформаций пентапептида свидетельствует о заметной конформационной подвижности фрагмента. Следует отметить, что самыми низкоэнергетическими конформациями свободного пентапептидного участка Thr¹-Gly²-Lys³-Ala⁴-Ser⁵ оказались структуры шейпа *efff* (E_{отн.} = 0 ккал/моль).

Как следует из результатов исследования, благодаря наличию в цепи остатка глицина N-концевая пентапептидная последовательность Thr¹-Gly²-Lys³-Ala⁴-Ser⁵ оказалась относительно подвижным участком и способной образовывать как α-спиральные конформации, так и различные изгибы.

Таблица 1.

Энергетическое распределение оптимальных конформаций N-концевого пентапептидного фрагмента Thr¹-Gly²-Lys³-Ala⁴-Ser⁵ молекулы гемокинаина 1 человека.

Шейп	Форма	Интервал относительной энергии (ккал/моль)					
		0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10
<i>eeee</i>	BBBBB				1	1	25
	RLBBB						27
<i>efee</i>	BRBBB			1	-	2	24
	RPBBB		1	2	1	2	21
<i>eefe</i>	BRRBB					2	25
	RLRBB						27
<i>effe</i>	BRRBB				1	3	23
	RPRBB		1	-	2	4	20
<i>efff</i>	BBRRR		1	2	1	3	20
	RLRRR				2	2	23
<i>efff</i>	BRRRR	1	-	1	2	2	21
	RPRRR		1	1	1	3	21
<i>efef</i>	BRBRR	1	1	2	2	-	21
	RPBRR	1	1	3	1	2	19
<i>eeef</i>	BBBRR			1	1	2	23
	RLBRR						27
<i>feee</i>	RBBBB				1	-	26
	BLBBB						27
<i>ffee</i>	RRBBB				1	3	23
	BPBBB				1	1	25
<i>fefe</i>	RBRBB					1	26
	BLRBB						27
<i>fffe</i>	RRRBB			1	1	4	21
	BPRBB						27
<i>feff</i>	RBRRR			1	2	1	23
	BLRRR						27
<i>ffff</i>	RRRRR		1	6	1	2	17
	BPRRR						27
<i>ffef</i>	RRBRR				1	3	23
	BPBRR			2	-	2	23
<i>feef</i>	RBRRR				1	-	26
	BLBRR					1	26

Конформационный анализ N-концевого пентапептида молекулы гемокинаина-1 мыши Arg¹-Ser²-Arg³-Thr⁴-Arg⁵ показал несколько отличные от N-концевого пентапептида молекулы гемокинаина-1 человека результаты. Такое отличие связано с тем, что фрагмент Arg¹-Ser²-Arg³-Thr⁴-Arg⁵ содержит три остатка аргинина с положительно заряженной разветвленной боковой цепью. Аргинины в этой последовательности разделены между

**BDU-nun Fizika Problemləri İnstitutunun yaradılmasının 10 illiyinə həsr olunmuş
Beynəlxalq konfrans**

собой полярными остатками серина и треонина. Расчет показал, что энергетически предпочтительными оказались конформации только двух шейпов: *efff* и *efef*. В интервал относительной энергии 0-3 ккал/моль из 16 возможных шейпов вошли стабильные конформации лишь двух шейпов.

Таблица 2.

Энергетическое распределение оптимальных конформаций пентапептида Arg1-Ser2-Arg3-Thr4-Arg5 молекулы гемокинина-1 мышцы/крысы.

Шейп	Форма	Интервал относительной энергии (ккал/моль)					
		0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	5-10
<i>eeee</i>	BBBBB						21
<i>efee</i>	BRBBB						23
<i>eefe</i>	BBRBB						31
<i>effe</i>	BRRBB						30
<i>eeff</i>	BBRRR						25
<i>efff</i>	BRRRR	2	4	6	2	3	19
<i>efef</i>	BRBRR	1	2	3	4	2	22
<i>eeef</i>	BBBRR						18
<i>feee</i>	RBBBB						11
<i>ffee</i>	RRBBB						9
<i>fefe</i>	RBRBB				1	1	17
<i>fffe</i>	RRRBB						32
<i>feff</i>	RBRRR						27
<i>ffff</i>	RRRRR				2	4	25
<i>ffef</i>	RRBRR						14
<i>feef</i>	RBBRR					2	16

Это связано с наличием в последовательности трех остатков аргинина, межостаточные взаимодействия которых играют основную роль в стабилизации конформаций данного пентапептида. Боковые цепи аргининов участвуют в образовании водородных связей с атомами основной цепи фрагмента. Для последующего расчета были отобраны низкоэнергетические конформации, вошедшие в интервал относительной энергии 0-6 ккал с охватом по одной конформации из каждого шейпа пентапептида.

ЛИТЕРАТУРА

1. IUPAC-IUB Commission on Biochemical Nomenclature, *Biochim. Biophys. Acta* 121 (1971).
2. Н. М. Годжаев, И. С. Максумов и Л. И. Исмаилова, *Журн. структур. химии* 24, 47 (1983).
3. Г. А. Агаева, Н. А. Ахмедов и Е. М. Попов, *Молекуляр. биология* 20 (1), 164 (1987).
4. Г. А. Агаева, Н. Н. Керимли и Н. М. Годжаев, *Биофизика* 50 (2), 203 (2005).
5. Н. М. Годжаев и Г. А. Агаева, *Биофизика* 45 (4), 581 (2000).
6. Е. М. Попов, Г. М. Липкинд, С. Ф. Архипова и В. Г. Дашевский, *Молекуляр. биология* 2, 622 (1968).

