

На правах рукописи

СУСАК ИВАН ПЕТРОВИЧ

**ВЛИЯНИЕ МАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ НА ФИЗИКО -
ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОЛЕКУЛЯРНЫХ
ЖИДКОСТЕЙ И БИОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ**

Специальность 01.04.02 – теоретическая физика

А в т о р е ф е р а т
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Томск – 2003

**Работа выполнена в Институте биофизики клетки РАН и
в Томском государственном университете.**

- Научный руководитель:** доктор физико-математических наук,
профессор, ведущий научный сотрудник
лаборатории механизмов рецепции
Института биофизики клетки РАН
Олег Александрович Пономарёв
- Научный консультант:** доктор биологических наук, член-
корреспондент РАН, профессор, директор
Института биофизики клетки РАН
Евгений Евгеньевич Фесенко
- Официальные оппоненты:** доктор физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник
Института биофизики клетки РАН
Людмила Владимировна Якушевич
- доктор физико-математических наук,
профессор кафедры Теоретической физики,
Физического факультета, Томского
государственного университета
Владимир Александрович Бородовицын
- Ведущая организация** Институт математических проблем биологии
РАН, г. Пушкино, Московской области

Защита состоится “_____” _____ 2003 г. в _____ часов на заседании
диссертационного совета Д 212.267.07 в Томском государственном университете
по адресу: 634050, г. Томск, пр. Ленина, 36.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Томского
государственного университета.

Автореферат разослан “_____” _____ 2003 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
доктор физико-математических наук,
старший научный сотрудник

И.В. Ивонин

Актуальность проблемы.

Проблема действия магнитных полей на вещество интересовала многих исследователей. В настоящее время работы в этом направлении можно подразделить на две категории.

К первой следует отнести исследования кинетических эффектов, в которых решающими являются магнитные взаимодействия при рекомбинации радикалов. Благодаря работам Франкевича Е.Л., Бучаченко А.Л., Молина Ю.Н., Сагдеева Р.З., Кубарева С.И. и других, эта область исследована достаточно основательно, что позволяет рассчитывать количественно результаты воздействия магнитного поля. Ко второй относятся работы Фесенко Е.Е., Казаченко В.Н., и других по влиянию магнитного поля на биологические системы, биополимеры, структуру жидкостей, процессы адсорбции при крашении текстильных материалов, механическую прочность и физико-химические свойства волокнистых полимеров. Решение проблемы выявления механизмов рецепции магнитного воздействия биологическими системами невозможно без изучения физико-химических свойств системы в целом. На сегодняшний день не достаточно ясен не только механизм магнитных эффектов в этой категории исследований, но и часто подвергается сомнению, вследствие трудностей воспроизводимости, и само их существование. Вследствие этого, получение дополнительных и убедительных доказательств влияния магнитных полей на физико-химические свойства жидкостей является сегодня актуальной задачей.

Цель и задачи исследования.

Выявление механизмов влияния магнитных полей на физико - химические свойства жидкостей и биологических систем.

Положения, выдвигаемые на защиту.

- Основные свойства воды в области низких частот определяются концентрацией солитонов и их динамикой.
- Внешние воздействия полей, границ, примесей осуществляются через изменение концентрации солитонов.
- Магнитное поле влияет не только на структуру жидкости, но и на химические реакции в водных системах. Прямое влияние магнитного поля на химические превращения достаточно сильное и немонотонное.

Научная новизна работы.

Впервые было вычислено объемное взаимодействие в жидкости при наличии магнитного поля и изучен вклад в термодинамические функции. Предложена модификация модели Бернала – Фаулера - учет распределенного дипольного момента в жидкости с водородными связями. Выявлена зависимость магнитного влияния на вероятность рекомбинации радикальных пар. Предложены возможные механизмы рецепции магнитного воздействия веществом.

Научно-практическая значимость исследования.

Результаты, проведенных исследований, могут быть использованы для оценки воздействия влияния магнитных полей на живые организмы, на скорость протекания реакций, в технологических процессах, в здравоохранении.

Апробация результатов диссертации.

Научные результаты и выводы работы докладывались и обсуждались на:

1. ICMP.00, 13th International Congress on Mathematical Physics, Imperial College, London, UK, 17 to 22 July 2000. http://physics.iop.org/IOP/Confs/ICMP/friday_o.pdf.
2. International Conference " Diffusion Assisted Reactions DAR - 00", Volgograd State University, Volgograd, Russia, September 17 to 22.
3. VOLGA.01 (6.22-7.3) Petrov's Lectures - 2001: The 13th Summer School-Seminar " Volga -13 ' 2001 " On Recent Problems in Theoretical and Mathematical Physics (Kazan, Russia).
4. International Conference "Physics of Liquid Matter: Modern Problems" (PLMMP-2001), Taras Shevchenko National University of Kyiv, Kiev, Ukraine, September 14 to 19, 2001.
5. IX International Conference "Mathematics. Computer. Education" and International Workshops "Mathematical models of biosystems" "Electronic Publishing in Biophysics" January 28 – February 2, 2002, Dubna, Russia.
6. VOLGA.02 (6.22-7.3) Petrov's Lectures - 2002: The 13th Summer School-Seminar " Volga -14 ' 2002 " on Recent Problems in Theoretical and Mathematical Physics (Kazan, Russia). Video-lecture in <http://videolib.itp.ru/Events/Kazan2002/susak.avi>.
7. The Third International Conference "Electromagnetic Fields and Human Health. Fundamental and Applied Research", Moscow - St.-Petersburg, Russia 17-24 September 2002
8. International Conference "Modern Problems of Theoretical Physics", Dedicated to the 90th anniversary of A.S. Davydov. Bogolyubov Institute for Theoretical Physics of the NacSc of Ukraine. December 9-15, 2002, Kyiv, Ukraine. http://www.bitp.kiev.ua/davydov/sched/sched_ukr_sections.html
9. Regular seminar on theoretical biophysics. Institute of Cell Biophysics of the Russian Academy of Sciences 17/12/02. <http://www.psn.ru/~yakushev/seminar.html>.
10. X International Conference "Mathematics. Computer. Education" and International Workshops "Mathematical models of biosystems" "Electronic Publishing in Biophysics" January 20 - January 25, 2003, Pushchino, Russia.

