



UDK:537.632;539.1

**Akhatqul ISLAMOV,**

Senior Research Fellow, Institute of Nuclear Physics, Academy of Sciences of Uzbekistan.

Email: ramvild@gmail.com

**Ramil VILDANOV,**

Associate Professor of the National University of Uzbekistan

Email: ramvild@gmail.com

**Jasur KHUDOYQULOV,**

Master's degree from the National University of Uzbekistan

Email: ramvild@gmail.com

Ионон плазма ва лазерли технологиялар институти Лоборатория мудири, .ф-м ф.д. Пайзиев Ш тақризи асосида

### NEUTRON-INDUCED CENTERS IN A LuAG:Pr SINGLE CRYSTAL

Abstract

The absorption and gamma-luminescence spectra and thermal stimulated luminescence of pure LuAG and activated by praseodymium LuAG:Pr crystals before and after irradiation with fast neutrons have been investigated to study the effect of neutron-induced color centers on the optical features of a single crystal. The results of thermal and photo influence on neutron-induced color centers and subsequent gamma irradiation allow suggesting that the color centers are competitors to the activator  $\text{Pr}^{3+}$  center, leading to decreasing luminescence as a result of charge transfer.

**Key words:** neutron irradiation; color centers in LuAG; gamma-luminescence; thermoluminescence; photo fading.

PACS: 29.40.Mc, 42.70.-a.

### НЕЙТРОННО-ИНДУЦИРОВАННЫЕ ЦЕНТРЫ В МОНОКРИСТАЛЛЕ LuAG: Pr

Аннотация

Были исследованы спектры поглощения, гамма-люминесценции, а также термостимулированная люминесценция чистого LuAG и активированного празеодимом LuAG:Pr кристаллов до и после облучения быстрыми нейтронами для изучения влияния нейтронно-индуцированных центров окраски на оптические характеристики монокристалла. Результаты термо- и фото-воздействия на нейтронно-индуцированные центры окраски и последующее гамма-облучение позволяют предположить, что центры окраски являются конкурентами активаторным  $\text{Pr}^{3+}$  центрам что приводит к уменьшению люминесценции в результате переноса заряда.

**Ключевые слова:** нейтронное облучение; центры окраски в LuAG; гамма-люминесценция; термолуминесценция; фото обесцвечивание, PACS: 29.40.Mc, 42.70.-a.

### LUAG: PR KRISTALIDA NEYTRON-INDUKSIYALANGAN MARKAZLAR

Annotatsiya

Neytron-induksialangan rang markazlarining monokristalning optik xususiyatlariga ta'sirini o'rganish uchun sof LuAG va praseodim bilan faollashtirilgan LuAG:Pr kristallarining tez neytronlar bilan nurlanishdan oldin va keyin absorbsiya va gamma-luminesans spektrlari va termal stimulyatsiya luminesansi o'rganildi. Neytron-induksialangan rang markazlariga issiqlik va foto ta'sirining va keyingi gamma-nurlatishining natijalari, rang markazlari  $\text{Pr}^{3+}$  aktivatori markazining uchun raqobatchilar bo'lib zaryadni uzatish natijasida luminesansni kamaytirishga olib keladi.

**Kalit so'zlar:** neytron nurlanishi; LuAGdagi rang markazlari; gamma-luminesans; termoluminesans; fotota'sirda rang yo'qotish. PACS: 29.40.Mc, 42.70.-a.

**Introduction.** Scintillation materials are a part of devices intended for detecting high-energy radiation, gamma quanta, accelerated charged particles and neutrons [1,2]. The study of new particles in high-energy physics involves the use of appropriate scintillation sensors. The criteria for them are effectiveness of radiation-induced luminescence, response speed, good energy resolution and radiation resistance for the radiation doses to be used [3]. Single crystals of aluminum lutetium garnet  $\text{Lu}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$  (LuAG) activated by the praseodymium ions  $\text{Pr}^{3+}$  (LuAG:Pr) attract great attention for use in scintillators as crystalline plates or fibers [4,5] owing to their high density ( $6.7 \text{ g/cm}^3$ ), high speed ( $\sim 20 \text{ ns}$ ) and high light yield ( $\sim 20,000 \text{ ph/MeV}$ ) thrice exceeding that of  $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$  (BGO) [6,7]. However, for their practical use, it is necessary to study their optical radiation stability, i.e. the maintenance of optical and luminescent characteristics under radiation action. Over the ultraviolet and visible spectral ranges the optical transparency degradation of nominally pure LuAG and LuAG:Pr after irradiation with gamma-ray quanta ( $\gamma$ ) to  $10^6 \text{ Gy}$  due to the appearance of defects associated with color centers has been shown [1,8,9]. Moreover, a decrease in the light yield (11%) in LuAG:Pr after irradiation with  $^{60}\text{Co}$   $\gamma$ -quanta with a dose of  $100 \text{ Gy}$  and a decrease in the intensity of the activator luminescence of  $\text{Pr}^{3+}$  in the  $310 \text{ nm}$  band ( $4.0 \text{ eV}$ ) ( $\sim 9\%$ ) under the  $\gamma$  dose up to  $1.3 \cdot 10^3 \text{ Gy}$  were shown in [10], which is caused by localization of charge carriers on impurities and intrinsic defects with formation of capture centers [11]. In contrast, neutron irradiation can form color centers (captured charge carriers in deep traps) manifesting themselves as additional absorption bands within the transparency range of crystal. It was shown that the intensity of neutron-induced color centers in the crystals of yttrium aluminum garnet  $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$  (YAG) with characteristic absorption bands of  $250, 310, 375$  and  $500 \text{ nm}$  monotonically increases with the raise in fast neutron fluence [12-14], which is associated with formation of additional structural

defects. The test measurements for LuAG:Pr after irradiation with a neutron fluence of  $10^{12}$  cm $^{-2}$  showed a 36% decrease in the light yield [10].

To study the effect of neutron irradiation on activator luminescence in LuAG:Pr, we investigated the optical properties of LuAG and LuAG:Pr crystals before and after irradiation with neutron fluxes, thermo and photo discoloration of induced defects, which allowed us to make a sequential analysis of changes in activator luminescence under the action of neutron-induced color centers.

**Materials and methods.** The samples of single crystals of nominally pure LuAG and LuAG:Pr $^{3+}$  activated by praseodymium ions (the Pr concentration 0.22 mol.%) were grown by the Czochralski method in an argon atmosphere (Furukawa Co. Ltd, Japan). For optical studies, the plates of  $4 \times 4$  mm $^2$  in size and 1 mm in thickness were prepared.

The samples were irradiated with mixed gamma-ray fluxes in a 10 MWt VVR-SM reactor at the Institute of Nuclear Physics of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan (INP).

The reactor provided a neutron flux of  $10^{14}$  cm $^{-2}$ ·s $^{-1}$  within a wide energy range, a  $\gamma$ -quantum flux of 37 Gy/s·cm $^2$  with energy of 0.1-7 MeV. The samples were wrapped in an aluminum foil and placed in a cadmium glass with a wall thickness of 1 mm to transmit only fast neutrons with energy  $> 0.1$  MeV. The glass was sealed in a quartz ampoule that was placed in a standard aluminum container filled with distilled water. The neutron flux incident on the samples was determined from the induced radioactivity of a monitor placed next to it with the threshold energy  $E > 2.4$  MeV and amounted to  $3 \cdot 10^{13}$  cm $^{-2}$ ·s $^{-1}$  [15]. Four containers with the samples were irradiated with fast neutron fluences of  $10^{15}$ ,  $10^{16}$ ,  $5 \cdot 10^{16}$  and  $10^{17}$  cm $^{-2}$ .

In order to recharge the neutron-induced centers after thermoluminescence up to 600 K, gamma irradiation was carried out at a temperature of 310 K with a dose of  $10^3$  Gy from a  $^{60}\text{Co}$  source with the average energy of  $\gamma$ -quanta 1.17 and 1.33 MeV and the power 0.8 Gy/s at INP. For the losses from the dark tunnel charge transfer between traps to be reduced, the time elapsed from the gamma irradiation completion to the start of optical measurements did not exceed 5 min.

For photo-discoloration of the neutron-irradiated samples, the mercury lamp (SVD-120A) lines selected by an MDR-12 monochromator were used to make estimation of contributions of various induced color centers.

The spectra of optical absorption (OA) before and after irradiation were measured at room temperature 305 K with spectrophotometers SF-56 (LOMO) and LAMBDA-35 (PerkinElmer) within the spectral range 190–1100 nm.

The gamma-luminescence (GL) spectra were recorded for temperature 310 K with the use of a special diffraction monochromator MSD-1 with PMT-39 within the spectral range 200–550 nm. The GL spectra were scanned at the maximally possible scan rate 20 nm/s for the accumulated dose none-exceeding 12 Gy.

The integral peaks of thermoluminescence (TL) were recorded using an FEU-79 at a constant heating rate of 0.25 K/s within the temperature range 300–605 K under the control of a chromel-kopel thermocouple. The spectral composition of the TL peaks, i.e. thermoluminescence (TL), was measured within the range 250–450 nm (Pr $^{3+}$  luminescence and intrinsic defects in the matrix) by the MSD-1 with the scan rate 20 nm/s in the uninterrupted mode. In this case, for the spectrum scanning time of 10 s within the range 250–450 nm the temperature increased by 2.5 K, which was less than the half-width of the TL peak and could not significantly affect the spectrum.

**Results and discussion.** The spectral dependences of the absorption coefficient  $\alpha$  of a nominally pure LuAG single crystal are presented in Fig. 1(a) before (curve 1) and after (curve 2, fast neutron fluences  $10^{16}$  cm $^{-2}$  and curve 3, fast neutron fluences  $10^{17}$  cm $^{-2}$ ) irradiation.

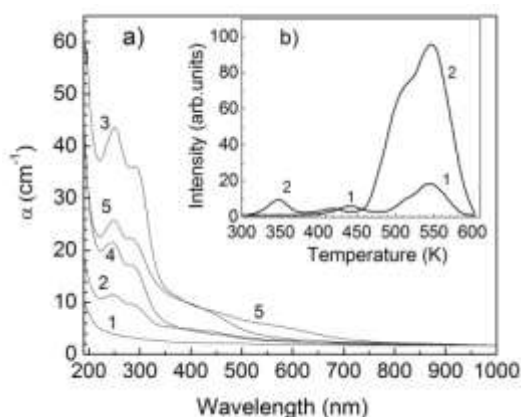


Figure 1: The absorption spectra of nominally pure single crystal LuAG: a) initial (1), after the neutron fluences  $10^{16}$  (2) and  $10^{17}$  cm $^{-2}$  (3), after measurements of the integral curves of thermoluminescence up to 605 K after irradiation with the fluence  $10^{17}$  cm $^{-2}$  (4), after additional gamma irradiation with the dose  $10^3$  Gy (5). Inset: thermoluminescence curves after irradiation with the fluence  $10^{17}$  cm $^{-2}$  (1) and after only gamma irradiation with the dose  $10^3$  Gy (2)

It can be seen that with the raise in neutron fluence up to  $10^{17}$  cm $^{-2}$  the maxima of the 250, 295, 390 and 570 nm bands grow rapidly, which indicates the additional formation of color centers and the increase in their concentration as compared, for example, with ionizing  $\gamma$ -radiation [1, 8, 9].

Absorption spectrum of LuAG after exposure to fast neutron fluence  $10^{17}$  cm $^{-2}$  (Fig. 1 (a), curve 3) was decomposed into 5 Gaussians (G1-G5) as shown in Fig. 2, their parameters are listed in Table 1.

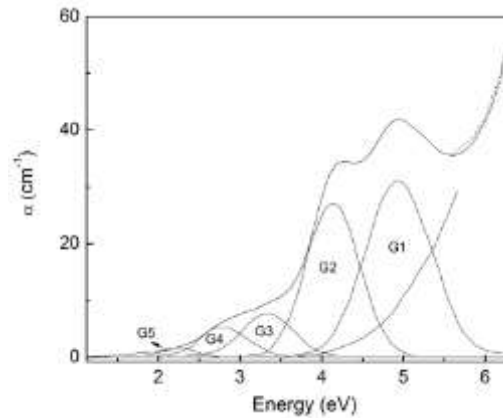


Figure 2: Absorption spectrum of LuAG crystal after neutron fluence  $10^{17} \text{ cm}^{-2}$  (solid curve), its Gaussian components (G1, G2, G3, G4, G5) and their sum (dotted curve).

Table 1

Parameters of spectral decomposition of optical absorption curve.

Gaussian #	Energy, eV	Wavelength, nm	FWHM, eV
LuAG after neutron fluence $10^{17} \text{ cm}^{-2}$			
G1	2.17	570	0.48
G2	2.7	458	0.75
G3	3.2	387	0.80
G4	4.15	298	0.77
G5	4.95	250	0.90
LuAG:Pr after neutron fluence $10^{17} \text{ cm}^{-2}$			
G1	2.16	573	0.49
G2	2.7	458	0.75
G3	3.2	387	0.80

According to [16], in the YAG crystal the 1 MeV neutrons transfer the average energy of  $\sim 220$  keV to oxygen atoms and  $\sim 138$  keV to aluminum atoms, which is much more than the threshold energy:  $\text{Ed(O)} = 40$  eV,  $\text{Ed(Al)} = 56$  eV,  $\text{Ed(Y)} = 66$  eV [17]. In this case, in the YAG spectra of optical absorption there is a number of the 250, 300, 375 and 500 nm bands and a monotonic increase in their intensity with the raise in fluence up to  $10^{16}$ - $10^{19} \text{ cm}^{-2}$  are observed, which is explained by formation of intrinsic defects of the F-center type (an anion vacancy capturing two electrons), hole  $\text{O}^-$ -center and  $\text{F}^+$ -center (an anion vacancy capturing one electron) [12,13,16,18]. The 250, 295 and 390 nm OA bands observed in the LuAG crystal after the neutron fluence up to  $10^{17} \text{ cm}^{-2}$  (Fig. 1(a), curves 2 and 3) coincide with the data presented in [12, 14, 16] for YAG. However, unlike the YAG crystal where the 500 nm band exists, the 570 nm band is observed in the LuAG crystal, but their nature is not discussed.

By analogy with YAG, the neutron-induced color centers in LuAG are associated with displacement defects in the oxygen and aluminum sublattices. In the band gap these defects form the energy levels where electrons and holes can be localized; their release can lead to light emission, i.e., thermal discoloration of induced color centers. For the thermal release to be verified in the LuAG crystal irradiated with the highest fast neutron fluence of  $10^{17} \text{ cm}^{-2}$ , the TL spectra were measured within the temperature range from 300 to 605 K (Fig. 1(b), curve 1). Here, the TL peaks are visible in the range 445, 515, and 545 K. For the sample irradiated with only  $^{60}\text{Co}$   $\gamma$ -quanta with the dose  $10^3$  Gy, the 445 K peak is not visible (Fig. 1(b), curve 2), which is also confirmed in [9,19]. This can be associated with creating an additional local level responsible for TL at 445 K. Moreover, the intensities of the TL peaks for 515 and 545 K in LuAG irradiated only with neutrons are about 5 times less than those of the same peaks for irradiation with only  $^{60}\text{Co}$   $\gamma$ -quanta. The reasons for this are associated with strong coloring (300-400 nm) of the LuAG sample after neutron-gamma irradiation (Fig. 1(a), curve 3).

After TL measurements within the temperature range 300-605 K for the sample irradiated with the neutron fluence  $10^{17} \text{ cm}^{-2}$ , a  $\sim 50\%$  decrease in the maxima of the 250, 295 and 390 nm bands is observed in the OA spectrum, while the 570 nm band is practically not observed (Fig. 1(a), curve 4). This can be associated with thermal release of charges from traps and their recombination with carriers of the opposite sign at other centers that cause the TL peaks (Fig. 1(b), curve 1). In this case, the neutron-generated defects where charge localization is possible can remain. Then, under subsequent irradiation of this sample with  $^{60}\text{Co}$   $\gamma$ -quanta, the color centers similar to those observed after irradiation with fast neutrons accompanied by a gamma-ray flux (Fig. 1(a), curve 3) should be filled with carriers. For this, the sample irradiated with the neutron flux  $10^{17} \text{ cm}^{-2}$  and heated up to 605 K was then irradiated with  $^{60}\text{Co}$   $\gamma$ -quanta with the dose  $10^3$  Gy; after that the following was observed in the OA spectrum (Fig. 1(a), curve 5): an absorption increase in the 250 and 295 nm band, restoration to the previous value of the 390 nm band and growth of the 570 nm band, as compared to the (curve 3) state. The effect of  $\gamma$ -irradiation is the charging of both existing traps (radiation defects) [8, 9] and defects induced by neutron irradiation (curve 5). In this case, the OA increase in the

570 nm band is apparently due to the fact that under prolonged reactor irradiation (for 6 years), the defects associated with the 570 nm OA band are partially empty.

Similar studies were carried out with the LuAG:Pr single crystals activated by praseodymium ions before and after irradiation with fast neutrons. The LuAG:Pr single crystal is a scintillation material with activator luminescence of Pr<sup>3+</sup> in the 310, 325 and 375 nm bands associated with the d→f transitions [6,7,10].

The optical absorption spectra of the LuAG:Pr samples before and after irradiation with fast neutrons are presented in Fig. 3(a).

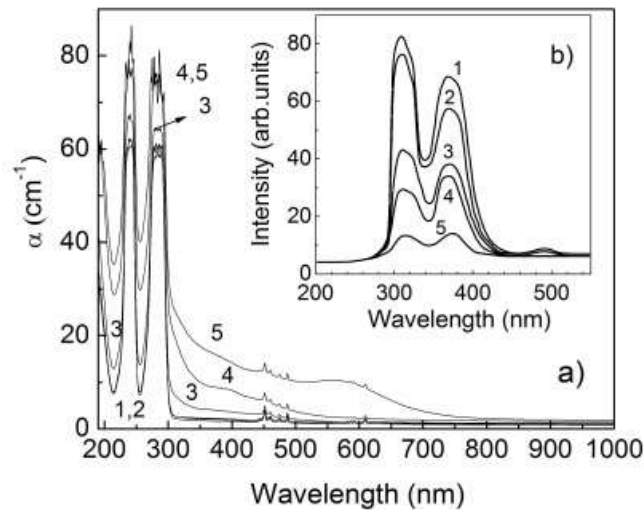


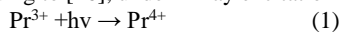
Figure 3: The spectra of absorption (a) and gamma-luminescence (b) of activated LuAG:Pr single crystals: initial (1), after the neutron fluence  $10^{15}$  (2),  $10^{16}$  (3),  $5 \cdot 10^{16}$  (4) and  $10^{17}$  cm<sup>-2</sup> (5)

In the OA spectra of the initial sample (curve 1) and that irradiated with the  $10^{15}$  cm<sup>-2</sup> neutron fluence (curve 2) the known bands of the Pr<sup>3+</sup> ion are observed within the 240 and 285 nm range of the 4f→5d transitions, as well as the multiplet bands within the 450-490 and 580-610 nm range of the 4f→4f transitions. With the raise in the neutron fluence up to  $10^{16}$  (curve 3) and  $5 \cdot 10^{16}$  cm<sup>-2</sup> (curve 4), the absorption coefficient for the 240 and 285 nm bands increases. For these bands, under irradiation with the fluence of  $\geq 5 \cdot 10^{16}$  cm<sup>-2</sup> (curves 4 and 5), the absorption coefficient  $\alpha \geq 75$  cm<sup>-1</sup> (for the sample thickness 0.1 cm) reaches the transmittance measurement limit. This increase is apparently due to strong overlap with the 250 and 295 nm OA bands observed in nominally pure LuAG, which intensity also increases with neutron fluence growth (Fig. 1(a), curves 2 and 3).

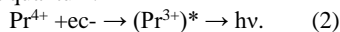
Within the visible spectral range, the intensity of the 390 nm OA band observed for the neutron fluence  $\geq 10^{16}$  cm<sup>-2</sup> and the wide 570 nm band for the fluences  $\geq 5 \cdot 10^{16}$  cm<sup>-2</sup> (Fig. 3 (a), curves 3, 4 and 5) grows as in the case of the pure LuAG sample (Fig. 1 (a), curves 2 and 3). It is interesting that for the fluence  $5 \cdot 10^{16}$  cm<sup>-2</sup> the both samples became yellow-brown and this color is intensified for  $10^{17}$  cm<sup>-2</sup> as in the YAG crystal irradiated up to  $4.1 \cdot 10^{18}$  cm<sup>-2</sup> [14] and in YAG:Pr additionally doped with the Mg<sup>2+</sup> ions after heat treatment to 1200°C in air [20]. Yellow-brown coloring with a characteristic absorption within the range 300-600 nm is associated with the charge transfer transition of Pr<sup>4+</sup> (a transition from the oxygen ligand to Pr<sup>4+</sup>) in the LuAG matrix additionally doped with Mg<sup>2+</sup> and annealed in air: ceramics over the range of 700-1500°C [21] and a single crystal at 1200°C [22]. As a result, it turned out that additional Mg doping and annealing led to a decrease in the light yield.

