

**ВЛИЯНИЕ РАДИОНУКЛИДОВ НА
ДИНАМИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ
ВРАЩЕНИЯ СПИНОВОЙ МЕТКИ В
БИОМАТЕРИАЛАХ**

Умаров Насимджон Негматович - кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей физики и твёрдого тела ГОУ "ХГУ имени академика Бободжана Гафурова", e-mail: nasimchon-74@mail.ru.

**ТАЪСИРИ РАДИОНУКЛИДҲО БА
ПАРАМЕТРҲОИ ДИНАМИКИИ
ЧАРХЗАНАНДАГИИ НИШОНАҲОИ
СПИНИ ДАР БИОМАТЕРИАЛҲО**

Умаров Насимҷон Негматович - номзоди илмҳои физикаю математика, дотсенти кафедраи физикаи умумӣ ва ҷисмҳои сахти МДТ "ДДХ ба номи академик Бобоҷон Гафуров", e-mail: nasimchon-74@mail.ru.

**THE AFFECT OF RADIONUCLIDES OVER
DYNAMIC PARAMETERS OF SPINAL
MARK ROTATION IN BIOMATERIALS**

Umarov Nasimjon Negmatovich - Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of the Department of General Physics and Solid State of the PEI "KSU named after academic Bobojon Gafurov", e-mail: nasimchon-74@mail.ru.

Ключевые слова: спиновая метка, температурная зависимость, энергия активации вращения радикала, частота вращения, тростник обыкновенный.

Методом спиновой метки изучена молекулярная динамика нитроксильного радикала, присоединённого к структуре стебля тростника обыкновенного. Установлено, что по мере роста количества радионуклидов, частоты и энергия активации вращения радикала изменяются. Определено, что радионуклиды увеличивают частоту вращательной подвижности нитроксильного радикала вокруг положения равновесного состояния. Выявлено, что радионуклиды уменьшают активационную энергию вращения радикала.

Вожаҳои калидӣ: нишонаҳои спинӣ, вобастагии ҳароратӣ, энергияи активатсионии чархзании радикалҳо, басомади чархзанӣ, қамиши оддӣ.

Бо усули нишонаҳои спинӣ динамикаи молекулави радикали нитроксилье, ки ба сохтори танаи қамиши оддӣ пайваст кардашудааст мавриди тадқиқ қарор дода шудааст. Аниқ карда шудааст, ки бо зиёд шудани миқдори радионуклидҳо басомад ва энергияи активатсионии чархзании радикалҳо тағйир меёбад. Муайян карда шудааст, ки радионуклидҳо басомади гардиши радикали нитроксильро дар атрофи мавқеи ҳолати мувозинат зиёд мекунанд. Ошкор карда шудааст, ки радионуклидҳо энергияи активатсионии чархзании радикалҳоро хурд мекунанд.

Key words: spinal mark, temperature dependence, radical rotation activation energy, rotation frequency, usual rush

By means of spinal mark method we have studied a molecular dynamics of a nythroxy radical joined to the structure of the stem belonging to usual rush. It was identified that in so far as radionuclides increase in number, frequencies and rotation, activation energy change. It is determined that radionuclides intensify the mobility of rotational frequency produced by a nythroxy radical around the post ton of the state of equilibrium.

Из научных источников [1-5], указанных в библиографическом списке, известно, что метод спиновой метки является одним из наиболее эффективных методов исследования молекулярной динамики и характеристик вращающейся метки, прикрепленного к матрицам биоматериалов. Спиновые метки, прикрепленные к матрице биоматериала, предоставляют информацию об изменении положения внутри молекул.

Априори спектр электронного парамагнитного резонанса радикала зависит от влияния внешних факторов и ориентации присоединённых спиновых меток (зондов) во внешнем магнитном поле.