Публикации.

По материалам диссертации опубликовано 21 работа, из них 10 статей и 11 тезисов конференций.

Структура и объем диссертации.

Диссертация включает в себя введение, обзор литературы, описание наиболее популярных теоретических методов и вычислительных методик, обсуждение результатов исследований в 3 главах, выводы и список цитируемой литературы, список обозначений. Работа изложена на 123 страницах машинописного текста и содержит 10 рисунков. Список литературы содержит 126 ссылок.

Метод.

Для вычисления кинетических свойств использован метод функций Грина. Термодинамические свойства вычислены с помощью асимптотических разложений по степеням плотности и численных методов. Магнитные свойства рекомбинации радикальных пар исследованы с помощью метода корреляционных функций. Широко использовались другие методы математической физики.

Результаты и обсуждение.

Введение

Оказывается, что биологические системы не имеют специальных рецепторов для каждого типа электромагнитного поля, способных резонансно поглотить энергию поля и стимулировать ответ на воздействие. Представляется, что имеется некоторый первичный рецептор [Geletyuk V.I., Kazachenko V.N., Chemeris N.K., Fesenko E.E.// FEBS Lett. 1995], которым может быть вода, играющая уникальную роль в функционировании биологических систем. Это предположение было прямо проверено в работе [Fesenko E.E., Geletyuk V.I., Kazachenko V.N., Chemeris N.K.// FEBS Lett. 1995]. Были проведены две серии экспериментов. В одной серии экспериментов исследовалось влияние облучения воды на свойства Ca^{2+} - активированных калиевых каналов в культурах почечных клеток. Было установлено, что замена в культуре необлученного водного раствора предварительно облученным вызывает такое же качественное изменение в K^{+} - каналах, как и облучение водного раствора непосредственно в кювете с культурой, т. е. носителем эффекта является вода. Опыты на планариях также показали, что изменяются некоторые процессы жизнедеятельности в воде, прошедшей обработку постоянным и переменным магнитными коллинеарными полями, сравнимыми по интенсивности с геомагнитным полем [В.В. Новиков, И.М. Шейман, Е.Е. Фесенко, Биофизика, 2002].

Свойства жидкости после облучения изменяются. Она отличается размерами и концентрацией кластеров, или доменов, которые представляют собой относительно устойчивые структуры и равновесие, между которыми может изменяться под влиянием полей.

Формирование доменов происходит под действием двух потенциалов: межмолекулярного потенциала «вода - вода» (водородная связь, короткодействующий потенциал) [Ben – naim A. Stillinger F.H. Structure and Transport Processes in Water and Aqueous Solutions. N.Y.: Interscience, 1972.] и диполь – дипольного взаимодействия молекул воды (дальнодействующий потенциал). Молекула воды в кристаллической форме (лед) имеет четырех соседей и взаимодействует с ними посредством водородных связей. Если молекула образует водородные связи с двумя или тремя соседями, то формируется простая нить (два соседа) или нить с боковой группой молекул (три соседа), и мы имеем состояния жидкой воды. В работе [Rice S.A. Topic in Current Chemistry. Berlin, N.Y. 1975] показано, что среднее число водородных связей на молекулу воды равно 2.7 при среднем числе соседей 4.7. Поэтому воду можно представить состоящей из лент (полос), (см. рис. 1), соединенных между собой «прореженными» в жидкости и «непрореженными»

во льду водородными связями. В жидкой воде ленты могут скручиваться, создавая топологические солитоны. Они и обеспечивают часть процессов переноса в биологических системах.

Заметим, что молекулы воды в полосе имеют постоянную ориентацию дипольных моментов (рис. 1), на рисунке они направлены вниз. Если повернуть полосу вокруг оси аппликат на угол, равный 180° , то дипольный момент изменит направление на противоположное. Этого же можно достичь, если все протоны в полосе сдвинуть к соседним атомам кислорода. Энергии обоих состояний совпадают.

Наличие этого вырождения приводит к появлению доменов или больших кластеров. Они образуются при согласованном скручивании полос и определяются заданием граничных условий. Исходя из этой структуры, жидкость может быть описана следующим набором полевых коллективных координат: углом скручивания, вектором директора, вектором скорости, которые связаны посредством законов сохранения энергии, импульса и момента количества движения. Длина полосы также является переменной динамической величиной.

Если кластер считать бесструктурной частицей без внутренних степеней свободы (для ультранизких частот это всегда так и есть), то для расчета его смещения в жидкой воде необходимо учесть трение, которое к тому же должно быть большим. Это приводит к спектру, отличному от дебаевского. Для определения модуля угла поворота $|\varphi(0) - \varphi(t)|$ следует использовать функцию Грина уравнения Фоккера – Планка. В области более высоких частот домены не успевают прореагировать на поле и релаксирует внутренняя структура домена, где большую роль играет объемный дипольный момент среды.

1. Структура жидкости и ее свойства

Жидкость характеризуется квазиодномерной полимерной структурой (лентой). Элементы ленты уложены в микрокластеры, стабилизация которых достигается за счет переноса протона по механизму солитонного типа. Если считать, что модель применима к жидкой воде в биологической системе, то она имеет как минимум три уровня структурирования: **1) большие кластеры (600 \AA , $10^6 \text{ H}_2\text{O}$)**, соединенные скрученными лентами, **2) глобулы (200 \AA , $10^5 \text{ H}_2\text{O}$ при 0°C ; 30 \AA , $600 \text{ H}_2\text{O}$ при 80°C)** и клубки (20 \AA), окружающие глобулы, со скрутками внутри между этими структурами, **3) лента из $(\text{H}_2\text{O})_2$ со скрутками**.

