

ISSN 2521-6368

Volume 2
Number 1
2018

Journal of Baku Engineering University

P H Y S I C S

Journal is published twice a year
Number - 1. June, Number - 2. December

An International Journal

<http://journal.beu.edu.az>

Founder

Havar Mammadov

Editor-in-chief

Niftali Qocayev

Co-Editor

Baba Gassumov

Editorial advisory board

Eldar Qocayev (Azerbaijan, Technical University)
Eldar Masimov (Azerbaijan, Baku State University)
Eyyub Guliyev (Azerbaijan, National Academy of Sciences)
Farhad Rustamov (Azerbaijan, Institute of Physical Problems)
Izzet Efendiyeva (Azerbaijan, Baku State University)
Larisa Ismayilova (Azerbaijan, Institute of Physical Problems)
Kerim Allakhverdiyev (Azerbaijan, National Aviation Academy Of Azerbaijan)

Mahammadali Ramazanov (Azerbaijan, Baku State University)
Mirzeli Murguzov (Azerbaijan, Azerbaijan Pedagogical University)
Namiq Ahmedov (Azerbaijan, Institute of Physical Problems)
Nagif Nabiyev (Azerbaijan, Baku State University)
Sajida Abdulvahabova (Azerbaijan, Baku State University)
Shaig Nebiyev (USA, NASA)
Razim Bayramov (Azerbaijan, Baku Engineering University)

International Advisory board

Ahmed Abdimov (Azerbaijan, Baku State University)
Aydin Kazimzade (Azerbaijan, Baku State University)
Anar Rustamov (Germany, Hote Frankfurt University)
Ali Javan (USA, Massachusetts Institute of Technology)
Adil R. Abduragimov (USA, University of California, Los Angeles)
Amrulla Mamedov (Turkey, Bilkent Universit)
Faig Mikailzade (Turkey, Gebze Technical University, Kocaeli)
Irada Aliyeva (Azerbaijan, Baku State University)
Garib Murshudov (York Akademy, UK, London)
Hamed Sari-Sarraf (USA, Texas Technik University)
Eden Mamut (Romania, Black Sea Universitetes Network Center)
Elsen Veli Veliyev (Turkey, Kocaeli University)
Edil Eyoazov (Azerbaijan, Azerbaijan Pedagogical University)
Kamran T. Mahmudov (University of Lisbon, Portugal)
Kev Salihov (Tataristan, Kazan University)
Khalil Kälantär (Displays and Optical Technologies, Japan, Tokio)
Konstantin Voldemarovich Shaitan (Russia, Moskov State Unvrersity)
M.IqbalChoudhary (University of Karachi, Pakistan)
Natiq M. Atakishiyev (Universidad National Antonoma de Mexico)
Nizami Gasanliy (Middle East Technical University, Turkey)
Oktai Gassumov (Azerbaijan National Academy of Sceince, Baku)
Oguz Gulseren (Bilkent University, Turkey)

Olgun Guven (Turkey, Hacettepe University)
Rasim Mamedov (Azerbaijan, Baku State University)
Rauf Jafarov (Azerbaijan, Institute of Physical Problems)
Sebahattin Tuzemen (Turkey, Ataturk University)
Sevim Akyuz (Turkey, Istanbul University)
S.V. Chernyshenko (Germany, Koblenz University)
Suleyman.I.Allakhverdiev (Russian, Akademy Science, Moscow)
Takhmasib Aliyev (METU, Ankara, Turkey)
Taleh Yusifov (University of California, USA, Los Angeles)
Tariel Ismayilov (Azerbaijan, Baku State University)
Tarlän Efendiyev (Belarus, National Academy of Science)
Tatyana Birshteyn (Russia, National Academy of Science)
Toshi Nagata (Japan, National Institute for Natural Science)
V. Thavasi (Singapore, National University of Singapore)
Vanin A.F. (Russia, National Academy of Science)
Vagif Nasirov (Azerbaijan, Azerbaijan Pedagogical University)
Vladimir Pashenko (Russia, Moskov State University)
Veli Gusseyinov (National Academy of Science, Baku, Azerbaijan)
Vladimir Gorbarchuk (Poland, Lyubel Polytechnic University)
Yusuf Sahin (Turkey, Ataturk University)
Yusif Nurullayev (Azerbaijan, Institute of Physical Problems)

Executive Editors

Shafag Alizade

Assistant Editors

Ulker Agayeva

Lala Hajiyeva

Design

Ilham Aliyev

Contact address

Journal of Baku Engineering University
AZ0102, Khirdalan city, Hasan Aliyev str. 120, Absheron, Baku, Azerbaijan
Tel: 00 994 12 - 349 99 95 Fax: 00 994 12 349-99-90/91

e-mail: jr-physics@beu.edu.az

web: <http://journal.beu.edu.az>

facebook: [journal Of Baku Engineering University](https://www.facebook.com/journalofbakuengineeringuniversity)

Copyright © Baku Engineering University

ISSN 2521-6368

ISSN 2521-6368



Journal of Baku Engineering University

PHYSICS

Baku - AZERBAIJAN

Journal of Baku Engineering University

PHYSICS

2018. Volume 2, Number 1

CONTENTS

Elastic Scattering Hadrons at Large Impact Parameters <i>S.G. Abdulvahabova, N.Sh. Barkhalova, T.O. Bayramova</i>	3
Electric Quadrupole Transitions in Nucleons Clusters Transfers <i>I. G. Afandiyeva</i>	11
Laser Radiation Attenuator on the Basis of A³B⁶ Layered Semiconductor Connections <i>V.M. Salmanov, A.G. Kyazim-Zade, A. H. Huseynov, R.M. Mammadov, A.A. Salmanova, F.Sh. Ahmadova, N.D. Dashdamirova</i>	18
Трёхмерная структура аналогов глипролиновых тетрапептидов <i>Л.И. Исмаилова, Р.М. Аббаслы, Н.А. Ахмедов</i>	26
The Effect of γ-Radiation on Structural Transformations in Cu_{2-x}Ni_xS (x = 0.05, 0.1, 0.15, 0.2) Crystals <i>A.G. Rzayeva¹, V.İ. Nasirov¹, H.B. Ibrahimov², A.P. Abdullayev</i>	33
First-principle Study Ferromagnetism for ZN Vacancy States in ZN_{1-x}CR_xO, ZN_{1-x}V_xSNAS₂ and ZNMN_xSN_{1-x}AS₂ Compounds <i>G. Orudzhev, V. Jafarova, S. Huseynova</i>	36
α_1-Meson Spin 3/2 Δ-Baryons Coupling constant from the Soft-Wall ADS/QCD Model <i>Huseynova N.J</i>	41
Внутренняя и внешняя неустойчивость в низкоразмерных проводящих средах электронного типа носителей заряда <i>Гасанов Э.Р., Мустафаева Р.К., Гаджиева В.М.</i>	48
AB Initio исследование структуры и ик-спектра олигомера полиэтиленгликоля ПЭГ5 <i>S.D. Demukhamedova, Z.I. Hajiyev, N.M. Qocayev</i>	54
“AB Initio” Numerical Model of Ferroelectric Phase Transition in GeTe crystal: I. Selfconsistent Band Structure Calculation of Getecrystal using Pseudopotential method <i>Baba Gasimov</i>	63
Трёхмерная структура молекулы гипотензивного пептида новокинина <i>Агаева Г.А., Агаева У.Т., Годжаев Н.М.</i>	68
On the Phase Transitions in Nuclear Collisions and the Early Universe <i>A. Rustamov, J. N. Rustamov</i>	74
The Influence of Solar Activity on the Discovery of Periodic Comets of the Saturn Family <i>Ayyub Guliyev, Hazi Gasimov</i>	85

UOT 539.12-17PACS 25.40-Ep

ELASTIC SCATTERING HADRONS AT LARGE IMPACT PARAMETERS

S.G. ABDULVAHABOVA, N.Sh. BARKHALOVA, T.O. BAYRAMOVA

Baku State University

Baku, AZERBAIJAN

sajida.gafar@gmail.com

ABSTRACT

The work is dedicated to consequences of analyticity and unitarity of the scattering amplitude. Using the Gaussian quasipotential an equation for the scattering amplitude matrix is obtained and formula is derived for the cross sections. The dependence of the cross section and ratio of the real part of the amplitude in the forward scattering to its imaginary part of on the momentum t is discussed. The steep Gaussian peak for cross section at small angles is followed by the exponential (Orear) regime. In this region, the real part of the amplitude can be large and negative in comparison with its imaginary part according to the unitarity condition. Results from theoretical approach are compared with experimental data.

Key words: quasipotential, scattering amplitude, unitarity, cross section, impact parameter.

ЭЛАСТИЧНОЕ РАССЕЙЯНИЕ АДРОНОВ ПРИ БОЛЬШИХ ПРИЦЕЛЬНЫХ ПАРАМЕТРАХ

РЕЗЮМЕ

Работа посвящена следствиям вытекающим из аналитичности и унитарности амплитуды рассеяния. Используя гауссовский квазипотенциал, получено уравнение для матрицы амплитуды рассеяния и формула для сечения. Обсуждается в прямом рассеянии зависимость сечения и отношения действительной части амплитуды к ее мнимой части от импульса t . Крутой гауссовский пик для поперечного сечения под малыми углами сопровождается экспоненциальным (Ореарским) режимом. В этой области действительная часть амплитуды может быть больше и отрицательной по сравнению с ее мнимой частью в соответствии с условием унитарности. Результаты теоретического подхода сравниваются

Ключевые слова: квазипотенциал, амплитуда рассеяния, унитарность, эффективное сечение, прицельный параметр.

ADRONLARIN HƏDƏF PARAMETRİNİN BÖYÜK QIYMƏTLƏRİNDƏ ELASTİKİ SƏPİLMƏSİ

XÜLASƏ

İş səpilmə amplitudunun analitiklik və unitarlıq xassəsindən alınan nəticələrə həsr olunmuşdur. Qauss tipli kvazipotensialdan istifadə edilərək səpilmə amplitudunun matrisası və effektiv kəsik üçün ifadələr alınmışdır. İrəliyə səpilmədə effektiv kəsiyin və amplitudun həqiqi və xəyali hissələrinin nisbətinin impuls t -dən asılılığı tədqiq edilmişdir. Eninə kəsiyin kiçik bucaqlarda kəskin Gauss zirvəsinin eksponensial (Orear) rejimə keçməsi göstərilmişdir. Bu oblastda amplitudun həqiqi hissəsi xəyali hissəyə nəzərən böyük və mənfi qiymətlər alır ki, bu da unitarlıq şərtinin nəticəsidir. Nəzəri yaxınlaşmadan alınan nəticələr təcrübi qiymətlərlə müqayisə edilmişdir.

Açar sözləri: kvazipotensial, səpilmə amplitudu, unitarlıq, effektiv kəsik, hədəf məsafəsi.

1. Introduction

A theoretical analysis of the angular distribution of the fragments arising from the break-up of the projectile by the nuclear and interaction with the target is very useful and necessary for the experimental investigations. More useful would be the exclusive experiments where the scattering process of the projectile is separated from the background of other reactions by means of the coincidence detection of the two outgoing fragments together with a simultaneous measurement of their energies [1].

In the theory of diffraction, the reaction is considered as a quantum mechanical process due to the fact that different components of the wave function of the incident hadron have a different probability of interaction with the target [2r]. As a result, the wave function is distorted. If we expand it over a complete set of functions, after collision, it contains not only the initial hadron function and other states of the incident particle. In this case we are talking about those components of the wave function for which the probability of interaction with the target is small, i.e. In the course of the collision, only a small part of the target is excited (an elastic collision with only one of its constituent particles). Since otherwise the quark wave function of the target will lose its coherence and the target will decay into a large number of secondary hadrons. To do this, we must use the "point" component of the wave function of the incident hadron. This is possible in the following cases: - quarks and gluons are at a small distance from each other and the scattering cross section is very small; - go into the field of large impact parameters. In particular, has been the touchstone of the theory since its first derivation, showing a remarkable agreement between the predicted and experimental structure of the angular scattering distribution. The analysis of hadron-nucleus cross sections in the diffraction approximation can be used to extract information on the scattering amplitude parameters. For this it will be necessary to measure the hadron-nucleus cross sections at various incident-hadron energies.

According to the model developed in [3], when the de Broil wavelength of the incident particle is much smaller than the size of the target nucleus, the interaction of each incident particle with the nucleus can be considered as a process of interaction along a narrow tube inside the nucleus, whose distance from the center of the nucleus is determined by the impact parameter b . In this paper, we discuss the cross section of elastic scattering for the region of large impact parameters b .

2. The amplitude of elastic scattering

We will discuss some aspects of nucleon-nucleon collisions without physical overlap, i.e. collisions with impact parameters, b , larger than the sum of the nuclear radii, R , i.e. $b > 2R$. Particles can be produced in these collisions through an interaction of the fields of the nuclei. The interactions can involve both the electromagnetic and nuclear fields, but because of the short range of the nuclear force, purely nuclear processes are suppressed for $b > 2R$.

If the momentum transfers from the nuclei are small enough ($q < kc/R$), the fields both nuclei couple coherently to all nucleons. This enhances the cross sections and gives the events a unique signature, which can be used for identification. The restrictions on the momentum transfer do not prevent the production of heavy systems, however, in high-energy collisions.

The scattering of hadrons at high energies is a multiparticle process, as a result of which the unitarity condition reduces to an unsolvable infinite chain of interlocking equations. One of the methods that would allow us to construct an elastic scattering amplitude that satisfies at least the two-particle unitarity condition is the use of a quasipotential [4].

The quasipotential in space configuration depends on the velocity and is nonlocal. In addition, it depends on the total energy of the system and is a complex function. Choosing a quasipotential in the form of a smooth, local (in configurational space) function that depends on energy, with a positive definite imaginary part, it is possible to correctly describe the basic properties of hadron scattering at small and large angles [5,6].

The potential description of scattering with a given quasipotential permits a description region of the phase shifts of individual iteration which are essential in the transition from the

description region of momentum transfer to the Orear region. The probability description can be considered as a justification for the introduction of smooth quasipotentials into field theory, and in addition it appears to be more promising for describing scattering with momentum transfers comparable with energy.

As a concrete example, we choose a quasipotential in the form of a Gaussian

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

corresponding to a purely imaginary amplitude of diffraction scattering. In (1) the parameter a characterizes the effective interaction radius, which depends on the energy. With increasing energy, the parameter a increases logarithmically: $a = a_0 + lns$. The local quasipotential (1) has a positive definite imaginary part and is a smooth non-singular function of r which satisfies all of the principles enumerated above and also the requirement of diffractive behaviour at small transferred momenta. The advantage of Gaussian Potential is that it is very flexible. In contrast to analytic potentials, the accuracy of Gaussian potential can be improved by adding more quantum mechanical data at various points in configurational space without changing the fit globally. The flexibility of the fit ensures that the best possible fit is achieved for any given data [7].

In the representation of invariant variables (Mandelstam variables) the standard relationship of the scattering amplitude f with the differential cross section of elastic scattering has the following form

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

The scattering amplitude is analytic not only in the s plane, but also in the t plane.

In the description of elastic diffraction, it is convenient to use the eikonal model, the advantage lies in the fact that in an explicit form it leads to the observance of the unitarity condition for the scattering amplitude. If the energy of the incident particle is sufficiently large, so that the wavelength $\lambda = \kappa^{-1}$ is small in comparison with the characteristic dimensions of the interaction region R (where R is the nucleus radius), i.e. $kR \gg 1$, the so-called high-energy approximation is well-suited to explain the scattering of such particles.

The high-energy or eikonal approximation is widely and successfully used to describe the scattering of particles also in complex nuclei as scattering in a certain optical continuous medium. In this approximation, instead of the law of conservation of energy, the law of conservation of the momentum projection on the direction \mathbf{k} takes place: $\mathbf{p}\mathbf{k} = \text{const}$. This means that the movement in the transverse directions is completely neglected. In addition, in this approximation, no restrictions are imposed on the masses and coordinates of the particles, both the finite radius and the recoil are considered exactly. Therefore, the eikonal approximation can be used to calculate the differential cross sections for both direct and exchange processes. In addition, in the eikonal approximation, the effect of distortions is taken into account only in the phase of a plane wave. Therefore, the high-energy approximation can be used to calculate the angular distributions of scattered particles.

For the hadron scattering amplitude at high energies, it is very convenient to pass from expansion in partial waves to the representation of the impact parameter b

$$f(s, b) = i \int b db \left(1 - \exp \left[-\frac{i}{m} \int_{-\infty}^z V(b^2 + z'^2) dz' \right] \right) \quad (3)$$

Such a recording of the amplitude in the high-energy region is not based on a specific mechanism of interaction. The entire dynamics of the process in the eikonal models should be introduced by specifying a specific kind of eikonal [8]:

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

here the parameters μ_0 and a_0 have the meaning of the reduced mass and the interaction radius:

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

In the eikonal approximation, the characteristic scattering angle is determined by the quantity $\theta \leq \tilde{\lambda}/b$.

(3) can be expressed in terms of the eikonal

$$f(s,t) = i \int b db (1 - \exp[i\chi(s,b)]) J_0(b\sqrt{-t}), \quad (6)$$

where J_0 is the Bessel function.

We note that the function $f(s,b)$, which determines the amplitude for purely nuclear scattering according to Eq. (6), is virtually equal to unity within the nucleus, both in the case of antinucleon scattering, and in that of nucleon scattering. This means that for these particles the nucleus acts as an absolutely black sphere (in the central region) with a diffuse boundary.

At high energies, each value of b corresponds to its partial wave $l = b\sqrt{s}/2$ and the unitarity condition has the form

$$2 \operatorname{Im} f(s,b) = |f(s,b)|^2 + \varphi_{in}(s,b), \quad (7)$$

here $\varphi_{in}(s,b)$ is the contribution of inelastic channels, i.e. probability of inelastic interaction at a point b .

The total collision cross section and the inelastic scattering cross section are determined as follows

$$\sigma_{tot} = 4\pi \int \operatorname{Im} f(s,b) b db, \quad \sigma_{in} = 2\pi \int \varphi_{in}(s,b) b db. \quad (8)$$

The differential cross section for elastic scattering is related to the amplitude as follows

$$\frac{d\sigma(s)}{dt} = \left[\operatorname{Re} f(s,t)^2 + \operatorname{Im} f(s,t)^2 \right]. \quad (9)$$

The elastic scattering amplitude must satisfy the general principles of analyticity and unitarity.

After simple calculations for the differential cross section for elastic scattering, we obtain

$$\frac{d\sigma}{dt} = \left(\frac{d\sigma}{dt} \right)_{t=0} \exp\{2[a(t) - 1] \ln(s/s_0)\}. \quad (10)$$

The differential cross sections of binary processes (in particular, the elastic pp scattering reactions), according to formula (10), are concentrated in a narrow region of transmitted momentum $|t|$, whose width decreases logarithmically with increasing energy. This phenomenon in elastic processes is usually called the reduction of the diffraction cone. Reduction of the cone of the angular distribution was observed experimentally in all binary reactions.

The total cross section is related to the imaginary part of the scattering amplitude according to the optical theorem

$$\sigma_{tot} = 4\pi \int \text{Im } f(s,b) b db = \frac{\text{Im } f(0)}{s} \quad (11)$$

In the b representation the total cross section increases with increasing s as

$$\sigma_{tot} \propto \ln^2 s. \quad (12)$$

Due to the fact that with increasing energy the cross section grows in the logarithmic approximation, as s increases, it is necessary to note that the distance at which the collision probability is not yet small increases with increasing according to the law

$$r(\ln s) = a \ln s + d - c \ln s, \quad (13)$$

where a, d, c are constants. The cross section with amplitude $f(s,b)$ and with radius (13) is a disc with radius $r \propto \ln s$. Inside the disk ($b < r$) $\text{Im } f \rightarrow 1$, and at the periphery of the disk ($b > r$) $f \propto \exp(-2m_\pi(b-r))$. This behaviour ensures the correct position of the nearest feature of the t channel $t = 4m^2$.

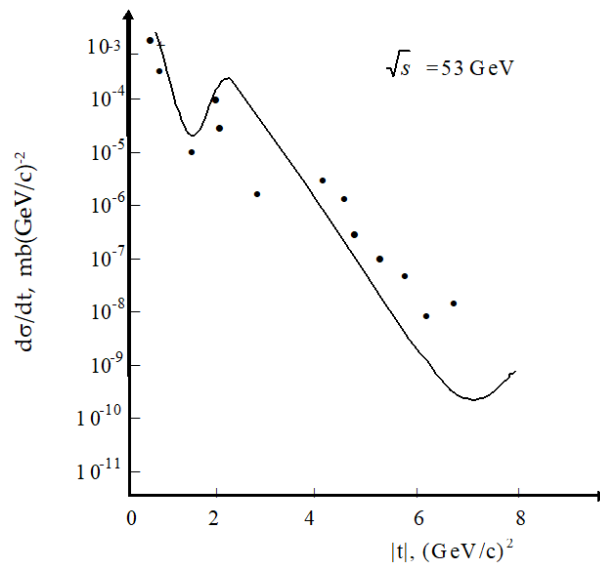
The amplitude can be expanded in a series b containing only even powers of the regularity condition for the Fourier-Bessel transform of the function (6):

$$f(s,t) = is \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\exp(a|t|/n)}{n!n} \left(-\frac{4\pi^2 \mu}{a} \right)^{n-1}. \quad (14)$$

On the basis of the obtained formulas, we first consider proton-proton scattering.

For $t \approx -\frac{2}{a} \ln\left(\frac{a}{\pi^2}\right)$ the contribution of the second term in the expansion (14) is comparable with the first term. Therefore, a second minimum must appear in the differential cross section. This fact is confirmed by the known experimental data [9,10r] for measuring the differential cross section for elastic pp scattering at $\sqrt{s} = 53 \text{ GeV}$. The parameters are adjusted to experimental data. As can be seen from Fig.1, the model predicts the first minimum at $\sim 1.2 (\text{GeV}/c)^2$ and the second minimum at $\sim 7.0 (\text{GeV}/c)^2$.

Fig. 1. Dependence of the differential cross section of an elastic pp scattering from. Points-experimental data from [9,10r].



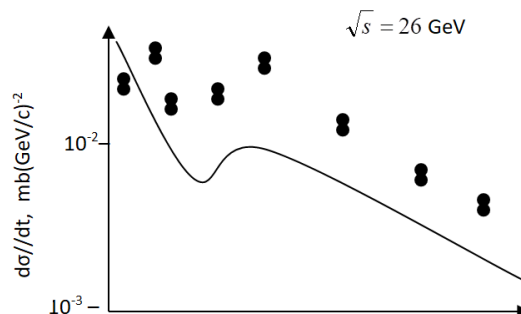
There are three minimums for the cross section in the experiment. The first and third coincide with the theoretical values, but the second minimum does not exist on the theoretical curve. Undoubtedly, the imaginary part of the elastic scattering amplitude dominates at small angles in the diffraction cone and the problem of the behaviour of the real part of the amplitude of elastic scattering for nonzero momentum transfers becomes very relevant.

One might think that the discrepancy is due to the fact that at high energies because of intense meson formation, all phases become complex and the nuclear amplitude - forward scattering is almost completely imaginary. In this case, the scattering can be represented as due to the action of the one-pion exchange potential. In the paper [11], proton-proton elastic scattering was studied in the framework of one pion exchange model and a scalar theory in an attempt to simulate nucleon-nucleon interactions covering a large energy range. When the models were compared with the available total cross-sectional data, it was found that the scalar theory best fits the data below the laboratory momentum of 0,5 GeV. However, compliance with high-energy data is not as good as it was found in a very low momentum region.

In Fig. 2 compares the results of calculations using formula (11) with experimental data for the scattering cross section $p^9\text{Be}$ [12]. The solid line corresponds to the cross-section calculated from equation (11), the points correspond to the experimental data.

It can be seen from Fig. 2 that the model of a composite nucleon leads to a satisfactory agreement between the calculated cross section and its t -dependence and experimental data. As in the usual eikonal approach, at large $|t|$ values are predicted $d\sigma/dt$ (Fig.1. and Fig.2) that are significantly smaller than in the experiment. In addition, there is no pronounced minimum in the experiment. The experimental cross section has a slight inflection at $|t|=0.4$ (GeV/c)². The unitarity condition predicts an exponential fall for the differential cross section with additional substructure to occur exactly between the low momentum transfer diffraction cone and high momentum transfer. As can be seen from the Fig.2, the steep Gaussian peak at small angles is followed by the exponential (Orear) regime with some shoulders and dips and then by the power-law drop. It is known that the ^9Be nucleus does not have spherical symmetry, and one of the reasons may be a significant deformation of the nucleus, which has a significant quadrupole moment $Q = 53$ mb.

Fig.2. Differential cross section for $p^9\text{Be}$ scattering. The solid line corresponds to the cross-section calculated from equation (11), the points correspond to the experimental data from [12].



We made very simple assumptions about the structure of the nuclei and indicated the main theoretical considerations for detailed calculations. Depending on the number of nucleons, the number of channels influencing the decay channel increases. If deformed nucleus, the deformation also affects the process. Other reasons are an increase in the ratio of the real part of

the elementary scattering amplitude to the imaginary one and the presence of some incoherent scattering channels. Accounting for all of these factors sharply increases the complexity of the calculations. Therefore, this article did not take into account the role of deformation and number of channels.

It follows from (9) that the ratio of the real part of the amplitude in the forward scattering to its imaginary part

$$A(s,t) = \frac{\text{Im } f(s,t)}{\text{Re } f(s,t)}, \quad (15)$$

must tend to zero in the asymptotic as s increases. A definite relation between the real and imaginary parts of the amplitude is valid for a certain energy interval.

As we can see, the real part of the amplitude can over exceed at large momentum transfers, according to the unitarity condition. In this region, the real part of the amplitude can be large and negative in comparison with its imaginary part. We note that $A(t)$ vanishes and becomes negative. This result agrees with the general theorem on the change in the sign of the real part of the elastic scattering amplitude at high energies [13]. But on the other hand, the decrease in $A(t)$ with an increase in t is unsatisfactory.

In explaining the energy dependence of the hadron-hadron scattering cross section, the t -channel exchange picture is more adequate, which for high energies was formulated in the form of the Regge model. Diffraction scattering in the Regge model is described by the exchange of a pomeron-a vacuum moving pole in the complex plane of the angular momentum. But this model also can not explain all the data. (s, t) -dependence of the differential cross sections and the ratio $A(t)$ in a wide energy range and momentum transfers can not be solved without introducing fitting parameters.

3. Conclusion

In this paper we carried out a study on the basis of the continued unitarity method in which the main equation for the scattering amplitude is the elastic unitarity condition, analytically continued to the region above the first inelastic threshold. Here we considered only the Gaussian potential. Nevertheless, the physical interpretation of the results suggests [14r], that the qualitative scattering pattern described in the main features is valid for a larger class of strong potentials that decrease rapidly at infinity.

We have made very simple assumptions regarding the structure of the nuclei and pointed out the main theoretical considerations for detailed calculations. More specific structure effects, such as e.g. resonances, are expected to appear on a background parameterized by the above equations. The availability of experimental data in the near future will certainly arouse interest on the detailed investigation of such effect. Such experiments would give valuable information on disintegration reactions and about the distribution of the nuclear density in the nuclear surface. At high energies both the electromagnetic and the nuclear interaction between projectile and target will be important. Far from being a drawback, this can be of utility to extract complementary information about these different reaction mechanisms in the peripheral collisions. A decomposition of these mechanisms from the analysis of angular distribution of the fragments or from the dependence of the cross sections on the energy, charge and mass parameters is possible in accurate measurements.

There are many models, but it is still difficult to give preference to any one of them. Most models are successful at the introduction of different assumptions. It is essential how to achieve improvement of existing models: by avoiding simplifying assumptions or looking for new physical arguments that would make the model more realistic and save it from simplifications. It is from this point of view that one should approach the analysis of the further development of the model of hadron scattering, caused by new experimental facts.

REFERENCES

- [1] C.A. Bertulani and G. Baur, *Coincidence cross Sections for the dissociation of light ions in high-energy collisions*. N. Ph, 1988, A 480, 615- 628.
- [2] N. P. Zotov, V. A. Tsarev, *Difraktsionnaya dissosiasiya*:Sov. Phys.Uspexhi, 1988, 31 (2), 119–139.
- [3] D. Kiang, S.H.Ling, K.Young, C.S. Lam, *Multiplicity distribution in hadron-nucleus scattering*. Phys.Rev. D, 1985, 31-35.
- [4] A.A. Logunov and A.N. Tavkhelidze, *Quasi-optical approach in quantum field theory*. Nuovo Cim. 1963, 29, (2), 380-399.
- [5] Yu.D. Chernichenko Form factor for a two-particle system within a relativistic quasipotential approach: Case of arbitrary masses and of a vector current. *Physics of Atomic Nuclei*, 2015, Vol. 78, (2), 201–214.
- [6] W. Ulmer. *A new calculation formula of nuclear cross-section of therapeutic protons*. *Jour Proton Ther.* 2015;1:117. DOI: <http://dx.doi.org/10.14319/jpt.11.7>
- [7] Bartók-Pártay, DOI: 10.1007/978-3-642-14067-9,7, *Springer-Verlag Berlin Heidelberg*, 2010, p. 83.
- [8] S.G. Abdulvahabova, E.A. Rasulov, *Proceeding of International workshop “Quantum particles, fields and strings” Fizika*, 2002, (3), 83- 85.
- [9] H.S. Hans. *Nuclear Physics: Experimental And Theoretical*. New Age Pulisher, 2001, p.787
- [10] N. P. Zotov, S.V. Rusakov, V. A. Tsarev. *Uprugoye rasseyaniye protonov na protonax pri visokix energiyax i bolshix peredannix impulsax*. PEPAN, 1980, V.11(5), 1160-1223.
- [11] Ryan B. Norman, Frank Dick, John W. Norbury and Steve R. Blattnig. *Differential Cross Sections for Proton-Proton Elastic Scattering NASA/TP*, 2009, 215565, p. 87.
- [12] G.D. Alkhazov, S.L. Belostotsky, A.A. Vorobiev. *Scattering of protons by light nuclei*. Preprint LINP-449, 1978, p. 11.
- [13] A. Martin, *Froissart bound for inelastic cross sections*. *Phys. Rev. D*, 2009, 80, 065013.
- [14] I. M. Dremin, *Elastichnoye rasseyaniye adronov*. *Uspexhi Fizicheskikh Nauk*, 2013, 183 (1), 3-32

UOT 539.12-17PACS 25.40-Ep

ELECTRIC QUADRUPOLE TRANSITIONS IN NUCLEONS CLUSTERS TRANSFERS

I. G. AFANDIYEVA

Azerbaijan State University of Oil and Industry

Baku/ AZERBAIJAN

E-mail: irada.e@mail.ru

ABSTRACT

Based on the theory of clusters discussed the electric quadrupole transitions in two-nucleon transfers reactions as (t, p) . The study did not take into account the interaction between the particles of the association. and the internal structure of the clusters is neglected. Study was carried out with the distorted plane waves of proton and of triton. The results are given in the work related to the analysis of the matrix element of the electric quadrupole transitions. Shown that, in the two-nucleon transfer reactions, the low-lying 0^+ levels will be more strongly excited in nuclei in which the single-particle quadrupole transitions near the Fermi surface have the same sign. This report demonstrated via some examples how the nuclear magnetic and quadrupole moment are sensitive to some features in the nuclear structure.

Key words: nucleon cluster, matrix element, electric quadrupole transitions.

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ КВАДРУПОЛЬНЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ПЕРЕДАЧАХ НУКЛОННЫХ КЛАСТЕРОВ

РЕЗЮМЕ

На основе теории кластеров обсуждались электрические квадрупольные переходы в двухнуклонных реакциях как (t, p) . В исследовании не учитывалось взаимодействие между частицами кластеров и внутренней структурой кластеров пренебрегается. Исследование проводилось с искаженными плоскими волнами протона и тритона. Полученные результаты применяются к анализу матричного элемента электрических квадрупольных переходов. Показано, что в реакциях переноса двух нуклонов низлежащие 0^+ уровни будут более сильно возбуждаться в ядрах, в которых одночастичные квадрупольные переходы вблизи поверхности Ферми имеют один и тот же знак. Приведенные примеры свидетельствуют о том, что ядерный магнитный и квадрупольный моменты чувствительны к некоторым особенностям ядерной структуры.

Ключевые слова: нуклонные кластеры, матричный элемент, электрические квадрупольные переходы.

NUKLON KLASTERLƏRİNİN ÖTÜRÜLMƏSİNDƏ ELEKTRİK KVADRUPOL KEÇİDLƏRİ

XÜLASƏ

Klaster nəzəriyyəsinə əsasən (t, p) tipli ikinuklonlu reaksiyalarda elektrik kvadrupol keçidlərinə baxılmışdır. Tədqiqatda klasterin zərrəcikləri arasında qarşılıqlı təsir və quruluşları nəzərə alınmamışdır. Proton və tritonun dalğa funksiyaları təhrif olunmuş dalğalar kimi kötürülmüşdür. Alınmış nəticələr elektrik kvadrupol keçidlərinin matrisa elementlərinin təhlilinə tətbiq edilmişdir. Birzərrəcikli kvadrupol keçidləri Fermi səviyyəsində eyni işarəyə malik olduqda 0^+ səviyyələrinin ikinuklonlu ötürülmə reaksiyalarında daha güclü həyəcanlanması göstərilmişdir. Verilən nümunələr nüvənin maqnit və elektrik momentlərinin nüvənin quruluşunun müəyyən xüsusiyyətlərindən asılılığını sübut edir.

Açar sözlər: nuklon klasterləri, matrisa elementləri, elektrik kvadrupol keçidləri.

1. Introduction

The idea of nucleons clustering has a history back to the early thirties of the last century. By observing alpha decay from nucleus, people speculated that nuclei are made up of alpha particles. Bethe in his paper [1] predicted that nuclei are made of alpha particles and gave also a geometrical arrangement of alpha particles inside nuclei. He predicted that, for each new

addition of alpha particles, the number of bonds increased is three. At that time, this was too a big challenge for the clustering models and eventually these models disappeared from the nuclear structure theories. Clustering is a recurrent feature in light nuclei, from beryllium to nickel. In light nuclei, the nucleons have been observed to cluster together forming substructures within the atomic nucleus, for states where the nucleons are only just bound together. Cluster structures are typically observed as excited states close to the corresponding decay threshold; the origin of this phenomenon lies in the effective nuclear interaction, but the detailed mechanism of clustering in nuclei has not yet been fully understood. If we are taking into account the interaction between nucleons (as it is in reality) in the model approach, we can expect the formation of clusters. Calculations showed that, the associations occur on the surface of the nucleus, where the density of nuclear matter less than in the downtown nucleus [2].

Since the formation of associations, most likely on the surface area of the nuclei, then to study them in the first place it is necessary to carry out studies of nuclear processes, extending to the surface of the nucleus. These are direct nuclear reactions. The association effect is significant when the scattering particles with light nuclei have intermediate-energy and it appears the stronger the higher the energy of the incident particle. The information obtainable from bineutron cluster stripping reactions is different from that obtained from single-nucleon transfer reactions; from the latter only the single particle character of the levels is obtained. The sets of data obtained from the single and two nucleon transfer reactions are both valuable, and they are mutually complementary. The analysis of the former kinds of reactions has already reached a satisfactory enough stage to furnish quantitative information about nuclear structure.

The two-nucleon transfer reactions also, have taken on great importance, because they are to be very sensitive to nuclear spectroscopy. The task of the proton-triton or triton-proton scattering is the simplest problem in the nucleon - nucleus interaction or interaction of a particle with a complex structure, which has been studied for a long time and its solution, developed highly effective calculation schemes.

In this paper, we obtained the expression for matrix element for electric quadruple transition. Considered energy region lies below the threshold meson production and the impulse approximation is used. It is assumed that the amplitude of the interaction of nucleons of the incident nucleus with the nucleons of the target nucleus are the same as in the case of a collision free nucleons.

2. Matrix element of electric quadruple transitions

Consider the $t + A \rightarrow B + p$ reaction in the laboratory system and we will study the knocking out bineutrons cluster. Let \vec{r}_p , \vec{r}_{n_1} and \vec{r}_{n_2} coordinates of the proton and neutron in the triton, \vec{k}_p - free proton wave vector, \vec{k}_t - wave vector of triton. In (t, p) reactions occur dissipative phenomena, i.e. the dissipation in the orbital angular momentum of a reaction in which part of the relative angular momentum of \mathbf{L}_i , characterizing the initial trajectory, transform into spin of fragments in accordance with the expression $\Delta\mathbf{L} = \mathbf{L}_A - \mathbf{L}_t \equiv \mathbf{L}_B + \mathbf{L}_p$.

We will neglect the internal structure of the associations and effects of the Pauli principle between the nucleons in the clusters are taken into account by introducing short range repulsion between the clusters. The orthogonality condition model and excluded state model treat the clusters as elementary particles, but include effects of the Pauli principle in a more microscopic way. Wheeler's resonating group method is a fully microscopic theory for calculating

properties of cluster systems. It makes simplifying assumptions about the internal structure of the clusters but takes the Pauli principle explicitly [3].

Scattering may be accompanied by transitions between different states of the LJ , compatible the conservation the total angular momentum. However, the orbital angular momentum and spin are not good quantum numbers and the partial wave corresponding to a certain L and S , may cause scattered wave with $L' \neq L, S' \neq S$. If we take into account that the good quantum numbers are the total angular momentum and parity, the amplitude of the scattered waves form a matrix, the elements of which depend on the following indices: J, L and S .

In the scheme of connection $\mathbf{I}_t + \mathbf{L} = \mathbf{j}, \mathbf{I}_A + \mathbf{j} = \mathbf{J}$, due to the statistical nature of the dissipation of angular momentum transmitted $\Delta\mathbf{L}$ not completely polarized, and the back can be decomposed into alignment J and fluctuation J' components, ie, from

$$\langle J_x \rangle = \langle J_y \rangle = 0, \quad \langle J_z \rangle = J_0.$$

The transmitted $\Delta\mathbf{L}$ orbital angular momentum is basically alignments and increases with the loss of kinetic energy. This transfer of angular momentum takes place in two ways: as the inelastic excitation of core as certain multipole and nucleons occupying certain orbital in the initial and the residual nucleus. Thus it is possible to put the physical problems of the dissipation of energy and angular momentum on the distribution $\Delta\mathbf{L}$ between fragments and the orientation of each fragment, characterized by the ratio J/J' depending on such typical reaction parameters such as energy, deflection angle.

This is an illustration of the fact that the clusters of the nucleons are compatible with the Young scheme of the orbital part of the wave function if this scheme contains the maximal number of fourgroups.

The wave function of the initial state can be written as [4]

$$\Psi_i = \Psi_A(\xi) F_t(\vec{r}_t) f^S(\vec{r}, \vec{\rho}) \chi_{1/2, m_t}, \quad (1)$$

where $\Psi_A(\xi)$ the wave function of the nucleus A , $F_t(\vec{r}_t)$ - distorted wave function of the triton, \vec{r}_t the radius vector in the centre of inertia of triton, $f^S(\vec{r}, \vec{\rho})$ -the wave function of the internal motion of triton, $r = |\vec{r}_{n_1} - \vec{r}_{n_2}|$, $\vec{\rho}$ - distance from the proton to the centre of gravity bineutrons cluster, S indicates the spin state of the captured neutrons, $\chi_{1/2, m_t}$ -spin function of the triton. Bineutron association in the triton is different from free nucleons, as they are surrounded by other nucleons. This field leads to a change in the association properties compared with the free neutrons [5].