ЭЛЕКТРОННО-КОНФОРМАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА МОЛЕКУЛЫ CYS-ARG-GLU-LYS-ALA

Г.Дж. Аббасова, Л.С. Гаджиева

Бакинский Государственный Университет

кафедра Оптики и Молекулярной физики

lala-h@mail.ru

Одним из актуальных направлений нанобиотехнологии является исследование процессов управляемого транспорта лекарственных препаратов и диагностических средств, осуществляемого с помощью наночастиц. Нагруженные молекулами лекарственного вещества, наночастицы способны доставлять химические соединения непосредственно к пораженным клеткам без существенного воздействия на здоровые клетки различных органов и тканей. К числу таких лекарственных препаратов, используемых в терапии опухолевых клеток с использованием наночастиц, относится соединение, состоящее из пяти аминокислотных остатков-Cys, Arg, Glu, Lys, Ala.

В данной работе с целью предоставления информации о конформационной подвижности и электронно-конформационных свойствах молекулы Cys-Arg-Glu-Lys-Ala теоретическими методами с использованием вычислительных компьютерных программ рассчитаны геометрические и энергетические параметры, определяющие устойчивые конформационные состояния молекулы [1].

Стерически допустимые изменения двугранных углов вращения вокруг связей N-C^α(φ) в основной цепи и связей C^α-C^β(χ₁), C^β-C^γ(χ₂), C^γ-C^δ(χ₃) и т. д. в боковых цепях аминокислотных остатков Cys, Arg, Glu, Lys и Ala были определены из конформационных карт, построенных в низкоэнергетических состояниях молекулы по вычислительной программе, описанной в работе [2]. Углы φ и χ₁, соответствующие локальным минимумам потенциальной поверхности монопептидов варьировались в энергетическом поле всей молекулы, основная цепь которой фиксировалась в соответствии с координатами атомов в одной из низкоэнергетических конформаций молекулы. Отсчет двугранных углов вращения проводился согласно стандартной номенклатуре IUPAC-IUB [3].

Низкоэнергетические конформации стабилизированы водородными связями, в образовании которых участвуют боковые цепи остатков с противоположно заряженными функциональными группами Arg2 и Glu3 (табл.1). В образовании водородных связей участвуют также атомы водорода пептидной группы (NH) основной цепи Cys1 и карбоксильной группы боковой цепи глутаминовой кислоты (Glu3), атомы пептидной группы в основных цепях остатков Glu3 и Ala5.

Таблица 1.

Водородные связи в низкоэнергетических конформациях
молекулы Cys-Arg-Glu-Lys-Ala

*Конформация	Водородная связь	Длина водородной связи, Å	Энергия водородной связи, ккал/моль
1	N ^o H(Arg2)...CO O(Glu3)	2.7	-0.18
2	NH (Glu3)...COO(Glu3) CO(Glu3)...NH(2.5 2.7	-0.34 -0.18

**BDU-nun Fizika Problemləri İnstitutunun yaradılmasının 10 illiyinə həsr olunmuş
Beynəlxalq konfrans**

	Ala5)		
3	N ^o H(Arg2)...CO O(Glu3)	2.3	-0.54
4	N ^o H(Arg2)...CO O(Glu3)	2.9	-0.11
5	N ^o H(Arg2)...CO O(Glu3)	2.8	-0.15
6	NH(Cys1)...COO (Glu3) NH(Arg2)...COO (Glu3)	1.9 2.2	-1.25 -0.76
7	NH(Cys1)...COO (Glu3)	2.1	-1.05
8	NH(Cys1)...COO (Glu3) NH(Arg2)...COO (Glu3)	2.1 2.0	-1.05 -0.94
9	N ^o H(Arg2)...CO O(Glu3)	2.4	-0.42
11	NH(Arg2)...COO (Glu3)	2.3	-0.50

Согласно результатам расчета, глутаминовая кислота играет существенную роль в формировании стабилизирующих контактов, так как участвует как в невалентных взаимодействиях, так и в электростатических контактах с соседними по цепи остатками. Найденными нами 12 низкоэнергетических конформационных состояний молекулы, могут быть использованы для изучения конформационной динамики и структуры ее аналогов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Farokhzad O.C., Cheng J.J., Teply B.A., Sherifi I., Jon S., Kantoff P.W., Ritchie J.P., Langer R. 2006. Targeted nanoparticles–aptamer bioconjugates for cancer chemotherapy in vivo. *Proc. Nat. Acad. Sci.* **103**, 6315-6320.
2. Максумов И.С., Исмаилова Л.И., Годжаев Н.М. 1983. Программа полуэмпирического расчёта конформаций молекулярных комплексов на ЭВМ. *Журнал структурной химии*, **24**, 147-148.
3. IUPAC-IUB, Quantity, Units and Symbols in Physical Chemistry. 1988. Blackwell Scientific Publications, Oxford, **39**.