

**ВЛИЯНИЕ РАДИОНУКЛИДОВ
НА ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ
АКТИВНЫХ РАДИКАЛОВ И
ГИДРОКСИЛЬНЫХ ГРУПП**

Абдуллаев Сабур Фузайлович, д.физ.-мат.наук, проф., заведующий лабораторией физики атмосферы физико-технического института им. С.У. Умарова НАНТ; Умаров Насимджон Негматович, к.физ.-мат. наук, заведующий кафедрой общей физики и твёрдого тела ГОУ “ХГУ имени акад. Б.Гафурова” (Таджикистан, Худжанд)

**ТАЪСИРИ
РАДИОНУКЛИДҲО БА
ИРТИБОТИ МУТАҚОБИЛАИ
РАДИКАЛҲОИ ФАЪОЛ ВА
ГУРҶҲОИ ҲИДРОКСИЛӢ**

Абдуллоев Сабур Фузайлович, д.и.физ.-мат., проф. мудири лабораторияи физикаи атмосфераи Институти физикаю техникаи ба номи С.У. Умарови АМИТ; Умаров Насимҷон Негматович, н.и.физ.-мат., мудири кафедраи физикаи умумӣ ва ҷисмҳои сахти МДТ “ДДХ ба номи акад.Б.Гафуров”(Тоҷикистан, Хуҷанд)

**INFLUENCE OF
RADIONUCLIDES ON THE
INTERACTION OF
REACTIVE RADICALS AND
HYDROXYL GROUPS**

Abdullaev Sabur Fuzailovich, Dr. of Physics Mathematics, Professor, Head of Atmospheric Physics Laboratory S.U. Umarov Physical Technical Institute National Academy of Sciences of the Republic of Tajikistan; E-mail: sabur.f.abdullaev@gmail.com; Umarov Nasimjon Negmatovich, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Head of the Department of General Physics and Solid State, SEI “KhSU named after acad.B.Gafurov”, E-mail: nasimchon-74@mail.ru.

Ключевые слова: активные радикалы, гидроксильная группа, растительное соединения, радионуклиды, математическое моделирование

Методом электронного парамагнитного резонанса и инфракрасной спектроскопии исследовано влияние активных радикалов на количество гидроксильных групп в листьях каперса колючего. Определено, что радионуклиды пагубно влияют на количество гидроксильных групп, о чём свидетельствует уменьшение гидроксильных групп до 30 %. С использованием экспериментальных результатов с применением системы уравнения Лотки-Вольтера и математической программы Mathcad определено взаимодействие активных радикалов и гидроксильных групп. Выявлено, что процесс увеличения и уменьшения количества активных радикалов и гидроксильных групп на графике, похож на колебания гармонического осциллятора.

Вожаҳои калидӣ: радикалҳои фаъол, гурӯҳҳои ҳидроксилӣ, пайваस्ताгиҳои рустанигӣ, радионуклидҳо, моделиронии математикӣ

Дар асоси усули резонанси электронои парамагнитӣ ва спектроскопияи инфрасурх, таъсири радикалҳои фаъол ба шумораи гурӯҳҳои ҳидроксилӣ дар барги кавар омӯхта шудааст. Муайян карда шуд, ки радионуклидҳо ба миқдори гурӯҳҳои ҳидроксилӣ таъсири манфӣ мерасонанд, дар натиҷа 30 фоиз кам шудани гурӯҳҳои ҳидроксилӣ мушоҳида мешавад. Бо истифода аз натиҷаҳои таҷрибавӣ, системаи муодилаҳои Лотка-Вольтер ва барномаи математикӣ Mathcad, таъсири мутақобилаи радикалҳои фаъол бо гурӯҳҳои ҳидроксилӣ муайян карда шудааст. Мушаххас шуд, ки раванди зиёд ва кам шудани шумораи радикалҳои фаъол ва гурӯҳҳои ҳидроксилӣ дар график ба лаппиши осциллятори гармоникӣ монанд мебошад.