Существенным является то, что кластер представляет собой линейную цепочку молекул воды, соединенных водородными связями, которая сворачивается в клубок, образуя каплю. Клубок переходит в глобулу (Лифшиц. 1968). Часть цепочек, входящих в кластеры могут служить каналами протонной проводимости. Есть малые кластеры из 1-5 молекул воды, есть кластеры из 12, 20, 50 молекул воды живущие около 10^{-10} с. Кластеры стабилизируются зарядами примесей (H_3O^+ , OH^- и др.) и завязаны в структуру 3-х мерного геля. Структура и свойства воды зависят от растворенных примесей, которые располагаются в окрестности солитонов (скруток ленты) и меняют их концентрацию.

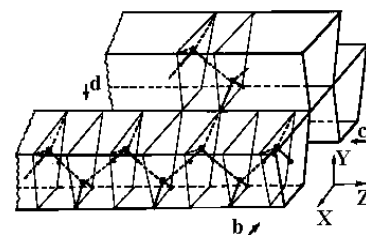


Рис. 1. Ориентированная структура воды: идеализированная локальная регулярная тетраэдрическая сеть (лёд Ih).

2. Внешние воздействия

Внешние воздействия меняют концентрацию солитонов (скруток) и тем самым меняется структура кластеров. Солитоны порождаются в основном в клубковой фазе и из нее переходят в глобулярную. При достаточном их накоплении глобула раскалывается на две, уменьшая размер кластера. Порождение солитонов под действием слабого электромагнитного поля происходит путем скручивания ленты расположенной между кластерами. Образующиеся дефекты поглощаются более объемной глобулой.

Электрические и магнитные поля влияют также на движение зарядов H^+ чем меняют их действие на кластеры и изменяют свойства воды. Сама молекула H_2O нечувствительна к малым медленно меняющимся полям. Возможны длительные релаксационные процессы, обусловленные самосогласованным изменением структуры кластеров при наложении или снятии внешнего воздействия. Кроме того, имеет место пороговый эффект, когда изменения накапливаются, не меняя структуры, а потом происходит раскол кластеров или объединение двух кластеров в один.

На кластерную организацию (число солитонов) влияют не только поля, но и механические воздействия. Поэтому процессы в воде, приготовленной различным образом, будут отличаться (талая вода, конденсированная вода, гомеопатическая вода). Есть еще магнетизм протонов, который тоже играет большую роль, но в данной работе не рассматривается.

В результате получено выражение для эффективного гамильтониана жидкости, выяснена связь с параметрами жидкости и внешними электромагнитными полями (ЭМП). При этом изучение сведено не только к построению модели жидкой воды, но и жидкостей с H – связями в целом, благодаря параметрам, характеризующих модель ϵ_0 , t_0 , S_0 описанных ниже. Заменяя эти параметры можно проводить исследование подобных систем. Влияние ЭМП, если оно имеется, можно учесть через константу взаимодействия их с веществом. Вещества, содержащие цепочки водородных связей с 3-ех мерной структурой в жидком состоянии были названы – объёмными вязаными структурами. В них происходят временные процессы: образования и разрушения H – связей, других динамических связей и связей, образующих надмолекулярные структуры и деформации связей. Поведение систем с водородными связями играет важную роль в процессах переноса, обнаруживая большое количество чётких нелинейных и квантовых эффектов. Предположительно структура таких систем похожа на спутанные ленты. Ленты сцеплены своими краями, образуя объёмную вязаную структуру. Такие структуры ранее были названы большими кластерами, или просто кластерами. Такими свойствами обладают молекулы ДНК, содержащие водород, ферроэлектрики (такие как триглицинсульфат и сегнетова соль), вязанные клубки линейных и квазилинейных полимеров [А.Ю. Гросберг, И.М. Лифшиц, А.Р. Хохлов, Успехи физических наук, 1979], фуллерены, кумулены. Есть данные о том, что и вода принадлежит к таким системам [С.П. Габуда, 1982]. При изучении воздействия ЭМП на многокомпонентные среды можно сопоставить его с возникновением в системе солитонов, которые будут предопределять микросостояния нашей макросистемы.

Удалось найти зависимость воздействия поля, через изменение концентрации таких односолитонных решений. Работа выполнена в многосолитонном приближении для кинков. Предположено, что структура

жидкости определяется количеством солитонов на участок отдельной лентовидной цепочки между связками, концентрацией солитонов и концентрацией связок в системе.

Эффективный гамильтониан.

Мы рассмотрели структуру жидкости как двумерную поверхность. Модель характеризуется следующими параметрами: энергией молекулярного поля, пропорциональной энергии водородных связей, временем трансформации двумерной поверхности, пропорциональной времени жизни одной водородной связи для жидкости [О.А. Пономарев, Е.Е. Фесенко, Биофизика, 2000], расстояниями, пропорциональными размеру молекулы. Модель принимает во внимание взаимодействие в объёме как соседних, близко расположенных по ленте молекул, так и молекул, достаточно удалённых по ленте друг от друга. Двумерная структура рассмотрена как обладающая эластичностью, определённой аналогично таковой в теории нематиков. Преобразования структуры связаны с преобразованиями водородных связей. Несколько молекул жидкости образуют с помощью водородных связей сегмент ленточки, а сегменты связываются своими краями также через водородные связи. При разрушении любой водородной связи происходит трансформация двумерной структуры и подкластеры, состоящие из молекул меняют свою ориентацию согласно принципу наименьшего действия. Происходит "перезавязывание" лент. Таким образом, модель описывает изотропную среду с локальной анизотропией. Мгновенные взаимодействия краёв цепи, сложенной из упорядоченных сегментов приняты намного менее прочными, чем взаимодействия молекул в самой ленте. В первом приближении такие взаимодействия не рассматриваются, а моделируется поведение смотанной в клубок ленты. Система вносится во внешнее электромагнитное поле низкой интенсивности. В такой системе появляются уединенные волны - солитоны и бризеры, существенно влияющие на её свойства.