The wave function of a nucleus A consisting of N bineutron clusters has the form:

$$\Psi_A = \hat{A} \left\{ \begin{array}{l} P_i(R_1 \dots R_N) x \\ \exp \left[-\frac{a}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (r_{ij} - R_i)^2 - 2b \sum_{l=1}^N R_l^2 \right] \chi(\sigma\tau) \end{array} \right\} \quad (2)$$

where $\hat{A} = \sum_p (-1)^p P$ the antisymmetrization operator (here the sum over all $A!$ permutations of the nucleons of the nucleus); P_i is a polynomial of degree n_i that defines the shell configuration of the nucleus, parity, total orbital angular momentum, its projection, etc. of the state; $\chi(\sigma\tau)$

- spin-isospin function; \mathbf{r}_{ji} is the radius vector of the j -th nucleon in the l -th binucleon association; $R_l = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^2 r_{jl}$ and $x = b/a$ parameter of isolation. For $x \rightarrow 1$, the wave function (2) goes over into the shell function.

The final state function describes the state of the nucleus B consisting of A and bineutrons cluster and the free movement of a proton. It can be represented as:

$$\Psi_f = \Psi_B(\xi) f(\vec{r}_p) \chi_{1/2, m_p}, \quad (3)$$

where $f(\vec{r}_p)$ - distorted function of the proton, $\chi_{1/2, m_p}$ - the spin function of the proton.

The matrix element of the quadrupole transition has the following form

$$M = \frac{\langle \Psi_i | \hat{Q} | \Psi_j \rangle}{\sqrt{N_i N_j}}, \quad (4)$$

where

$$\hat{Q} = \sum_{i=1}^A r_i^2 Y_{20}(\theta, \varphi_i), \quad (5)$$

- quadrupole moment operator; N_i and N_j the normalization integrals.

The main feature of the integrals appearing in expressions (4) is that the wave function of the relative movement and distorted waves also depend on the relative different combinations of variables.

Furthermore, they are presented in nucleon variables. The problem of separation of variables is very important because of its solution depends on the possibility of analytical calculation of integrals over the angular variables, as well as for those variables that are not associated with the interaction of particles.

The operator \hat{Q} is not symmetric in all nucleons, since it acts only on the variables of the protons. Taking into account the contribution of the spin or isospin part of the operator G does not cause any special difficulties. This problem is solved in the same way as in the shell model.

The quadrupole transition operator in the Jacobi variables can be written as follows:

$$\hat{Q} = 2R^2 Y_{20}(r) + \sum_{l=1}^A \left\{ r_l^2 Y_{20}(r_l) + \frac{1}{2} u_l^2 Y_{20}(u_l) + \frac{1}{2} v_l^2 Y_{20}(v_l) \right\}, \quad (6)$$

where variables the Jacobi variables describe the motion of bineutrons inside the l cluster:

$$u_l = r_{l1} - r_{l2}; \quad v_l = r_{l1} + r_{l2}. \quad (7)$$

The term containing the quadrupole moment of the center of mass of the nucleus is discarded, since it does not correspond to any real physical transition of the nucleus from one state to another, but leads to excitation of the center of mass of the nucleus.

Since antisymmetric functions are in the (4) and the operator \hat{Q} is symmetric with respect to the nucleons, then we can write

$$M = \frac{A! \langle \hat{A} \Psi_i | \hat{Q} | \Psi_j \rangle}{\sqrt{N_i N_j}}. \quad (8)$$

Taking into account the form of the operator \hat{Q} , it is possible to represent (8) in the form $A!$ of terms, one of which is a direct integral and has the form $\langle \Psi_i | \hat{Q} | \Psi_j \rangle$, and the remaining exchange ones - $\langle P \Psi_i | \hat{Q} | \Psi_j \rangle$.

Let us consider the calculation of the matrix element for the quadrupole transition $0^+ \rightarrow 2^+$ in $^{234}\text{U}(t,p)^{236}\text{U}$:

$$M(E2) = \frac{74! \langle \hat{A} \Psi_{00} | \hat{Q} | \Psi_{20} \rangle}{\sqrt{N_{00} N_{20}}}, \quad (9)$$

where

$$\Psi_{00} = \left\{ \exp \left[-\frac{74!a}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^2 \frac{1}{2} (u_{ij}^2 + v_{ij}^2) - \frac{1}{2} b \sum_{l=1}^N R_l^2 \right] \chi(\vec{\sigma}, \vec{\tau}) \right\} x \quad \text{and} \\ x F_t(\vec{r}_i) f^S(\vec{r}, \vec{\rho}) \chi_{1/2, m_t} \quad (10)$$

$$\Psi_{20} = \Psi_{20}(\xi) f(\vec{r}_p) \chi_{1/2, m_p}. \quad (11)$$

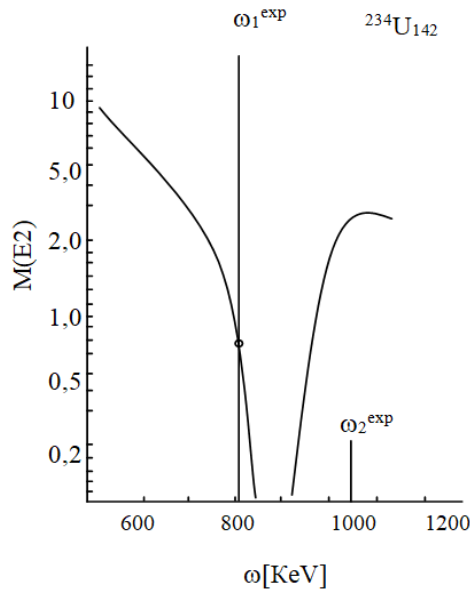
In view of the fact that a large number of single-particle states are taken into account in calculations, the effective charge for dineutrons is assumed to be zero for quadrupole transitions.

Substituting (10) and (11) into (9) for the matrix element, we obtain for direct integral

$$M(E2) = \pi^2 2^{-\left(L+2+\frac{n+n'}{2}\right)} \left(1 - \frac{q^2}{4sp} \right)^{-1/2(3+n+n')} x. \quad (12)$$

$$F\left[\frac{1}{2}(L-n); \frac{1}{2}(L-n'); L+3/2; \frac{q^2}{4sp}\right] / x^{7/2}$$

Fig. 1 shows the $M(E2)$ value for transition from the excited to the ground state. The solid line corresponds to the matrix element calculated by Eq. (12), point data from [6].



Thus the strong population in two nucleons reactions of the excited states in the actinide region can be associated with the density distribution of single - particle levels and the alignment of the corresponding quadrupole moments in the vicinity of the Fermi surface of these nuclei.

In Fig. 1 shows the $M(E2)$ value for transition from the two excited to the ground state. The solid line corresponds to the matrix element calculated by Eq. (12) point data from [6]. Break-down of the E2-additivity for strongly interacting protons and neutrons. Only in the weak coupling limit it is possible to describe the empirical quadrupole moment for a composed proton-neutron state as a linear combination of the respective proton- and neutron-quadrupole moments. If the experimental quadrupole moment of a composed state does not agree with the empirical additivity value, it can be an indication that there is a strong interaction between the protons and the neutrons. In that case, the wave function cannot be decoupled into its proton and neutron part only. In this paper all the calculations were based on non-relativistic quantum mechanics. But at sufficiently high energies become significant inelastic processes associated with the formation of mesons.

The problem, in the solution of such problems is the separation of variables, since it affects the possibility of analytic computation of integrals over the angles, as well as for those variables that are not related to the interaction of particles. Therefore, the ability to describe the interaction between nucleons via potential is limited by high energy. Such a restriction on energy means that the unambiguous definition of the potential at small distances impossible.

3. Conclusion

For an explanation of two-nucleon transmission there are different approaches, each of which is treated properly, some but not all aspects of these transitions. Among these aspects: the use of the exact wave functions of triton and the corresponding exact interaction; accurate interpretation of the limited domain of interactions in the amplitude of both the first and second order; explanation of non-orthogonality of the amendment to the term of the second order, which seeks to eliminate the amplitude of the first order. In addition, all the results are very sensitive to potentials and the wave functions of the kernel used for the transition matrix.

The article was used approaching zero radiuses with the assumption that there is not take into account the exchange of nucleons between the two nuclei, and that the target nucleus is not excited. Then, we were limited by the fact that the internal states incident t , emitted p , and any intermediate state associations are fully balanced S -states, so that the corresponding sequential interaction of transmission are diagonal in the spin states of nuclei. With this reasoning radial wave functions two neutrons which form association close to one another, particularly in the peripheral region of the nucleus where there is a "cross-linking" of the wave functions of nucleons - target (A) and in the nucleus B .

However, we would like to emphasize once again that before we modify the nuclear model it is necessary to investigate the reliability of the spectroscopic factors extracted from the relative excitation cross sections in the reactions of two-nucleon transfers, that is, to investigate the mechanism of reaction.

In the two-nucleon transfer reactions, the low-lying 0^+ levels will be more strongly excited in nuclei in which the single-particle quadrupole transitions near the Fermi surface have the same sign.

This report demonstrated via some examples how the nuclear quadrupole transitions are sensitive to some features in the nuclear structure.

REFERENCES:

- [1] M. Freer, *Scholarpedia*. 2010, 5 (6): 9652.
- [2] D. Jenkins, S. J. Courtin, *Clustering in stable and exotic light nuclei*. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 2010, 42, 034010.
- [3] D. M. Brink J. *History of cluster structure in nuclei*. Phys.: Conf. Ser. 2008, 111, 012001.
- [4] S.G. Abdulvahabova, R.A. Ahmedov, I.G. Afandiyeva, *Journal of Physical Science and Application. (US)*, 2015, V 5, N.2, p. 158-162.
- [5] Y. A. Berejnoj, V. P. Mikhayluk, *Alfa klasterizatsiyav prosessax rasseyaniya chastis i leqkix yader yadrami. PEPAN*, 2008. 39 (2), p. 437-506.
- [6] J.V. Maher, et al. *(p,t) reactions in actinide nuclears*. Phys. Rev. Lett. 1970, 25, p. 302-308.

UOT: 621.315.592PACS: 72.40.+w

LASER RADIATION ATTENUATOR ON THE BASIS OF A³B⁶ LAYERED SEMICONDUCTOR CONNECTIONS

V.M. SALMANOV¹, A.G. KYAZIM-ZADE¹, A. H. HUSEYNOV¹, R.M. MAMMADOV¹,
A.A. SALMANOVA², F.Sh. AHMADOVA¹, N.D. DASHDAMIROVA¹

¹Baku State University, Baku, AZERBAIJAN,

²Azerbaijan State University of Oil and Industry, , Baku, AZERBAIJAN

AZ1148, Z.Xalilov st., 23, E-mail: vagif_salmanov@yahoo.com

ABSTRACT

Electroabsorption spectra of GaSe, GaS, InSe crystals, solid solutions GaS_{0.5}Se_{0.5} and GaSe crystals doped with boron GaSe (B) atoms have been investigated experimentally. The absorption edge in GaSe shifted toward longer wavelengths by 16 nm under an applied field as low as 1·10³ V/cm. A similar shift in InSe is 76 nm at 3.7×10¹ V/cm. A continuous He-Ne laser light (λ=632,19 nm) and YAG:Nd³⁺ laser pulses (λ=1060 nm) could be modulated up to 100% intensity by a ~20 V applied voltage. The red shift is much higher than that evaluated on the base of a Franz-Keldysh mechanism and have a thermal origin. It should be noted that the proposed device can also be used as an effective cut-off filter, for example, in the study of luminescence or photostimulation, when it is necessary to separate the useful signal from the signal generated by powerful excitation radiation.

Keywords: GaSe, InSe, GaS, lasers, absorption, optical filters.

ОСЛАБИТЕЛИ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ОСНОВЕ СЛОИСТЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СОЕДИНЕНИЙ А³В⁶

АННОТАЦИЯ

Экспериментально исследованы спектры электропоглощения в кристаллах GaSe, GaS, InSe, твердых растворов GaS_{0.5}Se_{0.5} и в кристаллах GaSe, легированных атомами бора GaSe(B). Под действием внешнего электрического поля 10³ В/см, край полосы поглощения GaSe смещается в стороны длинных волн на величину 16 нм. Аналогичный сдвиг в InSe составляет 76 нм при 37 В/см. Интенсивности непрерывного He-Ne (632,19 нм) лазера и импульсного YAG:Nd³⁺ (1060 нм) лазера могут быть модулированы до 100% при приложенном к образцам внешнего электрического напряжения ~ 20 В. Сдвиг край полосы поглощения в исследованных веществах под действием внешнего электрического поля намного больше, чем приложенных в теории Франца – Келдыша и имеет тепловое происхождение с наличием положительной обратной связи. Предлагаемое устройство также может быть использовано в качестве эффективного отрезающего фильтра, например, при исследовании люминесценции или фотостимуляции, когда необходимо отделить полезный сигнал от сигнала, генерируемый мощным лазерным излучением.

Ключевые слова: GaSe, InSe, GaS, лазеры, поглощение, оптические фильтры.

A³B⁶ LAYVARI YARIMKEÇİRİCİLƏR ƏSASINDA LAZER ŞÜALARININ İNTENSİVLİYİNİN ZƏİFLƏDİCİSİ

XÜLASƏ

GaSe, GaS, InSe kristallarında, GaS_{0.5}Se_{0.5} bərk məhlullarında və bor (B) elementi ilə aşqarlanmış GaSe kristallarında elektroudma spektrləri tədqiq edilmişdir. 10³ V/sm xarici elektrik sahəsinin təsiri ilə udmanın uzun dalğalı kənarı uzun dalğalı tərəfə 16 nm-ə qədər sürüşür. analogi sürüşmə InSe-də 37 V/sm-də 76 nm təşkil edir. GaSe kristallarından keçən He-Ne (632.19 nm) lazerinin kəsilməz və YAG:Nd³⁺ (1060 nm) lazerinin impulsu şüalanmasının intensivliyi kristala təbiiq olunan elektrik sahəsinin təsiri ilə 100% -ə qədər modullaşdırıla bilər. Xarici elektrik sahəsinin təsiri ilə udmanın uzundalğalı kənarın sürüşməsi Franz-Keldiş nəzəriyyəsi əsasında hesablanan qiymətdən daha böyükdür və sürüşmənin termik təbiətli olduğu göstərilir. Udmanın uzundalğalı kənarının elektrik sahəsinin təsiri ilə sürüşməsi əsasında hazırlanmış qurğu lazer şüalanmasının intensivliyini modilyasiya etmək üçün istifadə olunur.

Açar sözlər: GaSe, InSe, GaS, lazerlər, udulma, optik filtrlər.

1. Introduction

From numerous publications on various scientific and technological applications of lasers, it is known that laser radiation has a super-strong electromagnetic field much higher than the intra-atomic electric fields E_a ($E_a \sim 10^9$ V/cm). If you focus a laser beam that transfers energy E in time τ (pulse duration) to a spot with area S , then the generated energy flux density will be determined by the formula [1]

$$q = \frac{E}{S\tau} \quad (1)$$

It's clear that, it can be increased by increasing the beam energy and / or reducing the duration of the laser pulse. From a technical point of view, it seems quite affordable to receive $\sim 10^3$ J in the beam of energy in less than picosecond (10^{-12} s) times, although lasers with energies of several megajoules ($\sim 10^6$ J) and femtosecond durations (10^{-15} s) and even attoseconds (10^{-18} s). The reduction of the focal spot area is limited by diffraction - its minimum area is approximately equal to the square of the laser wavelength λ (for visible light it is $\sim 10^{-8}$ cm²). So, with the help of a laser, the beam of which focuses on a spot of such an area, it is possible to obtain energy flux densities of more than 10^{28} W/cm² ($E \sim 100$ kJ, $S = 10^{-8}$ cm², $\tau \sim 10^{-15}$ s). The intensity of laser radiation, at which the electric field intensity in the beam is compared to the intra-atomic one, is $6.9 \cdot 10^{16}$ W/cm².

In order to imagine what kind of energy flows we are talking about, we recall that the flow of solar energy on the surface of the Earth averages $\sim 1.4 \cdot 10^2$ W/cm². At flows of $10^6 \div 10^7$ W/cm², melting and evaporation of solids occur, and at $10^{10} \div 10^{11}$ W/cm², electrical breakdown of gases and the formation of plasma. A laser beam with $q \sim 10^{14}$ W/cm² is used to heat the plasma to temperatures of tens and hundreds of millions of degrees and initiate thermonuclear reactions in it.

Laser radiation has a high intensity (power), which is directly impossible to direct to the object under study, otherwise, depending on the power, one of the above processes may occur: melting, evaporation of a substance, plasma formation, etc. Therefore, one of the main issues of laser technology is the manufacture of laser attenuators, which allows smoothing down the intensity of laser radiation to the desired, minimum value, without distorting the pulse shape.

Currently, to attenuate the radiation of lasers used various sets of neutral filters, mechanically adjusted slits and diaphragms, optical polarizers and integrating spheres are used for attenuating laser radiation, specifically, He-Ne laser radiation with a wavelength of 632,8 nm and YAG:Nd laser radiation with a wavelength of 1060 nm. All these methods have certain disadvantages. For example, slits and diaphragms change the geometry of the beam cross section, filters have a limited dynamic range of regulation and polarizers may cause a beam shift. The same drawbacks are inherent in integrating spheres, to a certain degree [2]. In addition, it was shown in [3] that infrared interference filters based on ZnSe crystals with addition of tellurium allow the edge of the absorption band and transmission spectra to change with temperature. However, it should be noted that these filters are not intended for laser radiation. On the other hand, a temperature change in the range of 300–80 K leads to a slight shift in the edge of the absorption band (the temperature shift coefficient is negative and is equal to $-25A^0/^\circ C$).

These disadvantages can be easily eliminated with a relatively simple attenuator of the intensity of transmitted laser radiation. Its operation is based on the effect of the shift of the long – wavelength edge of an optical absorption band in layered – chain crystals under the

action of an electric field [4-7]. Gallium and indium selenide are a typical representative of these crystals.

GaSe and InSe crystals belong to the A^3B^6 family of semiconductor compounds and have a layered structure [8]. The structure of these crystals consists of successively packed layers, each of which contains four tightly connected atomic planes Se-Ga(In)-Ga(In)-Se. The bond between the layers is a weak van der Waals bond, while the covalent bond dominates along the layers.

Due to the peculiarities of the structure and chemical bonds, these single crystals possess unique physical properties. The weak Van der Waals bond between the layers allows for cleavage along the cleavage plane and obtain samples with thicknesses down to a fraction of a micron with natural mirror surfaces. The relatively small value of the absorption coefficient ($\alpha \sim 10^3 \text{ cm}^{-1}$) allows working with resonators $\sim 10 \text{ }\mu\text{m}$ in length. The band gap widths of GaSe ($E_g \sim 2.02 \text{ eV}$) and InSe ($E_g \sim 1.24 \text{ eV}$) are in the range of generation frequencies of most lasers operating in the visible and near infrared spectral regions (YAG:Nd³⁺, Ar, He-Ne, Rb lasers, liquid dye lasers, etc.).

In this work, the influence of the electric field on the edge of the absorption band of GaSe, GaS, InSe crystals, solid solutions GaS_{0.5}Se_{0.5} and GaSe crystals doped with boron GaSe(B) atoms is experimentally investigated.

2. Experimental method

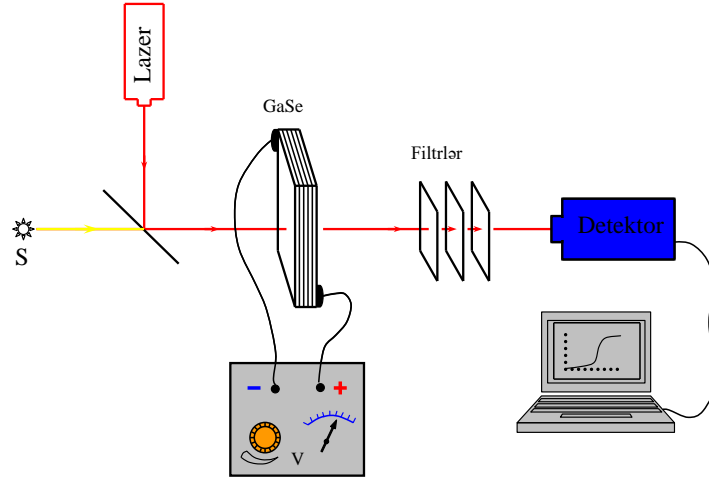
The crystals studied were grown by the Bridgman method. The procedure of manufacturing the attenuator of laser radiation includes the following operations: spalling of a thin (a thickness of below $100 \text{ }\mu\text{m}$) sample of single crystal measuring $3 \times 3 \text{ mm}^2$; deposition of semitransparent gold electrodes $\sim 100 \text{ \AA}$ thick on the faces perpendicular to the c-axis, through which radiation passes; and formation of the connection of these electrodes to the current – feeding electrodes with an In – Ga paste. To make the contacts more rigid, we applied polymeric adhesive or varnish on the paste. The most reliable contacts were obtained when depositing an indium oxide film with thickness of below $1 \text{ }\mu\text{m}$ on crystal faces, with the subsequent soldering of copper or nickel wires-electrodes by using In. the efficiency of such a device depends chiefly on the crystal thickness and distance between the electrodes. In the initial state, the optical transmission of the attenuator manufactured according to the above schema was $\sim 20\%$. We found that the maximum shift of the edge of the optical absorption band takes place in specified crystals with a resistivity of $10^3 \div 10^5 \text{ }\Omega \cdot \text{cm}$ at room temperature.

The radiation sources used were a halogen incandescent lamp and a pulsed Nd:YAG³⁺ laser with built-in 2nd and 3rd harmonic generators, designed to generate radiation with a wavelength of 1064, 532 and 335 nm. The duration of the laser pulse was 12 ns with a maximum capacity of about $\sim 10 \text{ MW/cm}^2$. In the study of the transmission spectra, an automated monochromator with double dispersion M833 (spectral resolution $\sim 0.024 \text{ nm}$ at a wavelength of 600 nm) was used with computer control and a detector recording radiation in the wavelength range of 350-2000 nm. Si p-i-n photodiode was used as a detector of the transmitted light. The amplitude and the shape of the registered signal were controlled by digital oscilloscope.

Essentially the attenuator operates by such a scheme (Fig.1). The radiation from the laser passes through semitransparent electrodes and crystal (perpendicular to the layers).

The transmission spectra were measured under the applied voltages of up to 20 V. The form and fronts of pulses of radiation passed through an attenuator did not detect any distortions and it is possible to suppose, that the switching time of the device does not exceed of 10⁻¹⁰ s.

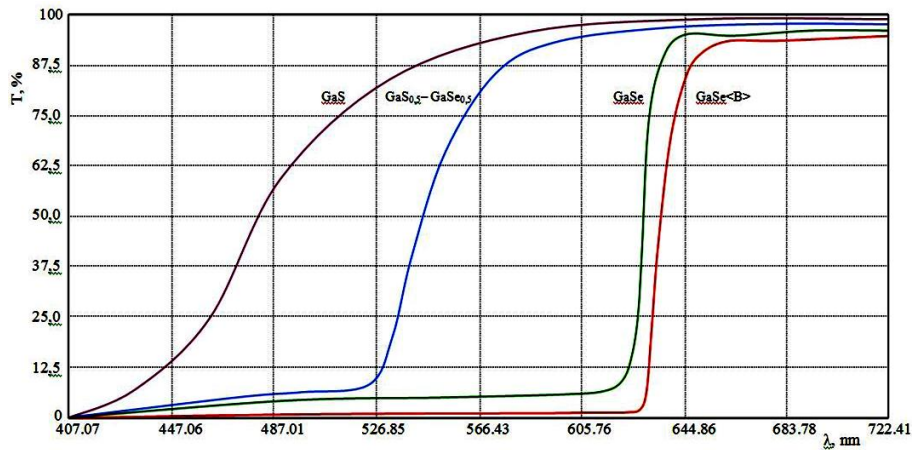
Fig.1. The scheme of the experimental setup.



3. Experimental results and discussion

Figure 2 shows the transmission spectra of thin GaS, GaS_{0.5}Se_{0.5}, GaSe and GaSe(B) thin films. As can be seen from the figure, the transmission spectra of these crystals cover a rather wide range of wavelengths from 407 nm to 630 nm. In this case, the edge of the absorption band corresponds to the forbidden width of each crystal and coincides with their values, which is known from the literature [4, 9, 10].

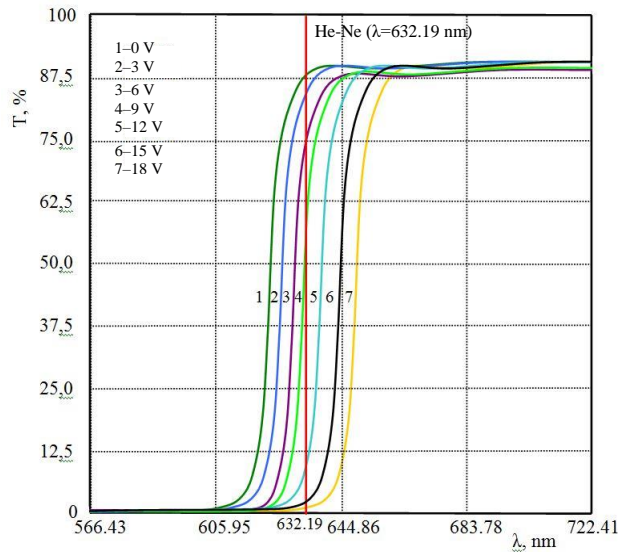
Fig.2. Transmission spectra of thin semiconductor GaS, GaSe, GaS_{0.5}Se_{0.5} and GaSe(B) films.



We have experimentally found that the edge of the absorption band of layered crystals depends rather strongly on the magnitude of the applied external electric field.

As an example, Figure 3 shows the transmission spectra of a GaSe sample with different applied voltages. The absorption edge moves toward longer wavelengths by increasing the applied voltage. A large shift of about 16 nm (~160 A⁰) in the absorption edge corresponding to 50 meV is observed for the applied voltage of 16 V. As can be seen from the figure, the shift of the edge of the absorption band towards the long waves (~160 A⁰) under the action of an external electric field allows you to smoothly change the intensity of the He-Ne laser.

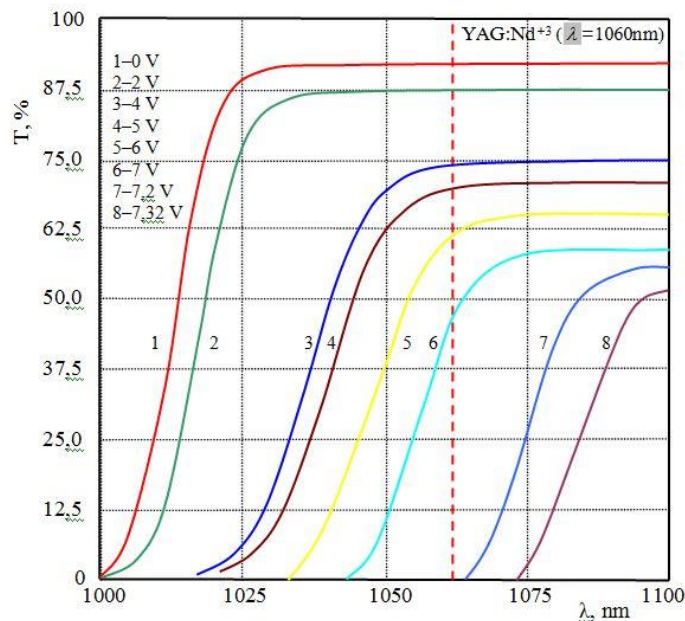
Fig.3. Transmission spectra of GaSe thin films for different applied voltages.



Unfortunately, application of GaSe crystals in this case is limited by a visible range of spectrum. The development of a similar attenuator of laser radiation operating in near IR range of spectrum meets the requirements of the present time. Therefore we have continued investigations on searching of a material which is capable to exhibit similar properties in IR range of spectrum, in particular, in the near IR range in which the YAG:Nd³⁺ laser ($\lambda=1060$ nm).

Figure 4 represents these spectra for various voltage bias applied InSe thin films. As one can see when no field was applied to the sample then the absorption edge (the curve 1) places on 998 nm (1,24 eV). This is a good agreement with data for forbidden gap of InSe. Under applied voltage the absorption edge is red shifted (curves 2-8) achieving a mark of 1074 nm at about 7,3 V. Value of shift is about 75,8 nm (88 meV). As can be seen from fig. 4 this value is quite enough to control the intensity of the YAG:Nd³⁺ laser.

Fig.4. Transmission spectra of InSe thin films under various applied voltages (V): 1-0; 2-2; 3-4; 4-5; 5-6; 6-7; 7-7,2; 8-7,32.

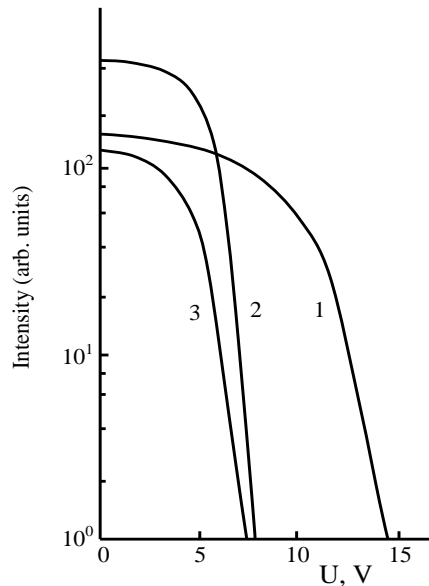


In fig. 5 shows the experimental results on the attenuation of the radiation of a continuous He-Ne laser ($\lambda= 632.19$ nm), with an output power of ~ 10 mW, a pulsed YAG: Nd laser ($\lambda= 1060$ nm), with an output power of 12 MW/cm² and a duration of ~ 10 ns as well as laser GaAs diode with tunable wavelength of 650 nm, 535 nm and a maximum power of 2 mW. As can be seen from the figure, already at a voltage of ~ 14 V, a 100-fold attenuation of the intensity of laser radiation is achieved.

The dependence of the magnitude of the shift of the edge of the absorption band ($\Delta\lambda$) on the applied electric field (E) for GaSe and InSe has a power-law character $\Delta\lambda \sim E^n$, where $n = 2.1 \div 2.5$.

It should be noted that the proposed device can also be used as an effective cut-off filter, for example, in the study of luminescence or photostimulation, when it is necessary to separate the useful signal from the signal generated by powerful excitation radiation (see Fig. 2). This was successfully implemented by us in measurements using a high-power tunable wavelength YAG: Nd laser (532 and 1064 nm).

Fig.5. Intensity of laser radiation with wavelengths of (1) 632.19, (2) 1060 and (3) 532 nm transmitted through the attenuator GaSe (curve 1), InSe (curve 2) and Ga_{0.5}Se_{0.5} (curve 3) as a function of constant voltage applied to it.



In our opinion, the observed anomalously large shift of the edge of the absorption band of layered GaSe, InSe, and other crystals, compared with other semiconductor materials, under the action of an applied electric field cannot be satisfactorily explained using the Franz-Keldysh effect. According to the Franz-Keldysh effect, the “red” shift of the absorption band edge in semiconductors is not high enough. According to this model, the shift of the absorption edge can be calculated by the formula [11]

$$\hbar\theta = 0.0725 (m_0/\mu)^{1/3} E^{2/3} \quad (2)$$

where $\mu^{-1} = (m_e)^{-1} + (m_h)^{-1}$ is the reduced effective mass, E is the applied electric field in units of MW / cm.

Substituting the values of the electron effective masses $m_e=0,3m_0$ and holes $m_h=0,2m_0$ for GaSe [12], as well as the experimental value of the electric field applied to the sample $E = 10^3$ V/cm into the above formula, we obtain that the absorption edge shift associated with the Franz-

Keldysh effect is only ~ 1.4 meV, which is much less than the experimentally obtained value (~ 50 meV). A similar estimate for InSe with values of $m_e=0,12m_0$, holes $m_h=0,6m_0$ [13] and $E = 3.7 \times 10^1$ V/cm gives a value of 0.17 meV, while the experimentally found value is ~ 90 meV. In addition, according to the Franz-Keldysh theory, the dependence of the shift of the edge of the absorption band ($\Delta\lambda$) on the applied electric field (E) is sublinear $\Delta\lambda \sim E^{2/3}$ [7], whereas experimentally we observe a superlinear dependence $\Delta\lambda \sim E^{2.5}$.

In our opinion, the most consistent explanation of the results obtained can be a combination of effects stimulated by an electric field: the thermal shift of the edge of the absorption band [6]. Estimates show that samples from GaSe with a specific resistance of $\sim 10^3$ Ω -cm under the action of an electric field of ~ 20 V emit Joule energy ~ 1.9 W/cm². This value is sufficient for heating the sample ~ 45 - 50 °C and the GaSe becomes opaque for the He-Ne ($\lambda = 632.8$ nm) laser. A similar estimate for InSe samples with a specific resistance of $\sim 10^2$ Ω -cm under the action of an electric field of ~ 50 V/cm releases Joule energy ~ 11.6 W/cm², which heats the sample to 245 °C and InSe becomes opaque to YAG:Nd³⁺ ($\lambda=1064$ nm) laser. As a result, we can assume that in our case there is a positive feedback, in which the conductivity, reducing the resistance of the sample, leads to its local heating, which in turn shifts the edge of the absorption band.

Of no less interest is the reason why an anomalously large shift of the edge of the absorption band in the long-wavelength region of the spectrum is observed in layered semiconductor A³B⁶ compounds. Currently it is not possible to answer this question unequivocally. It can be assumed that this phenomenon is due precisely to the layered structure of these compounds. The weak Van der Waals coupling between the layers leads to the fact that the changes in the band gap with temperature and, accordingly, the shift of the absorption band edge to the long-wave region of the spectrum in layered crystals become stronger.

This assumption is also supported by the experimental results obtained by us in GaSe crystals doped with Bohr atoms of GaSe(B) samples. The fact is that among the investigated layered crystals, the GaSe samples doped with boron atoms have the lowest displacement. Earlier, we showed that during the condensation of boron atoms in interaction with selenium atoms, an isotype structure (BSe₂) is formed with an optimum distance of 198 (3) nm between B – Se atoms [14]. In the crystal structure of gallium selenide, the distance between the Ga – Se atoms is 247 (2) nm. Of course, when gallium is substituted with boron impurity atoms in the crystal structure of GaSe, a stronger bond with selenium atoms appears than the Ga – Se bond [15].

4. Conclusion

A design of an attenuator for visible and IR lasers radiation and the method for its manufacturing are described. The device is based on the electric – field – induced shift of the optical absorption edge of gallium and indium selenide crystals. It is shown that GaSe and InSe thin films with a resistivity of $10^3 \div 10^5$ Ω -cm and applied electric field of $10^2 \div 10^3$ V/cm reduces the intensity of He-Ne laser radiation ($\lambda=632,19$ nm) and YAG:Nd³⁺ laser radiation ($\lambda=1060$ nm), pulse duration of 10 ns and power of 10 MW/cm² by more than two orders of magnitude. The physical mechanism of the anomalous large shift of the absorption edge is given. The device can also be efficiently used as a cut-off filter for visible and near IR range of spectrum.

This work was supported by the Science Development Foundation under the President of the Republic of Azerbaijan - **Grant № EIF/ MQM/ Elm-Tehsil-1-2016-1(26)-71/01/1.**

REFERENCES

1. V.S. Letokhov. Femtosecond laser pulses: application prospects. Bulletin of the Russian Academy of Sciences. **72**, 779-785, 2002. (rus).
2. G.L. Voronkov. Oslablenie opticheskogo izlucheniya (Attenuation of optical radiation), Leningrad: Mashinostroenie. 125. 1980. (rus).
3. Weiting Feng, Yan Yixin. Shift in infrared interference filters at cryogenic temperature. Appl. Optics **31**(31), 6591-6592. 1992.
4. S.G.Abdullaeva, V.A.Gadjiyev, T.G.Kerimova, E.Yu Salaev. Electroabsorption in GaS_xSi_{1-x}. Nuovo Cimento **B38**, 459-465, 1977.
5. Y.Iwamura, M.Moriyama and N.Watanabe. Jpn J. Appl. Phys. **29**, 975-983, 1990.
6. A.Segura, M.V.Andres and V. Munor. Jpn J. Appl. Phys. 1991, v. 30. pp.608-614.
7. P.E. Sulewski, E.Bucher, N. Stucheli. Appl. Phys.A. **54**, 79-83, 1992.
8. Kamimura H., Nakao K. Band structures and optical properties of semiconducting layer compounds GaS and GaSe. J. of Phys. Soc. Japan, **24**, 1313-1320, 1968
9. Cingolani A., Manfredotti C., Minafra A., Rizzo A. Optical properties of GaSe and InSe. Phys.Stat. Sol. (a), **6**, 63-67, 1973.
10. Segura A., Besson J.M., Chevy A., Martin M.S. Absorption edge in InSe. Phys.Stat. Sol. (a), **15**, 303-308, 1977.
11. Tyaqay V.A., Snitko O.B. "Electroreflections in semiconductors" Naukova Dumka, Kiev, 147. 1980. (rus).
12. Minder R., Ottaviani G., Canali C. Optical properties in GaSe. J. Phys. Chem. Solids, **37**, 417-425, 1976.
13. Bourdon A., Chevy A., Besson J.M. On some physical properties of InSe and GaSe semiconducting crystals intercalated by ferroelectrics. Proceed. Of the 14th Int. Conf. of Phys. Of Semicond., Edinburgh (I. O.P. Conf. Ser.43) 1371, 1978.
14. A.L. Ivanovsky, G.P. Shveykin. Quantum chemistry in materials science. Boron, its alloys and compounds. Ed. Ekaterinburg, 394, 1997. (rus).
15. V.M. Salmanov, A.G. Guseinov, A.G. Kyazym-zade, R.M. Mamedov, A.A. Salmanova, F.Sh. Ahmedov. Effect of boron atoms on the optical absorption and photoconductivity of thin films of gallium selenide. Journal of Baku Engineering University – Physics, **1**(1), 72-76, 2017. (rus)

UOT 539.193/194PACS: 11.15.-p

ТРЕХМЕРНАЯ СТРУКТУРА АНАЛОГОВ ГЛИПРОЛИНОВЫХ ТЕТРАПЕПТИДОВ

Л.И. ИСМАИЛОВА, Р.М. АББАСЛЫ, Н.А. АХМЕДОВ

Институт Физических Проблем
Бакинский Государственный Университет
Баку, АЗЕРБАЙДЖАН
lara.ismailova52@mail.ru, Abbasli_Rena@mail.ru

РЕЗЮМЕ

Компьютерное моделирование помогает решить одну из основных проблем молекулярной биофизики - изучить структурно-функциональную организацию пептидных молекул. Данная работа посвящена изучению пространственного строения и конформационных свойств N-концевых аналогов тетрапептидных молекул глипролинов Gly-Pro-Gly-Pro, Leu-Pro-Gly-Pro, Val-Pro-Gly-Pro, Phe-Pro-Gly-Pro и Arg-Pro-Gly-Pro. Расчеты проводились с помощью метода теоретического конформационного анализа и специальной компьютерной программы. Потенциальная энергия каждой молекулы выбиралась как сумма невалентных, электростатических, торсионных взаимодействий и энергии водородных связей. Найдены низкоэнергетические конформации для каждой молекулы, значения двугранных углов основной и боковых цепей, оценена энергия внутри-и межостаточных взаимодействий. Расчет показал, что низкоэнергетическими для тетрапептидных аналогов глипролинов являются полусвернутые формы основной цепи. Такая форма сближает участки основной цепи и боковые цепи аминокислот, входящих в эти молекулы, что приводит к их эффективным взаимодействиям.