Key words: active radicals, hydroxyl group, radionuclides, plant compounds, mathematical modelling

Based on the method of electronic and paramagnetic resonance and infrared spectroscopy, the effect of active radicals on the number of hydroxyl groups in caber leaves was studied. It is determined that radionuclides have a detrimental effect on the number of hydroxyl groups, as evidenced by a decrease in hydroxyl groups by up to 30%. Resorting to the experiment results with the application of Lotka-Volterra equation system and Mathcad mathematical programmer the author determined interaction of active radicals with joined spinal marcs proceeding from a proportional number of hydroxylic groups. It is cleared out that a cycle of multiplication and reduction of the active radicals and hydroxylic groups on the schedule's similar to the vacillation of a harmonious oscillator.

Известно, что радионуклиды, находясь в структуре растений, очевидно, влияют на их развитие и рост. Впоследствии, процесс структурообразования и биохимический состав составных частей растений изменяется. Кроме внешних облучений радиации, также внутренние облучения влияют на структуру и свойства растительных соединений [1,с.4]. Согласно литературным данным, изменения структуры и свойств биоматериалов отражаются на спектральных характеристиках [5,с.7].

Судя по обработке литературных данных, влияние радионуклидов на взаимодействия активных радикалов и ОН – групп состав растений – систематически не исследовано. Для прогнозирования взаимодействия активных радикалов и гидроксильных групп растительных соединений можно применить математические уравнения. Как известно, уравнения Лотки-Вольтера могут быть применены для моделирования разных процессов взаимодействия: «хищник-жертва», «червь-растение», «ледник-тепловое течение» и др. По моделям их уравнений решаются физико-химические, биохимические, биофизические и экологические проблемы [8,9].

При обработке литературных данных влияние активных радикалов состава растений на количество присоединившихся спиновых меток к гидроксильным группам систематически не изучено. Поэтому разработка математической модели этих взаимодействий и её анализ в современных вычислительных средствах имеют практическое значение.

В связи с этим в работе поставлена задача – исследовать влияние радионуклидов на взаимодействие между гидроксильными группами и активными радикалами листьев каперса колючего.

Для определения количества активных радикалов и гидроксильных групп применены метод электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) и инфракрасной спектроскопии (ИК).

В качестве объекта исследованы образцы листьев каперса колючего из разных мест произрастания. Метод подготовки образцов, представленный нами описано в работе [5,-7;С.10-13] и согласуется с ГОСТом [14]. ИК-спектры снимали в Фурье-спектрометре IRAffinity-1 (производстве Японии) в лаборатории НИИ ТНУ. Образцы для спектральных исследований готовились согласно [5,с.7] в виде спрессованных таблеток, состоящих из смеси растений и порошка КВг в отношении 6 мг/ 600 мг.

Спектры ЭПР образцов снимали на радиоспектрометре РЭ-1306. Интенсивность сигнала образца сравнивалась с интенсивностью сигнала эталонной навески двухвалентного Mn^{+2} в окиси магния MgO по количеству свободных радикалов, далее относительно оценивали количество активных радикалов. Согласно экспериментальных результатов [7,с.12], по мере роста влияние техногенных факторов количества активных радикалов и гидроксильных групп изменяется.

В табл. 1 приведено количество активных радикалов в зависимости влияния на них радионуклидов. Количество радионуклидов определяли гамма-радиометрическим методом. Измерения проводились с помощью гамма-спектрометра производства фирмы «Канберра» (США) согласно методике [3,с.4].

Таблица 1. Количество активных радикалов в листьях каперса колючего от концентрации радионуклидов

Радионуклиды	Pb-214	Bi-214	Ac-228	Tl-208	K-40	$C \cdot 10^{15}$,
Образцы	351.93 кэВ	609.31 кэВ	911.2 кэВ	583.19 кэВ	1461 кэВ	спин/г
точка А	0	0	0	0	1066.00	1.75
точка В	151.98	172.06	162.71	130.77	9565.54	4.64

Примечание: С – количества активных радикалов.