Распространение солитонов на сегментах трёхмерной структуры вдоль лент будет поворачивать их на угол 2π , тогда как распространение бризера – на угол 4π . Аналитическая форма решения SG-уравнения для типов бризера и солитона описывается в [В.Е. Захаров, С.В. Манаков, С.П. Новиков, Л.П. Питаевский, Наука, 1980]. Рассмотрим случай без бризеров. Тогда в основном квантовом состоянии система будет описываться гамильтонианом

$$H_0 = H'_k + \sum_j \int_{-l_j/2}^{l_j/2} \left[\frac{1}{2} I \dot{\phi}_j^2(s,t) + \frac{1}{2} C \left(\frac{\partial \phi_j}{\partial s} \right)^2 + \frac{U}{2} (1 - \cos 2\phi_j) + \frac{\mu}{l_j} \mu_1 \cos \phi_j - \delta I H(t) \dot{\phi}_j \right] ds + \sum_{j>j_1}^N U(|r_j - r_{j_1}|) + \sum_j U(r_j),$$

где H'_k - кинетическая энергия системы минус кинетическая энергия, отнесённая к обобщённым координатам солитонов, $\phi_j(s,t)$ - угол вращения изгибаемой ленты на участке между точками j и $j+1$, длиной l_j , в точках j и $j+1$ лента связана с другой, и потенциал такого связывания составляет $U(|r_j - r_{j_1}|)$, I - плотность момента инерции по отношению к изгибу на единичную длину ленты, C - константа эластичности ленты, U - плотность энергии взаимодействия в молекулярном поле, μ' - модуль плотности дипольного момента, δ - параметр взаимодействия полимерной цепи с внешним магнитным полем $H(t)$.

Точка над функцией ϕ_j означает производную по времени. Величина $U(r_j)$ – внешний потенциал, действующий на точку j с координатой r_j , например, в

капилляре. Допустим, на сегменте ленты между точками j и $j+1$ находится n_j солитонов (то есть, мы имеем n_j - солитонное решение). Допустим также, что концентрация солитонов не очень высока, так что мы можем рассматривать каждый солитон как достаточно удалённый от других солитонов.

Тогда $\phi_j(s,t) \approx \sum_{\alpha=1}^{n_j} \varphi_{j\alpha}(s,t)$, где $\varphi_{j\alpha}(s,t) = 2 \arctan \exp(\gamma_\alpha(s - s_\alpha - v_\alpha t))$ - односолитонное решение [В.Е. Захаров, Л.А. Тахтаджян, Л.Д. Фадеев, Доклады АН СССР, 1974], относящееся к сегменту нити между точками j и $j+1$, $\gamma_\alpha = (1 - v_\alpha^2)^{-\frac{1}{2}}$. Интегрирование по s в выражении может быть осуществлено в явном виде, что приводит к эффективному гамильтониану, описывающему систему в терминах свободных частиц, солитонов и взаимодействий между ними. Гамильтониан не зависит от времени и может быть вычислен для любого момента. Простейший способ сделать это – выбрать время равным нулю $t = 0$. В дальнейшем использован этот эффективный гамильтониан для описания системы, состоящей из изогнутых лент между точками r_j и r_{j+1} и положениями на них скручиваний (солитонов) в точках s_α .

Для свободной энергии на единицу объёма получено выражение

$$\frac{F - F_0}{V} = -c_1 \frac{\pi^2 \delta^2}{4kT} CI \langle v^2 \rangle H^2(t) + c_1 \frac{2\pi \sqrt{UC}}{\gamma} - c_1 \left(-kT \ln c_0 + c_0 \left(-\frac{\pi}{2} + \frac{8}{3\gamma^2} \right) C - \frac{c_0^2}{3!(kT)^2} \left(\pi - \frac{16}{3\gamma^2} \right) \left(2\gamma - \frac{8}{3\gamma} + \frac{256}{27\gamma^3} \right) C^2 \sqrt{UC} - \frac{32c_0^2}{3!\gamma^3} \left(\frac{C}{U} \right) \sqrt{UC} \right) + \frac{F_1}{V},$$

где $c_j = \frac{n_j}{l_j}$ - линейная концентрация солитонов в цепочке. Для глобулы

$$\frac{F_1}{V} = \frac{kT}{4} \left(-3 + \sqrt{1 + 8A(T)c_0^2} \right)^2 n_0(T), \text{ для клубка } \frac{F_1}{V} = -\frac{5kT}{3V} \ln V \rightarrow 0 \text{ при } V \rightarrow \infty. \text{ Здесь}$$

$$c_1(T) = \frac{1}{V} \sum_{j=1}^N n_j = c_0(T) \sum_{j=1}^N \frac{l_j}{V} = c_0(T) \sigma, \text{ где } \sigma - \text{ количество лент, пересекающихся}$$

в единичном участке связывания. Для однородной жидкости это количество постоянно. Следует обратить внимание, что n_0 - концентрация участков связывания, существенно зависит от чистоты жидкости и понижается по мере удаления примесей. Величина с \ln только увеличивает найденный эффект и решения с этой величиной для концентрации солитона могут быть выражены через W-функции Ламберта [Corless R.M., Gonnet G.H., Hare D.E.G, Jeffrey D.J., Knuth D.E. Maple Share Library]. Остаётся минимизировать свободную энергию по c_0 , отнесённую к единице объёма и найти концентрацию солитонов. Варьируя свободную энергию по c_0 , мы получим

$$\frac{U}{C^2} \frac{\delta C_p}{V} = \frac{\pi^2 \delta^2 \bar{v}^2 H^2(t) c_0 \sigma}{8kT^2 U} - \frac{\sigma}{k^2 T^3} \left(\pi - \frac{16}{3\gamma^2} \right) \left(2\gamma - \frac{8}{3\gamma} + \frac{256}{27\gamma^3} \right) c_0^2 + \frac{4kn_0 A^2(T) c_0^2}{\sqrt{(1 + 8A(T)c_0^2)^3}}.$$

Анализ статистического интеграла для вязаных структур показал, что концентрация солитонов возрастает в магнитном поле. В отсутствии магнитного поля система также имеет определённое количество солитонов с относительными концентрациями, показанными на рис. 2. Величина равновесной концентрации солитонов соответствует минимуму свободной энергии. В отсутствии магнитных

полей равновесная величина концентрации солитонов низка, но она увеличивается с возрастанием силы поля. Объёмные взаимодействия уменьшают величину свободной энергии пропорционально концентрации участков соединения лент. С увеличением концентрации солитонов такое относительное уменьшение сокращается, и при $c_0^2 = A^{-1}$ становится равным нулю, тогда свободная энергия понижается опять.