Ключевые слова: конформация, тетрапептид, молекула, аналог, структура.

THREE DIMENSIONAL STRUCTURE OF THE ANALOGUES OF THE GLYPROLINE TETRAPEPTIDES

ABSTRACT

Computer modeling helps us to solve the problem of the investigating of structure-functional organization of the peptide molecules. This work is devoted to study the spatial organization and conformational possibilities of the N-terminal analogues of the glyproline tetrapeptide molecules Gly-Pro-Gly-Pro, Leu-Pro-Gly-Pro, Val-Pro-Gly-Pro, Phe-Pro-Gly-Pro and Arg-Pro-Gly-Pro. The calculations were carried out by the method of theoretical conformational analysis and a special computer program. The potential energy of the each molecule was chosen as the sum of the non-valent, electrostatic and torsional interaction energies and the energy of hydrogen bonds. The low-energy conformations of these molecules, the dihedral angles of the backbone and side chains of the amino acid residues of the tetrapeptides, and the energies of intra- and inter-residual interactions were determined. It is revealed that low energy conformations of this molecule have the half-folded type of backbone. These forms bring parts of the backbone and the side chains of the amino acids together, and they result in convenient interactions.

Key words: conformation, tetrapeptide, molecule, analogue, structure.

GLIROLIN TETRAPEPTİDLƏRİNİN ANALOQLARININ FƏZA QURULUŞU

XÜLASƏ

Peptid molekullarının quruluş-funksiya əlaqələrinin öyrənilməsi molekulyar biofizikanın əsas problemlərindən biridir. Kompüter modelləşməsi bu problemin həllinə kömək edir. Bu tədqiqat işi qliprolin molekullarının N-kənar tetrapeptid analoqlarının Gly-Pro-Gly-Pro, Leu-Pro-Gly-Pro, Val-Pro-Gly-Pro, Phe-Pro-Gly-Pro və Arg-Pro-Gly-Pro fəza quruluşlarının və konformasiya xüsusiyyətlərinin öyrənilməsinə həsr olunmuşdur. Hesablamalar nəzəri konformasiya analizinin və xüsusi kompüter proqramlarının köməyi ilə aparılmışdır. Molekulun potensial enerjisi qeyri-valent, elektrostatik, torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinin və hidrogen rabitəsi enerjisinin cəmi şəklində seçilmişdir. Hər bir molekulun aşağıenerjili konformasiyaları, əsas və yan zəncirlərin ikiüzlü fırlanma bucaqlarının qiymətləri tapılmış, aeminturşu qalıqları daxilində və arasında qarşılıqlı təsir enerjiləri müəyyən olunmuşdur. Hesablamaların nəticələri göstərilmişdir ki, tetrapeptid molekulların əsas zəncirin yarıfırlanmış formalarının konformasiyaları aşağıenerjili olur. Bu formada molecula daxil olan aminturşu qalıqlarının əsas və yan zəncirlərinin atomları bir-birinə yaxınlaşır və onlar arasında effektiv qarşılıqlı təsirlər yaradır.

Açar sözlər: konformasiya, tetrapeptid, molekul, analoq, fəza quruluşu.

Введение

Регуляторные пептиды определяют работу живого организма. Это короткие линейные пептиды, которые не имеют в растворах фиксированной пространственной структуры. Они существуют в виде набора низкоэнергетических конформаций. Этот набор определяется аминокислотной последовательностью пептидных молекул и физико-химическими свойствами растворителя. При взаимодействии биологически активного пептида с рецептором могут происходить конформационные изменения пептидной цепи. Конформационные перестройки обеспечивают эффективные взаимодействия активного центра молекулы с лигандсвязывающим центром рецептора.

Основной чертой этих пептидных молекул является их высокая эффективность. Используя регуляторные пептиды человеческого организма, можно создавать новые и эффективные лекарственные препараты. Изучить механизм действия пептидных молекул можно, если решить задачу определения набора низкоэнергетических структур молекул, а также задачу целенаправленного конструирования их искусственных аналогов.

Глипролины - короткие пептиды, аминокислотные последовательности которых состоят только из остатков глицина и пролина. Известно, что глипролины образуются в организме в результате внутриклеточного катаболизма коллагена, эластина и родственных белков. Глипролины обладают рядом биологических активностей, представляющих большой практический интерес. В частности, они влияют на систему свертывания крови, модулируют работу иммунной и нервной систем, обладают противоязвенным действием [1, 2]. В настоящее время механизмы действия глипролинов и их мишени мало изучены. В связи с этим актуальным представляется проведение структурно-функциональных исследований глипролинов и их синтетических аналогов на модельных системах с помощью теоретических методов исследования.

Глипролины Gly-Pro, Pro-Gly, Pro-Gly-Pro, Pro-Gly-Pro-Gly обладают нейропротективными свойствами, обеспечивают сохранение нормальной функции инсулярной и противосвертывающей систем крови на фоне развития диабета. Ряд аминокислот (Leu, Arg), входящих в глипролины, участвуют в нормализации уровня триглицеридов и баланса липопротеидов, предотвращают риск диабета и атеросклероза [3,4].

В данной статье приведены результаты изучения пространственного строения и конформационных свойств пептидных молекул, состоящих из аминокислотных остатков глицина (Gly) и пролина (Pro), а также остатков аргинина (Arg), фенилаланина (Phe), валина (Val) и лейцина (Leu). Целью данной работы является определение пространственной структуры глипролинового тетрапептида Gly-Pro-Gly-Pro и его аналогов Phe-Pro-Gly-Pro, Leu-Pro-Gly-Pro, Arg-Pro-Gly-Pro и Val-Pro-Gly-Pro, которые получают добавлением к N-концу трипептидной молекулы Pro-Gly-Pro аминокислотных остатков Phe, Leu, Arg и Val.

Метод расчета

Компьютерное моделирование, основанное на использовании метода теоретического конформационного анализа и программ, позволяющих получать графическое изображение пространственной структуры молекулы, было выполнено для молекул семейства глипролинов. Метод теоретического конформационного анализа дает возможность рассчитывать трехмерную структуру пептидных молекул исходя из известной аминокислот-

ной последовательности и специальной программы [5]. В расчетах использовалась разработанная специальная классификация (конформация, форма основной цепи, шейп) [6]. Формы остатков определялись областями В, R, L и P двугранных углов основной цепи φ - ψ . При расчете рассматривались развернутые формы дипептидной молекулы (ВВ, ВR, LB, LR, RL, PL, PP- шейп e) и свернутые формы основной цепи (RB, RR, BL, LL, PR, PB- шейп f). Для глицина начальные приближения формировались из низкоэнергетических конформаций (R форма – $\varphi = -90^\circ$; $\psi = -90^\circ$; В форма – $\varphi = -90^\circ$; $\psi = 100^\circ$; L форма – $\varphi, \psi = 90^\circ$ и P форма основной цепи – $\varphi = 90^\circ$; $\psi = -90^\circ$). Для аминокислоты пролин учитывались два положения (В форма – $\psi = 130^\circ$ и R форма – $\psi = -50^\circ$). Для аминокислотных остатков Phe, Leu, Val, Arg рассматривались R, В и L формы основной цепи. Положения боковой цепи фенилаланина определялось двумя углами χ^1, χ^2 , валина - тремя χ^1, χ^2, χ^3 , а лейцина и аргинина - четырьмя углами χ^1, χ^2, χ^3 и χ^4 .

Расчет выполнялся в рамках механической модели молекул с учётом невалентных ($E_{нв}$), электростатических ($E_{эл}$), торсионных взаимодействий ($E_{тор}$) и энергии водородных связей ($E_{вс}$). Конформационное состояние каждого аминокислотного остатка обозначалось через X_{ij} , где X - характеризует форму основной цепи остатка (R, B, L, P), а символы $ij = 11\dots, 12\dots, 13\dots, 21\dots$, и т.д. отвечают положениям боковой цепи (χ^1, χ^2, \dots); индекс 1 соответствует значениям углов области $0-120^\circ$, индекс 2 – области $120^\circ - (-120^\circ)$, а индекс 3 – области $(-120^\circ)-0^\circ$. Обозначения и отсчеты углов вращения соответствуют принятой международной номенклатуре [7].

Результаты и их обсуждение

Молекула Gly-Pro-Gly-Pro. Определение пространственной структуры тетрапептида Gly-Pro-Gly-Pro мы начали с выяснения конформационных возможностей дипептидной молекулы Gly-Pro, затем трипептида Gly-Pro-Gly, и, наконец, всей тетрапептидной молекулы.

Расчет данной дипептидной молекулы выполнялся на основе стабильных конформаций монопептидов N-ацетил-L-пролина и L-глицина. Для аминокислоты пролин учитывались R и B формы основной цепи. Остаток глицина в расчетах имел четыре формы основной цепи R, B, L, P. Так же для глицина в расчет были включены граничные начальные приближения углов φ, ψ . Для дипептида Gly-Pro, содержащего 27 атомов и 6 переменных двугранных углов, возможны 2 шейпа и 8 форм основной цепи. Развернутый шейп e включает шесть форм ВВ, ВR, LB, LR, RP, RL, а свернутый шейп f включает формы основной цепи RB, RR, PR, PB, BL, BP.

Учитывая специфику боковых цепей аминокислотных остатков глицина и пролина, важно подчеркнуть, что остаток Gly лишен боковой цепи (в боковой цепи находится один атом водорода), а боковая цепь остатка Pro представляет жестко фиксированное кольцо. Конформационные возможности дипептидной молекулы определяются углами только основной цепи этих остатков: φ, ψ, ω . Расчет показал, что основной вклад в энергию молекулы вносят дипептидные взаимодействия, их энергия варьируется от -1.0 до -3.0 ккал/моль.

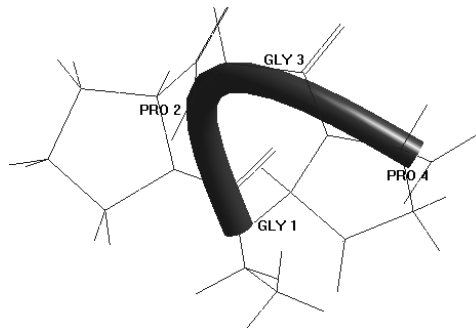
Формы основной цепи шейпа e имеют одинаковый развернутый ход основной цепи, при этом боковые цепи Gly и Pro находятся по разные стороны от основной цепи, а формы шейпа f имеют одинаковый свернутый ход основной цепи, где боковые цепи амина-

кислот оказываются сближенными. Наиболее низкой энергией обладает конформация PR, которая имеет свернутую форму основной цепи.

Трипептидная молекула Gly-Pro-Gly имеет 34 атома и 9 переменных двугранных углов. Для нее возможны 32 формы основной цепи. Из них самую низкую энергию имеет RRB, которая также имеет свернутую форму основной цепи.

Тетрапептид Gly-Pro-Gly-Pro включает 48 атомов и 11 переменных двугранных углов. Было составлено свыше 200 начальных приближений, которые были проминимизированы по энергии. В результате только ограниченное число конформаций попадает в энергетический интервал 0 – 4 ккал/моль. Возможные структуры Gly-Pro-Gly-Pro описываются низкоэнергетическими конформациями свернутых RRRR, PRRB (fff) и полусвернутых LRRR (eff), RRBR (ffe) форм основной цепи (таблица 1). Глобальная конформация с относительной энергией 0,0 ккал/моль представлена на рисунке 1.

Рис. 1. Низкоэнергетическая пространственная структура глипролина GPGP



Полученные результаты использованы при определении пространственной структуры пентапептида Gly-Pro-Gly-Pro-Gly, гексапептида Gly-Pro-Gly-Pro-Gly-Pro и его N-концевых аналогов.

Молекула Leu-Pro-Gly-Pro. В данной молекуле N-концевой остаток Gly заменен на аминокислоту Leu. Добавление лейцина предотвращает риск диабета, нормализует уровень триглицеридов, обладает способностью снижать уровень глюкозы в крови. Коррекция нарушений противосвертывающей и инсулярной систем организма регулируется глипролином Leu-Pro-Gly-Pro [4].

Таблица 1. Энергетические параметры низкоэнергетических конформаций тетрапептидных глипролинов.

№	Конформация (шейп)	Е нв	Е эл	Е торс	Е общ	Е отн
Молекула Gly-Pro-Gly-Pro						
1	RRRR (fff)	-5,3	-2,6	0,8	-7,2	0,0
2	PRRB (fff)	-4,7	-3,9	0,9	-6,7	0,5
3	LRRR (eff)	-5,9	-2,1	1,8	-6,0	1,2
4	RRBR (ffe)	-3,5	-2,5	1,0	-5,1	2,1
5	RRPR (fef)	-3,3	-2,0	1,7	-3,4	3,8
Молекула Leu-Pro-Gly-Pro						
1	B ₂₂₂₂ RPR (eef)	-13,3	-2,9	1,7	-14,5	0,0
2	B ₂₁₂₂ RPB (eef)	-9,8	-3,1	1,1	-11,8	2,7
3	B ₂₂₂₂ RRR (eff)	-11,8	-2,77	1,0	-13,4	1,1
4	B ₂₂₂₂ RBR (efe)	-11,2	-3,0	1,2	-13,0	1,5
5	B ₂₂₂₂ BLR (efe)	-11,0	-2,9	1,5	-12,4	2,1

Молекула Val-Pro-Gly-Pro						
1	B ₂₂₂ RPR (eef)	-10,2	-2,8	1,6	-11,5	0,0
2	B ₂₂₂ RPB (eef)	-9,8	-2,1	1,1	-10,8	0,7
3	B ₂₂₂ RRR (eff)	-8,0	-2,3	1,9	-8,4	3,1
4	B ₂₂₂ RBR (efe)	-9,2	-2,9	1,2	-10,0	1,5
5	B ₂₂₂ BLR (efe)	-9,0	-2,3	1,8	-9,4	2,1
Молекула Phe-Pro-Gly-Pro						
1	B ₃₁ RBR (efe)	-11,5	-2,9	1,7	-12,8	0,0
2	B ₂₁ BLR (efe)	-9,6	-2,7	1,1	-11,3	1,5
3	B ₃₁ RRR (eff)	-10,8	-2,5	1,0	-12,3	0,5
4	B ₂₁ BPB (eff)	-8,4	-2,9	1,5	-9,8	3,0
5	B ₃₁ RPR (eef)	-8,7	-3,0	0,8	-10,9	1,9
Молекула Arg-Pro-Gly-Pro						
1	B ₂₂₂₂ RPR (eef)	-10,2	-3,5	0,8	-13,0	0,0
2	B ₂₁₂₂ BRR (eef)	-8,6	-4,3	2,2	-10,7	2,3
3	B ₃₃₂₂ RRR (eff)	-8,6	-1,8	1,2	-9,1	3,9
4	B ₁₂₂₂ BLB (efe)	-9,3	-3,9	3,5	-9,8	3,2
5	B ₂₂₂₂ BLR (efe)	-8,6	-3,6	3,5	-8,7	4,3

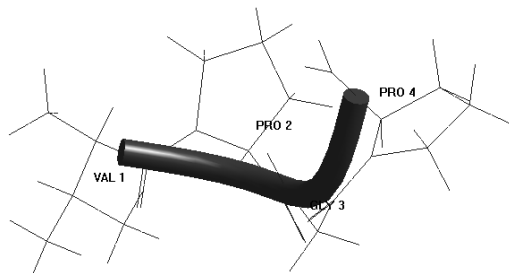
Для аминокислот учитывались все возможные формы основной цепи. Тетрапептид включал в себя 60 атомов и 15 переменных двугранных углов основной и боковых цепей всех аминокислот. Всего для тетрапептида Leu-Pro-Gly-Pro было составлено свыше 100 начальных приближений, принадлежащих четырем шейпам. Все они были проминимизированы по энергии, оценены их геометрические и энергетические параметры. Специфика аминокислотной последовательности данной пептидной молекулы состоит в том, что боковая цепь аминокислоты Leu является лабильной и объемной, глицин практически не имеет боковой цепи, а пролин имеет жесткую боковую цепь.

Расчет выявил, что для тетрапептидной молекулы Leu-Pro-Gly-Pro в энергетический интервал 0-5 ккал/моль попадают конформации развернутых и ее и полусвернутых шейпов eef, efe и eff. Для тетрапептида самыми низкоэнергетическими оказались конформации с формой основной цепи BRPR, BRPB, BRRR, BRBR, имеющих полусвернутую основную цепь. Расчет показал, что глобальной конформацией молекулы является BRPR₃₂₂₂. Низкоэнергетические конформации тетрапептида Leu-Pro-Gly-Pro представлены в табл.1.

Молекула Val-Pro-Gly-Pro. В данной тетрапептидной молекуле остаток Val присоединен к N-концу молекулы. Известно, что тетрапептид Val-Pro-Gly-Pro снижает концентрацию общего холестерина в организме. Расчет тетрапептида проводился на основе конформаций монопептида N-ацетил-L-валина и низкоэнергетических конформаций трипептида Pro-Gly-Pro. Следует отметить, что валин имеет объемную боковую цепь, имеющую две метильные группы. Было составлено свыше 150 начальных приближений, так как стоящий перед Pro остаток Val может находиться только в В форме основной цепи (R форма является высокоэнергетической). Конформации тетрапептида принадлежат четырем шейпам. Низкоэнергетические конформации принадлежат пяти формам основной цепи (табл.1). Глобальной конформацией является B₂₂₂ RPR (eef). Низкоэнергетическая конформация BRPR (eef) представлена на рисунке 2. Основной вклад в энергию этой конформации вносят невалентные взаимодействия (-10,2) ккал/моль, вклад электростатических взаимодействий составляет (-2,8) ккал/моль, а торсионных взаимодействий 1,6 ккал/моль, общая энергия конформации составляет (-14,5 ккал/моль).

Низкую энергию имеют конформации с полусвернутыми формами основной цепи. Она определяется наличием межостаточных ди-, три- и тетрапептидных взаимодействий. Полностью развернутые формы основной цепи B₄₄₄₄, B₄₄₄₄, B₄₄₄₄ проигрывают свыше 4,0 ккал/моль.

Рис. 2. Низкоэнергетическая пространственная структура глипролина Val-Pro-Gly-Pro

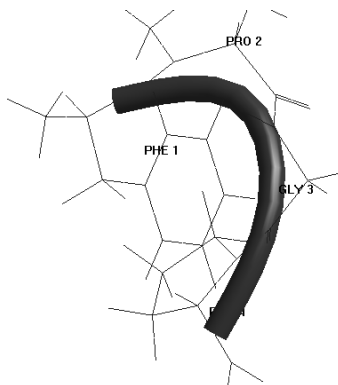


Молекула Phe-Pro-Gly-Pro. N-концевой остаток Phe в этой молекуле присоединен к трипептиду Pro-Gly-Pro. Расчет тетрапептида проводился на основе конформаций монопептида N-ацетил-L-фенилаланина и низкоэнергетических конформаций трипептида Pro-Gly-Pro. Специфика аминокислотной последовательности данной пептидной молекулы состоит в том, что ароматическая боковая цепь аминокислоты Phe является лабильной и объемной, глицин практически не имеет боковой цепи, а пролин имеет жесткую боковую цепь.

Для тетрапептида было составлено свыше 100 начальных приближений с учетом того, что стоящий перед Pro остаток Phe может находиться только в В форме основной цепи, так как R форма является высокоэнергетической. Для остальных аминокислот учитывались все возможные формы основной цепи. Тетрапептид включал в себя 61 атом и 13 переменных двугранных углов основной и боковых цепей всех аминокислот, входящих в него. Все конформации были проминимизированы по энергии, оценены их геометрические и энергетические параметры.

Расчет выявил, что для тетрапептидной молекулы Phe-Pro-Gly-Pro в энергетический интервал 0-5 ккал/моль попадают конформации всех возможных шейпов efe, eff, eef и eee. Для тетрапептида самыми низкоэнергетическими оказались конформации с формой основной цепи BRBR, BBLR, BRRR, BRPR, имеющих полусвернутую основную цепь. Расчет показал, что глобальной конформацией молекулы является B_3 BRBR. Основной вклад в энергию этой конформации вносят невалентные взаимодействия (-11,5) ккал/моль, вклад электростатических взаимодействий составляет (-2,9) ккал/моль, а торсионных взаимодействий 1,7 ккал/моль, общая энергия конформации составляет (-12,8 ккал/моль). Низкоэнергетические конформации тетрапептида Phe-Pro-Gly-Pro представлены в табл.1, а глобальная конформация – на рисунке 3.

Рис. 3. Низкоэнергетическая пространственная структура глипролина Phe-Pro-Gly-Pro



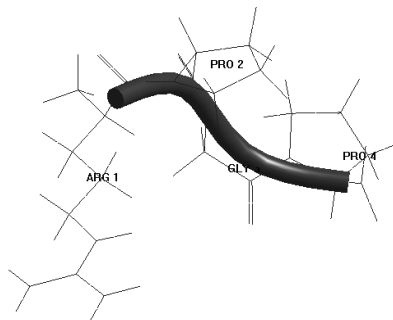
Данная конформация является компактной структурой, так как имеет полусвёрнутую форму основной цепи, поэтому между аминокислотными остатками молекулы возникают сильные взаимодействия. Низкая энергия этой конформации обусловлена на-

личием всех возможных для тетрапептидной молекулы взаимодействий. В энергетический интервал 0-5 ккал/моль попадают конформации 9 форм основной цепи. Всего 0,5 ккал/моль проигрывает конформация В₃₁RRR (eff) со свернутым С-концевым трипептидным участком. Самой высокой энергией обладают конформации с поностью развернутой основной цепью.

Молекула Arg-Pro-Gly-Pro. Этот тетрапептид применяется в качестве средства лечения тромбообразований, снижает повышенный уровень глюкозы в крови при инсулинзависимом диабете. Аминокислота Arg снижает риск развития сахарного диабета. Молекула содержит атомов и переменных двугранных углов. Боковая цепь аргинина представляет собой длинную, объемную и положительно заряженную цепь, конформационные возможности которой задаются четырьмя углами.

Для тетрапептида самыми низкоэнергетическими оказались конформации с формой основной цепи BRBR, BBLR, BRRR, BRPR, имеющие полусвернутую основную цепь (таблица 1. Расчет показал, что глобальной конформацией молекулы является В₂₂₂₂RPR (0,0 ккал/моль) (рис.4).

Рис. 4. Низкоэнергетическая пространственная структура глипролина Arg-Pro-Gly-Pro



Проведенный расчет пространственной структуры тетрапептидных молекул позволил определить четкие количественные энергетические и геометрические характеристики. Полученные результаты могут быть использованы для изучения пространственного строения пентапептидных и гексапептидных молекул глипролинов, а так же исследования конформационных возможностей боковых цепей при взаимодействии с молекулами рецепторов.

REFERENCES

- [1] K. B. Martinova, L. A. Andreeva, P. A. Klimova et al., "Structure functional investigation of the glysin and prolin containing peptides wich are neyroprotectors", Bioorg. Khim., vol. 35, N 2, pp. 165-171, 2009 (in russian).
- [2] Yu. A. Zolotarev, K. E. Badmayeva et all., "Short peptide fragments with antiulcer activity from a collagen hydrolysate", Bioorg. Khim., vol. 32, N 2, pp. 89-94, 2006 (in russian).
- [3] L. A. Lyapina, N. F. Myasoedav et all "Fibrinolytic and hypoglycemic effects of the Pro-Gly-Pro-Leu peptide during development of insulin- dependent diabetes in rats", Izv Akad Nauk Ser Biol, vol. 3, pp. 375-379, 2010 (in russian).
- [4] N.F. Mysoyedov., L.A. Andreeva, L.A. Lyapina et all Correction of impairments in functions of anticoagulation and insular systems of an organism by regulatory peptide Leu-Pro-Gly-Pro. Biology Bulletin, 2013, V. 40, №3, P. 304-306.
- [5] I. S. Maksumov, L. I. Ismailova, N. M. Godjaev "A computer program for calculation of conformations of molecular systems", J. Struc. Chem., vol. 24, pp. 147- 148, 1983 (in russian).
- [6] E. M. Popov "An Approach to calculations of the problem of structure- functional organization of natural peptides", Mol. Biol., vol. 19, pp. 1107-1138, 1985.
- [7] IUPAC-IUB, *Quantity, Units and Symbols in Physical Chemistry*, vol. 39, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1988.

*UOT: 539.2;538.9-405;548**PACS: 71.20.Nr, 72.20.Ee, 72.20.Fr, 72.20.Ht*

THE EFFECT of γ –RADIATION ON STRUCTURAL TRANSFORMATIONS IN $\text{Cu}_{2-x}\text{Ni}_x\text{S}$ ($x = 0.05, 0.1, 0.15, 0.2$) CRYSTALS

A.G. RZAYEVA¹, V.İ. NASIROV¹, H.B. IBRAHIMOV², A.P. ABDULLAYEV³¹Azerbaijan State Pedagogical University²Institute of Physics of Azerbaijan National Academy of Sciences³Institute of radiation problems Azerbaijan National Academy of Sciences

aybenizrzayeva16@mail.ru, vaqif-nesir@mail.ru

ABSTRACT

The crystals of $\text{Cu}_{2-x}\text{Ni}_x\text{S}$ ($x=0,05; 0,1; 0,15; 0,2$) have been synthesized and grown, determined their composition and structures. The crystals we obtained by the method of differential thermal analysis (DTA) have been studied before and after γ -irradiation with a dose of 25 Mrad. It has been established that this irradiation has a slight influence on the temperature of the structural transformations in the considered samples.

Key words: structure, structural transformations, γ -irradiation, modification, endoeffect, crystal.

γ -ŞÜALANMANIN $\text{Cu}_{2-x}\text{Ni}_x\text{S}$ ($x=0,05; 0,1; 0,15; 0,2$) KRİSTALLARINDA QURULUŞ ÇEVİRLMƏLƏRİNƏ TƏSİRİ

XÜLASƏ

$\text{Cu}_{2-x}\text{Ni}_x\text{S}$ ($x=0,05; 0,1; 0,15; 0,2$) birləşmələri sintez olunaraq monokristalları göyərdilmiş, tərkib və quruluşları təyin edilmişdir. Alınan kristallar diferensial termik analiz üsulu ilə γ -şüalanmadan əvvəl və sonra (25 Mrad) tədqiq olunaraq müəyyən edilmişdir ki, həmin dozada şüalanma tədqiq olunan kristallarda quruluş çevrilmələrinin temperaturuna nəzərəcarpacaq dərəcədə təsir göstərmir.

Açar sözlər: quruluş, quruluş çevrilmələri, γ -şüalanma, modifikasiya, endoeffekt, kristal.

ВЛИЯНИЕ γ – ИЗЛУЧЕНИЯ НА СТРУКТУРНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В КРИСТАЛЛАХ $\text{Cu}_{2-x}\text{Ni}_x\text{S}$ ($x=0,05; 0,1; 0,15; 0,2$)

РЕЗЮМЕ

Синтезированы и выращены монокристаллы $\text{Cu}_{2-x}\text{Ni}_x\text{S}$ ($x=0,05; 0,1; 0,15; 0,2$) определены их состав и структуры. Полученные нами кристаллы методом дифференциально термического анализа (ДТА) исследовались до и после γ -облучения дозой 25 Мрад. Установлено, что это облучение незначительно влияет на температуру структурных превращений в исследуемых образцах.

Ключевые слова: структура, структурные превращения, γ -облучение, модификация, эндоэффект, кристалл.

It is known that copper and sulfur form a series of stable intermediate phases at different temperatures. They are described by the formulas Cu_xS ($x = 1,7-2,0$) and Cu_xS . [1-3] At 25 °C, the following phases are stable: Cu_2S , $\text{Cu}_{1.96}\text{S}$, $\text{Cu}_{1.79-1.765}\text{S}$, and CuS . Note that in the connection of Cu-S systems, metallic atoms are very mobile and, depending on external thermodynamic conditions, they can freely flow through the voids of the crystal lattice. This circumstance can cause numerous phase transformations and changes in the physicochemical properties of these compounds.

According to [4], Cu_2S has three modifications: orthorhombic stable to 103.5°, hexagonal stable in the temperature range of 103.5-435°C, and cubic, existing at temperatures above 435°C.

In the present work, the results of investigations of the effect of irradiation on structural transformations in $\text{Cu}_{2-x}\text{Ni}_x\text{S}$ ($x = 0.05, 0.1, 0.15, 0.2$) using the DTA method before and after irradiation are presented.

For the synthesis of $\text{Cu}_{2-x}\text{Ni}_x\text{S}$ ($x = 0.05, 0.1, 0.15, 0.2$), the initial elements of the following cleaned: Cu-99.998, Ni-99.90 and S of the grade OCF. The quartz ampoule was filled with the starting materials in the amount necessary for the given composition. Ampoules were evacuated to a pressure of 0.193 Pa. The synthesis was carried out in the temperature range 800-1150°C. For homogenization, the synthesized samples were annealed at 800 °C for 100 hours. To obtain single crystal samples of the crystals studied, a combination of slow cooling and Bridgman methods was chosen.

X-ray studies were carried out on a D8ADVANCE powder diffractometer of Bruker firm in the temperature range 300-1400 K, using a temperature chamber TTK 755. The results of these studies are given in [5, 6, 7]. On the basis of these studies, it was established that in the temperature range from room temperature to melting points (1410 K) in $\text{Cu}_{2-x}\text{Ni}_x\text{S}$ crystals ($x = 0.05, 0.1, 0.15, 0.2$), there are three polymorphic modifications. X-ray studies have shown that various transformations in these crystals occur according to the scheme: orthorhombic → hexagonal → cubic. To clarify the effect of γ -radiation on the character of structural transformations in the crystals under study, we performed a series of DTA studies.

The experiments were performed on a scanning thermo-analyzer of the "Perkin Elmer STA 6000" type (USA). In the given device the following physico-chemical processes are simultaneously fixed: differential thermal DTA and thermogravimetric - TG. The measurements were carried out under ordinary.

The obtained derivative $\text{Cu}_{1.95}\text{Ni}_{0.05}\text{S}$ shows that there are four endoeffects on the DTA curve: 106°C, 483°C, 522°C; 930°C and two exoeffects: 432°C, 681°C. On the TG curve, the endoeffect, observed at 106°C, is also observed. This shows that at $T = 106^\circ\text{C}$ (379K) structural transformations take place in this sample, which is confirmed by X-ray diffraction [5]. The conversion energy is 1150 J, and the enthalpy is 15.66 J / g. On the TG curve, in the temperature range 20-2400C, no changes in mass are observed, and in the range 240-4830C the mass increases by 6.8% due to thermal oxidation.

Endo-effects detected at 483°C, 522°C show that in this crystal structural transformation occurs again, the energy of which is 860.3 J, enthalpy $H = 7.45$ J / g. The energy of the endoeffect detected at 522 °C is $E = 737.03$ J, and the enthalpy $H = 7.45$ J / g

On the basis of X-ray studies, we can say that at 483°C ($T = 756\text{K}$) in a $\text{Cu}_{1.95}\text{Ni}_{0.055}\text{S}$ crystal, a hexagonal cubic transformation takes place. The results of the DTA study are given in Table 1, which shows that in all the investigated crystals, the first endoeffects detected at temperatures of 106°C, 1120C, 1060C correspond to the temperatures of the structural transformations. We note that with an increase in the amount of Ni in Cu_2S , the energy of these endoeffects increases, and the enthalpy decreases.

Table 1. The results of DTA studies in $\text{Cu}_{2-x}\text{Ni}_x\text{S}$ ($x=0,05; 0,1; 0,15; 0,2$)

Composition samples	Temperature Effects, t°C	Energy of Endoeffects ΔE , J	Enthalpy H, J / G	The temperature interval of mass loss by TG, t°C		
$\text{Cu}_{1.95}\text{Ni}_{0.05}\text{S}$	106	1150	15,66	20-241	241-484	483~250
	483	860,3	8,69	const	Increased	Decreased on
	522	737,83	7,48		on 6.8%	13,8%
	930	-	-			
$\text{Cu}_{1.90}\text{Ni}_{0.5}\text{S}$	106	1609,4	17,7	20-320	320-950	495-950
	400	4102,91	37,50	const	Increased on 6.34%	Decreased
	503	311,43	2,86			on 13,8%
	530	433,72	3,96			
	656	272,24	24,90			

$\text{Cu}_{1,85}\text{Ni}_{0,15}\text{S}$	112	934,04	15,76	20-23	239-495	
	452	272,87	4,58	const	Decreased	
	532	528,96	8,28		on 5%	
	587	153,92	2,58			
$\text{Cu}_{1,80}\text{Ni}_{0,20}\text{S}$	106	1955	13,61	20-228	228-630	630-950
	300	-	-	const	Increased on	Decreased on
	344	-	-		4%	15 %
	803	5308,71	36,94			

The observed endoeffect at 803°C in the $\text{Cu}_{1,80}\text{Ni}_{0,20}\text{S}$ crystal also shows a structural transformation, which confirms the X-ray study [6]. The conversion energy is $E = 30.8 \text{ J}$. In the investigated crystals, under the influence of irradiation with a dose of 25 Mrad, similar studies were carried out. The results of these studies (for two crystals) are given in Table 2. In the crystal $\text{Cu}_{1,95}\text{Ni}_{0,05}\text{S}$, 4 endoeffects are reflected: 111,9°C, 449,7°C, 532°C, 666°C. The endo-effects obtained from $\text{Cu}_{1,85}\text{Ni}_{0,15}\text{S}$ are found at temperatures of 111.6°C, 444.2°C, 528.0°C and 543.0°C. Comparing Tables 1 and 2, it is seen that in the $\text{Cu}_{1,95}\text{Ni}_{0,05}\text{S}$ crystal, the temperature of the first endoeffect increased by 50C, and in the sample $\text{Cu}_{1,85}\text{Ni}_{0,15}\text{S}$, and the temperature and energy slightly decreased. An increase in the enthalpy is observed.

Thus, experiments show that irradiation with γ -rays of the investigated crystals does not cause a significant change in the nature and number of structural transformations. This irradiation slightly affects the transformation temperature.

Table 2. The results of the DTA study of $\text{Cu}_{2-x}\text{Ni}_x\text{S}$ ($x = 0.015, 0.15$) irradiated with doses of 25 Mrad.

Composition of samples	The temperature of endoeffects, t°C	Enthalpy H, J / g
$\text{Cu}_{1,95}\text{Ni}_{0,05}\text{S}$	111,2	20,01
	449,7	3,263
	532,9	20,59
	666,0	4,608
$\text{Cu}_{1,85}\text{Ni}_{0,15}\text{S}$	111,6	14,85
	444,4	2,637
	528,0	0,1417
	543,0	1,253

REFERENCES

1. Alsen N. Uber die cristallstructuren van covellin (CuS) and cupterglamz (Cu_2S). Geol.Forening. I. Stokholm Forhand.1931, v.53, p.111-120.
2. Buerger M.S., Buerger N.W. Low chalcocite and ligh chalcocite. Amer.Miner. 1944,v.29, №1-2, p.55-65,
3. Djurle E.An. X-ray stufy in the system Cu-S. Acta Chem. Scand.1958, v.12, №7, p.1415-1427.
4. Абрикосов Н.Х. и др. Полупроводниковые халькогениды и сплавы на их основе. Изд. «Наука», 1975, 220 стр.
1. Nasirov V.I., Rzayeva A.G., Ibrahimov H.B. Structural phase transformation in $\text{Cu}_{1,80}\text{Ni}_{0,2}\text{S}$ crystal. Докл. НАН. Азерб. 2015, V.LXXI, №3, P.28-32,
6. Nasirov V.I., Rzaeva A.G., Ibrahimov H.B. Transformation in $\text{Cu}_{1,95}\text{Ni}_{0,05}\text{S}$ crystals. Crystallogrphy Reports, 2016, v.61, 7, p.1102-1104
7. Nasirov V.I., Rzaeva A.G., Ibrahimov H.B. AzTU-nun Elmi əsərləri. 2015.Cild 2, №2, səh. 16-21.

UOT: 537.621.5, 548.4PACS: 537.621.5, 548.4

FIRST-PRINCIPLE STUDY FERROMAGNETISM FOR ZN VACANCY STATES IN $Zn_{1-x}Cr_xO$, $Zn_{1-x}V_xSnAs_2$ AND $ZnMn_xSn_{1-x}As_2$ COMPOUNDS

G. ORUDZHEV^{1,2}, V. JAFAROVA¹, S. HUSEYNOVA¹

vcafarova@beu.edu.az

¹Institute of Physics (Innovation Sector), 131 H. Javid ave, Baku, Az-1143, AZERBAIJAN²Azerbaijan Technical University, 25 H. Javid ave, Baku, Az-1073, AZERBAIJAN
Baku, AZERBAIJAN

ABSTRACT

At work we present a theoretical study of the magnetic properties of Zn vacancy states in Cr and V, Mn doped hexagonal ZnO and tetrahedrally bonded chalcopyrite ZnSnAs₂ semiconductors, respectively. The structural, electronic and magnetic properties of pure as well as $Zn_{1-x}Cr_xO$, $Zn_{1-x}V_xSnAs_2$ and $ZnMn_xSn_{1-x}As_2$ were studied by the Density Functional Theory method using Atomistix ToolKit program software within the Local Spin Density and Spin Generalized Gradient Approximations. Ab initio calculations were performed for a 32-, 48-, 64-, 96-, 128-, 192- and 256-atoms ZnO and ZnSnAs₂ supercells, show that Zn(Cr)- and Zn(V)-, Mn(Sn)- substitutions leads to a ferromagnetic spin ordering. The obtained that the magnetic moment of supercell is depending on the selection the position of vacancy states.

Keywords: ZnO, ZnSnAs₂, ATK, ab initio calculation, Local Density Approximation, Spin Generalized Gradient Approximation, ferromagnetism, magnetic moment.

ИССЛЕДОВАНИЕ ФЕРРОМАГНЕТИЗМА ДЛЯ ВАКАНСИОННЫХ СОСТОЯНИЙ ZN В СОЕДИНЕНИЯХ $Zn_{1-x}Cr_xO$, $Zn_{1-x}V_xSnAs_2$ И $ZnMn_xSn_{1-x}As_2$ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

АННОТАЦИЯ

На работе мы представляем теоретическое исследование магнитных свойств вакансии Zn в легированных Cr и V, Mn соответственно гексагональных ZnO и с халькопиритом ZnSnAs₂ полупроводниках. Расчеты выполнялись с использованием программных комплексов Atomistix ToolKit, реализующих методы функционала электронной плотности и спин обобщенного градиента аппроксимаций. В качестве объектов, исследования выбраны суперячейки ZnO и ZnSnAs₂, состоящие из 32-, 48-, 64-, 96-, 128-, 192- и 256-атомов с различными комбинациями дефектов (внедрение атомы Cr и V, Mn и вакансии Zn). Показано, что магнитный момент дефектной суперячейки имеет сильную зависимость от концентрации примеси и наличия вакансий.

Ключевые слова: ZnO, ZnSnAs₂, ATK, из первых принципов, Функционала Электронной Плотности и Спин Обобщенного Градиента Аппроксимаций, ферромагнетизм, магнитный момент.