From the data in Figs. 1(a) and 2(a), it can be seen that regardless of the presence of the Pr<sup>3+</sup> ion in the LuAG crystal, neutron irradiation with the fluence  $>10^{16}$  cm<sup>-2</sup> causes yellow-brown coloring and appearance of the 390 nm OA band of the F<sup>-</sup>-center and the 570 nm band due to structural displacement defects in the oxygen and aluminum sublattices. The induced 570 nm OA band can be associated with an oxygen vacancy near the uncontrolled impurity cation V0(Cimp).

Under excitation by the <sup>60</sup>Co  $\gamma$ -quanta of the initial LuAG:Pr sample, the 310, 325 and 375 nm luminescence bands of the activator Pr<sup>3+</sup> are observed in the GL spectrum (Fig. 3(b), curve 1). The recombination energy of the generated electron-hole pairs corresponds to the interband transition  $E_g = 8.13$  eV ( $\sim 152$  nm) [23]. The luminescence in LuAG:Pr associated with the 5d→4f transitions of the activator below 4 eV is also excited by the 241Am  $\alpha$ -particles [24] and X-ray radiation [22, 25, 26]. According to [26], under X-ray excitation the Pr<sup>3+</sup> ions act as traps for holes from the valence band:



When an electron is captured from the conduction band and goes from the excited state to the 4f ground state the ion emits a quantum:



As seen from Fig. 3(b), with the raise in the fast neutron fluence up to  $10^{17}$  cm<sup>-2</sup> the intensities of the 310, 325 and 375 nm GL bands strongly decrease (curves 3-5). Perhaps this is due to the fact that an increase in the induced defects concentration competes with Pr<sup>3+</sup> centers in the process of charge carrier capture and thereby prevents the energy transfer to Pr<sup>3+</sup> to excite its luminescence. Partial reabsorption of the Pr<sup>3+</sup> activator luminescence by the color centers induced by fast neutrons within the spectral range 300-400 nm is also possible (Fig. 1(a), curves 2 and 3, Fig. 3(a), curves 3-5), which is similar to the decrease in the light yield of LuAG:Pr with the raise in the concentration of the Mg<sup>2+</sup> codopants and annealing in air [22].

For the influence of neutron-induced color centers within the visible range (390 and 570 nm bands) to be studied, the OA spectra of LuAG:Pr were measured after irradiation with the neutron fluence of  $10^{17}$  cm<sup>-2</sup> and then after heating up to 605 K (after TSL measurements) (Fig. 4(a)).

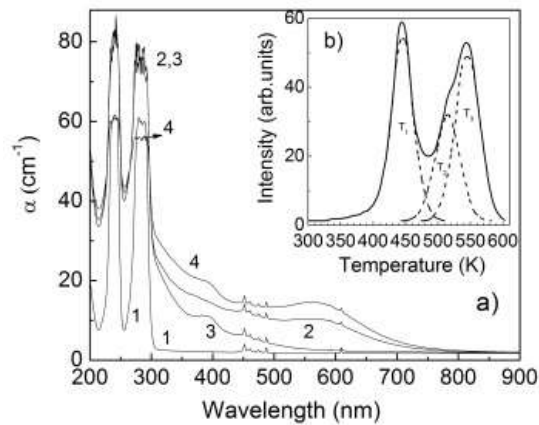


Figure 4: The absorption spectra of activated LuAG:Pr single crystals: a) initial (1), after the neutron fluence  $10^{17} \text{ cm}^{-2}$  (2), and after measurements of thermoluminescence up to 605 K and the fluence  $10^{17} \text{ cm}^{-2}$  (3) and after additional gamma irradiation with the dose  $10^3 \text{ Gy}$  (4). Inset: b) the thermoluminescence curve after irradiation with the fluence  $10^{17} \text{ cm}^{-2}$  and its decomposition into Gaussian  $T_1 - T_3$ .

In this case, for the TSL integral curve of LuAG:Pr irradiated with the neutron fluence  $10^{17} \text{ cm}^{-2}$  the peaks at 445, 515 and 545 K are observed (Fig. 4(b)); they coincide with those of nominally pure LuAG (Fig. 1(b)). Based on the equation from [16], expanding the TSL curve into Gaussian components (Fig. 4(b)) and assuming that the TSL processes have second-order kinetics, one can calculate the trap depth or activation energy  $E_t$  for each peak:

$$E_t = 3.5(kT_m^2/w) - 2kT_m,$$

where  $k$  is the Boltzmann constant,  $T_m$  is the temperature at the peak maximum,  $w$  is the full width at half maximum (FWHM) of the peaks. The activation energy for the TSL peaks 445, 515 and 545 K was 1.34, 1.62 and 1.95 eV, respectively.

For the LuAG:Pr sample irradiated with the neutron fluence  $10^{17} \text{ cm}^{-2}$  and heated up to 605 K the following values of its OA spectrum parameters (Fig. 4(a), curve 3) were observed: the intensities of the 240 and 285 nm bands did not change, the 390 nm band of the  $F^+$ -center was reduced by ~50% as for the pure LuAG one, and the 570 nm band of the  $V_0(C_{imp})$ -center was almost gone. The observed last two cases can be characterized by the fact that for the activation energy of 1.34, 1.62, and 1.95 eV the charge carriers released from the traps (color centers) radiatively recombine with the  $Pr^{4+}$  centers. That was evidenced by a separately measured spectral composition of the 445 and 545 K TSL peaks where 310 and 370 nm luminescence bands similar to the GL spectrum (Fig. 3(b)) associated with the 5d-4f transitions in  $Pr^{3+}$  were observed. Under subsequent irradiation of the samples with  $\gamma$ -quanta with the dose of 103 Gy, a decrease in the intensities of the 240 and 285 nm OA bands (Fig. 4(a), curve 4) associated with  $Pr^{3+}$  was observed, as well as an increase in the 390 and 570 nm bands as compared to the case before heating (curve 2). That can be explained by the fact that the defects generated by fast neutrons under heating up to 605 K are retained as for nominally pure LuAG. Under subsequent irradiation by  $\gamma$ -quanta the electrons are captured by these induced defects, which leads to an increase the absorption in the 390 nm band of the  $F^+$ -center and in the 570 nm band of the  $V_0(C_{imp})$ -center (curve 4). In this case, according to process (1), a part of the holes is captured by  $Pr^{3+}$  with formation of a  $Pr^{4+}$  hole-centers, which leads to a decrease in the 240 and 285 nm bands of the  $Pr^{3+}$  center (curve 4). It should be noted that under additional  $\gamma$ -irradiation with the dose  $10^3 \text{ Gy}$  after high-temperature annealing at  $\geq 873 \text{ K}$  in air (for 30 min) the 390 and 570 nm OA bands of the LuAG and LuAG:Pr crystals irradiated by fast neutrons did not appear. Therefore, at the temperature  $\geq 873 \text{ K}$ , interstitial oxygen diffuses to the anionic vacancy and occupies it.

The optical fading of neutron-induced OA bands can be studied to determine a charge state of the 570 nm center. Photofading at the corresponding wavelength release the charge carriers only from the levels located in the band gap of the crystal. The change in the concentration of induced color centers should be also observed in measurements of thermoluminescence. Those results indicate that the oxygen vacancies participate in the TSL process as electron traps.

**Conclusion.** As a result of fast neutron irradiation of nominally pure LuAG with the fluence up to  $10^{17} \text{ cm}^{-2}$ , the formation of color centers with characteristic optical absorption bands in the 250 nm range of the  $F$ -center and in the 295 nm range of the hole  $O^-$ -center is observed. Regardless of the Pr activator presence the color centers with the 390 nm band of the  $F^+$ -center and with the 570 nm band of the electron center are formed. In this case, the peaks at 445, 515 and 545 K with characteristic activation energy of 1.34, 1.62 and 1.95 eV are observed on the integral TSL curves. After only  $\gamma$ -irradiation the 445 K TSL peak is not observed, which is evidence of forming an additional local level in the band gap under neutron irradiation. The decrease in the intensity of GL bands of the activator  $Pr^{3+}$  center with the raise in the fast neutron fluence  $\geq 10^{15} \text{ cm}^{-2}$  has the following possible explanation:

- on the one hand, reabsorption of  $Pr^{3+}$  luminescence by color centers (hole  $O^-$  and electronic  $F^+$ ) is possible within the spectral range 300-400 nm, their concentration increases with the raise in neutron fluence;
- on the other hand, the data on additional  $\gamma$ -quanta irradiation of a neutron-irradiated sample heated up to 605 K lead to assuming that a hole is captured by the  $Pr^{3+}$  center with the formation of a hole  $Pr^{4+}$  center, as a result of which the concentration of the  $Pr^{3+}$  centers decreases and the concentration of the electron  $F^+$  and  $V_0(C_{imp})$  centers increases.

The obtained results provide useful information for determining the radiation resistance of optical transparency and luminescence centers since a decrease in the light emission and an increase in the after-luminescence amplitude can be controlled by defects (impurity and structural) caused by ionizing radiation [1,8-10] and displacements of structure-forming atoms by fast neutron fluences  $\geq 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ .

## REFERENCES

1. Nikl M., Mihokova E., Laguta V., Pejchal J., Baccaro S., Vedda A. Radiation damage processes in complex-oxide scintillators. in: Proceedings of SPIE, vol. 6586 2007 p. 6586OE-1-13.
2. Nikl M. and Yoshikawa A. Recent R&D Trends in Inorganic Single-Crystal Scintillator Materials for Radiation Detection, *Adv. Opt. Mater.* 3 (2015) 463.
3. Zhu R.Y. Precision crystal calorimetry in future high energy colliders, *IEEE Transactions on Nuclear Science.* 44 (3) (1997) 468.
4. Lecoq P. *Journal of Physics: Conference Series* 160 (2009). 012016. doi:10.1088/1742-6596/160/1/012016
5. Pauwels K., Dujardin C., Gundacker S., Lebbou K., Lecoq P., Lucchini M., Moretti F., Petrosyan A.G., Xu X. and Auffray E. Published by IOP Publishing for sissamedialab2013 doi:10.1088/1748-0221/8/09/P09019.
6. Nikl M., Ogino H., Krasnikov A., Beitlerova A., Yoshikawa A., Fukuda T. *Phys. Stat. Sol. A. Appl.Resear.* 202 (1) (2005) R4.
7. Ogino H., Yoshikawa A., Nikl M., Kamada K., Fukuda T., *J. of Cryst. Growth.* 292 (2006) 239.
8. Derdzian M.V., Ovanesyan K.L., Petrosyan A.G., Belsky A., Dujardin C., Pedrini C., Auffray E., Lecoq P., Lucchini M., Pauwels K., *J. of Cryst. Growth.* 361 (2012) 212.
9. Islamov A. Kh., Ibragimova E. M., Khaiitov I. A., Vil'danov R. R., and Amonov M. Z., *Opt. and Spect.* 125 (2018) 49.
10. Iwashita T., Miyabayashi K. *IEEE Nuclear Science Symposium Conference Record* (2010) 278.
11. Islamov A. Kh., Ibragimova E. M., Khaiitov I. A., Vildanov R. R., Kudratov Kh.N. 12th International Conference "Nuclear and Radiation Physics", Almaty, Republic of Kazakhstan. (2019) p.87 (in Russian).
12. Vahidov Sh. A., Ibragimova E. M., Kaipov B., Tavshunskii G.A., and Yusupov A. A. in: Radiation effects in some laser crystals. *Izd. Fan, Tashkent* (1977) 50 (in Russian).
13. Rakov A. F. *Phys. Stat. Sol. A* 76 (1983) K57.
14. Izerroukena M., Meftah A., Nekkab M. *Jour. of Lumin.* 127 (2007) 696.
15. Islamov A. Kh., Salikhbaev U.S., Ibragimova E.M., Nuritdinov I., Fayzullaev B.S., Vukolov Yu. K., Orlovskiy I., *Jour. of Nucl. Mater.* 443 (2013) 393.
16. Izerroukena M., Meftah A., Berkani S., *Nucl. Instru. and Meth. in Phys. Res.* 326 (2014) 90–94.
17. Ubizskii S. B., Matkovskii A.O., Mironova-Ulmane N., Skvortsova V., Suchocki A., Zhydachevskii Y.A., Potera P. *Phys. Stat. Sol. A* 177 (2000) 349.
18. Chakrabarti K., *Phys J. Chem. Solids.* 49 (1988) 1009.
19. Shen Y., Feng X., Shi Y., Vedda A., Moretti F., Hu Ch., Liu Sh., Pan Y., Kou H., Wu L. *Ceramics International.* 40 (2014) 3715.
20. Pawlak D., Frukacz Z., Mierczyk Z., Suchocki A., Zachara J. *Jour. of Alloys and Compounds* 275–277 (1998) 361–364.
21. Hu Z., Cao M., Chen H., Shi Y., Kou H., Xie T., Wu L., Pan Y., Feng X., Vedda A., Beitlerova A., Nikl M., Li J., *Opt. Mater.* 72 (2017) 201.
22. Pejchal J., Buryi M., Babin V., Prusa P., Beitlerova A., Barta J., Havlak L., Kamada K., Yoshikawa A., Laguta V., Nikl M., *Jour. of Lumin.* 181 (2017) 277.
23. Zorenko Yu., Gorbenko V., Voloshinovskii A., Stryganyuk G., Mikhailin V., Kolobanov V., Spassky D., Nikl M., Blazek K. *Phys. Stat. Sol. (a).* 2005. V. 202. No.6. P. 1113
24. Yanagida T., Sato M., Kamada K., Fujimoto Y., Yokota Y., Yoshikawa A., Chani V. *Opt. Mater.* 33 (2011) 413.
25. Ogino H., Yoshikawa A., Nikl M., Krasnikov A., Kamada K., Fukuda T., *Cryst J. Growth.* 287 (2006) 335.
26. Drozdowski W., Dorenbos P., J.T.M.de Haas, Drozdowska R., Owens A., Kamada K., Tsutsumi K., Usuki Y., Yanagida T., Yoshikawa A. *IEEE Trans. Nucl. Sci.* 55 (2008) 2420.



UDK:535.41:535.36

**Mukhriddin MAKHKAMOV**,  
Namangan Davlat Universiteti talabasi  
**Abulkosim ABDULLAEV**,  
O'zbekiston Milliy Universiteti magistranti  
**Jamoliddin RAZZOKOV**,  
O'zbekiston Milliy Universiteti dotsenti,  
Fanlar Akademiyasi Materialshunoslik Instituti, katta ilmiy xodimi  
E-mail: jrazzokov@gmail.com  
**Avez SHARIPOV**,  
Toshkent farmatsevtika instituti, Noorganik, fizik va kolloid kimyosi kafedrasini mudiri, kimyo fanlari doktori.  
**Shavkat MAMATKULOV**,  
Fanlar Akademiyasi Materialshunoslik Instituti katta ilmiy xodimi

### DISULFID BOG'LARNING LIZOZIM OQSILI STRUKTURASI HAMDA XOSSALARIGA TA'SIRI: MOLEKULAR DARAJADAGI TADQIQOT

Annotatsiya

Lizozim muhim fermentlardan biri bo'lib ko'z yoshi, so'lak va sutda ko'p miqdorda ishlab chiqariladi. Lizozim bakteriyalar hujayra devorlarining peptidoglikan komponentini bo'lib, mikroblarga qarshi vosita vazifasini bajaradi, bu esa hujayra o'limiga olib keladi. Lizozimda to'rtta disulfid bog' (DB) mavjud bo'lib bu bog'lar katalitik funksiyani bajarishda muhim rol o'ynaydi. DBlar (6Sis-127Sis va 30Sis-115Sis) uzilganda konformatsion o'zgarishlar ro'y berishini molekulyar dinamika metodi yordamida tadqiq qildik va olingan natijalar lizozimni turli sohalarida 3D o'zgarishlarni keltirib chiqardi. Bu o'zgarishlar lizozimni katalitik funksiyasini o'zgarishiga sabab bo'lishi mumkin.

**Kalit so'zlar:** Lizozim, katalitik funktsiya, molekulyar dinamika.

### EFFECTS OF DYSULFIDE BONDS ON LYOZIM PROTEIN STRUCTURE AND PROPERTIES: MOLECULAR LEVEL STUDY

Abstract

Lysozyme is one of the most important enzymes and it produced in large amounts in tears, saliva and milk. Lysozyme destroys a peptidoglycan component of the bacterial cell wall and act as antimicrobial agents, leading to cell death. Lysozyme contains four disulfide bonds (DB), which play an important role in catalytic function. We studied the conformational changes for the case of DB (6Cis – 127Cis and 30Cis – 115Cis) disruption using the molecular dynamics, and obtained results caused in 3D changes in various areas of lysozyme. These changes may affect to the catalytic function of lysozyme.

**Key words:** Lysozyme, catalytic function, molecular dynamics.

### ВЛИЯНИЕ ДИСУЛЬФИДНЫХ СВЯЗЕЙ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА ЛИЗОЦИМА БЕЛКА: ИССЛЕДОВАНИЕ НА МОЛЕКУЛЯРНОМ УРОВНЕ

Аннотация

Лизоцим – один из важнейших ферментов, который в больших количествах вырабатывается со слезами, слюной и молоком. Лизоцим разрушает пептидогликановый компонент стенки бактериальной клетки и действует как антимикробный агент, что приводит к гибели клетки. Лизоцим содержит четыре дисульфидные связи (DB), которые играют важную роль в каталитической функции. Мы изучили конформационные изменения для случая разрушения DB (6Cis – 127Cis и 30Cis – 115Cis) с использованием молекулярной динамики и получили результаты, связанные с трехмерными изменениями в различных областях лизоцима. Эти изменения могут повлиять на каталитическую функцию лизоцима.

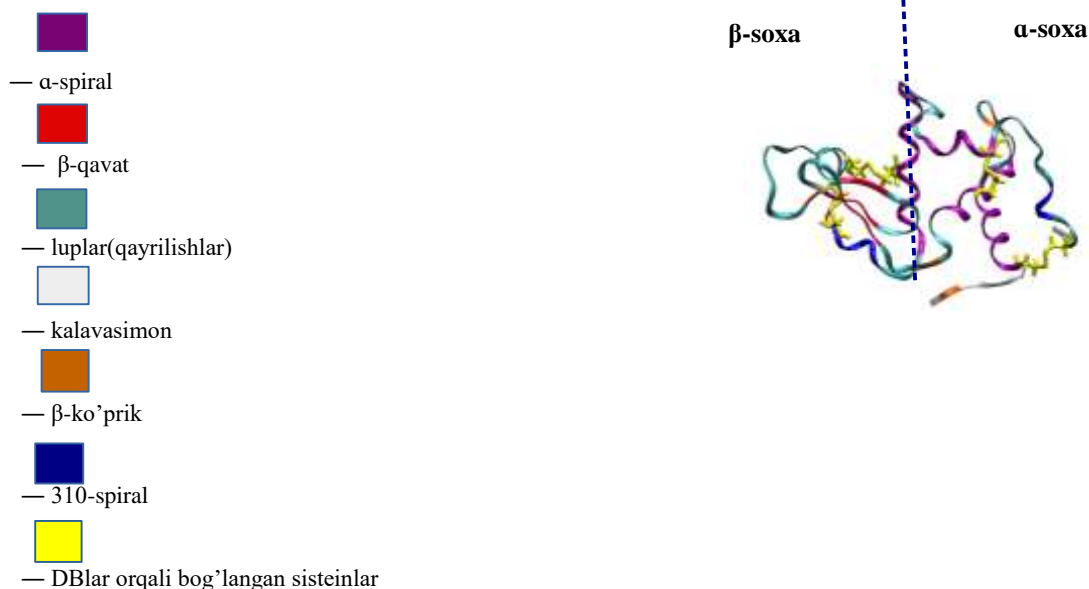
**Ключевые слова:** Лизоцим, каталитической функции, молекулярной динамики.

**Kirish.** Lizozim – tug'ma immunitet tizimining bir qismini tashkil etuvchi va hayvonlar hamda inson organizmi tomonidan ishlab chiqariladigan antimikrobial ferment sanaladi [1]. Lizozim bakterial hujayra devorining asosiy komponenti bo'lgan peptidoglikan tarkibiga kiruvchi glikozidik bog'larning gidrolizini katalizlaydi [2]. Bu gidroliz, o'z navbatida, bakterial hujayra qobig'ining yaxlitligini buzadi va bakteriyani yorilib ketishiga olib kelishi mumkin [3, 4]. Chunki qobig'ining peptidoglikan qavati shikastlangan bakteriya osmotik stressga uchraydi. Tovuq tuxumi-oqi (TTo) lizozimi ustida o'tkazilgan tadqiqotlardan so'ng, kataliz mexanizmi borasida ikki xil qarash bor, biri Fillipsning "Ion mexanizmi" bo'lsa, ikkinchisi Koshlandning "kovalent mexanizmi" [5, 6]. Har ikki mexanizmga ko'ra, TTo lizozimining aktiv tomonida joylashgan Glu35 (Glutamik) va Asp52 (Aspartik) aminokislotalar glikozidik bog'larni uzishda hal qiluvchi rolni bajaradi. Shuningdek TTo lizozimi o'zining katalitik faol bo'lmasa ham bakteriyalarni o'ldira oladi: kationik tabiatga ega lizozim manfiy zaryadlangan bakterial membranaga botib kirib, stabil o'mashib turishi mumkin [7]. Bu holat membranaga o'z funksiyasini bajarishida salbiy ta'sir etadi.