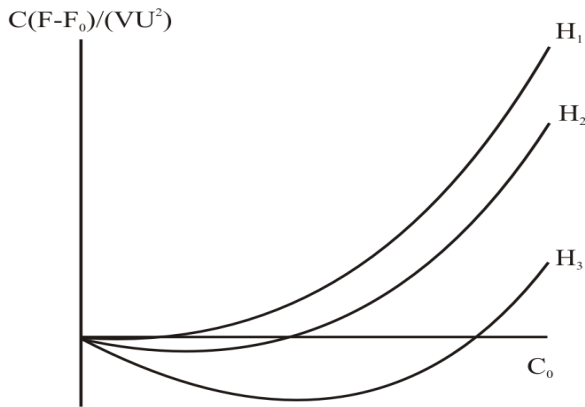


Рис. 2. Зависимость свободной энергии от концентрации солитонов и магнитного поля, $H_1=0$, $H_1 < H_2 < H_3$.



Рис. 3 Зависимость свободной энергии от безразмерной температуры и магнитное поле при равновесной величине концентрации солитонов, $H_1=0$, $H_1 < H_2 < H_3$.

Зависимость свободной энергии от температуры показана на рис. 3. С возрастанием магнитного поля свободная энергия понижается. Теплоёмкость системы уменьшается с понижением температуры, но возрастает в магнитном поле (рис. 4). Такое поведение системы в магнитном поле наблюдается из-за следующего факта. С увеличением интенсивности поля система получает дополнительные степени свободы, соответствующие солитонам. На рис. 4 показаны экспериментальные данные по конфигурационной теплоёмкости в отсутствие электромагнитного поля, взятые из статьи [Ю.Я. Ефимов, Ю.И. Наберухин, Журнал структурной химии, 2000], и пересчитанные в единицах наших безразмерных переменных и параметров, свойственных воде. Теория показала достаточно хорошее соответствие с экспериментальными данными. Следует заметить, что рис. 4 отражает поведение теплоёмкости любой вязаной структуры, а не только воды. Если бы теплоёмкость воды в магнитном поле была известна, рис. 4 позволяет нам установить параметры взаимодействия воды с магнитным полем. Описывая жидкость как протяжённую среду, мы пришли к заключению, что минимальная энергия модели жидкости соответствует отсутствию деформаций в её структуре.

Любое отклонение распределения направляющей от стандартной картины (которая одинакова по всему объёму жидкости) сопровождается присутствием дополнительной энергии эластических деформации в модели жидкости, которая может быть осуществлена только внешним влиянием, связанным, например, с поверхностями выбранного сегмента, внешними ЭМП, и т. п. В отсутствие этих воздействий, или по их окончанию, жидкость стремится вернуться в состояние с прежней ориентацией частиц. В солитонной модели жидкость, после воздействия на неё внешнего магнитного поля происходит поворачивание определённых сегментов ленты, что ведёт к отклонению распределения направлений молекул. Приращение свободной энергии в солитонной модели жидкости обусловлены концентрацией солитонов и бризеров. Они становятся ощутимыми даже при низких величинах интенсивности магнитного поля.

Было предположено, что в ЭМП конфигурация молекулярных лент воды варьирует, также как и длины цепи водородных связей. Поле ориентирует ленты воды в трёхмерном пространстве, и при достаточном количестве взаимодействий в воде возникает локальная упорядоченность направлений. ЭМП взаимодействует с этим потоком, изменяя конформационное состояние части ленты без существенных изменений энергии.

Таким образом, квазистационарные переходы в системе «вода + биологическая молекула» ведут к ориентированию и координации отдельных частей. Изменение свойств системы начинается после некоторого индукционного периода, обязательного для смещения значительной доли частиц в новом конформационном состоянии. Это может значить, что вязаные структуры, к которым принадлежит и вода, имеют уникальные свойства, которые могут быть объяснены существованием в них солитонов и бризеров. Многие свойства в структуре воды объясняются в терминах концепции солитонов. Более того, структуры различных вязаных жидкостей при различных магнитных полях могут быть описаны в терминах сдвига солитонов и бризеров. Солитонные модели предоставляют хорошее описание таких систем. Мы вычислили статистический интеграл, который позволяет находить конфигурационные вклады во внутреннюю энергию, теплоёмкость, энтропию вязаных структур (включая жидкую воду) в широком интервале температур и в присутствии магнитных полей. Полученное значение теплоёмкости для воды без магнитного поля хорошо согласуется с экспериментальными данными.

3. Влияние магнитного поля на радикальные реакции в водных системах.

Влияние на процессы оказывают магнитные поля в диапазонах частот от единиц Гц до десятков Гц, в области кГц и МГц. Отмечена отчётливая связь этих электромагнитных полей с конкретными физико-химическими процессами. Однако механизмы этого влияния до сих пор неизвестны [Аристархов В.М., Пирузян Л.А., Цыбышев В.П.//Реакции биологических систем на магнитные поля. М. Наука. 1978, Коварский В.А.//УФН, 1999]. Без сомнения магнитное поле влияет на

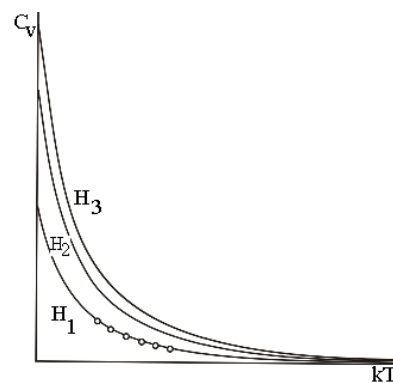


Рис.4. Зависимость добавки к теплоёмкости вязаных структур от безразмерной температуры и магнитного поля, $H_1=0$, $H_1 < H_2 < H_3$.