$Zn_{1-x}Cr_xO$, $Zn_{1-x}V_xSnAs_2$ VƏ $ZnMn_xSn_{1-x}As_2$ BİRLƏŞMƏLƏRİNDƏ ZN VAKANSIYA HALLARI ÜÇÜN FERROMAQNİZMİN TƏMƏL PRINSİPLƏRDƏN ÖYRƏNİLMƏSİ

XÜLASƏ

İşdə uyğun olaraq Cr və V, Mn atomları ilə aşqarlanmış ZnO və ZnSnAs₂ yarımkeçirici birləşmələrində Zn vakansiya halları üçün maqnit xassələri təməl prinsiplərdən tədqiq edilmişdir. Hesablamalar Funksional Sıxlıq Nəzəriyyəsinin Lokal Sıxlıq və Ümumiləşmiş Spin Qradient Yaxınlaşmaları istifadə olunmaqla ATK proqram təminatı çərçivəsində yerinə yetirilmişdir. Tədqiqat obyektii olaraq 32-, 48-, 64-, 96-, 128-, 192- və 256-atomdan ibarət $Zn_{1-x}Cr_xO$, $Zn_{1-x}V_xSnAs_2$ və $ZnMn_xSn_{1-x}As_2$ supersəlləri götürülmüş və Zn vakansiya hallarına baxılmışdır. Müəyyən edilmişdir ki, tədqiq edilmiş supercellərdə maqnit momenti vakansiyanın harada (dopant atomdan yaxında və yaxud uzaqda) seçilməsindən və aşqarın konsentrisiyasından asılıdır.

Açar sözlər: ZnO, ZnSnAs₂, ATK, təməl prinsiplərdən hesablama, Lokal Sıxlıq Yaxınlaşması, Ümumiləşmiş Spin Qradient Yaxınlaşması, ferromaqnetizim, maqnit momenti.

1. Introduction

ZnO is a hexagonal material that crystallizes in the wurtzite structure [1]. ZnO with wide band gap has been identified as a promising direct band gap semiconductor material, exhibiting room temperature ferromagnetism when doped with 3d-transition metal ions (Cr, Co, Fe, Mn, Cr or V). Ferromagnetism in transition metal-doped ZnO is theoretically predicted in [2] using ab initio calculations based on density functional theory (DFT) local density approximation (LDA).

ZnSnAs₂ is a II-IV-V₂ tetrahedrally bonded chalcopyrite semiconductor with energy gap within 0.6-0.76 eV at 300 K [3]. The ZnSnAs₂:Mn films grown on InP (001) substrates show a ferromagnetic phase exhibiting high Curie temperature ($T_c=330$ K) [4-6]. This makes ZnSnAs₂ with 3d-elements incorporated a promising candidate for application in spintronics [7].

In this work we study the magnetic properties of Zn vacancy states in Cr-doped ZnO and V-, Mn-doped ZnSnAs₂ by using the ab-initio calculations. Also have been considered ferromagnetic and antiferromagnetic spin ordering of dopant Cr, V and Mn atoms. To simulate the doping effect we have performed our calculations for primitive cell and supercells of ZnO and ZnSnAs₂, using Atomistix ToolKit program software (ATK, <http://quantumwise.com/>) on based Density Functional Theory DFT [8] with local spin density approximation (LSDA) [9] and Spin Generalized Gradient Approximation (SGGA) [10], respectively. In so doing, we have been able to reproduce experimental value of energy gap only using Hubbard_U corrections.

2. Computational details

Our calculations were performed for the primitive cell of ZnO and ZnSnAs₂, and for a number of supercells with as many atoms in the case of Zn vacancy states in Cr-doped ZnO and V-, Mn-doped ZnSnAs₂ by implementing the DFT+U using the ATK programme software, within the LSDA and SGGA methods, respectively. The electron-ion interactions were taken into account through pseudopotentials of the Fritz Haber Institute (FHI). The Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) exchange-correlation functional [11] and Double Zeta Polarized basis sets were used in ATK calculations. The kinetic cut-off energy was 150 Ry. The primitive cell of ZnO and ZnSnAs₂ was relaxed and optimized with force and stress tolerances of 0.01 eV/Å and 0.01 eV/Å³, respectively. The investigated supercells containing Cr-, V and Mn dopant atoms were relaxed with force tolerance of 0.05 eV/Å.

The magnetic moments calculations were done by Mulliken population analysis. The number of the electrons treated as valence electrons was 6 for 12 for Zn (3d¹⁰4s²), 6 for O (2s²2p⁴), Cr (3d⁵4s¹), 5 for V (3d³4s²), 7 for Mn (3d⁵4s²), 4 for Sn (5s²5p²), and 5 for As (4s²4p³). The Hubbard U-parameter we used in our calculations for Cr-, V- and Mn-3d states were 2.32 eV, 2.73 eV and 3.02 eV, respectively.

3. Results and discussion

3.1 Lattice parameters and band structures of pure ZnO and ZnSnAs₂ crystals

The optimized values of the lattice parameters (a , c) for ZnO are in a good agreement with theoretical [12] and experimental dates [12,13,14,15] (Table 1). The values of lattice parameters, anion displacement parameter (u) and tetragonal distortion parameter ($c/2a$) for ZnSnAs₂ are listed in Table 2 together with the relevant experimental results [16-18].

According to the ab initio obtained band structures and the density of states of the pure ZnO and ZnSnAs₂ are a direct band gap non-magnetic semiconductors. Both the valence band

top and conduction band bottom are located at the center of the Brillouin zone. The values of the energy gap of ZnO and ZnSnAs₂ compounds are 3.4 and 0.34 eV, respectively. Spin-up and spin-down states form the same band structure.

Table 1. A comparison between the calculated, other theoretical and experimental lattice parameters for ZnO.

Parametr	This work	Theor. [12]	Exp. [12]	Exp. [13]	Exp. [14]	Exp. [15]
$a, \text{Å}$	3.2495	3.238	3.258	3.249	3.250	3.275
$c, \text{Å}$	5.2069	5.232	5.220	5.206	5.204	5.247
c/a	1.60	1.62	1.60	1.60	1.60	1.60

Table 2. The calculated and experimental lattice parameters, the anion displacement parameter and the tetragonal distortion parameter for ZnSnAs₂.

Parameters	This work	Ref. [16]	Ref. [17]	Ref.[18]
$a, \text{Å}$	5.836	5.852	5.853	5.85
$c, \text{Å}$	11.776	11.703	11.712	11.70
$c/2a$	1.010	1.000	1.000	1.00
u	0.2315	0.231	-	0.231

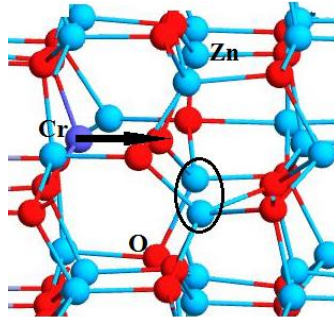
3.2 Cr(Zn)+vacancy(Zn) in the ZnO

In case of Cr(Zn) substitution and in presence of one Zn-vacancy which positioned far from the dopant the Cr atom creates magnetic moment 2.173 μ_B . The magnetic moment of 4 O-atoms bonded with dopant Cr atom is -0.143 μ_B , the contribution from the other 44 oxygen atoms and 46 zinc atoms are negligible (-0.047 μ_B and 0.007 μ_B respectively). The total magnetic moment of supercell is 1.989 μ_B and decreases 1.395 μ_B in comparison free case vacancy [19, 20].

Almost the same total result is obtained at other positions of Zn-vacancy. In the particular case, when Zn-vacancy is positioned near the dopant Cr atom (see, Fig. 1) the total magnetic moment of supercell is 1.995 μ_B (composed mainly 2.077 μ_B from Cr and -0.103 μ_B from 48 O atoms; the total magnetic moment by other 4 O atoms from neighborhood of the dopant is -0.094 μ_B , the contribution from the oxygen atoms vicinity of vacancy is negligible (0.002 μ_B)).

Thus, in case of Zn-vacancy, regardless of its position in the structure, magnetization of the supercell is approximately the same, i.e., the total magnetic moment of supercell decreases by nearly 1.4 μ_B in comparison with vacancy-free case.

Figure 1. The structure of Zn₄₇Cr₁O₄₈ supercell with Zn vacancy. The vacancy position is encircled. Magnetic moments are shown by black arrows.



As in other cases the participation of 4 O atoms with dangling bonds vicinity of the vacancy in the magnetization is very weak. Regarding the changes of the structure, obtained from the relaxation, 2 O atoms have been tightened to the vacancy, but other 2 O atoms atoms have been removed from the vacancy.

Thus, Cr(Zn) substitution+Zn-vacancy in 96-atoms supercell strengthens (by nearly $1.2 \mu_B$) the total magnetic moment in comparison with the Zn-vacancy.

3.3 V(Zn) substitution+Zn-vacancy in $ZnSnAs_2$

In the V(Zn) substitution and in presence one Zn-vacancy which positioned far from the dopant the calculated total magnetic moment of 96-atoms supercell is $2.31 \mu_B$. The dopant V atom in this case creates slightly smaller magnetic moment $2.569 \mu_B$ and 48 As atoms weakens total moment by the amount $-0.291 \mu_B$ and the main contribution in this case, again, belongs to the 4 As atoms neighboring with the dopant. In comparison with the vacancy-free case [19, 20] total field weakening is $\sim 0.7 \mu_B$.

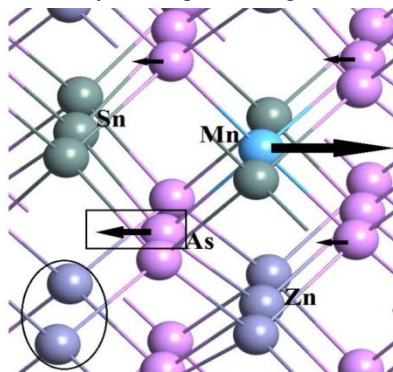
Let the Zn-vacancy is chosen so that one of As atoms chemically bonded with the V dopant loses one bond due to the vacancy. Structure relaxation reveals, the As atoms from vicinity of the vacancy are exposed to some displacement and tightened to the vacancy position in the structure. According to the Mulliken population analysis in this case the total magnetic moment of supercell is greatly weakened ($1.093 \mu_B$); the dopant V atom creates a smaller magnetic moment $2.412 \mu_B$, which is attenuated with 48 arsenic atoms more stronger, $-1.187 \mu_B$ (the negative contribution of $4-x$ As atoms from vicinity of the dopant is $-0.772 \mu_B$). Ultimately, the total magnetic moment of the supercell decreases by the amount $1.907 \mu_B$ as compared to vacancy-free case.

Thus, the change of magnetic moment of the supercell due to one Zn-vacancy is $(-0.7 \div -1.9) \mu_B$ depending on position of the vacancy.

3.3 Mn(Sn) substitution+Zn-vacancy in $ZnSnAs_2$

Mulliken population analysis for the $Zn_{24}Sn_{22}Mn_1As_{48}$ supercell with one Zn vacancy (Fig. 2) results in the following partial magnetic moments if vacancy is positioned near the Mn atom: 4.714 from Mn, -0.037 from 23 Zn, -0.017 from 23 Sn, and $-1.605 \mu_B$ from 48 As atoms. The total magnetic moment is $3.055 \mu_B$. In other words, it is almost the same as the one in the vacancy free case.

Figure 2. The structure of $Zn_{24}Sn_{22}Mn_1As_{48}$ supercell with Zn vacancy. The vacancy position is encircled. The As atom near the vacancy is framed by rectangular. Magnetic moments are shown by black arrows.



Note that the magnetic moment of the As near the vacancy is noticeably larger than that of the other As atoms, which results in the reduced total moment of the structure. On the other hand, a significant increase of the total magnetic moment is possible if Zn vacancy is positioned far from the As atom neighboring Mn. Calculations show that in this case the total magnetic moment can reach $3.627 \mu_B$ which is already much above $3 \mu_B$.

4. Conclusion

Ab initio calculations performed for a 32-, 48-, 64-, 96-, 128-, 192- and 256-atoms ZnO and ZnSnAs₂ supercells. Due to the ab initio obtained band structures and density of states of the pure ZnO and ZnSnAs₂ compounds are a direct band gap non-magnetic semiconductors. Mulliken population analysis shows that, when Cr(Zn) substitution +Zn-vacancy in ZnO and V (Zn)-, Mn(Sn) substitutions+Zn-vacancies in ZnSnAs₂ lead to a ferromagnetic spin ordering. Note that, the doping of ZnO and ZnSnAs₂ with the transient Cr and V, Mn atoms would lead to the magnetization of the structure, because of the unpaired electrons in the partially filled Cr- and V-, Mn-3d orbitals.

The presence of vacancies in the structure affects the magnetization (increases or reduces the magnetic moment of the supercell).

ACKNOWLEDGEMENTS

This work was partly supported by the Science Development Foundation under the President of the Republic of Azerbaijan-grant No EIF-BGM-2-BRFTF-1-2012/2013-07/03/1-M-05.

REFERENCES

- [1] T. Makino, Y. Segawa, M. Kawasaki et al. Appl. Phys. Lett. **78**, 1237 (2001).
- [2] K. Sato and H. Katayama-Yoshida. Jpn. J. Appl. Phys. **39**, L555 (2000).
- [3] V. Brudnyi, T. Vedernikova. Russian Journal of Phys. Techn. Semicon. **43**, 433 (2009).
- [4] S. Choi, G. Cha, S. Hong et al. Solid State Communications. **122**, 165 (2002).
- [5] N. Uchitomi, H. Oomae, J. Asubar, H. Endo and Y. Jinbo. Jpn. J. Appl. Phys. **50**, 05FB02-1 (2011).
- [6] J. Asubar, Y. Jinbo, N. Uchitomi. Journal of Crystal Growth. **311**, 929 (2009).
- [7] G. Medvedkin, T. Ishibashi, T. Nishi, K. Hayata, Y. Hasegawa and K. Sato. Jpn. J. Appl. Phys. **39**, L949 (2000).
- [8] P. Hohenberg, Kohn W. Phys. Rev., **136**, B864 (1964).
- [9] V.V. Karasiev, T. Sjoström, J.W. Dufty, S.B. Trickey. Phys. Rev. Lett. **112**, 076403 (2014).
- [10] J. Perdew, J. Tao, V. Staroverov and G. Scuseria. J. Chem. Phys. **120**, 6898 (2004).
- [11] J. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. Phys. Rev. Lett., **77**, 3865 (1996).
- [12] C. Jin, Y. Yang et al. J. Mater. Chem. C, **2**, 2992 (2014).
- [13] A. Arif, O. Belahssen et al. J. of Semicon., **36**, 013001-1 (2015).
- [14] F. Decremps, F. Datchi et al. Phys. Rev. B, **68**, 104101 (2003).
- [15] T. Malaeru, J. Neamtu et al. Rev. Roum. Chim. **57**, 857 (2012).
- [16] D. Gasson, P. Holmes, I. Jennings, B. Marathe, and J. Parrot. J. Phys. Chem. Solids **23**, 1291 (1962).
- [17] A. Vaipolin. Sov. Phys. - Fiz. Tverd. Tela **15**, 1430 (1973).
- [18] A. Mejidov, R. Muradov et al. Trans. Ser. Phys.-Math. Tech. Sci., Physics and Astronomy **2**, 110 (2004).
- [19] V.N. Jafarova, S.S. Huseynova. I International Scientific Conference Of Young Researchers, BEU, 36 (2017).
- [20] G.S. Orudzhev, V.N. Jafarova, S.S. Huseynova. Azerbaijan Journal of Physics, **XXVIII**, 2, 15 (2017).

UOT: 530.145PACS : 12.40.Yx, 12.40.Nn

a_1 -MESON SPIN 3/2 Δ -BARYONS COUPLING CONSTANT FROM THE SOFT-WALL ADS/QCD MODEL

HUSEYNOVA N.J¹¹Institute for Physical Problems of BSU

Baku/AZERBAIJAN

nerminh236@gmail.com

ABSTRACT

We consider a_1 -axial vector meson with spin 3/2 Δ -delta baryons interaction in the framework of the soft-wall model of AdS/QCD. The axial vector field is determined by the gauge fields with left and right chiral symmetries and was included the pseudoscalar X field for breaking chiral symmetry in the bulk of Anti-de Sitter(AdS) space. The Lagrangian and equations of motion is written in the bulk of AdS space and the profile function is found from the solution of equations. In addition to these fields, the Rarita-Schwinger field for the Δ -delta baryons is introduced inside the AdS space, and the profile functions for them are found from Lagrangian. According AdS/CFT correspondence using from the bulk interaction Lagrangian we derived an integral over an extra dimension for the a_1 -axial vector meson spin 3/2 Δ -delta baryons $g_{a_1\Delta\Delta}$ coupling constant.

Keywords: Anti-de Sitter space, Rarita-Schwinger field, meson, delta baryon, profile function.

ADS/KXD-NİN YUMŞAQ DİVAR MODELİNDƏ a_1 -MEZONUN SPİNİ 3/2 OLAN Δ -BARİONLARLA QARŞILIQLI TƏSİR SABİTİ

XÜLASƏ

Tədqiqat işində a_1 -mezon ilə spini 3/2 Δ -delta barionların qarşılıqlı təsir məsələsinə AdS/KXD-nin yumşaq divar modeli çərçivəsində baxılmışdır. Anti de Sitter (AdS) fəzasının daxilində sol və sağ kiral simmetriyaya malik olan kalibrləşmə sahələri vasitəsilə aksial vektor sahə və kiral simmetriyanı pozmaq üçün psevdoskalyar sahə daxil edilmişdir. Bu sahələr üçün AdS fəzasının daxilində Laqranjian yazılmış, hərəkət tənlikləri alınmış və bu tənliklərin həlli olan profil funksiyaları tapılmışdır. Bunlardan əlavə AdS fəzasının daxilində spini 3/2 olan Δ -delta barionlar üçün Rarita-Şvinger sahəsi daxil edilmiş, onlar üçün Laqranjian yazılmış, hərəkət tənlikləri alınmış və bu tənliklərin həlli olan profil funksiyaları tapılmışdır. AdS/KSN uyğunluğuna əsaslanaraq daxili fəzada yazılmış qarşılıqlı təsir Lagranjianından istifadə edərək a_1 -mezon spini 3/2 Δ -delta barion qarşılıqlı təsir sabiti $g_{a_1\Delta\Delta}$ üçün əlavə ölçü üzrə integral ifadə alınmışdır.

Açar sözlər: Anti de Sitter fəzası, Rarita-Şvinger sahəsi, mezon, delta barion, profil funksiya.

КОНСТАНТА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ a_1 -МЕЗОНА С Δ -БАРИОНАМИ СО СПИНОМ 3/2 В МОДЕЛИ МЯГКОЙ СТЕНЫ АДС/КХД

РЕЗЮМЕ

В данном исследовании мы рассматриваем взаимодействие a_1 - аксиального вектор-мезона с Δ -дельта барионами со спином 3/2 в рамках модели мягкой стены АДС/КХД. С помощью калибровочных полей с левому и правому киральными симметриями определены аксиальные векторные поля и введено псевдоскалярное поле для нарушение киральной симметрии внутри пространство АДС. Внутри пространство АДС записан Лагранжиан для этих полей и профильные функции. Помимо этих полей внутри пространство АДС введено поле Рариты-Швингера для Δ -дельта барионов и профильные функции для них найдены из Лагранжиана. Согласно АДС/КТП соответствия мы получили соответствие константы взаимодействия a_1 -аксиального вектор-мезона с Δ -дельта барионами в качестве интеграла по дополнительному измерению.

Ключевые слова: пространство Анти-де Ситтера, поле Рариты-Швингера, мезон, дельта барион, профильные функции.

I. Introduction.

One of the greatest developments in particle physics is gauge-gravity duality which has conjectured by Maldacena during the last decade. This conjecture includes the possibility of obtaining accurate results in the strong coupling limit of gauge theories from classical calculations of gravitationally interacting fields in a higher dimensional space. The original correspondence was between a particular string theory in 10-dimensional and a particular conformal field theory in 4-dimensional, namely the large N_c limit of $N=4$ super Yang-Mills theory.

A particular implementation motivated by the original AdS/CFT correspondence is the “bottom-up” approach, which is a way of using the AdS/CFT correspondence as motivation for modeling QCD starting from a 5D space. Since the beta function of $N=4$ SUSY Yang-Mills is vanishing, it is described by conformal field theory (CFT). From this reason the correspondence is called the AdS/CFT. After Maldacena, the original version of the AdS/CFT duality has been extended to less supersymmetric cases and even to non-supersymmetric ones. Besides the idea of the AdS/CFT duality is deeply connected to that of “holography”, which was proposed by several people.

AdS/QCD is a model which has established according to AdS/CFT correspondence. The main idea of AdS/QCD is to construct a model that includes important properties of the original 4D field theory, such as chiral symmetry breaking and confinement by introducing an extra spatial direction to the 4D space-time. There are two models of AdS/QCD. First one is a soft-wall model where the confinement is modeled by adding an extra 5D Dilaton field to action integral and action was integrated from 0 to ∞ . The second one is hard-wall model where the confinement is modeled by cutting space at infrared boundary z_m and action was integrated from 0 to z_m .

In the present paper, we have interested in the soft-wall model of AdS/QCD and have calculated the a_1 -axial vector meson spin 3/2 Δ -delta baryons $g_{a_1\Delta\Delta}$ coupling constant in the framework of this model[1,2].

The purpose of this manuscript is as follows: At first, in Section II we would like to review the soft-wall model of AdS/QCD in detail with a simple setup involving bulk geometry of this model and the axial vector current for the spin 3/2 Δ -delta baryons. Then we give profile functions for the axial vector meson and spin 3/2 delta baryons in the soft-wall model of AdS/QCD. In Section III, we write lagrangian for the a_1 -axial vector meson-spin 3/2 Δ -delta baryons interaction in the bulk of AdS space. According to AdS/CFT correspondence using from the bulk interaction Lagrangian we derived an integral over an extra dimension for the a_1 -axial vector meson spin 3/2 Δ -delta baryons $g_{a_1\Delta\Delta}$ coupling constant.

II. Soft-wall model of AdS/QCD

In the soft-wall model the confinement is modeled by adding an extra 5D Dilaton field as an exponential multiplying to action integral where action was integrate from 0 to ∞ with the following formula [3,4]:

$$S = \int d^5x \sqrt{g} e^{-k^2 z^2} \mathcal{L}, \quad (1)$$

where $g = |\det g_{MN}|$ ($M, N=0,1,2,3,4,5$) and the metric of AdS space is defined as follow

$$ds^2 = g_{MN} dx^M dx^N = e^{2A(z)} (dz^2 + \eta_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu) = \frac{1}{z^2} (-dz^2 + \eta_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu), \mu, \nu = 0,1,2, d-1. \quad (2)$$

Here $\Phi = k^2 z^2$ is a Dilaton field and $\eta_{\mu\nu}$ is a Minkovski metrics.

$$\eta_{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1) \quad (3)$$

Dilaton field is introduced to make the integral over z to finite at infrared boundary of AdS space ($z \rightarrow \infty$) and for the soft-wall model it was choosen as follow [5,6,7]:

$$\Phi - A = k^2 z^2 + \log z \quad (4)$$

The axial vector current

As we know axial-vector isovector current of nucleons in QCD is given with following formula :

$$j^{\mu,a}(x) = \bar{\psi}(x) \gamma^\mu \gamma^5 \frac{\tau^a}{2} \psi(x), a = 1,2,3. \quad (5)$$

In a weak interaction the axial-vector isovector current is a partially conserved :

$$\partial_\mu j^{\mu,a}(x) = i \bar{\psi}(x) \gamma^5 \{ \frac{\tau^a}{2}, \mu \} \psi(x), \quad (6)$$

Here $\psi = \begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix}$ is a doublet and μ is a mass matrix of u and d quarks: $\mu = \text{diag}(m_u, m_d)$ ($m_u = m_d = m$). In one-nucleon states a matrix element of the axial-vector isovector current is defined in terms of $G_A(q^2)$ axial-vector and $G_P(q^2)$ induced pseudoscalar form-factors [8,9]:

$$\langle N(p') | j^{\mu,a}(0) | N(p) \rangle = \bar{u}(p') \left[\gamma^\mu \gamma^5 G_A(q^2) + \frac{q^\mu}{2m_N} \gamma^5 G_P(q^2) \right] \frac{\tau^a}{2} u(p), \quad (7)$$

where $q_\mu = p'_\mu - p_\mu$ is a total interaction momentum and m_N -is a nucleon mass.

$G_A(q^2)$ axial-vector, $G_P(q^2)$ induced pseudoscalar vø $G_{\pi N}(q^2)$ pion-nucleon form-factors are connected with each other as following expression:

$$2m_N G_A(q^2) + \frac{q^2}{2m_N} G_P(q^2) = 2 \frac{M_\pi^2 F_\pi}{M_\pi^2 - q^2} G_{\pi N}(q^2). \quad (8)$$

Similarly axial-vector isovector current of nucleons the axial-vector isovector current of the spin 3/2 Δ -delta baryons in QCD is expressed with formula (5).

Profile functions of axial vector meson in the soft-wall model of AdS/QCD

According to AdS/CFT correspondence for vector fields the ultraviolet boundary value of Kaluza-Kleyn modes of vector field correspondence to the states of vector mesons. Similarly vector mesons, the axial-vector mesons correspondence to the ultraviolet boundary value of Kaluza-Kleyn modes of transverse component of axial-vector gauge field [3,4]. The axial-vector field consist of A_\perp transverse and A_\parallel longitudinal components: $A = A_\perp + A_\parallel$. In the bulk of AdS space axial-vector gauge symmetry is broken, so only A_\parallel longitudinal components have physical meaning and are related with pion field. For simplicity this component is fixed by using from the $A_5 = 0$ gauge condition. Thus the action for axial-vector field is expressed in term of:

$$S_{AdS}^{aksial} = -\frac{1}{4g_5^2} \int d^5 x \sqrt{g} e^{-k^2 z^2} \text{Tr}(F_L^2 + F_R^2), \quad (9)$$

where $F_{MN} = \partial_M A_N - \partial_N A_M - i[A_M, A_N]$. 5D coupling constant depends on number of color $g_5^2 = \frac{12\pi^2}{N_c}$ and $g_5 = 2\pi$. After using Fourier transformation the $A_{1\mu}^a(x, z)$ transverse

component of axial-vector gauge field is written in momentum space. Equation of motion for the Fourier component of the $A_{\perp\mu}^a(p, z)$ axial-vector gauge field is written from the expression (9) as follow:

$$\left[\partial_z \left(\frac{1}{z} e^{-k^2 z^2} \partial_z \tilde{A}_{\mu}^a(p, z) \right) + p^2 \frac{1}{z} e^{-k^2 z^2} \tilde{A}_{\mu}^a(p, z) \right]_{\perp} = 0. \quad (10)$$

$A(p, z)$ bulk-boundary propagator is introduced with $\tilde{A}_{\perp\mu}^a(p, z) = A(p, z) A_{\mu}^a(p)$ condition. It satisfies equation (10) with boundary conditions $A(p, 0) = 1$ and $A'(p, z_0) = 0$. For the $A_n(z)$ n-th mode KK decomposition with $A(p, z) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n(z) f_n(p)$ and $m_n^2 = p^2$ equation of motion is as follow:

$$\partial_z (e^{-B(z)} \partial_z A_n) + m_n^2 e^{-B(z)} A_n = 0, \quad (11)$$

where $B(z) = \Phi(z) - A(z) = k^2 z^2 + \ln z$. After substitution

$$A_n(z) = e^{B(z)/2} \psi_n(z), \quad (12)$$

similarly vector field equation of motion is written like-Shredinger equation and it has a solution as follow:

$$\psi_n(z) = e^{-k^2 z^2/2} (kz)^{m+1/2} \sqrt{\frac{2n!}{(m+n)!}} L_n^m(k^2 z^2). \quad (13)$$

Here $L_n^m(k^2 z^2)$ is a Lager polinom.

For a_1 -mezon için $m = 1$ və (13) has a solution [8,9]:

$$A_n(z) = k^2 z^2 \sqrt{\frac{2}{(1+n)}} L_n^1(k^2 z^2). \quad (14)$$

Profile functions of spin 3/2 delta baryons in the soft-wall model of AdS/QCD

From the particle physics we know that Δ^- baryons have $\Delta^0 = udd$, $\Delta^+ = uud$, $\Delta^- = ddd$ və $\Delta^{++} = uuu$ states. According to Pauli principle Δ -baryons include two spin states with spins 1/2 and 2/3. According to the AdS/CFT correspondence, the spin 1/2 baryon operator at the boundary will correspond to a bulk Dirac field [5,6] while the spin 3/2 baryon operator to a bulk Rarita-Schwinger field at the boundary field [3].

A simple holographic description of spin 3/2 baryons in the boundary theory is given by the Rarita-Schwinger fields in the bulk [4]. In AdS space the 5D action for the Rarita-Schwinger field is given similarly to 4D field:

$$S_F = \int d^5x \sqrt{g} e^{-\Phi(z)} \left(i \bar{\Psi}_A \Gamma^{ABC} D_B \Psi_C - (m_1 + \frac{\Phi}{2}) \bar{\Psi}_A \Psi^A - (m_2 - \frac{\Phi}{2}) \bar{\Psi}_A \Gamma^{AB} \Psi_B \right). \quad (15)$$

Where $\Psi_A = e_A^N \Psi_N$, $e_A^N = z \delta_A^N$ və $g^{MN} = e_A^M e_B^N \eta^{AB}$. $D_N = \partial_N + \frac{1}{8} \omega_{NAB} [\Gamma^A, \Gamma^B] - iV_N$ is a covariant derivative. Non-zero components of spin connection are: $\omega_{\mu\nu z} = -\omega_{\nu\mu z} = \frac{1}{z} \eta_{\mu\nu}$.

$\Gamma^A = (\gamma^\mu, -i\gamma^5)$ 5D gamma matrices satisfy $\{\Gamma^A, \Gamma^B\} = 2\eta^{AB}$ relation. Notations is used during the calculations:

$$\Gamma^{ABC} = \frac{1}{2} (\Gamma^B \Gamma^C \Gamma^A - \Gamma^A \Gamma^C \Gamma^B), \quad \Gamma^{AB} = \frac{1}{2i} [\Gamma^A, \Gamma^B]. \quad (16)$$

From the expression for action (15) one can find the equation of motion:

$$i\Gamma^A (D_A \Psi_B - D_B \Psi_A) - (m_- + \Phi) \Psi_B + \frac{m_+}{3} \Gamma_B \Gamma^A \Psi_A = 0. \quad (17)$$

Here $m_{\pm} = m_1 \pm m_2$, m_1 and m_2 – is a mass of vector spinors.

Being a reducible axial vector-spinor the Rarita-Schwinger fields contain not only spin-3/2 components but also spin-1/2 components as well. In 4D, the extra spin-1/2 components can be projected out by a Lorentz-covariant constraint:

$$\gamma^{\mu}\Psi_{\mu} = 0. \quad (18)$$

As in 4D, the following Lorentz-covariant constraint will project out one of the spin-1/2 components from the 5D Rarita-Schwinger fields:

$$e_A^M \Gamma^A \Psi_M = 0, \quad (19)$$

which then gives:

$$\partial^M \Psi_M = 0. \quad (20)$$

for a free particle if combined with equations of motion.

The spin-3/2 baryon operators \mathcal{O}_L and \mathcal{O}_R are transform differently under the $SU(2)_L \times SU(2)_R$ group in the boundary of AdS space. So that in 5D AdS space is introduced two 5D vector spinors [2,5].

Thus, equation of motion is obtain for Rarita-Shwinger field like Dirac equation[3,4]:

$$(iz\Gamma^A \partial_A + 2i\Gamma^5 - (m_- + \Phi))\Psi_{\mu} = 0, (\mu = 0,1,2,3). \quad (21)$$

Left and right chiral field is introduced for the spinors:

$$\begin{aligned} \Psi_{M(R)} &= \frac{1}{2}(1 + \gamma^5)\psi_M, \\ \Psi_{M(L)} &= \frac{1}{2}(1 - \gamma^5)\psi_M. \end{aligned} \quad (22)$$

thus equation of motion from (21) by using (22) is in the form:

$$\begin{aligned} \left[\partial_z^2 - \frac{2(m_- + k^2 z^2)}{z} \partial_z + \frac{2(m_- - k^2 z^2)}{z^2} + p^2 \right] f_R &= 0, \\ \left[\partial_z^2 - \frac{2(m_- + k^2 z^2)}{z} \partial_z + p^2 \right] f_L &= 0. \end{aligned} \quad (23)$$

and profile functions for the spin-3/2 delta baryons are in the form [3,4]:

$$\begin{aligned} F'_{1L}^{(n)}(z) &= n_{1L} \xi^{\alpha} L_n^{(\alpha)}(\xi), \\ F'_{1R}^{(n)}(z) &= n_{1L} \xi^{\alpha - \frac{1}{2}} L_n^{(\alpha-1)}(\xi), \end{aligned} \quad (24)$$

where $\alpha = m_- + \frac{1}{2}$.

The normalization constants in (24) was found from

$$\int_0^{\infty} \frac{dz}{z^{2m_-}} e^{-k^2 z^2} F'_{1L}^{(n)}(z) F'_{1L}^{(m)}(z) = \delta_{nm}, \quad (25)$$

as follow:

$$\begin{aligned} n_L &= \frac{1}{k^{\alpha-1}} \sqrt{\frac{2\Gamma(n+1)}{\Gamma(\alpha+n+1)}}, \\ n_R &= n_L \sqrt{\alpha + n}. \end{aligned} \quad (26)$$

III. a_1 -axial vector meson-spin 3/2 Δ -delta baryons interaction

We use from the 5D action in the bulk of AdS space to calculate a_1 -axial vector meson-spin 3/2 Δ -delta baryons coupling constant in the boundary of this space. This action include interaction between axial-vector field in 5D space and axial-vector current in 4D space.

$$S_{int} = \int d^4x dz e^{-\Phi(z)} \sqrt{g} \mathcal{L}_{int}. \quad (27)$$

According to AdS/CFT correspondence the delta baryon's axial-vector current is written as follow:

$$\langle J_\mu \rangle = -i \frac{\delta Z_{KXD}}{\delta \tilde{A}_\mu^0} \Big|_{\tilde{A}_\mu^0=0} \quad (28)$$

where $Z_{KXD} = e^{iS_{int}}$ and $\tilde{A}_\mu^0 = \tilde{A}_\mu(q, z=0) = A_\mu(q)$ the vacuum expectation value of the axial-vector field ($A(z=0) = 1$), $J_\mu(p', p) = g_{a_1\Delta\Delta} \bar{u}(p') \gamma_\mu u(p)$ is a 4D current in the boundary of AdS space and $q = p' - p$. p' and p are the momentum before and after interaction.

Generally, \mathcal{L}_{int} interaction Lagrangian is construct according to the gauge invariance of the model and consist of from the different interaction terms. For calculating this Lagrangian we use from 3 kind of interaction between the fields in the bulk of AdS space.

1) A minimal interaction Lagrangian term consist of interaction between axial vector field with the current of spinors

$$\mathcal{L}_{a_1\Delta\Delta}^{(0)} = \frac{1}{2} (\bar{\Psi}_1^\nu e_A^M \Gamma^M A_M \Psi_{1\nu} - \bar{\Psi}_2^\nu e_A^M \Gamma^M A_M \Psi_{2\nu}) \quad (29)$$

(29) Lagrangian gives the following integral for coupling:

$$g_{a_1\Delta\Delta}^{(0)nm} = \int_0^\infty \frac{dz}{z^2} e^{-\Phi(z)} A_0(z) \left(F_{1R}^{(n)*}(z) F_{1R}^{(m)}(z) - F_{1L}^{(n)*}(z) F_{1L}^{(m)}(z) \right) \quad (30)$$

where $A_0(z) = (kz)^2 \sqrt{2} L_0^{(1)}(k^2 z^2)$ is a profile function of a 0th KK modes for axial-vector field which UV boundary value correspondence to the ground state of a_1 meson according to AdS/CFT. nm indices indicate initial and final excited states of nucleons.

2) Spinors is interacted with axial-vector field in the bulk of AdS space, so that they have magnetic moments. For this interaction $\mathcal{L}_{FNN}^{(1)}$ Lagrangian is written as below:

$$\mathcal{L}_{F\Delta\Delta}^{(1)} = \frac{i}{2} k_1 e_A^M e_B^N (\bar{\Psi}_1^\nu \Gamma^{MN} F_{MN} \Psi_{1\nu} + \bar{\Psi}_2^\nu \Gamma^{MN} F_{MN} \Psi_{2\nu}), \quad (31)$$

this term gives the following contribution to the coupling integral:

$$g_{a_1\Delta\Delta}^{(1)nm} = \int_0^\infty \frac{k_1 dz}{z^2} e^{-k^2 z^2} \partial_z A_0(z) \left(F_{1R}^{(n)*}(z) F_{1R}^{(m)}(z) + F_{1L}^{(n)*}(z) F_{1L}^{(m)}(z) \right). \quad (32)$$

3) Besides this terms, there is interaction between skalyar field X , axial-vector and spinor fields which called Yukava coupling constant as follow:

$$\mathcal{L}_{F\Delta\Delta}^{(2)} = g_Y e_A^M e_B^N (\bar{\Psi}_1^\nu X \Gamma^M A_M \Psi_{2\nu} + \bar{\Psi}_2^\nu X \Gamma^M A_M \Psi_{1\nu}), \quad (33)$$

From the Yukava interaction we get next contribution for the $g_{a_1\Delta\Delta}^{S,W}$ coupling constant:

$$g_{a_1\Delta\Delta}^{(2)nm} = 2g_Y \int_0^\infty \frac{dz}{z^2} e^{-k^2 z^2} A_0(z) v(z) F_{1L}^{(n)*}(z) F_{1R}^{(m)}(z). \quad (34)$$

These integral expressions is coincide with expression for the axial-vector meson spin 2/3 delta baryons in the framework of hard-wall model besides the exponential factor and

for-mula for profile functions. Thus, we get three expression for the a_1 -meson spin 3/2 Δ -baryons coupling constant in the framework of the soft-wall AdS/QCD model. The total constant is consist of sum of this terms as follow:

$$g_{a_1\Delta\Delta}^{s.w.} = g_{a_1\Delta\Delta}^{(0)nm} + g_{a_1\Delta\Delta}^{(1)nm} + g_{a_1\Delta\Delta}^{(2)nm}. \quad (35)$$

This work has been done under the BSU "50+50" grant. So, Narmin Huseynova thanks BSU for this support.

LITERATURE

1. Erlich J., Katz E., Son D.T. and Stephaov M.A. *QCD and a Holographic Model of Hadrons*, Physics Review Letters 95:261602,2005
2. Karch A., Katz E., Son D.T. and Stephanov M. A. *Linear confinement and AdS/QCD*, Physics Review D 74, 015005 (2006)
3. Abidin Z. and Carlson C. *Nucleon electromagnetic and gravitational form factors from holography*, Physics Review D 79, 115003 (2009)
4. Grigoryan H. R. and Radyushkin A. V. *Structure of Vector Mesons in Holographic Model with Linear Confinement*, Physics Review D 76, 095007 (2007)
5. Ahn H.C., Hong D. K., Park C. and Siwach S. *Spin 3/2 Baryons and Form Factors in AdS/QCD*, Physics Review D 80, 054001 (2009)
6. Hong D. K., Inami T. and Yee H. U. *Baryons in AdS/QCD*, Physics Letters B646:165-171,2007
7. Gherghetta T., Kapusta J. I. and Kelley T. M. *Chiral symmetry breaking in soft-wall AdS/QCD*, Phys. Rev. D79:07 6003,2009
8. Mamedov Sh., Sirvanli B., Atayev İ., Huseynova N. *Nucleon's axial-vector form fac-tor in the hard-wall AdS/QCD model*, Int. J. Theor. Phys., 2017, V. 56, №6, p.1861-1874.
9. Huseynova N. *The axial vector meson-Δ baryon coupling constant from the hard-wall model of AdS/QCD model* International Conference "Modern Trends in Physics" 20-22 April 2017.