Lizozimning kashf etilishi ingliz mikrobiologi Aleksandr Flemingga tegishli. Fleming tasodifan, uning burun tomchisi plastinka ustidagi bakteriyalarning parchalanishiga olib kelganini aniqlagan [8]. Bu tasodif organizmda juda yaxshi "bakteriolitik

element" mavjudligining kashf etilishi edi. Fleming mazkur elementni lizozim (Lysozyme) deb atadi. Keyinchalik, lizozimlar inson organlari, to'qimalari va sekretsialarida (taloq, yo'ldosh, ona suti, so'lak, ko'z yoshi, qon zardobi va boshqalar) ko'p miqdorda topilgan va shunga o'xshash litik fermentlar turli umurtqali, umurtqasiz hayvonlarning organlari va sekretsialaridan, bakteriyalar va hatto o'simliklardan ajratib olingan [9]. Lizozimlar asosan uchta tipga ajratilgan, bular: c-tip (Chicken-type), g-tip (Goose-type), i-tip (Invertebrate-type) [10]. Shuningdek yana, fag-tip, bakterial-tip, plant-tip kabi turlari ham ma'lum qilingan [11]. Barcha lizozimlar bakterial hujayra qobig'ini parchalash qobiliyatiga ega bo'lib, ularning strukturasi o'zaro o'xshash bo'ladi. Bakteriyalarni o'ldirishdan tashqari, ba'zi lizozimlar zambrug'larni ham yo'q qilishga qodir.

C-tipidagi lizozimlarning birlamci strukturasi 129 aminokislota qoldig'idan iborat bo'lib, molekular og'irligi 14.3 kDa (kilo Dalton). Ularning polipeptid zanjiri sakkizta sistein aminokislota orasidagi to'rtta disulfid bog'lanishlar (6Sis-127Sis, 30Sis-115Sis, 64Sis-80Sis, 76Sis-94Sis) orqali stabillashgan (qarang Rasm 1). Disulfid bog'lar (DB) oqsil uchlamchi strukturasi termodinamik barqarorligini oshirib, proteazalarning ta'siriga bo'lgan qarshilikni kuchaytiradi.



Rasm 1. C-tipiga mansub bo'lgan tovuq tuxumi-oqi lizozimining tuzilishi.

DBlar kimyoviy jihatdan kovalent bog'lanadi. Ular ko'proq hujayralarning ichida emas, balki tashqarisida (ya'ni oqsilning hujayra tashqarisiga chiqqan qismi yoki hujayradan tashqarida bo'lgan oqsilda) uchraydi. Bu albatta hujayra ichidagi pH muhit bilan bog'liq. Chunki sisteinlarning  $-S-S-$  orqali o'zaro bog'lanishi oksidlangan holat deyiladi. DBlarning hosil bo'lib qolishi polipeptid zanjirining turli konformatsiyaga o'ralish jarayoniga ham ta'sir etib, uni birmuncha sekinlashtiradi. Ya'ni o'ralish vaqtida DBlar tufayli stabillashgan bir qator oraliq konformatsiyalar shakllanib o'tishi mumkin. Kovalent bog'lanish atomlar orasidagi eng mustahkam bog'lardan hisoblanadi. Shu boisdan DBlar oqsil makromolekulasining turli muhitlardagi deyarli o'zgarimas 3D konformatsiyasini va bir butunligini saqlashda muhim sanaladi. Bir qarashda TTo lizozimidagi DBlarning barchasi uzilsa, molekulaning globulyar shaklidan asar ham qolmaydigandek. Biroq amalda, ma'lum shaklga o'ralgan yirik oqsillarning stabilligiga, kompakligiga peptid zanjirlarning kovalent bo'lmagan, kuchsiz o'zaro ta'sirlashuvlari ham ko'roq hissa qo'shar ekan. Ion bog', vodorod bog'lanish, van der Vaals ta'sirlashuvi shular jumlasidandir. Kuchsiz ta'sirlashuvning bog'lanish energiyasi juda kichik bo'ladi. Lekin yirik oqsillardagi minglab bu kabi ta'sirlashuv energiyalari qo'shilganda kattagina bog'lovchi potentsialni hosil qilishi mumkin (qarang: Jadval 1).

Jadval 1.

Polipeptidlarni stabillovchi kimyoviy ta'sirlashuvlar

Ta'sirlashuv	Misol	Tipik masofa	Erkin energiya (dissotsiyalanish entalpiyasi)
Kovalent bog'	$C\alpha-C$	1.5 Å	356 kJ/mol ( $C=C$ bog' uchun 610 kJ/mol)
Disulfid bog'	$-Cys-S-S-Cys-$	2.2 Å	251 kJ/mol
Tuz ko'prigi	$-COO-\dots NH_3^+$	2.8 Å	8-17 kJ/mol (o'rtacha hisobda)
Vodorod bog'	$>N-H \dots O=C<$	3 Å	1-2 kJ/mol
van der Vaals	$-CH_3 \dots H_3C-$	3.5 Å	4 kJ/mol; 4-17kJ/mol oqsilning ichki (gidrofobik) qismlarida

Shunday ekan, DBlar yoki oqsillarda uchraydigan kovalent tabiatli boshqa maxsus bog'larning ma'lum bir makromolekula strukturasiidagi tutgan o'rni qay darajada, ularning uzilishi 3D konformatsiyalarda qanchalik aks etadi, biror sezilarli effekt kuzatiladimi, yoki yo'qmi? Biomolekulalar ustida izlanishlar olib borayotgan ko'plab tadqiqotchilar uchun bu kabi savollar qiziq tadqiqot obyekti hisoblanadi. Binobarin, DBlarning uzilishi oqsilning strukturasi, shunday ekan xossalari va bajaradigan funksiyasiga ham ta'sir etishi mumkin.

Bugungi kunda molekulyar dinamika (MD) simulyatsiyalari oqsillar, lipidlar va kichik molekularlarning o'zaro ta'sirini o'rganish va ko'plab hodisalarning atomar va molekular darajadagi tafsilotlarini o'rganish uchun muvaffaqiyatli qo'llanilib

kelinmoqda. Turli jarayonlarda oqsillardagi strukturaviy ma'lumotlarini yuqori aniqlikda olish va ularning o'zaro ta'sirlashuvlarini baholash eksperimentda o'ziga xos murakkabliklarni keltirib chiqarishi mumkin. Shu tufayli MD simulatsiyalari ushbu sistemalarni o'rganish uchun ideal vosita hisoblanadi.

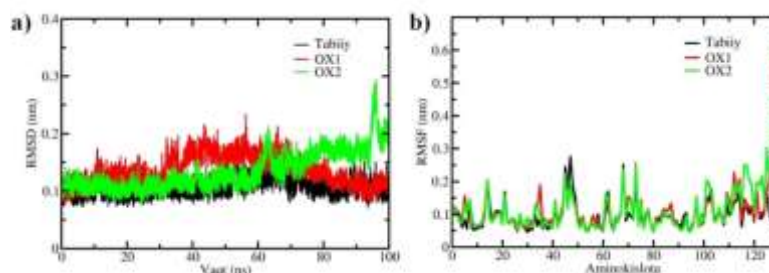
Ushbu tadqiqotimizda biz TTo lizozimidagi DBLarni uzilishi tufayli oqsil strukturasi kuzatilishi mumkin bo'lgan konformatsion o'zgarishlarni MD metodi yordamida tadqiq etdik.

Metod. DBLar uzilgach, TTo lizozimida namoyon bo'ladigan o'zgarishlarni ifodalash maqsadida, tabiiy holatdagi lizozim hamda 6Sis-127Sis (OX1) va 30Sis-115Sis (OX2) DBLari uzilgan lizozim oqsillari uchun standard MD simulatsiyalarini o'tkazdik va olingan natijalarni o'zaro taqqosladik. MD simulatsiyalarini bajarishda GROMACS paketining 2020.1 versiyasidan foydalanildi [12]. TTo lizozimi molekulasi boshlang'ich kordinatalarini www.rcsb.org saytidan olindi (PDB kodi 1AKI) va uni dodekaedr boksga joylab atrofini suv bilan o'radik. Sistemaga 0.1M konsentratsiyada NaCl ionlari qo'shildi. Sistemadagi atomlararo ta'sirlashuvlarni ifodalash uchun AMBER99SB potentsiali qo'llanildi [13]. Suv uchun SPC/E modelidan foydalanildi [14].

Huddi shu sistemani DBLari uzilgan lizozimlar uchun ham hosil qildik. Dastlab "steepest descent" algoritmidan foydalangan holda sistemaning potentsial energiyasini minimal holatga keltirib oldik. So'ngra lizozim molekulasi potentsial kuch bilan qotirib qo'ygan holda uning atrofidagi suv va ionlarni NVT va NPT sharoitlarida 100 ps vaqt davomida muvozanat holatiga keltirdik. Keyin qotilgan potentsialni bekor qilib, sistemani NPT sharoitida 100 ns MD simulatsiya qilganmiz. Ikkala sistema ham huddi shu bosqichlarda, bir xil fayllardan foydalangan holda simulatsiya qilindi. Sistema zarrachalarning harakat tenglamalarini vaqt bo'yicha integrallashda "leap-frog" algoritmini qo'lladik va vaqt qadamini 2 fs qilib belgiladik. Muvozanatlashning NVT bosqichida sistemaga 310 K temperatura berdik, V-rescale termostatidan foydalandik NPT bosqichida Berendsen barostatida 1 atmosfera bosimi berildi [15]. 100 ns NPT simulatsiyada esa sistemada izotropik doimiy bosimni ta'minlash uchun Parrinello-Rahman barostatidan foydalanganmiz [16]. Barcha intermolekular ta'sirlashuvlarni hisoblashda zarrachalarning o'zaro ta'sir etadigan sferik radiusini (cutoff radius) 1.0 nm etib belgiladik. Keng-doirdagi elektrostatik ta'sirlashuvlar PME (particle-mesh Ewald) algoritmi orqali hisoblandi [17]. Boksnig barcha vektorlari bo'yicha davriy chegara shartlari (Periodic Boundary Conditions - PBC) qo'llanildi. Lizozim atomlaridan boks devorlarigacha bo'lgan eng qisqa masofani 1.0 nm olganmiz.

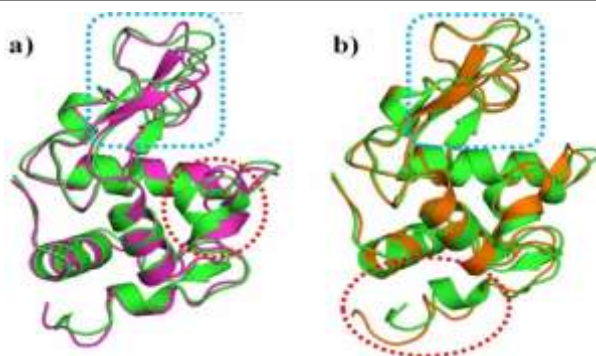
MD simulatsiyalardan olingan trayektoriyalar orqali sistemalarni analiz qildik. DBLar yo'q bo'lsa oqsil asosiy zanjiridagi egiluvchanlik va harakatchanlik xossalari qanaday o'zgarishini bilish maqsadida tabiiy va DBLari uzilgan lizozimlarning asosiy zanjiridagi o'rtacha kvadratik og'ishlarni (RMSD—Root-mean-square deviation) hisobladik. Huddi shu tarzda, lizozimlardagi har bir aminokislota harakatchanligining simulatsiya davomidagi o'rtacha kvadratik o'zgarishlarini (RMSF—Root-mean-square fluctuation) ham hisobladik. Qandaydir bog'larning uzilishi yoki mutatsiyalar tufayli makromolekula sezilarli o'zgarishlarga uchrasa, bu uning ikkilamchi strukturasi aks etishi kerak. Shu boisdan, 3D konformatsiyalarni chuqurroq tadqiq etish maqsadida GROMACS dagi gmx do\_dssp modulidan foydalanib, lizozimlarning simulatsiya mobaynidagi ikkilamchi strukturalarini analiz qilib ko'rdik. Olingan analiz natija va grafikalarini o'zaro solishtirdik.

**Natija va muhokama.** Aksariyat oqsillar o'zining tabiiy holatida muayyan strukturaga ega boladi. Oqsillar asosiy zanjirining shakli ularning ikkilamchi va uchlamchi strukturasi belgilaydi. Tashqi muhit ta'sirlari (issiqlik xaotik harakati, yon zanjirlarni erituvchi bilan ta'sirlashuvlari) tufayli oqsilning asosiy zanjirida tebranishlar va og'ishlar muntazam ro'y berib turadi. Ichki molekulyar ta'sirlashuvlar oqsil molekulasi yoyilib ketishiga yo'l qo'ymaydi. TTo lizozimida bir emas to'rtta DBLar oqsil asosiy zanjirining turli sohalarini o'zaro bog'lab turadi. Oqsildagi mavjud disulfid bog'lari uziladigan bo'lsa, asosiy zanjirning ayni shu sohalarida tabiiy strukturaga nisbatan qandaydir darajadagi og'ishlar va chetlanishlar har doimgidan ko'ra boshqacharoq bo'lishi mumkin. Shunga o'xshash holatlar sitogloblin va inson epidermal o'sish faktori oqsilida ham kuzatilgan [18, 19]. Buni tadqiq etish maqsadida, tabiiy va DBLari uzilgan OX1 va OX2 lizozimlardagi C $\alpha$ -uglerodlarni asosiy zanjirlarining simulatsiya davomidagi o'rtacha kvadratik og'ishlarini hisobladik va ularni solishtirdik (Rasm 2a). Shundan so'ng har bir amino kislota simulatsiya davomida og'ishlari va tebranishlari ham hisoblandi (Rasm 2b).



Rasm 2. a) Tabiiy, OX1 va OX2 lizozim C $\alpha$ -uglerodlarni o'rtacha kvadratik og'ishlari (RMSD) graffiklari. b) Tabiiy, OX1 va OX2 lizozim aminokislotalarini o'rtacha kvadratik o'zgarishlari (RMSF) keltirilgan.

2-rasmga ko'ra OX1 va OX2 lizozimning C $\alpha$ -uglerodlari tabiiysiga nisbatan ko'proq og'imoqda, tebranish amplitudalari ham kattaroq. E'tibor bersak farqlar mavjud 0.5nm atrofida. Demak DBLari uzilgan lizozim molekulasi ham tabiiy lizozimga xos shaklini saqlamoqda; faqat uning C $\alpha$ -uglerodlari harakatchanligi nisbatan oshgan. Shu boisdan DBLari uzilgan lizozimning sharsimon shakli nisbatan beqarorroq bo'ladi. Bu holat sistemalarning vizual analizida ham kuzatildi (Rasm 3).



Rasm 3. a) Tabiiy (yashil) va OX1 lizozimni 100ns modellashtirish traektoriyasidan olingan ikkilamchi 3D strukturalarni solishtirish b) Tabiiy va OX2 lizozimni 100ns modellashtirish traektoriyasidan olingan ikkilamchi 3D strukturalarni solishtirish.

3-rasmdan ko'rinib turganidek DBlar uzilishi lizozim strukturasi konformatsion o'zgarishlarga sabab bo'ldi. Asosiy o'zgarishlar kontur chiziq bilan belgilab qo'yilgan. Rasm 3a tabiiy va bir sistein bog'ni uzilishi lizozim strukturasi biron konformatsion farq bergan bo'lsa Rasm 3b ikki DBlarni uzilishi esa spiralsimon konformatsiyani yo'q bo'lishiga olib keldi. Ko'k rangda belgilangan konturlar esa strukturalar halqalarida siljishlar ro'y bergan.

**Xulosa.** Molekulyar dinamika metodi yordamida tabiiy lizozim va 6Sis-127Sis (OX1) va 30Sis-115Sis (OX2) DBlari uzilgan lizozimlar uchun konformatsion o'zgarishlar tadqiq etildi. DBlar lizozim strukturasi birligini va funksiyasini bajarish uchun muhim o'rin tutishi aniqlandi. Demak, faolligini o'zgartirish orqali modifikatsiyalangan lizozimni turli maqsadlarda foydalanish mumkin. Masalan, oziq ovqatni bakteriyadan tozalash, saratonni davolash va boshqalar [20, 21]. Qo'lga kiritilgan natijalar lizozimni nanoo'lcham aniqlikda turli parametrlarini hisoblash va kelajakda aniq maqsadlarda qo'llash mumkin.

#### ADABIYOTLAR

1. Lesnierowski, G. and J. Kijowski, Lysozyme, in *Bioactive egg compounds*. 2007, Springer. p. 33-42.
2. Ellison, R., 3rd and T.J.J.T.J.o.c.i. Giehl, Killing of gram-negative bacteria by lactoferrin and lysozyme. 1991. 88(4): p. 1080-1091.
3. Kiristi, M., et al., Lysozyme-based antibacterial nanomotors. 2015. 9(9): p. 9252-9259.
4. Masschalck, B., D. Deckers, and C.W.J.J.o.f.p. Michiels, Lytic and nonlytic mechanism of inactivation of gram-positive bacteria by lysozyme under atmospheric and high hydrostatic pressure. 2002. 65(12): p. 1916-1923.
5. Blake, C., et al., Crystallographic studies of the activity of hen egg-white lysozyme. 1967. 167(1009): p. 378-388.
6. Koshland Jr, D.J.B.r., Stereochemistry and the mechanism of enzymatic reactions. 1953. 28(4): p. 416-436.
7. Ibrahim, H.R., T. Matsuzaki, and T.J.F.I. Aoki, Genetic evidence that antibacterial activity of lysozyme is independent of its catalytic function. 2001. 506(1): p. 27-32.
8. Fleming, A.J.P.o.t.R.S.o.L.S.B., Containing Papers of a Biological Character, On a remarkable bacteriolytic element found in tissues and secretions. 1922. 93(653): p. 306-317.
9. Ogawa, H., H. Miyazaki, and M.J.J.o.i.d. Kimura, Isolation and characterization of human skin lysozyme. 1971. 57(2): p. 111-116.
10. Callewaert, L. and C.W.J.J.o.b. Michiels, Lysozymes in the animal kingdom. 2010. 35(1): p. 127-160.
11. Cao, D., et al., Expression of recombinant human lysozyme in egg whites of transgenic hens. 2015. 10(2): p. e0118626.
12. Abraham, M.J., et al., GROMACS: High performance molecular simulations through multi-level parallelism from laptops to supercomputers. 2015. 1: p. 19-25.
13. Showalter, S.A., R.J.J.o.c.t. Brüschweiler, and computation, Validation of molecular dynamics simulations of biomolecules using NMR spin relaxation as benchmarks: application to the AMBER99SB force field. 2007. 3(3): p. 961-975.
14. Mark, P. and L.J.T.J.o.P.C.A. Nilsson, Structure and dynamics of the TIP3P, SPC, and SPC/E water models at 298 K. 2001. 105(43): p. 9954-9960.
15. Bussi, G., D. Donadio, and M.J.T.J.o.c.p. Parrinello, Canonical sampling through velocity rescaling. 2007. 126(1): p. 014101.
16. Parrinello, M. and A.J.J.o.A.p. Rahman, Polymorphic transitions in single crystals: A new molecular dynamics method. 1981. 52(12): p. 7182-7190.
17. Essmann, U., et al., A smooth particle mesh Ewald method. 1995. 103(19): p. 8577-8593.
18. De Backer, J., et al., The effect of reactive oxygen and nitrogen species on the structure of cytoglobin: A potential tumor suppressor. 2018. 19: p. 1-10.
19. Yusupov, M., et al., Impact of plasma oxidation on structural features of human epidermal growth factor. 2018. 15(8): p. 1800022.
20. Touch, V., et al., Preparation of antimicrobial reduced lysozyme compatible in food applications. 2003. 51(17): p. 5154-5161.
21. Attri, P., et al., Plasma treatment causes structural modifications in lysozyme, and increases cytotoxicity towards cancer cells. 2021.



УДК 621.315.592.4

**Андрей НЕБЕСНЫЙ,**

Национальный Университет Узбекистана,

Базовый докторант кафедры “Физика полупроводников и полимеров”

E-mail: nebesny-andrey@yandex.ru

**Рафаэль НУСРЕТОВ,**

«Узбекско-Японский Молодежный Центр Инноваций» при ТГТУ

Младший научный сотрудник

**Абдулманан НАСИРОВ,**

Доцент Национальный Университет Узбекистана

**Павел ПАРЧИНСКИЙ,**

Доцент Национальный университет Узбекистана

ТГТУ профессора, .ф-м ф.д. Аюпов Қ.С тақризи асосида

#### INVESTIGATION OF DOPING EFFECT ZNO FILMS WITH ALUMINUM ON THE PHOTOCONDUCTIVITY AND SURFACE MICROSTRUCTURE

Abstract

The article shows the results of a study of the surface microstructure and photoconductivity of thin-film ZnO: Al coatings. The effect of the film thickness on the microstructure is shown. It was found that an increase in concentration from 1 to 6 at. % Al leads to a shift of the absorption edge to the short-wavelength part of the spectrum due to the Burstein-Moss effect.