биохимические реакции и это влияние далее трансформируется в виде макроскопических эффектов на клеточном и организменном уровнях. Многие элементарные процессы, исследованные в химической кинетике, являются составной частью биохимических реакций [Бучаченко А.Л., Сагдеев Р.З., Салихов К.М. Магнитные эффекты в химических реакциях. 1978, Бучаченко А.Л. Физическая химия, ред. Я.М. Колотыркин. М. Химия. 1980, Frankevich E.L., Kubarev S.I. Triplet State ODMR Spectroscopy. 1982, Steiner U.E., Urlich T.// Chem. Rev. 1989]. Выяснение механизмов влияния магнитных полей на эти процессы позволило поставить на прочный научный фундамент проблему влияния магнитных полей не только в кинетике химических реакций, но и по новому осветить проблемы магнитобиологии и магнитомедицины. Не исключено, что в сложных биологических системах со временем будут открыты новые механизмы влияния магнитных полей, однако не следует пренебрегать известными ранее механизмами [Ким Ю.А. и др.//Биофизика. 1988, Кубарев С. И., Ермакова Е. А., Кубарева И. С., Разинова С. М. // Химическая физика, 2000].

Указанные процессы наблюдались во многих экспериментах и могут быть связаны также и с перемещением ядер. Поэтому в данной работе мы учитываем, что движения ядер (не только колебания, но и вращения, которые более существенны) влияют на процессы в спиновых системах.

Выяснено влияние движения ядер, амплитуды постоянного, частоты и амплитуды переменного магнитных полей на вероятность рекомбинации радикальной пары.

Расчёт магнитных эффектов от слабого магнитного поля экстремально низкой частоты на величину вероятности рекомбинации радикальных пар.

Рассмотрим перенос электрона и рекомбинация его с дыркой. Реакция $M^*(H_2O)_n \square e^- + M(H_2O)_n^+$ зависит от комбинированного магнитного поля

$H^z(t) = H_0^z + H_2^z \cos \omega_2 t$ очень существенно. Наблюдаются резонансы от H_0^z, H_2^z, ω_2 .

Для получения этого рассматривается простейший случай рекомбинации радикальных пар. Слабые статические и экстремально низкочастотные магнитные поля воздействуют на живые системы. Во многих случаях для магнитобиологических откликов имеют место резонансы, которые появляются при изменении частоты и амплитуды переменного поля и изменения величины постоянного поля.

Поскольку природа магнитобиологических эффектов не ясна, мы решили использовать эффект с ясным физическим смыслом – рекомбинацию радикальных пар, и выяснить, не проявляются ли для этого процесса такие же свойства, как и для биологических систем.

Исходным является стохастическое уравнение Лиувилля, которое описывает временное изменение спиновых систем

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = i[H_0, \rho] - H_d \rho - H_S (P_S \rho - \rho P_S) - H_T (P_T \rho - \rho P_T). \quad (1)$$

Здесь H_0 имеет вид

$$H_0 = \sum_{\alpha, \beta} Q^{\alpha\beta} S_1^\alpha S_2^\beta - \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} [A_{1q\beta\gamma} S_1^\alpha + A_{2q\beta\gamma} S_2^\alpha] (r_{q\beta}(0) r_{q\gamma}(0)) \omega_{q\gamma}^2 |t| \cdot \exp \left[-\frac{\omega_{q\beta}^2 + \omega_{q\gamma}^2}{2} t^2 \right] + g_1 \beta \sum_{\alpha} H_{\alpha}(t) S_1^\alpha + g_2 \beta \sum_{\alpha} H_{\alpha}(t) S_2^\alpha, \quad (2)$$

$Q^{\alpha\beta}$ – параметр, описывающий энергию взаимодействия двух спинов (частиц, радикалов, и пр.), β – магнетон Бора, $r_{i\alpha}$ – α – проекция векторной координаты (радиус-вектора) i – го электрона; S_1^α и S_2^β – α – и β – проекции 1-го и 2-го спинов, $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ – полностью антисимметричный единичный тензор 3-го ранга, $A_{1q\beta\gamma}$ и $A_{2q\beta\gamma}$ – параметры, описывающие связи 1-го и 2-го спинов соответственно с β – проекцией движения q -го ядра, $r_{q\beta}(0)$ и $r_{q\gamma}(0)$ – β – и γ – проекции векторных координат q -го ядра в нулевой момент времени, $\omega_{q\gamma}$, $\omega_{q\beta}$ и $\omega_{q\omega}$ – частота колебаний q -го ядра соответственно в направлениях γ , β и ω , g_1 и g_2 – g – факторы 1-го и 2-го спинов, $H_\alpha(t)$ – α – проекция зависящей от времени магнитной составляющей электромагнитного поля, ρ – матрица спиновой плотности, H_d – константа скорости диссоциации, H_S, H_T – константы скорости рекомбинации по синглетному и триплетному каналам соответственно, P_S, P_T – операторы проектирования на синглетные и триплетные состояния.

Далее рассматриваем синглетный канал и вычисляем вероятность рекомбинации радикальной пары в приближении больших времён, когда $\varphi = \varphi(\infty)$, которая равна

$$W_S = 2H_S \int_0^\infty dt \rho_{SS}(t) = \frac{1}{2} \frac{H_S}{H_S + H_d} + \frac{1}{2} J_0(h_2) \frac{H_S \left((H_S + H_d) \cos \varphi - h_0 \omega_2 \sin \varphi \right)}{h_0^2 \omega_2^2 + (H_S + H_d)^2} + \sum_{k=1}^\infty J_{2k}(h_2) \cdot$$

$$\cdot \left[\frac{H_S \left((H_S + H_d) \cos \varphi - (h_0 + 2k) \omega_2 \sin \varphi \right)}{(H_S + H_d)^2 + (h_0 + 2k)^2 \omega_2^2} + \frac{H_S \left((H_S + H_d) \cos \varphi - (h_0 - 2k) \omega_2 \sin \varphi \right)}{(H_S + H_d)^2 + (h_0 - 2k)^2 \omega_2^2} \right] + \sum_{k=0}^\infty J_{2k+1}(h_2) \cdot$$

$$\cdot \left[\frac{H_S \left((H_S + H_d) \cos \varphi - (h_0 - 2k - 1) \omega_2 \sin \varphi \right)}{(H_S + H_d)^2 + (h_0 - 2k - 1)^2 \omega_2^2} - \frac{H_S \left((H_S + H_d) \cos \varphi - (h_0 + 2k + 1) \omega_2 \sin \varphi \right)}{(H_S + H_d)^2 + (h_0 + 2k + 1)^2 \omega_2^2} \right].$$

(3)

Обсудим полученные результаты. Выражение (3) имеет максимумы в точках $h_{0p} = \pm 2k$. Заметим, что каждый резонанс входит с весом, определяемым функцией Бесселя соответствующего индекса и зависит от частоты и амплитуды переменного поля. Общая картина изменения вероятности рекомбинации РП приведена на рис. 5 и определяется суммой функций Бесселя.

