

ISSN 2521-6368

Volume 6  
Number 1  
**2022**

# 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**

*Razim Bayramov*

**Editorial advisory board**

*Azer Ahmedov (Baku State University, Azerbaijan)  
Cahangir Huseynov (Azerbaijan, Azerbaijan Pedagogical University)  
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)  
Gulnara Akhverdiyeva (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)  
Nadir Gahramanov (Azerbaijan, Baku State University)  
Namiq Ahmedov (Azerbaijan, Institute of Physical Problems)  
Sajida Abdulvahabova (Azerbaijan, Baku State University)*

**International Advisory board**

*Ahmed Abdinov (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)  
Gulshen Agayeva (Azerbaijan, Institute of Physical Problems)  
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)  
Kamran T. Mahmudov (University of Lisbon, Portugal)  
Kev Salihov (Tataristan, Kazan University)  
Khalil Kälantär (Displays and Optical Technologies, Japan, Tokio)  
Konstantin Voldemarovich Shaitan (Russia, Moskow State University)  
M.Iqbal Choudhary (University of Karachi, Pakistan)  
Natiq M. Atakishiye (Universidad National Autonoma 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)  
Svetlana Demuhamedova (Azerbaijan, Institute of Physical Problems)  
Takhtasib Aliyev (METU, Ankara, Turkey)  
Taleh Yusifov (University of California, USA, Los Angeles)  
Tariel Ismayilov (Azerbaijan, Baku State University)  
Tarana Aliyeva (Azerbaijan, Institute of Physical Problems)  
Tarlan Efendiye (Belarus, National Academy of Science)  
Toshi Nagata (Japan, National Institute for Natural Science)  
V. Thavasi (Singapore, National University of Singapore)  
Vagif Nasirov (Azerbaijan, Azerbaijan Pedagogical University)  
Vladimir Pashenko (Russia, Moskow State University)  
Veli Gusseynov (National Academy of Science, Baku, Azerbaijan )  
Vladimir Gorbarchuk (Poland, Lyubel Polytechnic University)  
Yusif Nurullayev (Azerbaijan, Baku State University)  
Yusuf Sahin (Turkey, Ataturk University)*

**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](mailto:jr-physics@beu.edu.az)*

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

*facebook: [Journal Of Baku Engineering University](#)*

*Copyright © Baku Engineering University*

ISSN 2521-6368



**Journal of  
Baku Engineering  
University**

**PHYSICS**

Baku - AZERBAIJAN

# Journal of Baku Engineering University

## PHYSICS

2022. Volume 6, Number 1

### CONTENTS

#### THERMODYNAMIC PROPERTIES OF HULTHÉN PLUS A CLASS OF YUKAWA POTENTIALS FOR SOME DIATOMIC MOLECULES

*A. I. Ahmadov, G. A. Bayramova* ..... 3

#### INFLUENCE OF ORGANIC ADDITIVES ON THE STRUCTURES AND ELECTROPHYSICAL PROPERTIES OF HIGH PRESSURE POLYETHYLENE (LDPE)

*E.M.Gojayev, Sh.A.Zeynalov, G.S.Jafarova, F.SH.Kerimov* ..... 21

#### ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ КАТАЛИТИЧЕСКОГО ДОМЕНА КАЗЕИНКИНАЗЫ 1CSN

*Демухамедова С.Д., Алиева И.Н., Гаджиев З.И.* ..... 27

#### ABOUT THE PROCESSES OF HYDRATION IN DILUTE AQUEOUS SOLUTIONS OF ELECTROLYTES

*Masimov E.A., Shahbazova G.M., Ələsgərova G.N.* ..... 39

#### SYNTHESIS AND ELECTROPHYSICAL PROPERTIES OF THE $(\text{PbGa}_2\text{S}_4)_{1-x}(\text{FeS})_x$ , $(\text{PbIn}_2\text{S}_4)_{1-x}(\text{FeS})_x$ VΘ $(\text{In}_2\text{S}_3)_{1-x}(\text{FePbIn}_4\text{S}_8)_x$ TYPE SOLUTIONS

*Hasanova U.A., Mammadov SH.H., Bakhtiyarly I.B.* ..... 45

IOT: 532:533PACS: 03.65. Ge; 03.65.Pm; 03.65.Ca

## THERMODYNAMIC PROPERTIES OF HULTHÉN PLUS A CLASS OF YUKAWA POTENTIALS FOR SOME DIATOMIC MOLECULES

A. I. AHMADOV<sup>1,2</sup>, G. A. BAYRAMOVA<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Department of Theoretical Physics, Baku State

University, <sup>2</sup>Institute for Physical Problems,

Baku State University,

ahmadovazar@yahoo.com

<sup>3</sup>Department of Solid State Physics, Baku State

University, Z. Khalilov st. 23, AZ-1148,

BAKU, AZERBAIJAN

gyunel.bayramova.91@mail.ru

### ABSTRACT

In this article, the bound states and thermodynamic properties are investigated for Hultén plus a class of Yukawa potential by solving the Schrödinger equation. We use the Greene–Aldrich approximation to evaluate the centrifugal term and apply Nikiforov–Uvarov (NU) method for the analytical solution. With the help of the energy spectra, analytical expressions of the vibrational partition function  $Z$ , entropy  $S$ , Helmholtz free energy  $F$ , internal energy  $U$ , and specific heat capacity  $C$  thermodynamic functions are derived by employing the Poisson summation formula. These thermodynamic functions are also studied for the diatomic molecules  $\text{CrH}$ ,  $\text{NiC}$  and  $\text{CuLi}$  because they vary with temperature and upper bound vibration quantum number.

**Keywords:** Schrödinger equation, Hulthén plus Yukawa-class potentials, Nikiforov–Uvarov method, energy spectrum, partition function, thermodynamic properties, diatomic molecules.

### ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОТЕНЦИАЛОВ ХЮЛЬТЕНА ПЛЮС

### КЛАССА ЮКАВА ДЛЯ НЕКОТОРЫХ ДВУХАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ

### РЕЗЮМЕ

В этой статье связанные состояния и термодинамические свойства исследуются для потенциала Хюльтена плюс класс Юкавы путем решения уравнения Шредингера. Мы используем развитую аппроксимацию Грина-Олдрича для преодоления проблемы, возникающей в центробежной части потенциала и применяем метод Никифорова-Уварова (НУ) для аналитического решения. С помощью энергетических спектров получены аналитические выражения термодинамических функций колебательной статистической суммы  $Z$ , энтропии  $S$ , свободной энергии Гельмгольца  $F$ , внутренней энергии  $U$  и удельной теплоемкости  $C$  с использованием формулы суммирования Пуассона. Эти термодинамические функции также изучаются для двухатомных молекул  $\text{CrH}$ ,  $\text{NiC}$  и  $\text{CuLi}$ , поскольку они меняются в зависимости от температуры и верхней границы колебательного квантового числа.

**Ключевые слова:** уравнение Шредингера, потенциалы Хюльтена плюс класс Юкавы, метод Никифорова–Уварова, энергетический спектр, статистическая сумма, термодинамические свойства, двухатомные молекулы.

### HÜLTEN VƏ YUKAVA SİNİF POTENSİALLARININ CƏMİNİN BƏZİ İKİ ATOMLU MOLEKULLAR ÜÇÜN TERMODİNAMİK XASSƏLƏRİ

### XÜLASƏ

İşdə Şredinger tənliyini Hultén üstə gəl Yukawa sinif potensiallarının cəmi üçün analitik şəkildə həll etməklə bağlı hallar və termodinamik xüsusiyyətlər öyrənilmişdir. Mərkəzdənqəçmə potensialında meydana çıxan sinqlularlılıq aradan qaldırmaq üçün Greene–Aldrich yaxınlaşmasından istifadə etməklə Nikiforov–Uvarov (NU) metodunu tətbiq edərək analitik formada həll edilmişdir. Enerji spektrinin analitik ifadəsindən və Puasson cəmləmə formulundan istifadə etməklə statistik cəm funksiyası  $Z$ , entropiya  $S$ , Helmholtz sərbəst enerjisi  $F$ , daxili enerji  $U$  və xüsusi istilik tutumu  $C$  termodinamik funksiyalarının analitik ifadələri tapılmışdır. Temperatur və

vibrasiya kvant ədədinin yuxarı sərhəddinin qiymətindən asılı olaraq dəyişən bu termodinamik funksiyalar iki atomlu CrH, NiC və CuLi molekulları üçün geniş şəkildə öyrənilmişdir.

**Açar sözlər:** Şredinger tənliyi, Hütlen üstəgəl Yukava sinif potensialları, Nikiforov–Uvarov metodu, enerji spektri, statistik cəm, termodinamik xassələr, iki atomlu molekullar.

## INTRODUCTION

Study of the analytical solution of wave equations in potential fields in relativistic and non-relativistic quantum mechanics always plays and will continue to play an important and possibly the main role in nuclear and elementary particle physics as well as in physics of atoms and molecules [1,2]. The physical properties of microobjects in potential physical models are described and interrelated using various wave equations, for example, the Schrödinger equations, Klein–Fock–Gordon equations, and the relativistic finite difference equations and the Dirac equations.

The analytical expression of the vibrational energy and partition functions are very the important values are basic requirements in statistical mechanics and thermodynamics. The partition function [3] can be evaluated by direct approach or by approximate methods, provided that the energy levels are known. The analytical solution of the Schrödinger equation give possibilities way for the calculation of the partition function  $Z$  followed by evaluation of other thermodynamic functions such as the entropy  $S$ , Helmholtz free energy  $F$ , internal energy  $U$ , and specific heat capacity  $C$ .

In the last few years, the study of thermodynamic properties has drawn a lot of attention from researchers [4-8]. In Ref. [9] investigated the thermodynamic properties with Hua potential. Using Poisson summation approach, the authors in Ref.[10], studied the thermodynamic properties of Deng-Fan-Eckart potential for some diatomic molecules. Bakhti et al. [11] evaluated the thermodynamic properties of  $O_2$  and  $H_2$  molecules with the multi-parameter exponential-type potential and obtained results identical with experimental reports. The thermodynamic properties of a hyperbolic Pöschl-Teller potential has been studied [12]. Chabi and Boumali [13] have evaluated the thermal properties of the Morse potential using the Euler MacLaurin method. The thermodynamic properties for modified Rosen-Morse potential have been reported [14]. In Refs. [15,16] Jia et al. discussed thermodynamic properties with the improved Manning-Rosen potential for a Lithium dimer and a sodium dimer with improved Rosen-Morse potential.

Presently lots a authors quite an effort is made for a better understanding of thermodynamic properties for quantum systems as diatomic molecules in molecular physics. Moreover, the importance of molecular vibration and rotational spectroscopy has extensive research fields for widely scientific areas [17]. Ikot and his collaborators [18] studied thermodynamic functions for exponential-type molecule potentials in D-dimensions. Also, Okorie et al. [19] calculated the thermodynamic functions for  $CO$ ,  $NO$ , and  $N_2$  with the modified Kratzer plus screen Coulomb potential using the modified factorization method. Recently, Ghanbari and Khordad [17] investigated thermodynamic properties for  $CO$  and  $N_2$  using pseudo harmonic and Mie-type potentials and many other efforts by several researchers [18-25]. In addition, Jia and collaborators successfully predicted the thermodynamic properties for some diatomic substances by employing suitable potential

models to represent the internal vibrations of diatomic molecules [26-30]. By employing the improved Tietz potential and Fu-Wang-Jia potential to represent the internal vibrations of triatomic molecules, some authors have successfully predicted the thermodynamic properties for some triatomic substances and the equilibrium constant for water gas shift reaction [31-35]. In Ref. [36], carried out a comprehensive study of the thermodynamic and thermomagnetic properties of the system for the new Morse interacting potential by using analytical solutions of the 2D Schrödinger equation. Recently, in Ref. [37] solved the Schrödinger equation with the linear combination of Hultén plus a class of Yukawa potential by using the Nikiforov–Uvarov (NU) method.

In this study our main goal is to obtain thermodynamics properties of few diatomic molecules by the solving Schrödinger equation with Hultén plus a class of Yukawa potential by using the Nikiforov–Uvarov (NU) method.

The rest of the present work is organized as follows. In section 1, solutions of the Schrödinger equation with the Hulthén potential plus Yukawa-class potentials are obtained for the bound state using improved approximation scheme obtained by the NU method. Thermodynamic properties and analytical computation of the thermodynamic values are presented in Section 2. Numerical evaluations and discussion are presented in section 3. Concluding comments on the work are presented in Section 4.

## 1. ANALYTICAL SOLUTION OF THE SCHRÖDINGER EQUATION WITH THE SUM OF THE HULTHÉN POTENTIAL AND THE YUKAWA-CLASS POTENTIAL

The Schrödinger equation for the particle with mass  $m$  in the spherical system of coordinates has the form [2]

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi(r, \theta, \varphi) + V(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi). \quad (1)$$

Taking into account this equation, the general wave function in the spherical system of coordinates is written as

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \frac{\chi(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (2)$$

Let us substitute function (2) into Eq. (1); then for the radial Schrödinger equation we obtain

$$\frac{d^2\chi(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ E - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - V(r) \right] \chi(r) = 0. \quad (3)$$

The Hulthén potential in the interaction system is widely used to describe continuous and bound states. This potential is used in different fields of physics, including atomic and nuclear physics, condensed state physics, elementary particle physics, and solid state physics. The Hulthén potential is defined as follows [38,39]:

$$V(r) = -\frac{Ze^2 \delta e^{-\delta r}}{1 - e^{-\delta r}}. \quad (4)$$

Here  $\delta$  - is the screening parameter parameter, and  $Z$  - is the atomic number in the Mendeleev table. The Hulthén potential is one of the important potentials in physics at small

distances. The potential was used in nuclear physics, elementary particle physics, atomic physics, and solid state physics. The general wave functions of this potential were used to solve problems of solid state physics and atomic physics. It should be noted that the radial Schrödinger equation for the Hulthén potential can be solved analytically only for the states with zero angular momentum  $l = 0$ . For small values of the radial coordinate  $r$ , the Hulthén potential behaves as the Coulomb potential, whereas for large  $r$  values, it decreases exponentially, so that its influence on the bound state is less than that of the Coulomb potential. This potential is also used to describe vibrations of a diatomic molecule and is a suitable model for other physical phenomena.

Our second potential, is the potential proposed by Yukawa [40] as the effective non-relativistic potential describing very well strong interactions of nucleons. The Yukawa potential decreases faster than  $1/r$  due to the presence of the exponential factor. The Yukawa-class potential can be represented in the form

$$V(r) = -\frac{V_0 e^{-\delta r}}{r} - \frac{V'_0 e^{-2\delta r}}{r^2}, \quad (5)$$

where  $V_0, V'_0$  - determine the potential depth. By summing the Hulthén potential and the Yukawa-class potential, we obtain the unique approximation for the Yukawa potential in the form [41]

$$\frac{1}{r} \approx \frac{2\delta e^{-\delta r}}{(1-e^{-2\delta r})}, \quad (6)$$

$$\frac{1}{r^2} \approx \frac{4\delta^2 e^{-2\delta r}}{(1-e^{-2\delta r})^2}. \quad (7)$$

Hence, it is possible to represent the sum of the Hulthén potential and Yukawa-class potential in the form

$$V(r) = -\frac{(A+B)e^{-2\delta r}}{1-e^{-2\delta r}} - \frac{De^{-4\delta r}}{(1-e^{-2\delta r})^2}, \quad (8)$$

where

$$A = 2Ze^2\delta, \quad B = 2\delta V_0, \quad D = 4\delta^2 V'_0 \quad (9)$$

A linear combination of these two potentials can be used to study interactions of the deformed pair of nuclei and spin-orbit coupling of the particle in a potential field. One more important property of this potential is its application for a description of oscillations within a hadron system. By investigating the Schrödinger equation with linear combination of the potentials, it is possible to estimate deeper and more exactly the physical properties of the wave functions and energies of the bound, discrete, and continuous states of interacting systems. Based on investigations in this direction, in this work we solve the radial Schrödinger equation with the linear combination of the Hulthén and Yukawa-class potentials. With these combined potentials, the examined quantum system can be studied at large distances. Substituting potential (8) into Eq. (3), for the radial Schrödinger equation we obtain

$$\frac{d^2\chi(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ E - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + \frac{(A+B)e^{-2\delta r}}{1-e^{-2\delta r}} + \frac{De^{-4\delta r}}{(1-e^{-2\delta r})^2} \right] \chi(r) = 0. \quad (10)$$

From Eq. (10) it follows that as  $r \rightarrow 0$  a singularity arises in the centripetal potential. This equation is solved exactly for  $l \neq 0$ . To solve the problem arising in the centripetal component of the Hulthén potential plus the Yukawa-class potential analytically for  $l \neq 0$ , we substitute Eq. (6) into Eq. (10) and obtain

$$\frac{d^2\chi(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ E - \frac{2\hbar^2\delta^2l(l+1)e^{-2\delta r}}{m(1-e^{-2\delta r})^2} + \frac{(A+B)e^{-2\delta r}}{1-e^{-2\delta r}} + \frac{De^{-4\delta r}}{(1-e^{-2\delta r})^2} \right] \chi(r) = 0. \quad (11)$$

From Eq. (11), we obtain the effective potential of the sum of the Hulthén potential and the Yukawa-class potential in the form:

$$V_{eff}(r) = \frac{4\delta^2l(l+1)e^{-2\delta r}}{m(1-e^{-2\delta r})^2} - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{(A+B)e^{-2\delta r}}{1-e^{-2\delta r}} - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{De^{-4\delta r}}{(1-e^{-2\delta r})^2}. \quad (12)$$

To solve Eq. (11) by the Nikiforov–Uvarov method, it should be transformed into the hypergeometric equation of the form [42]:

$$\chi''(s) + \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)} \chi'(s) + \frac{\tilde{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)} \chi(s) = 0. \quad (13)$$

To reduce Eq. (11) to hypergeometric equation (13), we must introduce a new

variable  $s = e^{-2\delta r}$  then we obtain

$$\frac{d^2\chi(s)}{ds^2} + \frac{1}{s} \frac{d\chi(s)}{ds} + \frac{1}{4\delta^2 s^2} \left[ \frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{4\delta^2l(l+1)s}{(1-s)^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{(A+B)s}{1-s} + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{Ds^2}{(1-s)^2} \right] \chi(s) = 0 \quad (14)$$

To rewrite the differential equation in a more compact form, in Eq. (14) we introduce new designations of the form

$$-\varepsilon^2 = \frac{mE}{2\hbar^2\delta^2}, \quad \alpha^2 = \frac{m(A+B)}{2\delta^2\hbar^2}, \quad \gamma^2 = \frac{mD}{2\delta^2\hbar^2}. \quad (15)$$

Using designations (15) in Eq. (14), we obtain

$$\chi''(s) + \frac{1-s}{(1-s)s} \chi'(s) + \frac{1}{(1-s)^2 s^2} \left[ -\varepsilon^2(1-s)^2 - l(l+1)s + \alpha^2 s(1-s) + \gamma^2 s^2 \right] \chi(s) = 0. \quad (16)$$

Now we can successfully use the Nikiforov–Uvarov method to solve Eq. (16). Comparing Eq. (16) to Eq. (13), we obtain for  $\tilde{\tau}(s)$ ,  $\sigma(s)$  and  $\tilde{\sigma}(s)$  as,

$$\sigma(s) = (1-s)s,$$

$$\tilde{\tau}(s) = 1-s,$$

$$\tilde{\sigma}(s) = -\varepsilon^2(1-s)^2 - l(l+1)s + \alpha^2 s(1-s) + \beta^2 s^2. \quad (17)$$

Using formulas (A4) and expression (17), we obtain for the function  $\pi(s)$  as,

$$\pi(s) = \frac{\sigma(s) - \tilde{\tau}(s)}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma'(s) - \tilde{\tau}'(s)}{2}\right)^2 - \tilde{\sigma}(s) + k\sigma(s)} = -\frac{s}{2} \pm \sqrt{(a-k)s^2 - (b-k)s + c}, \quad (18)$$

Here

$$a = \frac{1}{4} + \varepsilon^2 + \alpha^2 - \gamma^2,$$

$$b = 2\varepsilon^2 + \alpha^2 - l(l+1),$$

$$c = \varepsilon^2. \quad (19)$$

The parameter  $k$  can be found from expression (18) as follows. From the condition that the discriminant of the expression under the square root of Eq. (18) is equal to zero, we obtain:

$$(a-k)s^2 - (b-k)s + c = 0, \quad (20)$$

$$D = (b-k)^2 - 4(a-k)c = k^2 + (4c-2b)k + (b^2 - 4ac),$$

$$k^2 + (4c-2b)k + (b^2 - 4ac) = 0,$$

$$k_{1,2} = (b-2c) \pm 2\sqrt{c^2 + c(a-b)}. \quad (21)$$

Substituting expressions (21) into Eq. (18), we obtain for the function  $\pi(s)$ :

$$\pi(s) = -\frac{s}{2} \pm \begin{cases} (\sqrt{c} - \sqrt{c+a-b})s - \sqrt{c}, & \text{для } k = (b-2c) + 2\sqrt{c^2 + c(a-b)} \\ (\sqrt{c} + \sqrt{c+a-b})s - \sqrt{c}, & \text{для } k = (b-2c) - 2\sqrt{c^2 + c(a-b)} \end{cases} \quad (22)$$