UOT:534PACS:71.23.-k

ВНУТРЕННЯЯ И ВНЕШНЯЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ В НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ПРОВОДЯЩИХ СРЕДАХ ЭЛЕКТРОННОГО ТИПА НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА

¹ГАСАНОВ Э.Р., ¹МУСТАФАЕВА Р.К., ²ГАДЖИЕВА В.М.

Бакинский Государственный Университет, AZ-1148, ул. З. Халилова, 23
Институт физики НАН Азербайджана, Баку, AZ-1143 .пр. Г. Джавида, 33
vefa86haciyeva@gmail.com

РЕЗЮМЕ

Построена теория колебания тока в низкоразмерных средах электронного типа носителей заряда. Определены значения частоты нарастающих волн. Найдены значения электрического и магнитного поля при которых происходит излучения энергии. С определены инкремент нарастания возбуждаемых волн. Доказано, что инжекция играет существенный роли для излучения энергии. Показано, что для излучения энергии требуется больше значения электрического поля, чем при возбуждения нарастающих волн внутри среды. Доказано, что с изменением размеров образца частота возникающих колебаний тока очень сильно меняется. Значения внешнего электрического поля при появления колебания тока зависит от размера образца. Когда начинается колебания тока в цепи возникает сопротивление индуктивного характера, а реальная часть импеданса осциллирует с определенным периодом. Инжекция на контактах среды усиливает нарастания волны. Эта среда с указанными размерами может служить как источник излучения энергии.

Ключевые слова: частота, амплитуда, электрон, неравновесные колебания.

AŞAĞI ÖLÇÜLÜ ELEKTRON TİP KEÇİRİCİ MÜHİTLƏRDƏ DAXİLİ VƏ XARİCİ DAYANIQSIZLIQ XÜLASƏ

Aşağı (nanoölçülü) ölçülü elektron tip keçiricikli mühitlərdə cərəyan rəqslərinin nəzəriyyəsi verilmişdir. Yaranan dayanıqsız dalğaların tezlikləri hesablanmışdır. Enerji şüalanmasına uyğun elektrik sahəsinin və maqnit sahəsinin analitik ifadələri hesablanmışdır. Yaranan dalğaların inkrementi hesablanmışdır. İsbat olunmuşdur ki, kontaktlarda olan injeksiya şüalanma üçün vacibdir. İsbat olunmuşdur ki, şüalanma üçün lazım olan elektrik sahəsinin qiyməti daxildə yaranan artan dalğa üçün lazım olan elektrik sahəsinin qiymətindən böyükdür. İsbat olunmuşdur ki, nümunənin ölçüləri dəyişdikcə yaranan rəqslərin tezlikləri kəskin dəyişir. Rəqs yarananda elektrik sahəsinin qiyməti nümunənin ölçülərindən asılı olur. Rəqs yarananda dövrədə induktiv xarakterli müqavimət yaranır. Müqavimətin həqiqi hissəsi müəyyən periodla osilyasiya edir. Kontakda yaranan injeksiya dalğaları gücləndirir. Bu mühit göstərilən ölçülərdə enerji şüalanma mərkəzi ola bilər.

Açar sözlər: tezlik, amplituda, elektron, tarazlıqda olmayan rəqslər.

INTERNAL AND EXTERNAL INSTABILITY IN LOW-DIMENSIONAL CONDUCTIVE CHARGE CARRIER TYPE ELECTRONIC ENVIRONMENTS

ABSTRACT

A theory current fluctuations in low-dimensional electronic Wednesday type of charge carriers. Defines an escalating frequency of waves. Found the values of electric and magnetic fields at which radiation energy happen. With defined increment rise brought by waves. It is proved that the injection of substantial plays the role of radiation energy. It is shown that the radiation of energy requires more than the value of the electric field than the escalating waves excitation inside Wednesday. It has been proven that with resizing the sample frequency transients occur very much changes. The value of the external electric field with the advent of the current fluctuations zavisitotthe size of the sample. When the current fluctuations in the chain occurs the resistance of inductive character, and the real part of impedance oscillates with a certain period. Injection on the contacts Wednesday strengthens the waves rise. This Wednesday with specified sizes mozhetsluzhit as a source of radiation energy.

Keywords: frequency, amplitude, electron, non-equilibrium oscillation.

Введение

Теория квазинейтральных колебаний тока в полупроводниках с определенными глубокими ловушками при наличии внешнего электрического поля и при наличии внешнего электрического и сильного магнитного поля построена в работах [1-4]. В работе [5] с учетом релаксации носителей заряда построена теория колебания тока в полупроводниках с двумя типами носителей заряда. Теория неустойчивости в проводящих средах построена во многих работах. Однако, в этих работах не исследованы влияния размера образца на неустойчивые колебания тока. В этой теоретической работе мы построим теорию колебаний тока в низкоразмерных проводящих средах, во-внешнем постоянном электрическом и магнитном полях. Доказано, что с изменением размеров образца частота возникающих колебаний тока очень сильно меняется. Значения внешнего электрического поля при появления колебания тока зависит от размера образца.

Теория

Плотность тока в проводящих средах с одним типом носителей заряда при наличии электрического и магнитного полей имеет вид: [5]

$$\vec{j} = \rho\mu\vec{E} - \rho\mu_1[Eh] + \rho\mu_2\vec{E} + \nu D\nabla\rho - D_1[\nabla\rho h] + D_2\nabla\rho \quad (1)$$

Здесь: $\vec{H} = \vec{h}H_0$, $\rho = en$, n -концентрация электронов; μ , μ_1 , μ_2 -омические, холловские, фокусировочные подвижности носителей заряда, D , D_1 , D_2 -соответствующие коэффициенты диффузии. К уравнению (1) нужно добавить уравнение Пуассона

$$\text{div} \partial E = \frac{4\pi}{\varepsilon} \rho' \quad (2)$$

Считая, что $j = \vec{j}_0 + \vec{j}'$, $\vec{E} = \vec{E}_0 + \vec{E}'$, $\rho = \rho_0 + \rho'$ и $\vec{E}' \ll \vec{E}_0$, $\rho' \ll \rho_0$, $\vec{j}' \ll \vec{j}_0$

из (1-2) легко получим:

$$\begin{aligned} \vec{j}' = & \vec{g}_0'\rho' + \rho_0\mu_0\vec{E}' + \rho_0\mu_0\vec{E}_0\beta \frac{\vec{E}_0\vec{E}'}{E_0^2} - \rho_0\mu_1[\vec{E}'\vec{h}] - \\ & - \rho_0\mu_1[\vec{E}_0\vec{h}]\beta_1 \frac{\vec{E}_0\vec{E}'}{E_0^2} - \rho_0\mu_1[\vec{E}_0\vec{h}] + \vec{g}_1'\rho' + \rho_0\mu_2\vec{E}' + \rho_0\vec{E}_0\mu_2\beta_2 \frac{\vec{E}_0\vec{E}'}{E_0^2} + D\nabla\rho' - D_1[\nabla\rho h] + D_2\nabla\rho \end{aligned} \quad (3)$$

$$\rho' = \frac{\varepsilon}{4\pi} \text{div} E' \quad (4)$$

Здесь: $\vec{g}_0 = \mu_0\vec{E}_0$, $\vec{g}_1 = \mu_2\vec{E}_0$, $\beta = 2 \frac{dh_1\mu}{dh_1E_0^2}$, $\beta_1 = 2 \frac{dh_1\mu_1}{dh_1E_0^2}$, $\beta_2 = 2 \frac{dh_1\mu_2}{dh_1E_0^2}$

Направим \vec{E}_0 по x $\vec{E}_0 = \vec{i}E_0$ (\vec{i} – единичный вектор по x).

Уравнение (3) распишем по компонентам

$$\begin{aligned} j'_x = & [\rho_0\mu_0(1+\beta) + \rho_0\mu_1(1+\beta_1)\nu + \rho_0\mu_2(1+\beta_2)]E'_x + \frac{\varepsilon}{4\pi}(\vec{g}_0 + \vec{g}_1)\text{div} E' + \frac{ik\varepsilon}{4\pi}(\vec{g}_0 + \vec{g}_2)(E'_y + E'_z) + \\ & + \frac{\varepsilon}{4\pi}(\vec{g}_0 + \vec{g}_1)\frac{\nu E'_x}{\nu x} + \frac{\varepsilon}{4\pi}D_2\frac{\nu^2 E'_x}{\nu x^2} - \frac{\varepsilon D_2 k^2}{4\pi}(E'_y + E'_z) \end{aligned} \quad (5)$$

$$j'_y = \rho_0\mu_1(1+\beta_1)E'_x + [\rho_0\mu_1(1+\beta) + \rho_0\mu_2]E'_y + \frac{\varepsilon D}{4\pi} + \frac{\varepsilon}{4\pi}(D_0 + D_1)\left(\frac{\nu^2 E'_x}{\nu x^2} + \frac{\nu^2 E'_y}{DxDy} + \frac{\nu^2 E'_z}{DxDz}\right) \quad (7)$$

Мы будем исследовать колебания тока по направлению x , поэтому

$$j'_y = j'_z = 0 \quad (8)$$

Представляя переменные значения электрического поля в следующем виде

$$E'_x = E_1(x)e^{i(\bar{k}r - \omega t)}, \quad E'_y = E_y(0)e^{i(\bar{k}r - \omega t)}, \quad E'_z = E_z(0)e^{i(\bar{k}r - \omega t)}, \text{ и}$$

$k_y = k_z = \frac{2\pi}{L_x}$ из (находим) следующие уравнения для определения E'_y и E'_z

$$\sigma_1 E'_x + \sigma_2 E'_y - \frac{\varepsilon D n_y^2}{4\pi} (E'_y + E'_z) + \frac{i \varepsilon n_y D}{4\pi} \frac{\nu E'_x}{\nu x} + \frac{\varepsilon D_2}{4\pi} \frac{\nu^2 E_x}{\nu x_2} - \frac{\varepsilon D_2}{4\pi} k_x n_y (E'_y + E'_z) = 0 \quad (9)$$

$$\sigma_2 E'_z + \frac{i n_y D_2}{4\pi} \frac{\nu E_x}{\nu x} - \frac{\varepsilon n_y^2 D_2}{4\pi} (E'_y + E'_z) = 0 \quad (10)$$

Здесь $\sigma_1 = \rho_0 \mu_1 (1 + \beta_1)$, $\sigma_2 = \rho_0 \mu_0 (1 + \beta) + \rho_0 \mu_2$. Из совместного решения (9-10) легко определяем E'_y и E'_z

$$E'_y = \frac{\Omega_z}{\sigma_2^2} \cdot \frac{i k_y D_z}{4\pi} \cdot \frac{\nu E_x}{\nu x}; \quad E'_z = \frac{\Omega_y}{\sigma_2^2} \cdot \frac{i k_y D_z}{4\pi} \cdot \frac{\nu E_x}{\nu x} + \frac{\pi_0}{\sigma_2} E'_x + \frac{i \varepsilon n_y D}{4\pi \sigma_2} \cdot \frac{\nu E_x}{\nu x} + \frac{\varepsilon D_2}{\sigma_2} \cdot \frac{\nu^2 E'_x}{\nu x^2} \quad (11)$$

$$\text{Здесь: } \Omega_z = \frac{\varepsilon D_z k_x n_y}{4\pi} - \frac{\varepsilon D k_y^2}{4\pi}; \quad \Omega_y = \sigma_2 - \frac{\varepsilon D n_y^2}{4\pi} - \frac{\varepsilon D_z k_x k_y}{4\pi}$$

Уравнения неразрывность для плотности тока имеет вид:

$$\frac{d\rho'}{dx} + \text{div} j'_x = 0 \quad (12)$$

$$\text{Из уравнение Пуассона } \text{div} E' = \frac{4\pi}{\varepsilon} \rho' \text{ находим } \rho' = \text{div} \bar{\nu} \frac{\varepsilon}{4\pi} E' \quad (13)$$

Из (12-13) легко получим следующие уравнение для определения E'_x

$$\sigma_1 E'_x + \frac{\varepsilon \vartheta_2}{4\pi} \frac{\nu E_x}{\nu x} + \frac{\varepsilon D_2}{\varepsilon} \frac{\nu E_x}{\nu x} + \frac{\varepsilon D_z}{\varepsilon} \frac{\nu^2 E_x}{\nu x^2} + \left(\frac{\varepsilon \vartheta_2}{2\pi} i n_y - \frac{\varepsilon D_2 k_y^2}{4\pi} - \frac{i \omega \varepsilon}{4\pi} \right) (E'_y + E'_z) = 0 \quad (14)$$

При получения уравнение (14) мы определили k_y, k_x , в следующем виде:

$$n_y^2 = \frac{4\pi \sigma_2}{D_2}, \quad k_x^2 = \frac{4\pi}{\varepsilon} \frac{D \sigma_2}{D_2^2} \text{ т.е. } L_x = \left(\frac{\varepsilon \pi D_2^2}{D \sigma_2} \right)^{1/2}; \quad L_y = \left(\frac{\varepsilon \pi D_2}{\sigma_2} \right)^{1/2} \quad (15)$$

Подставляя E'_y и E'_z из (11) с учетом (15) получим:

$$\begin{aligned} & \frac{\varepsilon D_2}{4\pi} \left[1 + \frac{i \varepsilon}{2\pi \sigma_2} \left(k_y \vartheta_2 - \frac{\omega}{2} \right) \right] \frac{\nu^2 E_x}{\sigma x^2} + \frac{\varepsilon \vartheta_2}{4\pi} \left[1 + \frac{\omega \varepsilon}{4\pi \vartheta_2 n_y} - i \left(1 + \frac{D_z k_y}{2 \vartheta_2} \right) \right] \frac{\nu E_x}{\nu x} \\ & + \sigma_1 \left[1 - \frac{\sigma_1}{\sigma_1} + \frac{i \omega \varepsilon}{4\pi} \left(\frac{\sigma_1 n_y \vartheta_2}{\sigma_1 \sigma_2} \frac{\omega}{\sigma_1} - \frac{\omega \sigma_1}{\sigma_1 \sigma_2} \right) \right] E'_x = 0 \end{aligned} \quad (16)$$

Решение уравнение (16) определяет переменные часть электрического поля внутри среды с размерами (15). Когда колебания электрического поля, плотности заряда и плотности тока, происходит только внутри среды волновой вектор является вещественной величиной, а частота колебания комплексной величиной т.е.

$$k = k_0, \omega = \omega_0 + i\omega_1 \quad (17).$$

Из решение уравнение (16) с учетом (8 и 17) легко получим:

$$\omega_0 = \frac{1}{2} \left[\rho_0 \mu_1 (1 + \beta) + \rho_0 \mu_2 (1 + \beta_2) - \frac{\varepsilon D_2 K_x K_y}{4\pi} \left(1 + \frac{2\pi \sigma_1}{\varepsilon D_2 K_x K_y} \right) \right] \quad (18)$$

$$\omega_1 = \frac{1}{2} \left[\rho_0 \mu_0 (1 + \beta) + \rho_0 \mu_2 (1 + \beta_2) - \sigma_2 \left(\frac{C}{\mu_0 H} \right)^2 - \frac{\sigma_2 K_x}{n_y} + \frac{1}{2} \sigma_1 \right] \quad (19)$$

При получения (18-19) мы определимы для электрического поля выражения

$$E_0 = \frac{2\pi}{\varepsilon} \frac{\sigma_2}{K_y \mu_2} \quad (20)$$

Из (19) видно, что при значениях $(\beta, \beta_1, \beta_2) = \pm \frac{1}{2}$ (21) возбуждаемая волна внутри среды с частотой ω_0 (18) при электрическом поле (20) является наступающим. При значениях $(\beta, \beta_1, \beta_2) = -\frac{3}{2}$ (22) волна частотой ω_0 (18) является затухающими. Нужно отметить, что значения коэффициентов $(\beta, \beta_1, \beta_2)$ определяются рассеянием носителей заряда. Значения (21) имеет место, когда рассеяния происходит на акустических фононах а значения (22) имеет место при рассеяния на оптических и на дефектах решетки. Если соотношения Эйнштейна имеет место, т.е.

$$D = \frac{T_{eff}}{e} \mu; T_{eff} = \frac{T}{3} \left(\frac{CE_0}{SH} \right)^2 \quad (22)$$

Здесь E- температура решетки в- эргах, S'-скорость звука, тогда из (20) легко получим для значения магнитного поля формулы

$$H = \frac{C}{S'} \left(\frac{\pi T}{3\varepsilon} \right)^{1/2} \quad (23)$$

n- концентрация носителей заряда. Легко убедиться, что $\mu_0 H \gg C$.

Внешняя неустойчивость

При внешний неустойчивости

$$\omega = \omega_0, k_x = k_0 + ik'_x \quad (24)$$

Решение уравнение (16) определяет E'_x и следовательно импеданс образца

$$Z = \frac{1}{Z'_x} \int_0^{L_x} E'_x(x) dx \quad (25).$$

Для определения E'_x мы должны учитывать инжекцию носителей заряда на контактах образца. Концентрация носителей заряда изменяется в образце за счет входа и выхода носителей заряда на контактах. Таким образом колебательный часть тока меняется за счет инжекции т.е

$$n' = \delta I' \quad (26).$$

Будем искать решение (16) в следующем виде

$$E'_x = C_1 e^{ik_1 x} + C_2 e^{ik_2 x} \quad (27)$$

Волновые векторы k_1 и k_2 определяются из дифференциального уравнения (16).

Константы C_1 и C_2 нужно определить из граничного условия для переменного электрического поля E'_x . Представляя $E'_x \sim e^{ik_1 x}$ определим из (16) k_1 и k_2 . После не сложных алгебраических вычислений получим

$$k_1 = \frac{\varepsilon k_0}{2\pi}(-1 + ix) = -k_2; \quad x = \frac{1}{2} \left[\sqrt{\mathcal{G}^2 + \mathcal{G}' + \mathcal{G}} \right]^{1/2}$$

$$k_0 = \frac{\pi \sigma_2}{\varepsilon v_2 k_y}; \quad \mathcal{G} = \frac{\varepsilon \sigma_2}{4\pi v_2}; \quad \mathcal{G}' = \frac{\sigma_2 U}{v_2 k_y \mathcal{G}_2} \quad U = \frac{\beta_1 + \frac{\mu H}{C}(1 + \beta_2)}{2 + \beta} \quad (28)$$

При получения формулы (28) мы использовали неравенство

$$k_y \mathcal{G}_2 > \sigma_2 \quad (29)$$

Для определения константов c_1 и c_2 мы должны использовать граничные условия электрического поля. Контакты кристалла во-всех экспериментальных условиях являются инжектирующими, т.е. носители заряда входят из среды. Поэтому

$$n' = \delta I' \quad (30)$$

δ - коэффициент инжекции, n' -переменная часть концентрации и носителей заряда, J' -переменный ток в цепи. Из уравнение Пуассона получим:

$$\text{div} \vec{E}' = \frac{4\pi e}{\varepsilon} n' = \frac{4\pi e}{\varepsilon} \delta I' \quad \frac{\nu E'}{\nu x} = \frac{4\pi e}{\varepsilon} \delta I' \quad (31)$$

Из (31) получим

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dE'}{dx} \Big|_{x=0} = \frac{4\pi e \delta_0 I'}{\varepsilon} \\ \frac{dE'}{dx} \Big|_{x=L_x} = \frac{\nu \pi e \delta_{L_x} I'}{\varepsilon} \end{array} \right. \quad (32)$$

Подставляя $\frac{dE'}{dx} \Big|_{x=0}$ и $\frac{dE'}{dx} \Big|_{x=L_x}$ из 27 легко получим:

$$C_1 = \frac{4\pi e I'}{ik \varepsilon} \cdot \frac{\delta_0 e^{-ikL_x} - \delta_{L_x}}{e^{-ikL_x} - e^{ikL_x}} \quad (33)$$

$$C_2 = \frac{4\pi e I'}{ik \varepsilon} \cdot \frac{\delta_0 e^{-ikL_x} - \delta_{L_x}}{e^{-ikL_x} - e^{ikL_x}}$$

Импеданс кристалла определяется

$$Z = \frac{1}{I'} \int_0^{L_x} E'_x dx \quad (34)$$

Подставляя (33) в (34) после интегрирование получим:

$$\text{Re } z = f \frac{2 \sin 2\alpha}{e^{2\alpha} - 2 \cos^2 \alpha}; \quad I_m Z = f \frac{e^{2\alpha}}{e^{2\alpha} - 2 \cos^2 \alpha} \quad (35)$$

$$f = \frac{2\pi}{\varepsilon} \frac{e(\delta_{Lx} + \delta_0)}{k_0^2}; \alpha = k_0 L_x \quad (36)$$

Из (35) видно, что $k_0 L_x \geq 1$ (36)

$$\operatorname{Re} z = 2fe^{-2\alpha} \sin 2\alpha; \operatorname{Im} z = f > 0 \quad (37)$$

Тогда $f + R_1 = 0$ и $2fe^{-2\alpha} \sin 2\alpha + R = 0$ $R_1 < 0, R > 0$. Из уравнений (37) получим:

$$\sin 2\alpha = -\frac{R}{2|R_1|} e^{2\alpha} \quad (38)$$

При всех отрицательных значениях $\sin 2\alpha$ соотношения (38) удовлетворяется. Из (37) видно, что $\operatorname{Re} z$ осциллирует аргументом 2α а, $\operatorname{Im} z$ положительная величина и поэтому в цепь нужно присоединить сопротивление емкостного характера.

При получения (35) мы определили для частоты колебания тока, следующие формулы

$$\omega = k_y g_2 \quad E_0 = \frac{2\pi en}{\varepsilon k_y} \quad (39).$$

Обсуждение

Таким образом в низкоразмерных проводящих средах во-внешнем электрическом и перпендикулярно к нему магнитном полях возбуждается высокочастотная нарастающая волна. Поперечные и линейные размеры среды должны быть определены по формулам (15). Электрическое поле при котором возбуждается эта волна имеет определенное значение (формула 20) значения магнитного поля $H \sim n^{1/2}$. Частота возбуждаемой волны определяется формулой (18). Колебания тока в этой среде происходит при частоте и электрического поля, которые определяются формулой (36). Когда начинается колебания тока в цепи возникает сопротивление индуктивного характера, а реальная часть импеданса осциллирует с определенным периодом. Инжекция на контактах среды усиливает нарастания волны. Эта среда с указанными размерами может служить как источник излучения энергии.

ЛИТЕРАТУРА

1. Теория спонтанных колебаний тока в кристаллах с глубокими ловушками. Л.Э. Гуревич, Э.Р. Гасанов. ФТТ,11, 1433-1438, 1969.
2. Теория спонтанных колебаний тока в кристаллах типа германия, легированного золотом. Л.Э. Гуревич, Э.Р. Гасанов ФТП 1201-1209, 1969
3. Внутренняя и внешняя неустойчивость кристалла с глубокими ловушками в отсутствии и при наличии магнитного поля. Л.Э. Гуревич, Э.Р. Гасанов. ФТТ,11, 3684-3691, 1969.
4. Instability in Semiconductors with Deep Traps in the Presense of Strong ($\mu_{\pm} H \gg C$) External Magnetic Field. E.R. Hasanov, Rasoul Nezhad Hosseyyn, A.Z. Panahov and Ali Ihsan Demirel Adv. Studies Theor. Phys. Vol. 5,2011, no1, 15-30.
5. High Freguenay Energy Radiation of n-Type Semiconductors at Constant Electric and Magnetic Field. Eldar Rasuloglu Hasanov, Akber Zeynalabdin Panahov and Ali Ihsan Demirel Adv. Studies Theor. Phus. Vol 7, 2013, no.21, 1035-1042.
6. Nonlinear Oscillations of the Charge Carriers Concentration and Electric Fieldin Semiconductors With Deep Traps. F.F. Aliyev1. E.R. Hasanov1,2 10SR Journal of applied Physics (10SR-JAP) e-ISSN. 2278-4861. Volume 10. ISUE 1. Yer. II (Jan-Feb 2018) PP 36-42.

UOT: 542.8:544.14; 542.8:539.19

PACS: 33.20-t

AB INITIO ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ИК-СПЕКТРА ОЛИГОМЕРА ПОЛИЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ ПЭГ5

S.D. DEMUKHAMEDOVA, Z.I. HAJIYEV, N.M. QOCAYEV

Институт физических проблем Бакинского Государственного Университета

ул.3.Халилова, 23, AZ 1148, Баку, АЗЕРБАЙДЖАН

svetlanabest@mail.ru; zahid_gadjiev@mail.ru

РЕЗЮМЕ

В работе квантово-химическим ab initio методом HF с использованием базиса 6-31G (d,p) проведен расчет пространственной и электронной структуры и колебательного спектра олигомера полиэтиленгликоля ПЭГ5. Проведен сравнительный анализ структурных и энергетических изменений с ранее исследованным нами олигомером ПЭГ4. Исследованные модели получены в результате предварительного моделирования на основе расчетов, проведенных методом молекулярной динамики. Получены частоты, интенсивности, построен теоретический ИК спектр олигомера ПЭГ5. Теоретическая интерпретация полученного теоретического колебательного спектра произведена по распределению потенциальной энергии по колебательным координатам с использованием программы VEDA-4.

Ключевые слова: полиэтиленгликоль, олигомер, квантово-химические расчеты, пространственная и электронная структура, ИК спектр.

PEQ-5 POLIETİLENQLİKOL OLİQOMERİN QURULUŞUNUN AB İNİTİO VƏ İQ-SPEKTRİNİN TƏDQIQI XÜLASƏ

İşdə 6-31G(d,p) bazisindən istifadə etməklə HF ab initio kvant-mexaniki üsullu ilə polietinqlikoll PEQ5 oliqomerinin fəza və elektron quruluşları, həmçinin rəqs spektri hesablanmışdır. Alınan nəticələrin əvəllər əldə etdiyimiz nəticələrlə müqayisəli analizi aparılmışdır. Tədqiq olunan modellər molekulyar dinamika üsulu ilə aparılan hesablamalar əsasında aparılan ilkin modelləşdirmə ilə alınmışdır. Hesablamalar nəticəsində PEQ5 oliqomerinin rəqs tezlikləri və spektr xətlərinin intensivlikləri alınmış, PEQ5 oliqomerinin nəzəri İQ spektri qurulmuşdur. Alınmış nəzəri rəqs spektrlərinin nəzəri interpretasiyası potensial enerjinin rəqs koordinatlarına görə paylanmasına istinadən aparılmışdır.

Açar sözlər: polietilenqlikoqol, oliqomer, kvant-kimyəvi hesablamalar, fəza və elektron quruluşları, İQ spektr.

AB INITIO STUDY OF THE STRUCTURE AND IR SPECTRUM OF THE PEG5 POLYETHYLENE GLYCOL OLIGOMER

ABSTRACT

Using a quantum-chemical ab initio HF method on the 6-31G (d, p) basis the spatial and electronic structure and vibrational spectrum of the PEG5 polyethylene glycol oligomer were calculated. A comparative analysis of the structural and energy changes was carried out as compared with the PEG4 oligomer, which was previously studied by us. The studied models were obtained as a result of preliminary modeling based on calculations carried out by the molecular dynamics method. The frequencies, intensities were obtained, a theoretical IR spectrum of PEG5 oligomer was constructed. The theoretical interpretation of the obtained theoretical vibrational spectrum was made according to the distribution of potential energy over the vibrational coordinates using the VEDA-4 program.

Keywords: polyethylene glycol, oligomers, quantum chemical calculations, spatial and electronic structure, IR spectrum.

Введение

Полиэтиленгликоль и его олигомеры имеют обширную область применения - в машиностроении, нефтепереработке, в сельском хозяйстве, в текстильной и химической

промышленности и других отраслях. Он используется как растворитель, стабилизатор, в качестве криопротектора - проникает через мембраны живых клеток, образует связи с молекулами воды, препятствуя повреждению клеток при замораживании. С помощью ПЭГ выявляют антигены и антитела в донорской крови, проводят некоторые анализы с ДНК и белками. Полиэтиленгликоль образует стабильные комплексы с ионами щелочных металлов, которые имеют большое практическое значение [1,2]. Благодаря своей нетоксичности и безопасности для человека ПЭГ и его различные комплексы приобрели большую роль в медицине. Особое внимание к комплексам ПЭГ появилось после работ, в которых было показано, что ковалентное присоединение ПЭГ к бычьему сывороточному альбумину (БСА) [3] приводит к изменению его иммунологических свойств. В работе [4] продемонстрировано слияние ПЭГ с *E.coli* L-аспарагиназой, противораковым ферментом, на основе которого создан препарат Опсарар. В обзоре [5] рассмотрено большое количество работ в области соединений ПЭГ с малыми молекулами лекарственного средства для создания противоопухолевых препаратов и предложены потенциальные применения соединений ПЭГ в качестве транспортного средства по переносу лекарственных препаратов к белкам.

Такая востребованность полиэтиленгликолей, олигомеров и различных комплексов на основе ПЭГ делает актуальными проведения всестороннего изучения полиэтиленгликолей, особенно востребованными становятся теоретические исследования. Настоящая работа посвящена квантовохимическому исследованию структуры и колебательного спектра олигомера полиэтиленгликоля, состоящего из пяти повторяющихся звеньев, а также сравнению пространственной и электронной структуры ПЭГ5 с ранее изученным нами олигомером ПЭГ4 [6].

Методы расчета

В настоящее время для исследования свойств молекул очень широко используются методы молекулярного моделирования и вычислительной квантовой химии. Для создания модели комплекса ПЭГ5 на первом этапе расчета мы использовали метод молекулярной динамики. На экране дисплея была собрана развернутая модель олигомера полиэтиленгликоля, состоящая из пяти повторяющихся звеньев ПЭГ5, включающая шесть атомов кислорода. В процессе оптимизации методом молекулярной динамики структура цепочки определенным образом сворачивалась. В результате расчета была установлена наиболее стабильная конформация олигомера полиэтиленгликоля ПЭГ5, которая выбиралась в качестве исходной для проведения квантовохимического расчета в рамках приближения метода самосогласованного поля (ССП) Хартри-Фока (HF) в базисе 6-31G (d,p) с использованием программного комплекса GAUSSIAN-09.

На основе проведенных квантово-химических расчетов нами были получены геометрические, энергетические и электронные параметры олигомера ПЭГ5. После оптимизации структуры тем же методом HF в базисе 6-31G (d,p) нами был рассчитан теоретический ИК спектр олигомера ПЭГ5, получены частоты и интенсивности колебательных полос и построен теоретический спектр поглощения. Для правильной интерпретации теоретического ИК спектра нами был произведен анализ распределения потенциальной энергии по колебательным координатам с помощью программы VEDA-4 [7-9]. Отметим, что вычисленные в рамках метода Хартри-Фока частоты нормальных колебаний довольно плохо согласуются с частотами экспериментального ИК спектра. Для сравне-

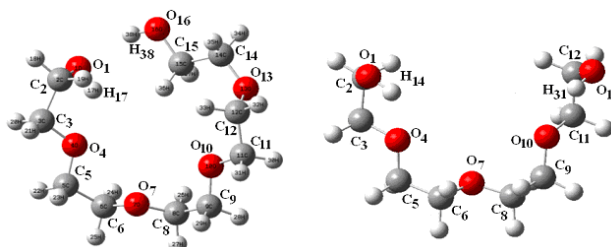
ния теоретических спектров с экспериментальными необходимо использовать масштабирующие множители. Однако теоретические расчеты ИК спектров очень важны. Так, отсутствие расчетных отрицательных частот служит проверкой правильности проведения квантово-химических вычислений и подтверждает нахождение в результате проведенной оптимизации геометрии глобального минимума [10]. В случае наличия отрицательных частот необходимо продолжить оптимизацию геометрии.

Результаты и их обсуждение

Оптимизированная структура ПЭГ5 приведена на рис.1. На рисунке приведена также оптимизированная структура олигомера ПЭГ4, сравнение пространственной и электронных структур этих олигомеров проведено в данной работе.

Результаты расчета пространственной структуры – валентные и двугранные углы олигомера ПЭГ5, а также для сравнения соответствующие значения ранее изученной

Рис. 1. Пространственные структуры моделей олигомеров ПЭГ5 (слева) и ПЭГ4 (справа) после оптимизации методом ab initio HF.



нами структуры олигомера ПЭГ4, приведены в таблицах 1 и 2. Длины валентных связей принимают стандартные значения. Все длины С-С связей $\sim 1.51 \text{ \AA}$. Длины С-О связей во всех комплексах, рассчитанных по методу HF $\sim 1.40 \text{ \AA}$.

Таблица 1. Валентные углы (град) в ПЭГ5 и ПЭГ4

Угол	ПЭГ5	ПЭГ4	Угол	ПЭГ5	ПЭГ4
O ₁ C ₂ C ₃	112.6	111.5	C ₈ C ₉ O ₁₀	109.5	109.4
C ₂ C ₃ O ₄	108.8	107.3	C ₉ O ₁₀ C ₁₁	114.9	114.9
C ₃ O ₄ C ₅	114.2	114.9	O ₁₀ C ₁₁ C ₁₂	108.1	107.3
O ₄ C ₅ C ₆	110.2	109.4	C ₁₁ C ₁₂ O ₁₃	107.8	111.5
C ₅ C ₆ O ₇	110.4	109.3	C ₁₂ O ₁₃ C ₁₄	118.1	
C ₆ O ₇ C ₈	113.6	114.5	O ₁₃ C ₁₄ C ₁₅	106.5	
O ₇ C ₈ C ₉	109.8	109.3	C ₁₄ C ₁₅ O ₁₆	110.8	

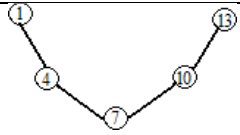
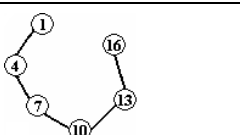
Таблица 2. Двугранные углы (град) в ПЭГ5 и ПЭГ4

Угол	ПЭГ5	ПЭГ4	Угол	ПЭГ5	ПЭГ4
O ₁ C ₂ C ₃ O ₄	-67.3	60.5	C ₈ C ₉ O ₁₀ C ₁₁	176.8	176.4
C ₂ C ₃ O ₄ C ₅	179.9	-176.8	C ₉ O ₁₀ C ₁₁ C ₁₂	-174.6	176.8
C ₃ O ₄ C ₅ C ₆	175.9	-176.5	O ₁₀ C ₁₁ C ₁₂ O ₁₃	65.5	-60.5
O ₄ C ₅ C ₆ O ₇	74.8	70.8	C ₁₁ C ₁₂ O ₁₃ C ₁₄	-154.8	
C ₅ C ₆ O ₇ C ₈	175.2	-177.9	C ₁₂ O ₁₃ C ₁₄ C ₁₅	149.6	
C ₆ O ₇ C ₈ C ₉	-175.9	177.9	O ₁₃ C ₁₄ C ₁₅ O ₁₆	-62.4	
O ₇ C ₈ C ₉ O ₁₀	-71.6	-70.8			

Как видим, валентные и двугранные углы ПЭГ5 и ПЭГ4 имеют схожие значения, двугранные углы O₁C₂C₃O₄ и O₁₀C₁₁C₁₂O₁₃ в обоих олигомерах закручиваются в гош конформацию, но в противоположные стороны.

Для более наглядной картины пространственного сворачивания структуры цепочек олигомеров ПЭГ5 и ПЭГ4 в таблице 3 приведены межатомные расстояния между несвязанными атомами кислорода в этих олигомерах.

Таблица 3. Межатомные расстояния (Å) между атомами кислорода в олигомерах ПЭГ4 и ПЭГ5 по данным расчета методом HF/6-31G

ПЭГ4		ПЭГ5	
			
Атомы	Расстояние	Атомы	Расстояние
O ₁ -O ₄	2.78	O ₁ -O ₄	2.69
O ₄ -O ₇	2.87	O ₄ -O ₇	2.83
O ₇ -O ₁₀	2.87	O ₇ -O ₁₀	2.82
O ₁₀ -O ₁₃	2.78	O ₁₀ -O ₁₃	2.85
O ₁ -O ₇	5.38	O ₁₃ -O ₁₆	3.60
O ₁ -O ₁₀	6.59	O ₁ -O ₇	5.06
O ₁ -O ₁₃	7.31	O ₁ -O ₁₀	5.65
O ₄ -O ₁₃	6.59	O ₁ -O ₁₃	5.70
O ₇ -O ₁₃	5.38	O ₁ -O ₁₆	2.99
O ₄ -O ₁₀	4.88	O ₁₆ -O ₁₀	5.01
		O ₁₆ -O ₇	5.97
		O ₁₆ -O ₄	4.73
		O ₄ -O ₁₃	5.91
		O ₇ -O ₁₃	5.32
		O ₄ -O ₁₀	5.16

Как видим из таблицы 3, если структура образованной полости цепочки ПЭГ4 симметрична и полость открыта (расстояние между концевыми атомами кислорода O₁-O₁₃ = 7.31 Å), то более удлиненная полиэтиленгликолевая цепочка ПЭГ5 уже имеет тенденцию к замыканию и концевые атомы кислорода начинают сближаться друг с другом (расстояние O₁-O₁₆ = 2.99 Å).

В таблице 4 приведены заряды на атомах в оптимизированных олигомерах ПЭГ5 и ПЭГ4.

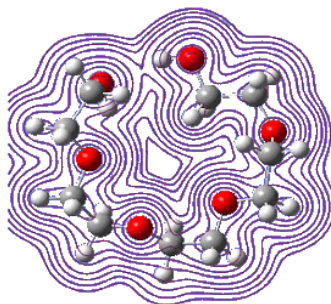
Таблица 4. Заряды на атомах в ПЭГ5 и ПЭГ4

Атом	ПЭГ5	ПЭГ4		Атом	ПЭГ5	ПЭГ4	
O ₁	-0.687	-0.649	0.038	C ₉	0.119	0.122	0.003
C ₂	0.113	0.104	-0.009	O ₁₀	-0.639	-0.653	-0.014
C ₃	0.107	0.101	-0.006	C ₁₁	0.116	0.102	-0.014
O ₄	-0.643	-0.653	-0.010	C ₁₂	0.118	0.104	-0.014
C ₅	0.126	0.122	-0.004	O ₁₃	-0.654	-0.649	0.005
C ₆	0.116	0.118	0.002	C ₁₄	0.101		
O ₇	-0.637	-0.631	0.006	C ₁₅	0.107		
C ₈	0.117	0.118	0.001	O ₁₆	-0.675		

Как видим, заряды на атомах в обоих олигомерах имеют схожий характер. Наибольшее отличие в значениях зарядов на атомах в олигомере ПЭГ5 по сравнению с зарядами на атомах олигомера ПЭГ4 наблюдается в понижении заряда концевого атома кислорода O₁ на 0.038 единиц заряда. На атомах O₁₀, C₁₁ и C₁₂ заряды в ПЭГ5 на 0.014, а на атомах O₄ и C₂ на 0,01 единиц заряда выше.

На рис. 2 представлена карта электронной плотности для олигомера ПЭГ5.

Рис. 2. Карта электронной плотности олигомера ПЭГ5.



В таблице 5 приведены энергетические параметры и дипольные моменты олигомеров ПЭГ5 и ПЭГ4. Граничные НОМО и LUMO орбитали во многом определяют реакционную способность молекул. Примерно 98% электронных переходов—это переходы между орбиталями основного состояния НОМО и возбужденного состояния LUMO.