**Key words:** zinc oxide, transparently conductive oxides, photoconductivity, surface microstructure, Burstein-Moss effect

#### АЛЮМИНИЙ БИЛАН ЛЕГИРЛАШНИНГ ZNO ЮПҚА ПЛЁНКАЛАРНИНГ СИРТ ФОТОЎТКАЗУВЧАНЛИГИ ВА МИКРОСТРУКТУРАСИГА ТАЪСИРИНИ ЎРГАНИШ

Аннотация

Мақолада юпқа қатламли ZnO:Al қопламаларининг сирт микроструктураси ва фотоўтказувчанлигининг ўрганиш натижалари келтирилган. Плёнканинг микроструктурасига унинг қалинлигининг таъсири аниқланди. Al концентрациясининг 1 дан 6 ат. % гача ортиши Бурштейн-Мохе эффекти туфайли ютилиш чегараси спектрининг қиска тўлқинли қисмига силжишга олиб келиши аниқланди.

**Калит сўзлар:** рух оксиди, шаффоф ўтказувчан оксидлар, фотоўтказувчанлик, сирт микроструктураси, Бурштейн-Мосса эффекти.

#### ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ЛЕГИРОВАНИЯ ТОНКИХ ПЛЕНОК ZNO АЛЮМИНИЕМ НА ФОТОПРОВОДИМОСТЬ И МИКРОСТРУКТУРУ ПОВЕРХНОСТИ

Аннотация

В работе приведены результаты исследования микроструктуры поверхности и фотопроводимости тонкопленочных покрытий ZnO:Al. Показано влияние толщины пленки на микроструктуру. Установлено, что увеличение концентрации с 1 до 6 ат. % Al приводит к сдвигу края области поглощения в коротковолновую часть спектра из-за эффекта Бурштейна-Мосса.

**Ключевые слова:** оксид цинка, прозрачные проводящие оксиды, фотопроводимость, микроструктура поверхности, эффект Бурштейна-Мосса

**Введение.** На сегодняшний день прозрачные проводящие оксидные (transparent conductive oxide - TCO) покрытия находят все больше применений в нанoeлектронике и фотонной технике. Большой интерес такие материалы представляют и для солнечных элементов. Наиболее распространенным TCO на данный момент является оксид индия. Однако постоянно растущие темпы производства привели к значительному сокращению запасов индия и, как следствие, резкому росту его стоимости. Такая ситуация повышает актуальность поиска альтернативных материалов. [1]. Весьма перспективным материалом видится оксид Цинка, имеющий высокую оптическую прозрачность в видимой области спектра (80-85%) [2].

Проводимость и прозрачность ZnO можно менять путем легирования [3]. Для увеличения проводимости обычно используют материалы III (B, Al, Ga, In) или IV (Pb, Sn) группы периодической таблицы [4]. Наибольшее распространение получило легирование ZnO алюминием или галлием [5] В настоящей работе приводятся результаты исследований влияния легирования Al на структурные и фотоэлектрические свойства ZnO.

**Образцы и методика измерения.** В работе использовались образцы тонких пленок ZnO толщиной 70,7 нм и 137,7 нм, легированные алюминием, выращенные золь-гель методом на подложках Si[111]. По уровню легирования образцы были разбиты на две группы. Концентрация Al в структурах первой группы составляла 1 ат. %, в структурах второй группы 6 ат. %.

Для изучения структурных свойств поверхности тонких пленок ZnO:Al использовался электронный микроскоп Jeol JSM-IT200. Данный микроскоп был снабжен EDS детектором, позволяющим контролировать элементный состав изучаемых образцов.

Для изучения фотопроводимости образец помещался в закрытую экранированную ячейку. В качестве источника излучения использовался белый светодиод со спектром излучения от 420 до 720 нм, с максимумами интенсивности на 450 и 600 нм. Световое излучение подавалось на образец через оптическую систему, состоящую из фокусирующей линзы и поворотного зеркала. Это позволило вынести светодиод за пределы измерительной ячейки и исключить нагрев образца. При этом через образец пропускался ток  $I = 0,2$  мА и измерялось падение напряжения на нем. Все данные снимались в режиме реального времени, при помощи автоматизированной установки, содержащей в своем составе АЦП, и передавались на ПК для дальнейшей обработки.

Перед измерением образец выдерживался несколько часов в полной темноте в ячейке, после чего на него подавалось световое излучение. Длительность освещения образца выбиралась таким образом, чтобы добиться выхода фотопроводимости образца на насыщение. После выхода фотопроводимости на насыщение освещение отключалось и проводилось измерение релаксации процесса фотопроводимости. Времена нарастания и спада фотопроводимости (>90% от полного значения) составили 300 - 350 с и 600-700 секунд соответственно.

**Результаты и обсуждение.** Проведенные при помощи сканирующей электронной микроскопии исследования показали, что микроструктура поверхности пленки ZnO:Al практически не зависит от концентрации алюминия. Однако увеличение толщины пленки с 70,7 нм до 137,7 нм приводила к значительному изменению структуры поверхности.

На Рис.1 приведено изображение поверхности образца с толщиной пленки 70,7 нм и концентрацией 1% ат. Al. Как видно из рисунка, рельеф микроструктуры поверхности ZnO представляет собой микрообразования в виде точек, с диаметром порядка 1мкм.

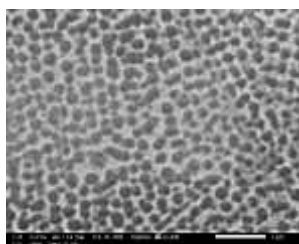


Рис. 1 - Изображение электронной микроскопии поверхности пленки ZnO:Al толщиной 70,7 нм и концентрацией 1% ат. Al

На Рис.2 приведено изображение среза исследуемого образца. Из рисунка видно, что покрытие поверхности микроструктурными образованиями неравномерное, имеются участки, на которых структура ZnO полностью отсутствуют, а высота микроструктурных образований варьируется от 0.2 мкм до 0.5 мкм.

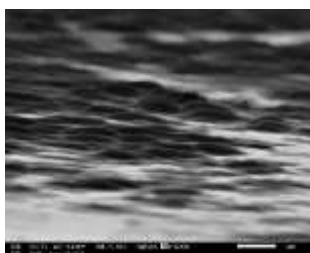


Рис. 2 - Изображение электронной микроскопии среза пленки ZnO:Al толщиной 70,7 нм и концентрацией 1% ат. Al

Пленки ZnO:Al толщиной 70.7 нм, содержащие 6% ат. Al имели аналогичную структуру поверхности.

На Рис. 3 приведено изображение образца, содержащего 6% ат. Al, толщиной пленки 137нм имеют нитевидную структуру. Нити имеют длину порядка размеров образца, и длина значительно превосходит их диаметр. При этом поверхность образца равномерно покрыта такими нитями. Таким образом увеличение толщины пленки ZnO:Al приводит к существенной модификации микрорельефа поверхности.

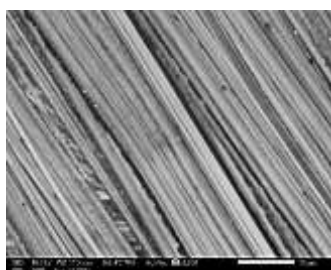


Рис. 3 - Изображение электронной микроскопии поверхности пленки ZnO:Al толщиной 137,7 нм и концентрацией 6% ат. Al

На Рис 4 приведены результаты измерения фотопроводимости пленок ZnO:Al содержащих 1% ат. Al. Освещение образца начиналось в момент времени  $t_1 = 100$  сек. В момент времени  $t_2 = 400$  сек освещение образца прекращалось и начиналось измерение релаксации процесса фотопроводимости.

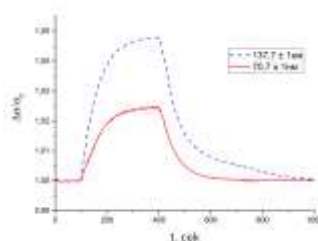


Рис. 4 – Зависимости фотопроводимости пленок ZnO:Al с концентрацией 1% ат. Al разной толщины, измеренные при 300К

Отметим, что временная зависимость фотопроводимости имеет классический для пленки ZnO вид. Несмотря на то, что ширина запрещенной зоны ZnO (3.36 эВ) [4] больше энергии видимого светового излучения ( $\leq 3.26$  эВ), в микроструктурированных пленках ZnO фотопроводимость наблюдается даже при освещении белым светом. Это связано с тем, что у подобных образцов имеется хвост плотности состояний, ниже края зоны проводимости [6, 7].

При этом удвоение толщины пленки приводит к двукратному увеличению относительной фотопроводимости образца. Такое увеличение фотопроводимости связано с уменьшением вклада рекомбинационных процессов на поверхности и на границе раздела ZnO – Si.

Повышение концентрации алюминия с 1 до 6 процентов приводило к полному отсутствию фотопроводимости у образцов при облучении их видимым светом. На наш взгляд отсутствие эффекта фотопроводимости в образцах с более высоким уровнем легирования может быть объяснено следующим образом. Легирование ZnO алюминием приводит к значительному росту концентрации свободных носителей заряда и увеличению ширины запрещенной зоны. В результате происходит заполнение свободных состояний в зоне проводимости электронами донорной примеси. Это приводит к коротковолновому сдвигу края спектра поглощения, вследствие эффекта Бурштейна-Мосса [1]. В следствии такого сдвига спектр возбуждающего излучения уже не захватывает хвост плотности состояний разрешенной зоны ZnO [8].

**Заключение.** В настоящей работе приводятся результаты исследований микроструктурных и фотоэлектрических свойств пленок ZnO легированных алюминием. Показано, что микроструктура поверхности пленок определяется не содержанием легирующей примеси алюминия, а толщиной исследуемых пленок. Установлено наличие фотопроводимости, установлено что увеличение концентрации алюминия с 1 до 6 ат. % ведет к исчезновению фотопроводимости в исследуемых образцах при видимом свете. На наш взгляд этот эффект связан с эффектом Бурштейна-Мосса, который приводит к сдвигу края области поглощения в коротковолновую часть спектра с увеличением степени легирования алюминием.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Хохлов Е.А., Войнилович А.Г., Смирнов А.Г. - "Свойства пленок ZnO и ZnO:Al, перспективы для прозрачных электродов" – Доклады БГУИР, №5(35) – 2008, с.71-76.
2. Достанко А.П., Агеев О.А., Голосов Д.А. - "Электрические и оптические свойства пленок оксида цинка, нанесенных методом ионно-лучевого распыления оксидной мишени" - Физика и техника полупроводников. – 2014. – Т.48 – Вып. 9 – С 1274-1279.
3. Грузинцев А.Н., Волков В.Т., Якимов Е.Е. – "Фотоэлектрические свойства пленок ZnO, легированных акцепторными примесями Cu и Ag" - Физика и техника полупроводников – 2003г., том 37 выпуск 3, с
4. Рембеза С.И., Рембеза Е.С., Свистова Е.С., Кошелева Н.Н., "Металлооксидные пленки: синтез, свойства и применение", ВГУ – Воронеж: Издательский дом ВГУ, 2018. – 43с.
5. Ellmer K. – "Magnetron sputtering of transparent conductive zinc oxide: relation between the sputtering parameters and the electronic properties" - Journal of Applied Physics. – 2000. – V.33. – P 17-32.
6. Kavak H., Senadım E. Tuzemen, Ozbayraktar L.N., Esen R.– "Optical and photoconductivity properties of ZnO thin films grown by pulsed filtered cathodic vacuum arc deposition" - Vacuum 83, 2009, P 540-543
7. Shan F.K., Liu G.X., Lee W.J., Shin B.C. – "Stokes shift, blue shift and red shift of ZnO-based thin films deposited by pulsed-laser deposition" - Journal of Crystal Growth 291 (2006) 328-333.
8. Hwang J.-Y., Cho C.R., Lee S.A., Jeong S.Y. // Journal of the Korean Physical Society. 2005. Vol.47.P288.



УДК 537.622.4

**Павел ПАРЧИНСКИЙ,**  
Доцент Национальный университет Узбекистана  
E-mail: pavelphys@mail.ru  
**Алиса ГАЗИЗУЛИНА,**  
Базовый докторант Национальный университет Узбекистана  
**Шавкат ЮЛДАШЕВ,**  
Профессор Национальный университет Узбекистана  
**Абдуманан НАСИРОВ,**  
Доцент Национальный университет Узбекистана

ТГТУ профессори, .ф-м ф.д. Аюпов Қ.С тақризи асосида

### ANISOTROPY OF MAGNETORESISTANCE IN GaMnAs AND GaMnAs: Be EPITAXIAL LAYERS

Abstract

Effect of codoping GaMnAs with a Be impurity on the anisotropy of the magnetoresistance measured at different orientations of the magnetic field is investigated. It is shown that codoping with Be leads to a modification of the anisotropy of the magnetoresistance in the range of fields up to 3000 Oe. The observed effect can be associated with a reorientation of the easy axis from the in-plane direction to the out-of-plane direction. The reorientation of the easy magnetization axis can be caused by a decrease of strain stresses in the bulk of the epitaxial layer with introduction of Be into the GaMnAs semiconducting matrix.

**Key words:** magnetic anisotropy, magnetoresistance, molecular beam epitaxy, easy axice, GaMaAs, GaMnAs:Be.

### GaMnAs DF GaMnAs: Be ЭПИТАКСИАЛ ҚАТЛАМЛАРИДА МАГНИТ-ҚАРШИЛИК АНИЗОТРОПИЯСИНИНГ ТАЪСИРИ

Аннотация

Ушбу мақола магнит майдоннинг турли йўналишларида ўлчанган магнит-қаршилик анизотропиясига GaMnAs ни Be билан легирлашнинг таъсирини ўрганиб чиқди. Be билан легирлаш 3000 Э га қадар бўлган майдонлардаги магнит-қаршилик анизотропиясининг характеридаги ўзгаришга олиб келаши кўрсатилди. Аниқланган эффект эпитаксиал қатлам текислигида ётадиган йўналишдан одатда эпитаксиал қатлам текислигига тўғри келадиган йўналишдан енгил магнитланиш ўқининг йўналишини ўзгартириш билан боғлиқ бўлиши мумкин. Енгил магнитланиш ўқининг йўналишини ўзгариши, GaMnAs нинг яримўтказгичли матричасига Be киритилганда, эпитаксиал қатлам ҳажмида механик кучланишларнинг камайиши билан боғлиқ бўлиши мумкин.

**Калит сўзлар:** магнит анизотропия, магнит қаршилик, молекуляр нур эпитаксияси, енгил магнитланиш ўқи, GaMnAs, GaMnAs: Be.

### ЭФФЕКТЫ АНИЗОТРОПИИ МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЯ В ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ СЛОЯХ GaMnAs И GaMnAs:Be

Аннотация

В настоящей статье исследовано влияние солегирования примесью Be GaMnAs на анизотропию магнетосопротивления, измеренного при различных ориентациях магнитного поля. Показано, что солегирование Be ведет к изменению характера анизотропии магнетосопротивления в области полей до 3000 Э. Обнаруженный эффект может быть связан с изменением ориентации оси легкого намагничивания от направления, лежащего в плоскости эпитаксиального слоя, к направлению лежащему нормально к плоскости эпитаксиального слоя. Изменение направления оси легкого намагничивания может быть связано с уменьшением механических напряжений в объеме эпитаксиального слоя при введении примеси Be в полупроводниковую матрицу GaMnAs.

**Ключевые слова:** магнитная анизотропия, магнетосопротивление, молекулярно-лучевая эпитаксия, ось легкого намагничивания, GaMaAs, GaMnAs:Be.

**Введение.** На сегодняшний день разбавленные магнитные полупроводники на основе соединений A3B5 рассматриваются в качестве базовых материалов спинтроники – области полупроводниковой электроники, в которой центральное место занимает использование спиновой степени свободы в твердотельных системах [1-3]. Эффективность внедрения элементов спинтроники в полупроводниковую наноэлектронику зависит как от возможности эффективного контроля и управления спиновой ориентацией носителей заряда в этих элементах, так и от возможности их интеграции с традиционными, немагнитными, элементами наноэлектронных структур. Возможность создания приборов и структур полупроводниковой спинтроники требует создания материалов, сочетающих в себе полупроводниковые и магнитные свойства. Наиболее полно отвечают этим требованиям твердые растворы магнитной примеси Mn в GaAs. В твердых растворах такого типа состояние ферромагнитного упорядочения формируется при взаимодействии локализованных магнитных моментов ионов Mn с делокализованными спинами носителей заряда (дырок). При этом атомы Mn, занимая позиции в подрешетке Ga, являются эффективными акцепторами. Таким образом легирование GaAs примесью Mn

позволяет получить одновременно локализованные спины в узлах решетки, так и медиаторы ферромагнитного взаимодействия в разрешенных энергетических зонах.

Необходимо отметить, что концентрация Mn, достаточная для создания ферромагнитного упорядочения в GaMnAs может быть получена только при помощи термодинамически-неравновесных методов, таких как низкотемпературная молекулярно-лучевая эпитаксия [4, 5]. При этом, атомный радиус ионов Mn существенно превышает радиус замещаемых ионов Ga в растущем эпитаксиальном слое, что приводит к возникновению механических напряжений сжатия в его объеме. Росту таких напряжений способствует так же и высокая дефектность эпитаксиальных слоев, полученных методом низкотемпературной молекулярно-лучевой эпитаксии. Наличие механических напряжений приводит к понижению порядка симметрии GaMnAs и возникновению анизотропии его магнитных свойств. Анизотропия магнитных свойств GaMnAs является одним из критических факторов, определяющих свойства приборов и структур на его основе.

На сегодняшний день установлено, что природа эффектов, приводящих к возникновению магнитной анизотропии GaMnAs зависит от величины и знака механических напряжений в эпитаксиальном слое, а также концентрации носителей заряда [6-9]. Известно, что легирование GaMnAs примесью Be позволяет эффективно управлять концентрацией носителей заряда в его объеме [10]. Кроме того, легирование бериллием ведет к уменьшению постоянной решетки арсенида галлия, что позволяет компенсировать механические напряжения, возникающие в эпитаксиальном слое GaMnAs, в следствии разницы ионных радиусов Ga и Mn. Поэтому можно ожидать, что легирование Be может оказывать существенное влияние на параметры анизотропии эпитаксиального слоя GaMnAs.

**Образцы и методика эксперимента.** Исследуемые образцы GaMnAs легированные бериллием (в дальнейшем GaMnAs:Be) были получены методом низкотемпературной молекулярно-лучевой эпитаксии на полуизолирующую подложку GaAs с кристаллографической ориентацией (001). Температура подложки в процессе эпитаксии составляла 275 0C. Концентрация примеси Mn и Be в выращиваемых образцах задавалась температурой эффузионных ячеек, которые составляли 860 0C и 1100 0C соответственно. Данные режимы эпитаксии позволяли вырастить образцы с концентрацией Mn 0,78 ат.% и Be – 0,1 ат.%. Толщина исследуемых образцов составляла 250–300 нм. Температура Кюри исследуемых образцов была определена из измерений температурной зависимости аномального эффекта Холла и составила 50–55 K [11].

Измерения магнетосопротивления (MC) исследованных в настоящей работе образцов проводились четырёх зондовым методом в геометрии Ван-Дер-Пау. В процессе измерений магнитное поле было ориентировано нормально относительно исследуемой оси, как в плоскости образца, так и в направлении перпендикулярном поверхности образца.

Для удобства представления результатов зависимости MC от H представлялись в нормированном виде

$$R_h = \frac{R(H) - R(0)}{R(0)},$$

где  $R(H)$  – сопротивление, измеренное при заданном значении магнитного поля,  $R(0)$  – сопротивление образца в отсутствии магнитного поля.

Для определения влияния примеси Be на анизотропию магнетосопротивления GaMnAs полученные в данной работе результаты сопоставлялись результатами измерений MC несолегирированных Be эпитаксиальных слоев GaMnAs, выращенных при аналогичных режимах эпитаксии.

**Результаты и обсуждение.** На рис. 1, 2 приведены зависимости величины сопротивления исследуемых эпитаксиальных слоев от напряженности внешнего магнитного поля, измеренные при температуре 20 K вдоль кристаллографического направления  $\langle 110 \rangle$ . Из представленных зависимостей видно, что при различной ориентации магнитного поля относительно поверхности образца характер магнетосопротивления существенно различен. Особенно хорошо различия заметны в области слабых магнитных полей до 3000 Э.