As follows from expression (22), the NU method yields four values of the polynomial  $\pi(s)$ , but we choose the  $\pi(s)$  value for which the function  $\tau(s)$  has a negative derivative. Other values are not physical. Thus, the corresponding functions  $\pi(s)$  and  $\tau(s)$  have the form

$$\pi(s) = \sqrt{c} - s \left[ \frac{1}{2} + \sqrt{c} + \sqrt{c+a-b} \right], \quad (23)$$

$$\pi'(s) = -\frac{1}{2} - \left[ \sqrt{c} + \sqrt{c+a-b} \right], \quad (24)$$

$$k = (b-2c) - 2\sqrt{c^2 + c(a-b)}, \quad (25)$$

$$\tau(s) = \tilde{\tau}(s) + 2\pi(s) = (1-s) + 2\pi(s) = 1 - \left[ 2 + 2\sqrt{c} + \sqrt{c+a-b} \right]s + 2\sqrt{c},$$

$$\tau'(s) = -\left[ 2 + 2(\sqrt{c} + \sqrt{c+a-b}) \right]. \quad (26)$$

The energy eigenvalues are conventionally determined from the expressions given below:

$$\lambda = k + \pi'(s) \quad (27)$$

$$\lambda_n = -n\tau'(s) - \frac{n(n-1)}{2}\sigma''(s) \quad (28)$$

By substituting expressions (24) and (25) into Eq. (27), we obtain for  $\lambda$ :

$$\lambda = (b-2c) - 2\sqrt{c^2 + c(a+b)} - \frac{1}{2} - (\sqrt{c} + \sqrt{c+a-b}) \quad (29)$$

On the other hand,  $\lambda_n$  is determined as follows:

$$\lambda_n = -n\tau'(s) - \frac{n(n-1)}{2}\sigma''(s) = n(2 + 2\sqrt{c} + 2\sqrt{c+a-b}) + n(n-1) \quad (30)$$

The left sides of Eqs. (29) and (30) are equal and hence, equating the right sides of these expressions, we obtain

$$(b-2c) - 2\sqrt{c^2 + c(a-b)} - \frac{1}{2} - (\sqrt{c} + \sqrt{c+a-b}) = n(n-1) + 2n(1 + \sqrt{c} + \sqrt{c+a-b}) \quad (31)$$

Solving Eqs. (31) for  $\sqrt{c}$  we obtain that the energy eigenvalues are determined by the analytical expression of the form

$$\sqrt{c} = \frac{b-2c - \frac{1}{2} - (2n+1)\sqrt{c+a-b} - n(n+1)}{1 + 2n + 2\sqrt{c+a-b}} \quad (32)$$

Here

$$b-2c = \alpha^2 - l(l+1)$$

$$\sqrt{c+a-b} = \sqrt{\frac{1}{4} + l(l+1) - \gamma^2} \quad (33)$$

Taking into account expression (33), from formula (32) we obtain

$$\sqrt{c} = \frac{\alpha^2 - l(l+1) - \frac{1}{2} - (2n+1)\sqrt{\frac{1}{4} + l(l+1) - \gamma^2} - n(n+1)}{1 + 2n + 2\sqrt{\frac{1}{4} - \gamma^2 + l(l+1)}} \quad (34)$$

Taking into account expression (15), from formula (34) we obtain the following analytical expression for the energy spectrum:

$$E_{nl} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\alpha^2 - l(l+1) - \frac{1}{2} - (2n+1)\sqrt{\frac{1}{4} + l(l+1) - \gamma^2} - n(n+1)}{\frac{1}{2} + n + \sqrt{\frac{1}{4} + l(l+1) - \gamma^2}} \cdot \delta \right]^2 \quad (35)$$

To determine the radial function of the particle moving in the field with the Hulthén potential plus the Yukawa-class potential, we factorize the radial function  $\chi(s)$  in the form

$$\chi(s) = \phi(s)y(s). \quad (36)$$

Using the NU method, we find the function  $\phi(s)$  from the condition Eq.(A8):

$$\frac{\phi'(s)}{\phi(s)} = \frac{\pi(s)}{\sigma(s)}. \quad (37)$$

Solving Eq. (37), we obtain for the function  $\phi(s)$ :

$$\phi(s) = s^\varepsilon (1-s)^{\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + l(l+1) - \beta^2}}. \quad (38)$$

The function  $y_n(s)$  is determined from the Rodrigues formula

$$y_n(s) = \frac{C_n}{\rho(s)} \frac{d^n}{ds^n} [\sigma^n(s) \rho(s)]. \quad (39)$$

Here  $C_n$ - is normalization constant, and  $\rho(s)$ - is the weight function obtained by solving the Pearson equation in the form

$$\frac{d}{ds} (\sigma(s) \rho(s)) = \tau(s) \rho(s). \quad (40)$$

Solving Eq. (40) for  $\rho(s)$ , we obtain

$$\rho(s) = s^{2\varepsilon} (1-s)^{\frac{2}{4} + l(l+1) - \beta^2}. \quad (41)$$

Substituting the weight function  $\rho(s)$  into Eq. (39), we obtain for the function  $y_n(s)$ :

$$y_n(s) = \frac{C_n}{s^{2\varepsilon} (1-s)^{\frac{2}{4} + l(l+1) - \beta^2}} \frac{d^n}{ds^n} \left[ s^{n+2\varepsilon} (1-s)^{n+2\sqrt{\frac{1}{4} + l(l+1) - \beta^2}} \right]. \quad (42)$$

Taking into account that

$$\frac{d^n}{ds^n} \left[ s^{n+2\varepsilon} (1-s)^{n+2\sqrt{\frac{1}{4} + l(l+1) - \beta^2}} \right] = n! s^{2\varepsilon} (1-s)^{\frac{2}{4} + l(l+1) - \beta^2} P_n^{(2\varepsilon, 2\sqrt{\frac{1}{4} + l(l+1) - \beta^2})}(1-2s), \quad (43)$$

we obtain for the function  $y_n(s)$ :

$$y_n(s) = C_n P_n^{(2\varepsilon, 2\sqrt{\frac{1}{4} + l(l+1) - \beta^2})}(1-2s). \quad (44)$$

Substituting expressions (38) and (44) into expression (36) for the radial wave function  $\chi(s)$ , we obtain:

$$\chi_n(s) = C_n s^\varepsilon (1-s)^K P_n^{(2\varepsilon, 2K-1)}(1-2s). \quad (45)$$

Using the properties of the Jacobi polynomials, we express the radial wave function  $\chi(s)$  in terms of the hypergeometric function. From here we obtain [43]:

$$P_n^{(p,q)}(s) = \frac{(-1)^n}{n! 2^n (1-s)^p (1+s)^q} \frac{d^n}{ds^n} [(1-s)^{p+n} (1+s)^{q+n}], \quad (46)$$

$$P_n^{(p,q)}(1-2s) = \frac{(-1)^n}{n! 2^n s^p (1-s)^q} \frac{d^n}{ds^n} [s^{p+n} (1-s)^{q+n}], \quad (47)$$

$$\frac{d^n}{ds^n} [s^{p+n} (1-s)^{q+n}] = n! s^p (1-s)^q P_n^{(p,q)}(1-2s) \quad (48)$$

$$P_n^{(p,q)}(s) = \frac{\Gamma(n+p+1)}{n!\Gamma(p+1)} {}_2F_1(-n, p+q+n+1, p+1; \frac{1}{2}(1-s)). \quad (49)$$

Then for the function  $\chi_n(s)$  we obtain the expression in the compact form:

$$\chi_n(s) = C_n s^\varepsilon (1-s)^K \frac{\Gamma(n+2\varepsilon+1)}{n!\Gamma(2\varepsilon+1)} {}_2F_1(-n, 2\varepsilon+2K+n, 1+2\varepsilon; s). \quad (50)$$

In our case,

$$p = 2\varepsilon, q = 2K - 1.$$

The normalization constant  $C_n$  -is determined from the normalization condition:

$$\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 dr = \int_0^\infty |\chi(r)|^2 dr = \frac{1}{2\delta} \int_0^1 \frac{1}{s} |\chi(s)|^2 ds = 1, \quad (51)$$

And we obtain

$$C_n = \sqrt{\frac{2\delta n!(n+K+\varepsilon)\Gamma(2\varepsilon+2K+n)\Gamma(2\varepsilon+1)}{(n+K)\Gamma(n+2K)\Gamma(2\varepsilon)\Gamma(n+2\varepsilon+1)}}, \quad (52)$$

$$\text{where } K = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + l(l+1) - \gamma^2}.$$

## 2. THERMODYNAMIC PROPERTIES AND ANALYTICAL COMPUTATION OF THE THERMODYNAMICS FUNCTIONS

In this section, we present the thermodynamic properties for the combined new potential model. Must be noted that the vibrational partition function is the beginning point to determine any thermal functions of a system [3].

The vibrational partition function can be calculated with the aid of direct summation over all possible vibrational energy levels at a given temperature  $T$  which defined as

$$Z(\beta, \lambda) = \sum_{n=0}^{n_{\max}} e^{-\beta E_{nl}}, \quad \beta = \frac{1}{k_B T}, \quad (53)$$

where  $k_B$  is the Boltzmann's constant,  $n_{\max}$  is the upper bound quantum number,  $E_{nl}$  - is the ro-vibrational energy eigenvalues of the linear sum Hulthén's and a class of Yukawa potentials.

First, we simplify Eq (35) to have

$$E_n = -p \left[ \frac{Q}{n+\nu} - (n+\nu) \right]^2, \quad (54)$$

$$\text{where } p = \frac{\hbar^2 \delta^2}{2m}, \quad Q = \alpha^2 - \gamma^2, \quad \nu = \sqrt{\left( l + \frac{1}{2} \right)^2 - \gamma^2} > 0, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots, [\sqrt{Q} - \nu],$$

$$n_{\max} = [\sqrt{Q} - \nu] \equiv \lambda.$$

Substituting Eq (54) into Eq (53) gives

$$Z(\beta, \lambda) = \sum_{n=0}^{n_{\max}} \exp \left\{ -\beta \left[ -p \left( \frac{Q}{n+\nu} - (n+\nu) \right)^2 \right] \right\} = \sum_{n=0}^{\lambda} e^{\beta p \left[ \frac{Q}{n+\nu} - (n+\nu) \right]^2}. \quad (55)$$

In evaluating Eq (55), we employ the Poisson summation formula for lower order approximation as [44]

$$\sum_{n=0}^{n_{\max}} f(n) = \frac{1}{2} [f(0) - f(n_{\max}+1)] + \int_0^{n_{\max}+1} f(x) dx. \quad (56)$$

By using Eq (56) on Eq (55), the partition function is obtained as follows

$$Z(\beta, \lambda) = \frac{1}{2} \left[ e^{\beta p g_1^2} - e^{\beta p g_2^2} \right] + \int_0^{\lambda+1} e^{\beta p \left[ \frac{Q}{x+\nu} - (x+\nu) \right]^2} dx, \quad (57)$$

where  $g_1 = \frac{Q}{\nu} - \nu$ ;  $g_2 = \frac{Q}{\lambda+\nu+1} - (\lambda+\nu+1)$ . Then for integral in Eq.(54) we obtain:

$$\int_0^{\lambda+1} f(x) dx = \int_0^{\lambda+1} e^{\beta p \left( \frac{Q}{x+\nu} - (x+\nu) \right)^2} dx. \quad (58)$$

Here we introduce a new variable  $y = \frac{Q}{x+\nu} - (x+\nu)$ , then for variable  $x$  we obtain:

$$(x+\nu)^2 + y(x+\nu) - Q = 0,$$

$$x+\nu = \frac{-y \pm \sqrt{y^2 + Q}}{2} \text{ or } x = \frac{-y \pm \sqrt{y^2 + Q}}{2} - \nu. \text{ Where } x \geq 0, \text{ then } x = \frac{-y + \sqrt{y^2 + Q}}{2} - \nu.$$

So, in the new variable for integral (58) we obtain:

$$\begin{aligned} \int_0^{\lambda+1} f(x) dx &= \int_0^{\lambda+1} e^{\beta p \left( \frac{Q}{x+\nu} - (x+\nu) \right)^2} dx = \frac{1}{2} \int_{g_1}^{g_2} e^{\beta p y^2} \left( \frac{y}{\sqrt{y^2 + Q}} - 1 \right) dy = \\ &= -\frac{1}{2} \int_{g_1}^{g_2} e^{\beta p y^2} dy + \frac{1}{2} \int_{g_1}^{g_2} \frac{y e^{\beta p y^2} dy}{\sqrt{y^2 + Q}} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\beta p}} \left\{ \operatorname{erfi}(\sqrt{\beta p(g^2 + Q)}) - \operatorname{erfi}(\sqrt{\beta p} \cdot g_2) - \right. \\ &\quad \left. - \operatorname{erfi}(\sqrt{\beta p(g_1^2 + Q)}) + \operatorname{erfi}(\sqrt{\beta p} \cdot g_1) \right\}. \quad (59) \end{aligned}$$

The detail of this calculations are

$$\begin{aligned} I_1 = \int_{g_1}^{g_2} e^{\beta p y^2} dy &= \left\{ \begin{array}{l} \varepsilon = \sqrt{\beta p} y \\ dy = \frac{1}{\sqrt{\beta p}} d\tau \end{array} \right\} = \frac{1}{\sqrt{\beta p}} \int_{\sqrt{\beta p} g_1}^{\sqrt{\beta p} g_2} e^{\tau^2} d\tau = \frac{1}{\sqrt{\beta p}} \left\{ \int_0^0 e^{\tau^2} d\tau + \int_0^{\sqrt{\beta p} g_2} e^{\tau^2} d\tau \right\} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\beta p}} \left\{ \int_0^{\sqrt{\beta p} g_2} e^{\tau^2} d\tau - \int_0^{\sqrt{\beta p} g_1} e^{\tau^2} d\tau \right\} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\beta p}} \left[ \operatorname{erfi}(\sqrt{\beta p} \cdot g_2) - \operatorname{erfi}(\sqrt{\beta p} \cdot g_1) \right]. \quad (60) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 I_2 &= \int_{g_1}^{g_2} \frac{ye^{\beta py^2} dy}{\sqrt{y^2 + Q}} = \int_{g_1}^{g_2} e^{\beta py^2} d(\sqrt{y^2 + Q}) = \left\{ \begin{array}{l} \tau = \sqrt{\beta p(y^2 + Q)} \\ d\tau = d(\sqrt{\beta p(y^2 + Q)}) \\ d(\sqrt{y^2 + Q}) = \frac{dy}{\sqrt{\beta p}} \end{array} \right\} = \\
 &= \frac{1}{\sqrt{\beta p}} \left( \int_{\sqrt{\beta p(g_1^2 + Q)}}^{\sqrt{\beta p(g_2^2 + Q)}} e^{\tau^2} d\tau - \int_0^{\sqrt{\beta p(g_1^2 + Q)}} e^{\tau^2} d\tau \right) = \\
 &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\beta p}} \left[ \operatorname{erfi}(\sqrt{\beta p(g_2^2 + Q)}) - \operatorname{erfi}(\sqrt{\beta p(g_1^2 + Q)}) \right]
 \end{aligned} \tag{61}$$

where  $\operatorname{erfi}(u)$  -is called the imaginary error function and is defined as

$$\operatorname{erfi}(u) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^u e^{-\tau^2} d\tau. \tag{62}$$

Thus, for partition function  $Z(\beta, \lambda)$  we obtain:

$$\begin{aligned}
 Z(\beta, \lambda) &= \frac{1}{2} \left[ e^{\beta pg_1^2} - e^{\beta pg_2^2} \right] + \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\beta p}} \left\{ \operatorname{erfi}(\sqrt{\beta p(g_2^2 + Q)}) - \right. \\
 &\quad \left. - \operatorname{erfi}(\sqrt{\beta p} \cdot g_2) - \operatorname{erfi}(\sqrt{\beta p(g_1^2 + Q)} + \operatorname{erfi}(\sqrt{\beta p} \cdot g_1)) \right\}
 \end{aligned} \tag{63}$$

Note that, the derivate of the imaginary error function is

$$\frac{d}{du} \operatorname{erfi}(u) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-u^2} \tag{64}$$

With the help of the vibrational partition function of Eq (63), the other thermodynamic functions of the considering potential can be obtained in the following form.

For vibrational internal energy we obtain

$$\begin{aligned}
 U(\beta, \lambda) &= -\frac{\partial}{\partial \beta} (\ln Z(\beta, \lambda)) = -\frac{1}{Z(\beta, \lambda)} \frac{\partial Z(\beta, \lambda)}{\partial \beta} = \\
 &= -\frac{1}{Z(\beta, \lambda)} \left\{ \frac{p}{2} (g_1^2 e^{\beta pg_1^2} - g_2^2 e^{\beta pg_2^2}) + \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\beta p}} \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{2} \sqrt{\frac{p}{\beta}} \cdot \right. \\
 &\quad \left[ \sqrt{g_2^2 + Q} e^{\beta p(g_2^2 + Q)} - g_2 e^{\beta pg_2^2} - \sqrt{g_1^2 + Q} e^{\beta p(g_1^2 + Q)} + g_1 e^{\beta pg_1^2} \right] - \\
 &\quad - \frac{1}{8} \cdot \frac{1}{\beta} \sqrt{\frac{\pi}{\beta p}} \left[ \operatorname{erfi}(\sqrt{\beta p(g_2^2 + Q)}) - \operatorname{erfi}(\sqrt{\beta p} \cdot g_2) - \operatorname{erfi}(\sqrt{\beta p(g_1^2 + Q)}) + \operatorname{erfi}(\sqrt{\beta p} \cdot g_1) \right] = \\
 &= -\frac{1}{Z(\beta, \lambda)} \left\{ \frac{p}{2} \left( g_1^2 e^{\beta pg_1^2} - g_2^2 e^{\beta pg_2^2} \right) + \frac{1}{4\beta} \left[ \sqrt{g_2^2 + Q} e^{\beta p(g_2^2 + Q)} - g_2 e^{\beta pg_2^2} - \right. \right. \\
 &\quad \left. - \sqrt{g_1^2 + Q} e^{\beta p(g_1^2 + Q)} + g_1 e^{\beta pg_1^2} \right] - \frac{1}{8\pi} \sqrt{\frac{\pi}{\beta p}} \left[ \operatorname{erfi}(\sqrt{\beta p(g_2^2 + Q)}) - \operatorname{erfi}(\sqrt{\beta p} \cdot g_2) - \right. \\
 &\quad \left. \left. - \operatorname{erfi}(\sqrt{\beta p(g_1^2 + Q)}) + \operatorname{erfi}(\sqrt{\beta p} \cdot g_1) \right] \right\}
 \end{aligned} \tag{65}$$

The vibrational free energy defined in this form:

$$F(\beta, \lambda) = -\frac{1}{\beta} \ln Z(\beta, \lambda) \tag{66}$$

For vibrational entropy we obtain:

$$\begin{aligned}
S(\beta, \lambda) = k_B \ln Z(\beta, \lambda) - k_B \beta \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z(\beta, \lambda) &= k_B \ln Z(\beta, \lambda) - \\
- k_B \beta \cdot \frac{1}{Z(\beta, \lambda)} \left\{ \frac{p}{2} (g_1^2 e^{\beta p g_1^2} - g_2^2 e^{\beta p g_2^2}) + \frac{1}{4\beta} \left[ \sqrt{g_2^2 + Q} e^{\beta p(g_2^2 + Q)} - \right. \right. \\
- g_2 e^{\beta p g_2^2} - \sqrt{g_1^2 + Q} e^{\beta p(g_1^2 + Q)} + g_1 e^{\beta p g_1^2} \left. \right] - \\
- \frac{1}{8\beta} \sqrt{\frac{\pi}{\beta p}} \left[ \operatorname{erf}(\sqrt{\beta \pi(g_2^2 + Q)}) - \operatorname{erf}(\sqrt{\beta p} g_2) - \operatorname{erf}(\sqrt{\beta p(g_1^2 + Q)} + \operatorname{erf}(\sqrt{\beta p} g_1)) \right] \left\} \quad (67)
\end{aligned}$$