В работах [3, 4] исследовано влияние радиации места произрастания на молекулярную динамику растительных природных соединений. Согласно [3, 4] по мере увеличения мощности радиационного фона в составе и структуре растений количество устойчивых радикалов существенно изменяется, иными словами уменьшается. Общеизвестно, что если внешняя среда загрязнена радионуклидами, естественно, растения вынуждены поглощать эти техногенные выбросы. Если радионуклиды, находятся в структуре растений, очевидно, они пагубно влияют на структуру и свойств а также на процесс развития растений. Поэтому, процесс нормального развития растений, который заложен генетически, может нарушаться. В результате, процесс структурообразования, и как следствие, биохимический состав всех органов растений существенно изменяется. Согласно работы [6] выявлено, что радионуклиды уменьшают межмолекулярные и внутримолекулярные взаимодействия гидроксильных групп, а также усиливают подвижность нитроксильных радикалов, присоединённых к гидроксильным группам.

Анализ литературы показывает, что влияние радионуклидов внутренним облучением, воздействующим на динамические параметры, и как следствие, на механические свойства биоматериалов, получаемых из стебля тростника обыкновенного систематически не исследовано и поэтому, мы полагаем, что этот вопрос является актуальной задачей современной физики.

В данной работе изучено влияние количества радионуклидов на частоту вращения радикалов вокруг положения равновесия (v_0) и эффективную энергию активации вращения радикалов (Еэф.) образцов из стеблей тростника. Образцы стебля тростника готовили из растений, произраставших у реки Сыр-Дарьи и у подножия Моголтау в пределах города Худжанда.

В зависимости от степени загрязнения окружающей среды радионуклиды могут приводить к экологическому напряжению среды, в результате чего, очевидно, нарушаются структура и свойства биоматериалов. Одним из элементов появления радионуклидов в составе и структуре растений является почва, которая аккумулирует в себе экотоксиканты, которые могут мигрировать [7, 8].

Тростник обыкновенный широко применяется в хозяйстве, где он произрастает. Из тростника делают корзины, лёгкую мебель для дач, музыкальные инструменты, картон, бумагу и прочее. Составные части тростника обыкновенного используются для строительства жилищ, решёток, заборов, а также для плетения циновок, переноски сетей, изготовления корзин, изоляционного материала, топлива, заменителей пробки и так далее. Стебель тростника содержит около 60-65 процентов целлюлозы и используется при производстве целлюлозы и бумаги [9, 10]. Также тростник служит как высококачественный, экологичный и прочный материал с водоотталкивающими свойствами для крыш сараев и домов. В деревнях из молодого тростника заготавливают пищу для домашних животных на зиму. Также тростник обыкновенный играет важную роль для очищения воды в водоёмах.

В табл. 1 приведена концентрация радионуклидов в почве и растениях. Видно, что по мере роста концентрации радионуклидов в пробах почв и в растениях она тоже увеличивается. Высокая концентрация радионуклидов имеется в составе проб почвы, собранных из Моголтау. Радионуклиды К-40, Рb – 214 и Вi – 214 больше содержатся в пробах почв, собранных в окрестностях Моголтау чем в пробах почв из Худжанда около Сыр-Дарьи. Радионуклидов К-40, Рb – 214 и Вi – 214 от 2 до 4 раз больше поглощается растениями, произрастающими в окрестностях шахтных вод Моголтау. Естественно, эти радионуклиды влияют на молекулярную динамику функциональных групп биоматериалов, в частности, на частоту вращения радикала и эффективной энергии активации.

Таблица 1.