а). *Влияние движения ядер.* Влияние движения ядер проявляется через сдвиг фазы $\varphi(t)$ и приводит к искажению лоренцевой формы резонанса, не меняя зависимости от магнитного поля H_2 и несколько изменяя величину резонанса. Это хорошо видно на рис. 5 и 6.

а)

б)

а)

б)

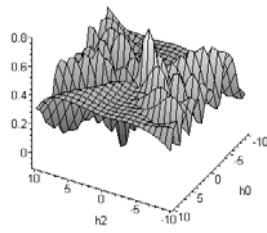
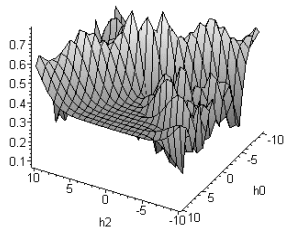


Рис. 5. Изменение вероятности рекомбинации радикальной пары (РП) в зависимости от амплитуд постоянного и переменного магнитного поля, а) $\varphi = 0$, б) $\varphi = 4$.

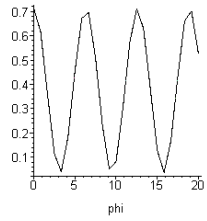
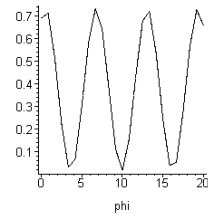


Рис. 6. Зависимость вероятности рекомбинации РП от скорости движения ядер, а) $h_0 = 4$, б) $h_0 = 5$.

б). *Влияние амплитуды H_0 .* Зависимость эффекта от H_0 – резонансная. Амплитуда H_0 определяет номер резонанса и его вес, связанный с функцией Бесселя с определенным индексом. То есть ей определяется зависимость эффекта от переменного магнитного поля. Так как $J_0(h_2)$ и $J_2(h_2)$, $J_4(h_2)$ по-разному ведут себя с уменьшением переменного магнитного поля, то H_0 может изменить знак эффекта. Более того, так как $J_0(h_2)$ возрастает с уменьшением h_2 , то эффект растет с уменьшением воздействия, причем H_0 при этом тоже должно уменьшаться, чтобы эффект возрастал. Поле H_0 состоит из двух составляющих: поля земного магнетизма (около 10^{-5} Т) и лабораторного поля. Поэтому чтобы на герцовых частотах выйти на резонанс с весом $J_0(h_2)$ необходимо экранировать систему от магнитного поля Земли и выключить лабораторное поле. Сравнение эффекта при $H_0=0$ и $H_0 \neq 0$ приведено на рис. 7, 9.

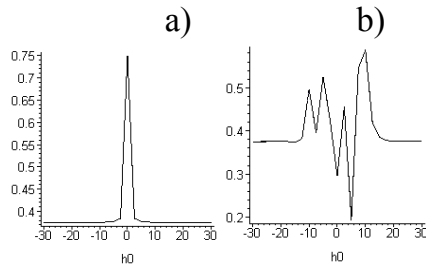


Рис. 7. Зависимость вероятности рекомбинации РП от амплитуды постоянного магнитного поля, а) $h_2 = 0$, б) $h_2 = 10$.

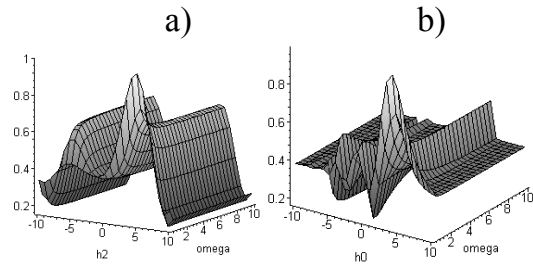


Рис. 8. Зависимость вероятности рекомбинации РП от частоты переменного поля и амплитуды переменного поля (а), и постоянного поля (б).

в). *Влияние частоты переменного поля.* Она разделяет область малых и больших полей. С ростом частоты граница раздела смещается в сторону увеличения напряженности полей H_0 и H_2 . Если мы хотим иметь максимальный эффект, то частота и H_0 должны быть связаны между собой «циклотронной» формулой [Леднев В. В., Сребрицкая Л. К., Ильясова Е. Н., Рождественская З. Е., Климов. А. А., Белова Н. А., Тирас Х. П. //Биофизика. 1996.]

$$\omega = \frac{eH_0}{M_k c}, \quad \text{где } M_k = \frac{4mkg_0}{|g_1 - g_2|}, \quad k = 1, 2, \dots \quad (4)$$

г). *Влияние амплитуды переменного поля.* Зависимость от H_2 – резонансная. Величина H_2 входит в выражении в комбинации $\left(\frac{H_2}{\omega_2}\right)$. Поэтому уменьшение частоты эквивалентно увеличению амплитуды поля и наоборот (рис. 9.).

а) б)

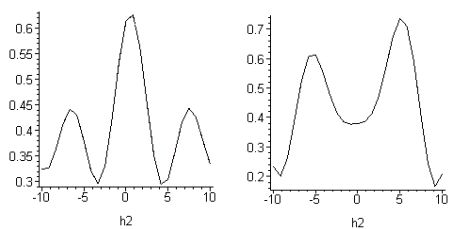


Рис.9. Зависимость вероятности рекомбинации РП от амплитуды переменного поля для малых (а) и больших (б) амплитуд постоянного поля, а) $h_0 = 0.3$, б) $h_0 = 4$.