Vibrational specific heat capacity defined in this form:

$$\begin{aligned}
C(\beta, \lambda) = k_B \beta^2 \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \ln Z(\beta, \lambda) &= \\
= k_B \beta^2 \frac{\partial}{\partial \beta} \left\{ \frac{1}{Z(\beta, \lambda)} \left[ \frac{p}{2} (g_1^2 e^{\beta p g_1^2} - g_2^2 e^{\beta p g_2^2}) + \frac{1}{4\beta} (\sqrt{g_2^2 + Q} e^{\beta p(g_2^2 + Q)} - g_2 e^{\beta p g_2^2} - \sqrt{g_1^2 + Q} e^{\beta p(g_1^2 + Q)} \right. \right. \\
+ g_1 e^{\beta p g_1^2}) - \frac{1}{8\beta} \sqrt{\frac{\pi}{\beta p}} \left[ \operatorname{erf}(\sqrt{\beta p(g_2^2 + Q)}) - \operatorname{erf}(\sqrt{\beta p} \cdot g_2) - \operatorname{erf}(\sqrt{\beta p(g_1^2 + Q)}) + \operatorname{erf}(\sqrt{\beta p} \cdot g_1) \right] \left\} \right\} = \\
= k_B \beta^2 \left\{ - \frac{1}{Z^2(\beta, \lambda)} \left[ \frac{p}{2} (g_1^2 e^{\beta p g_1^2} - g_2^2 e^{\beta p g_2^2}) + \frac{1}{4\beta} \left( \sqrt{g_2^2 + Q} e^{\beta p(g_2^2 + Q)} - g_2 e^{\beta p g_2^2} - \sqrt{g_1^2 + Q} e^{\beta p(g_1^2 + Q)} + g_1 e^{\beta p g_1^2} \right) - \right. \right. \\
- \frac{1}{8\beta} \sqrt{\frac{\pi}{\beta p}} \left( \operatorname{erf}(\sqrt{\beta p(g_2^2 + Q)}) - \operatorname{erf}(\sqrt{\beta p} g_2) - \operatorname{erf}(\sqrt{\beta p(g_1^2 + Q)}) + \operatorname{erf}(\sqrt{\beta p} g_1) \right)^2 + \\
+ \frac{1}{Z(\beta, \lambda)} \left[ \frac{p^2}{4} (g_1^4 e^{\beta p g_1^2} - g_2^4 e^{\beta p g_2^2}) - \frac{1}{4\beta^2} \left( \sqrt{g_2^2 + Q} e^{\beta p(g_2^2 + Q)} - g_2 e^{\beta p g_2^2} - \sqrt{g_1^2 + Q} e^{\beta p(g_1^2 + Q)} + g_1 e^{\beta p g_1^2} \right) + \right. \\
\frac{1}{4\beta} \left( p \sqrt{(g_2^2 + Q)^3} e^{\beta p(g_2^2 + Q)} - p g_2^3 e^{\beta p g_2^2} - p \sqrt{(g_1^2 + Q)^3} e^{\beta p(g_1^2 + Q)} + p g_1^3 e^{\beta p g_1^2} \right) + \\
+ \frac{3}{16\beta^2} \sqrt{\frac{\pi}{\beta p}} \left( \operatorname{erf}(\sqrt{\beta p(g_2^2 + Q)}) - \operatorname{erf}(\sqrt{\beta p} g_2) - \operatorname{erf}(\sqrt{\beta p(g_1^2 + Q)}) + \operatorname{erf}(\sqrt{\beta p} g_1) \right) - \\
\frac{1}{8\beta} \sqrt{\frac{\pi}{\beta p}} \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{2} \sqrt{\frac{p}{\beta}} \left( \sqrt{g_2^2 + Q} e^{\beta p(g_2^2 + Q)} - g_2 e^{\beta p g_2^2} - \sqrt{g_1^2 + Q} e^{\beta p(g_1^2 + Q)} + g_1 e^{\beta p g_1^2} \right) \left\] \right\} = \\
= k_B \beta^2 \left\{ - \frac{1}{Z^2(\beta, \lambda)} \left[ \frac{p}{2} (g_1^2 e^{\beta p g_1^2} - g_2^2 e^{\beta p g_2^2}) + \frac{1}{4\beta} \left( \sqrt{g_2^2 + Q} e^{\beta p(g_2^2 + Q)} - g_2 e^{\beta p g_2^2} - \sqrt{g_1^2 + Q} e^{\beta p(g_1^2 + Q)} + \right. \right. \\
+ g_1 e^{\beta p g_1^2}) - \frac{1}{8\beta} \sqrt{\frac{\pi}{\beta p}} \left( \operatorname{erf}(\sqrt{\beta p(g_2^2 + Q)}) - \operatorname{erf}(\sqrt{\beta p} g_2) - \operatorname{erf}(\sqrt{\beta p(g_1^2 + Q)}) + \operatorname{erf}(\sqrt{\beta p} g_1) \right)^2 + \\
+ \frac{1}{Z(\beta, \lambda)} \left[ \frac{p^2}{4} (g_1^4 e^{\beta p g_1^2} - g_2^4 e^{\beta p g_2^2}) - \frac{3}{8\beta^2} \left( \sqrt{g_2^2 + Q} e^{\beta p(g_2^2 + Q)} - g_2 e^{\beta p g_2^2} - \sqrt{g_1^2 + Q} e^{\beta p(g_1^2 + Q)} + g_1 e^{\beta p g_1^2} \right) + \right. \quad (68) \\
+ \frac{p}{4\beta} \left( \sqrt{(g_2^2 + Q)^3} e^{\beta p(g_2^2 + Q)} - g_2^3 e^{\beta p g_2^2} - \sqrt{(g_1^2 + Q)^3} e^{\beta p(g_1^2 + Q)} + g_1^3 e^{\beta p g_1^2} \right) + \\
+ \frac{3}{16\beta^2} \sqrt{\frac{\pi}{\beta p}} \left( \operatorname{erf}(\sqrt{\beta p(g_2^2 + Q)}) - \operatorname{erf}(\sqrt{\beta p} g_2) - \operatorname{erf}(\sqrt{\beta p(g_1^2 + Q)}) + \operatorname{erf}(\sqrt{\beta p} g_1) \right) \left\] \right\}.
\end{aligned}$$

### 3. NUMERICAL EVALUATIONS AND DISCUSSION

In the present study, the focus is on analytical solving the Schrödinger equation for the Hulthen plus a class of Yukawa potential within the framework of the Nikiforov-Uvarov

method and by using analytical expression of the energy spectrum for widely studying thermodynamic properties of the few diatomic molecules.

The analytical solution of the Schrödinger equation give possibilities way for the calculation of the partition function  $Z$  followed by evaluation of other thermodynamic functions such as the entropy  $S$ , Helmholtz free energy  $F$ , internal energy  $U$ , and specific heat capacity  $C$ . In the present investigation, we use the energy spectrum to study for the thermodynamics properties of three selected diatomic molecules,  $\text{CrH}$ ,  $\text{NiC}$  and  $\text{CuLi}$ . The spectroscopic parameters of these molecules are given in Table 1 and taken from Ref. [45].

It should be noted that in numerical calculations here that the following conversion factors have been employed:  $\hbar c = 1973.296 \text{ eV} \text{ } \overset{0}{\text{\AA}}$ ,  $1\text{amu} = 931.494028 \text{ MeV}/c^2$ ,  $k = 8.61733262 \cdot 10^{-5} \text{ eV}/K$  and  $1\text{cm}^{-1} = 1.239841875 \cdot 10^{-4} \text{ eV}$  for all computations [46]. In the calculation, we set  $A = 2\text{cm}^{-1}$ ,  $B = 2\text{cm}^{-1}$  and  $D = 1\text{cm}^{-1}$ . Also in all numerical calculations we adopt the orbital quantum number  $l = 0$ . Obtained results of the thermodynamic properties are visualized through in Figs1-5. In Fig.1 present the dependence partition function  $Z(\beta)$  of the  $\beta = 1/kT$  for three selected  $\text{CrH}$ ,  $\text{NiC}$  and  $\text{CuLi}$  diatomic molecules. As is seen that the partition function  $Z$  in the region  $0.0001 K^{-1} \leq \beta \leq 0.0007 K^{-1}$  is slowly increasing with an increase in the  $\beta = 1/kT$ .

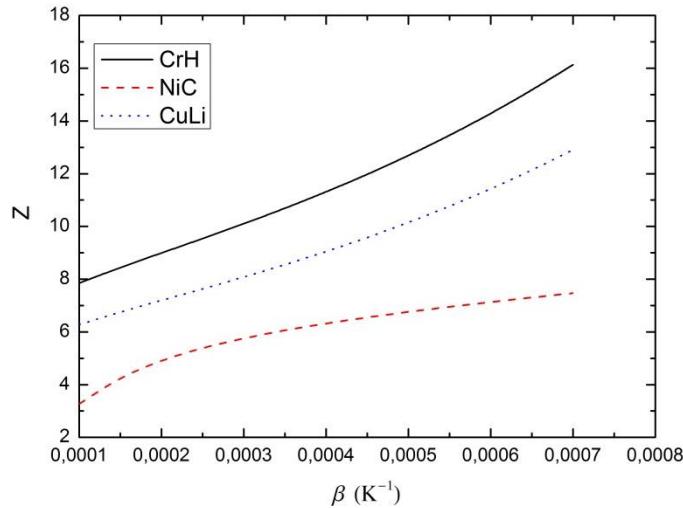


Fig.1. Vibrational partition function  $Z$  versus  $\beta(K^{-1})$  for  $\text{CrH}$ ,  $\text{NiC}$  and  $\text{CuLi}$  diatomic molecules.

In Fig.2, we have displayed the vibrational mean energy  $U$  with the dependence of the  $\beta = 1/kT$  for various diatomic molecules. As is seen that the vibrational mean energy  $U$  for  $\text{CrH}$ ,  $\text{NiC}$  and  $\text{CuLi}$  diatomic molecules have same behavior. Vibrational mean energy for all three molecules with increasing  $\beta = 1/kT$  are slowly decrease slowly and smoothly when with increasing  $\beta = 1/kT$ , but from the point  $\beta = 0.008$  more quickly decrease. For molecules  $\text{CrH}$  and  $\text{CuLi}$  vibrational mean energy  $U$  is slowly increasing with an increase in the  $\beta = 1/kT$ .

In Fig.3 the dependence of the Helmholtz free energy  $F$  is displayed for the  $\text{CrH}$ ,  $\text{NiC}$  and  $\text{CuLi}$  diatomic molecules as a function of  $\beta = 1/kT$ . It is seen from Fig.3 Helmholtz free energy  $F$  are monotonically decreasing with an increase in the  $\beta = 1/kT$ .

In Fig.4 present the dependence vibrational entropy as a function of the  $\beta=1/kT$ . It should be noted that for, NiC and CuLi diatomic molecules vibrational entropy have same behavior, monotonically decreasing with an increase in the  $\beta=1/kT$ . But, for molecule CrH vibrational entropy is slowly decreasing with an increase in the  $\beta=1/kT$ .

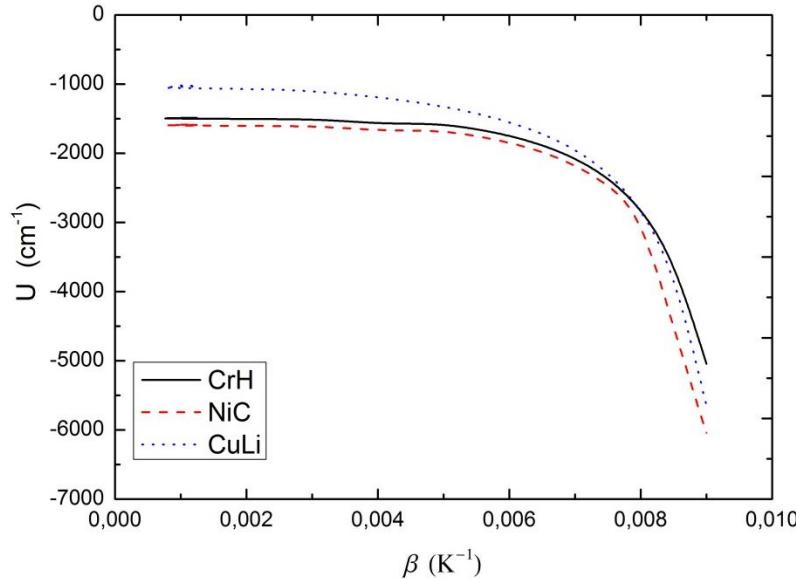


Fig.2. Vibrational mean energy  $U$  versus  $\beta(K^{-1})$  for CrH, NiC and CuLi diatomic molecules.

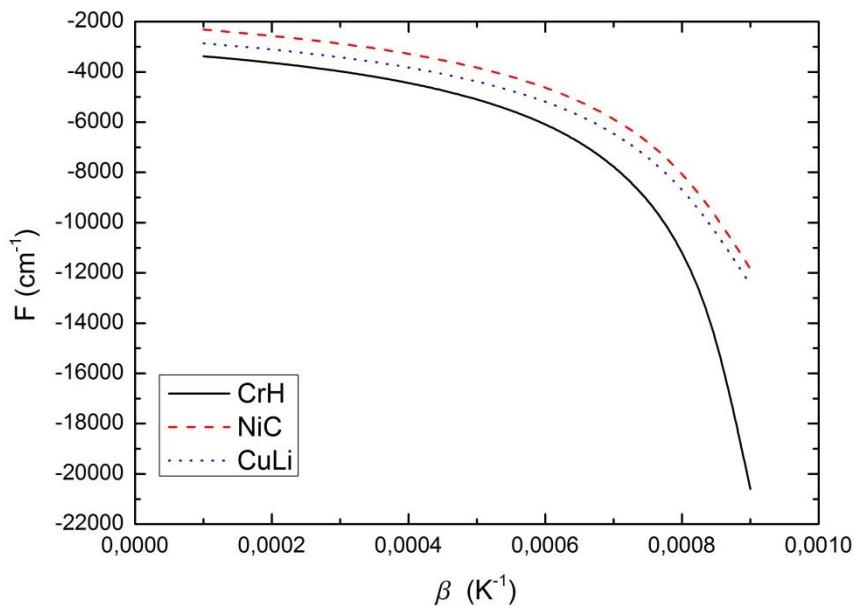


Fig.3. Vibrational free energy  $F$  versus  $\beta(K^{-1})$  for CrH, NiC and CuLi diatomic molecules.

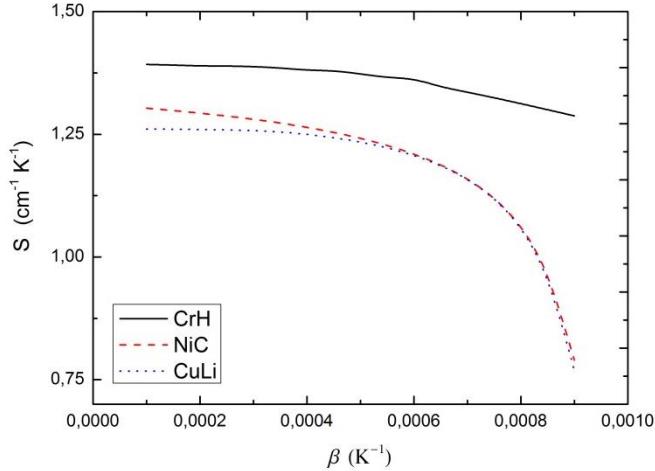


Fig.4. Vibrational entropy  $S$  versus  $\beta(K^{-1})$  for CrH, NiC and CuLi diatomic molecules.

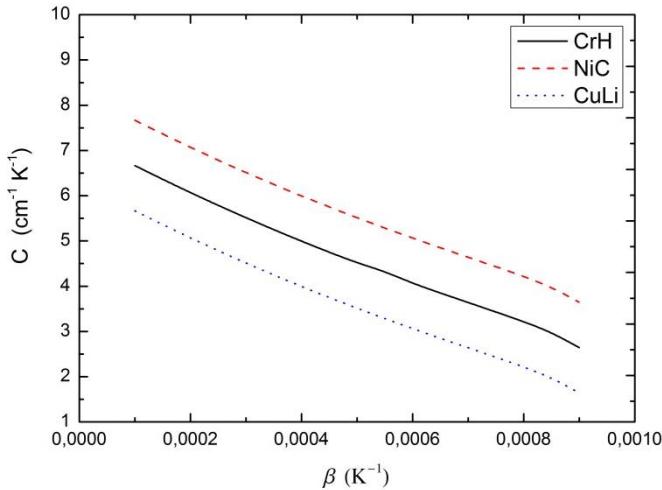


Fig.5. Vibrational specific heat capacity  $C$  versus  $\beta(K^{-1})$  for CrH, NiC and CuLi diatomic molecules.

Finally in Fig.5 we have displayed the vibrational specific heat capacity  $C$  as a function of the  $\beta = 1/kT$ . As is seen from figure specific heat capacity for all three molecules monotonically decreasing with an increase in the  $\beta = 1/kT$ .

#### 4. Conclusion

In this work, the modified Schrödinger equation has been solved with the Hulthén potential plus the Yukawa-class potential by using an appropriate approximation by applying the Nikiforov–Uvarov method within the framework of conventional quantum mechanics.

The analytical expressions of the ro-vibrational energy spectra and the corresponding normalized eigenfunction have been obtained. Using the ro-vibrational energy spectra of the Hulthén potential plus the Yukawa-class potential, the vibrational partition function and other thermodynamic functions like vibrational free energy, vibrational mean energy, vibrational entropy and vibrational specific heat capacity have been deduced using the Poisson summation formula. With these results, the thermodynamic properties of CrH, NiC

and CuLi diatomic molecules have been studied graphically and discussed extensively, as it varies with temperature and upper bound vibration quantum number. It should be note that our new suggested combined potential have more general applications, because this combined potential can be reduced to the few potential model.

Therefore, obtaining results can contribute to important information about the dynamics in atomic and molecular physics and provides an opportunity for a deeper study of this problem. Thus, we can conclude that the results obtained by us will be of interest not only to a theoretical physicist, but also to an experimental physicist, due to accurate and more general results.

Table 1. Spectroscopic constants of the diatomic molecules studied in the present work.

Molecules	$\delta^0 A^{-1}$	$\mu(\text{amu})$
CrH	1.52179	0.988976
NiC	2.25297	9.974265
CuLi	1.00818	6.259494

## REFERENCES

1. Bagrov V. G. and. Gitman D. M , Exact Solutions of Relativistic Wave Equations, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht; Boston, 1990
2. Landau L.D. and Lifshits E.M., Quantum Mechanics. Non-Relativistic Theory, Nauka, Moscow, 2006
3. Strekalov, M. L, An accurate closed-form expression for the partition function of Morse Oscillators, Chem. Phys. Lett. **439**, p.209-212, 2007
4. Hassanabadi, H., Sargolzaeipor, S., Yazarloo, B.H. Thermodynamic properties of the three dimensional Dirac oscillator with Aharonov–Bohm field and magnetic monopole potential. Few- Body Syst. **56**, p.115-124, 2015
5. Okorie, U.S., Ikot, A.N., Onyeaju, M.C., Chukwuocha, E.O. A study of thermodynamic properties of quadratic exponential-type potential in D-dimensions, Rev. Mex. Fis. **64**, p.608-614, 2018
6. Ebomwonyi, O., Onate, C.A., Ekong, S.A., Onyeaju, M.C. Thermodynamic properties for the carbon monoxide molecule under the Influence of the Coulomb- Hulthén-Pöschl-Teller potential. J. Sci. Technol. Res. **1**, 122-136 (2019).
7. Okorie, U.S., Ikot, A.N., Onyeaju, M.C., Chukwuocha, E.O., Bound state solutions of Schrödinger equation with modified Möbius square potential (MMSP) and its thermodynamic properties, J. Mol. Mod. **24**, p.289-302, 2018
8. Louis, H., Ita, B.I., Nzeata, N.I., Approximate solution of the Schrödinger equation with Manning- Rosen plus Hellmann potential and its thermodynamic properties using the proper quantization rule, Eur. Phys. J. Plus **134**, p.315, 2019
9. Njoku, I.J., Onyenegecha, C.P., Okereke, C .J., Ukwuihe, U.M., Nwaneho, F.U., Approximate solutions of Schrödinger equation and thermodynamic properties with Hua potential, Res. Phys. **24**, p.104208, 2021
10. Edet, C.O., Okorie, U. S., Osobonye, G., Ikot, A.N., Rampho, G.J., Sever R., Thermal properties of Deng–Fan–Eckart potential model using Poisson summation approach, . J. Math. Chem. **58**, p. 989-1013, 2020
11. Bakhti, H., Diaf, A., Hachama, M., Computing thermodynamic properties of the O<sub>2</sub> and H<sub>2</sub> molecules with multi- parameter exponential-type potential. Com. Theor. Chem. **1185**, p. 112879, 2020
12. Okorie, U.S., Ikot, A.N., Chukwuocha, E.O., Onyeaju, M.C., Amadi, P.O., Sithole, M.J., Rampho, G.J., Energies spectra and thermodynamic properties of hyperbolic Pöschl-Teller potential model, Int. J. Thermophysics **41**, p. 91-106, 2020

13. Chabi, K., Boumali, A., Thermal properties of three-dimensional Morse potential for some diatomic molecules via Euler-Maclaurin approximation, Rev. Mex. Fis. **66**, p. 110-120, 2020
14. Dong, S.H., Irrison, M.C., Energy spectrum for a modified Rosen-Morse potential solved by proper quantization rule and its thermodynamic properties, J. Math. Chem. **50**, p. 881-892, 2012
15. Jia, C.S., Zhang, L.H., Wang, C. W. Thermodynamic properties for the lithium dimer, Chem. Phys. Lett. **667**, p. 211-215, 2017
16. Song, X.Q., Wang, C. W., Jia, C. S. Thermodynamic properties for the sodium dimer, Chem. Phys. Lett. **673**, p. 50-55, 2017
17. Ghanbari A. and Khordad R., Theoretical prediction of thermodynamic properties of N<sub>2</sub> and CO using pseudo harmonic and Mie-type potentials, Chem. Phys. **534**, p. 110732, 2020
18. Ikot A.N., Okorie U.S., Osobonye G., Amadi P.O., Edet C.O., Sithole M. J., Rampho G.J., Sever R., Superstatistics of Schrödinger equation with pseudo-harmonic potential in external magnetic and Aharonov-Bohm fields, Heliyon 6, p. e03738, 2020
19. Edet C. O. and Ikot A..N., Effects of topological defect on the energy spectra and thermo-magnetic properties of CO diatomic molecule, J. Low Temp Phys **203**, p. 84–111, 2021
20. Rampho G. J., Ikot A. N., Edet C. O., and Okorie U. S., Energy spectra and thermal properties of diatomic molecules in the presence of magnetic and AB fields with improved Kratzer potential. Molecular Physics, 119:5, 2020.
21. Ikot A. N., Edet C. O., Amadi P. O., Okorie U.S., Rampho G. J., and Abdullah H. Y., *Thermodynamic properties of Aharonov-Bohm (AB) and magnetic fields with screened Kratzer potential*, Eur. Phys. J. D **74**, p. 159, 2020
22. Edet C. O., Amadi P. O., Onyeaju M. C., Okorie U. S., Sever R., Rampho G. J., Hewa Y. Abdulla, Idris H. Salih and Ikot A. N., Thermal Properties and Magnetic Susceptibility of Hellmann Potential in Aharonov-Bohm (AB) Flux and Magnetic Fields at Zero and Finite Temperatures, Low Temp Phys **202**, p. 83–105, 2021
23. Edet. C.O., Amadi P.O., Okorie U.S., Tas A., Ikot A.N. , and Rampho G. J., Solutions of Schrödinger equation and thermal propertiesof generalized trigonometric Pöschl-Teller potential. Rev. Mex. Fis. **66**, p. 824-839, 2020
24. Okorie U. S. , Edet C. O., Ikot A. N., Rampho G. J. and Sever R., Thermodynamic functions for diatomic molecules with modified Kratzer plus screened Coulomb potential. Indian J Phys **95**, p. 411–421, 2021
25. Ikot A. N., Okorie U. S., Rampho G. J., P. O. Amadi P. O., Edet C. O., Akpan I. O., Abdullah H. Y., and Horchani R., Klein-Gordon Equation and nonrelativistic thermodynamic properties with improved screened Kratzer Potential. J. Low Temp Phys **202**, p. 269–289, 2021
26. Jia C. S., Wang C. W., Zhang L. H., Peng X. L., Zeng R., and You X. T., Partition function of improved Tietz oscillators.Chem. Phys. Lett. **676**, p.150-153, 2017
27. Jia C. S., Wang C. W., Zhang L. H., Peng X. L., Tang H. M., Liu J. Y., Xiong Y. and Zeng R., Predictions of entropy for diatomic molecules and gaseous substances, Chem. Phys. Lett. **692**, p. 57, 2018
28. Jia. C. S., Wang C. W., Zhang L. H., Peng X. L., Tang H. M. and Zeng R., Enthalpy of gaseous phosphorus dimer. Chem. Eng. Sci. **183**, p. 26-29, 2018
29. Peng . X. L., Jiang R., Jia C. S., Zhang L. H., and Zhao Y. L., Gibbs free energy of gaseous phosphorus dimer, Chem. Eng. Sci.190, p.122-125, 2018 30. Jia C. S., Zeng R., Peng X. L., Zhang L. H., and Zhao Y. L., Entropy of gaseous phosphorus dimer, Chem. Eng. Sci. 190, p. 1-4, 2018
31. Chen X. Y. , Li J. and Jia C. S., Thermodynamic properties of gaseous carbon disulfide, ACS Omega , **4**, **14**, p.16121–16124, 2019
32. Jia C. S., Wang Y. T., Wei L. S., Wang C. W., Peng X. L., and Zhang L. H., Predictions of entropy and Gibbs energy for carbonyl sulfide, ACS Omega, **4**(22): p. 20000-20004, 2019
33. Tang B., Wang Y. T., Peng W. L., Zhang L. H., and Jia C. S., Efficient predictions of Gibbs free energy for the gases CO,BF, and gaseous BBr. J. Mol. Struct. **1199**, p. 126958, 2020.
34. Jia C. S., Li J., Liu Y. S., Peng X. L., Jia X., Zhang L. H., Jiang R., Li X. P., Liu J. Y., and Zhao Y. L., Predictions of thermodynamic properties for hydrogen sulfide, J. Mol. Liquids. **315**, p. 113751, 2020.
35. Wang C.W., Peng X.L., Liu J.Y., Jiang R., Li X.P., Liu Y.S., Liu S.Y., Wei L.S., Zhang L.H., and Jia C.S.,**A novel formulation representation of the equilibrium constant for water gas shift reaction**, Int. J. Hydrogen Energy. **47**, p. 27821-27838, 2022.