Так для GaMnAs при нормальной ориентации магнитного поля относительно поверхности образца вдоль кристаллической оси  $[1\bar{1}0]$  наблюдается положительное MC. Величина положительного магнетосопротивления достигает максимума при значениях напряженности магнитного поля  $H = 2500$  Э, при дальнейшем увеличении напряженности магнитного поля магнетосопротивление меняет знак и становится отрицательным. Вдоль кристаллической оси  $[110]$  MC является отрицательным во всем диапазоне напряжений внешнего магнитного поля. Однако, в области полей от  $H = 2000$  Э до  $H = -2000$  Э наблюдается плато, то есть область, в которой значение магнетосопротивления практически не зависит от величины внешнего поля.

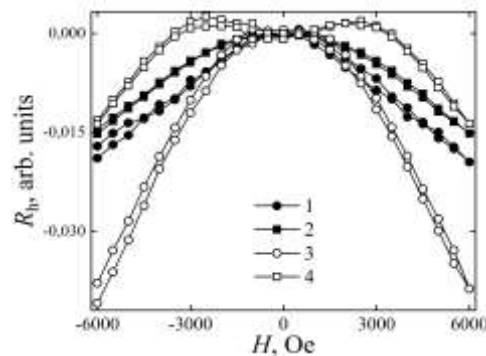


Рис. 1. Магнетосопротивление эпитаксиальных слоев GaMnAs и GaMnAs:Be при нормальной ориентации H относительно поверхности образца: 1 – GaMnAs:Be  $[110]$ , 2 – GaMnAs:Be  $[1\bar{1}0]$ , 3 – GaMnAs  $[110]$ , 4 – GaMnAs  $[1\bar{1}0]$ .

На зависимостях  $R_h(H)$ , полученных для GaMnAs:Be участки положительного MC отсутствуют для обеих осей, а наблюдается лишь плато MC при напряженности магнитного поля H до 1500-2000 Э. Различие в характере

магнетосопротивления, измеренного для кристаллических осей  $[110]$  и  $[\bar{1}\bar{1}0]$  проявляется лишь в некотором уменьшении ширины плато для оси  $[110]$ . Таким образом, при ориентации магнитного поля нормально к поверхности образца, в области магнитных полей до 3000 Э анизотропия МС для образца GaMnAs:Be выражена слабее, чем для образца несолегирированного Be.

Рассмотрим теперь магнетосопротивление эпитаксиальных слоев при параллельной ориентации магнитного поля относительно поверхности образца. В этом случае положительное магнетосопротивление наблюдается как в образцах GaMnAs, так и в образцах GaMnAs:Be.

Наибольшая величина положительного магнетосопротивления наблюдается вдоль оси  $[110]$  для образца солегирированного Be. Кроме того, величина положительного магнетосопротивления остается положительной вплоть до значений 3500 Э. Для кристаллической оси  $[\bar{1}\bar{1}0]$  также наблюдаются участки положительного магнетосопротивления в области напряженности магнитного поля от  $H = 1000$  Э до  $H = -1000$  Э.

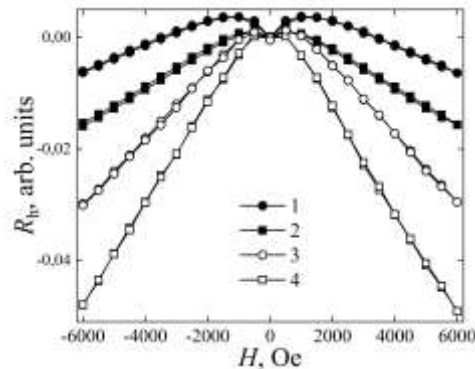


Рис. 2. Магнетосопротивление эпитаксиальных слоев GaMnAs и GaMnAs:Be при параллельной ориентации  $H$  относительно поверхности образца: 1 – GaMnAs:Be  $[110]$ , 2 – GaMnAs:Be  $[\bar{1}\bar{1}0]$ , 3 – GaMnAs  $[110]$ , 4 – GaMnAs  $[\bar{1}\bar{1}0]$ .

В образцах GaMnAs эффект положительного магнетосопротивления выражен слабее. На зависимостях  $R_H(H)$ , измеренных для образца GaMnAs, в области полей от  $H = 500$  Э до  $H = -500$  Э также наблюдаются участки положительного магнетосопротивления, однако величина его не превышает 0,1% для оси  $[110]$  и 0,02% для оси  $[\bar{1}\bar{1}0]$ .

Таким образом проведенные измерения магнетосопротивления эпитаксиальных слоев GaMnAs и GaMnAs:Be показали, что солегирирование Be ведет к изменению характера магнитной анизотропии при различной ориентации магнитного поля относительно исследуемой оси. Такое изменение, на наш взгляд, может быть связано с уменьшением механических напряжений в объеме эпитаксиального слоя. Уменьшение механических напряжений, в свою очередь ведет к изменению ориентации оси легкого намагничивания от направления, лежащего в плоскости эпитаксиального слоя, к направлению перпендикулярному плоскости эпитаксиального слоя [12].

**Заключение.** Проведены измерения магнетосопротивления эпитаксиальных слоев GaMnAs и GaMnAs:Be. Показано, что характер анизотропии МС зависит от ориентации магнитного поля относительно поверхности эпитаксиального слоя. Установлено, что изменение характера анизотропии может быть связано с механических напряжений в объеме эпитаксиального слоя, при солегирировании GaMnAs примесью Be.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Ch. Song, B. Cui, F. Li, X. Zhou, F. Pan. *Progr. Mater. Sci.*, 87, 33 (2017).
2. H. Munekata. In: *Molecular Beam Epitaxy: Materials and Applications for Electronics and Optoelectronics*, ed. By H. Asahi Y. Horikoshi (Hoboken, N. J., John Wiley & Sons, 2019).
3. Б.Н. Звонков, О.В. Вихрова, Ю.А. Данилов, М.В. Дорохин, А.В. Кудрин, И.Л. Калентьева, Е.А. Ларионова, В.А. Ковальский, О.А. Солтанович. *ФТП*, 53 (3), 351 (2019)
4. T. Hayashi, M. Tanaka, H. Shimada, N. Tsuchiya, Y. Otuka. *J. Cryst. Growth*, 175/176, 1063 (1997).
5. Y. Iye, F. Oiwa, A. Endo, S. Katsumoto, F. Matsukura, A. Shen
6. P. Juszyński, M. Gryglas-Borysiewicz, J. Szczytko, M. Tokarczyk, G. Kowalski, J. Sadowski, D. Wasik. *J. Magn. Magn. Mater.*, 396, 48 (2015).
7. J. Chang, S. Choi, K. Jae Lee, S.-K. Bac, S. Choi, P. Chongthanaphisit, S. Lee, X. Liu, M. Dobrowolska, J.K. Furdyna. *J. Cryst. Growth*, 512, 112 (2019).
8. T. Dietl. *J. Appl. Phys.*, 9, 7437 (2001).
9. M. Sawicki, F. Marsukura, A. Idiaszek, T. Dietl, G.M. Schott, C. Rueter, C. Gold, G. Karczewski, G. Schmidt, L.W. Molenkamp. *Phys. Rev. B*, 70, 245325 (2004).
10. S. Lee, S.J. Chung, I.S. Choi, Sh.U. Yuldashev, H. Im, T.W. Kang, W-L. Lim, Y. Sasaki, X. Liu, T. Wojtowicz, J.K. Furdyna. *J. Appl. Phys.* 93 (2003) 8307.
11. П.Б. Парчинский, А.С. Галашина, D. Kim. *Узб. физ. журн.*, 19 (3), 143 (2017). (P.B. Parchinskiy, A.S. Galashina, D. Kim. *Uzbek J. Phys.*, 19 (3), 143 (2017).
12. L. Theverhand, L. Largeau, O. Mauguin, A. Lemaitre, B. Theys, *Appl. Phys. Lett.* 2005. V87. P. 182506.



UDK:539.125.5:546.28

**Javlon RAYIMBAEV,**  
*Ulugh Beg Astronomical Institute, Institute of Nuclear Physics researcher*  
E-mail: javlon@astrin.uz,  
**Saidmuhammad AXMEDOV,**  
*Basic doctoral student of the National University of Uzbekistan*  
saidmuhammadaxmed@gmail.com  
**Gulhayo ABDURAZZOQOVA,**  
*Master's degree from the National University of Uzbekistan*  
E-mail:abdurazzoqovagulhayo97@gmail.com

*Тезлаткизлар лабораторияси мудири. Профессор, .ф-м ф.д.Холбоев И тақризи асосида*

### HIGH ENERGY PARTICLE FROM ASTROPHYSICAL COMPACT OBJECTS

Abstract

In this work, first, we have reviewed acceleration mechanisms of particles around astrophysical compact objects such as black holes and neutron stars. It is important and actual issue in relativistic astrophysics to study energy extraction processes from compact gravitating objects and acceleration of particles up to (ultra) high energies by such objects. We have studied electric Penrose process with the black hole charge,  $Q < M$  have also been studied and shown that... . Moreover, we have studied acceleration of charged particles on polar cap region of slowly rotating magnetized neutron stars in different regimes by Inverse Compton scattering and curvature radiation processes.

**Key words:** high energy particle, black holes, neutron stars, cosmic rays, acceleration mechanisms

### ЧАСТИЦА ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ ОТ АСТРОФИЗИЧЕСКИХ КОМПАКТНЫХ ОБЪЕКТОВ

Аннотация

В этой работе, во-первых, мы рассмотрели механизмы ускорения частиц вокруг астрофизических компактных объектов, таких как черные дыры и нейтронные звезды. Важной и актуальной задачей релятивистской астрофизики является изучение процессов извлечения энергии из компактных гравитирующих объектов и ускорения ими частиц до (сверх) высоких энергий. Мы изучили электрический процесс Пенроуза с зарядом черной дыры,  $Q < M$  также были изучены и показали, что Кроме того, мы исследовали ускорение заряженных частиц в области полярной шапки медленно вращающихся замагниченных нейтронных звезд в различных режимах за счет процессов обратного комптоновского рассеяния и кривизны излучения.

**Ключевые слова:** частицы высоких энергий, черные дыры, нейтронные звезды, космические лучи, механизмы ускорения.

### ASTROFIZIK KOMPOKT OBYEKT LARDAN YUQORI ENERGIYALI ZARRACHA

Anotatsiya

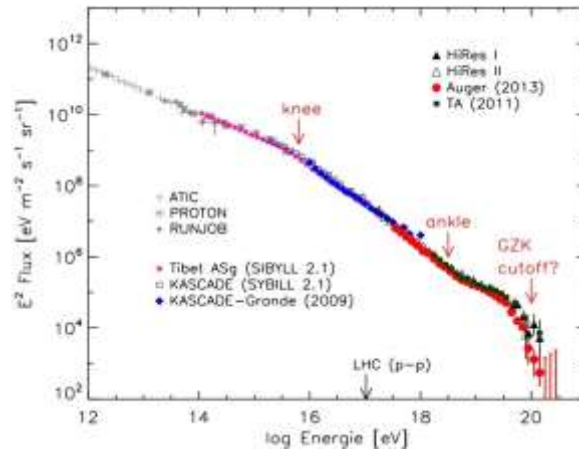
Ushbu ishda, birinchi navbatda, biz qora tuynuklar va neytron yulduzlari kabi astrofizik ixcham ob'ektlar atrofidagi zarrachalarning tezlanish mexanizmlarini ko'rib chiqdik. Relyativistik astrofizikada ixcham tortishuvchi jismlardan energiya olish jarayonlarini va bunday ob'ektlar tomonidan zarrachalarning (ultra) yuqori energiyagacha tezlashishini o'rganish muhim va dolzarb masaladir. Biz qora tuynuk zaryadi bilan elektr Penrose jarayonini o'rgandik,  $Q < M$  ham o'rganildi va ... ekanligini ko'rsatdi. Bundan tashqari, biz teskari Kompton tarqalishi va egrilik nurlanish jarayonlari orqali turli rejimlarda sekin aylanadigan magnitlangan neytron yulduzlarning qutb qopqog'i hududida zaryadlangan zarrachalarning tezlashishini o'rgandik.

**Kalit so'zlar:** yuqori energiyali zarralar, qora tuynuklar, neytron yulduzlar, kosmik nurlar, tezlanish mexanizmlari.

General relativity and gravitation : 04.40.Dg, 04.40.Nr, 04.50.Kd

**Introduction.** The recent unprecedented discovery of extragalactic high-energy neutrinos has enabled pinpointing their source to blazars, which are supermassive black holes at a distance of 1.75 Gpc with relativistic jets directed almost exactly toward us. It is generally believed that such neutrinos are tracers of ultrahigh-energy cosmic rays (UHECRs) which are the most energetic among particles detected on Earth, with an energy  $E > 10^{18}$  eV that is unreachable by the current most powerful particle accelerators, such as the Large Hadron Collider, with a maximum energy  $< 10^{13}$  eV per beam. Constituents of UHECRs were thought to be dominated by protons, as indicated by cosmic-ray fluorescence measurements, although recent observations are suggesting heavier constituents. For Galactic cosmic rays, one should observe anisotropy in the arrival direction dominantly on the Galactic plane. As observed by both the Pierre Auger Observatory in the Southern Hemisphere in the Telescope Array in the Northern Hemisphere, UHECRs with energy  $> 10^{18}$  eV are extragalactic with very high confidence level. The spectrum of cosmic rays exhibits the presence of the so-called knee and ankle. Cosmic rays with energy up to  $10^{15.5}$  eV are generally believed to be produced in Galactic supernova explosions, while the significant lowering of flux between the knee and  $10^{18.5}$  eV suggests a change in the source of such particles.[1]

Figure 1: Cosmic-ray spectrum (energy flux multiplied by E2 versus energy of particles)



The flux of cosmic rays with energies over than 1019 eV is extremely low, which causes the main difficulty in unveiling their source and physics. In order to explain the highest energy cosmic rays, several exotic scenarios have been proposed, including extra dimensions, violation of Lorentz invariance, and the existence of new, exotic particles. By analysing the radio images of the blazar jets, Britten et al. Suggested that high-energy neutrino can possibly be explained by the collision of two jets. Among the astrophysical acceleration mechanisms for UHECRs, relativistic shocks in a plasma of relativistic jets have been previously considered among the most plausible. However, the recent results and estimates may indicate that shock acceleration is not able to account for UHECR energies above 1020 eV. Therefore, the production and acceleration mechanisms of UHECRs remain unclear. Cosmic rays consist of high energetic (charged and uncharged) particles, atomic nuclei and electromagnetic wave ( $\gamma$ -rays), that constantly come from the Sun, galactic and extragalactic sources.[2] The cosmic-ray spectrum measured on Earth (Fig.2) traces a surprisingly regular declining power law over more than 10 orders of magnitude in energy  $\sim 10^{10} \div 10^{21}$  eV (ultra-high energy protons). Many interests on the particles with the energy range originated outside our solar system. In fact, the presence of breaks in the power law in the cosmic ray spectrum (so-called the knee at 1015 eV and the ankle at 1018 eV) implies the changing of energy regimes and sources of the particles.[12]

Note that in Fig.2 observational data from Agricultural Technology Information Centre (ATIC) [3], PROTON [4], RUNJOB [5], Tibet AS- $\gamma$  [6], Karlsruhe Shower Core and Array DETector (KASCADE) [7], Karlsruhe Shower Core and Array DETector – Grande (KASCADE-Grande) [8], High Resolution Fly's Eye-1 (HiRes-I) [9], High-Resolution Fly's Eye-2 (HiRes-II) [10], and Auger [11] are used. LHC energy reach of p p collisions (in the frame of a proton) is indicated for comparison. Data collected by R. Engel. Adapted from Kotera & Olinto (2011).

The measurement of a flux suppression at the highest energies [12], reminiscent of the "GZK cut-off" [13] produced by the 25 interaction of particles with the cosmic microwave background photons for propagations over intergalactic scales, has appeared the debate concerning the extragalactic provenance of ultra-high energy cosmic rays. But the exact source is still to be found, and how these particles can be accelerated to such energies is another enigma. Most of these particles are charged, and thus deflected by cosmic magnetic fields at all scales, mainly Galactic and extragalactic fields depending on their energies. Tracing back their trajectories to their sources is a challenge, given our poor knowledge of these magnetic fields. Above 1015 eV, particles cannot be detected directly. Because when the atmosphere acts like a calorimeter: the primary cosmic rays interact with the air molecules and cause the secondary particles to rain. To reconstruct the characteristics of the primary particles by measuring these air-showers, one has to rely on hadronic interaction models, extrapolated at energies too high to be tested experimentally. Some particles are indeed detected with energies 40 million times larger than that reached with the Large Hadronic Collider. Cosmic rays are also at the origin of most of the high-energy neutrinos and of the non-thermal radiation, in particular of gamma rays. Hence, one natural strategy is to conduct multi-messengers studies that cross-correlate cosmic-ray, neutrino, and gamma-ray information, to ultimately understand the mechanisms at play in the most powerful sources of our Universe. With the first detection of cosmic neutrinos with the Ice Cube experiment in 2012 and the consequent birth of high-energy neutrino astronomy, we stand today at the threshold of an exciting multi messenger era.

Throughout this work, we use (-, +, +, +) for the space-time signature and system of units where  $G = c = 1$ . Latin indices run from 1 to, 3 and Greek ones from 0 to 3.

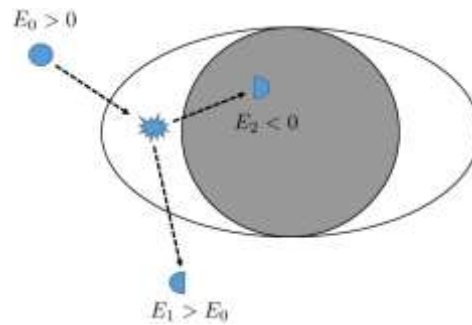
Black holes as a source of high energy particles.

In fact, supermassive black holes are huge energy reservoirs in the universe, with total mass more than tens of millions Solar mass or  $10^{66}$  eV. This is a huge amount of energy. However, almost all (more than 90 % of) mass of the black hole accumulated inside the sphere so-called event horizon where no particle, even light rays can not escape the region. So, in which mechanism and/or process cause to accelerate particles around black holes. For the first time, R.Penrose has suggested his mechanism.

According to Penrose process, a particle fall to the region between event and static horizons of the black hole so-called ergoregion decays by two particles. Assumed that one of the particles falls down to the center of the black hole with negative energy, and the second one goes out with the energy higher than the initial particle's energy. However, the efficiency of the process for extremely rotating Kerr black holes is about 20.7%. Later, N.Dadhich has suggested the Penrose process in the presence of external magnetic field, so-called Magnetic Penrose process. The idea is that a neutral particle decays by two charged particles with the same value, but different sign. The energy efficiency increases up to 120 % due to the Lorentz forces by the external magnetic field. Recently, A.Tursunov and N. Dadhich have shown that three different regimes in the MPP: low, moderate and ultra. For example, in  $\beta$ -decay and electron-positron pair production, the process carries by low efficiency regime when escape particle is electron, while for positron escaped cases it carries in ultra regime with 106 %. Another much interesting

and applicable version of the Penrose process called electric Penrose process also been formulated by Tursunov et al. assuming the black hole has less electric charge that not enough to effect on the spacetime around the black hole.

Figure 2: Schematic view of classical Penrose process



In this section, we will carry their calculation for the case when the black hole charge is enough to effect on the spacetime around the black hole. The spacetime around the electrically charged Reissner-Nordstöm black hole in spherical coordinates ( $\alpha = \{t, r, \theta, \phi\}$ ) describes as follows,

$$ds^2 = -f(r)dt^2 + \frac{1}{f(r)}dr^2 + r^2[d\theta^2 + \sin^2\theta d\phi^2] \tag{1}$$

with the following gravitational metric function

$$f = 1 - \frac{2M}{r} + \frac{Q^2}{r^2} \tag{2}$$

and the four electromagnetic potential around the BH

$$A_\alpha = \frac{Q}{r} \{1, 0, 0, 0\} \tag{3}$$

where M and Q are total mass and electric charge of the black hole, respectively. Generally the horizon of a black hole in spacetime can be found in the following standard way  $g_{rr} \rightarrow \infty$  or  $g_{tt} \rightarrow 0$  and the radius of event horizon for the metric (1) in the case of electrically charged black hole is

$$r_{\pm}^h = 1 \pm \sqrt{1 - \frac{Q^2}{M^2}} \tag{4}$$

One can easily see from Eq.(4) implies  $Q < M$ . Following Arman et al., we will calculate energy of second particle

$$E_2 = \frac{\Omega_0 - \Omega_1}{\Omega_2 - \Omega_1} (E_0 + q_0 A_t) - q_2 A_t \tag{5}$$

where  $\Omega_i = \frac{d\phi_i}{dt}$  is the angular velocity of the particles,  $i = 0, 1, 2$ . Now, we consider

that the initial particle's angular momentum can be found using the same approach as it is in Ref.[2] and decays at near the horizon of the black hole. We also consider the initial particle is uncharged ( $q_0 = 0$ , and  $q_1 = q_2$ ). So, the two particles accelerates following their Keplerian orbits opposite to each other. Consequently, we have

$$\Omega_0 = \frac{1}{r} \sqrt{f(r)[1 - f(r)]} \quad \Omega_1 = -\Omega_2 = \sqrt{\frac{f(r)}{2r}} \tag{6}$$

Assume that the energy of the initial particle is equal to its rest mass energy, i.e.,  $E_0 = m_0$  and  $q_2 = Ze$ ,  $m_0 = Am_n$  where,  $m_n, e$  and  $A$  are atomic mass, elementary charge and atomic number.