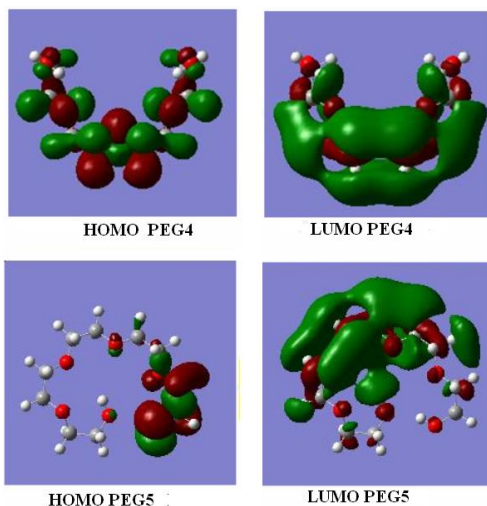
Энергетическая разность между НОМО и LUMO орбиталями, от которой зависят многие свойства вещества, может служить измерением: чем она меньше, тем легче возбуждать или диссоциировать молекулу. Как видно из таблицы эта разность составляет 0.61703 а.е. для ПЭГ5 и 0.64743 а.е. для ПЭГ4. Более узкая энергетическая щель всего на 0.03040 а.е. оказывается у олигомера ПЭГ5, что свидетельствует о незначительно более легкой диссоциации этого олигомера.

Таблица 5. Энергетические параметры ПЭГ4 и ПЭГ5

	ПЭГ4	ПЭГ5
Полная энергия (RHF, ат.е.)	-687.708	-840.628
Дипольный момент (Дебай)	4.778	5.4706
НОМО	-0.41878	-0.39656
LUMO	0.22865	0.22047
Δ	0.64743	0.61703

На рисунке 3 представлены картинки граничных молекулярных орбиталей для олигомеров ПЭГ5 и ПЭГ4.

Рис. 3. Граничные орбитали олигомеров ПЭГ4 и ПЭГ5.



После исследования пространственной и электронной структуры олигомера ПЭГ5 нами был произведен квантовохимический расчет колебательного спектра олигомера ПЭГ5 тем же методом HF и в том же базисе 6-31G (d,p). В результате проведенного расчета получены частоты и интенсивности колебательных полос и построен теоретический ИК спектр поглощения олигомера ПЭГ5, приведенный на рис. 2. На этом же рисунке для сравнения снизу приведен теоретический ИК спектр олигомера ПЭГ4. По оси абсцисс отложены частоты колебаний в см^{-1} , по оси ординат – интенсивности. На спектре каждая синяя линия - это теоретически вычисленная частота с ее интенсивностью, выраженной палочками, высота которых соответствует правой шкале расчетных дипольных интенсивностей D ($\text{esu}^2 \text{ см}^2 \times 10^{40}$). Программа выдает расчетные значения дипольных интенсивностей в км/моль . Приведем связь между этими единицами измерения: D (км/моль) = $0,0002507 \times D$ ($\text{esu}^2 \text{ см}^2 \times 10^{40}$) $\times \nu$ (см^{-1}), где ν - вычисленная (немасштабируемая) частота. Черная линия соответствует левой шкале и представляет собой спектральное распределение молярного коэффициента поглощения ($\text{л}\cdot\text{см}^{-1}\cdot\text{моль}^{-1}$). Фактически эта кривая выписывает теоретический ИК спектр поглощения, который строится с учетом, что любая полоса поглощения имеет определенную полуширину.

В таблице 6 приведены значения полученных частот, интенсивностей и подробная интерпретация спектра олигомера ПЭГ5, основанная на анализе распределения потенциальной энергии по колебательным координатам, которая позволяет определить, в каких областях молекулы в наибольшей степени локализуется энергия данного колебания. Расчет распределения потенциальной энергии по колебательным координатам выполнен с использованием программы VEDA-4 [7-9], которая в качестве входных данных берет расчетные файлы программы Gaussian-09.

Таблица 4. Теоретические частоты (см^{-1}) и интенсивности (KM/Mole) олигомера ПЭГ5

ν	I	интерпретация и степень участия
4146	101	91 O ₁ H ₁₇
4124	218	91 O ₁₆ H ₃₈
3264	72	74 C ₁₄ H ₃₄ 10 C ₁₄ H ₃₅
3263	69	73 C ₂ H ₁₈ 14 C ₂ H ₁₉ 10 C ₁₄ H ₃₄
3225	70	78 C ₁₂ H ₃₃
3211	193	16 C ₂ H ₁₉ 10 C ₃ H ₂₁ 42C ₅ H ₂₃ 10 C ₆ H ₂₄
3208	27	34 C ₂ H ₁₉ 13 C ₃ H ₂₁ 21 C ₅ H ₂₃
3202	79	65 C ₈ H ₂₆ 15 C ₉ H ₂₉
3199	19	59 C ₁₅ H ₃₆ 20 C ₁₅ H ₃₇
3190	12	31 C ₂ H ₁₉ 25 C ₃ H ₂₀ 31 C ₃ H ₂₁
3189	64	66 C ₁₄ H ₃₅ 11 C ₁₅ H ₃₆
3188	31	11 C ₅ H ₂₃ 56 C ₆ H ₂₄ 15 C ₆ H ₂₅
3186	66	63 C ₁₁ H ₃₀ 19 C ₁₁ H ₃₁
3180	19	16 C ₈ H ₂₆ 20 C ₉ H ₂₈ 55 C ₉ H ₂₉
3165	101	11 C ₃ H ₂₀ 25 C ₅ H ₂₂ 16 C ₁₂ H ₃₂
3164	109	11 C ₅ H ₂₂ 28 C ₁₂ H ₃₂ 26 C ₁₅ H ₃₇
3162	108	13 C ₁₂ H ₃₂ 15 C ₁₅ H ₃₆ 49 C ₁₅ H ₃₇
3155	146	23 C ₃ H ₂₀ 16 C ₃ H ₂₁ 12 C ₆ H ₂₅ 18 C ₈ H ₂₇ 12 C ₉ H ₂₈
3151	20	15 C ₃ H ₂₀ 11 C ₃ H ₂₁ 15 C ₅ H ₂₂ 10 C ₆ H ₂₇ 19 C ₉ H ₂₈
3141	15	16 C ₅ H ₂₂ 24 C ₆ H ₂₅ 12 C ₈ H ₂₇ 18 C ₁₁ H ₃₁
3137	3	23 C ₆ H ₂₅ 32 C ₁₁ H ₃₁
3130	1	35 C ₈ H ₂₇ 28 C ₉ H ₂₈ 10 C ₁₁ H ₃₁
1671	7	83 H ₃₇ C ₁₅ H ₃₆
1661	1	38 H ₂₁ C ₃ H ₂₀ 22 H ₂₃ C ₅ H ₂₂
1660	1	19 H ₂₅ C ₆ H ₂₄ 15 H ₂₇ C ₈ H ₂₆ 16 H ₂₉ C ₉ H ₂₈ 12 H ₃₁ C ₁₁ H ₃₀

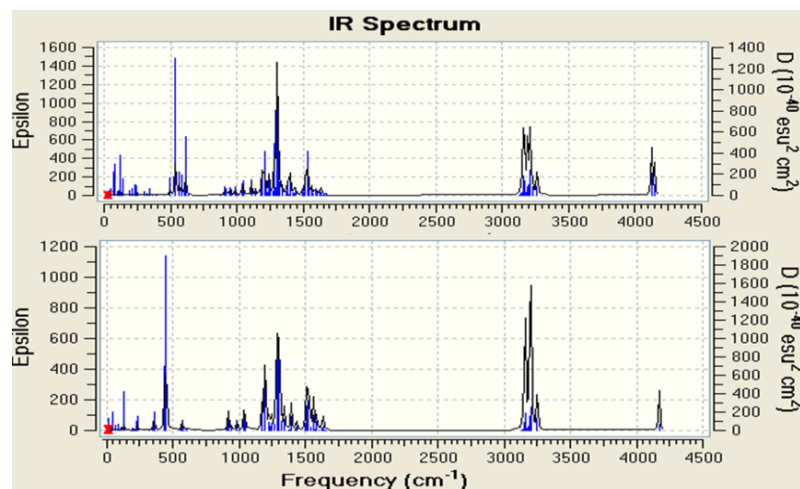
1659	1	17 H ₂₅ C ₆ H ₂₄ 16 H ₂₇ C ₈ H ₂₆ 18 H ₂₉ C ₉ H ₂₈ 19 H ₃₁ C ₁₁ H ₃₀
1654	3	19 H ₃₃ C ₁₂ H ₃₂ 49 H ₃₅ C ₁₄ H ₃₄
1649	1	72 H ₁₉ C ₂ H ₁₈
1643	2	52 H ₃₃ C ₁₂ H ₃₂ 19 H ₃₅ C ₁₄ H ₃₄
1638	5	27 H ₂₁ C ₃ H ₂₀ 41 H ₂₃ C ₅ H ₂₂
1637	9	12 H ₂₅ C ₆ H ₂₄ 25 H ₂₉ C ₉ H ₂₈ 27 H ₃₁ C ₁₁ H ₃₀
1634	12	22 H ₂₅ C ₆ H ₂₄ 25 H ₂₇ C ₈ H ₂₆ 15 H ₂₉ C ₉ H ₂₈ 15 H ₃₁ C ₁₁ H ₃₀
1624	0	11 H ₃₇ C ₁₅ C ₁₄ O ₁₃
1622	17	11 H ₃₇ C ₁₅ C ₁₄ O ₁₃
1606	11	
1590	26	13 H ₁₉ C ₂ O ₁ H ₁₇
1577	8	11 H ₃₃ C ₁₂ O ₁₃ C ₁₄
1564	24	10 H ₃₃ C ₁₂ O ₁₃ C ₁₄
1547	34	11 H ₃₁ C ₁₁ O ₁₀ C ₉
1529	159	10 H ₂₇ C ₈ O ₇ C ₆ 11 H ₂₈ C ₉ O ₁₀ C ₁₁
1518	74	10 H ₂₁ C ₃ O ₄ C ₅ 10 H ₂₂ C ₅ O ₄ C ₃
1508	10	12 H ₃₈ O ₁₆ C ₁₅ 15 H ₃₄ C ₁₄ O ₁₃ C ₁₂ 15 H ₃₅ C ₁₄ O ₁₃ C ₁₂
1489	23	30 H ₁₇ O ₁ C ₂ 21 H ₁₈ C ₂ O ₁ 18 H ₁₉ C ₂ O ₁ H ₁₇
1439	28	30 H ₃₄ C ₁₄ O ₁₃ 12 H ₃₅ C ₁₄ O ₁₃ C ₁₂
1434	8	15 H ₂₆ C ₈ O ₇ 13 H ₂₈ C ₉ O ₁₀ 13 H ₃₂ C ₁₂ O ₁₃
1429	7	21 H ₃₂ C ₁₂ O ₁₃
1420	10	18 H ₂₂ C ₅ O ₄ 18 H ₂₄ C ₆ O ₇ 17 H ₂₈ C ₉ O ₁₀
1400	54	38 H ₃₈ O ₁₆ C ₁₅ 10 H ₃₂ C ₁₂ O ₁₃ 21 H ₃₆ C ₁₅ O ₁₆
1398	59	14 H ₂₆ C ₈ O ₇ 15 H ₃₀ C ₁₁ O ₁₀ 12 H ₃₂ C ₁₂ O ₁₃
1395	3	11 H ₂₀ C ₃ O ₄ 14 H ₂₂ C ₅ O ₄ 14 H ₂₄ C ₆ O ₇
1385	44	24 H ₂₀ C ₃ O ₄ 16 H ₂₆ C ₈ O ₇ 14 H ₂₈ C ₉ O ₁₀
1376	14	18 H ₂₀ C ₃ O ₄ 19 H ₃₀ C ₁₁ O ₁₀ 10 H ₃₄ C ₁₄ O ₁₃ 10 H ₃₆ C ₁₅ O ₁₆
1369	8	14 H ₂₀ C ₃ O ₄ 11 H ₂₂ C ₅ O ₄ 12 H ₂₄ C ₆ O ₇ 10 H ₂₈ C ₉ O ₁₀
1343	25	23 H ₁₇ O ₁ C ₂ 27 H ₁₈ C ₂ O ₁ 12 H ₁₉ C ₂ O ₁ H ₁₇
1324	44	22 O ₇ C ₆ 14 O ₁₀ C ₉ 22 O ₇ C ₈ 11 O ₁₀ C ₁₁
1310	160	11 O ₁₀ C ₉ 12 O ₁₃ C ₁₂ 10 O ₁₃ C ₁₄
1302	379	17 O ₄ C ₃ 21 O ₄ C ₅ 10 O ₁₃ C ₁₂ 12 O ₁₃ C ₁₄
1289	23	22 H ₃₇ C ₁₅ C ₁₄ O ₁₃
1285	158	13 O ₇ C ₆ 10 O ₄ C ₅ 11 O ₇ C ₈ 16 O ₁₀ C ₁₁
1275	12	12 H ₂₂ C ₅ O ₄
1249	25	
1241	53	
1229	9	
1216	27	
1206	125	71 O ₁₆ C ₁₅
1194	55	13 O ₁₆ C ₁₅ 35 O ₁ C ₂ 10 C ₂ C ₃
1189	43	12 O ₁₀ C ₁₁ 14 C ₉ C ₈
1176	15	18 O ₄ C ₃ 18 C ₅ C ₆
1141	20	12 O ₁₃ C ₁₂ 27 O ₁₃ C ₁₄ 19 C ₁₂ C ₁₁ 10 C ₁₅ C ₁₄
1109	42	54 C ₁₅ C ₁₄ 10 C ₁₅ C ₁₄ O ₁₃
1047	36	11 C ₅ C ₆ 10 H ₂₂ C ₅ O ₄ C ₃
1034	29	20 C ₉ C ₈ 11 H ₂₇ C ₈ O ₇ C ₆
1014	1	25 C ₅ C ₆ 12 C ₉ C ₈ 10 H ₂₅ C ₆ O ₇ C ₈
987	21	20 O ₁₆ C ₁₅ 41 C ₂ C ₃ 19 H ₂₁ C ₃ O ₄ C ₅
960	14	28 O ₁₃ C ₁₂ 21 C ₁₂ C ₁₁ 18 H ₃₁ C ₁₁ O ₁₀ C ₉
947	18	14 O ₇ C ₆ 15 O ₇ C ₈ 10 H ₂₂ C ₅ O ₄ C ₃
923	14	13 O ₁₀ C ₉ 16 O ₁₀ C ₁₁ 10 H ₂₇ C ₈ O ₇ C ₆ 10 H ₃₂ C ₁₂ O ₁₃ C ₁₄
911	18	16 O ₄ C ₃ 15 O ₄ C ₅ 13 H ₁₈ C ₂ O ₁ H ₁₇
874	1	11 H ₃₆ C ₁₅ O ₁₆ 14 H ₃₄ C ₁₄ O ₁₃ C ₁₂ 14 H ₃₅ C ₁₄ O ₁₃ C ₁₂ 31 H ₃₆ C ₁₅ C ₁₄ O ₁₃ 13 O ₁₆ C ₁₅ C ₁₄ O ₁₃
632	52	20 O ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ 16 C ₁₄ O ₁₃ C ₁₂
612	85	14 O ₁ C ₂ C ₃ 48 H ₃₈ O ₁₆ C ₁₅ C ₁₄
601	11	14 O ₄ C ₅ C ₆ 11 C ₈ O ₇ C ₆

581	28	10 C ₉ C ₈ O ₇ 13 C ₂ C ₃ O ₄ 27 H ₃₈ O ₁₆ C ₁₅ C ₁₄
565	32	12 O ₁ C ₂ C ₃ 11 C ₅ C ₆ O ₇ 15 H ₃₈ O ₁₆ C ₁₅ C ₁₄
538	175	70 H ₁₇ O ₁ C ₂ C ₃ 11 H ₁₈ C ₂ O ₁ H ₁₇
498	21	10 C ₁₅ C ₁₄ 16 O ₁₆ C ₁₅ C ₁₄ 16 C ₁₂ C ₁₁ O ₁₀ 16 C ₁₅ C ₁₄ O ₁₃
389	1	31 C ₁₄ O ₁₃ C ₁₂
368	1	16 C ₃ O ₄ C ₅ 14 O ₁ C ₂ C ₃ 13 C ₁₄ O ₁₃ C ₁₂
364	0	17 O ₄ C ₅ C ₆ 16 O ₁ C ₂ C ₃ 10 C ₅ C ₆ O ₇ 12 C ₂ C ₃ O ₄
347	6	17 O ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ 16 O ₁₆ C ₁₅ C ₁₄ 26 C ₁₅ C ₁₄ O ₁₃
327	2	15 C ₈ O ₇ C ₆ 12 C ₁₅ C ₁₄ O ₁₃
303	3	10 C ₁₁ O ₁₀ C ₉ 24 O ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ 13 O ₁₆ C ₁₅ C ₁₄ 11 C ₁₅ C ₁₄ O ₁₃
253	2	14 C ₁₁ O ₁₀ C ₉ 11 O ₁ C ₂ C ₃ O ₄
243	6	15 C ₃ O ₄ C ₅ 33 O ₁ C ₂ C ₃ O ₄
230	6	26 C ₈ O ₇ C ₆ 10 C ₅ C ₆ O ₇ 10 C ₉ C ₈ O ₇ 13 O ₁₀ C ₉ C ₈ O ₇ 10 O ₄ C ₅ C ₆ O ₇
211	4	10 C ₅ C ₆ O ₇ 24 O ₄ C ₅ C ₆ O ₇ 20 O ₁ C ₂ C ₃ O ₄
193	2	24 O ₁₀ C ₉ C ₈ O ₇ 14 O ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ O ₁₀ 11 O ₁ C ₂ C ₃ O ₄
145	6	13 C ₁₄ O ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ 18 C ₉ C ₈ O ₇ C ₆
134	1	10 C ₂ C ₃ O ₄ C ₅ 23 C ₁₅ C ₁₄ O ₁₃ C ₁₂
120	11	10 O ₄ C ₅ C ₆ O ₇ 11 O ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ O ₁₀ 10 C ₁₂ C ₁₁ O ₁₀ C ₉ 11 C ₁₅ C ₁₄ O ₁₃ C ₁₂
113	1	42 O ₁₆ C ₁₅ C ₁₄ O ₁₃
102	1	12 O ₄ C ₅ C ₆ O ₇ 13 C ₉ C ₈ O ₇ C ₆
82	6	15 C ₃ O ₄ C ₅ C ₆ 16 C ₈ O ₇ C ₆ C ₅ 11 O ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ O ₁₀ 12 C ₁₂ C ₁₁ O ₁₀ C ₉
75	4	27 C ₃ O ₄ C ₅ C ₆ 15 C ₈ O ₇ C ₆ C ₅ 14 C ₁₁ O ₁₀ C ₉ C ₈ 10 C ₁₂ C ₁₁ O ₁₀ C ₉
50	0	10 O ₁₀ C ₉ C ₈ 20 C ₂ C ₃ O ₄ C ₅
48	1	24 C ₁₄ O ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ 25 C ₁₂ C ₁₁ O ₁₀ C ₉
37	0	29 C ₁₁ O ₁₀ C ₉ C ₈ 11 C ₁₂ C ₁₁ O ₁₀ C ₉
34	0	29 C ₈ O ₇ C ₆ C ₅ 11 C ₁₄ O ₁₃ C ₁₂ C ₁₁ 20 C ₉ C ₈ O ₇ C ₆

В высокочастотной области спектра наблюдаются интенсивные полосы поглощения, которые характеризуются симметричными и антисимметричными валентными колебаниями ОН и СН групп. Анализ распределения потенциальной энергии колебаний по внутренним колебательным координатам показывает, что очень интенсивные полосы поглощения олигомера ПЭГ5 4146 и 4124 см⁻¹ определяются валентными колебаниями концевых ОН связей, а потенциальная энергия высокочастотных колебаний, лежащих в интервале частот 3264 ÷ 3130 см⁻¹, сосредоточена в чисто валентных колебательных координатах растяжения различных связей СН. Самые интенсивные полосы поглощения в высокочастотной части спектра – это полосы 4124 (218), 3211 (193), 3155 (146), 3164 и 3162 (~110), 4146 и 3165 см⁻¹ (101). Здесь и далее в скобках указана интенсивность данного колебания. Валентные колебания СО и СС связей располагаются в области 1324÷911 см⁻¹. Очень интенсивные полосы поглощения 1302 (379), 1310 и 1285 см⁻¹ (с интенсивностями ~160) и 1206 см⁻¹ (126) – характеризуются валентными колебаниями ОС связей.

Деформационные колебания углов НСН различных СН₂ групп располагаются в области 1671÷1634 см⁻¹ и имеют очень маленькую интенсивность, самая интенсивная из них – это полоса 1634 см⁻¹ (~12). Деформационные колебания углов НОС и НСО располагаются в области 1508÷1343 см⁻¹. Деформационные колебания валентных углов ОСС и СОС самой полиэтиленгликолевой цепочки проявляются в области частот 632÷211 см⁻¹, наиболее интенсивные из которых 632 (52) и 612 см⁻¹ (35). Энергия колебаний очень интенсивной полосы 538 см⁻¹ (~175) сосредоточена в неплоских колебательных координатах НОСС и НСОН. Неплоские торсионные колебания самой полиэтиленовой цепочки ОССО и ССОС находятся в низкочастотной области спектра 193 см⁻¹ и ниже, самая интенсивная из этих полос – полоса 120 см⁻¹ (~11).

Рис. 2. Теоретический колебательный спектр олигомера ПЭГ5 (сверху) и теоретический колебательный спектр олигомера ПЭГ4 (снизу)



Заклучение

Теоретический расчет колебательного спектра поглощения олигомера ПЭГ5 и анализ распределения потенциальной энергии по колебательным координатам позволил установить природу каждой полосы поглощения. Сравнение теоретических спектров олигомеров ПЭГ5 и ПЭГ4 позволяет судить об изменениях в ИК-спектре поглощения, связанных с удлинением полиэтиленгликолевой цепочки. Отсутствие отрицательных частот в теоретически рассчитанном ИК-спектре поглощения подтверждает правильность проведенных квантовохимических расчетов.

Проведенный нами анализ структуры и теоретического спектра ИК поглощения олигомера ПЭГ5 может оказаться полезным экспериментаторам при исследовании экспериментальных спектров поглощения комплексов полиэтиленгликолей различной длины и их комплексов с различными атомами, пептидами, аминокислотами или лекарственными средствами, а также исследователям, занимающимся проблемами подобных структур при анализе межмолекулярных взаимодействий.

ЛИТЕРАТУРА

1. Chen J., Spear S.K., Huddleston J.G., Rogers R.D. // Green Chem. 2005. 7, N. 2. P. 64.
2. Chen J., Spear S. K., Huddleston J. G., Holbrey J.D., Swatloski R.P., Rogers R.D. // Ind.End.Chem.Res. 2004. 43, N. 17. P. 5358.
3. buchowski A., Van Es T., Palczuk N.C., Davis F.F. // J.Biol.Chem. 1966. 252, P. 3578.
4. Abuchowski A., G.M.Kazo, C.R.Verhoest, Van Es T., D.Kafkewitz, M.L.Nucci, A.T.Viau, F.F.Davis. // Cancer Biochem.Biophys. 1984. 7, P.175.
5. Greenwald R.B. // Journal of Controlled Release. 2001. 74 (1-3), P.159.
6. Демухамедова С.Д., Гаджиев З.И., Алиева И.Н. Ab initio расчет структуры и ИК-спектра олигомера полиэтиленгликоля ПЭГ4. Materials International scientific conference for the Actual issues Applied physics and Energy. Sumgait, Azerbaijan 14-15 may 2018. P. 79-82.
7. Jamróz M.H. Vibrational Energy Distribution Analysis VEDA 4. Warsaw, 2004.
8. Jamróz M.H., Dobrowolski J.Cz., Brzozowski R. // Journal of Molecular Structure. 2006. 787, P.172.
9. Jamróz M.H. // Spectrochim Acta A Mol Biomol Spectrosc. 2013. 114, P.220.
10. Грибов Л.А., Муштакова С.П. Квантовая химия. ГАРДАРИКИ. М., 1999.

UOT 538.915PACS: 61.50.Ah

“AB INITIO” NUMERICAL MODEL OF FERROELECTRIC PHASE TRANSITION IN GeTe CRYSTAL: I. SELFCONSISTENT BAND STRUCTURE CALCULATION OF GeTe CRYSTAL USING PSEUDOPOTENTIAL METHOD

Baba GASIMOV

Baku Engineering University

Baku / AZERBAIJAN

ABSTRACT

The software package, developed by the author on the basis of the microscopic theory of solids and unified approach to the numerical simulation of the electronic subsystem of crystalline solids and calculating the total energy of the crystal per unit cell [1], was used for the self-consistent calculation of the electronic band structure of the GeTe crystal, having cubic structure with space group symmetry O_h^5 (Fm3m). Results of the calculation was later used for numerical modeling of ferroelectric phase transition in this crystal.

Keywords: self-consistent band structure, pseudopotential method, ferroelectric phase transition, GeTe.

**“ПЕРВОПРИНЦИПИАЯ” МОДЕЛЬ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В
КРИСТАЛЛЕ GeTe: I. САМОСОГЛАСОВАННЫЙ РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ
КРИСТАЛЛА GeTe МЕТОДОМ ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛА**

РЕЗЮМЕ

Пакет программ, разработанный автором на основе микроскопической теории твердых тел и единого подхода к численному моделированию электронной подсистемы кристаллических твердых тел и расчета полной энергии кристалла в расчете на элементарную ячейку [1], использовался для проведения самосогласованного расчета электронного спектра кристалла GeTe, имеющего кубическую структуру с пространственной группой симметрии O_h^5 (Fm3m). Результаты расчета были затем использованы для численного моделирования сегнетоэлектрического фазового перехода в этом кристалле.

Ключевые слова: самосогласованная зонная структура, метод псевдопотенциала, сегнетоэлектрический фазовый переход, GeTe.

**GeTe KRİSTALINDA “İLK PRİNSİPLƏRDƏN” SEQNETOELEKTRİK FAZA KEÇİDİNİN
MODELLƏŞDIRİLMƏSİ: I. PSEVDOPOTENSİAL ÜSULU İLƏ ÖZ-ÖZÜNƏQƏRARLAŞMIŞ
ELEKTRON ZONA QURULUŞUNUN HESABLANMASI**

XÜLASƏ

Məqalədə mikroskopik bərk cisimlər nəzəriyyəsi və kristalların elektron alt sisteminin vahid yanaşma əsasında ədədi modelləşdirilməsi və kristalın elementar özəyinə düşən tam enerjisini hesablamaq üçün hazırladığımız proqramlar kompleksi [1] vasitəsilə kubik quruluşa və O_h^5 fəza simmetriya qrupuna malik olan GeTe çox atomlu kristalının öz-özünə qərarlaşmış elektron zona quruluşu hesablanmışdır. Alınan nəticələr kristalda seqneto elektrik faza keçidinin modelləşdirilməsi üçün istifadə edilmişdir.

Açırsözlər: öz-özünəqərarlaşmış zona quruluşu, psevdopotensial üsulu, seqneto elektrik faza keçidi, GeTe.

1. Introduction

$A^{IV}B^{VI}$ compounds are characterized by a number of special properties, among which the structural transition to the ferroelectric phase with decreasing temperature is important. Ferroelectric crystals are a special class of crystalline materials characterized in a certain temperature range by the presence of spontaneous polarization, the direction of which can

be inverted by means of an applied electric field, and sometimes by mechanical stress. These crystals are an important subset of the class of pyroelectrics.

With increasing temperature, ferroelectrics undergo a phase transition, accompanied by the disappearance of spontaneous polarization and change in the symmetry of the crystal lattice. Near the critical temperature T_c at which the phase transition occurs, ferroelectrics are characterized by anomalous values of the dielectric constant, susceptibility, heat capacity, coefficient of thermal expansion, etc. (the second order phase transition). Sometimes, in addition to abrupt changes in these quantities, the first derivatives of the thermodynamic potential, such as, for example, spontaneous polarization, volume, entropy, also change the latent heat of transition (the first order phase transition). The presence of ferroelectric and semiconductor properties simultaneously in $A^{IV}B^{VI}$ type crystals, including a GeTe crystal, causes an ever-increasing interest in these compounds. Ferroelectrics-semiconductors, along with the fact that they are well represented in the literature by numerous studies, have an extremely simple structure and therefore are an ideal object for microscopic modeling in terms of the contribution of the electronic subsystem to the free energy of the lattice.

This paper describes a microscopic calculation of the electronic band structure of the GeTe ferroelectric-semiconductor from the "first principles" based on the SCPPBAND software package [1]. In a subsequent article, on the basis of the obtained energy spectrum of electrons, the total energy per unit cell for the GeTe in the para-phase is calculated at various atomic displacements forming the unit cell of the crystal in accordance with the soft phonon mode conception, which allows a microscopic calculation of the dependence of the total energy on nuclear displacements, which in turn is used to interpret the ferroelectric phase transition in this crystal within the framework of the vibronic theory [2,3].

Thus, the purpose of this article is on one hand to carry out a self-consistent calculation of the energy band structure of the GeTe crystal using the pseudopotential method, thus demonstrating the possibility of using the numerical model of the electronic subsystem implemented in the SCPPBAND package to calculate the characteristics and properties of solids that are sufficiently sensitive to the calculation details, and on the other hand, using the results of this calculation, in a subsequent article to obtain numerical confirmation of the Bersuker's statement concerning the vibronic mechanism of structural instability as the only reason of the ferroelectric phase transition in this crystal, which is undoubtedly of independent interest.

The choice of the GeTe crystal for carrying out these calculations was due to the fact that it has a simple crystal structure and, as a convenient object of numerical simulation, this crystal is a typical ferroelectric, and the presence of a narrow energy gap makes it natural to use the pseudopotential method to model its electronic subsystem.

2. Calculation technique

The Schrödinger equation, which determines the solution the band problem, has the form:

$$H\Psi_{\mathbf{k}}^n(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k})\Psi_{\mathbf{k}}^n(\mathbf{r}) \quad (1)$$

where n is the band number, \mathbf{k} is the Brillouin zone (BZ) vector. In the pseudopotential method [4] the wave function $\Psi_{\mathbf{k}}^n(\mathbf{r})$ in (1) is expanded in plane-waves (PW) that leads the secular equation for defining the electronic band structure:

$$\det\|H_{\mathbf{GG}'}(\mathbf{k}) - E_n(\mathbf{k})\delta_{\mathbf{GG}'}\| = 0 \quad (2)$$

The Hamiltonian of the system is defined by superposition of screened ionic pseudopotentials:

$$H = T + V_{ps}(\mathbf{r}), \quad V_{ps}(\mathbf{r}) = \sum_{l=1}^N \sum_{\alpha=1}^{NTP} \sum_{i=1}^{N_\alpha} V_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \quad (3)$$

The general expression for the screened pseudopotential form factor has the following form:

$$\mathbf{V}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}(\mathbf{k}) = \sum_{\alpha=1}^{NTP} S_\alpha(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) F_\alpha(\mathbf{k}, \mathbf{G}, \mathbf{G}') \quad (4)$$

$$F_\alpha(\mathbf{k}, \mathbf{G}, \mathbf{G}') = \Omega_b^{-1} \iiint \exp[-i(\mathbf{k} + \mathbf{G})\mathbf{x}] V_\alpha(\mathbf{x}) \exp[i(\mathbf{k} + \mathbf{G}')\mathbf{x}] d\mathbf{x} \quad (5)$$

$$S_\alpha(\mathbf{G} - \mathbf{G}') = \sum_{i=1}^{N_\alpha} \exp[i(\mathbf{G} - \mathbf{G}')\mathbf{R}_i] \quad (6)$$

Using the orthonormality property of the PW basis, the matrix elements of the Hamiltonian in atomic units ($e = \hbar = m = 1$) can be written this way:

$$H_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}(\mathbf{k}) = 1/2(\mathbf{k} + \mathbf{G})^2 \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} + V_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}(\mathbf{k}) \quad (7)$$

This expression (7) defines the secular equation for the pseudopotential method with non-symmetrized PW basis. The crystal symmetry can be taken into account by using the symmetrized combinations of plane waves (SPW), which leads the following expression for the Hamiltonian matrix elements:

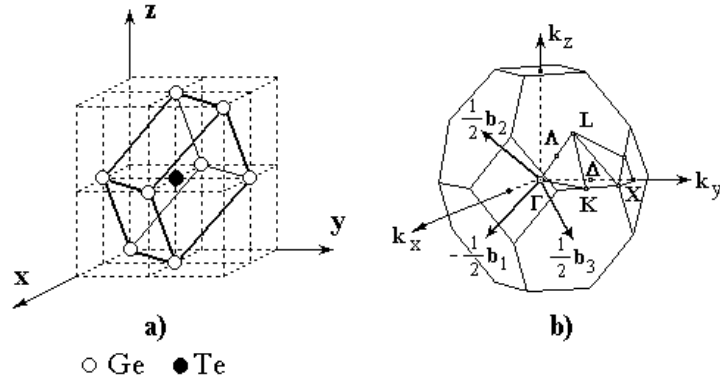
$$H_{ij} = \int_V PW_i(\hat{H}) SPW_j d\mathbf{r} = A_i^n A_j^n \int_V PW_i(\mathbf{Q}_i^S)(\hat{H}) \left\{ \sum_l^{N_j^S} C_j(l) PW_j(\mathbf{Q}_j^S) \right\} d\mathbf{r} = A_i^n A_j^n \sum_l^{N_j^S} C_j(l) \int_V PW_i(\hat{H}) PW_j d\mathbf{r} \quad (8)$$

Formulas (2-8) define a system of expressions for calculation of Hamiltonian matrix elements using SPW basis.

3. Calculation details and obtained results

The GeTe crystal in the para-phase has a face-centered cubic structure with $O_h^5 (Fm\bar{3}m)$ symmorphic space group symmetry. Figure 1 shows a primitive cell containing 1 formula unit and consisting of 2 atoms, as well as the Brillouin zone (BZ) of this crystal.

Figure 1. Unitcell (a) and Brillouinzone (b) of a GeTe crystal.



Below, in Tables 1 and 2, the symmetry operations as well as the G_{11} elements of the irreducible representations matrices for the symmetry group of the BZ $\Delta(0,0,\xi)$ wave vector, which are necessary for the calculation, are given.

Table 1. Symmetry operations of the symmetry group for the $\Delta(0,0,\xi)$ wave vector in BZ.

R_1 $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	R_2 $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	R_3 $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	R_4 $\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
R_5 $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	R_6 $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	R_7 $\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	R_8 $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
τ_1 (0,0,0)	τ_2 (0,0,0)	τ_3 (0,0,0)	τ_4 (0,0,0)
τ_5 (0,0,0)	τ_6 (0,0,0)	τ_7 (0,0,0)	τ_8 (0,0,0)

Table 2. The G11 elements of the matrices of irreducible representations of the symmetry group of the BZ wave vector $\Delta(0,0,\xi)$ (m is the dimension of the irreducible representation).

(m)	R_1	R_2	R_3	R_4	R_5	R_6	R_7	R_8
$\Delta_1(1)$	1	1	1	1	1	1	1	1
$\Delta_2(1)$	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1
$\Delta_3(1)$	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1
$\Delta_4(1)$	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
$\Delta_5(1)$	1	-1	0	0	0	0	i	$-i$

The coordinates of BZ special points used in numerical integration over the BZ, as well as data on composition of the crystal elementary cell, coordinates and parameters of the atomic cores and Fermi energies, describing the trial screening of the core potentials are shown in Table 3.

Table 3. GeTe calculation input (in atomic units)

Lattice constant	$a=11.3575$	
Special points of the BZ	$k_1^*=(2\pi/a)*[0,0,0]$ $k_2^*=(2\pi/a)*[0,0,1]$	
	<i>Ge</i>	<i>Te</i>
Fermi momentum (K_F)	0.7206	2.1209
Valence charge (Z_v)	4	6
Core radius (R_c)	0.809	1.787

The dispersion curves calculation was carried out along the symmetry direction $\Gamma - \Delta - X$, while for the convenience of describing the input data, the point Γ was represented as $\Delta(0,0,\xi=0)$, and the point X - as $\Delta(0,0,\xi=1)$. In the first iteration of the self-consistency process, the trial potential was built on the basis of the one-parameter Ashcroft pseudopotential [5], screened in the Hubbard-Sham approximation [6]. At subsequent iterations, additive shielding in reciprocal space was used. The exchange interaction was taken into account in the Slater approximation [7].

Figure 2 shows the charge density distribution after the 5th iteration of the self-consistency process as an illustration. The $\rho(x,y,z)$ function in this figure is built for fixed values of $z=0.0$ and $z=2.1$, both in the form of contour diagrams and in the form of dependence $\rho|_{z=const} = \tilde{\rho}(x,y)$ on the (x,y) plane. The band structure of GeTe crystal in cubic phase along the BZ symmetry direction $\Gamma - \Delta - X$ is shown in Figure 3. The value of the damping parameter in the conver-

gence acceleration scheme was chosen to be $\beta = 0.9$. The results of the calculation of the band structure are in good agreement with other calculations [8, 9], in which the empirical pseudopotential and APW methods were used.

Figure 2. The distribution of the electron charge density in the unit cell of the crystal $GeTe(O_h^5)$ (the 5th iteration)

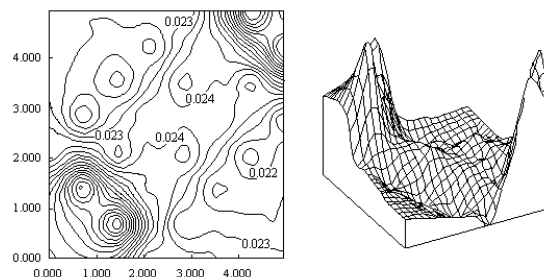
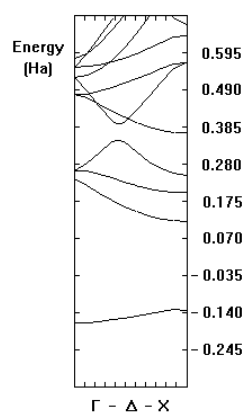


Figure 3. Dispersion curves along the $\Gamma - \Delta - X$ symmetry direction of the $GeTe(O_h^5)$ crystal BZ



In the second part of this article, the calculated dispersion curves and charge density distribution functions in unit cell are used to provide the total energy per unit cell calculations in the density functional approximation using the reciprocal lattice formalism and then to interpret the ferroelectric phase transition in a GeTe crystal in the framework of vibronic theory.

REFERENCES

1. B.Gasimov, Microscopic Numerical Modeling of Multiatomic Crystals from the "First Principles": Band Structure and Total Energy Calculation, Journal of Qafqaz University (Physics), n.32, 2011, pp.1-6.
2. I.B.Bersuker, *Phys.Lett.* **20**, 589 (1966)
3. N.Kristofel, P.Konsin, *Phys.Stat.Sol(b)***21**, K39 (1967)
4. V.Heine, M.L.Cohen, D.Weaire, *The Pseudopotential Concept. Solid State Physics (Advances in Research and Applications)***24**, 1970
5. Ashcroft N.W., Electron-Ion Pseudopotential in Metals. // *Phys.Lett.***23**,n.1, 1966, pp.48-51.
6. Hubbard J. The description of collective motions in terms of many-body perturbation theory. II. The correlation energy of a free-electron gas.// *Proc.Roy.Soc.(London).*- 1958.-v.A243.- p.336.
7. Slater J.C. Quantum Theory of Molecules and Solids, Vol. 4: The Self-Consistent Field for Molecules and Solids. New York: McGraw-Hill, 1974.
8. Lin P. J., Saslow W., Cohen M. L. Analysis of the optical properties and electronic structure of the SnTe using the empirical pseudopotential method. // *Solid Stat.Comm.*- 1967.- v.5.- p.893-897.
9. Rabii S. Energy Band Structure and electronic properties of SnTe.// *Phys.Rev.* - 1969.- v.182, n.3.- p.821-828.