При $H_2=0$ исчезают все резонансы, кроме первого, имеющего место лишь при $H_0=0$. Если $H_0 \neq 0$, то исчезают все резонансы (рис. 9б). С ростом H_2 начинают проявляться вторые, третьи и т.д. резонансы, величина которых зависит от H_2 немонотонно и имеет порог. При больших H_2 эффект меняется синусоидально спадая несколько с ростом амплитуды переменного поля, рис. 9.

Полученные результаты могут иметь значение для биологии. Известно, что слабые статические и экстремально низкочастотные магнитные поля эффективно влияют на живые системы: клетки, ткани, физиологические системы и целые организмы. Во многих случаях эти эффекты носят резонансно подобный мультипиковый характер. Мультипиковые отклики проявляются при варьировании частоты или амплитуды переменного магнитного поля и амплитуды постоянного поля. По-видимому, эти эффекты являются квантовыми биениями, которые хорошо изучены в случае рекомбинации радикальных пар, и полученные нами результаты могут быть соотнесены с биологическими экспериментами. Динамика радикальных пар такова, что система медленно термализуется, поведение системы долго остаётся динамическим, что и приводит к биениям. Роль радикальных пар может иметь место во многих биологических процессах, связанных с переносом электронов и ионов. Интересно посмотреть, как на этот процесс влияют водородные связи, которых много в ДНК и воде. Вообще говоря, роль радикальных пар проявляется в том, что имеется физическая модель для исследования биологических явлений в магнитных полях. Дальнейшее изучение позволит обобщить и выявить роль исследованных процессов по рекомбинации радикальных пар в биологических процессах.

ВЫВОДЫ.

- Показано, что объёмные вязанные структуры описываются солитонной моделью, в которой молекулы расположены в динамической полосе с распределённым дипольным моментом.
- Следует из модели трехуровневая модель жидкой среды: большой кластер +(клубок, глобула)+ лента. Она предсказывает существование больших кластеров, которые существенно меняют свойства жидкости в области сверхнизких частот.
- Показано, что основные свойства объёмных вязанных структур в области низких частот определяются концентрацией солитонов и их динамикой.
- Установлено, что внешние воздействия полей, границ, примесей осуществляются через изменение концентрации солитонов.
- Показано, что магнитное поле влияет на структуру молекулярных жидкостей и на химические реакции в водных системах. Прямое влияние магнитного поля на химические превращения достаточно сильное и немонотонное.
- Показано, что необходимо учитывать влияние движения ядер, которое искажает Лоренцеву форму резонанса и изменяет величину резонанса.

- Установлено, что зависимость от амплитуд постоянного и переменного коллинеарных магнитных полей - резонансная. Влияние частоты переменного магнитного поля имеет циклотронный характер.

СПИСОК РАБОТ, ОПУБЛИКОВАННЫХ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. O.A. Ponomarev, I.P. Susak "The Peculiarity of Transfer of Energy in Liquid Water"// In the Book: "Diffusion Assisted Reactions. 2000". Edited by A.I. Ivanov, V.V. Mikhailova - Volgograd, 2000.
2. О.А. Пономарев, И.П. Сусак, Е.Е. Фесенко, А.С. Шигаев "Термодинамические свойства объемных вязаных структур"// Биофизика, 2002, Т. 47, № 3, С. 395 - 410.
3. О.А. Пономарев, И.П. Сусак, Е.Е. Фесенко "Свойства жидкой воды в электромагнитном поле (солитонная модель)" // In the Book: " Recent problems in field theory. 2001-2002 ". Edited by A.V. Aminova. - Kazan, Regent, 2003, С. 333-340.
4. O.A. Ponomarev, I.P. Susak "Free Energy of Bulk Knitted Structures in Magnetic Field: Band - Soliton Model"// In the Book: " Recent problems in field theory. 2001-2002 ". Edited by A.V. Aminova. - Kazan, Regent, 2003, С. 341- 348.
5. O.A. Ponomarev, I.P. Susak, E.E. Fesenko "Role of structural defects in liquid water" // In the Book: " Recent problems in field theory. 2001-2002 ". Edited by A.V. Aminova. - Kazan, Regent, 2003, С. 330- 332.
6. I.P. Susak, O.A. Ponomarev, A.S. Shigaev, E.E. Fesenko " Thermodynamic properties of bulk knitted structures: band-solitons models"// J. of Molecular Liquids. Vol. 105, No. 2-3, 2003, pp. 181 -186.
7. И.П. Сусак, А.С. Шигаев, О.А. Пономарев, Е.Е. Фесенко "Моделирование взаимодействия магнитного поля с объемными вязаными структурами". В книге "Математика, компьютер, образование". Часть 2/ Под ред. Г.Ю. Ризниченко. – Москва – Ижевск: Научно – издательский центр "Регулярная и хаотическая динамика", 2002, С. 733 – 740.
8. И.П. Сусак, А.С. Шигаев, О.А. Пономарев, Е.Е. Фесенко "Первичный механизм воздействия низкоинтенсивного электромагнитного излучения на биологическую жидкость". В книге "Математика, компьютер, образование - 2003". Под ред. Г.Ю. Ризниченко. – Москва – Ижевск: Научно – издательский центр "Регулярная и хаотическая динамика", 2003.
9. А.С. Шигаев, И.П. Сусак, О.А. Пономарев, Кубарев С.И., Кубарева И.С., Е.Е. Фесенко "Влияние слабого магнитного поля низкой частоты на величину вероятности рекомбинации радикальных пар" В книге "Математика, компьютер, образование - 2003". Под ред. Г.Ю. Ризниченко. – Москва – Ижевск: Научно – издательский центр "Регулярная и хаотическая динамика", 2003.
10. I.P. Susak, A.S. Shigaev, O.A. Ponomarev, E.E. Fesenko "Interaction Magnetic Field with Liquid Structures". Ukrainian Journal of Physics. 2003.