36. Ikot A. N., Okorie U. S., Okon I. B., Obagboye L. F., Ahmadov A. I., Abdullah H. Y., Qadir K. W., Udoh M. E., and Onate C.A., Thermal properties of 2D Schrödinger equation with new Morse interacting potential, *Eur. Phys. J. D* **76**:208, 19p. 2022
37. Bayramova G. A., Analytical Solution of the Schrödinger Equation for the Linear Combination of the Hulthén and Yukawa-Class Potentials, *Russ. Phys. J* **65**, No.1, p. 7-20, 2022
38. Hulthén L, About the own solutions of the Schrodinger equation of the deuteron // *Ark. Mat. Astron. Fys.*, 28A, p.1-12, 1942
39. Hulthén L., On the virtual state of the deuteron *Ark. Mat. Astron. Fys.*, 29B, p. 1, 1942
40. Yukawa H., On the interaction of elementary particles, *Proc. Phys.-Math. Soc. Japan.*, 17, p. 48-57, 1935
41. Greene R.L., Aldrich C., Variational wave functions for a screened Coulomb potential *Phys. Rev. A* **14**, p. 2363 1976
42. Nikiforov A. F. and Uvarov V.B., *Special Functions of Mathematical Physics*, Springer, Basel, 1988
43. Abramowitz M and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, Mathematical Tables*, Dover, New York, 1964
44. Pearson C. E., *Handbook of Applied Mathematics*, New York: Van Nostrand Reinhold, 1983
45. Oyewumi .K.J., Falaye B.J., Onate C.A., Oluwadare O.J., and Yahya W.A., *Molecular Phys.*, **112**, p.127, 2014
46. Okorie U.S., Ikot A.N., Chukwuocha E.O., Rampho G.J., Thermodynamic properties of improved deformed exponential-type potential (IDEP) for some diatomic molecules. *Results in Physics* **17**, p. 103078, 2020

**UOT:539,21:537,86 538,9-405:537,86****PACS: 73.21.Cd**

## **INFLUENCE OF ORGANIC ADDITIVES ON THE STRUCTURES AND ELECTROPHYSICAL PROPERTIES OF HIGH PRESSURE POLYETHYLENE (LDPE)**

**E.M.GOJAYEV, SH.A.ZEYNALOV, G.S.JAFAROVA, F.SH.KERIMOV**

Azerbaijan Technical University

geldar-04@aztu.edu.az, sucaetz@aztu.edu.az

g.jafarova@aztu.edu.az, ferhad.kerimov@aztu.edu.az

### **ABSTRACT**

In this work, the composition and amount of a low molecular weight organic additive that modifies the electrophysical properties and structures of LDPE brand 10803-020 are determined. Phthalimide (PhI) was used as modifying organic additives. The content of additives in the composition of LDPE varied in the range of 0.01-0.1 wt.%. Based on experimental studies, it was found that the content of 0.05 wt% phthalimide is optimal, since it provides the greatest stability of electrical properties compared to both the original LDPE and LDPE with other additive contents. It is shown that this additive contributes to maintaining an increased value of the specific volumetric electrical resistance in all temperature ranges (20-110°C) of the test and has a relatively stable value of the dielectric loss tangent.

**Keywords:** Supramolecular structure, volume electrical resistivity, phthalimide, dielectric loss tangent.

### **ВЛИЯНИЕ ОРГАНИЧЕСКИХ ДОБАВОК НА СТРУКТУРУ И ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛИЭТИЛЕНА ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ (ПЭВД)**

### **РЕЗЮМЕ**

В данной работе определены состав и количество низкомолекулярной органической добавки, модифицирующей электрофизические свойства и структуры ПЭВД марки 10803-020. В качестве модифицирующей органической добавки использовали фталамид (ФИ). Содержание добавок в составе ПВД варьировалось в пределах 0,01-0,1 масс.%. На основании экспериментальных исследований установлено, что содержание фталамида 0,05% масс. является оптимальным, так как обеспечивает наибольшую стабильность электрических свойств по сравнению как с исходным ПЭНП, так и с ПЭНП с другим содержанием добавки. Показано, что данная добавка способствует сохранению повышенного значения удельного объемного электрического сопротивления во всех диапазонах температур (20-110°C) испытаний и имеет относительно стабильное значение тангенса угла диэлектрических потерь.

Ключевые слова: надмолекулярная структура, объемное удельное электросопротивление, фталамид, тангенс угла диэлектрических потерь.

### **ÜZVİ ƏLAVƏLƏRİN YÜKSƏK TƏZYİQLİ POLİETİLENİN (YTPE) QURULUŞUNA VƏ ELEKTROFİZİKİ XASSƏLƏRİNƏ TƏSİRİ**

### **XÜLASƏ**

Bu işdə YTPE markalı 10803-020-nin elektrofiziki xüsusiyyətlərini və strukturlarını dəyişdirən aşağı molekulyar ağırqliq üzvi əlavənin tərkibi və miqdarı müəyyən edilmişdir. Ftalamid (Fİ) dəyişdirici üzvi əlavələr kimi istifadə edilmişdir. YTPE -nin tərkibindəki aşqarların tərkibi 0,01-0,1 küt.% aralığında dəyişdi. Eksperimental tədqiqatlar əsasında müəyyən edilmişdir ki, 0,05 küt% ftalamidin tərkibi optimaldır, çünkü o, həm optimal YTPE, həm də digər əlavə tərkibli YTPE ilə müqayisədə elektrik xassələrinin ən böyük sabitliyini təmin edir. Göstərilmişdir ki, bu əlavə, təcrlübənin bütün temperatur diapazonlarında (20-110°C) xüsusi həcmi elektrik müqavimətinin qiymətinin artımına və dielektrik itki bucağının tangensinin nisbətən stabil qalmasına səbəb olur.

**Açar sözlər:** Molekulyarüstü quruluş, həcmi elektrik müqaviməti, ftalamid, dielektrik itki bucağının tangensi.

The study of changes in the structure and properties of polymeric dielectrics is of great importance, since the necessary condition for the normal operation of electrical insulation is the stability of its electrical characteristics: breakdown voltage  $U_{br}$ , specific volumetric electrical resistance  $\rho V$ ,  $\tau$  (lifetime), dielectric loss factor  $tg\sigma$ , etc.

The electrical properties of polymers depend on the imperfection of the structure, the presence of impurities and regions with different densities, cavities, etc., which in turn depend on the aggregate and developed state of the polymer. At present, the effect of supramolecular structures on their electrical properties has been clearly established [1,2].

This work is devoted to the study of the effect of a modifying additive on the change in the electrophysical properties and structure of high-pressure polyethylene (LDPE) brand 10808-020. Phthalimide (chemical formula C8H5NO2) was used as a modifier.

PhI was introduced into the feedstock of LDPE by mechanical mixing in the amount of 0.01–0.1 wt%. To achieve a uniform distribution to the FI additive in the composition of LDPE, repeated regranulation was carried out. The formation of films from LDPE granules and modifications based on it was carried out by blown extrusion on industrial equipment of the LRP 45-700M brand. The thickness of the samples was 40–50  $\mu\text{m}$ .

The electrical strength of the LDPE film, depending on the composition and amount of additives, was determined based on the study of the kinetics of electrical breakdown development (lifetime) according to the method developed by us [3,4]. The results of the experiments are shown in Fig.1. The introduction of a small amount of phthalimide (PhI) additive into the composition of LDPE (1,2,3,4,5 and 6) leads to a significant change in its electrical durability (Fig. 1).

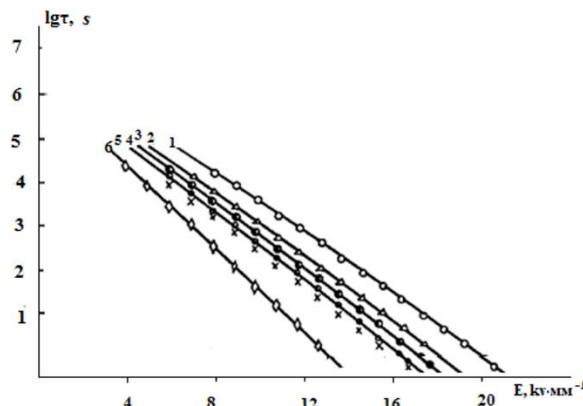


Fig.1. Dependences of the electrical durability of the LDPE film and its modification on the electric field strength. 1- LDPE + 0.05 wt.%; 2-LDPE + 0.03 wt.%, 3-LDPE + 0.07 wt.%; 4-LDPE + 0.01 wt.%; 5-LDPE + 0.1 mass PHI; 6-LDPE (no additive).

As follows from the experimental data, in the case under consideration, when an optimal amount (0.05 wt.%) of phthalimide is introduced into LDPE, its electrical strength increases. This means that by studying the change in the lifetime of an LDPE film with the introduction of an additive, it is possible to determine the optimal conditions for modifying the electrophysical properties of LDPE. For a more visual representation of electrical destruction development in the modified polymer the dependence of the electric strength of the LDPE film on the mass percent of the indicated additives is shown under other identical conditions ( $\tau=const$ ,  $T=const$ ) on the Fig.2. The dependence  $E_{br}=f(C)$  was built according to the data used to plot the graphs in Fig.1.

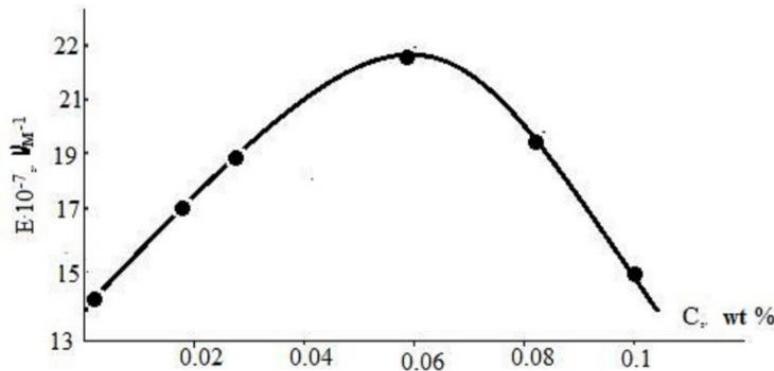


Fig.2. Change in the electrical strength of LDPE film modifications depending on the mass percent of the phthalimide additive.

As can be seen from Fig. 2, the electrical strength of the LDPE film reaches its maximum value when 0.05 wt.% phthalimide is introduced into its composition.

As follows from the obtained experimental results, when the optimal content of the proposed phthalimide additive is introduced into the composition of LDPE, its electrical strength increases from  $14 \cdot 10^7$  to  $220 \cdot 10^7$  V·m<sup>-1</sup>, i.e. about 40%.

Obtaining information about the most important parameters of the dielectric, such as the specific volumetric electrical resistance, the dielectric loss tangent, as well as the effect of organic additives on these properties, is of great scientific and practical interest. Figure 3 shows the results of experimental studies of the temperature dependence of the specific-volume electrical resistance of the LDPE film and its optimal modification (LDPE + 0.05 wt% phthalimide).

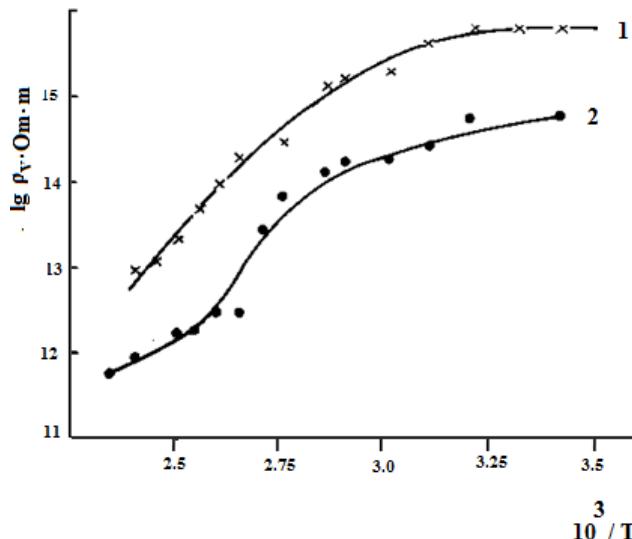


Fig.3. Influence of the FI additive on the change in the temperature dependence of the specific volumetric electrical resistance of the film. 1-LDPE + 0.05 wt% PhI, 2-LDPE (without additive)

From Fig. 3 it follows that the introduction of 0.05 wt% phthalimide into the composition of LDPE leads to a significant increase in the specific volumetric electrical resistance. Samples from LDPE with phthalimide additives contribute to maintaining an increased value of specific-volume resistance in all temperature ranges (20-1100°C) of the test. A good correlation is observed when studying the dependence of the specific volume electrical resistance on the content of phthalimide at room temperature. Experimental studies are shown in Fig.4.

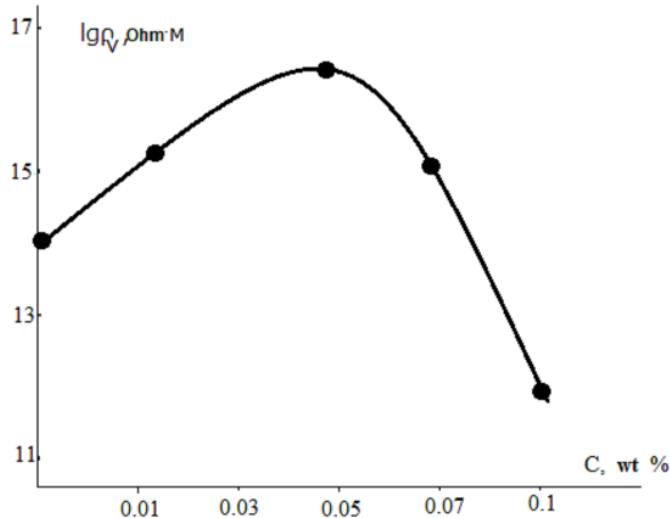


Fig.4. Dependence of the specific volume electrical resistance on the content of phthalimide

From Fig. 4 it can be seen that the specific volume electrical resistance increases with increasing content of phthalimide and passes through a maximum at 0.05 wt%. With a further increase in the content of phthalimide, its decrease is observed. Thus, the specific volumetric electrical resistance of LDPE is also sensitive to the introduction of an organic additive of phthalimide, and the content of 0.05 wt.% of this additive is also optimal here, since it provides the greatest stability of electrical properties compared to the original LDPE.

The increase in the specific volumetric electrical resistance of the LDPE film that we have established when 0.05 wt.% phthalimide is introduced into its composition can be explained on the basis of the formation of an optimal supramolecular structure in them.

As has been shown, the dielectric properties of polymer insulations are closely related to the structure of the polymer. Naturally, one should expect a change in the dielectric loss tangent of the LDPE film with various additives.

We have studied the change in dielectric losses ( $\tan \delta$ ) of the LDPE film and its optimal modification at different temperatures.

Figure 5 shows the effect of the addition of phthalimide on the change in the temperature dependence of  $\tan \delta$  of the LDPE film.

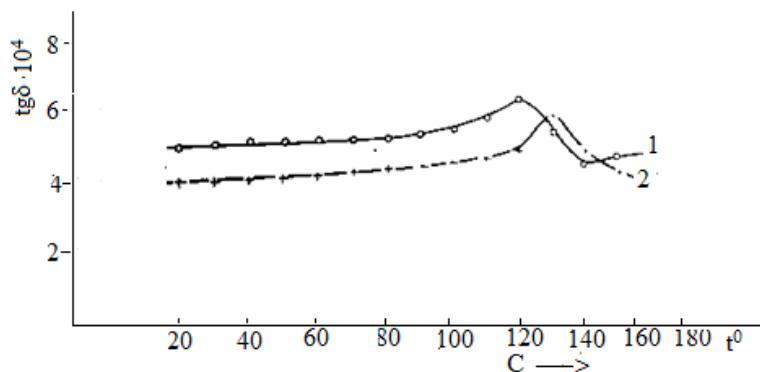


Fig.5. Influence of the optimal content of the phthalimide additive on the change in the temperature dependence of the dielectric loss tangent of the LDPE film. 1-LDPE (no additive), 2-LDPE + 0.05 wt.% phthalimide

As follows from Fig. 5, when 0.05 wt.% phthalimide is introduced into the composition of LDPE, it leads to a significant change, i.e. decrease in dielectric losses (curve 2) than that of the LDPE film without additive (curve 1).

Similar to the dependence of the specific volumetric electrical resistance of LDPE on the content of the phthalimide additive, Fig. 6 shows the dependence of the dielectric loss tangent of LDPE on the amount of this additive.

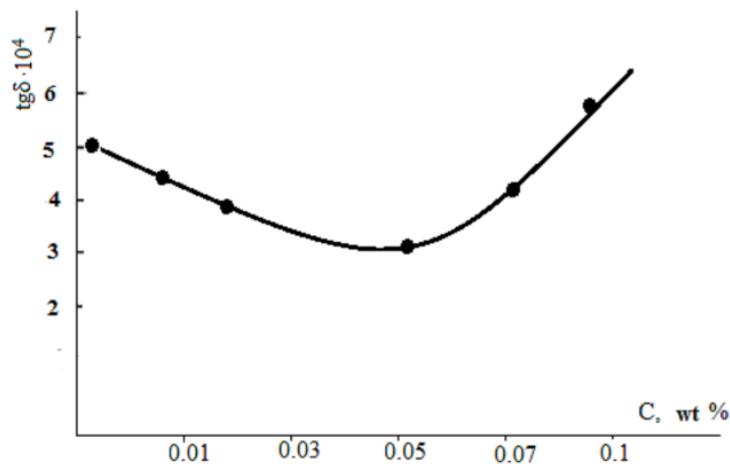


Fig.6. Dependence of the dielectric loss tangent on the content of phthalimide

As can be seen from Fig. 6, the tangent of the dielectric loss angle at the maximum  $\text{tg}\delta_{\text{max}}$ , depending on the content of phthalimide, first decreases, as it is expected to pass through a minimum at 0.05 wt.%, with a further increase, the content of the additive begins to increase.

Thus, from the experimental data it can be seen that the introduction of 0.05 wt.% of the amount of this additive into the composition of LDPE under the same conditions is optimal and leads to a decrease in the dielectric loss tangent. It is likely that additives introduced into the composition of LDPE affect the crystallization kinetics and significantly increase the packing density of macromolecules. As a result, molecular interaction increases in polymer chains and the movement of kinematic segments becomes more difficult; some impurity polar radicals lose their mobility, falling into crystalline regions [5,6,7].

**REFERENCES**

1. Кособудский И.Д., Юрков Г.Ю., Губин С.П., Запись В.В. Новые композиционные наноматериалы с управляемыми свойствами для радиотехники и электроники. Радиотехника. 2005, с.105-109
2. Marzban, P., Resalati, H., Ghasemian, A., and Shakeri, A. (2016). "Surface modification of talc particles with phthalimide: Study of composite structure and consequences on physical, mechanical, and optical properties of deinked pulp," BioRes. 11(4), 8720-8738.
3. Э.М.Годжаев, А.А.Абдурагимов, Ф.Ш.Керимов, С.И.Сафарова Исследование электрической прочности модифицированного ПЭВД при одновременном воздействии механических и электрических силовых полей. АзТУ Журнал Научные труды фундаментальной науки, Баку-2018, №2, ст.56-59
4. P. Barber, Sh. Balasubramanian, Y. Anguchamy, Sh. Gong, A. Wibowo, H. Gao, H. J. Ploehn and H.-C. z. Loye Polymer Composite and Nanocomposite Dielectric Materials for Pulse Power Energy Storage Materials 2009, 2, 1697-1733;ISSN 1996-1944, doi:10.3390/ma2041697
5. Годжаев Э.М., Абдурагимов А.А., Керимов Ф.Ш., Османова С.С. Влияние внешних воздействий на электрические свойства композитов на основе полиэтилена высокого давления с наполнителями фталевый ангидрид, ортофенилендиамина и терефталевый ангидрид. Scientific Light (Wroclaw, Poland) vol 1. N17(2018), с.29-53
6. Novak I. Influence of Processing Additives on Adhesive Properties of Surface-Modified Low-Density Polyethylene Macromolecular Materials and Engineering 289(3): March 2004, 269 – 274 DOI:10.1002/mame.200300166
7. Ch. Bowen and J. Bowen Degradation of polymer films David Soft Matter, 2013, 9, 344–358

IOT: 539.2; 577.3PACS: 31.15.E-

## ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ КАТАЛИТИЧЕСКОГО ДОМЕНА КАЗЕИНКИНАЗЫ 1CSN

ДЕМУХАМЕДОВА С.Д., АЛИЕВА И.Н., ГАДЖИЕВ З.И.