High energy particles from highly magnetized neutron stars

In this section, we present to study high energy particles from highly magnetized neutron stars. Here, we use slow rotation approximation for the spacetime of rotating neutron stars. As a proof of validity of the approximation, we calculate the spin parameter as

$$\frac{a}{M} = \frac{J}{M^2 c} = \frac{I\Omega}{M^2} \approx \frac{1}{15} \left(\frac{P}{1 \text{ ms}}\right)^{-1} \left(\frac{M}{1.4 M_\odot}\right)^{-1} \left(\frac{R}{10 \text{ km}}\right)^2 \tag{7}$$

where M, R, J and I are the mass, radii, angular momentum and moment of inertia of the neutron star, respectively, and P is the period of the star correspondingly, the angular velocity of the star is  $\Omega = \frac{2\pi}{P}$ . The estimation shows that the value of the square of dimensionless spin parameter even for millisecond pulsars (with mass  $1.4 M_\odot$  and radii 10 km) is about 0.0044 (0.4%), so we can neglect it. This estimation implies that neutron stars best fit to slow rotation approximation.

The spacetime exterior to a slowly rotating magnetized relativistic star in Einstein- aether gravity can be expressed in spherical coordinates (t, r,  $\theta, \phi$ ) in the following form: [14], [15], [16]

$$ds^2 = -N^2 dt^2 + N^{-2} dr^2 + r^2(d\theta^2 + \sin^2\theta [d\phi^2 - 2\omega^* dt d\phi])$$

with the lapse function

$$N^2 = 1 - \frac{2M}{r} + \frac{c_{14} - 2c_{13}M^2}{1 - c_{13}2r^2}, \quad r \geq R \tag{8}$$

where  $c_{13}$  and  $c_{14}$  the coupling constants of the aether theory. The frame dragging angular velocity in the spacetime (8) can be expressed in the following form:

$$\omega^* = \omega \left(1 + \frac{2c_{13} - c_{14}M}{1 - c_{13}4r}\right) \quad \text{with} \quad \omega = \frac{2J}{r^3} \tag{9}$$

where the quantity  $J = I\Omega$  is the total angular momentum of the relativistic star with moment of inertia I and the angular velocity  $\Omega$ . In general, the moment of inertia measurements for the neutron stars is one of the most difficult problems in observational relativistic astrophysics. However, one may assume theoretically that the inertia moment can be expressed as  $I = \beta MR^2$ , where  $\beta$  stands for normalization coefficient reflecting spacetime effects (for uniform sphere in flat spacetime  $\beta = 2/5$ ). There has recently been growing evidence for the existence of neutron stars possessing magnetic fields with strengths that exceed the quantum critical field strength of  $4.4 \times 10^{13} \text{ G}$ , at which the cyclotron energy equals the electron rest mass. Such

evidence has been provided by new discoveries of radio pulsars having very high spin-down rates and by observations of bursting gamma-ray sources termed magnetars.

One of the most mysterious questions of pulsar physics that has no unique answers is the polar cap radiation mechanisms. One likely scenario was described above: magnetospheric charges are accelerated along open magnetic field lines (which are concentrated at the poles) and radiate  $\gamma$ -rays that subsequently generate the electron-positron pairs in the strong magnetic field. The primary beam and the pair plasma combined provide the mechanism of the electromagnetic radiation. This motivates the studies of the equations of motion of relativistic charged particles in the plasma magnetosphere of the slowly rotating magnetized neutron stars.

Now, in order to see the equation of motion of a charged particle in an electro- magnetic field, we use the following equation [17]

$$\frac{dv^\mu}{d\tau} + \Gamma_{\nu\lambda}^\mu v^\nu v^\lambda = \frac{e}{m} F^{\mu\nu} v_\nu, \tag{10}$$

where  $m$  and  $e$  mass and electric charge of the particle,  $v^\mu = dx^\mu/d\tau$  is four-velocity of the particle,  $\Gamma_{\nu\lambda}^\mu$  are Christoffel symbols for given spacetime metric and  $\tau$  is an arbitrary affine parameter. Since open field lines area (the polar cap) is small (with an angular size of  $\sim 5^\circ$ ), we can use the small angle ( $\theta \ll 1$ ) approximation for the polar cap region. Eq.(10) can be rewritten as [17]

$$\frac{N^2(s, c_{13}, c_{14})}{s^2} \frac{d}{ds} \left( s^2 \frac{d\phi}{ds} \right) - \frac{l(l+1)}{s^2} \phi = \frac{B}{B_0} (j - \bar{j}),$$

$$\frac{d}{ds} (N(s, c_{13}, c_{14}) \gamma) = \frac{1}{N^2(s, c_{13}, c_{14})} \frac{d\phi}{ds}, \tag{11}$$

here  $l$  is the multipole number and the Lorentz factor  $\gamma$  is defined as

$$\gamma \equiv v^\mu u_\mu = \frac{1}{\sqrt{1-V^2}}, \tag{12}$$

where  $u_\mu$  is the four-velocity of fiducial observer,  $V^i \equiv \frac{v^\mu h_\mu^i}{\gamma}$  is the 3-dimensional spatial velocity with the projection tensor  $h_{\alpha\beta} g_{\alpha\beta} + u_\alpha u_\beta$ , and for convenience we introduced the following normalized variables [17]

$$j \equiv -\frac{2\pi N(s)\rho(s)}{\Omega B(s)}, \quad \phi(s) \equiv \frac{e}{m} \Phi(s),$$

$$\bar{j} \equiv -\frac{2\pi N(s)\rho_{GJ}(s)}{\Omega B(s)}, \quad s \equiv \sqrt{\frac{2\Omega B e}{mc^2}} r,$$

where,  $B \equiv |B| = B^r + O(\theta^2)$ ,  $\Phi$  is the scalar potential of the electromagnetic field and  $\rho$  is the charge density on the stellar surface. In order to clarify the relationship between  $j$  and  $\bar{j}$  at  $\chi = 0$ , we expand  $j$  in power series for small parameter  $y = \frac{r}{R} - 1$  up to the first order in the following form [17]

$$\bar{j} \approx j_R [1 + y \frac{3\omega_R}{\Omega} \left( 1 + \frac{c_{14}-2c_{13}}{1-c_{13}} \right)^{-1}], \tag{13}$$

where  $\bar{j} = 1 - \frac{\omega_R}{\Omega} \left( 1 + \frac{c_{14}-2c_{13}}{1-c_{13}} \right)^{-1}$  with  $\omega_R = \omega(r = R)$  It is clear that the presence of non-zero MOG

parameter provides additional radial dependence on  $\bar{j}$  In Fig. 3 we have shown dependence of Lorentz  $\gamma$ -factor of the accelerating charged particles on dimensionless height ( $y = \eta - 1$ ) for different values of aether parameters  $c_{13}$  and  $c_{14}$ , for both cases  $j = 0.99j_{GJ}$ , and  $j = 1.01j_{GJ}$  Lorentz  $\gamma$ -factor increase in the presence of the parameters  $c_{13}$  and  $c_{14}$ . It is seen from the figure that the velocity of the charged particle is zero at closer points in the right panel of the figure, in GR case the particles up to a critical distance radiates electromagnetic radiation due to

$j = 0.99j_{GJ}$ , the right one for  $j = 1.01j_{GJ}$ ,

inverse Compton scattering. In this scenario, the particle accelerates and due to the radiation it loses its kinetic energy.

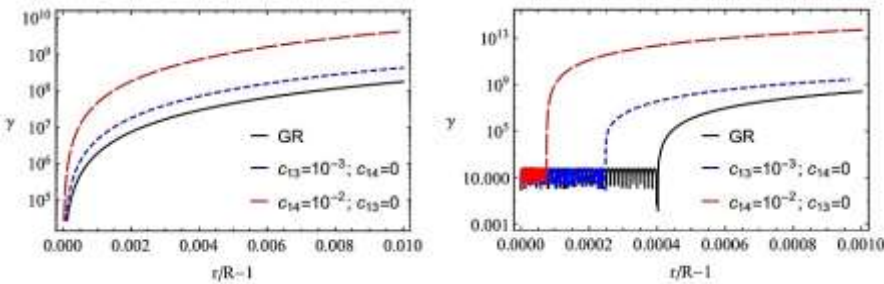


Figure 3: Numerical solution of Eq.(11) for the Lorentz factor  $\gamma$  of a neutron stars with mass  $M = 2\text{km}$ , radius  $R = 10\text{km}$  and rotation period  $P = 1\text{ms}$  for  $l = 2$ . As initial condition, we use  $\gamma_R = \gamma(r=R) = 1.000001$ . The left panel corresponds

Then again accelerates by electric field parallel to the magnetic field lines, in turn the accelerated particles radiates again and again. In the distances over than the critic distance, the curvature radiation dominates. The Lorentz factor reaches up to about 60, it means that ( $50 \lesssim \gamma \lesssim 104$ ) the regime corresponds to resonance in Compton scattering in which the scattering cross-section increases significantly and thus the energy loss of the accelerated charged particle is high. Then the accelerated electrons/positrons radiate  $\gamma$ -rays through inverse Compton scattering with the energy enough to create  $e^\pm$  pairs, i.e.  $E_\gamma \geq 2m_e c^2$ , in turn, the  $\gamma$ -rays start pair production  $\gamma \rightarrow e^+ + e^-$  in the magnetic field of the star. In the presence of aether parameter, the accelerated electrons from the surface of the star radiate at the distances closer to the surface than in general relativity and pair production process starts much earlier, because the charged particles are accelerating under two different forces: those of the accelerating electric field and the gravitational field of the central object. Here, we test the effects of the aether parameter on  $\gamma$  factor for the accelerating charged particle in a typical neutron star's polar cap region. In  $j > \bar{j}$  case (the bottom panel in figure 3) the value of the Lorentz factor at large distances reaches to more than 106 and the curvature radiation dominates being a source of ultra-high/high energy  $\gamma$  photons.

**Conclusions.** The present work, dedicated to acceleration processes around charged black holes with linear electric charge and rotating highly magnetized neutron stars, to understand the origin of high energetic protons, electrons and  $\gamma$ -rays, in cosmic ray spectrum. Energy release from charged black holes by electric Penrose process have been investigated and shown that... Finally, we also have studied energetic processes on the polar cap region of rotating magnetized neutron stars by inverse Compton scattering and curvature radiation processes. It is obtained that the presence of both aether parameters cause to increase the  $\gamma$ -factor of accelerating charged particles in both inverse Compton scattering and curvature radiation mechanisms. However, in curvature radiation case the value of relativistic factor about  $\sim 10^6$  times higher than it is in the case of inverse Compton scattering. Moreover, when  $j > j_{GJ}$  the Lorentz factor tells about repeating radiation in the form of pulses continuously at close distances to the surface of the neutron star. The distance become shorter in the presence of both aether parameters, while the effect of  $c_{14}$  parameter is stronger than the effect of parameter  $c_{13}$ . In both panels, it is seen that at large distances the Lorentz factor grows very slowly and reaches its saturation value.

**Acknowledgements.** This research is supported by Grants No. VA-FA-F-2-008, No. MRB-AN-2019-29 and No. YFA-Ftech-2018-8 of the Uzbekistan Ministry for Innovational Development.

#### REFERENCES

1. Tursunov A. et al. Supermassive black holes as possible sources of ultrahigh-energy cosmic rays.//The Astrophysical Journal.-2020. – 895.- 1.- p.14.
2. Blasi P., Epstein R. I., Olinto A. V. Ultra-high-energy cosmic rays from young neutron star winds.// The Astrophysical Journal.-2000. – 533. -2.
3. Kotera K. Cosmic rays and pulsars: connections from low to ultrahigh energies. //Diss. UPMC-Paris 6 Sorbonne Universités Id: tel-01968764, -2014.
4. Ahn H. S. et al. All-Particle Spectrum Measured by ATIC-1. //International Cosmic Ray Conference.-2008. -2. -p.79.
5. Grigorov N. L. et al. Energy spectrum of primary cosmic rays in the 10 11- 10 15 eV energy range according to the data of Proton-4 measurements. 12th.//International conference on cosmic rays.-1971. -1. -p.172.
6. Apanasenko A. V. et al. All particle spectrum observed by RUNJOB.//International Cosmic Ray Conference.-2001. – 5. - p.1622.
7. Chen D. The cosmic ray all-particle spectrum in the wide energy range from 10 14 eV to 10 17 eV observed with the Tibet-III air shower array. //International Cosmic Ray Conference. -2008. -4. -p.103-106.
8. Kampert K. H. et al. Cosmic Ray Energy Spectra and Mass Composition at the Knee—Recent Results from KASCADE. Nuclear Physics B-Proceedings Supplements -2004. -136. -p.273-281.
9. Apel W. D. et al. Cosmic Ray Measurements with the KASCADE-Grande Experiment.// arXiv preprint arXiv:0906.4007 -2009.
10. Abbasi R. U. et al. Measurement of the flux of ultra high energy cosmic rays by the stereo technique. //Astroparticle Physics.-2009. – 32. -1. -p.53-60.
11. Abbasi R. U. et al. First observation of the Greisen-Zatsepin-Kuzmin suppression. //Physical review letters. -2008. -100. -10. -p.101101.
12. Aab A. et al. The Pierre Auger observatory: contributions to the 33rd international cosmic ray conference.// International Cosmic Ray Conference arXiv preprint arXiv:1307.5059. -2013.
13. Abraham J. et al. Measurement of the depth of maximum of extensive air showers above 10 18 eV. //Physical review letters -2010. -104. -9. p.91101.
14. Berglund P., Bhattacharyya J., Mattingly D. Mechanics of universal horizons. //Physical Review D.-2012.-85.-12. - p.124019.
15. Barausse E., Sotiriou T. P., Vega I. Slowly rotating black holes in Einstein-æther theory.//Physical Review D. -2016.-93.-4. -p.044044.
16. Zhu T. et al. Shadows and deflection angle of charged and slowly rotating black holes in Einstein-Æther theory.//Physical Review D. -2019. -100.-4. -p.044055.
17. Sakai N., Shibata S. General relativistic electromagnetism and particle acceleration in a pulsar polar cap. //Astrophysical Journal.-2003. -584.-1. -p.427-433.



УДК: 537.58:541.183.23:547.233:547.51

**Ганибой РАХМАНОВ,**

доцент Национальный университет Узбекистана

e-mail: rakhmanov.gt@mail.ru

**Тургунали АХМАДЖАНОВ,**

доцент Национальный университет Узбекистана

**Икром УРОЛОВ,**

преподаватель Национальный университет Узбекистана

ТГТУ доктори, .ф-м ф.н. Абдувоитов А. тақризи асосида

### ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА ПОВЕРХНОСТНОЙ ИОНИЗАЦИИ И ОЦЕНКА ПОТЕНЦИАЛОВ ИОНИЗАЦИИ НЕКОТОРЫХ СОЕДИНЕНИЙ ПРИ ДИССОЦИАТИВНОЙ ПОВЕРХНОСТНОЙ ИОНИЗАЦИИ

Аннотация

В работе приведены результаты исследования диссоциативной поверхностной ионизации (ПВИ) некоторых молекул органических соединений по измерению коэффициента поверхностной ионизации  $\beta$  в нестационарных условиях. По определённым коэффициентам и измеренной работе выхода окисленного вольфрама оценены потенциалы ионизации  $V$  некоторых радикалов при адсорбции молекул морфина и тебаина на поверхности окисленного вольфрама.

**Ключевые слова:** поверхностная ионизация, нестационарные процессы, время жизни, константы скоростей, работа выхода, потенциал ионизации

### DETERMINATION COEFFICIENT SURFACE IONIZATION AND IONIZATION POTENTIAL SAME ORGANIC COMPOUNDS UNDER DISSOCIATION SURFACE IONIZATION

Abstract

This paper presents the results of a study of dissociative surface ionization (DSI) of some molecules of organic compounds by measuring the surface ionization coefficient  $\beta$  under nonstationary conditions. The ionization potentials  $V$  of some radicals during the adsorption of morphine and thebaine molecules on the surface of oxidized tungsten are estimated from certain coefficients and the measured work function of oxidized tungsten.

**Key words:** surface ionization, non-stationary processes, lifetime, velocity constants, output operation, ionization potential

### ДИССОЦИАТИВ СИРТИЙ ИОНЛАШИШ ЖАРАЁНИДА СИРТИЙ ИОНЛАШИШ КОЭФФИЦИЕНТИНИ ВА БАЪЗИ ОРГАНИК БИРИКМАЛАРНИНГ ИОНЛАШИШ ПОТЕНЦИАЛИНИ АНИҚЛАШ

Аннотация

Ushbu maqolada nostatsionar sharoitlarda sirt ionlanish koeffitsienti  $\beta$  ni o'lchash orqali ba'zi organik birikmalar ba'zi molekularining dissosiativ sirtiy ionlanishini (SI) tadqiq qilish orqali nostatsionar sharoitlarda sirtiy ionlanish koeffitsienti  $\beta$  ni o'lchash natijalari keltirilgan. koeffitsientlari va oksidlangan volframning o'lchangan chiqish ishi qiymatlaridan foydalanib baholanadi. Sirtiy iynlashish koeffitsiyenlari va oksidlangan volframning o'lchangan chiqish ishi qiymatlaridan foydalanib morfina va tebain molekularining oksidlangan volfram sirtidagi adsorbsiyasi jarayonida ba'zi radikallarning ionlanish potentsiallari  $V$  baholandi.

**Калит so'zlar:** yuzadagi ionlanish, statsionar jarayonlar, yashash vaqti, tezlik konstantalari, chiqish ishi, ionlanish potentsiali

**Введение.** Явление термической ионизации атомов и молекул нашли и находят многочисленные применения в практике физико-химических исследований. С помощью ПВИ можно получить потоки ионов, детектирование нейтральных частиц, можно определить потенциалы ионизации и средства к электрону, а также кинетических характеристик термодесорбции и гетерогенной реакции диссоциации молекул на поверхности которые очень важны для изучения взаимодействия многоатомных частиц с поверхностью твёрдого тела. Молекулы образуют ионы путём поверхностной ионизации и закономерности эмиссии молекулярных ионов, как исходных молекул, также продуктов гетерогенной реакции диссоциации на поверхности могут определяться соотношениями которые следуют из формулы Саха-Ленгмюра для степени ПВИ [1-4]. Поверхностно - ионизационные токи в основном зависят от соотношений между работой выхода и потенциалом ионизации.

**Методика исследования.** Одним из основных характеристик атомов и многоатомных частиц, а также поверхности является работа выхода и потенциал ионизации. От этих характеристик во многом зависят процессы адсорбции, десорбции и гетерогенные реакции диссоциации молекул на поверхности. В своё время широкое применение нашло определение потенциала ионизации атомных и многоатомных частиц с помощью уравнения Саха-Ленгмюра [1,4]

$$J_i = e v_i A \exp \frac{e[\varphi_i - V_i]}{kT} \quad (1)$$

где  $e$  – заряд электрона;  $v_i$  – поток ионизирующихся частиц, которая равно  $v_i = v \cdot \beta$ , где  $v$  – поток частиц поступающий на поверхность, а  $\beta$  – коэффициент поверхностной ионизации (ПВИ) на ионизирующей поверхности;  $\varphi_i$  – ионная работа выхода поверхности и  $V_i$  – потенциал ионизации ионизирующихся частиц. По зависимостям  $\ln J(T) =$

$f\left(\frac{5040}{T}\right)$  можно найти разность работы выхода и потенциала ионизации. В методе ПВИ преимущественно ионизируются не сами исходные молекулы, а продукты их гетерогенной реакции диссоциации на поверхности [3], этот метод не приемлема, так как в этом случае как ионные токи, так и коэффициент ионизации  $\beta$ , а также коэффициент гетерогенной реакции диссоциации молекул на поверхности  $\gamma_i$  зависят от температуры. В таких случаях метод оценки потенциала ионизации можно определить по измеряемым величинам коэффициента поверхностной ионизации.

Основываясь на определении коэффициента поверхностной ионизации и уравнение Саха-Ленгмюра можем получить соотношение [2]

$$V = \varphi + kT \frac{\ln A(1 - \beta)}{\beta} \quad (2)$$

где  $\beta$  - коэффициента поверхностной ионизации,  $A$  - отношение статистических сумм в заряженном и в нейтральном состояниях  $A = \frac{g^+(T)}{g^0(T)}$ . Для большинство многоатомных частиц она близка единице. Из соотношения (2) можно получить потенциала ионизации радикалов ионизирующих частиц, при определенной работы выхода измерив коэффициента  $\beta$ . Мы в данной работе для измерения коэффициента ПВИ использовали изотермический метод нестационарных процессов ПВИ. Коротко рассмотрим этот метод.