Содержание радионуклидов в почве и тростнике обыкновенном (Бк/кг)

Изотопы	Худжанд, почва	Худжанд, растения	Моголтау, почва	Моголтау, растения
Pb – 214	126,3	67,3	1298,3	159,6
Bi – 214	100,7	44,2	1132,2	182,6
Pb – 212	54,2	0	450,8	31,2

Tl-208	69	38,7	377,8	39,6
K-40	212,5	98,4	3037,1	255,8

Согласно источникам [11-14] показано, что интервал температуры влияет на вращательную частоту радикала и эффективную энергию активации. Эта зависимость определяется согласно следующей формулы (1);

$$\nu = \nu_0 e^{-\frac{E}{RT}} \quad (1),$$

где, ν – частота вращения радикала, ν_0 – частота вращательных колебаний радикала вокруг положения равновесия, E – эффективная энергия активация вращения радикала, R – газовая постоянная, T – абсолютная температура (К). Формулу (1) переведём в десятичные логарифмы в следующем виде (2);

$$\nu = \nu_0 10^{\lg e \left(-\frac{E}{RT}\right)} \quad (2)$$

Для получения зависимости частоты вращения радикала (ν) от температуры ($1/T$), логарифмируя уравнения (2), получаем;

$$\lg \nu = \lg \nu_0 - \left(\frac{E}{R} * \lg e\right) * \left(\frac{1}{T}\right). \quad (3)$$

Зависимость частоты вращения радикалов от температуры исследовалась в диапазоне от – 280 до 350 К. на рисунке 1 представлена зависимость логарифма частоты вращения радикалов от температуры.

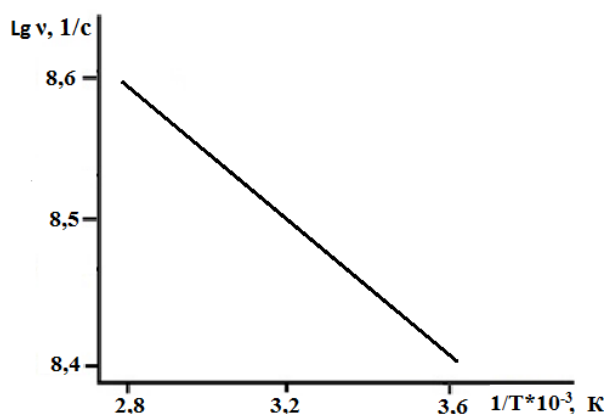


Рис. 1. График зависимости частоты от обратной величины температуры

Из рисунка 1 видно, что эта зависимость (ν от $1/T$) описывается уравнением (3) и с понижением температуры приведёт к уменьшению частоты вращения радикала, которое подчиняется теории. Естественно это уравнение описывает зависимость частоты вращения радикала от температуры.

Используя формулу (3), составим систему уравнений для определения активационной энергии и частоты вращательной подвижности присоединённых спиновых-меток в макромолекулы стебля тростника вокруг положения равновесия,

$$\left. \begin{aligned} \lg \nu_1 &= \lg \nu_0 - \left(\frac{E}{R} * \lg e\right) * \left(\frac{1}{T}\right)_1 \\ \lg \nu_2 &= \lg \nu_0 - \left(\frac{E}{R} * \lg e\right) * \left(\frac{1}{T}\right)_2 \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

где $\lg \nu_1, \lg \nu_2$ – логарифма частоты вращения радикала в двух значения обратной температуры – $(1/T)_1, (1/T)_2$.

В таблице 2 приведены динамические параметры стебля тростника от места произрастания. Эффективная энергии активация и частоты вращения вокруг положения

равновесия изменяется, то есть радионуклиды пагубно влияют на динамические параметры макромолекул биоматериала.

Таблица 2.

Динамические параметры тростника обыкновенного в местах произрастания				
	Место произрастания	Е _{эфф} , ккал/моль	ν , 10 ⁸ 1/с	τ_c , 10 ⁻⁸ с
1.	Худжанд	0,82	3.17	0,32
2.	Моголтау	0,64	4.27	0,23

Как видно из табл.2, по мере роста количества радионуклидов, возможное появление в структуре тростника рыхлой области, радикалы которой свободно вращаются, впоследствии частота вращательных колебаний увеличивается.