Институт физических проблем,

Бакинский Государственный Университет,  
ул.3.Халилова, 23, AZ 1148, Баку, Азербайджан,  
*svetlanabest@mail.ru*

### РЕЗЮМЕ

В работе методом молекулярной динамики (МД) с использованием программ NAMD и VMD исследована конформационная подвижность боковых цепей аминокислотных остатков каталитического домена казеинкиназы 1csn. Рассчитаны геометрические параметры и изучена зависимость энергии конформационных состояний аминокислотных остатков домена от условий и температуры моделирования. На основе расчетов значений среднеквадратичных отклонений отдельных атомов (RMSD) исследована молекулярная динамика каталитического домена белка, сделаны выводы о стабильности отдельных участков исследуемого домена.

**Ключевые слова:** казеинкиназы, моделирование, молекулярная динамика, конформация.

**THE STUDY OF CATALYTIC DOMAIN CASEINKINASE 1CSN BY THE MOLECULAR DYNAMICS METHOD**

### ABSTRACT

The molecular dynamics method was used to study the catalytic domain of casein kinase 1csn. Computer simulation was performed using the NAMD and VMD programs. In the process of MD, the conformations of the protein chain change. To find out which sections of the protein and to what extent changes affect the standard deviations of the RMSD of various types of protein atoms from their initial state, which give an idea of the stability of the protein. As a result of the MD simulation, an equilibrium state of 1csn and detailed information about the structure, energy, temperature, etc. were obtained. The analysis of the obtained results was conducted. Calculations prove the stability of the structure of the studied of the 1csn protein.

**Keywords:** casein kinases, 1csn, modeling, molecular dynamics, conformation

### MOLEKULYAR DİNAMİKA ÜSULU İLƏ 1CSN KAZEİNKİNAZANIN KATALİTİK DOMENİNİN TƏDQİQİ XÜLASƏ

İşdə NAMD və VMD proqramlarından istifadə etməklə, kazeinkinaza 1csn-nin katalitik domeninin amin turşu qalıqlarının yan zəncirlərinin konformasiya mütəhərrikiyi molekulyar dinamika (MD) üsulu ilə öyrənilmişdir. Həndəsi parametrlər hesablanmış və domenin amin turşusu qalıqlarının konformasiya hallarının enerjisini simulyasiya şərtlərindən və temperaturdan asılılığı öyrənilmişdir. Ayri-ayrı atomların orta kvadratik kənarlaşmalarının hesablamaları əsasında zülalın katalitik domeninin molekulyar dinamikası öyrənilmiş, tədqiq olunan domenin ayri-ayrı hissələrinin stabililiyi haqqında nəticələr əldə edilmişdir.

**Açar sözlər:** kazein kinazalar, 1csn, modelləşdirmə, molekulyar dinamika, konformasiya

### Введение

Казеинкиназа 1 (CK1) представляет собой серин/треонин киназу и относится к одному из наиболее важных семейств ферментов - семейству протеинкиназ, обстоятельно изучаемых в биохимических и медицинских исследованиях. Члены семейства CK1 присутствуют в большинстве типов клеток и регулируют внутри клетки большинство сигнальных процессов, включая процессинг и репарацию ДНК, пролифера-

цию, апоптоз, дифференцировку и подвижность клеток, клеточное деление, сборку рибосом, внутриклеточный транспорт и способны изменять активность ключевых белков в молекулах путем передачи и интеграции сигналов Wnt [1]. Нарушение регуляции изоформ CK1 связано с частотой возникновения воспалительных и пролиферативных заболеваний, а также с нейродегенеративными нарушениями. Аномальная активность и мутации этих протеинкиназ приводят к ряду патологий, таких как псориаз, ревматоидный артрит, остеопороз, септический шок, болезнь Альцгеймера и часто обнаружаются в различных опухолевых образованиях, включая онкологию почек, молочных желез, ротовой полости, хориокарциномы, карциномы, аденокарциномы поджелудочной железы и рак яичников [1]. У человека зарегистрировано шесть изоформ CK1 ( $\alpha$ ,  $\gamma 1$ ,  $\gamma 2$ ,  $\gamma 3$ ,  $\delta$  и  $\varepsilon$ ), которые регулируют несколько биологических процессов и по крайней мере три изоформы CK1 ( $\alpha$ ,  $\delta$  и  $\varepsilon$ ) были зарегистрированы как онкогенные [2], играющие ключевую роль в выживании клеток и канцерогенезе посредством прямой или косвенной стабилизации  $\beta$ -катенина во внутриклеточном сигнальном пути Wnt [3], который регулирует эмбриогенез, дифференцировку клеток и развитие злокачественных опухолей. Высокий уровень ядерного  $\beta$ -катенина указывает на активную роль различных изоформ CK1 в канцерогенезе через Wnt-сигнальный путь. Значительное увеличение уровня CK1  $\delta$  /  $\varepsilon$  обнаружено в раковых клетках поджелудочной железы и молочной железы [4, 5]. Учитывая важность CK1 в процессе точного деления клеток и те последствия, которые наблюдаются при возможных мутациях и изменениях их активности, в последнее время в научных исследованиях повышенное внимание стало уделяться роли CK1 в развитии рака и разработке CK1-специфических ингибиторов в качестве противоопухолевых препаратов. Однако разработка таких соединений, доступных для применения *in vivo*, все еще остается сложной задачей. CK1 в качестве привлекательной лекарственной мишени для разработки противоопухолевой терапии изучался в работе [6]. Исходя из вышеизложенного, казеинкиназы являются важными лекарственными мишениями для широкого спектра заболеваний у человека и их всестороннее исследование является актуальной задачей.

Белки CK1-киназы имеют общие родственные высококонсервативные каталитические домены, ответственные за каталитическую активность на N-конце. На C-конце расположен весьма разнообразный регуляторный домен, ответственный за определение субстратной специфичности.

Биологическая функция изоформ CK1 зависит от их специального каталитического сайта, который фосфорилирует CK1 белок [7]. В работе [7] определена кристаллическая структура усеченного варианта казеинкиназы-1 из *Schizosaccharomyces pombe* в комплексе с MgATP. Модель напоминает «замкнутые» АТФ-связанные конформации циклин-зависимой киназы 2 и цАМФ-зависимой протеинкиназы, но с явными различиями и от протеинкиназ в структуре поверхностных петель, придающих казеинкиназе-1 уникальные свойства. Авторами [8] была получена также кристаллическая структура каталитического домена казеинкиназы-1 *Schizosaccharomyces pombe* в комплексе с N-(2-аминоэтил)-5-хлоризохинолин-8-сульфонамид, изохинолинсульфонамидным соединением, ингибирующими протеинкиназы, конкурируя с аденоинтрифосфатами (АТФ). Рассмотрен механизм АТФ-конкурентного ингибирования, позволивший заключить, что их селективность в отношении различных протеинкиназ достигается за счет гидрофобных контактов и водородной связи с изохинолиновым кольцом. В

работе [9] исследованы каталитические домены Nhp1/2, являющиеся членами семейства CK1 в *Schizosaccharomyces pombe* и полученные данные позволили определить молекулярный механизм, используемый ферментами CK1 для нацеливания на конкретную клеточную локализацию для разделенной передачи сигналов.

Биологическая функция белков напрямую зависит от их гибкости [10], белки выполняют свои специфические функции посредством коллективных движений атомов. Следовательно, коллективное атомное движение конкретного белка используется в качестве параметра для понимания стабильности белка. В обзоре [11] представлено краткое описание раннего использования биомолекулярного моделирования. CK1-подобный белок был идентифицирован в растениях, в том числе в рисе. В работе [12] сообщается о кристаллической структуре киназного домена CK1-подобного белка из риса и показано, что фосфорилирование липазы, как субстрата этого белка, резко снижает ее каталитическую активность. Длина и ориентация богатого глицином АТФ-связывающего сайта являются динамическими в семействе CK1. Считается, что киназы CK1 являются важными белками, претерпевающими большие конформационные изменения, непосредственно связанные с их структурными колебаниями и функциями, чтобы регулировать различные клеточные процессы. С помощью молекулярной динамики можно описать общее функциональное движение в молекуле. Методом молекулярной динамики были исследованы структурные и конформационные свойства трех изоформ казеинкиназы-1 [2], изучены динамика, стабильность и механизмы связывания АТФ с малярийным паразитом *Plasmodium falciparum* CK1 [13]. В работе [14] проведено молекулярно-динамическое исследование молекулы АТФ и получены различные конформации в растворе и в белке CK1.

В данной работе для исследования методом молекулярной динамики была выбрана модель структуры усеченного варианта казеинкиназы-1 из *Schizosaccharomyces pombe* в комплексе с MgATP.

### Методы расчета

В процессе изучения биохимических процессов, протекающих в живой клетке, все большее значение приобретают теоретические исследования, основанные на различных методах компьютерного моделирования. Наиболее точными считаются квантовохимические методы расчета с использованием методов *ab initio* Хартри-Фока и метода функционала электронной плотности DFT/B3LYP в расширенном базисе. Однако для молекул, состоящих из очень большого числа атомов квантовомеханические методы непригодны. В настоящее время одним из важнейших способов исследования больших биологических молекул является метод молекулярной динамики, способный моделировать поведение молекул, состоящих из большого числа атомов. Метод молекулярной динамики играет важную роль в определении структурных, динамических и термодинамических характеристик белковых молекул, изучении процессов ионного транспорта, стабильности белков, конформационных превращений, докинга лигандов.

Моделирование молекулярной динамики является одним из главных инструментов для понимания физических основ структуры и функции биологических макромолекул. Кристаллическая структура белка представляет его статическое среднее

состояние в определенных условиях. Однако, в настоящее время представление о белках, как относительно жестких структурах заменено динамической моделью, в которой внутренние движения и возникающие в результате конформационные изменения играют существенную роль в их функциональной активности. В физиологических условиях белки всегда находятся в движении. Как правило, их потенциальная энергия никогда не равна минимуму, а колеблется в его окрестностях из-за постоянного взаимодействия с нагретой до температуры среды водой.

Молекулярная динамика связана с внутренним движением белков и обеспечивает большую детализацию информации об индивидуальном движении атомов как функции времени. В основе метода молекулярной динамики лежит представление о многоатомной молекуле, в которой все атомы представляют собой материальные точки, а поведение атомов описывается классическими уравнениями движения. Численное интегрирование этих уравнений позволяет рассчитывать траектории движения всех точек, математическая обработка этих траекторий дает возможность получать структурные и динамические характеристики и отслеживать их во времени. Основным преимуществом молекулярной динамики является её способность получить "реальную" микроскопическую динамику, соответствующую свободной энергии системы и межатомным взаимодействиям. Взаимодействия между частицами (например, силы Ван-дер-Ваальса, электростатические взаимодействия, ковалентные связи) во всех случаях описываются при помощи потенциальной функции силового поля, которая зависит от координат всех частиц (атомов или групп атомов), их типов, зарядов и описываемых степеней свободы (вибраций, поворотов, торсионных вращений и т.д.).

В данной работе мы использовали программу NAMD [15] для моделирования динамики биологических молекул и программу VMD [16] для визуализации, построения и первичной обработки результатов моделирования. Программа молекулярной динамики NAMD написана с использованием модели параллельного программирования Charm++ и используется для моделирования очень больших систем. С помощью программы VMD из pdb файла координат атомов создается файл топологии psf с описанием атомов, зарядов, связей и определяющий какое взаимодействие для каких атомов надо рассчитывать. Программа добавляет также все Н-связи, которые отсутствуют в экспериментальной структуре, растворитель и ионы. С помощью этих программ можно динамически отслеживать изменения выбранного параметра со временем, например, проследить, как меняется со временем расстояние между атомами. Все изменения можно рассматривать в графическом виде. В NAMD, на начальных этапах, производится минимизация энергии, нагрев и стабилизация системы, затем приступают к непосредственному моделированию.

## Результаты и обсуждение

Для нашего исследования была выбрана модель кристаллической структуры усеченного варианта казеинкиназы-1 от *Schizosaccharomyces pombe* в комплексе с MgATP [7] из Protein Data Base (PDB код: 1CSN). Эта структура показала 45,5% идентичности с последовательностью человеческого ck1 $\alpha$  и является лучшей структурой для исследования, поскольку киназа находится в активной конформации [17]. В работе все процессы моделирования проводились методом молекулярной динамики с

использованием наиболее популярного пакета программного обеспечения для молекулярной динамики биологических молекул NAMD [15] и программы VMD [16] для визуализации, построения и первичной обработки результатов моделирования. После проведения подготовительных операций исследуемая структура помещается в гипотетический ящик с водой или в водяную сферу. Эти два способа учета водного окружения отличаются тем, что в ящике учитывается взаимодействие с окружением, а в сфере не учитывается. В нашем моделировании каталитического домена казеинкиназы 1csn мы использовали оба способа учета водного окружения. На начальном этапе моделирования производится минимизация энергии с целью обнуления скоростей и накладываются периодические условия.

Структура белка 1csn состоит из 298 аминокислотных остатков, которые составляют 2386 атомов, одной полной молекулы АТФ, одного иона  $Mg^{2+}$  и 103-х молекул воды. После того, как белок помещается в водяную сферу количество атомов вместе с молекулами воды составляет 15473, а в гипотетическом ящике их число достигает 14408 атомов. При размещении белка в водяную сферу или в ящик с водой, начальная температура была 0К, а потом производился постепенный нагрев системы до 310К. Для понимания режима связывания АТФ с белком 1csn и его динамического поведения были выполнены моделирования МД с использованием программы NAMD с силовым полем Charm.

На рис.1 показан белок 1csn в окружении молекул воды в водяном ящике. Основная цепь белка показана в виде ленты, а боковые цепи в линиях. В нижнем левом углу помещен значок системы координат, картинка получена из программы VMD.

После 1000 шагов минимизации выходные данные программы NAMD приведены в таблице – это энергетические значения связей, валентных и двугранных углов, кинетическая, электростатическая и потенциальная энергии, энергия гидрофобных взаимодействий, сумма кинетической и всех потенциальных энергий (полная энергия), значения давления (рассчитанное на основе отдельных атомов) и температуры. Полная энергия\*- это вариация полной энергии с гораздо меньшими кратковременными колебаниями, по которой легче обнаружить дефекты при моделировании с постоянной энергией.

GPRESSURE – это когда к более тяжелым атомам добавлены атомы водорода. TEMPAVG, PRESSAVG и GPRESSAVG - средние значения температуры и давления со времени предыдущего выхода на печать значений энергий. Все энергетические параметры даны в ккал/моль, давление в барах, температура в Кельвинах.

В таблице в первых двух строках после названия параметров представлены значения до (первая строка) и результаты после минимизации (вторая строка) белка 1csn, помещенного в гипотетический ящик с водой, а в третьей и четвертой строках приведены соответствующие значения для белка 1csn в водной сфере. Из таблицы видно, что наибольший вклад в энергию дают гидрофобные взаимодействия.

**Таблица.** Значения энергий (ккал/моль), температуры (К) и давления (Бар) катализитического домена казеинкиназы 1csn.

Параметры	Гипотетический ящик		Сфера	
	до МД	после МД	до МД	после МД
Энергия валентной связи	3457.7709	4638.6834	3853.5967	5229.1144
Энергия валентного угла	2351.5087	4394.5677	2454.5325	4847.1250
Энергия двугранных углов	785.5646	1134.7400	785.5646	1206.0575
Электростатическая энергия	-35914.6455	-51630.1819	-40570.3994	-58381.5411
Энергия гидрофобных взаимодействий	4901.0531	2854.3853	2974.2846	3667.3742
Кинетическая энергия	0.0000	13136.6842	0.0000	14334.5235
Потенциальная энергия	-48981.7534	-38445.0347	-30488.9194	-43285.5806
Полная энергия	-48981.7534	-25308.3505	-30488.9194	-28951.0570
Полная энергия*	-48981.7534	-25144.6626	-30488.9194	-28755.1228
Температура	0.0	305.8801	0.0	310.7977
Давление	82389728.5462	1023.7745	-	-
TEMPAVG	0.0	305.2452	0.0	309.4917
GPRESSURE	82394581.5562	-872.6562	-	-
PRESSAVG	82389728.5462	-710.1190	-	-
GPRESSAVG	82394581.5562	-708.2290	-	-

Для понимания механизма связывания лиганда АТФ активным сайтом белка была проведена молекулярная динамика участка связывания казеинкиназы 1csn с помощью программы PyMol. На рис.2 представлена структура белка 1csn в виде линий (фигура слева), лиганд АТФ показан палочками. На правой стороне рис.2 показана та же структура белка, представленная в виде поверхности. Из рисунка хорошо видно, как лиганд располагается в связывающем кармане белка 1csn.

На рис.3 представлена та же структура казеинкиназы 1csn в ленточной форме. В активном сайте показаны боковые цепи всех аминокислотных остатков, попадающих в активный центр 1csn и обозначены названия тех аминокислотных остатков, которые могут взаимодействовать с лигандом.

Для большей наглядности на рис.4 показан только активный центр казеинкиназы 1csn с лигандом и аминокислотными остатками в нем. Как видим, лиганд АТФ лежит в кармане белка и окружен сверху аминокислотными остатками Lys133, Asp154, Asp135 и Asn136, с правой стороны расположены сверху вниз Leu138, Gly189, Leu88, Asp86, Leu87, ниже Ala39 и Ile85. С левой стороны сверху вниз находятся Ser22, Phe23, Gly21, Glu20, Gly19, Gly24, Ile18, Ile26, Gly24 и Lys41. Достаточно близко к лиганду подходят боковые цепи Lys133 (2.9 Å) и Lys41 (2.8 Å), а также Ser22 (3.1 Å) и Leu138 (3.6 Å). С этими остатками в первую очередь образуются нековалентные взаимодействия, удерживающие лиганд АТФ в связывающем сайте.

В процессе МД конформация белка меняется. Для того, чтобы выяснить насколько сильно это изменение и каких частей белка оно касается, были вычислены среднеквадратичные отклонения RMSD различных типов атомов белка от их начального состояния, а также среднеквадратичные флуктуации атомов RMSF в зависимости от номера остатка, которому они принадлежат. Общие изменения стабильности были исследованы с помощью расчета RMSD. После вычислений изучается стабильность и подвижность различных компонентов системы в процессе молекулярной динамики.

Траектории движения атомов казеинкиназы 1csn проанализированы по графикам среднеквадратичного отклонения (RMSD), среднеквадратичных флуктуаций (RMSF), радиуса инерции ( $R_g$ ), водородной связи. На всех приведенных графиках с левой стороны размещены графики, соответствующие расположению структуры 1 csn в гипотетическом ящике с водой, а с правой стороны графики, соответствующие размещению структуры в водной сфере.

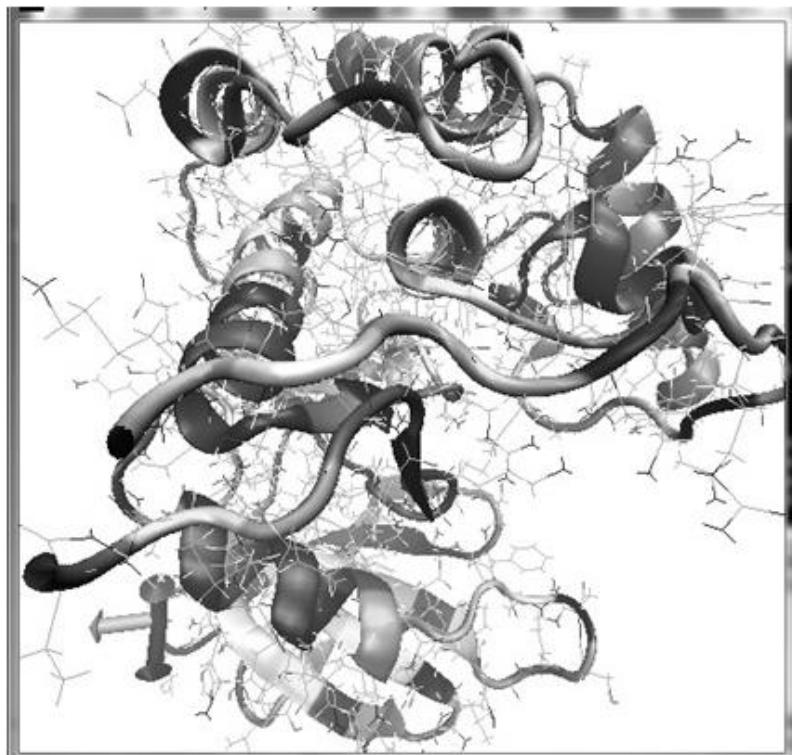


Рис. 1. Структура казеинкиназы 1csn в гипотетическом ящике с водой.