Из табл.1 видно, что количество активных радикалов в листьях каперса колючего зависит от концентрации радионуклидов. Согласно табл. 1, по мере роста концентрации радионуклидов количество активных радикалов увеличивается.

Согласно работе [7,9], радионуклиды непосредственно влияют на количество гидроксильных групп, о чём свидетельствует изменение интенсивности. Относительное количество гидроксильных групп в листьях растений в точке А около 3980 от. ед. в точки В – 2750 относительная единица.

Согласно научной литературе [15] для определения взаимодействия активных радикалов и ОН-групп используется система уравнений Лотки-Вольтера, имеющая следующий вид:

$$\begin{aligned}\frac{dR}{dt} &= (x - rC)R \\ \frac{dC}{dt} &= (-y + rR)C\end{aligned}\quad (2)$$

где R – относительное количество гидроксильных групп; C – количество активных радикалов; t – предполагаемое время взаимодействия; x , y – коэффициенты, отражающие взаимодействие между активными радикалами и гидроксильными группами.

Предполагаем, что активные радикалы и гидроксильная группа находятся в системе, при которой влияние других факторов незначительно. Отсюда уравнение для изменения количества гидроксильных групп (без влияний радиации) выглядит следующим образом:

$$\frac{dR}{dt} = xR \quad (3)$$

где x – коэффициент образования гидроксильных групп, R – величина нарастания гидроксильных групп, $\frac{dR}{dt}$ – скорость роста образований гидроксильных групп.

Когда гидроксильных групп образуется немного, то, естественно, они слабо взаимодействуют с активными радикалами. В результате чего уравнение количества активных радикалов принимает следующий вид:

$$\frac{dC}{dt} = -yC \quad (4)$$

где y – коэффициент уменьшений количества активных радикалов, C – величина нарастания активных радикалов, $\frac{dC}{dt}$ – скорость роста активных радикалов.

Из табл. 1 видно, что количество активных радикалов прямо пропорционально концентрации радионуклидов. Отсюда, взаимодействие ОН-групп и активных радикалов пропорционально величине RC , активные радикалы реагируют на количество ОН-групп с коэффициентом r . Очевидно, с учетом этих процессов и уравнений (3, 4) система уравнений принимает следующий вид:

$$\begin{aligned}\frac{dR}{dt} &= xR - rRC \\ \frac{dC}{dt} &= -yC + rRC\end{aligned}\quad (5)$$

Эта система находится в равновесных состояниях, когда количество гидроксильных групп и активных радикалов мало изменяется, можно полагать, что они остаются постоянными. Для решения уравнений этой системы можно применять математическую программу Mathcad.

Предположим, что начальное количество гидроксильных групп и активных радикалов равно $R=2$ и $C=6$, гидроксильная группа увеличивается с коэффициентом $x=1$, когда радионуклиды не находятся в составе растительных соединений, в этом случае активные радикалы уменьшаются с коэффициентом $y=1$. Зависимость количества активных радикалов и образований гидроксильных групп от времени, определяется системой (5). Эти данные вводим в программу Mathcad следующим образом:

$$F(t, R) = \begin{pmatrix} xR - rRC \\ -yC + rRC \end{pmatrix} \quad (6)$$

С помощью уравнений (6) можно исследовать временные взаимодействия гидроксильных групп и активных радикалов. Используя уравнения (6) и программу Mathcad [16], можно найти график взаимодействия параметров:

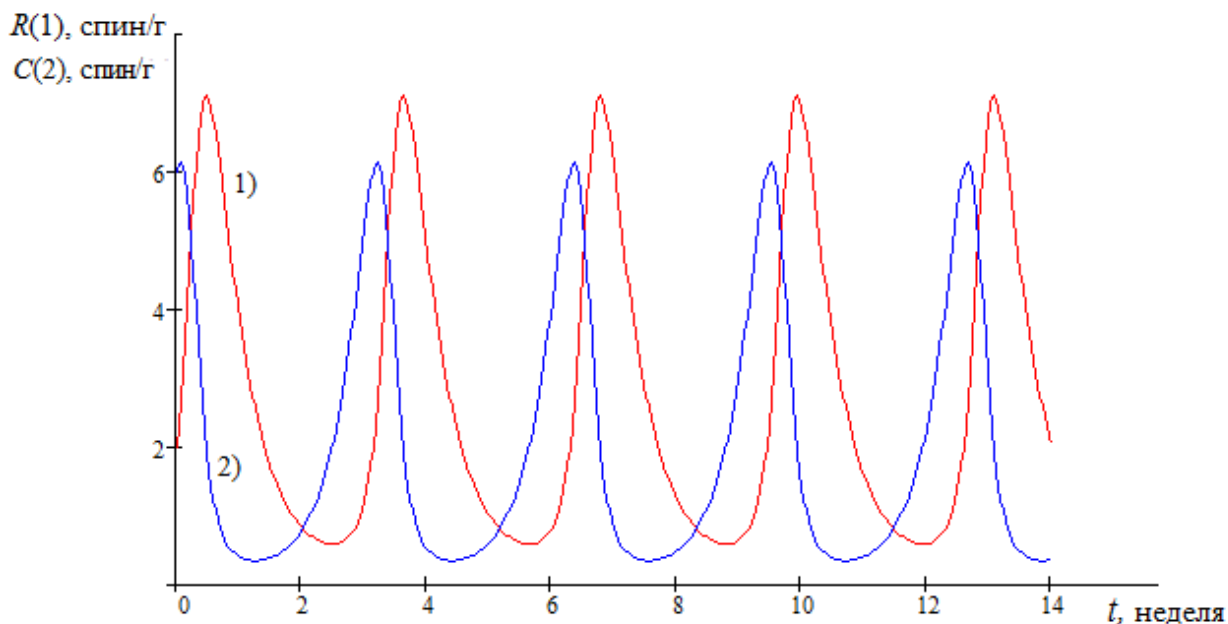


Рис.1. Временная зависимость количества активных радикалов (C) и гидроксильных групп (R)

На рис. 1 приведена зависимость количества активных радикалов и *ОН*-групп. Кривая 1 обозначает количество гидроксильных групп, кривая 2 - количество активных радикалов в зависимости от времени. Как видно, когда количество *ОН*-групп приближается к минимуму, то количество активных радикалов достигает максимального значения и наоборот. Этот процесс будет повторяться вышеупомянутым способом, как показано на графике.

Таким образом, на основании экспериментальных и теоретических расчётов можно заключить, что концентрация радионуклидов влияет на количество гидроксильных и стабильных радикалов в листьях каперса колючего, т.е. по мере роста количества активных радикалов уменьшается количество гидроксильных групп или наоборот. Эти изменения подобны тому, как происходит колебание гармонического осциллятора. Если баланс стабилизируется и количество гидроксильных групп и активных радикалов остаётся постоянным, то состояние равновесия нарушается и, возможно, приведёт к полному разрушению баланса активных радикалов и *ОН*-групп. Очевидно, разрушения этого баланса приводят к разрыхлению структуры и свойств макромолекул растений.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Абдуллаев, С.Ф. Динамика распределения тяжелых металлов и радиоактивных изотопов в образцах почвы и пылевого аэрозоля юга Таджикистана/С.Ф.Абдуллаев, В.А.Маслов, Б.И.Назаров// Оптика атмосферы и океана.- 2014. - Т. 27.- № 03. - С. 207–214.
2. Абдуллаев, С.Ф. Изотопный состав почв Таджикистана// С.Ф.Абдуллаев, В.А.Маслов, Б.И.Назаров//Ученые записки ХГУ им. академика Б. Гафурова. Естественные и эконом. науки. – Худжанд.- 2017.- №2 (41).- С. 60-65.
3. Беретта, Э.Результаты глобальной устойчивости обобщенной системы Лотки-Вольтерра с распределенными запаздываниями/Э.Беретта, В.Капассо, Ф.Ринальди//математическая биология, 1988.- Т.- 26. №6. С. 661–688
4. Берков, Н.А.Математический практикум с применением пакета Mathcad/ Н.А.Берков, Н.Н.Елисеева.- М: МГИУ, 2006.-135 с.
5. Гераськин, С.А. Хроническое радиационное воздействие на популяции растений/С.А. Гераськин// Тезисы докладов VI-съезда по радиационным исследованиям (радиобиология, радиоэкология, радиационная безопасность). Москва. - 2010. - Т. 2. - С. 12.
6. ГОСТ 31672-2012 Продукты пищевые. Метод электронного парамагнитного резонанса для выявления радиационно-обработанных продуктов, содержащих целлюлозу. М.: Стандарт информ- 2014.
7. Ильяшенко, Н.В. Использование метода Фурье ИК-спектроскопии для изучения изменений химического состава (*Potentilla erecta*L.) Raesch под действием антропогенных факторов/