UOT 539.193-.194; 539.196.3PACS: 11.15.-p

ТРЕХМЕРНАЯ СТРУКТУРА МОЛЕКУЛЫ ГИПОТЕНЗИВНОГО ПЕПТИДА НОВОКИНИНА

АГАЕВА Г.А.^{1,2}, АГАЕВА У.Т.¹, ГОДЖАЕВ Н.М.^{1,2}

Институт физических проблем, Бакинский Государственный Университет,

AZ-1148, Баку, ул. З.Халилова, 23;

Бакинский Инженерный Университет, AZ-0101,

Баку, пос.Хырдалан,16 км Сумгаитского шоссе

gulshen@mail.ru, nqocayev@qu.bmu.az

РЕЗЮМЕ

Методом молекулярной механики были исследованы пространственное строение и конформационные возможности гипотензивного пептида новокинина с аминокислотной последовательностью Arg-Pro-Leu-Lys-Pro-Trp. Поиск оптимальных пространственных структур проводился на основе поэтапного подхода с помощью фрагментарного конформационного анализа аминокислотной последовательности новокинина, применительно к полярной среде. Конформационный анализ всей молекулы выявил ограниченный набор энергетически предпочтительных конформационных состояний молекулы пептида в определенном интервале относительной энергии. В результате исследования были также определены энергетически предпочтительные области величин двугранных углов, величины энергетических вкладов межостаточных взаимодействий и водородных связей, а также взаимное расположение остатков и их боковых цепей в низкоэнергетических конформациях новокинина. На основе полученных параметров была составлена молекулярная модель наиболее вероятной биологически активной конформации новокинина.

Ключевые слова: новокинин, антигипертензивный пептид, конформация, метод молекулярной механики.

THREE-DIMENSIONAL STRUCTURE OF HYPOTENSIVE PEPTIDE NOVOKININ

ABSTRACT

By molecular mechanics method were investigated the spatial structure and conformational properties of the hypotensive hexapeptide novokinine, corresponding to its amino acid sequence Arg-Pro-Leu-Lys-Pro-Trp. The search of the optimal spatial structures of novokinine was conducted on base by fragmentary approach under polar conditions. Conformational analysis of novokinine was indicated a restricted number of its energetically favourable spatial structures, which were investigated. The obtained calculation results determined the preferable values of the dihedral angles and orientations of the all residues of novokinine molecule. Conformational analysis of the separate fragments showed the process of the second structure formation in this molecule. Based on theoretical calculations were obtained the inter-residues interaction energy contributions and determined the role of the each residue in the formation of the optimal spatial structures of novokinine molecule

Key words: novokinine, antihypertensive peptide, conformation, molecular mechanics method.

HİPOTENSİV NOVOKİNİN PEPTİDİNİN ÜÇÖLÇÜLÜ QURULUŞU

XÜLASƏ

Molekulyar mexanika metodundan istifadə edərək Ar-Pro-Leu-Lys-Pro-Trp amin turşusu ardıcılığı olan hipotensiv peptid novokininin fəza quruluşu və konformasiya imkanları öyrənilmişdir. Optimal fəza quruluşlarının axtarışı polar mühitə tətbiq olunan novokininin nəzəri konformasiya təhlili ilə mərhələli yanaşma əsasında həyata keçirilmişdir. Bütün molekulun konformasiya təhlili müəyyən bir nisbi enerji intervalında peptid molekulunun energetik cəhətdən üstünlük təşkil edən konformasiya vəziyyətlərinin məhdud bir sıra olduğunu ortaya qoymuşdur. Tədqiqatın nəticəsi olaraq, dihedral bucaqlarının enerji cəhətdən əlverişli bölgələri, qalıqlar arasındakı qarşılıqlı təsirlərin və hidrogen bağlarının enerji payları, habelə novokininin aşağı enerji konformasiyalarında qalıqların və onların yan zəncirlərinin qarşılıqlı tənzimlənməsi müəyyən edilmişdir. Əldə olunan parametrlərə əsasən, novokininin ən çox ehtimal olunan bioloji cəhətdən aktiv konformasiyasının molekulyar modeli hazırlanmışdır.

Açar sözlər: novokinin, antihipertenziv peptid, konformasiya, molekulyar mexanika üsulu.

Введение

Новокинин активный гипотензивный пептид, состоящий из шести аминокислотных остатков: Arg-Pro-Leu-Lys-Pro-Trp (RPLKPW). Эта последовательность является производной от участка 359-364 молекулы овальбумина, соответствующей минимальной последовательности молекулы овокинина, существенно понижающей артериальное давление [1-5]. Новокинин свое гипотензивную активность осуществляет через взаимодействие с рецептором АТ-2 ангиотензина [1-3]. Он существенно понижает систолическое кровяное давление при внутривенном или оральном введении в организм [4,5]. Было показано, что новокинин проявляет также антиопиоидную активность, воздействуя на обезболивающие свойства морфина [3]. Как известно, осуществление и эффективность фармакологических воздействий пептидного биорегулятора, так или иначе, связаны со структурной комплементарностью, взаимодействующих пептида и рецептора. Поэтому, для выяснения механизма биологического эффекта, необходимо знание пространственного строения и конформационных возможностей пептидного биорегулятора и его эффективных структурных аналогов. По всей видимости знание конформационных возможностей функционально активного гексапептида позволит вести более целенаправленный поиск его эффективных агонистов или антагонистов, поскольку именно стерическое соответствие в конечном счете обеспечивает специфичность связывания с рецептором.

В данной работе было проведено исследование пространственного строения и конформационных свойств молекулы новокинина RPLKPW в свободной карбоксилатной форме методом молекулярной механики.

Метод расчета

Использованная в данном исследовании классификация пептидных структур и потенциальные функции расчетной схемы полуэмпирического конформационного анализа и их параметризация описана в работах [6,7]. Невалентные взаимодействия оценивались по потенциалу Леннарда-Джонса с параметрами Скотта и Шераги [8]. Электростатическую энергию рассчитывали в монопольном приближении по закону Кулона с использованием зарядов, предложенных Шерагой. Параметризация потенциальных функций была аппроксимирована к условиям полярной среды: величина диэлектрической проницаемости принята равной 10. Водородные связи, оцениваемые по потенциалу Морзе, предполагались ослабленными и максимальная энергия на равновесном расстоянии принята равной -1.5 ккал/моль. Длины связей и валентные углы пептидной группы и боковых цепей, а также торсионные потенциалы и величины барьеров вращения соответствуют значениям, предложенным Момани и др.

При обсуждении результатов расчета была использована принятая классификация пептидных структур. Конформационное состояние каждого остатка определялось значениями двугранных углов φ , ψ и ω основной цепи и χ^i , боковых цепей. Углы φ и ψ основной цепи в конформациях находятся в низкоэнергетических областях стерической карты: R ($\varphi, \psi = -180^\circ \div 0^\circ$), B ($\varphi = -180^\circ \div 0^\circ, \psi = 0^\circ \div 180^\circ$), L ($\varphi, \psi = 0^\circ \div 180^\circ$) и P ($\varphi = 0^\circ \div 180^\circ, \psi = -180^\circ \div 0^\circ$). Введено понятие формы остатка, которое характеризует область (R, B, L или P) значений углов φ и ψ .

Расчет стабильных конформаций пептидов проводился с помощью программы и системы потенциальных функций, ранее описанных и примененных в работах [6,7].

Поиск минимумов потенциальной энергии осуществлялся методом сопряженных градиентов [6]. Отсчет двугранных углов вращения φ , ψ , ω и χ^i проведен согласно общепринятой номенклатуре IUPAC-IUB [8]. Выбор структурных вариантов при расчете конформаций отдельных пептидов и их фрагментов осуществлялся на основе известных значений двугранных углов (φ и ψ) соответствующих низкоэнергетическим областям конформационной карты R, B и L для каждого монопептида, а для монопептида глицина конформации выбирались из всех четырех R, B, L и P областей.

Результаты и обсуждения

Конформационное исследование гексапептида новокинина проводилось в три этапа, в каждом из которых использовались результаты предшествующего этапа. В свою очередь, этапы делятся на ряд последовательно решаемых структурных задач. Затем на основе низкоэнергетических конформаций фрагментов были рассчитаны стабильные конформации гексапептида в свободной карбоксилатной форме. Атомная расчетная модель и варьируемые двугранные углы молекулы новокинина представлены на рисунке 1. Как видно из рисунка 1 этот пептид состоит из шести остатков, двое из которых остатки пролина (Pro). Остатки пролина, как известно [9], обладают конформационным своеобразием, благодаря циклическому строению основной цепи. Остатки пролина ограничивают конформационные возможности предыдущего остатка, для которого реализуется только B форма основной цепи. Согласно атомной модели, при расчете конформаций исследуемого пептида учитывались 120 атомов и 30 переменных углов, составляющих его остатков. Для сокращения числа рассматриваемых конформационных состояний нами был применен поэтапный подход конформационного анализа. Согласно схеме расчета были последовательно рассмотрены конформационные возможности N-концевого тетрапептида Arg¹-Pro²-Leu³-Lys⁴, затем перекрывающегося с ними по двум остаткам Leu³-Lys⁴-Pro⁵-Trp⁶, затем на основе стабильных конформаций указанных тетрапептидов были определены энергетически предпочтительные конформационные состояния для всего гексапептида новокинина. Для каждого исследуемого фрагмента в качестве начальных приближений использовались величины двугранных углов (φ , ϕ , χ_1 , $\chi_2 \dots \chi_n$) низкоэнергетических конформационных состояний, составляющих его монопептидов. Величины двугранных углов (φ , ψ и ω) оптимальных конформаций монопептидов выбирались из всех областей стерической карты для остатка Pro, а для остатков алинового типа из B, R и L областей.

Как известно, для пептидного фрагмента число рассматриваемых структурных типов, т.е. шейпов, определяется формулой 2^{n-1} , где n-число остатков в последовательности фрагмента. В случае гексапептида число шейпов должно быть 32. Однако в данном гексапептиде имеются два остатка пролина, которые ограничивают конформационные возможности предыдущих остатков. Поэтому для рассматриваемого фрагмента стерически допустимы только восемь структурных типа: *eeeeee*, *eefee*, *efeee*, *effee*, *eeeef*, *efeefe*, *eefef* и *effee*. Было составлено около 300 структурных вариантов гексапептида. На перекрывающемся участке были рассмотрены все варианты форм и ориентаций близлежащих остатков. Некоторые остатки, составляющие этот гексапептид, имеют громоздкие разветвления боковой цепи. Только остатки пролина (Pro) имеют боковую цепь, которая в силу своей геометрии, находится в фиксированном положении. Энергетически предпочтительные конформации гексапептида представлены в таблице 1. Как видно из этой таблицы наблюдается существенная дифференциация по формам основной цепи.

В последовательности гексапептида имеются два остатка с положительно заряженными боковыми цепями - аргинин и лизин. Остаток триптофана (Trp) с гетероциклической боковой цепью расположен в конце с отрицательно заряженной С-концевой карбоксилатной группой (COO⁻). Все это вносит своеобразие при образовании межостаточных взаимодействий. Результаты расчета конформаций гексапептида представлены в таблице 1. В этой таблице показаны наиболее оптимальные конформации гексапептида, входящие в интервал относительной энергии 0-10 ккал/моль. В интервал 0-2 ккал/моль попадают только две конформации двух похожих шейпов *efeef* и *efeee*, которые различаются только формой основной цепи Pro⁵. В результате расчета для гексапептида новокинина выявлена более четкая дифференциация по шейпам и в интервал относительной энергии 0-5 ккал/моль попадают наиболее оптимальные конформации только двух форм основной цепи. Энергетически предпочтительными оказались конформации двух шейпов *efeef* и *efeee*. Следующими по стабильности оказались конформации шейпа *effee*.

В таблице 2 представлены величины двугранных углов трех наиболее низкоэнергетических конформаций новокинина. Проекция энергетически предпочтительной конформации гексапептида новокинина представлена на рисунке 2. В результате расчетов было показано, что в слабополярной среде пептид RPLKPW предпочтительно формирует стабильную структуру, для которой характерна вытянутая с двумя загибами конформация пептидной цепи. Предпочтительная конформация этого пептида стабилизируется эффективным электростатическим взаимодействием с образованием водородной связи между атомами карбоксильной группы С-терминальной части и гуанидиновой группы боковой цепи аргинина. Данное исследование позволило определить все стабильные конформационные состояния природного гексапептида, сопоставление которых дает возможность выделить структурные критерии, возможно необходимые для создания лекарственных препаратов пригодных для клинического использования.

Рис. 1. Атомная расчетная модель и переменные двугранные углы молекулы новокинина.

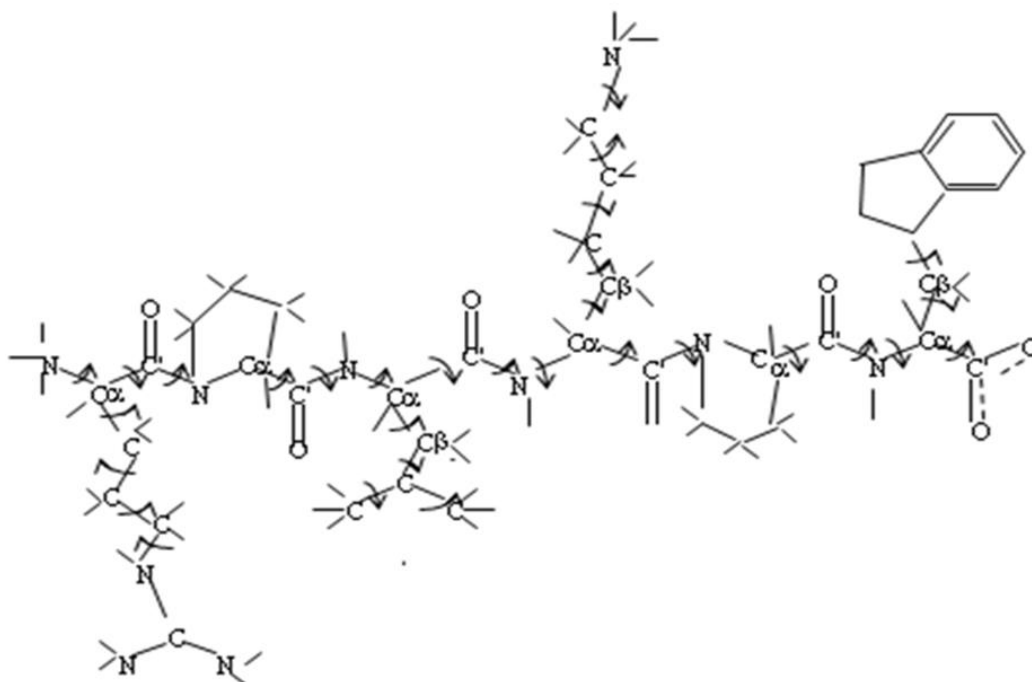


Рис.2. Молекулярная расчетная модель энергетически предпочтительной конформации новокинина.

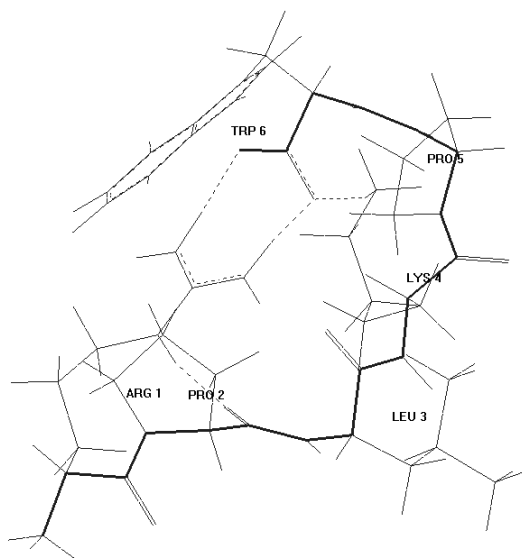


Таблица 1. Величины энергетических вкладов(ккал/моль) внутримолекулярных взаимодействий в низкоэнергетических конформациях молекулы новокинина.

№	Конформация	Е _{нев}	Е _{эл.}	Е _{гор.}	Е _{общ.}	Е _{отн.}
1	B ₂₂ RB ₁₂ B ₃₃ RR ₁	-31.8	-3.2	2.6	-32.4	0
2	B ₂₂ RB ₁₂ B ₁₃ BB ₁	-30.0	-1.7	2.8	-28.9	3.5
3	B ₂₂ RR ₁₂ B ₃₃ BB ₁	-28.7	-1.4	3.3	-26.7	5.7
4	B ₁₂ RR ₂₂ B ₃₁ RR ₃	-24.6	-1.7	4.3	-22.0	10.4
5	B ₁₂ BB ₃₂ B ₂₂ RR ₁	-25.7	-0.9	6.0	-20.6	11.8
6	B ₃₂ BB ₂₂ B ₁₂ BB ₂	-24.6	-0.8	5.9	-19.5	12.9
7	B ₂₂ BR ₂₂ B ₃₂ RR ₃	-18.4	-3.7	3.0	-19.1	13.3
8	B ₁₂ BR ₂₂ B ₁₂ BB ₃	-21.1	1.2	2.6	-17.3	15.1

Таблица 2. Величины двугранных углов (град.) аминокислотных остатков молекулы гексапептида новокинина в низкоэнергетических конформациях.

Остаток	Конформация	Основная цепь				Боковая цепь				
		Величины двугранных углов					χ ₂	χ ₃	χ ₄	χ ₅
		Φ	ψ	ω	χ ₁					
Arg	B ₂₂ RB ₁₂ B ₃₃ RR ₁	-65	145	188	183	176	178	181	-	
	B ₂₂ RB ₁₂ B ₁₃ BB ₁	-65	145	185	185	175	180	180	-	
	B ₂₂ RR ₁₂ B ₃₃ BB ₁	-120	146	186	184	176	179	180	-	
Pro	B ₂₂ RB ₁₂ B ₃₃ RR ₁	-	-53	187	-	-	-	-	-	
	B ₂₂ RB ₁₂ B ₁₃ BB ₁	-	-55	186	-	-	-	-	-	
	B ₂₂ RR ₁₂ B ₃₃ BB ₁	-	-55	184	-	-	-	-	-	
Leu	B ₂₂ RB ₁₂ B ₃₃ RR ₁	-95	145	181	59	186	180	180	-	
	B ₂₂ RB ₁₂ B ₁₃ BB ₁	-96	172	179	64	183	178	180	-	
	B ₂₂ RR ₁₂ B ₃₃ BB ₁	-99	155	180	62	183	180	179	-	
Lys	B ₂₂ RB ₁₂ B ₃₃ RR ₁	-140	80	179	-59	-56	180	180	180	
	B ₂₂ RB ₁₂ B ₁₃ BB ₁	-106	149	176	67	-61	180	180	180	
	B ₂₂ RR ₁₂ B ₃₃ BB ₁	-146	150	172	-59	-56	180	180	180	
Pro	B ₂₂ RB ₁₂ B ₃₃ RR ₁	-	-35	181	-	-	-	-	-	
	B ₂₂ RB ₁₂ B ₁₃ BB ₁	-	115	182	-	-	-	-	-	
	B ₂₂ RR ₁₂ B ₃₃ BB ₁	-	-44	180	-	-	-	-	-	
Trp	B ₂₂ RB ₁₂ B ₃₃ RR ₁	-130	-42	-	55	93	-	-	-	
	B ₂₂ RB ₁₂ B ₁₃ BB ₁	-85	152	-	58	93	-	-	-	
	B ₂₂ RR ₁₂ B ₃₃ BB ₁	-128	-42	-	55	93	-	-	-	

Заключение

Таким образом, расчет оптимальных конформаций гексапептида новокинина выявил существенную конформационную консервативность пептидной цепи молекулы. Конформационный анализ всей молекулы выявил ограниченный набор энергетически предпочтительных конформационных состояний молекулы пептида в определенном интервале относительной энергии. В результате исследования были также определены энергетически предпочтительные области величин двугранных углов, величины энергетических вкладов межостаточных взаимодействий и водородных связей, а также взаимное расположение остатков и их боковых цепей в низкоэнергетических конформациях новокинина. На основе полученных параметров была составлена молекулярная модель наиболее вероятной биологически активной конформации новокинина.

ЛИТЕРАТУРА

1. Yoshikawa M, Ohinata K, Yamada Y, The pharmacological effects of novokin; a designed peptide agonist of the angiotensin AT₂ receptor. *Current pharmaceutical design.*, 2013, v.19(17), p. 3009-3012.
2. Ohinata K., Fujiwata Y., Shingo F., Masaru I., Masatsugu H., Yoshikawa M. Orally administered novokin, an angiotensin AT₂ receptor agonist, suppresses food intake via prostaglandin E₂-dependent mechanism in mice, *Peptides*, 2009, v. 30, iss. 6, p. 1105–1108
3. Yamada Y, Yamauchi D, Usui H, Zhao H, Yokoo M, Ohinata K, Iwai M, Horiuchi M, Yoshikawa M. Hypotensive activity of novokin, a potent analogue of ovokin(2-7), is mediated by angiotensin AT(2) receptor and prostaglandin IP receptor. *Peptides*. 2008,v.29(3), p.412-8.
4. Yoshikawa M, Ohinata K, Yamada Y. The pharmacological effects of novokin; a designed peptide agonist of the angiotensin AT₂ receptor. *Curr Pharm Des.* 2013,v.19(17),p.3009-12.
5. Yamada Y, Yamauchi D, Yokoo M, Ohinata K, Usui H, Yoshikawa M. A potent hypotensive peptide, novokin, induces relaxation by AT₂- and IP-receptor-dependent mechanism in the mesenteric artery from SHR. *Biosci Biotechnol Biochem.* 2008,v.72(1), p.257-9.
6. Maksumov I.S.,Ismailova L.I., Godjaev N.M, The program for semiempirical calculation of conformations of the molecular complexes *J. Struct. Khim.*(Russian), 1983,vol.24,pp.147-148.
7. 4.Agaeva G.A., Agaeva U.T.,Godjaev N.M, The spatial organization of human hemokinin-1 and mouse/rat hemokinin-1 molecules, *Biophysics* (Russian),2015, vol.60, pp.365-377
8. IUPAC-IUB Quantity. Units and Symbols in Physical Chemistry,1988, vol. 39, Blackwell Scientific Publications, Oxford.
9. Schimmel P.R., Flory P.J., Conformational energies and conformational statistics of copolypeptides containing L-proline. *J. Mol. Biol.*, 1968, vol.34, pp. 105-111.

UOT: 359.12; 537.8PACS : 12.40.Yx, 12.40.Nn

ON THE PHASE TRANSITIONS IN NUCLEAR COLLISIONS AND THE EARLY UNIVERSE

A. RUSTAMOV^{1,2,3,4}, J. N. RUSTAMOV⁵

¹Physikalisches Institut, Universität Heidelberg, Heidelberg, Germany

²GSI Helmholtzzentrum für Schwerionenforschung, Darmstadt, Germany

³National Nuclear Research Center, Baku, Azerbaijan

⁴Baku State University, Baku, Azerbaijan

⁵Shamakhy Astrophysical Observatory named after N.Tusi
of Azerbaijan National Academy of Sciences, Shamakhy, Azerbaijan

ABSTRACT

The synergy between high energy nuclear collisions and cosmology offers unprecedented possibilities for understanding the early and present stage of our Universe. Indeed, during its expansion the Universe successively passes through several temperature and energy scales at which particle and nuclear physics predict symmetry breaking phase transitions. For example, the temperature and the energy density of the phase transition from a state of matter known as Quark Gluon Plasma (QGP) to hadron phase, as predicted by the theory of strong interactions, correspond to about 10^{-5} seconds after the creation of the Universe. In order to explore phase transition phenomena in nuclear collisions, we report on recent event-by-event net-proton fluctuations as measured by STAR at RHIC/BNL and by ALICE at LHC/CERN and discuss various non-dynamical contributions to these measurements, which should be properly subtracted before comparison to theoretical calculations on dynamical net-baryon fluctuations. We further argue, based on self-similarity, that spiral structures may also appear in nuclear collisions as a consequence of symmetry breaking phase transitions. Thus, spiral structures in galactic patterns may already be formed during the QGP phase transition which corresponds to a few microseconds after the Big Bang.

Keywords: nuclear collisions, phase transitions, spiral galaxies, symmetry breaking.

NÜVƏ TOQQUŞMALARİ VƏ İLKİN KAINATDA FAZA KEÇİDLƏRİ HAQQINDA XÜLASƏ

Yüksək enerjili nüvə toqquşmaları və kosmoloji tədqiqatların vəhdəti Kainatın başlanğıcında baş vermiş prosesləri və onun indiki vəziyyətini anlamaq üçün mühüm əhəmiyyət kəsb edir. Doğrudan da, Kainat genişləndikcə onun temperatur və enerji sıxlığının müəyyən qiymətlərində müxtəlif simmetriyaların pozulması ilə müşaiət olunan faza keçidləri baş verir. Bu çür faza keçidlərinin baş verməsi bilavasitə nüvə və zərrəcikə fizikasının qanunlarından irəli gəlir. Məsələn, Kainat yarandıqından təqribən 10^{-5} saniyə sonra onun temperatur və enerji sıxlığı güclü qarşılıqlı təsir nəzəriyyəsinə kavark və qlüonlar halından adi adron materiyasına keçid temperaturu və enerji sıxlığının qiymətlərinə uyğun gəlir. Təqdim edilmiş məqalədə nüvə toqquşmalarında faza keçidlərini müzakirə etmək məqsədi ilə STAR və ALICE təcrübələrində ölçülmüş protonların hadisədən-hadisəyə fluktuasiya siqnallarını müzakirə edirik. Xüsusi ilə, bu ölçmələri nəzəri hesablamalarla müqayisə etməzdən əvvəl onlara daxil olan qeyri dinamik hissələrin nəzərə alınması yollarını göstəririk. Bundan başqa, faza keçidlərinə xas olan özünə oxşarlıq meyarına əsaslanaraq, nüvə toqquşmalarında spiral quruluşların əmələ gələ bilməsini iddia edirik. Beləliklə, hesab edirik ki, qalaktikaların spiral quruluşu Böyük Partlayışın ilk mikrosaniyələrində baş vermiş faza keçidi zamanı formalaşa bilər.

Açar sözlər: nüvə toqquşmaları, faza keçidləri, spiral qalaktikalar, simmetriyanın pozulması.

Introduction

Our current understanding of the Universe is essentially based on the standard model of cosmology and the standard model of particle physics. Both models describe a large body of

experimental nuclear and cosmological data, in particular they predict several phase transitions which presumably took place during the evolution of the Universe. Observational evidences of the standard model of cosmology include large scale isotropy and homogeneity, the Hubble expansion, temperature anisotropies in the Cosmic Microwave Background, abundance of light elements, etc., which, confronted with the standard model of cosmology, lead to the conclusion that the Universe is mostly composed of dark matter (25%) and dark energy (70%). It is remarkable that first instances of the Universe can be created in the Earth laboratories such as the Large Hadron Collider (LHC) of the European Organization for Nuclear Research (CERN). Indeed, LHC experiments have made significant progress to probe a state of matter that has not existed for the past 14 billion years (the age of the Universe). The droplets of such a primordial matter will continue to be studied with the ALICE apparatus in head-on collisions of heavy nuclei accelerated by the LHC to a speed close to the speed of light. This approach will complement astrophysical findings, where the evolution of the Universe is studied by analyzing the light coming from ever far distant heavenly objects, as well as from cosmos in general, thus going back in time up to about 380.000 years after its creation. By this time the temperature of the matter was low enough for creation of neutral atoms and the matter started to be transparent in terms of photons. The ALICE experiment will start the few microseconds after the creation of Universe and go to even earlier times. The study of these collisions should allow to pin down the mechanisms that change the phase of the matter from its basic constituents, such as quarks, into hadrons. According to the current theory of strong interactions a transition from hadron phase to a new state of matter known as quark gluon plasma (QGP) should occur when the temperature exceeds a critical value of 2000 billion degrees (approximately 160 MeV). To make progress on a detailed understanding of the phase structure of the QGP a comprehensive study of multiplicity distributions of several particle species as well as correlations between them were studied in different experiments. Such multiplicity distributions are constructed by counting the number of particles produced in each collision (event) and thereby generating a distribution. It is expected that these multiplicity distributions will have significant deviations from those expected in purely statistical scenarios when reaching close to the transition temperature. In particular, they are expected to become extremely broad near the phase boundary. In practice this task becomes difficult because the exact number of particles including neutrals, such as neutrons and their anti-particles, cannot be measured on the event level. Hence, instead of studying the multiplicity distributions their quantitative characteristics, like mean values, variances, covariances between different particle types, higher moments and specific combinations of them are studied and compared to theoretical calculations. These measurements are generally known as event-by-event fluctuation measurements.

The paper is organized in the following way: the first section is devoted to discussions on the phase diagram of the strongly interacting matter and provides recent measurements from the ALICE and STAR experiments. The next two sections deal with the galactical structures, their classification and connection with the matter created in nuclear collisions. Finally we provide a conclusion in the final section.

1. Event-by-event fluctuations

Perhaps the most challenging problem in our understanding of strongly interacting nuclear matter is its phase structure and possible existence of a critical point, at which matter

undergoes a second-order phase transition. At the *BNL/ RHIC* and *CERN/ SPS* substantial experimental efforts are devoted to searches for a *QCD* critical point in ultra-relativistic heavy-ion collisions. This also serves as a motivation for the research programs at the future facilities, such as *FAIR* in Darmstadt and *NICA* in Dubna. Phase transitions can be addressed by investigating the response of the system to external perturbations via fluctuations of conserved charges. Moreover, one of the crucial issues is to establish the relation between freeze-out and the *QCD* chiral transition at vanishing net-baryon densities. This makes fluctuation studies at *LHC* of particular importance, especially in view of the reliable theoretical calculations in lattice *QCD* for vanishing values of baryon chemical potential [1- 4]. Although *LQCD* predicts a Skellam behavior for the second cumulants of net-baryon distributions at a pseudo-critical temperature of about 155 MeV, this is not the case for higher cumulants. Even on the level of second cumulants differences between *HRG* and *LQCD* results are significant for the ratio of off-diagonal susceptibilities [3, 4]. At this point we remind that, fluctuations of conserved charges are predicted in the Grand Canonical Ensemble formulation of thermodynamics [5]. In order to compare theoretical calculations within *GCE*, such as the Hadron Resonance Gas (*HRG*) model [6] and Lattice *QCD* (*LQCD*) [1], to experimental results, the requirements of *GCE* have to be achieved in experiments. This is typically done by analyzing the experimental data in a finite acceptance by imposing cuts on rapidity and/ or transverse momentum of detected particles. However, if the selected acceptance window is too small, the possible dynamical correlations we are after will also be strongly reduced [7] and consequently, net-baryons will be distributed according to the difference of two independent Poisson distributions [8]. We remind that for the Poisson distribution, all its cumulants are equal to its mean. The probability distribution of the difference $X_1 - X_2$ of two random variables, each generated from statistically independent Poisson distributions, is called the Skellam distribution. According to the additivity of cumulants, the cumulants of the Skellam distribution will then be $\kappa_n(\text{Skellam}) = \langle X_1 \rangle + (-1)^n \langle X_2 \rangle$, where $\langle X_1 \rangle$ and $\langle X_2 \rangle$ are mean values of X_1 and X_2 , respectively. On the other hand, the increase of the acceptance will enlarge significance of correlations due to baryon number conservation. In order to be more sensitive to dynamical fluctuations, the better approach is to study the fluctuation of conserved charges in a larger acceptance and subtract the correlation part caused by the global conservation laws. This is actually the appropriate way to address the fluctuation physics when both, trivial and dynamical fluctuations are close to Poisson probability distributions. To proceed further we provide the necessary definitions. The first four cumulants of net-baryon $\Delta n_B = n_B - n_{\bar{B}}$ distribution are defined as:

$$\kappa_1(\Delta n_B) = \langle \Delta n_B \rangle \tag{1}$$

$$\kappa_2(\Delta n_B) = \langle (\Delta n_B - \langle \Delta n_B \rangle)^2 \rangle \tag{2}$$

$$\kappa_3(\Delta n_B) = \langle (\Delta n_B - \langle \Delta n_B \rangle)^3 \rangle \tag{3}$$

$$\kappa_4(\Delta n_B) = \langle (\Delta n_B - \langle \Delta n_B \rangle)^4 \rangle - 3\kappa_2^2(\Delta n_B) \tag{4}$$

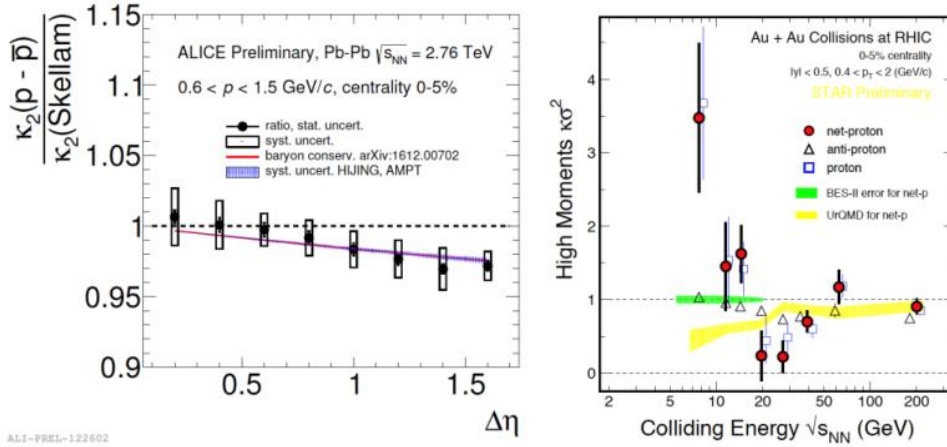
The second cumulant can be represented as a sum of corresponding cumulants for single baryons plus the correlation term for joint probability distributions of baryons and antibaryons

$$\kappa_2(\Delta n_B) = \kappa_2(n_B) + \kappa_2(n_{\bar{B}}) - 2(\langle n_B n_{\bar{B}} \rangle - \langle n_B \rangle \langle n_{\bar{B}} \rangle) \tag{5}$$

Eq. (5) shows that, in the case of missing correlations between baryons and antibaryons, $\langle n_B n_{\bar{B}} \rangle = \langle n_B \rangle \langle n_{\bar{B}} \rangle$, the second cumulant of net-baryons is exactly equal to the sum of the cor-

responding second cumulants for baryons and antibaryons. A correlation can emerge, in addition to that originating from critical fluctuations, from conservation laws. If the experimental acceptance is large enough the correlation term in Eq. (5) acquires a finite value. Hence we expect that the second cumulant of net-baryons becomes smaller than the sum of baryons and antibaryons. We note that in this work net-protons are used as a proxy for net baryons, which is justified at higher center-of-mass energies ($\sqrt{s_{NN}} > 10 \text{ GeV}$) [9].

Figure 1. Left panel: Pseudorapidity dependence of the normalized second cumulants of net-protons as measured by the *ALICE* experiment at *LHC*. The red solid line shows the effect of the baryon number conservation. Right panel: Ratio of fourth to second cumulants as measured by the *STAR* Collaboration for *Au+Au* collisions at different center-of-mass energies.



Recently the *ALICE* collaboration reported on the second cumulants of net-proton distributions, measured in *Pb-Pb* collisions at $\sqrt{s_{NN}} = 2.76 \text{ TeV}$ [10]. The analysis of experimental data was performed with the Identity Method [11–15]. Furthermore, based on the recently proposed model, it was demonstrated that non-dynamical fluctuations, such as those stemming from unavoidable fluctuations of participant nucleons are immaterial for the second cumulants of net-protons measured at *LHC* energies [8]. The obtained results for the second cumulants of net-protons, normalized to the Skellam baseline, are presented in the left panel of Figure 1. For pseudorapidity ranges of $|\eta| < 0.4$, which corresponds to $\Delta\eta < 0.8$, the experimentally measured net-proton distributions follow Skellam distribution. This agreement is due to the small acceptance as discussed above. For $\Delta\eta > 0.8$, however, some deviations from the Skellam baseline are observed. It is argued that these deviations, as a function of acceptance, are due to the global baryon conservation, which should be corrected for before comparison to theoretical calculations within *GCE*. For the second cumulants the contribution from the global baryon number conservation depends only on the acceptance factor $\alpha = \langle n_p \rangle / \langle N_B^{4\pi} \rangle$ with $\langle n_p \rangle$ and $\langle N_B^{4\pi} \rangle$ referring to the mean number of protons inside the acceptance and the mean number of baryons in the full phase space respectively [8]:

$$\frac{\kappa_2(p-\bar{p})}{\kappa_2(\text{Skellam})} = 1 - \alpha. \quad (6)$$

For each rapidity range the acceptance factor was then estimated using the total number of baryons as measured by the *ALICE* experiment in the pseudorapidity range of $|\eta| < 0.5$ [16]. Next, from *HIJING* and *AMPT* simulations, total number was obtained of baryons in the full phase space. The number of protons, used in the definition of α (cf. Eq. (6)), was taken from the experimental analysis for each rapidity range. Finally, using these values of α the red band

in the left panel of Figure 1 was calculated with Eq. (6). The finite width of the band reflects the difference between the two event generators. We hence conclude that the reported deviation from Skellam is caused by global baryon number conservation and that other possible dynamical fluctuations are not visible in the second cumulants of net-protons measured at *LHC* energies.

In the right panel of Figure 1 the ratio of fourth to second cumulants, $\kappa\sigma^2 = \kappa_4(p - \bar{p})/\kappa_2(p - \bar{p})$ of net-proton, proton and anti-proton distributions for the 5% most central *Au+Au* collisions are presented, as measured by the *STAR* Collaboration. The data shows strong enhancement at lowest center-of-mass energy of 7.7 GeV, while the results at 19.6, 27 and 39 GeV are below the *HRG* baseline. For higher energies, however, the data, within uncertainties, is consistent with unity. Moreover, the transport model *UrQMD* exhibits smooth decrease with decreasing energy. Few comments are in order at this point; (i) in order to get rid of participant fluctuations [8, 17], the experimental data of *STAR* were corrected with the so called Centrality Bin Width Correction (*CBWC*) procedure [18, 19]. The essential idea behind the *CBWC* is to get rid of the participant fluctuations by subdividing a given centrality bin into smaller ones and then merging them together incoherently [20]. However, although *CBWC* procedure reduces the overall level of fluctuations significantly it cannot fully eliminate the participant fluctuations; (ii) the same rapidity interval of $|y| < 0.5$ is used for all energies. This leads to significant decrease of the fraction of accepted protons with increasing energy and increases the artefacts of global baryon number conservation at low energies, which drives the results at $\sqrt{s_{NN}} = 19.6, 27$ and 39 GeV below unity. This explanation is also consistent with the energy dependence of the *UrQMD* results. Obviously baryon number conservation cannot explain the increase observed at lower energies. Recently it was argued that independent combination of baryon stopping and participant fluctuations also cannot explain this increase, though assumption of collective stopping of multiple baryons catches the essential part of the observed structure [21].