Пусть на однородный эмиттер поступает не изменяющейся во времени постоянный поток молекул, на поверхности эмиттера эти молекулы могут частично превращаться в видов частиц. На рис.1, а показано изменение концентрации и тока во времени, когда на отрезке времени  $0 \div f$  между эмиттером и вытягивающим электродом подается задерживающие ионы разность потенциалов  $U$ .

Концентрация ионизирующихся частиц, образованных при химических превращениях возрастает, а при изменении полярности электрического поля ( $t = f$ ) концентрация адсорбированных частиц начинает падать. Поэтому в коллекторной цепи возникает всплеск ионного тока  $i$ - частиц с последующим уменьшением тока, как показано на рис.1,в.

Изменение поверхностной концентрации  $N(t)$  определяется уравнением непрерывности

$$\frac{dN(t)}{dt} = v - K(T)N(T) \quad (3)$$

где  $v$ - поток частиц, поступающих на поверхность,  $T$ - температура адсорбента или сумма констант скоростей всех гетерогенных процессов, влияющих на поверхностную концентрацию ионизируемых частиц.

В случае ПВИ продуктов химических превращений исходных молекул на поверхности  $\wedge$  изменение поверхностной концентрации  $i$ -тых частиц  $n_i(t)$  следует уравнению

$$\frac{dn_i(t)}{dt} + K_i(T) \cdot n_i(t) = v_i(t) \quad (4)$$

где  $K_i(T) = K_{i+} + K_{i0} + \sum K_{imd}$ , а эффективной поток  $i$ - тых частиц на поверхности  $v_i(T) = N(t)K_{Mi}^d$ , где  $N(t)$  - концентрация исходных молекул, а  $K_{dMj}$ - константа скорости реакции диссоциации исходной молекулы с образованием  $i$ - ой частицы.

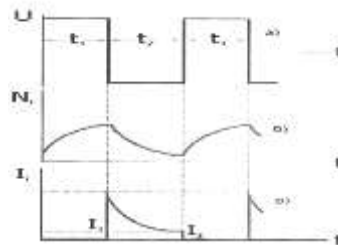


Рис. 1. Иллюстрация к методу модуляции напряжения: а) форма модулирующего напряжения; б) изменение во времени концентрации адсорбированных частиц на поверхности эмиттера; в) форма импульсов тока десорбирующихся ионов;  $T = \text{const}$ ;  $v = \text{const}$ .

Решение этой уравнения имеет следующий вид:

$$n_i(t) = n_i e^{-K_i(T)t} + (N_1 - N_0) \frac{K_M^d}{K_i(T) - K(T)} (e^{-K(T)t} - e^{-K_i(T)t}) + \frac{K_M^d N_i}{K_i(T)} (1 - e^{-K_i(T)t}) \quad (5)$$

Изменение тока со временем  $i$  определяется следующим образом:

$$\Delta I = eC_i \exp\left(-\frac{E_i^+}{kT}\right) K_M^d \left[ \frac{N_0}{K_i(T) + K_i^d(T)} - \frac{N_i}{K_i(T)} \right] e^{-K_i(T)t} + \frac{N_0 - N_1}{K_i(T) - K(T)} (e^{-K(T)t} - e^{K_i(T)t}) \quad (6)$$

Из решения (4) видно, что изменение  $\Delta I$  - тока ионов  $i$ - тых частиц не следует экспоненциальному закону и зависит как от  $K_M$ , так и от  $K_i$ . Однако в случае ММН можно выделить случаи когда изменение тока  $\Delta I_i$  описывается экспонентой

$$\Delta I \sim \Delta n_i = \Delta n_{\text{max}} \exp(-K_i(T) \cdot t) \quad (7)$$

Для этого необходимо, чтобы при изменении полярности электрического поля ММН не было увеличения поверхностной концентрации исходных молекул  $N(t)$ .

Это возможно, если  $K_M^+ \ll K_M^0$  например, когда исходные молекулы не десорбируются в виде ионов из-за относительно высокого значения потенциала ионизации и превращения их на поверхности в другие частицы ионизируемые путем ПВИ. Это часто встречаемый на практике ПВИ органических молекул случай, когда в виде ионов с большой эффективностью десорбируются продукты диссоциации молекул и не десорбируются  $M^+$  [5,6].

В этом случае по зависимостям  $\ln \Delta I_i = f(t)$  можно определить кинетические характеристик термодесорбции продуктов химических превращений на поверхности в виде ионов и нейтральных частиц.

Помимо этого, используя метод модуляции напряжения, можно определить одну из важнейших характеристик ПВИ - коэффициент поверхностной ионизации  $\beta$  [4]:

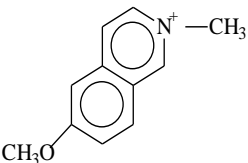
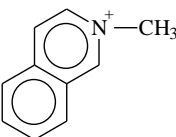
$$\beta = \frac{i_{\max} - i_0}{i_{\max}} = \frac{\Delta i_{\max}}{i_{\max}} \quad (8)$$

Как известно при применении ММН для диссоциативной ПВИ многоатомных частиц в эксперименте определяют обычно  $\beta'$ , которая меньше истинного значения  $\beta$ , так как ионизируются не сами молекулы, а их продукты гетерогенной реакции диссоциации на поверхности, кроме этого коэффициент гетерогенной реакции диссоциации зависит как от констант скоростей термодесорбции, так и от констант скоростей гетерогенной реакции диссоциации молекул на поверхности [7-8].

Эксперименты были проведены в экспериментальной установке ранее описанной нами [9]. Выбор органических соединений морфина и тебаина обоснована тем, что эти соединения были хорошо изучены в стационарных условиях [10-11]

#### Результаты

Используя метод модуляции потока при диссоциативной ПВИ молекул морфина и тебаина на поверхности окисленного вольфрама по вышеуказанной методике из соотношения (8) получили коэффициенты ионизации для радикалов  $C_9H_7N+CH_3$  ( $m/z=144$ ) и  $C_{11}H_{12}ON^+$  ( $m/z=174$ ) соответственно. Затем используя соотношение (2) оценили значения потенциала ионизации этих радикалов.

Адсорбируемые молекулы	Десорбирующиеся ионы	Диапазон температуры (К)	$\beta$	$V$
Тебаина $C_{19}H_{21}O_3N$ ( $m/z = 311$ )		720-788	0.68	$\leq 6.6$
Морфин ( $M=285$ ) $C_{17}H_{19}NO_3$		725-790	0.72	$\leq 6.8$

**Заключение.** Таким образом, впервые методом ПВИ определили коэффициенты поверхностной ионизации для радикалов  $C_9H_7N+CH_3$  ( $m/z=144$ ) и  $C_{11}H_{12}ON^+$  ( $m/z=174$ ) молекул морфина и тебаина, а также оценили потенциалы ионизации для некоторых радикалов, продуктов гетерогенной реакции диссоциации молекул на поверхности.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Зандберг Э.Я., Ионов Н.И., Поверхностная ионизация. М. Наука, 1969.С.438.
2. Зандберг Э.Я., Расулев У.Х., Шарапудинов М.Р. Термическая ионизация некоторых азотсодержащих органических соединений на вольфраме и его оксидах с образованием положительных ионов. Теоритическая и Экспериментальная Химия, 1970, VI(3), 328-338.
3. U.Kh. Rasulev, U. Khasanov, V.V. Palitsin. A study on a surface ionization source for molecular ions. Proseedings of the 12th International Conference on secondary Ion Mass Spectrometry., 1999, 283-286.
4. Назаров Э.Г., Расулев У.Х., Нестационарные процессы поверхностной ионизации/ ФАН, Ташкент, 1991.С.204.
5. Зандберг Э.Я., Расулев У.Х., Шустров Б.Н., Термоэмиссия положительных ионов органических соединений с окислов вольфрама// Докл. АН СССР. 1967. Т.172, с.885-886.
6. Rasulev U.Kh. and Zandberg E.Ya., Surface ionization of organic compounds and it's application // Progress in Surface Science, 1988. V.28. N3/4. p.181-412.
7. Rakhmanov G.T., Rasulev U.Kh., Saidumarov I.M.Application of surface ionization to determine rate constant and activation energy of dissociation reavtions of nitrogen fase polyatomic molecules on W oxides. Surface and Interface Analysis. 2006. Vol.38. P.219-223.
8. Рахманов Г.Т., Сайдумаров И.М., Ражабов А.Оценка потенциалов ионизации некоторых радикалов при диссоциативной поверхностной ионизации молекул органических соединений. Ўзбекистон Миллий Университети хабарлари. 2/1, 2013 й.185-187.
9. Рахманов Г.Т., Сайдумаров И.М., Худоева Х.К. Определение кинетики диссоциативной поверхностной ионизации многоатомных молекул. Журнал Поверхность “, 2009, N 8, стр. 103-108.
10. Расулев У.Х., Усманов Д.Т., Хасанов У. Поверхностно- ионизационная масс-спектрометрия алкалоидов опиума. Журнал Химия природных соединений, 2003,39(5), 489-494



УДК 541.547.962.94.

**Jakhongir KHAKKULOV**,  
Senior Lecturer, National University of Uzbekistan  
Email: jmkhakkulov@mail.ru  
**Abdulfatto KHOLMUMINOV**,  
Professor of the National University of Uzbekistan  
**Zokirjon TEMIROV**,  
Basic doctoral student of the National University of Uzbekistan

Based on the review of Ashurov N.Sh., Senior Research Fellow, Institute of Polymer Chemistry and Physics, UzResFA

### MOVEMENT OF BIOPOLYMER MACROIONS IN GRADIENT FIELDS

Annotation

In this study, it was found that the collision of  $C > 95\%$  of macronions in the gradient field at a current  $I = 1$  mA without collision with the electrodes took more than  $t \geq 18$  hours and  $t \geq$  more than 25 hours for the chitosan solution. fibroin solution. This result was achieved by increasing the current 8 times ( $I = 8$  mA) with 4.5 times (4 hours) for the chitosan solution and 4.2 times less time (6 hours) for the fibroin solution. These results show that, according to Faraday's law, as the current increases, the macrons move rapidly toward the electrodes and overlap.

**Keywords:** gradient field, shear stress, chitosan, fibroin, viscosity.

### ДВИЖЕНИЕ МАКРОИОНОВ БИОПОЛИМЕРА В ГРАДИЕНТНЫХ ПОЛЯХ

Аннотация

В этом исследовании было обнаружено, что столкновение  $C > 95\%$  макроионов в градиентном поле при токе  $I = 1$  мА без столкновения с электродами заняло более  $t \geq 18$  часов и  $t \geq$  более 25 часов для раствора хитозана. раствор фибрина. Этот результат был достигнут за счет увеличения тока в 8 раз ( $I = 8$  мА) с 4,5 раза (4 часа) для раствора хитозана и в 4,2 раза меньше времени (6 часов) для раствора фибрина. Эти результаты показывают, что, согласно закону Фарадея, при увеличении тока макроны быстро движутся к электродам и перекрываются.

**Ключевые слова:** градиентное поле, напряжение сдвига, хитозан, фиброин, вязкость.

### БИОПОЛИМЕР МАКРОИОНЛАРИНИНГ ГРАДИЕНТЛИ МАЙДОНДА ҲАРАКАТИ

Аннотация

Ушбу ишда ток кучи  $I = 1$  мА бўлганда градиентли майдонда  $C > 95\%$  макроионларнинг ўзаро тўқнашмасдан электродлар томон силжиб етиб келиши хитозан эритмаси учун  $t \geq 18$  соатдан кўпроқ ва фиброин эритмаси учун  $t \geq 25$  соатда кўпроқ вақтни талаб этиши аниқланган. Бундай натижага эришиш учун ток кучини 8 баробар оширилганда ( $I = 8$  мА) хитозан эритмаси учун 4,5 марта (4 соатда) ва фиброин эритмаси учун 4,2 марта (6 соатдан) кам бўлган вақт сарфланган ҳолда эришиш мумкин эканлиги кўрсатилган ҳамда ушбу вақт ва ток кучининг миқдорлари танлаб олинган. Бу натижалар Фарадей қонунига мос равишда ток кучини ошиши билан макроионларни электродлар томон жадал тарзда силжиши ва етиб келиб қоплашини кўрсатади.

**Калит сўзлар:** градиентли майдон, силжиш кучланиши, хитозан, фиброин, ковшоқлик.

**Introduction.** Today, the production of ionogenic biopolymers for specific purposes, including surfactants, is an urgent task, which can be achieved by in-depth study of the transfer of macroions and ions to the electrodes and their recovery on the surface, such as metals of various shapes and reliefs.

The implementation of electrochemical recovery of biopolymers requires the preparation of their polyelectrolyte solutions and the study of the ability of ionic macromolecules to move as giant macroions under the influence of an electric field. These processes depend on the fact that ionic polymers exhibit viscosity depending on the molecular mass and are sensitive to the effects of the electric field at the expense of ionogenic groups. Ionogenic biopolymers, including chitosan and fibroin as macroions, have the ability to move and electrochemically recover in solution under the influence of an electric field, as well as the formation of micro- and nanoparticles on its basis.

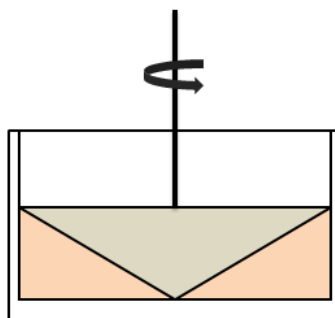
Scientific research on the application of biopolymers in medicine and their practical application is being carried out in many countries around the world. Kang D. G., J. Spitzer, and B. Poolman in their scientific work have shown that when polyelectrolytes are exposed to external forces, including mechanical or electrical stresses, gradient fields [1] are formed and macroions move along the power lines of these fields [2]. Wang T., Hu C., and other scientists believe that such fields, for example, when a liquid flows from a capillary under mechanical pressure, when a liquid is rotated by a rotor to form a stable laminar flow [3], or when electrophoresis and electrolysis processes ions and macroions [4]. studied to be observed in the lateral shift. In general, in a gradient field formed under mechanical action, macroions move along the lines of force, rotating and advancing [5], while in a gradient field formed under electric stress, functional groups of macroions move to the anode or cathode as anions or cations [6]. conclusions can be seen in the works of H. Isambert, A. Dragon, J L. Viovy, and J. Prost. The motion of macroions in gradient fields is cited in the scientific articles of Li X., Phan A. D., Schweizer K. S., the reason for the choice of poles is the sensitivity of anions or cations to the action of an electric field [7,8].

The following are the results of studies on the laws of displacement in the gradient fields of chitosan and fibroins as macroions formed under the influence of mechanical and electrical forces.

**Research Methodology.** Studies on the displacement of macrons in the gradient field were conducted on a "cone-surface" cell rheometer. At the same time, according to the Debye criterion, ChZ was diluted by 2% in the ratios  $\text{CH}_3\text{COOH}:\text{H}_2\text{O}$  and FB in the ratio  $\text{HCOOH}:\text{H}_2\text{O}$  (1: 1). Solutions with a concentration of  $C = 0.25 \text{ g / dl}$  were used. The studies were conducted at temperatures of  $25 \text{ }^\circ\text{C}$  and  $50 \text{ }^\circ\text{C}$ .

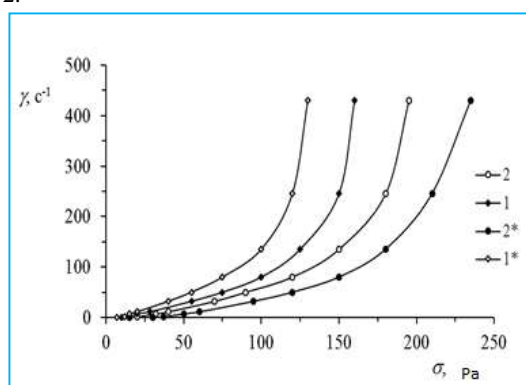
The objects of study were the control of chitosan (ChZ) and fibroin (FB) in dilute solutions ( $C = 0.25 \text{ g / dl}$ ) under the influence of different amounts of electric current (I) and reaching the electrode to cover it, ie to reduce the concentration of solutions by refractive index. the results of the studies showed that this process can be carried out in the range of current  $I = 0.1 - 10 \text{ mA}$ . It was observed that the current did not move the macrons in the area  $I < 0.1 \text{ mA}$  and that the solutions boiled in the area  $I > 10 \text{ mA}$ .

**Analysis and results.** Studies to study the displacement properties of macroions in a gradient field under the influence of mechanical forces were conducted in a "cone-surface" cell of the rheometer device (Figure 1).



**Figure 1.** Schematic view of the rheometer "cone-surface" cell

In this case, based on the results of viscometric studies based on Haggins's law [9], chitosan [11] according to Debye's criterion [10]  $C[\eta] \leq 0,5$  was diluted in  $\text{CH}_3\text{COOH}$  and fibroin [12] in  $\text{HCOOH}:\text{H}_2\text{O}$  (1: 1), ie the concentration  $C = 0,25 \text{ g / dl}$ , solutions in which macromolecules do not collide in the stream were prepared. The results of rheological studies of these solutions at  $25 \text{ }^\circ\text{C}$  and  $50 \text{ }^\circ\text{C}$  are shown in Figure 2.



**Figure 2.** Correlation of shear rate ( $\dot{\gamma}$ ) to shear stress ( $\sigma$ )

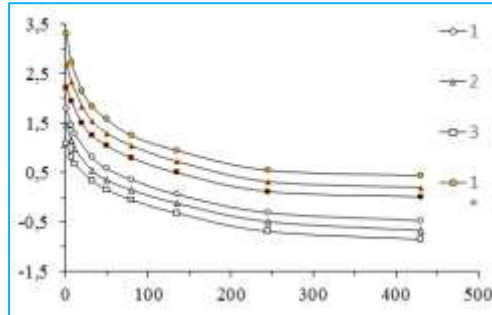
1-ChZ + 2%  $\text{CH}_3\text{COOH} : \text{H}_2\text{O}$  ( $25 \text{ }^\circ\text{C}$ )    1\* -ChZ + 2%  $\text{CH}_3\text{COOH} : \text{H}_2\text{O}$  ( $50 \text{ }^\circ\text{C}$ );  
2\* - FB +  $\text{HCOOH} : \text{H}_2\text{O}$  (1:1) ( $25 \text{ }^\circ\text{C}$ )    2- FB +  $\text{HCOOH} : \text{H}_2\text{O}$  (1:1) ( $50 \text{ }^\circ\text{C}$ )

It can be seen from the graphs that as the shear stress increases, the shear rate increases in the curvilinear coupling, i.e., the solutions exhibit a characteristic flow of non-Newtonian fluids. This is due to the change in the conformational state of the macromolecules in the flow due to the rotational and forward motion. However, it was observed that such changes start after a certain amount of shear stress, and based on it, the boundary leakage voltage ( $\sigma$ ), which corresponds to the onset of leakage, i.e., the leakage limit, was determined. As can be seen from the graph, as the temperature increases, the contact curves and the values of the boundary leakage voltage shift into the field of small amounts of shear stress.

This condition is associated with an increase in ductility due to a decrease in macromolecular interactions due to an increase in vibrational action under the influence of heat. The values of the limiting voltages determined at different temperatures are given in **Table 1**.

**Table 1.** Quantitative current-voltage quantities of chitosan and fibroin solutions at different temperatures

It is also represented by the rheogram in Fig. 3 that an increase in temperature leads to a decrease in the effective viscosity [13]  $\ln \eta_{ef}$ . This appearance of rheograms is characteristic of non-Newtonian flow [14], which indicates the deformation arrangement of macromolecules in the flow. As the temperature increases, the rheograms shift toward lower values of viscosity, indicating a decrease in macromolecular interactions. Also, in the area of the boundary leakage voltage, i.e. at the minimum value of the shear rate ( $\dot{\gamma} \rightarrow 0$ ), the amount of effective viscosity also decreases with increasing temperature. This condition minimized the change in effective viscosity in the field of shear rate  $\dot{\gamma} > 400 \text{ s}^{-1}$ , i.e., the non-Newtonian current was maintained even as it approached the Newtonian current.



**Figure 3.**  $(\dot{\gamma})$  link rheogram for effective viscosity at different temperatures  $(\ln \eta_{ef})$  shear rate:  
 ChZ + CH<sub>3</sub>COOH:H<sub>2</sub>O - 1 - 25°C; 2 - 40 °C; 3 - 50 °C;  
 FB+HCOOH: H<sub>2</sub>O (1:1) - 1\* -25 °C; 2\* - 40 °C; 3\* - 50 °C.

To analyze the essence of this, the ratio of the change in effective viscosity based on the Frenkel-Eyring formula [15]  $(\ln \eta_{ef})_1 - (\ln \eta_{ef})_2$  to the change in temperature  $(1/T)_1 - (1/T)_2$  from the tangent angle  $\text{tga} = E_a / R$  and the viscous current activity energy  $E_a = R \text{tga}$

The amounts of viscous flow activity energy are close to the energy of hydrogen bonds, and this is the case when the macromolecules move in the current, the weak bonds between them, i.e., energy bonds equal to the energy of hydrogen bonds or hydrogen bonds [16], are broken down. This means that no significant changes occur with the macromolecule.