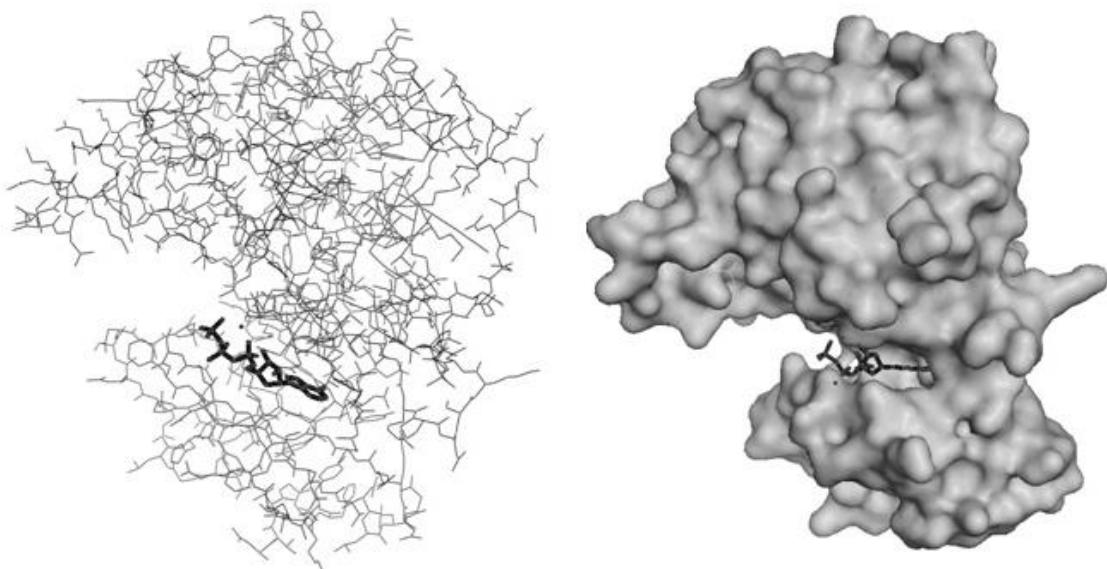


Рис. 2. Структура белка 1csn в виде линий (слева) и в виде поверхности (справа) с лигандром-молекулой АТФ в виде «палочек» в связующем кармане. Ион магния показан в виде черной точки.

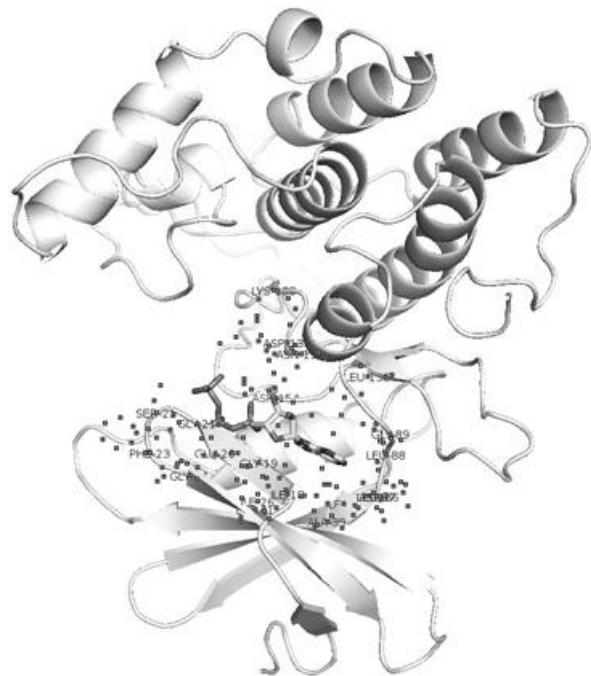


Рис. 3. Структура 1csn в ленточной форме и выделенным активным центром с лигандом- молекулой АТФ и боковыми цепями аминокислотных остатков, взаимодействующих с ним.

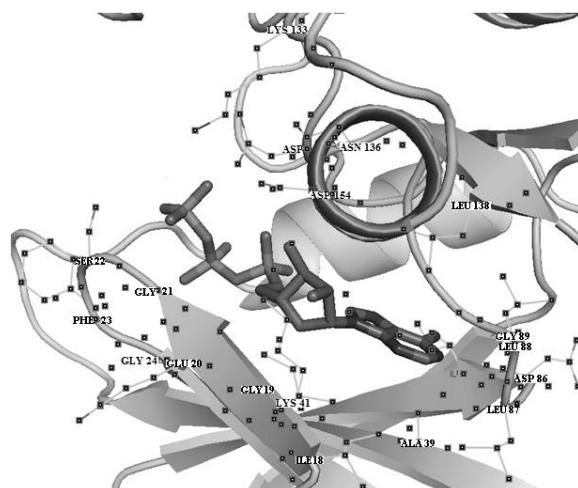


Рис. 4. Активный сайт казеинкиназы 1csn с лигандом АТФ.

На рис.5 приведен график изменения среднеквадратичного отклонения RMSD координат атомов казеинкиназы 1csn в процессе молекулярной динамики со временем. На графике стоит флагок «noh» и, следовательно, RMSD рассчитывается для всех атомов белка кроме атомов водорода. По оси ординат откладывается среднеквадратичное отклонение в ангстремах, по оси абсцисс время в пикосекундах. Моделирование продолжалось 2000 пс. Видно, что в ящике с водой наблюдаются сильные отклонения в структуре, связанные с взаимодействием с окружающей средой (левый график), стабилизации структуры практически не наблюдалось за все время моделирования. Отклонения от кристаллической структуры при моделировании обусловлены тепловым движением атомов и процессом релаксации. Полностью левый и правый графики сравнивать нельзя ввиду того, что по оси ординат шкалы резко

отличаются – если цена деления на правом графике составляет  $0.1 \text{ \AA}$ , то на левом соответствующее деление составляет  $0.05 \text{ \AA}$ . Тем не менее, видим, какую большую роль играют взаимодействия атомов белка с окружающей средой.

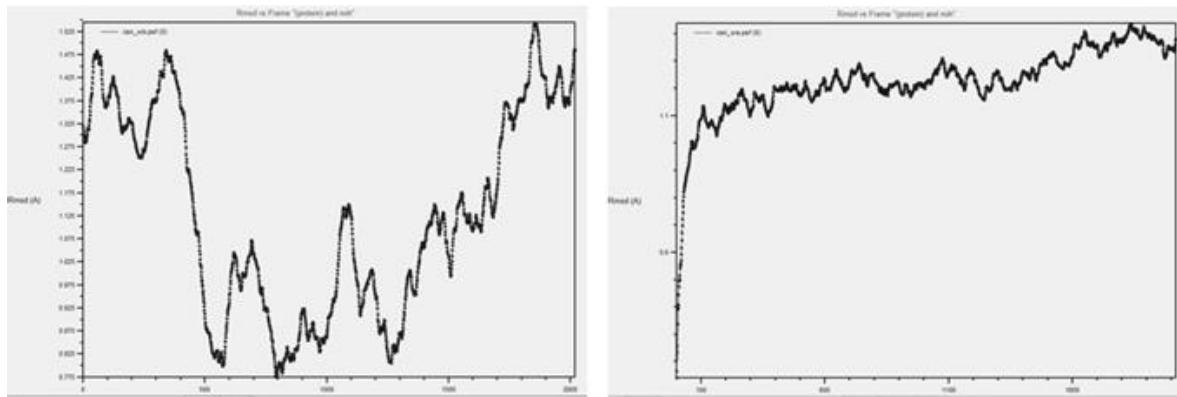


Рис. 5. RMSD ( $\text{\AA}$ ) от времени в пс без учета атомов водорода. Правый график соответствует белку 1 csn в водной сфере, а левый – в ящике с водой.

На рис.6 снят флагок «noh», поэтому RMSD рассчитывается для всех атомов белка, включая атомы водорода. Как видим из графика, наличие водородов при взаимодействии с окружающей средой сразу приводит к менее резким отклонениям атомов от положений равновесия. По-видимому, этому способствует учет взаимодействий атомов водородов белка с анионами среды. Отметим, что в процессе моделирования нас интересует RMSD, возникающая из-за колебаний структуры, а не из-за смещений и вращений молекулы в целом.

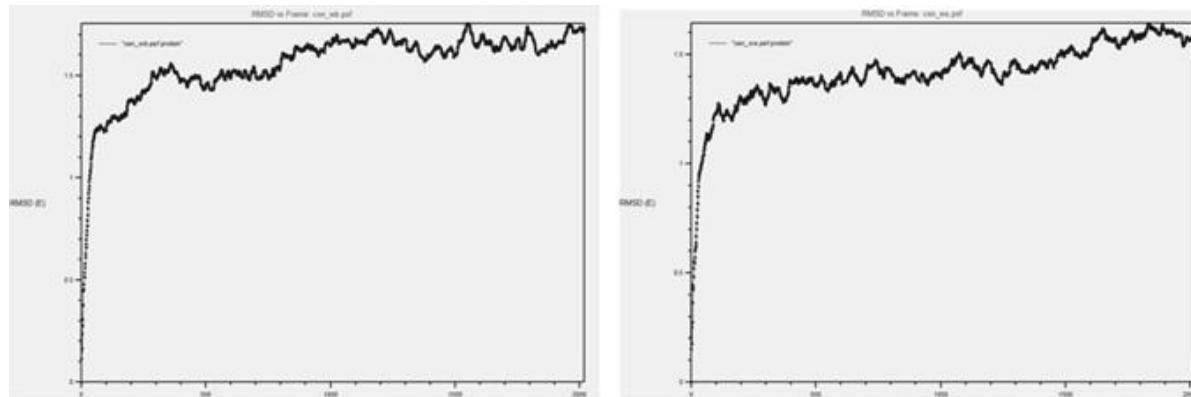


Рис. 6. RMSD ( $\text{\AA}$ ) казеинкиназы 1csn от времени в пс с учетом атомов водорода.

На рис.6 шкалы по оси ординат одинаковы на обоих графиках. Как видно из графика, в течение первых 100 пс наблюдается резкий скачок в значениях RMSD, затем происходят незначительные колебания около равновесных положений. В водном ящике учет взаимодействий с окружением приводит к более быстрому выходу структуры на плато приблизительно через 1000 пс, в водной сфере без учета взаимодействий отклонения в структуре более плавные, но окончательно стабилизация структуры наблюдается только через 1700 пс.

На рисунке 7 показаны флуктуации водородных связей. По оси ординат отложены номера водородных связей, по оси абсцисс время в пикосекундах. Водородные связи

являются наиболее важными специфическими межмолекулярными взаимодействиями, обеспечивающими стабильность комплекса при связывании лиганда [13]. Анализ водородных связей важен для понимания не только стабильности, но и гибкости белка в целом. Чтобы определить стабильность образующихся водородных связей при связывании активного сайта казеинкиназы 1csn с АТФ, был построен график динамических флюктуаций межмолекулярных Н-связей в течение 2000 пс. Результаты свидетельствуют о стабильности образующихся водородных связей, подтверждающих полученные данные по структуре комплекса.

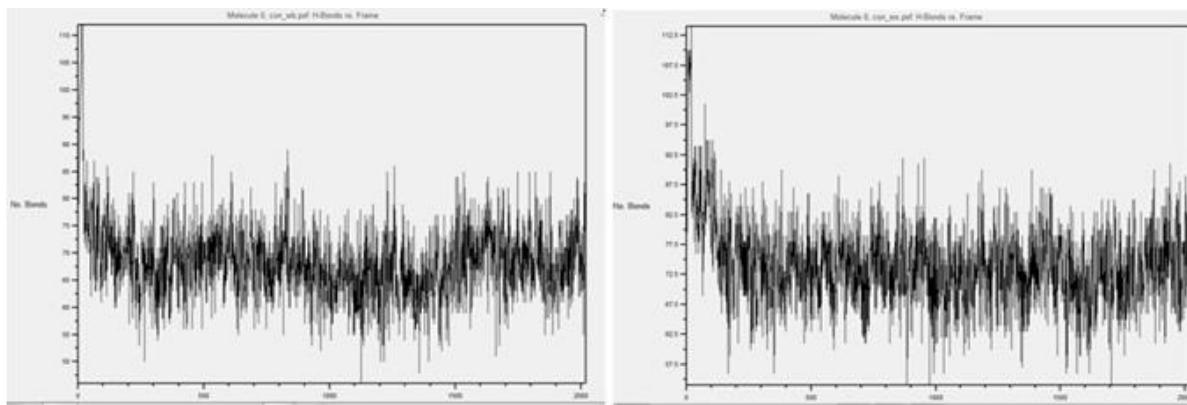


Рис. 7. Флюктуации водородных связей в структуре казеинкиназы 1csn при связывании лиганда в течение 2000 пс.

На рис.8 визуализированы среднеквадратичные флюктуации RMSF от номера аминокислотного остатка. Хорошо видна неравномерная подвижность атомов в процессе МД.

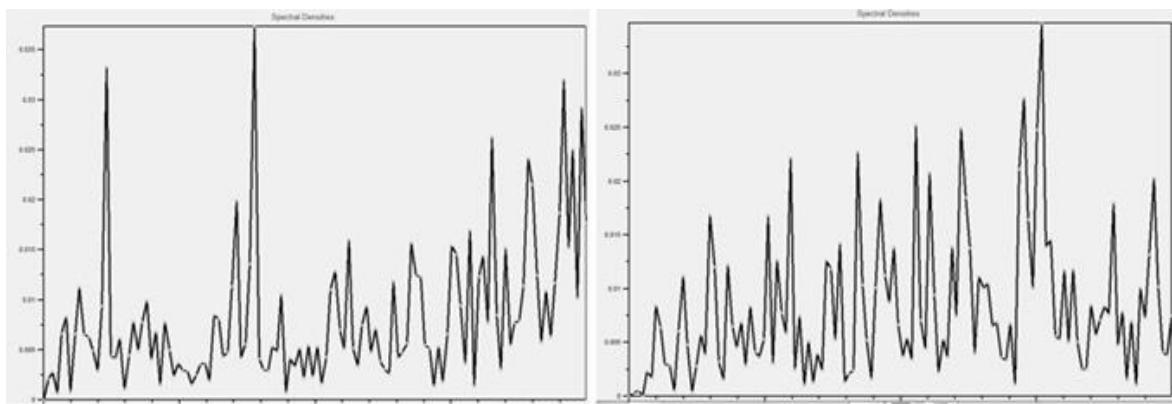


Рис. 8. Флюктуации RMSF от числа  $C^\alpha$  атомов каталитического домена казеинкиназы 1csn.

На рис.9 представлены зависимости энергетических параметров казеинкиназы 1csn от времени. Приведенные на рисунке кривые представляют зависимости от времени:

- (а) варьирование температуры представлено в виде линии, практически совпадающей с осью абсцисс,
- (б) выше лежит кривая зависимости энергии двугранных углов,
- (в) еще выше энергия химической связи и энергия валентных углов,
- (г) резко поднимающаяся вверх кривая описывает зависимость кинетической энергии в процессе молекулярной динамики.

Как видим, все графики довольно быстро выходят на плато, что говорит о том, что все энергетические параметры каталитического домена белка достаточно быстро стабилизируются.

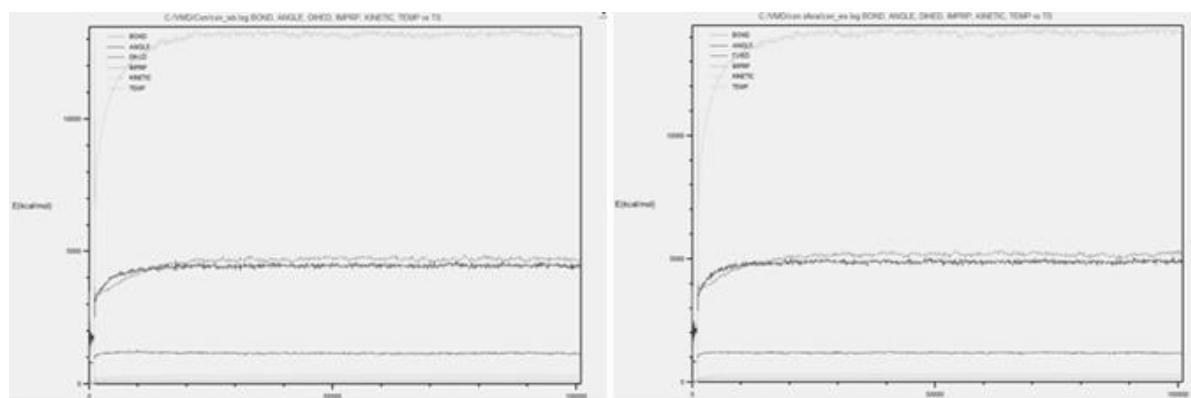


Рис. 9. Зависимость энергетических параметров и температуры казеинкиназы 1csn от времени в процессе молекулярной динамики.

### Заключение

Настоящее исследование дает представление о структурных особенностях каталитического домена казеинкиназы 1csn, которое может внести вклад в дальнейшее понимание связанных структур белка и механизма фосфорилирования, а также стимулировать дальнейшие исследования важного класса казеинкиназ СК1.

Практическая значимость работы связана с тем, что обсуждаемая динамика казеинкиназы 1csn может быть полезна при исследовании функциональной активности белка и его способности связывать лиганды, которые могут выступить в качестве перспективных лекарственных препаратов. В частности, на последующем этапе данного исследования планируется проведение молекулярного докинга с использованием ряда терапевтических средств, применяемых для лечения онкологических заболеваний и выступающих в роли лиганда для казеинкиназы 1csn.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Knippschild U., Krüger M., Richter J., Xu P., García-Reyes B., Peifer C., Halekotte J., Bakulev V., Bischof J. *The CK1 family: contribution to cellular stress response and its role in carcinogenesis*, Front. Oncol., Vol.4, pp.96, 2014
2. Singh S.P., Gupta D.K. *A comparative study of structural and conformational properties of casein kinase-1 isoforms: insights from molecular dynamics and principal component analysis*. J.Theor. Biol., Vol.371, p.59-68, 2015
3. Knippschild U., Gocht A., Huber N., Löbler J., Stöter M. *The casein kinase 1 family: participation in multiple cellular processes in eukaryotes*, Cellular Signalling, Vol.17, Iss..6, p.675-689, 2005
4. Brockschmidt C., Hirner H., Huber N., Eismann T., Hillenbrand A., Giamas G., Radunsky B., Ammerpohl O., Bohm B., Henne-Bruns D., Kalthoff H., Leithäuser F., Trauzold A., Knippschild U. *Anti-apoptotic and growth-stimulatory functions of CK1 delta and epsilon in ductal adenocarcinoma of the pancreas are inhibited by IC261 in vitro and in vivo*, Gut, Vol.57, Iss.6, p.799-806, 2008
5. Rosenberg L.H., Lafitte M., Quereda V., Grant W., Chen W., Bibian M.H., Noguchi Y., Fallahi M., Yang Ch., Chang J.C., Roush W.R., Cleveland J.L., Duckett D.R. *Therapeutic targeting of casein kinase 1 $\delta$  in breast cancer*, Science Translational Medicine, Vol.7, Iss.318, p. 318ra202, 2015
6. Long A.M., Zhao H., Huang X. *Structural Basis for the Interaction between Casein Kinase 1 Delta and a Potent and Selective Inhibitor*, Journal of Medicinal Chemistry, Vol.55, Iss.2, p.956-960, 2012
7. Xu R.M., Garmel G., Sweet R.M., Kuret J., Cheng X. *Crystal structure of casein kinase-1, a phosphate-directed protein kinase*. The EMBO Journal, Vol.15, Iss.5, p.1015-1023, 1995
8. Xu R.M., Garmel G., Kuret J., Cheng X. *Structural basis for selectivity of the isoquinoline sulfonamide family of protein kinase inhibitors*, Proc. Natl. Acad. Sci. USA, Vol.93, Iss.13, p. 6308-6313, 1996
9. Elmore Z.C., Guillen R.X., Gould K.L. *The kinase domain of CK1 enzymes contains the localization cue essential for compartmentalized signaling at the spindle pole*. Molecular Biology of the Cell, Vol.29, Iss.13, p. 1664-1674, 2018
10. Henzler-Wildman K., Kern D. *Dynamic personalities of proteins*. Nature, Vol.450, p.964-972, 2007
11. Karplus M., McCammon J.A. *Molecular dynamics simulations of biomolecules*. Nat Struct Biol. Vol.9, Iss.9, p.646-652, 2002
12. Park Y.I., Do K.H., Kim I.S., Park H.H. *Structural and functional studies of casein kinase I-like protein from rice*. Plant Cell Physiol., Vol.53, Iss.2, p.304-311, 2012
13. Dehury B., Behera S.K., Mahapatra N. *Structural dynamics of Casein Kinase I (CKI) from malarial parasite Plasmodium falciparum (Isolate 3D7): Insights from theoretical modeling and molecular simulations*. Journal of molecular graphics & modelling, Vol.71, p.154-166, 2017
14. Kobayashi E., Yura K., Nagai Y. *Distinct Conformation of ATP Molecule in Solution and on Protein*, Biophysics. Vol.9, p.1-12, 2013
15. Phillips J.C., Braun R., Wang W., Gumbart J., Tajkhorshid E., Villa E., Chipot C., Skeel R.D., Kalé L., Schulten K. *Scalable molecular dynamics with NAMD*. J. Comput. Chem., Vol.26, p.1781-1802, 2005
16. Humphrey W., Dalke A., Schulten.K. *VMD: Visual molecular dynamics*, Journal of Molecular Graphics, Vol.14, Iss.1, p.33-38, 1996
17. Sudha G., Yamunadevi S., Tyagi N., Das S., Srinivasan N. *Structural and molecular basis of interaction of HCV non-structural protein 5A with human casein kinase 1 $\alpha$  and PKR*, BMC Structural Biology, Vol.12, Iss.1, p.28-42, 2012

IOT532PASC: 77.22.Ej,64.75Bc,31.70.Dk,61.70Og

## ABOUT THE PROCESSES OF HYDRATION IN DILUTE AQUEOUS SOLUTIONS OF ELECTROLYTES

<sup>1</sup>MASIMOV E.A., <sup>1</sup>SHAHBAZOVA G.M., <sup>1</sup>ƏLƏSGƏROVA G.N.