2. Galaxies and their classification

It is known that galaxies constitute the important fundamental building blocks of the Universe. In 1926 American astronomer E. Hubble developed a morphological classification scheme of galaxies [23], which is usually referred to as “tuning fork” diagram (cf. Figure. 2). The main criteria for this classification scheme are visual appearances of galaxies. According to this scheme the galaxies are divided into three types: elliptical, lenticular and spiral. The classification was further expanded by the irregular galaxies, i.e., the galaxies without obvious regular shapes.

For elliptical galaxies the oval shaped appearance is typical. The surface brightness of these galaxies is monotonically decreasing from the center towards edges. These galaxies are divided into 7 subtypes from E0 (round) to E7 (elliptical) and, in general, exhibit no spiral structures. In contrary to spiral galaxies, they almost do not have interstellar gas and dust. Also, there are no young stars or star-forming regions in typical elliptical galaxies. Hence their overall colors and spectra are very similar to those of K stars. Moreover, elliptical galaxies contain neither a disk nor arms.

The spiral galaxies are subdivided into two groups, normal and barred ones. About half of the spiral galaxies have a bar like structure in the central bulge of the galaxy. Depending on the tightness of the spiral arms and the size of the bulge, the normal spiral galaxies are further

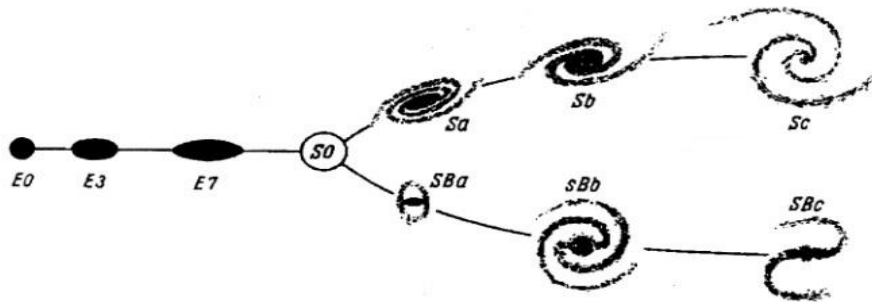
subdivided into Sa (tightly wound), Sb (middle wound) and Sc (loosely wound). In Sa galaxies the bulge dominates the galaxy, while in Sc galaxies the contribution of the bulge is much smaller. Spiral galaxies have a bulge with the core at the center and flattened disk containing spiral arms. The spiral arms contain numerous young blue stars and a large amount of interstellar gas and dust. It is interesting that the bulge of spiral galaxies is very similar to elliptical ones. Hence, the spiral galaxies consist of three components: a bulge, a disk, and a halo. The bulge is a spherical structure located in the center of the galaxy and contain older (population II) stars. The disk consists of the interstellar dust, gas and younger population I stars. The halo of a galaxy is a loose spherical structure located around the bulge. The halo contains old globular clusters of stars and scientists believe that it is rich with the mysterious “dark matter” [24,25].

In barred spiral galaxies (SBa, SBb, SBc) there is a bar running through the central bulge; the spiral arms emerge from the end of this bar.

As we move from Sa to Sc or from SBa to SBc, the following changes occur:

- the disc to bulge ratio increases;
- the degree of openness of the spiral arms increases;
- the galaxy becomes blue colored.

Figure 2. Hubbles “tuning fork” diagram (classification scheme), which includes elliptical (E0-E7), spiral (Sa-Sc, SBa-SBc) and lenticular (S0, SB0) galaxies.



There are also intermediate galaxies between elliptical and spiral galaxies, which are called lenticular galaxies (S0, SB0). They consist of a disc and a smaller bulge. However, their disks do not evidence spiral arms. The lenticular galaxies differ from elliptical galaxies because they have a bulge and a thin disk, but are different from Sa galaxies in that they have no spiral structure. They have either very little or no interstellar gas and dust.

E. Hubble found that some galaxies do not fit to the established pattern in “tuning fork” diagram. To shed some light on this problem he also considered irregular galaxies, i.e., the galaxies with no regular or symmetrical structures. Irregular galaxies have neither the spiral structure nor nuclear bulge and apparently they look like a random collection of stars. There are two subtypes of Irregular galaxies: IrrI and IrrII. Irregular IrrI galaxies appear to have some disturbed spiral structure. Irregular IrrII galaxies are much more abundant than IrrI galaxies; they have completely disrupted original shape. Most of the irregular galaxies are found to contain many young stars and experiencing significant ongoing star formation process. The shape of irregular galaxies could be a result of a galactic interaction, for instance, due to the passage close to another galaxy. Irregular galaxies are smaller objects in comparison with the elliptic and spiral ones. They are objects without definite shapes.

Irr I type galaxies contain HII regions, composed of a hydrogen gas, as well as many Population I stars. Irr II galaxies seem to have large amounts of interstellar gas and dust. The latter blocks most of the light from these stars, which it turn complicates observation of distinct stars in these galaxies.

Hubble thought of evolutionary connection between different subtypes, i.e. galaxies might evolve from one subtype to another one across the tuning-fork diagram. He believed that the evolution of galaxies have started from the left (elliptical galaxies) of the “tuning-fork” diagram and evolved to the right (spiral galaxies). Consequently he introduced the names “early galaxies” and “late galaxies” for elliptical and spirals galaxies, respectively. Albeit E. Hubble was not quite right in his theory of evolution of galaxies, his “tuning-fork” diagram is still being used by astronomers.

It is worthwhile to note that the “tuning fork” diagram is also an arrangement of galaxies according to their rotation rates. Spiral galaxies rotate rapidly, while elliptical ones have little or no rotation at all.

3. Phase transitions and spiral structures.

As we remarked above, galaxies are important fundamental building blocks of the Universe and more than 50% (even according to some sources up to 70%) of galaxies in the Universe are of spiral nature. It is known that the spiral structures of galaxies are stable, since they are not affected for billions of years. The formation and stability of these systems, however, is yet to be explained.

Recently we proposed an original idea that “fingerprints” of spiral structures can be traced back to the first microseconds after the Big Bang [26]. This scenario arises when combining two distinct arguments; (i) non-vanishing orbital angular momentum in heavy-ion collisions and (ii) well known phenomenon of the divergence of the correlation length near the critical point. While the first argument leads to the overall rotation of the system in the reaction plane, the second one requires the scale invariance, i.e., self-similarity of the entire system. This scenarios can be achieved if rotations follow a logarithmic spiral which reproduces itself by magnifying some part of it, i.e., it is by definition a self-similar object. Experimentally such structures can be looked at in event-by-event angular and momentum distributions of particles produced in nuclear collisions. One can argue that spiral structures in galaxies may be artefacts of successive phase transitions the Universe passed through during its expansion.

Conclusions

In summary we reviewed first measurements of net-proton fluctuations from the *ALICE* experiment at *LHC* and discussed preliminary results from the *STAR* experiment. The measured second cumulants of net-protons by the *ALICE* Collaboration, which are used as a proxy for net-baryons, are, after accounting for baryon number conservation, in agreement with the corresponding second cumulants of the Skellam distribution. We note that *LQCD* predicts a Skellam behavior for the second cumulants of net-baryon distributions at a pseudo-critical temperature of about 155 MeV, which is very close to the freeze-out temperature from the *HRG* model applied to the *ALICE* data. Critical behavior is predicted by *LQCD* starting from second off-diagonal cumulants, the analysis of which is ongoing in *ALICE*. The non-monotonic energy excitation function of fourth to second ratio of cumulants of net protons, as re-

ported by *STAR*, can be partially explained by the global baryon number conservation, while the increase of fluctuations at lower energies still to be understood. It is however expected that non-dynamical fluctuations, such as those stemming from participant fluctuations are still present in the final results, because the applied *CBWC* procedure cannot eliminate them entirely. There is no general consensus whether or not the observed nonmonotonic energy dependence is indeed connected to the critical phenomena associated with the second order phase transition at the critical point. We further argued, based on self-similarity, that that spiral structures of galaxies may also appear in nuclear collisions as a consequence of symmetry breaking phase transitions. This would imply that spiral structures in galaxies may be formed during the first instances after the creation of the Universe.

REFERENCES

- [1] A. Bazavov et al., Phys. Rev. D85 (2012) 054503.
- [2] B. Friman, F. Karsch, K. Redlich, and V. Skokov, Eur. Phys. J. C71 (2011) 1964.
- [3] F. Karsch, Nucl.Phys. A967 (2017) 461-464.
- [4] O. Kaczmarek, Nucl.Phys. A967 (2017) 137-144.
- [5] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, Statistical Physics, Pergamon Press, 1980.
- [6] A. Andronic, P. Braun-Munzinger, K. Redlich, and J. Stachel, J.Phys.Conf.Ser. 779 (2017).
- [7] V. Koch, in "Relativistic Heavy Ion Physics", R. Stock (ed.) (Springer, Heidelberg, 2010), (Landolt-Boernstein New Series I, v. 23) p. 626, arXiv:0810.2520v1.
- [8] P. Braun-Munzinger, A. Rustamov, J. Stachel, Nucl. Phys. A960 (2017), 114.
- [9] M. Kitazawa, and M. Asakawa, Phys. Rev. C86 (2012) 024904 and erratum, ibidum 069902, arXiv:1205.3292 [nucl-th].
- [10] A. Rustamov for the ALICE Collaboration, Nucl.Phys. A967 (2017) 453-456.
- [11] M. Gazdzicki et al., Phys. Rev. C83 (2011) 054907 .
- [12] M. I. Gorenstein, Phys. Rev. C84 (2011) 024902.
- [13] A. Rustamov, M. I. Gorenstein, Phys. Rev. C86 (2012) 044906.
- [14] T. Anticic et al. (NA49 Collab.), Phys.Rev. C89 (2014) 054902.
- [15] M. Arslanovic for the ALICE Collaboration, Nucl.Phys. A956 (2016) 870-873.
- [16] P. Braun-Munzinger, A. Kalweit, K. Redlich, and J. Stachel, Phys.Lett. B747 (2015) 292.
- [17] V. Skokov, B. Friman, and K. Redlich, Phys.Rev. C88 (2013) 034911.
- [18] X. Luo, PoS (CPOD2014) 019, arXiv:1503.02558.
- [19] X. Luo, N. Xu, Nucl.Sci.Tech. 28 (2017) no.8, 112.
- [20] X. Luo, J. Xu, B. Mohanty, N. Xu, J. Phys. G 40 (2013) 105104.
- [21] A. Bzdak, V. Skokov, Eur.Phys.J. C77 (2017) no.5, 288.
- [22] P. Braun-Munzinger, A. Rustamov, J. Stachel, arXiv:1807.08927.
- [23]. Hubble E.P., The classification of spiral nebulae. The Observatory, 1927, V 50, pp.276-281
- [24]. Frampton P.H., On the Origin and Nature of Dark Matter. arXiv:1804.03516v1 [physics.gen-ph] 4 Apr 2018, pp.1-31
- [25]. Zwicky F., On the Masses of Nebulae and of Clusters of Nebulae. Astrophysical Journal, 1937, 86, pp.217-246
- [26]. Rustamov J.N., Rustamov A.J. On the Spiral Structures in Heavy-Ion Collisions. arXiv:[1602.01812](https://arxiv.org/abs/1602.01812), 2016, pp. 1-5

UOT: 523PASC:96.25.-f

THE INFLUENCE OF SOLAR ACTIVITY ON THE DISCOVERY OF PERIODIC COMETS OF THE SATURN FAMILY

Ayyub GULIYEV, Hazi GASIMOV

Shamakhi Astrophysical Observatory

Baku Engineering University

guliyeveyyub@gmail.com, hqasimov@beu.edu.az

ABSTRACT

In this study, the first observations of the Saturn periodic comet family are being investigated for the intervals of the 11-year period of the Solar Activity. The analysis covers 110 comets with aphelion distance up to 8-12 A.U., were observed 1-23 cycles of Solar activity. It is established that the maximum number of detected comets is observed before and after the maximum period of solar activity. The family of comet Saturn is also a periodic comet as the family of Jupiter, but in this respect they differ, behaving like long-period comets. The magnetic field's pole in the Sun varies according to 11-year cycles. It is important to learn the effect of this change on comets.

Key words: 11-year cycle of Solar activity, periodic comets, observed dates.

SATURN DÖVRI KOMET AİLƏSİNİN MÜƏYYƏN OLUNMASINDA GÜNƏŞ FƏALLIĞININ ROLU XÜLASƏ

Bu tədqiqat işində Saturn dövrü komet ailəsinin ilk dəfə müşahidə olunma tarixləri Günəş fəallığının 11-illik dövrünün intervallarına görə tədqiq olunur. Tədqiqat afel məsafəsi 8-12 A.V.-dək olan və Günəş fəallığının 1-23-cü dövründə müşahidə olunan 110 kometi əhatə edir. Müəyyən olunmuşdur ki, kometlərin kəşf olunma tarixlərinin maksimumu Günəş fəallığının maksimum dövründə həmişə əvvəl, həmdə sonrakı dövrdə müşahidə olunur. Bu baxımdan Saturn komet ailəsi Yupiter komet ailəsi kimi qısa periodlu olmalarına baxmayaraq Yupiter komet ailəsindən fərqlənirlər və özlərini uzundövrü kometlər kimi aparırlar. Günəşin ümumi maqnit sahəsinin qütblüyü hər 11 illik dövrdə dəyişir. Bu dəyişmənin kometlər üzərində təsirini öyrənmək olduqca vacibdir.

Açar sözlər: Günəş aktivliyinin 11-illik tsikli, periodik kometlər, müşahidə tarixləri.

О ВЛИЯНИИ СОЛНЕЧНОЙ АКТИВНОСТИ НА ОТКРЫТИЕ ПЕРИОДИЧЕСКИХ КОМЕТ СЕМЕЙСТВА САТУРНА РЕЗЮМЕ

В работе изучается вопрос о распределении дат открытия комет семейства Сатурна по фазам 11-летнего цикла Солнечной активности (С.А.). Анализ охватывает 110 кометы с афелийными расстояниями до 8-12 А.Е., найденные 1-23 цикласолнечной активности. Установлено, что максимальное количество обнаруженных комет наблюдается до и после максимального периода солнечной активности. Семейство кометы Сатурна тоже периодические кометы как семья Юпитера, но в этом отношении они различается, ведут себя как долгопериодические кометы. Полюс магнитного поля в Солнце варьируется в зависимости от 11-летних циклов. Очень важно изучить эффект этого изменения на кометах.

Ключевые слова: 11-летний цикл солнечной активности, периодические кометы, даты открытия.

Introduction

The question of the influence of solar activity (S.A.), in particular the 11-year cycle on the distribution of cometary parameters, has been the subject of many studies. In this regard, the study of the Saturn family of comets is also relevant. Our aim is to study the first observant time comets have been distributed in different periods of the 11-year Solar activity. It may be that the two comets are identical to all parameters (orbit elements, direction of the orbit, etc.), but their observant time during the 11-year activity is different. This means that their brightness will not be the same during the Solar activity. Therefore, the purpose of this study the question of

changing the number of comets found at different periods of cycle. Here we will use the Volf number as a reference their maximum and minimum epochs. We'll look investigations of Wolf's numbers with comet parameters in the next studies. Studies on this subject have been dedicated in the works of Dobrovolsky [4], Sekanina [5-7] and recently Svoren [8]. Based on extensive statistical data, Guliyev's and Gasimov's [3] recent works proved the two-maximal distribution of long-period comets. While the statistical analysis of observation histories for single and double cycles of all comets, more comets were observed in single cycles. It also occurs in long-period comets, as well as in the families of Jupiter and Saturn's comet. The strongest probability is the magnetic field of the Solar spots. The magnetic polarization of spots in each cycle varies the opposite. In this sense, activity of the Sun cycle is considered 22 years, not 11 years. The magnetic field's polar of the Sun varies, as it has been mentioned above.

Statement of the question and the data used.

In this paper, the dependence of the Saturn periodic comet family members on solar activity was analyzed in a broader context. We used data from 1-23 S.A. cycles, for comparison we note that in the work author [2] the analysis covered the data of cycle 1-21. Thanks to the rapid development of cosmic technology, we see the number of Saturn comets grow incredible. During the analysis, were taken comets aphelion distance up to 8-12 A.U. In the future, according to their number, they will be able to compete with the Jupiter family. Our research starts with 8P / 1790 A2 comet and list is completed by P / 2008 Y1 comet. The comet's discovery dates were taken from the table on NASA's [9] site. In [2], its author instead of the traditional equation for determining the phase of the S.A

$$F = (t - T_1)/(T_2 - T_1) \tag{1}$$

used a more perfect (2) equation

$$F = \begin{cases} \frac{t-T_1}{2(T_{max}-T_1)}; & \text{if } t - T_{max} < 0 \\ \frac{t-T_{max}}{2(T_2-T_{max})} + 0.5; & \text{if } t - T_{max} > 0 \end{cases} \tag{2}$$

Here, t - the moment of discovery of the comet, T₁ and T₂ - the dates of successive minima of the S.A., T_{max} - the date of the maximum between them. The difference between (2) and (1) is that with this definition of the S.A. phase, the maximum always corresponds to the phase 0.5. In the classical phase definition [4-8], the maximum varies in a wide range of F and does not always coincide with the value 0.5.

The results of Saturn comet family analysis.

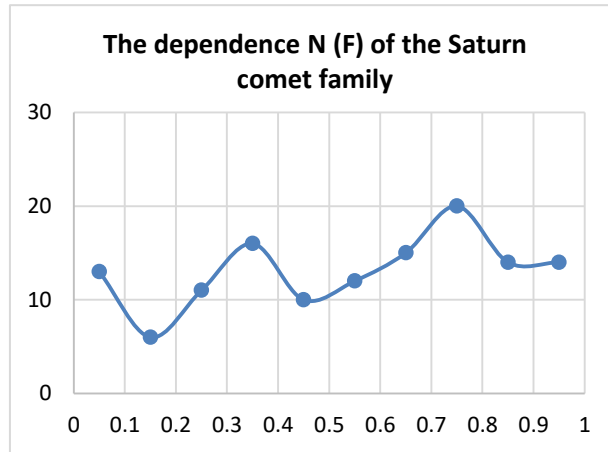
The results of the study are given in Table 1. In the table shows the number of comets discovered in each phase of the cycle. From here, it appears that the maximum number of comets found in two intervals of the cycle. In the range 0.3 - 0.4 was first maximum number (N=10) of comets. The second maximum (N=20) observed in the range 0.7-0.8. Taking into account the asymmetry of the sun's activity curve, the data in the 0-0.5 interval should be multiply 1.62, for normalize the data in the table. N_{eff} – the data identification is given in Table 1, on the third row. Given this fact, it can be said that the Saturn comet family behaves as long-period comets.

Table 1. Distribution of dates of discoveries of periodic comets Saturn family by S.A. cycle.

N	Φ									
	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1
Q<8-12 a.v	8	4	7	10	6	12	15	20	14	14
N _{eff}	13	6	11	16	10	12	15	20	14	14

It was emphasized that the conclusion of such results in the author's [1] work is related to the physical characteristics of cometary nuclei. In any case, this is due to the cosmogonic effects. If we want describe with graphs, data presented in Table 1, we'll see the two maximal distribution.

Fig 1. The dependence $N(F)$ of the Saturn comet family on the intervals of 1-23 cycles S.A.



Statistical analyze Saturn comet family for single and double cycles of Solar activity.

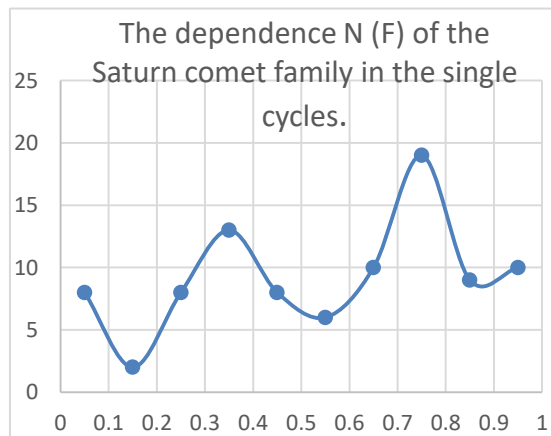
The statistical analysis of the Saturn comet family's for single and double cycles of solar activity is of great interest. The two maximal distribution in single cycles shows itself more clearly. So, the comets were found in the range of 0.3-0.4 ($N = 8$) and in the range 0.7-0.8 ($N = 19$).

Table 2. Distribution of the Saturn periodic comet family by intervals of single cycles of Solar activity.

N_{single}	Φ_{single}									
	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1
$Q < 8-12$ a.v	5	1	5	8	5	6	10	19	9	10
N_{eff}	8	2	8	13	8	6	10	19	9	10

Let's describe this information graphically. The graphical description is as seems as the long-period comets.

Fig 2. The dependence $N(F)$ of the Saturn comet family in the single cycles.



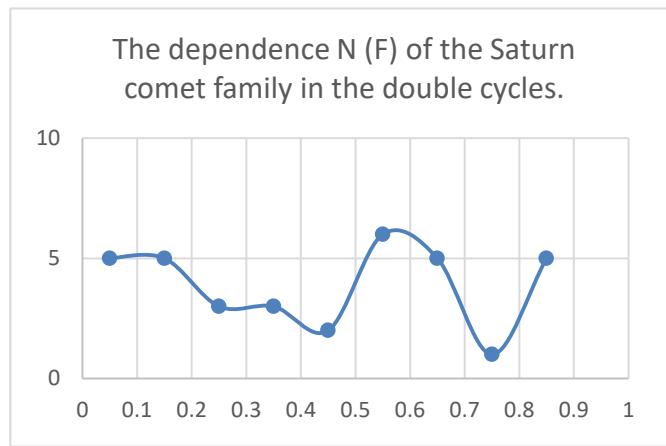
When we take these analyzes in double cycles, we get weaker indicators than single cycles. In Table 3, we can see that the maximum number ($N = 6$) was observed in the interval 0.5-0.6.

Table 3. Distribution of the Saturn periodic comet family by intervals of double cycles of Solar activity.

N _{double}	Φ _{double}									
	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1
Q<8-12 a.v	2	3	2	2	1	6	5	1	5	4
N _{eff}	5	5	3	3	2	6	5	1	5	4

The graphic representation of the data double cycles confirms that these results are weaker than single cycles.

Fig 3. The dependence N (F) of the Saturn comet family in the double cycles.



The Saturn periodic comet family, as long-periodic comets, presents two maximum distribution in the cycles of solar activity. However, the Saturn comet family belonging to the periodic comet, but reacts to the Solar Activity as a long-period comet, which is of great scientific interest. Additional investigations are needed to clarify such important issues.

1. Гулиев А.С. О влиянии солнечной активности на открытие короткопериодических комет // Проблемы косм. физики. 1985–20. – с. 39–43.
2. Гулиев А. С. О распределении кометных параметров по одиннадцатилетнему циклу солнечной активности // Кинематика и физика небесных тел. 1990– т.6., 4. – с. 68–73.
3. Quliyev Ə.S. Qasimov H. Ə., Fərhadova T. Distribution of parameters of long-period comets in phase of the 11-year solar activity cycle Journal of Baku Engineering University-2017, v.2, 181-185 p.
4. Добровольский О. В. Кометы. М.: Наука. 1966–288 с.
5. Secanina Z. Variation of the average absolute brightness of comets during an eleven-year solar cycle. Bulletin of the Astronomical Institute of Czechoslovakia, 1967, vol. 11, p.22.
6. Secanina Z. Changes of cometary characteristics as related to the changes of solar activity. Bulletin of the Astronomical Institute of Czechoslovakia, 1967, vol. 11, p.94.
7. Sekanina, Z. Solar activity as related to the statistics of comets. Bulletin of the Astronomical Institute of Czechoslovakia, 1966, vol. 10, p.103-104.
8. Ján Svoreň. Distribution of brightenings of periodic comets during solar activity cycles 9–22. Planetary and Space Science. Volume 118, 1 December 2015, Pages 176-180.
9. <https://www.jpl.nasa.gov>

INSTRUCTIONS FOR AUTHORS

1. "The Baku Engineering University Journal-Physics" accepts original unpublished articles and reviews in the research field of the author.
2. Articles are accepted in English.
3. File format should be compatible with **Microsoft Word** and must be sent to the electronic mail (journal@beu.edu.az) of the Journal. The submitted article should follow the following format:
 - Article title, author's name and surname
 - The name of workplace
 - Mail address
 - Abstract and key words
4. The title of the article should be in each of the three languages of the abstract and should be centred on the page and in bold capitals before each summary.
5. **The abstract** should be written in **9 point** type size, between **100** and **150** words. The abstract should be written in the language of the text and in two more languages given above. The abstracts of the article written in each of the three languages should correspond to one another. The keywords should be written in two more languages besides the language of the article and should be at least three words.
6. **UDC** and **PACS** index should be used in the article.
7. The article must consist of the followings:
 - Introduction
 - Research method and research
 - Discussion of research method and its results
 - In case the reference is in Russian it must be given in the Latin alphabet with the original language shown in brackets.
8. **Figures, pictures, graphics and tables** must be of publishing quality and inside the text. Figures, pictures and graphics should be captioned underneath, tables should be captioned above.
9. **References** should be given in square brackets in the text and listed according to the order inside the text at the end of the article. In order to cite the same reference twice or more, the appropriate pages should be given while keeping the numerical order. For example: [7, p.15].

Information about each of the given references should be full, clear and accurate. The bibliographic description of the reference should be cited according to its type (monograph, textbook, scientific research paper and etc.) While citing to scientific research articles, materials of symposiums, conferences and other popular scientific events, the name of the article, lecture or paper should be given.

Samples:

- a) **Article:** Demukhamedova S.D., Aliyeva İ.N., Godjajev N.M.. *Spatial and electronic structure of monomerrik and dimeric conapeetes of carnosine üith zinc*, Journal of structural Chemistry, Vol.51, No.5, p.824-832, 2010
 - b) **Book:** Christie ohn Geankoplis. *Transport Processes and Separation Process Principles*. Fourth Edition, Prentice Hall, p.386-398, 2002
 - c) **Conference paper:** Sadychov F.S., Aydın C., Ahmedov A.İ.. Appligation of Information – Commu-nication Technologies in Science and education. II International Conference."Higher Twist Effects In Photon- Proton Collisions", Baki, 01-03 Noyabr, 2007, ss 384-391
References should be in 9-point type size.
10. The margins sizes of the page: - Top 2.8 cm. bottom 2.8 cm. left 2.5 cm, right 2.5 cm. The article main text should be written in Palatino Linotype 11 point type size single-spaced. Paragraph spacing should be 6 point.
 11. The maximum number of pages for an article should not exceed 15 pages
 12. The decision to publish a given article is made through the following procedures:
 - The article is sent to at least to experts.
 - The article is sent back to the author to make amendments upon the recommendations of referees.
 - After author makes amendments upon the recommendations of referees the article can be sent for the publication by the Editorial Board of the journal.

YAZI VƏ NƏŞR QAYDALARI

1. "Journal of Baku Engineering University" Fizika- əvvəllər nəşr olunmamış orijinal əsərləri və müəllifin tədqiqat sahəsi üzrə yazılmış icmal məqalələri qəbul edir.
 2. Məqalələr İngilis dilində qəbul edilir.
 3. Yazılar **Microsoft Word** yazı proqramında, (**journal@beu.edu.az**) ünvanına göndərməlidir. Göndərilən məqalələrdə aşağıdakılara nəzərə alınmalıdır:
 - Məqalənin başlığı, müəllifin adı, soyadı,
 - İş yeri,
 - Elektron ünvanı,
 - Xülasə və açar sözlər.
 4. **Məqalədə başlıq hər xülasədən əvvəl** ortada, qara və böyük hərflə xülasələrin yazıldığı hər üç dildə olmalıdır.
 5. **Xülasə** 100-150 söz aralığında olmaqla, 9 punto yazı tipi böyüklüyündə, məqalənin yazıldığı dildə və bundan əlavə yuxarıda göstərilən iki dildə olmalıdır. Məqalənin hər üç dildə yazılmış xülasəsi bir-birinin eyni olmalıdır. Açar sözlər uyğun xülasələrin sonunda onun yazıldığı dildə verilməklə ən azı üç sözdən ibarət olmalıdır.
 6. Məqalədə UOT və PACS kodları göstərməlidir.
 7. Məqalə aşağıdakılardan ibarət olmalıdır:
 - Giriş,
 - Tədqiqat metodu
 - Tədqiqat işinin müzakirəsi və onun nəticələri,
 - İstinad ədəbiyyatı rus dilində olduğu halda orijinal dili mötəzə içərisində göstərməklə yalnız Latın əlifbası ilə verilməlidir.
 8. **Şəkil, rəsm, grafik və cədvəllər** çapda düzgün, aydın çıxacaq vəziyyətdə və mətn içərisində olmalıdır. Şəkil, rəsm və grafiklərin yazıları onların altında yazılmalıdır. Cədvəllərdə başlıq cədvəlün üstündə yazılmalıdır.
 9. **Mənbələr** mətn içərisində kvadrat mötərizə daxilində göstərməklə məqalənin sonunda mətn daxilindəki sıra ilə düzəlməlidir. Eyni mənbəyə iki və daha çox istinad edildikdə əvvəlki sıra sayı saxlanmaqla müvafiq səhifələr göstərməlidir. Məsələn: [7,səh.15].

Ədəbiyyat siyahısında verilən hər bir istinad haqqında məlumat tam və dəqiq olmalıdır. İstinad olunan mənbənin biblioqrafik təsviri onun növündən (monoqrafiya, dərslik, elmi məqalə və s.) asılı olaraq verilməlidir. Elmi məqalələrə, simpozium, konfrans, və digər nüfuzlu elmi tədbirlərin materiallarına və ya tezislərinə istinad edərkən məqalənin, məruzənin və ya tezisnin adı göstərməlidir.
- Nümunələr:**
- a) **Məqalə:** Demukhamedova S.D., Aliyeva İ.N., Godjayev N.M.. *Spatial and electronic structure of monomeric and dimeric complexes of carnosine with zinc*, Journal of structural Chemistry, Vol.51, No.5, p.824-832, 2010
 - b) **Kitab:** Christie ohn Geankoplis. *Transport Processes and Separation Process Principles*. Fourth Edition, Prentice Hall, 2002
 - c) **Konfrans:** Sadychov F.S., Aydın C., Ahmedov A.İ.. Appligation of Information-Communication Technologies in Science and education. II International Conference. "Higher Twist Effects In Photon- Proton Collisions", Baki, 01-03 Noyabr, 2007, ss 384-391
- Mənbələr 9 punto yazı tipi böyüklüyündə olmalıdır.
10. **Səhifə ölçüləri:** üstədən 2.8 sm, altdan 2.8 sm, soldan 2.5 sm və sağdan 2.5 sm olmalıdır. Mətn 11 punto yazı tipi böyüklüyündə, **Palatino Linotype** yazı tipi ilə və tək simvol aralığında yazılmalıdır. Paraqraflar arasında 6 punto yazı tipi aralığında məsafə olmalıdır.
 11. Orijinal tədqiqat əsərlərinin tam mətni bir qayda olaraq 15 səhifədən artıq olmamalıdır.
 12. Məqalənin nəşrə təqdimi aşağıdakı qaydada aparılır:
 - Hər məqalə ən azı iki ekspertə göndərilir.
 - Ekspertlərin tövsiyələrini nəzərə almaq üçün məqalə müəllifə göndərilir.
 - Məqalə, ekspertlərin tənqidi qeydləri müəllif tərəfindən nəzərə alındıqdan sonra Jurnalın Redaksiya Heyəti tərəfindən çapa təqdim oluna bilər.

YAZIM KURALLARI

1. "Journal of Baku Engineering University-Physics" önceler yayımlanmamış orijinal çalışmaları ve yazarın kendi araştırma alanında yazılmış derleme makaleleri kabul etmektedir.
2. Makaleler İngilizce kabul edilir.
3. Makaleler Microsoft Word yazı programında, (**journal@beu.edu.az**) adresine gönderilmelidir. Gönderilen makalelerde şunlar dikkate alınmalıdır:
 - Makalenin başlığı, yazarın adı, soyadı,
 - İş yeri,
 - E-posta adresi,
 - Özet ve anahtar kelimeler.
4. **Özet** 100-150 kelime arasında olup 9 font büyüklüğünde, makalenin yazıldığı dilde ve yukarıda belirtilen iki dilde olmalıdır. Makalenin her üç dilde yazılmış özeti birbirinin aynı olmalıdır. Anahtar kelimeler uygun özeti sonunda onun yazıldığı dilde verilmekle en az üç sözcükten oluşmalıdır.
5. Makalede UOT ve PACS tipli kodlar gösterilmelidir.
6. Makale şunlardan oluşmalıdır:
 - Giriş,
 - Araştırma yöntemi
 - Araştırma
 - Tartışma ve sonuçlar,
 - İstinat Edebiyatı Rusça olduğu halde orijinal dili parantez içerisinde göstermekle yalnız Latin alfabesi ile verilmelidir.
7. **Şekil, Resim, Grafik ve Tablolar** baskıda düzgün çıkacak nitelikte ve metin içerisinde olmalıdır. Şekil, Resim ve grafiklerin yazıları onların alt kısmında yer almalıdır. Tablolarda ise başlık, tablonun üst kısmında bulunmalıdır.
8. **Kullanılan kaynaklar**, metin dâhilinde köşeli parantez içerisinde numaralandırılmalı, aynı sırayla metin sonunda gösterilmelidir. Aynı kaynaklara tekrar başvurulduğunda sıra muhafaza edilmelidir. Örneğin: [7, sch.15]. Referans verilen her bir kaynağın künyesi tam ve kesin olmalıdır. Referans gösterilen kaynağın türü de eserin türüne (monografi, derslik, ilmi makale vs.) uygun olarak verilmelidir. İlmî makalelere, sempozyum, ve konferanslara müracaat ederken makalenin, bildirinin veya bildiri özetlerinin adı da gösterilmelidir.

Örnekler:

- a) **Makale:** Demukhamedova S.D., Aliyeva İ.N., Godjajev N.M.. *Spatial and Electronic Structure of Monomeric and Dimeric Conapeetes of Carnosine Üith Zinc*, Journal of Structural Chemistry, Vol.51, No.5, p.824-832, 2010
- b) **Kıtap:** Christie ohn Geankoplis. *Transport Processes and Separation Process Principles*. Fourth Edition, Prentice Hall, p.386-398, 2002
- c) **Kongre:** Sadychov F.S., Aydın C., Ahmedov A.İ. Appligation of Information-Communication Technologies in Science and education. II International Conference. "*Higher Twist Effects In Photon- Proton Collisions*", Baki, 01-03 Noyabr, 2007, ss 384-391

Kaynakların büyüklüğü 9 punto olmalıdır.

9. **Sayfa ölçüleri**; üst: 2.8 cm, alt: 2.8 cm, sol: 2.5 cm, sağ: 2.5 cm şeklinde olmalıdır. Metin 11 punto büyüklükte **Palatino Linotype** fontu ile ve tek aralıkta yazılmalıdır. Paragraflar arasında 6 puntoluk yazı mesafesinde olmalıdır.
10. Orijinal araştırma eserlerinin tam metni 15 sayfadan fazla olmamalıdır.
11. Makaleler dergi editör kurulunun kararı ile yayımlanır. Editörler makaleyi düzeltme için yazara geri gönderilebilir.
12. Makalenin yayına sunuşu aşağıdaki şekilde yapılır:
 - Her makale en az iki uzmana gönderilir.
 - Uzmanların tavsiyelerini dikkate almak için makale yazara gönderilir.
 - Makale, uzmanların eleştirel notları yazar tarafından dikkate alındıktan sonra Derginin Yayın Kurulu tarafından yayına sunulabilir.
13. Azerbaycan dışından gönderilen ve yayımlanacak olan makaleler için, (derginin kendilerine gönderilmesi zamani posta karşılığı) 30 ABD Doları veya karşılığı TL, T.C. Ziraat Bankası/Üsküdar-İstanbul 0403 0050 5917 No'lu hesaba yatırılmalı ve makbuzu üniversitemize fakslanmalıdır.

ПРАВИЛА ДЛЯ АВТОРОВ

1. «Journal of Baku Engineering University» - Физика публикует оригинальные, научные статьи из области исследования автора и ранее не опубликованные.
2. Статьи принимаются на английском языке.
3. Рукописи должны быть набраны согласно программы **Microsoft Word** и отправлены на электронный адрес (journal@beu.edu.az). Отправляемые статьи должны учитывать следующие правила:
 - Название статьи, имя и фамилия авторов
 - Место работы
 - Электронный адрес
 - Аннотация и ключевые слова
4. **Заглавие статьи** пишется для каждой аннотации заглавными буквами, жирными буквами и располагается по центру. Заглавие и аннотации должны быть представлены на трех языках.
5. **Аннотация**, написанная на языке представленной статьи, должна содержать 100-150 слов, набранных шрифтом 9 punto. Кроме того, представляются аннотации на двух других выше указанных языках, перевод которых соответствует содержанию оригинала. Ключевые слова должны быть представлены после каждой аннотации на его языке и содержать не менее 3-х слов.
6. В статье должны быть указаны коды UOT и PACS.
7. Представленные статьи должны содержать:
 - Введение
 - Метод исследования
 - Обсуждение результатов исследования и выводов.
 - Если ссылаются на работу на русском языке, тогда оригинальный язык указывается в скобках, а ссылка дается только на латинском алфавите.
8. **Рисунки, картинки, графики и таблицы** должны быть четко выполнены и размещены внутри статьи. Подписи к рисункам размещаются под рисунком, картинкой или графиком. Название таблицы пишется над таблицей.
9. **Ссылки** на источники даются в тексте цифрой в квадратных скобках и располагаются в конце статьи в порядке цитирования в тексте. Если на один и тот же источник ссылаются два и более раз, необходимо указать соответствующую страницу, сохраняя порядковый номер цитирования. Например: [7, стр.15]. Библиографическое описание ссылаемой литературы должно быть проведено с учетом типа источника (монография, учебник, научная статья и др.). При ссылке на научную статью, материалы симпозиума, конференции или других значимых научных мероприятий должны быть указаны название статьи, доклада или тезиса.

Например:

- a) **Статья:** Demukhamedova S.D., Aliyeva I.N., Godjajev N.M. *Spatial and electronic structure of monomeric and dimeric complexes of carnosine with zinc*, Journal of Structural Chemistry, Vol.51, No.5, p.824-832, 2010
- b) **Книга:** Christie on Geankoplis. *Transport Processes and Separation Process Principles*. Fourth Edition, Prentice Hall, 2002
- c) **Конференция:** Sadychov F.S, Fydin C, Ahmedov A.I. Application of Information-Communication Nechnologies in Science and education. II International Conference. *“Higher Twist Effects In Photon-Proton Collision”*, Baki,01-03 Noyabr, 2007, ss.384-391

Список цитированной литературы набирается шрифтом 9 punto.

10. **Размеры страницы:** сверху 2.8 см, снизу 2.8 см, слева 2.5 и справа 2.5. Текст печатается шрифтом **Palatino Linotype**, размер шрифта 11 punto, интервал-одинарный. Параграфы должны быть разделены расстоянием, соответствующим интервалу 6 punto.
11. Полный объем оригинальной статьи, как правило, не должен превышать 15 страниц.
12. Представление статьи к печати производится в ниже указанном порядке:
 - Каждая статья посылается не менее двум экспертам.
 - Статья посылается автору для учета замечаний экспертов.
 - Статья, после того, как автор учел замечания экспертов, редакционной коллегией журнала может быть рекомендована к печати.