The displacement of ions [17] and macroions in a liquid under the influence of electric forces towards the poles (electrodes) depends on their positive and negative valences ( $z_i$ ), radius ( $r_i$ ) size, charge ( $q_i$ ) and number of charges ( $n_i$ ), electric field strength ( $E$ ), temperature ( $T$ ) and viscosity ( $\eta$ ). The acceleration of the displacement of ions as well as macroions in an electric field

continues until the electric force ( $F_{el}$ ) is equal to the frictional force ( $F_{fr}$ ), i.e.  $F_{el} \approx F_{fr}$  These forces are expressed as follows:

$$\text{Electric power} \quad F_{el} = z_i e E \quad (1)$$

$$\text{Stokes power} \quad F_{fr} = 6\pi\eta r_i u_i \quad (2)$$

where  $e$  is the electron charge;  $\eta$  qoenvIRONMENTAL viscosity;  $u_i$  is the speed of ion movement. From this

$$6\pi\eta r_i u_i = z_i e E \quad (3)$$

If we divide both sides of this equation (3) by  $E/F$  and assume that  $E = 1$  when the number of positive and negative charges is equal, then the  $u_i / E$  ratio is taken as  $u_i$ . The result is the following expression:

$$6\pi\eta r_i (u_i F) = z_i e F \quad (4)$$

where  $F$  is the Faraday number and is determined from the second law of electrolysis. The  $u_i F$  multiplication represents the mobility of the ions, i.e. the displacement ( $\lambda_i$ ):

$$\lambda_i = (z_i e F) / 6\pi\eta r_i \quad (5)$$

This expression (5) shows that the displacement of ions is inversely proportional to the viscosity ( $\eta$ ) of the medium ( $\lambda_i$ ) and the radius (ions) of the ions. Given that the radii of ions in an electric field do not change their radii, then the displacement of ions becomes a function of viscosity. Given that macroions are recognized by the effective radius [18] and can change their conformation when they move in an electric field, then the displacement of macroions ( $\lambda_i$ ) depends on the solution radius ( $\eta$ ) and the amount of effective radius ( $r_i$ ) representing the change in the conformational state of the macro [17,18].

According to Newton's law 11, given that the viscosity, that is, the internal friction ( $\eta$ ), is expressed as the ratio of the shear stress

Polymer	Solvent	Concentration, C, g / dl	Boundary current voltage, ( $\sigma$ ), Pa	
			25°C	50°C
ChZ	2% CH <sub>3</sub> COOH: H <sub>2</sub> O	0,25	15	10
FB	HCOOH: H <sub>2</sub> O (1:1)	0,25	30	20

to the velocity gradient ( $\sigma$ ) to ( $\gamma$ ), then ions and macroions also move in the gradient field in the electric field. This is also explained by the fact that ions in solution, as well as macroions, are at different distances from the electrode [19]. As the electrodes are connected to a constant current source, the anions begin to slide toward the anode and the cations begin to slide toward the cathode. This creates a gradient field with different power lines, and its intensity depends on the strength of the electric current (I). To study its properties, studies were carried out on a specially assembled electrolysis device (Fig. 4), which is shown schematically.

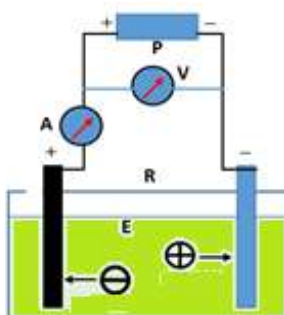


Figure 4. Schematic view of the electrolysis device

R - power supply; A - ammeter; V - voltmeter (diameter of graphite electrodes  $d = \varnothing 0.5$  cm and distance between  $l = 1$  cm). The reason for the use of graphite electrodes is that they do not undergo an oxidation and reduction reaction on the surface. However, the ions (macroions) that reach the electrode cover the surface of the electrode and form a new "sedimentary" phase with a mass ( $m$ ), as a result of which the concentration of ions (macroions) in the solution ( $C \rightarrow 0$ ) decreases. In this case, the amount of  $m$  is inversely proportional to  $C$  and is determined according to Faraday's law [20].

$$m = kIt \quad (6)$$

where  $k$  is the electrochemical equivalent;  $t$  is the experimental time.

When the power supply is disconnected, the coating phase on the electrode surface breaks down, splits into ions (macroions), redistributes back to the solution volume, and the concentration increases toward the initial amount.

**Conclusion.** In conclusion, it should be noted that the displacement properties of biopolymers as macroions in gradient fields, effective viscosity and viscous current activity energy, sediment formation on the electrode surface under the influence of an electric field, flow of dilute solutions in the displacement gradient field are characteristic of non-Newtonian fluids. In a partially deformed ordered state, rotation and forward motion move, and the shear process depends on the temperature, and the ductility also increases with increasing temperature.

#### REFERENCES

1. Kang D. G. et al. Study on the metal foam flow field with porosity gradient in the polymer electrolyte membrane fuel cell // *Renewable Energy*. – 2020. – T. 156. – C. 931-941.
2. Jan Spitzer, Bert Poolman. The Role of Biomacromolecular Crowding, Ionic Strength, and Physicochemical Gradients in the Complexities of Life's Emergence // *Microbiology And Molecular Biology Reviews*, June 2009, p. 371–388.
3. Wang T., Xu C. Liquid–liquid–liquid three-phase microsystem: hybrid slug flow–laminar flow // *Lab on a Chip*. – 2020. – T. 20. – №. 11. – C. 1891-1897.
4. Sheema Khan, David Ronis. A variational approach to static correlations in dilute macro-ion suspensions. *Molecular Physics* 60:3, pages 637-662.
5. H. Isambert, A. Ajdari, J-L. Viovy, and J. Prost Electrohydrodynamic patterns in macroion dispersions under a strong electric field *Phys. Rev. E* 56, 5688 – Published 1 November 1997.
6. KuanYang, Xiaomeng Chu, Xiaojuan Zhang, Xiaofeng Li, Jifu Zheng, Shengha Li, Nanwen Li, Tauqir A. Sherazi, Suobo Zhang The effect of polymer backbones and cation functional groups on properties of anion exchange membranes for fuel cells // *Journal of Membrane Science* Vol 603, 15 May 2020, 118025.
7. Li X. et al. High sensitive and fast response humidity sensor based on polymer composite nanofibers for breath monitoring and non-contact sensing // *Sensors and Actuators B: Chemical*. – 2021. – T. 330. – C. 129239.
8. Phan A. D., Schweizer K. S. Theory of spatial gradients of relaxation, vitrification temperature and fragility of glass-forming polymer liquids near solid substrates // *ACS Macro Letters*. – 2020. – T. 9. – №. 4. – C. 448-453.
9. Muthupradeepa R. et al. Physical and electrochemical chattels of phosphonium ionic liquid-based solid and gel-polymer electrolyte for lithium secondary batteries // *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*. – 2020. – T. 31. – №. 24. – C. 22933-22944.
10. Pogrebnyak A. et al. Influence of geometric and dynamic parameters of a water-polymer jet on characteristics of food products hydro-cutting process // *Ukrainian Food Journal*. – 2020. – T. 9. – №. 1.
11. Wang W. et al. Chitosan derivatives and their application in biomedicine // *International journal of molecular sciences*. – 2020. – T. 21. – №. 2. – C. 487.
12. Kholmuminov A. A., Matyakubov B. M., Rakhmonov T. T. Optical-Anisotropic Properties of Nanofiber Polymer Materials // *Theoretical & Applied Science*. – 2020. – №. 2. – C. 249-253.
13. Atakhanov AA et al. Rheological Behavior of Aqueous Suspensions of Nanocellulose // *High Molecular Compounds. Series A*. – 2020. – T. 62. – No. 3. – S. 189-194.
14. Gul S., Erge O., van Oort E. Frictional pressure losses of non-Newtonian fluids in helical pipes: applications for automated rheology measurements // *Journal of Natural Gas Science and Engineering*. – 2020. – T. 73. – C. 103042.

15. Masimov E. A., Pashayev B. G., Rajabov M. R. Viscometric and Densimetric Study of Water-PEG-KBr Systems // Russian Journal of Physical Chemistry A. – 2020. – Т. 94. – №. 12. – С. 2574-2580.
16. Osovskaya II, Dobosh A. Yu. Hydrophilic properties of natural polymers.
17. Sharfarets BP, Kurochkin VE On the Question of Linear Electrophoresis of Ions in Electrolyte // Scientific Instrument Engineering. - 2020. -T.30.- No. 3
18. Koshevar V., Kazhuro I. Colloid-chemical properties of latexes and their application. - Litres, 2021.
19. Pakhotin V. A., Boyko Yu. M. Volt-ampere Characteristics of the Emission of Negative Ions at Break of Polymers // Actual Problems of Strength. - 2020 .-- S. 221-223.
20. Bagaeva EA, Smirnova Yu. V., Demakova VV Determination of Physical Constants by Electrochemical Methods // Editorial Board. - S. 67.



УДК:535.41:535.36

**Шахноза ШОКИРОВА,**  
Магистрант Национальный университет Узбекистана  
**Гофур ЭШОНКУЛОВ,**  
доцент Национальный университет Узбекистана  
**Нурбек АШУРОВ,**  
старший научный сотрудник Институт химии и физики полимеров АНРУз,

ТГТУ профессори, .ф-м ф.д. Сапаев У тақризи асосида

### ИССЛЕДОВАНИЕ СТОЧНЫХ ВОД МЕТОДОМ ДИНАМИЧЕСКОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА

Аннотация

Методом динамического светорассеяния были определены размеры и распределение частиц различных ионов и дисперсных частиц в сточных водах. Показано что в сточных водах наблюдается частицы с размерами от нано до микронного размера с полимодальным распределением, размеры которых со временем увеличивается за счет агломерации.

**Ключевые слова:** динамическое светорассеяния, дисперсные частицы, сточные воды

### ОҚОВА СУВЛАРНИ ЁРУҒЛИКНИНГ ДИНАМИК СОЧИЛИШИ МЕТОДИ БИЛАН ТАДҚИҚ ҚИЛИШ

Аннотация

Ёруғликнинг динамик сочилиши методи билан оқова сувлардаги турли ион ва дисперс зарраларнинг ўлчамлари ва тақсимооти аниқланган. Оқова сувда ўлчами нано дан микронгача бўлган, ўлчами вақт ўтиши билан агломерация ҳисобига катталашадиган ва полимодал тақсимотга эга зарралар кузатилиши кўрсатилган.

**Калит сўзлар:** ёруғликнинг динамик сочилиши, дисперс зарралар, оқова сув.

### STUDY OF WASTEWATER BY DYNAMIC LIGHT SCATTERING

Annotation

The size and distribution of particles of various ions and dispersed particles in wastewater were determined by the method of dynamic light scattering. It is shown that in wastewater, particles with sizes from nano to micron with a polymodal distribution are observed, the size of which increases with time due to agglomeration.

**Key words:** dynamic light scattering, particulate matter, wastewater.

**Введение.** Вода обладает необычными свойствами как физическими, так и химическими, по сравнению с другими жидкостями. Вода – важнейший элемент жизни. В последнее время наблюдается тенденция нехватки чистой питьевой воды. По данным Всемирной Организации Здравоохранения загрязненная питьевая вода является одним из важнейших факторов преждевременной смерти [1-3].

Показателей качества воды можно разделить в основном на три группы это физические, химические и бактериологические для оценки которых используется большое количество различных методов [4]. Например, вкус и запах воды определяют органолептическими методами; цвет и мутность, а также содержание железа – фотометрией; жесткость, содержание хлоридов и сульфатов – титриметрией; а для определения биологических показателей можно использовать метод мембранных фильтров.

Для анализа мутных объектов концентрации растворённых веществ, для определения нефтепродуктов в воде используется метод светорассеяния, который основан на измерении интенсивности света, рассеянного дисперсными системами [5-6]. Метод светорассеяния пригоден для определения веществ в области концентраций 10<sup>-5</sup>—10<sup>-4</sup> % с точностью около ± 5%.

Метод лазерной корреляционной спектроскопии основан на оценке размеров движущихся частиц по автокорреляционной функции сигнала рассеяния, регистрируемого фотоприемником в некоторой точке спекл-поля. Согласно данным в научной литературе и проведенным экспериментам, этим методом можно эффективно оценивать размеры частиц в сильно разбавленных средах и образцах средней степени мутности. Если в исследуемой среде степень мутности слишком высока, то математическая обработка результатов измерений усложняется, а оценка диаметров частиц становится менее точной. Для исследования мутных сред этим методом без изменения оптической схемы рассеяния требуется не только усложнение математической модели, но и большее количество априорных данных о дисперсной среде.

В связи с этим целью данной работы были определить размеры и распределение частиц в сточных водах различных ионов и дисперсных частиц методом динамического светорассеяния.

**Экспериментальная часть.** В качестве объектов использовали воды из Аральского моря и сточных вод из Алмаликского горно-металлургического комбината (АГМК), у которых содержались ионы металлов, а также дисперсные частицы. Вода из Аральского моря и сточная вода из Алмаликского горно-металлургического комбината до фильтра очистки отличались по цвету, по содержанию дисперсных частиц которые видны невооруженным глазом.

Оценка размеров наночастиц оксида никеля проводилась методом динамического светорассеяния с помощью прибора Photocor compact (ООО «Фотокор», Россия). Измерение проводилось при температуре  $T=298$  К, термостабилизированный полупроводниковый лазер длиной волн 635.6 нм, с мощностью 25 мВт.

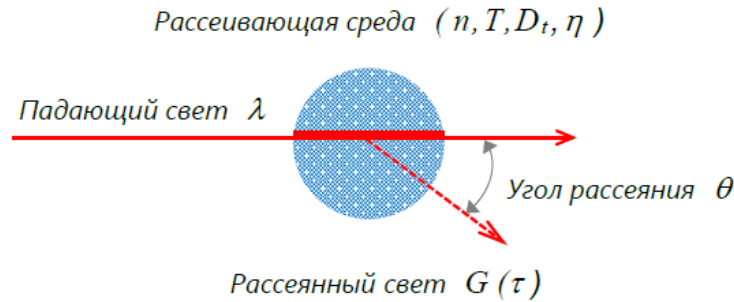


Рис.1. Схема процесса рассеяния света

**Результаты и их обсуждение.** Метод динамического рассеяния света используется также для измерения скоростей потоков жидкостей и газов. Традиционно, этот вариант метода носит название лазерной доплеровской анемометрии (ЛДА). В частности, данная конфигурация метода ДРС используется для измерения электрофоретической подвижности наночастиц, откуда рассчитывается их дзета-потенциал.

Диффузия монодисперсных наночастиц, диспергированных в жидкости и хаотическое броуновское движение этих частиц приводит к микроскопическим флуктуациям их локальной концентрации и соответствующим локальным неоднородностям показателя преломления среды. При прохождении лазерного луча через такую среду часть света будет рассеяна на этих неоднородностях. Флуктуации интенсивности рассеянного света будут соответствовать флуктуациям локальной концентрации дисперсных частиц. Информация о коэффициенте диффузии частиц содержится в зависящей от времени корреляционной функции флуктуаций интенсивности. Временная автокорреляционная функция согласно определению имеет следующий вид:

$$G(\tau) = \langle I(0)I(t-\tau) \rangle = \lim_{t_m \rightarrow \infty} \frac{1}{t_m} \int_0^{t_m} I(t)I(t-\tau) dt$$

где интенсивность  $I$  имеет различные значения во время  $t$  и  $(t-\tau)$ .  $t_m$  - это время интегрирования (время накопления корреляционной функции). Очевидно, что при  $\tau=0$ , автокорреляционная функция равна среднеквадратичной интенсивности рассеяния  $\langle I^2 \rangle$ .

Для бесконечного времени корреляция отсутствует, и автокорреляционная функция равна квадрату средней интенсивности рассеяния:

$$G(\tau) = \langle I(0)I(t-\tau) \rangle = \langle I(0) \rangle \langle I(t-\tau) \rangle = \langle I \rangle^2$$

В соответствии с гипотезой Онзагера, релаксация микроскопических флуктуаций концентрации к равновесному состоянию может быть описана первым законом Фика (уравнением диффузии):

$$\frac{\partial c(\vec{r}, t)}{\partial t} = -D \nabla^2 c(\vec{r}, t)$$

где  $c(\vec{r}, t)$  - концентрация и  $D$  - коэффициент диффузии частиц. Можно показать, что в такой системе автокорреляционная функция интенсивности рассеяния света экспоненциально затухает во времени, и характерное время релаксации однозначно связано с  $D$ . Корреляционная функция интенсивности рассеянного света (для случая квадратичного детектирования) имеет вид:

$$G(\tau) = a \cdot \exp\left(\frac{-2\tau}{t_c}\right) + b$$

Величины  $t_c$ ,  $a$  и  $b$  могут быть найдены путем аппроксимации измеренной корреляционной функции теоретической экспоненциальной функцией. Для сферических взаимодействующих между собой частиц размер их может быть рассчитан с использованием формулы Стокса-Эйнштейна:

$$D = \frac{k_B T}{6\pi\eta R}$$

где  $k_B$  - константа Больцмана,  $T$  - абсолютная температура и  $\eta$  - сдвиговая вязкость среды, в которой взвешены частицы радиуса  $R$ .

Как показали исследование у воды из Аральского моря наблюдается частицы от нанометрового диапазона до микронного размера с полимодальным распределением частиц, но при этом имеют большую долю микронные частицы (рис.2.). А при исследовании сточных вод Алмалыкского горно-металлургического комбината (АГМК) до фильтра наблюдается частицы в ионном виде, также наночастицы и микронные частицы. Большую часть частиц находится в нанометровом диапазоне, которые равно 150 нм. Как видно из экспериментальных данных распределение дисперсных частиц не имеют Гауссовой формы, имеются асимметричность.

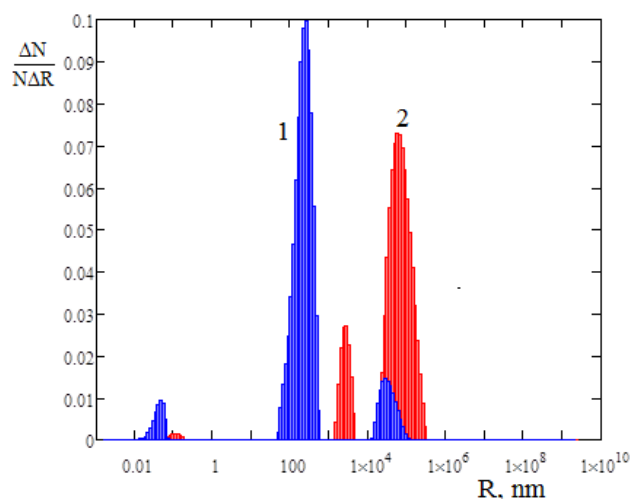


Рис.2. Распределение дисперсных частиц в 1) сточных вод АГМК, 2) воде аральского моря

**Заключение.** Таким образом, показано, что методом динамического светорассеяния можно оценить чистоту сточных вод, оценивая размеры и распределение дисперсных частиц, а также определить коэффициента диффузии. Выявлено что в водах из Аральского моря наблюдается частицы от нанометрового диапазона до микронного размера с полимодальным, а у воды Алмаликского горно-металлургического комбината (АГМК) до фильтра наблюдается частицы в ионном виде, также наночастицы и микронные частицы. Большую часть частиц находится в нанометровом диапазоне, которые равно 150 нм.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Игнатов И. Вода и происхождение жизни: сборник научных статей / И. Игнатов, О.В. Мосин. - Москва; Берлин: Директ-Медиа, 2016. - 658 с.
2. Курбатов А.Ю., Аверина Ю.М., Меньшиков В.В., Аснис Н.А., Ваграмян Т.А., Юрьева Г.А., Мамателашвили М.Т. Окисление двухвалентного железа в различных водных средах //Химическая промышленность сегодня. 2013. № 10. С. 36-41.
3. Комягин Е.А., Мынин В.Н., Ляпин И.Ф., Аверина Ю.М., Лопатюк Ю.Ю., Терпугов Г.В., Терпугов Д.Г. Пути решения проблемы очистки сточных вод от тяжелых и радиоактивных металлов//Экология и промышленность России. 2008. № 11. С. 21-23.
4. Аверина Ю.М., Ветрова М.А., Рыбина Е.О. Чумакова А.А. Методы контроля качества воды // Успехи в химии и химической технологии. ТОМ XXXIII. 2019. № 3, с.25-27.
5. Вильданов Р.Р., Эшонкулов Г.Б. Применение фотон-корреляционной спектроскопии для анализа дисперсных частиц // Узбекский Физический журнал 2010, т.12. №3 стр 165-168.
6. Vildanov R., Eshonqulov G. Application of a heterodyne laser system to determining parameters of turbulent atmosphere // Ukrainian Journal of Physics 2011 Vol. 56 №1 p.18-20.