Таким образом, в результате экспериментальных расчётов можно предположить, что радионуклиды влияют на эффективную энергию активации и на частоты вращательной подвижности спиновых меток вокруг положения равновесия. Определено, что по мере роста концентрации радионуклидов вращательные колебания нитроксильного радикала присоединённого к тростнику обыкновенного увеличиваются. Выявлено, что эффективная энергия активации вращательной диффузии спиновых меток присоединённых к образцам из Моголтау уменьшается до 22%. Полученные результаты можно использовать для оценки динамических параметров макромолекул растений.

ЛИТЕРАТУРА

1. Юсупов И.Х. Бахдавлатов А.Д., Марупов Р., Шукуров Т. Исследование молекулярной динамики лекарственного растения родиолы холодной (*Rodiola gelida schrenk*) методом спиновой метки. Известия АН Республики Таджикистан, 2013. – № 2 (151). – С. 70–78.
2. Лихтенштейн Г.И. Метод спиновых меток в молекулярной биологии. М.: Наука, 1977. – 256 с.
3. Умаров Н.Н., Шукуров Т., Юсупов И.Х., Марупов Р. Исследования влияния дозы радиационного фона на спектральные характеристики лекарственного донника (*Melilotus officinalis L.*) методом ИК- и ЭПР - спектроскопии. Учёные записки, серия естественные и экономические науки. Худжанд, 2016. – № 4 (39). – С. 52–60.
4. Умаров Н.Н. Шукуров Т., Абдуллаев С. Ф. Влияние пестицидов на содержание тяжёлых металлов и молекулярную динамику растительных природных соединений. Экосистемы. ФГАОУ ВО «КФУ имени В. И. Вернадского» г. Симферополь, 2020. – № 24. – С. 152–157.
5. Фрид Д.Ж. Метод спиновых меток. Теория и применение. М.: Наука, 1979. – С.64–155.
6. Умаров Н.Н., Юсупов И.Х., Абдуманонов А., Кадыров А.Л., Абдуллаев С,Ф., Абдуманонова Ф.А. Влияние радионуклидов на молекулярную динамику функциональных групп каперса колючего. Учёные записки, серия естественные и экономические науки. Худжанд, 2021. – № 3 (58). – С. 29–36.
7. Рахматов, М.Н. Содержание тяжелых металлов в пылевом аэрозоле и почвах Северного Таджикистана / М.Н. Рахматов, С. Ф. Абдуллаев // Оптика атмосферы и океана. 2021. Т. 34. № 02. С. 112–121. DOI: 10.15372/AOO20210206.
8. Соколов Э.М., Панарин В.М., Рылеева Е.М. Антропогенное загрязнение окружающей среды тяжёлыми металлами. Экология и промышленность России, 2008. – №11. – С 102–106.
9. Боар Р.Р., Крук С.Е., Мосс Б. Регрессия тростниковых болот *Phragmites australis* и недавние изменения химического состава воды в Норфолкском Бродленде // Англия. Аква, 1989. – Т. 35. – С. 41–55.
10. Исакулов, Б.Р. Исследование прочностных характеристик порисованных легких бетонов на основе отходов промышленности и растительного сырья Центральной Азии // Науч.-техн. вестн. Поволжья. Казань, 2011. – № 5. – С. 125–131.
11. Вассерман А.М., Бучаченко А.Л., Коварский А.Л. Нейман М.Б. Исследование молекулярных движений в полимерах методом парамагнитного зонда. Высокомолекулярное соединения, 1968. – Т.10. – № 8. – С. 1930–1936.
12. Стрюков В.Б., Королев Г.В. Исследование вращательных движений иминоксильного радикала в различных полимерах. Высокомолекулярное соединения, 1969. – Т.11. – №2. – С.149–425.
13. Максимов В.Л. О связи между эффективными и истинными энергетическими параметрами активированных процессов в полимерах. Высокомолекулярное соединения, 1990. – Т.32. – № 10. – С. 2032–2038.