- Н.В.Ильяшенко, С.М.Дементьева, С.Д.Хижняк, П.М.Пахомов, В.Д.Ильяшенко//Вестник Тверского государственного университета. Серия Биология и экология. - 2009. - Выпуск 13.- С. 211–220.
8. Кузин, А.И. Стимулирующие действие ионизирующего излучения на биологические процессы/А.И.Кузин.-Москва: Атомиздат.- 1977. -183 с.
 9. Лихтенштейн,Г.И. Метод спиновых меток в молекулярной биологии/Г.И.Лихтенштейн.-М.: Наука, 1974. - 256 с.
 - 10.Недорезов, Л.В.Непрерывно-дискретные модели динамики изолированной популяции и двух конкурирующих видов. Математические структуры и моделирование/Л.В.Недорезов, И.Н.Назаров.-Омск: Омский гос. ун-т, 1998. Вып. 2. С. 77–91.
 - 11.Умаров, Н.Н. Применение модели Лотки-Вольтера для изучения взаимодействий двух параметров в биоматериале/Н.Н.Умаров//Учёные записки Худжандского государственного университета. Серия естественные и экономические науки, 2023. - №2 (65). - С.42–48.
 - 12.Умаров, Н. Исследование молекулярных свойств листьев донника лекарственного (*Melilotus officinalis* (L.) Pall.) методом ИК – спектроскопии/ Н.Умаров, С.Ш. Давлатмамадова, Т. Шукуров, А. Усмонов,Р.Марупов//ДАН РТ.- 2014.-Т.57.-№ 1.- С. 32 – 36.
 - 13.Умаров, Н.Н.Исследования влияния дозы радиационного фона на спектральные характеристики лекарственного донника (*Melilotus officinalis* L.) методом ИК- и ЭПР-спектроскопии/Н.Умаров, С.Ш.Давлатмамадова, Т.Шукуров, А.Усмонов, Р.Марупов// Ученые записки ХГУ 2016.- №4 (39). - С. 52–60.
 - 14.Фельдман, В.И. ЭПР и ИК-спектроскопия свободных радикалов и ион-радикалов, образующихся под действием излучения в твердых системах. Применение ЭПР в радиационных исследованиях. Springer International Publishing, 2014.- PP.151-187.
 - 15.Юсупов, И.Х.Исследование радиационной зависимости молекулярно-динамических и физико-механических характеристик лекарственного репейника методом спиновых меток/ И.Х.Юсупов, Н.Н.Умаров, Р.Марупов//Вестник ТНУ. Серия естественных наук. Душанбе, 2017. - №4.- С.117-121.
 - 16.Юсупов, И.Х.Исследование молекулярной структуры растения донник лекарственный (*Melilotus officinalis*L.) методом спиновых меток/И.Х.Юсупов, А.Д.Бахдавлатов, Т.Алидодов // Доклады АН Республики Таджикистан, 2015. Т. 58. №4. С. 309–315.