<sup>1</sup>Baku State University, Baku,

*masimovspectr@rambler.ru, shahbazova.gunel@mail.ru*

### ABSTRACT

The hydration numbers of ions in dilute aqueous solutions of HCl, LiCl, CsCl, NaCl, as well as in aqueous solutions of potassium salts KBr, KCl, KI, were determined by the proposed refractometric method. It was found that the calculated hydration numbers of anions grow with the growth of their radii. Further, the effect of polyethylene glycol (PEG-6000) on the processes of hydration of ions in aqueous solutions of KCl and KBr was studied. It turned out that when the polymer is introduced into the solution, the hydration numbers of ions decrease, which is apparently associated with the role of the PEG oxygen atom, which competes with ions when interacting with water molecules.

**Keywords:** hydration, hydration number, solution, salts, polyethylene glycol

### К ПРОЦЕССАМ ГИДРАТАЦИИ В РАЗБАВЛЕННЫХ ВОДНЫХ РАСТВОРАХ ЭЛЕКТРОЛИТОВ

#### РЕЗЮМЕ

Числа гидратации ионов в разбавленных водных растворах HCl, LiCl, CsCl, NaCl, а также в водных растворах солей калия KBr, KCl, KI, были определены предлагаемым рефрактометрическим методом. Было установлено что, вычисленные числа гидратации анионов растут с ростом их радиусов. Далее было изучено влияние полиэтиленгликоля (ПЭГ-6000) на процессы гидратации ионов в водных растворах KCl и KBr. Оказалось, что при введении полимера в раствор числа гидратации ионов уменьшаются, что, по-видимому, связано с ролью атома кислорода ПЭГ, конкурирующего с ионами при взаимодействии с молекулами воды.

**Ключевые слова:** гидратация, число гидратации, раствор, соли, полиэтиленгликоль.

### ELEKTROLİTLƏRİN SULU MƏHLULLARINDA HİDRASIYA PROSESLERİ HAQQINDA

#### XÜLASƏ

İşdə HCl, LiCl, CsCl, NaCl-in duru sulu məhlullarında, həmçinin kalium duzlarının KBr, KCl, KI sulu məhlullarında ionların hidratasiya ədədləri təklif olunan refraktometrik üsulla təyin edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, kation (anion) sabit qaldıqda hidratasiya ədədi anionların (kationlarına) radiuslarının artması ilə artır. Daha sonra polietilen qlikolun (PEG-6000) KCl və KBr sulu məhlullarında ionların hidratlaşma proseslerinə təsiri öyrənilmişdir. Məlum olmuşdur ki, polimer məhlula daxil edildikdə ionların ədədləri azalır ki, bu da su molekülları ilə qarşılıqlı təsirdə olan zaman ionlarla rəqabət aparan PEG-in oksigen atomunun rolu ilə bağlıdır.

**Açar sözlər:** hidratasiya, hidratasiya ədədi, məhlul, duzlar, polietilenqlikol

As is known, all the properties of substances, including solutions, are related to their energy state and structure. Therefore, studying the interaction between all components of the solution leading to the formation of a certain structure is important. One of the important processes occurring in the solution are the processes of solvation (hydration, if the solvent is water).

As is known, when salts are dissolved in water, the salt dissociates into ions, and these ions do not interact with each other in dilute solutions.

As is known, hydration is the process of interaction of water molecules with ions, atoms, and molecules introduced into it. The process of hydration characterizes practically all structural and energetic changes occurring in the solution. The degree of hydration is characterized by the number of hydration ( $h$ ) and the thickness of the hydrate shell of the particles of the dissolved substance.

There are multiple methods of determining the number of hydration based on the differences in the properties of water in the general and hydrated shell (YMR, IK) [7-12]. Therefore, the obtained values of the hydration number, determined by different methods, as a rule, do not coincide.

## MATERIALS AND METHODS

In the work, we used PEG with a molecular weight of Mn=6000 produced by the company "Panreac" (Spain), as well as salts of the "chemically clean" type (хч), KCl, KBr, KJ, HCl, LiCl, CsCl, NaCl. All experiments were carried out using bidistillation water.

As is known, polyethylene glycol (PEG) of different molecular mass is widely used in various biotechnological processes.

Mixtures of aqueous solutions of PEG and various polymers and a number of organic and inorganic salts form two-phase systems that are widely used for the separation and purification of biological materials (proteins, viruses, cells, etc.), for the fractionation of some high-molecular compounds, for the early diagnosis of some diseases, etc. Therefore, the study of the effect of polyethylene glycol on the process of hydration of ions is important when studying the mechanisms of phase formation in water two-phase systems.

It is known that the formation of water-two-phase systems is connected with the interactions of phase-forming components (hydrophobic and hydrophilic hydration) with water. Different local microstructures arise around each component, and upon reaching a certain size, each of these structures turns into a separate stable thermodynamic phase and the system becomes two-phase.

With this goal, we studied the process of hydration of salts used to obtain different two-phase systems in diluted aqueous solutions of these salts and the influence of PEG on this process, which is the main polymer component of the two-phase system PEG-sodium citrate-water.

The hydration numbers of ions were found by the refractometric method described in the work [1, 2].

## RESULTS AND DISCUSSION

A very simple and experimentally convenient method for determining the hydration number of salts was proposed based on the study of the concentration dependence of the refractive index of a salt solution [1,2].

In these works, an analytical formula was obtained that relates the slope of the concentration dependence of the refractive index of the solution to the number of hydration [1, 2]:

$$h_1 + h_2 = \frac{3Mtg\Phi}{\rho N_A \alpha_{H_2O}} - i(\frac{r_{K^+}}{r_{H_2O}})^3 - j(\frac{r_{R^-}}{r_{H_2O}})^3 \quad (1)$$

where  $\rho$  is the density of the solution;  $N_A$  — Avogadro's number;  $M$  — molar mass KR;  $h_1, h_2$  — number of hydration ions  $K^+$  and  $R^-$ ; and  $c$  — mass concentration of KR in the solution.

We applied this method to determine the hydration number of ions in dilute aqueous solutions of HCl, and salts NaCl, CsCl, LiCl, KCl, KBr, KJ. The concentration dependence of the refractive index of dilute aqueous solutions of salts was carried out on a refractometer FR0429.

In dilute solutions, when the ions do not interact with each other, the value  $(n^2 - 1)/(n^2 + 2)$  depends linearly on the concentration. When reaching certain threshold concentrations, the linear dependence is broken  $(n^2 - 1)/(n^2 + 2) - C$ . We worked in the area of such concentrations where this dependence does not deviate from linearity.

The obtained data in coordinates  $(n^2 - 1)/(n^2 + 2) - C$  for various salts are presented in Fig. 1 and 2.

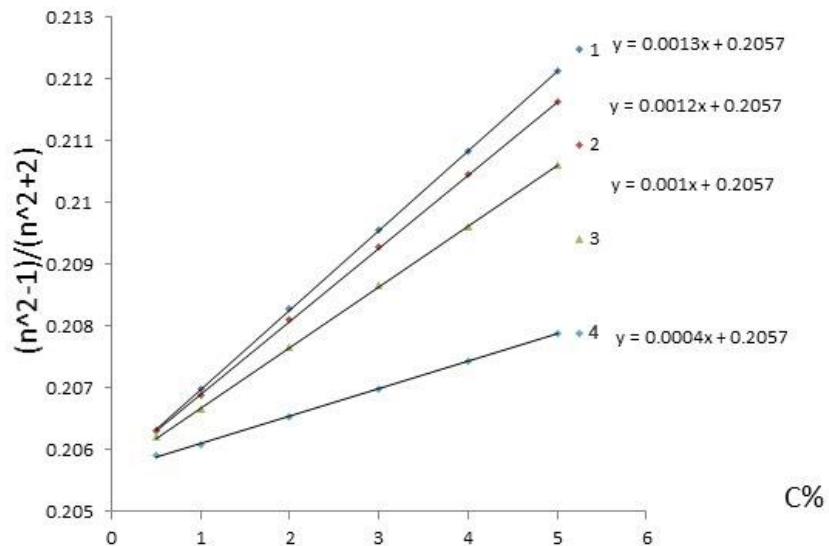


Fig. 1. Concentration relationship  $\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2}$  for aqueous solutions 1.HCl, 2.LiCl, 3.NaCl, 5.CsCl

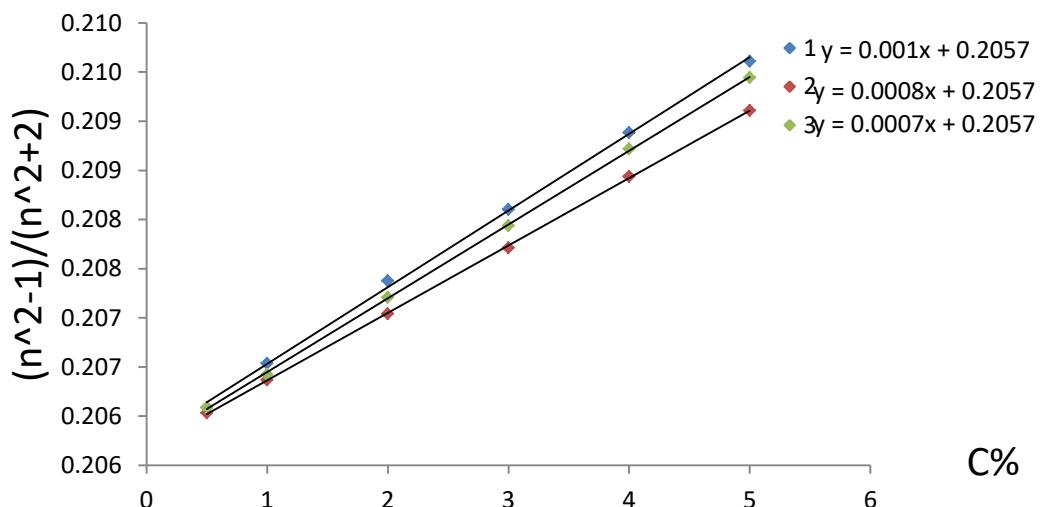


Fig.2. Dependence of the ratio on the concentration  $\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2}$  of KCl, KBr, KJ in the system

1. KCl+ water, 2. KBr+ water, 3. KJ+ water

As follows from the figures, these dependences have a linear character. Substituting parameters taken from literature [1-3], ( $r_{H^+} = 33\text{pm}$ ,  $r_{Cs} = 167\text{pm}$ ,  $r_{H_2O} = 140\text{pm}$ ,  $\alpha_{H_2O} = 1.45 \times 10^{-30}\text{m}$ ,  $\rho \approx 10^3 \text{kg/m}^3$ ,  $r_{Cl^-} = 200 \text{pm}$ ,  $r_{K^+} = 138\text{pm}$ ,  $r_{Br^-} = 196\text{pm}$ ) included in formula [1], we determined the sum of the hydration numbers of  $H^+$  and  $Cl^-$ ,  $Li^+$  and  $Cl^-$ ,  $Na^+$  and  $Cl^-$ ,  $Cs^+$  and  $Cl^-$ ,  $K^+$  and  $Cl^-$  ions based on the angular coefficient of the graph presented in Fig. 1 and 2 ,  $K^+$  and  $Br^-$ ,  $K^+$  and  $I^-$ , in aqueous solutions of  $HCl$ ,  $LiCl$ ,  $NaCl$ ,  $CsCl$ ,  $KCl$ ,  $KBr$ ,  $KJ$ .

Refractive indices of dilute aqueous solutions of potassium salts  $KCl$ ,  $KBr$  and  $KJ$  were measured by the refractometric method in the concentration interval  $0 \leq c \leq 5\%$ . As can be seen from table 1. the relationship is a linear function of salt concentration: . The values of the parameters obtained from the experiment and for the aqueous solutions studied at a temperature of  $25^\circ C$  were as follows: for all solutions  $A=0.02057$ , and values for  $KCl$   $B=0.001$ , for  $KBr$   $B=0.0008$ , for  $KJ$   $B=0.0007$ , etc. Fig.3 shows the graph of the dependence of the sum of the hydration numbers of the potassium ion and anions  $Cl^-$ ,  $Br^-$  and  $I^-$  on the sum of the radii of the potassium ion and the corresponding anions constructed according to table 1.

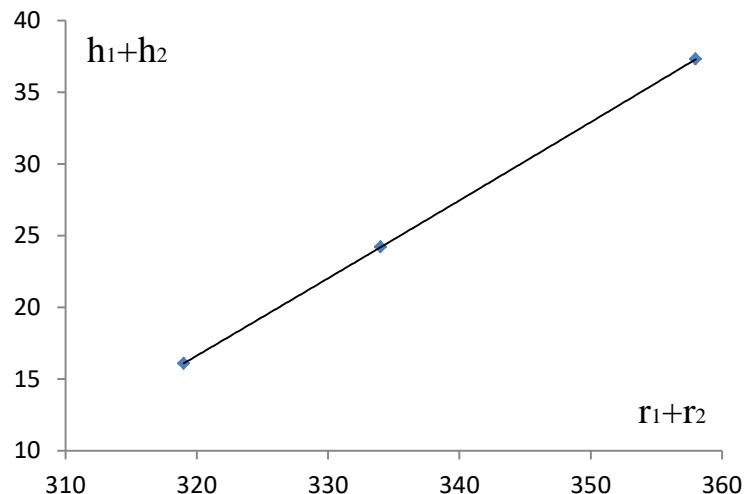


Fig. 3. Dependence of the hydration numbers of cation  $K^+$  and anions  $Cl^-$ ,  $Br^-$ ,  $I^-$  on the radius of the corresponding ions

Table 1. The sum of numbers of hydration of potassium ions  $K^+$  and anions  $Cl^-$ ,  $Br^-$ ,  $I^-$  at temperature  $25^\circ C$

	$r_1 + r_2$	$h_1 + h_2$
$KCl$	319	23,7
$KBr$	334	24,2
$KJ$	358	37,3

Through  $h_1$ , the number of hydration of potassium ions is indicated, and through  $h_2$  - the number of hydration of  $Cl^-$ ,  $Br^-$ ,  $I^-$  anions, respectively. It can be seen that with the growth of the radii of the anions, the sum of the hydration numbers of the ions increases. If the number of hydration of cation (anion) ions is assumed to be the same in all cases, then the increase in the amount can be explained by the growth of the surface area of anions (cations) with the growth of their radii. Despite the identical charges of all anions (cations) in this case, the main role is played by the steric factor: with the growth of the radii of anions (cations), new positions for the placement of water molecules on the surface of the anion (cation) arise, and the number of hydration of anions (cations) increases in the following sequence:  $Cl^-$ ,  $Br^-$  and  $I^-$ . ( $H^+$ ,  $Li^+$ ,  $Na^+$ ,  $Cs^+$ )

**Table 2.** The sum of the numbers of hydration ions  $\text{Cl}^-$  and cations  $\text{H}^+$ ,  $\text{Li}^+$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Cs}^+$  at temperature

	$r_1+r_2$	$h_1+h_2$
HCl	233	13.3
LiCl	276	14
NaCl	295	16.3
CsCl	348	20

The influence of polyethylene glycol (PEG-6000) on the value ( $h_1+h_2$ ) for ions  $\text{K}^+$  and  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{K}^+$  and  $\text{Br}^-$  is studied further. The obtained results are shown in table 3 and 4.

**Table 3.** The sum of the numbers of hydration of anion  $\text{Cl}^-$  and cation  $\text{K}^+$  at temperature

Solvents	$h_1+h_2$
KCl+H <sub>2</sub> O	23.7
KCl+PEG(0,04 gr 39%)+ H <sub>2</sub> O	13.5
KCl+PEG(1.1gr 39%)+ H <sub>2</sub> O	5.8

**Table 4.** The sum of the hydration numbers of anion  $\text{Br}^-$  and cation  $\text{K}^+$  at temperature 25°C

Solvents	$h_1+h_2$
KBr+H <sub>2</sub> O	24,2
KBr+PEG(0,3gr)+ H <sub>2</sub> O	16,7
KBr+PEG(0,5gr)+ H <sub>2</sub> O	12,6

As follows from the table, when the polymer is introduced into the solution, the number of hydration ions decreases, which is apparently connected with the competing role of the PEG oxygen atom in the interaction with water molecules. As it follows from the obtained data, when polyethylene glycol is introduced into the studied solution due to the structuring of water under the influence of PEG, the number of free water molecules and the possibility of salt ion hydration decrease, which is accompanied by a decrease in the number of hydration of ions.

## REFERENCES

1. Masimov E.A. Abbasov Kh.F. Journal of Qafqaz University N23, 2008, str.59.
2. E. A. Masimov and H. F. Abbasov, Russian Journal of Physical Chemistry A, 2012, Vol. 86, No. 3, pp. 399–401.
3. E.A. Masimov and H.F. Abbasov, in Proceedings of the Conference on Chemical Thermodynamics, June 20 – July 6, 2007, p. 3S239.
4. J. Campbell, Chemical Systems (Freeman, New York, 1970; Mir, Moscow, 1975), Vol. 1.
5. G. B. Bokii, Crystallochemistry (Khimiya, Moscow, 1971) [in Russian].
6. A. Kh. Amirkhanov. B сб.; "Some questions of chemical technology and physical and chemical analysis". Tashkent, izd. AN Uz. USSR, 1963, p. 76-86.
7. Mähler, Johan; Persson, Ingmar (2 January 2012). "A Study of the Hydration of Alkali Metal Ions in Aqueous Solution". Inorganic Chemistry. 51 (1): 425–438. doi:10.1021/ic2018693. PMC 3250073. PMID 22168370.
8. Uchida, Tsutomu; Hirano, Takashi; Ebinuma, Takao; Narita, Hideo; Gohara, Kazutoshi; Mae, Shinji; Matsumoto, Ryo (1 December 1999). "Raman spectroscopic determination of hydration number of methane hydrates". AIChE Journal. 45 (12): 2641–2645. doi:10.1002/aic.690451220.
9. Rempe, Susan B.; Pratt, Lawrence R.; Hummer, Gerhard; Kress, Joel D.; Martin, Richard L.; Redondo, Antonio (February 1, 2000). "The Hydration Number of Li<sup>+</sup> in Liquid Water". Journal of the American Chemical Society. 122 (5): 966–967. arXiv:physics/0001011. doi:10.1021/ja9924750.
10. Werner, Eric J.; Avedano, Stefano; Botta, Mauro; Hay, Benjamin P.; Moore, Evan G.; Aime, Silvio; Raymond, Kenneth N. (1 February 2007). "Highly Soluble Tris-hydroxypyridonate Gd(III) Complexes with Increased Hydration Number, Fast Water Exchange, Slow Electronic Relaxation, and High Relaxivity". Journal of the American Chemical Society. 129 (7): 1870–1871. doi:10.1021/ja068026z. PMC 3188311. PMID 17260995.
11. Steven F.; Bowler, Christine E.; Stadterman, Laura L.; Koh, Carolyn A.; Sloan, E. Dendy (1 January 2006). "Direct Measurement of the Hydration Number of Aqueous Methane". Journal of the American Chemical Society. 128 (2): 414–415. doi:10.1021/ja055283f. PMID 16402820.
12. Smirnov, P. R.; Trostin, V. N. (1 December 2007). "Structures of the nearest surroundings of the K<sup>+</sup>, Rb<sup>+</sup>, and Cs<sup>+</sup> ions in aqueous solutions of their salts". Russian Journal of General Chemistry. 77 (12): 2101–2107. doi:10.1134/S1070363207120043.

IOT:546.72PACS: 72.80.Tm

## SYNTHESIS AND ELECTROPHYSICAL PROPERTIES OF THE (PbGa<sub>2</sub>S<sub>4</sub>)<sub>1-x</sub> (FeS)<sub>x</sub>, (PbIn<sub>2</sub>S<sub>4</sub>)<sub>1-x</sub> (FeS)<sub>x</sub> VƏ (In<sub>2</sub>S<sub>3</sub>)<sub>1-x</sub> (FePbIn<sub>4</sub>S<sub>8</sub>)<sub>x</sub> TYPE SOLUTIONS

HASANOVA U.A., MAMMADOV SH.H., BAKHTIYARLY I.B.

Institute of Catalysis and Inorganic Chemistry named after Academician M. Nagiev

inulviyya@mail.ru

**ABSTRACT**

During the tests of quasi-ternary systems FeS-Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub>(In<sub>2</sub>S<sub>3</sub>)-PbS, it was found that in the cross-sections FeS-PbGa<sub>2</sub>S<sub>4</sub> (PbIn<sub>2</sub>S<sub>4</sub>) and Fe PbIn<sub>4</sub>S<sub>8</sub>- In<sub>2</sub>S<sub>3</sub> a solid solution is formed in a limited time. The indicated solid solutions were synthesized by melting binary compounds obtained with the use of special pure elements at a temperature of 1250-1300K. Their electrical conductivity and temperature dependence of thermoelectric properties over a wide temperature range were investigated and found to be semiconductors.

**Keywords:** solid solution, synthesis, semiconductor, electrical conductivity, electromotive force.

**СИНТЕЗ И ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ**(PbGa<sub>2</sub>S<sub>4</sub>)<sub>1-x</sub> (FeS)<sub>x</sub>, (PbIn<sub>2</sub>S<sub>4</sub>)<sub>1-x</sub> (FeS)<sub>x</sub> И (In<sub>2</sub>S<sub>3</sub>)<sub>1-x</sub> (FePbIn<sub>4</sub>S<sub>8</sub>)<sub>x</sub>**РЕЗЮМЕ**

При исследовании квазитройных систем FeS-Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub>(In<sub>2</sub>S<sub>3</sub>)-PbS установлено, что в разрезах FeS-PbGa<sub>2</sub>S<sub>4</sub>(PbIn<sub>2</sub>S<sub>4</sub>) и FePbIn<sub>4</sub>S<sub>8</sub>-In<sub>2</sub>S<sub>3</sub> в ограниченном интервале по компонентам образуются твердый раствор. Указанные твердые растворы были синтезированы путем плавления полученных бинарных соединений с использованием особо чистых элементов при температуре 1250-1300К. Исследованы их электропроводность и температурная зависимость термоэлектрических свойств в широком интервале температур и установлено, что они являются полупроводниками.