14. Забелина А.Н., Глушак М.И., Щербинин А.С., Хорошавина Ю.В., Рамш А.С., Курлянд С.К. Исследование бутадиен-нитрильных каучуков методом диэлектрической спектроскопии. Журнал физической химии, 2020. – Т. 94. – № 1. – С. 108–113.

REFERENCES

1. Yusupov I.Kh., Bakhdavlatov A.D., Marupov R., Shukurov T. Study of the molecular dynamics of the medicinal plant *Rhodiola cold* (*Rodiola gelida* Schrenk) by the spin label method. News of the Academy of Sciences of the Republic of Tajikistan, 2013. – № 2 (151). – P. 70–78.
2. Liechtenstein G.I. Spin label method in molecular biology. M.: Nauka, 1977. – 256 p.
3. Umarov N.N., Shukurov T., Yusupov I.Kh., Marupov R. Investigation of the influence of background radiation dose on the spectral characteristics of the medicinal sweet clover (*Melilotus officinalis* L.) by IR and EPR spectroscopy. Scientific notes, a series of natural and economic sciences. Khujand, 2016. – №4 (39). – P. 52–60.
4. Umarov N.N., Shukurov T., Abdullaev S.F. Influence of pesticides on the content of heavy metals and molecular dynamics of plant natural compounds. Ecosystems. Federal State Autonomous Educational Institution of Higher Education "KFU named after V. I. Vernadsky", Simferopol, 2020. – № 24. – P. 152–157.
5. Fried D.Zh. Spin label method. Theory and application. M.: Science, 1979. – P. 64–155.
6. Umarov N.N., Yusupov I.Kh., Abdumanonov A., Kadyrov A.L., Abdullaev S.F., Abdumanonova F.A. Influence of radionuclides on the molecular dynamics of functional groups of prickly caper. Scientific notes, a series of natural and economic sciences. Khujand, 2021. – № 3 (58). – P. 29–36.
7. Rakhmatov, M.N. The Content of Heavy Metals in Dust Aerosol and Soils of Northern Tajikistan / M.N. Rakhmatov, S.F. Abdullaev // Atmospheric and Oceanic Optics, 2021, V. 34. No. 03. pp. 212–221. DOI: 10.15372/AOO20210206.
8. Sokolov E.M., Panarin V.M., Ryleeva E.M. Anthropogenic pollution of the environment with heavy metals. Ecology and Industry of Russia, 2008. – № 11. – P. 102–106.
9. Boar R.R., Crook C.E., Moss B. Regression of *Phragmites australis* reedswamps and recent changes of water chemistry in the Norfolk Broadland // England. Aquat, 1989. – Bot. 35. – P. 41–55.
10. Isakulov B.R. Investigation of the strength characteristics of colored lightweight concrete based on industrial waste and vegetable raw materials of Central Asia // Nauch.-tekhn. vestn. Volga region. Kazan, 2011. – № 5. – P. 125–131.
11. Wasserman A.M., Buchachenko A.L., Kovarsky A.L., Neiman M.B. Investigation of molecular motions in polymers by the paramagnetic probe method. High-molecular compounds, 1968. – V.10. – № 8. – P. 1930–1936.
12. Stryukov V.B., Korolev G.V. Investigation of the rotational motions of the iminoxyl radical in various polymers. High-molecular compounds, 1969. – V.11. – № 2. – P. 149–425.
13. Maksimov V.L. On the relationship between effective and true energy parameters of activated processes in polymers. High-molecular compounds, 1990. – V. 32. – № 10. – P. 2032–2038.
14. Zabelina A.N., Glushak M.I., Shcherbinin A.S., Khoroshavina Yu.V., Ramsh A.S., Kurlyand S.K. Study of butadiene-nitrile rubbers by dielectric spectroscopy. Journal of Physical Chemistry, 2020. – V. 94. – № 1. – P. 108–113