REFERENCES:

1. Abdullaev S.F., Maslov V.A., Nazarov B.I. et al. Dynamics of the distribution of heavy metals and radioactive isotopes in soil and dust aerosol samples in the south of Tajikistan // Atmosphere and Ocean Optics. - 2014. - Vol. 27.- № 03.- PP. 207–214.
2. Abdullaev S.F., Maslov V.A., Nazarov B.I. et al. Isotopic composition of soils in Tajikistan // Scientific notes KSU named after acad. B. Gafurov. Natural and economy. science. - Khujand. - 2017.- № 2 (41). - PP. 60-65.
3. Beretta E., Capasso V., Rinaldi F. Global stability results for a generalized Lotka—Volterra system with distributed delays // *J. Math. Biol.* 1988. V. 26. №6. P. 661–688.
4. Berkov N.A., Eliseeva N.N. Mathematical workshop using the Mathcad package. M: MGIU, 2006. 135 p.
5. Geraskin S.A. Chronic radiation impact on plant populations // Abstracts of the VI Congress on radiation research (radiobiology, radioecology, radiation safety). Moscow. - 2010.-Vol. 2.- PP. 12.
6. GOST 31672-2012 Food products. Electron paramagnetic resonance method for identifying radiation-treated products containing cellulose. M.: Standard information - 2014.
7. Ilyashenko N.V., Dementieva S.M., Khizhnyak S.D., Pakhomov P.M., Ilyashenko V.D. Using the Fourier method - IR spectroscopy to study changes in the chemical composition of *Potentilla erecta* (L.) Raeusch under the influence of anthropogenic factors // Bulletin of TvSU. Series Biology and Ecology. - 2009.- Vol. 13.- PP. 211-220.
8. Kuzin, A.I. Stimulating effect of ionizing radiation on biological processes. Moscow: Atomizdat.- 1977.183 p.
9. Lichtenstein G.I. Spin label method in molecular biology. M.: Nauka, 1974. - 256 p.
- 10.Nedorozov L.V., Nazarov I.N. Continuous-discrete models of the dynamics of an isolated population and two competing species. Mathematical structures and modeling. Omsk: Omsk State. un-t, 1998. Issue. 2. P. 77–91.

11. Umarov N.N. Application of the Lotka-Wolter model to study the interactions of two parameters in a biomaterial. Scientific notes of Khujand State University. Series of natural and economic sciences, 2023. - № 2 (65). - P.42–48.
12. Umarov N., Davlatmamadova S. Sh., Shukurov T., Usmonov A, Marupov R. Investigation of the molecular properties of leaves of *Melilotus officinalis* (*Melelotus officinalis* (L.) Pall.), By IR spectroscopy // DAN RT.- 2014.-T.57.- № 1.- PP. 32-36.
13. Umarov N.N., Shukurov T., Yusupov I. Kh., Marupov R. Investigation of the effect of the dose of radiation background on the spectral characteristics of the medicinal sweet clover (*Melilotus officinalis* L.) by IR and EPR spectroscopy // Scientific notes KSU named after acad. B. Gafurov. Natural and economy. science. Khujand.-2016.-№ 4 (39).- P. 52-60.
14. Feldman V.I. EPR and IR spectroscopy of free radicals and radical ions produced by radiation in solid systems. Applications of EPR in radiation research. Springer International Publishing, 2014.- PP.151-187.
15. Yusupov I.Kh., Umarov N.N., Marupov R. Study of the radiation dependence of the molecular dynamic and physical-mechanical characteristics of medicinal burdock using the spin label method. TNU Bulletin. Natural Sciences Series. Dushanbe, 2017. - №4. - P. 117-121.
16. Yusupov I.Kh., Bakhdavlatov A.D., Aldidodov T.M. et al. Umarov N., Marupov R. Investigation of the molecular structure of the plant clover medicinal (*Melilotus officinalis* L.) by the method of spin labels // DAN RT.- 2015.- V. 58.- № 4.- PP. 309-315.