**Ключевые слова:** твердый раствор, полупроводник, синтез, электропроводность, электродвигущая сила.

(PbGa<sub>2</sub>S<sub>4</sub>)<sub>1-x</sub> (FeS)<sub>x</sub>, (PbIn<sub>2</sub>S<sub>4</sub>)<sub>1-x</sub> (FeS)<sub>x</sub> VƏ (In<sub>2</sub>S<sub>3</sub>)<sub>1-x</sub> (FePbIn<sub>4</sub>S<sub>8</sub>)<sub>x</sub> TİPLİ BƏRK MƏHLULLARIN  
SİNTEZİ VƏ ELEKTROFİZİKİ XASSƏLƏRİ**XÜLASƏ**

FeS-Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub>(In<sub>2</sub>S<sub>3</sub>)-PbS kvaziüçlü sistemlərinin tədqiqi zamanı müəyyən edilmişdir ki, FeS- PbGa<sub>2</sub>S<sub>4</sub> (PbIn<sub>2</sub>S<sub>4</sub>) və Fe PbIn<sub>4</sub>S<sub>8</sub> - In<sub>2</sub>S<sub>3</sub> kəsiklərində komponentlər əsasında məhdud intervalda bərk məhlul əmələ gəlir. Göstərilən bərk məhlullar xüsusi təmiz elementlərdən istifadə etməklə alınmış binar birləşmələrin 1250-1300K temperaturda əridilməsindən sintez olunmuşdur. Onların geniş temperatur intervalında elektrik keçiriciliyinin və termo-ehq temperatur asılılıqları tədqiq olunmuşdur.

**Açar sözləri:** bərk məhlul , sintez, yarımkəciri, elektrik keçiriciliyi, termoelektrik hərəkət qüvvəsi.

It is known that the chalcogenide compounds of III B subgroup elements (S<sup>2-</sup>P<sup>5+</sup>) of the periodic system and the complex functional material obtained on their basis are always at the center of attention. [1-5] Especially In<sub>2</sub>S<sub>3</sub> and Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub> have high photosensitivity with high-temperature modification and are used. [ 6 ]. In recent decades, it has been established that the compound FeIn<sub>2</sub>S<sub>4</sub>, FeGa<sub>2</sub>S<sub>4</sub> as a semiconductor retaining magnetic ions in Heisenberg counters [7,8] and the PbGa<sub>2</sub>S<sub>4</sub> compound is a laser material [9] and has a potential field of application. Therefore, the investigation of electrophysical properties of (PbGa<sub>2</sub>S<sub>4</sub>)<sub>1-x</sub> (FeS)<sub>x</sub>, (PbIn<sub>2</sub>S<sub>4</sub>)<sub>1-x</sub> (FeS)<sub>x</sub> və (In<sub>2</sub>S<sub>3</sub>)<sub>1-x</sub> FePbIn<sub>4</sub>S<sub>8/x</sub> type solid solutions is very important.

It should be noted that the indicated fixed solutions were previously discovered during the research of the respective systems. Solid solutions were obtained by melting double sulfides in a quartz ampoule with a length of 1 = 15-18 cm and a diameter of 105 m. The maximum temperature of the synthesis was 1250-1300K.

After the end of the synthesis, the temperature was gradually lowered to 500-600K and homogenized in this mode for 720 hours. The homogeneity of the samples was checked by microstructure and X-ray phase analysis methods.

The samples were placed in a cylindrical shape and were examined for some of their electrophysical properties.

### **THE OBTAINED RESULTS AND DISCUSSION**

It is known that solid solutions obtained on the basis of defective structures and compounds occupy a very important place among the materials that currently attract attention. The point is that on the basis of such compounds, the formation of the surface of the solid solution and the properties depending on the composition can be largely controlled. In particular, it is of interest to study the effect of transition elements on the electrophysical properties of defect structures and solid solutions.

During the study of highly doped crystals of compounds of type  $B_2^{m\text{m}}C_3^{\text{VI}}$ , it was found by many scientists that the additions of the elements S-<sub>1</sub>, p-element additives, as well as d- and f- orbitals have little effect on the electrical properties of these compounds.

From this point of view, transition elements with an incomplete d-orbit can be more electroactive components. Thus, in addition to creating an additional additive level in the energy spectrum, they can increase the electrical conductivity of the semiconductor by covering (shielding) the wave function of the d- orbit.

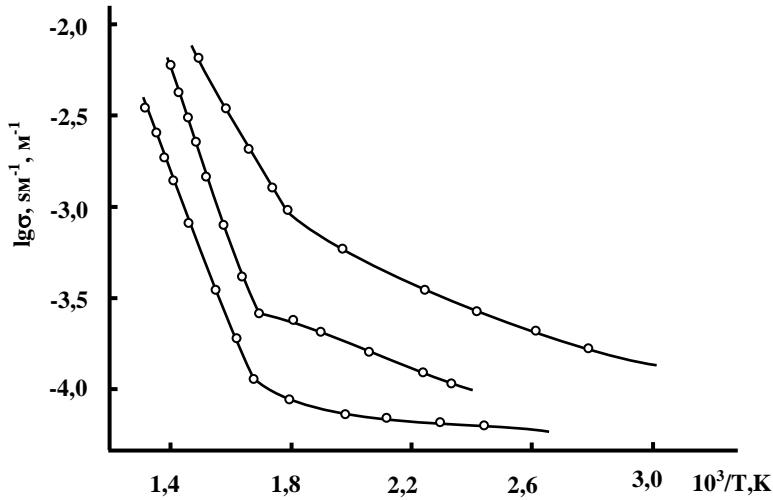
With an increase in the concentration of transition elements in a substance, the degree of shielding and, accordingly, its role in conductivity also increases sharply.

Figures 1 and 2 show the temperature dependence electrical conductivity and the temperature of the e.m.f. according to the  $FeS_x$ ,  $(PbIn_2S_4)_{1-x}$  type solid solutions. The specific electrical conductivity of the alloy containing 5 md FeS at room temperature was found to be four times higher than  $Ga_2S_3$  and  $PbGa_2S_4$ .

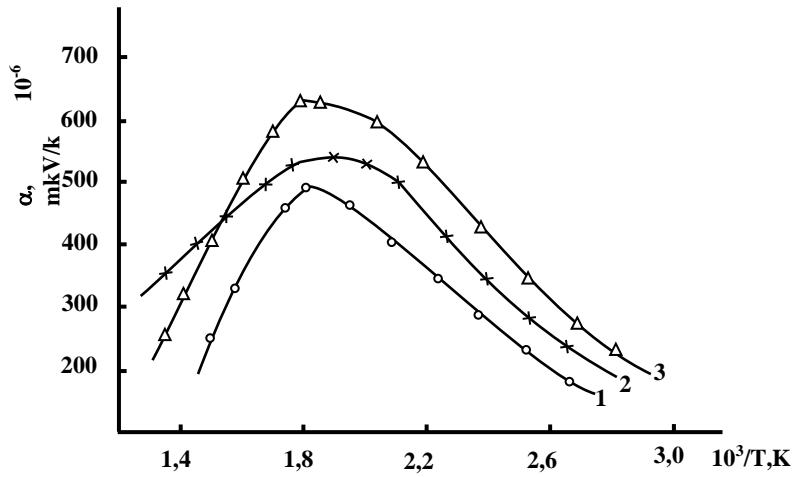
The observed break in the  $lg\sigma \sim f(1/T)$  dependence indicates the beginning of the specific conductivity area and, as can be seen, it shifts towards the low-temperature area with increasing concentration of iron monosulfide in the alloy. For instance, depending on the electrical conductivity temperature of an alloy containing 2 mol% FeS, the transition from the additional conductivity zone to the specific conduction zone takes place at 580 K, while in an alloy containing 5 mol% FeS, the transition to a specific zone takes place at 550 K.

As the conductivity area approaches, the  $lg\sigma \sim f(1/T)$  curves become linear. All the alloys in the additive zone were found to be p-type semiconductors. The reason for the formation of mainly acceptor levels in all alloys, in our opinion, since the 3d level in iron is less stable than the 3d5 level and, occurs by donating valence electrons for forming a stable 3d5 level.

In this case, 3d5 electrons actively participate in the conduction process, by forming acceptor levels. With the increase in the amount of FeS, the width of the thermally barred zone decreases and reaches  $\Delta E = 2.17$  eV in a solid solution containing 5 mol% FeS.



**Figure 1.** Temperature dependence of the electrical conductivity of  $(\text{FeS})_x(\text{PbGa}_2\text{S}_4)_{1-x}$  alloys:  
1-2 mol.% FeS, 2-3 mol.% FeS; 3-5 mol.% FeS



**Figure 2.** Temperature dependence of thermo e.m.f. of  $(\text{FeS})_x(\text{PbGa}_2\text{S}_4)_{1-x}$  alloys:  
1-2 mol.% FeS, 2-3 mol.% FeS; 3-5 mol.% FeS

Due to the high electrical resistance of the samples, it was possible to determine the value of the thermal electromotive force (e.m.f.) coefficient of homogeneous solid solutions only at temperatures higher than 450 K. Above this temperature, the thermo e.m.f. increases sharply with temperature and at 550 K it becomes 650 mV/K.

Up to the area of specific conductivity,  $\alpha$  (thermo e.m.f. coefficient) increases sharply, and with a subsequent increase in temperature, it decreases regularly. Such a temperature dependence of the thermo e.m.f. the coefficient can be explained by the fact that the alloys have a complex structure.

The temperature dependence of eutectic conductivity shown in Figure 3 shows that  $(\text{In}_2\text{S}_3)_{1-x}(\text{FePbIn}_4\text{S}_8)_x$  solid solutions formed on the basis of the  $\beta$ - $\text{In}_2\text{S}_3$  modification are semiconductors. As can be seen from the figure, the specific conductivity starts at a temperature of 500-550 K. In a relatively low-temperature range (up to 370 K), the temperature dependence of the electrical conductivity of the samples varies non-linearly

depending on the composition.

The change in electrical conductivity depending on the temperature in the temperature range of 300–550 K is determined both by the nature and concentration of controlled additives and by uncontrolled additives. This situation is also observed in the temperature dependence of the thermo e.m.f. of  $(\text{In}_2\text{S}_3)_{1-x}(\text{FePbIn}_4\text{S}_8)_x$  solid solutions.

The thermo e.m.f. rapidly changes depending on the temperature as it approaches the specific conductivity area (figure 4). At 480 K, the thermo e.m.f. coefficient of alloys containing 1.5 and 10 mol %  $\text{FePbIn}_4\text{S}_8$ , maximum (480 and  $620\text{--}800 \cdot 10^{-6}$  mV/K) in combination with  $\text{FePbIn}_4\text{S}_8$  and at 560 K. In other words, as the amount of  $\text{FePbIn}_4\text{S}_8$  in the alloy increases,  $\alpha$  takes its maximum value (increase).

It is known that divalent iron, due to its crystallochemical properties, is mainly located in the octahedral state of its crystal structure. In  $(\text{In}_2\text{S}_3)_{1-x}(\text{FePbIn}_4\text{S}_8)_x$  alloys, the occupation of the tetrahedral spaces of the  $\beta$ - $\text{In}_2\text{S}_3$  spinel block by iron ions occurs only through a partial electron transition  $\text{Fe}^{2+} \rightarrow \text{Fe}^{3+} + \bar{e}$ .

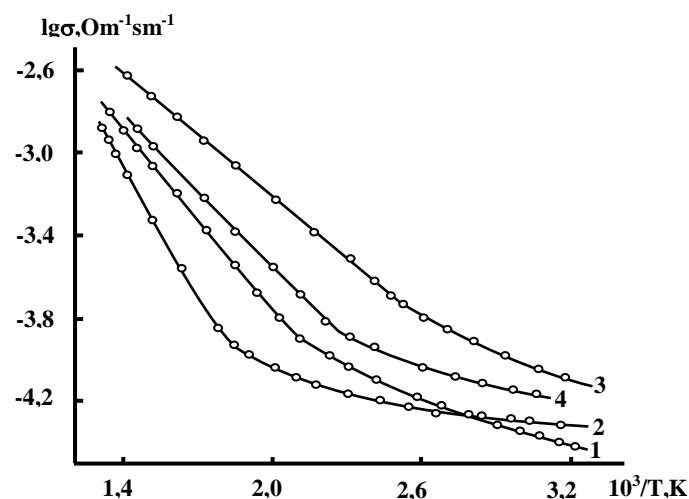


Figure 3. Temperature dependence of thermo e.m.f. of  $(\text{In}_2\text{S}_3)_{1-x}(\text{FePbIn}_4\text{S}_8)_x$  alloys:  
1-x=0,01;2-x=0,05; 3-x=0,1;4- $\text{FePbIn}_4\text{S}_8$

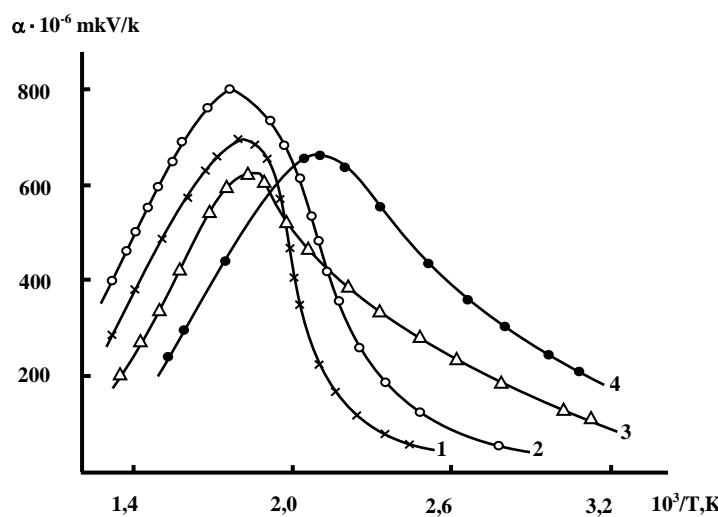


Figure 4. Temperature dependence of thermo e.m.f. of  $(\text{In}_2\text{S}_3)_{1-x}(\text{FePbIn}_4\text{S}_8)_x$  alloys:  
1-x=0,01;2-x=0,05; 3-x=0,1;4- $\text{FePbIn}_4\text{S}_8$

In the indicated hypothesis, the increase in the value of the electrical conductivity of the alloys from the solid solution field as compared to  $In_2S_3$  can occur as a result of the increase in free charge carriers formed during the transition of iron ions valence electrons. However, we did not find any rapid increase in the specific electrical conductivity during the testing of solid solution samples, in other words, the specific resistance of alloys in the area of solid solutions takes a high value, close to the specific resistance of the  $In_2S_3$  compound ( $\sim 10^4\text{-}10^5 \text{ Om}\cdot\text{m}$ ) [176].

We thank the head of the department of AzTU, Professor E. Godzhaev, for his help in measuring the electrophysical properties.

**REFERENCES**

1. Camille Y. Yones, Jimmil G. Edwards. Observation of a phase transformation of  $\text{Ga}_2\text{S}_3$  in a quartz effusion cell above 1230 K by means of neutron scattering // J.Phys.chem.B, 2001, vol.105. pp.2718-2724.
2. Медведева З.С. Халькогениды элементов III Б подгруппы Периодической системы. М.: Наука, 1968, 215 с.
3. Miller A.R., Searcy A.W. Thermodynamic stabilities as a functional for indium sulfide phases from mass spectrometer intensity time date // J.Phys.chem.1965, vol.69, № 11, p.3826-3832.
4. Бадиков Д., Бадиков Б., Дорошенко І., Финтисова Ф. и др. Новый низкофононный кристалл тиогаллата свинца в качестве матрицы для лазеров среднего ИК-диапазона // Фотоника, 2008, № 4, с. 24-27.
5. Duffin W.J., Hogg J.H. Crystalline phase in the system In<sub>2</sub>&In<sub>2</sub>S<sub>3</sub>// Acta crystallogr. 1966, vol. 20, № 4, p. 566-569.
6. Achwold W., Hovrbeke G. On the conduction mechanism in single crystal  $\beta$ -indium sulfidic In<sub>2</sub>S<sub>3</sub> // J. Phys. Chem. Solids. 1965, vol.26, №8, p.1319-1324
7. Nakatsuji S., Tonomura H., Onuma K. et al. Spin dis-order and order in quasi- 2D triangular Heisenberg antiferromagnetics: comparative study of FeGa<sub>2</sub>S<sub>4</sub>, FeGa<sub>2</sub>S<sub>5</sub> and NiGa<sub>2</sub>S<sub>4</sub>. <http://Phys. Rev. letters>, 2007, vol. 99, № 1-4, p. 157-203.
8. Rushcanski K.Z., Haeuseler H., Bercha D.M. Band structure calculations on the layered compounds FeGa<sub>2</sub>S<sub>4</sub> and NiGa<sub>2</sub>S<sub>4</sub>.// Phys. Chem. Solids, 2002, vol. 63, № 11, pp. 2019-2028.
9. Laser Materials and Technologies Res. Center of general physics Institute RAS. Final report, contact no EOARD F61775-99-WE033, 2000.
10. Медведева С.А. Введение в технологию полупроводниковых материалов М.: высшая школа, 1970, 504 с.

## 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](mailto: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., Godjayev 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 John Geankoplis. *Transport Processes and Separation Process Principles*. Fourth Edition, Prentice Hall, p.386-398, 2002
- c) **Conference paper:** Sadychov F.S., Aydin C., Ahmedov A.I.. 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- əvvəller nəşr olunmamış orijinal əsərləri və müəllifin tədqiqat sahəsi üzrə yazılmış icmal məqalələri qəbul edir.
2. Məqalələr İngilis dilində qəbul edilir.
3. Yazilar Microsoft Word yazı programında, ([journal@beu.edu.az](mailto:journal@beu.edu.az)) ünvanına göndərilməlidir. 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 hərfə 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. Açıq sözlər uyğun xülasələrin sonunda onun yazıldığı dildə verilməklə ən azı üç sözdən ibarət olmalıdır.
6. Məqalədə UOT və PACS kodları göstərilməlidir.
7. Məqalə aşağıdakılardan ibarət olmalıdır:
  - Giriş,
  - Tədqiqat metodu
  - Tədqiqat işinin müzakirəsi və onun nəticələri,
  - İstinad ədəbiyyatı rus dilində olduğu halda orjinal dili mötərzə içərisində göstərməklə yalnız Latin 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 cədvəlin üstündə yazılmalıdır.
9. **Mənbələr** mətn içərisində kvadrat mötərizə daxilində göstərilməklə məqalənin sonunda mətn daxilindəki sıra ilə düzülməlidir. Eyni mənbəyə iki və daha çox istinad edildikdə əvvəlki sıra sayı saxlanmaqla müvafiq səhifələr göstərilməlidir. Məsələn: [7,səh.15].

Ədəbiyyat siyahısında verilən hər bir istinad haqqında məlumat tam və dəqiq olmalıdır. İstinad olunan mənbənin bibliografiya 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 tezisin adı göstərilməlidir.

### Nümunələr:

- a) **Məqalə:** Demukhamedova S.D., Aliyeva İ.N., Godjayev N.M.. *Spatial and electronic structure af 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., Aydin 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:** üstdən 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 məqallə ən azı iki ekspertə göndərilir.
  - Ekspertlərin tövsiyələrini nəzərə almaq üçün məqalə müəllifə göndərilir.
  - Məqalə, ekspertlərin tənqidini 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 alanının-da yazılmış derleme makaleleri kabul etmektedir.
2. Makaleler İngilizce kabul edilir.
3. Makaleler Microsoft Word yazı programında, ([journal@beu.edu.az](mailto:journal@beu.edu.az)) adresine gönderilmelidir. Gönderilen makalelerde şunlar dikkate alınmalıdır:
  - Makalenin başlığı, yazarın adı, soyadı,
  - İş yeri,
  - E-posta adresi,
  - Özeti ve anahtar kelimeler.
4. **Özet** 100-150 kelime arasında olup 9 font büyüğünde, 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 orjinal dili parantez içerisinde göstermekle yalnız Latin alfabesi ile verilmelidir.
7. **Şekil, Resim, Grafik ve Tablolar** baskında düzgün çıkacak nitelikte ve metin içerisinde olmalıdır. Şekil, Resim ve grafiklerin yazıları onların alt kısmında yer almmalıdır. 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, seh.15]. Referans verilen her bir kaynağın künnesi tam ve kesin olmalıdır. Referans gösterilen kaynağın türü de eserin türüne (monografi, derslik, ilmî makale vs.) uygun olarak verilmelidir. İlmi makalelere, sempozyum, ve konferanslara müracaat ederken makalenin, bildirinin veya bildiri özetlerinin adı da gösterilmelidir.

### Örnekler:

- a) **Makale:** Demukhamedova S.D., Aliyeva İ.N., Godjayev N.M.. *Spatial and Electronic Structure of Monomerik and Dimeric Conapeetes of Carnosine Üith Zinc*, Journal of Structural Chemistry, Vol.51, No.5, p.824-832, 2010
- b) **Kitap:** Christie John Geankoplis. *Transport Processes and Separation Process Principles*. Fourth Edition, Prentice Hall, p.386-398, 2002
- c) **Kongre:** Sadychov F.S., Aydin 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 ölçülerı;** üst: 2.8 cm, alt: 2.8 cm, sol: 2.5 cm, sağ: 2.5 cm şeklinde olmalıdır. Metin 11 punto büyütükte **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 gönderebilir.
12. Makalenin yayına sunusu 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 alınından sonra Derginin Yayın Kurulu tarafından yayına sunulabilir.
13. Azerbaycan dışından gönderilen ve yayımlanacak olan makaleler için,(derginin kendilerine gönderilmesi zamanı 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](mailto: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., 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) **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. Appligation of Information-Communication Nechnologies in Science and education. II International Conference. "Higher Twist Effects In Photon-Proton Collision", Bakı,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 посыпается не менее двум экспертом.
  - Статья посыпается автору для учета замечаний экспертов.
  - Статья, после того, как автор учел замечания экспертов, редакционной коллегией журнала может быть рекомендована к печати.