

* *
*

УДК 53.01

DOI: 10.17223/00213411/63/11/81

С.С. ДЖИМАК^{1,2}, Г.Ф. КОПЫТОВ¹, Е.Н. ТУМАЕВ¹, В.А. ИСАЕВ¹, А.В. МОИСЕЕВ³,
В.В. МАЛЫШКО^{2,4}, А.А. ЕЛКИНА^{1,2}, М.Г. БАРЫШЕВ^{1,2}**ВЛИЯНИЕ НА ЭНЕРГИЮ КОВАЛЕНТНОЙ СВЯЗИ ИЗОТОПНОГО СОСТАВА
ФОРМИРУЮЩИХ ЕЕ ЯДЕР ***

Рассматривается объяснение физического механизма фракционирования изотопов, связанного с преобладанием среди нуклонов определенного количества нейтронов и объясняющего неравновесное накопление определенных форм стабильных изотопов биогенных элементов в гетерогенных системах. Причинами обнаруженного нейтронного эффекта могут являться: взаимодействие магнитных моментов атомных ядер и валентных электронов, приводящее к изменению расстояния между ними, в том числе влияние измененного расстояния между атомами на энергию ковалентной связи между парами атомов.

Ключевые слова: нейтрон, электрон, квант, ускорение биохимических реакций.

Известно, что возникающие колебания концентраций стабильных изотопов биогенных элементов с различным количеством нейтронов являются основой для возникновения термодинамических, кинетических и туннельных изотопных эффектов [1–3], сопровождающихся замедлением или ускорением химических процессов, а также изменением функциональной активности биологически активных веществ [4–9]. При этом даже незначительное колебание изотопных соотношений в ряде клеточных структур характеризуется достоверной модификацией физико-химических взаимодействий на различных уровнях организации гетерогенных систем, что ведет к изменению в работе их протективных факторов [10–15].

Цель настоящего исследования – описание ключевых механизмов возникновения изотопных эффектов на основании подхода, позволяющего получить более полное представление о последствиях накопления определенных фракций стабильных изотопов.

В результате сравнительного анализа ряда данных экспериментальных исследований была выявлена определенная закономерность (BADz-эффект [2]), характеризующая возникновение «изотопного шока» при образовании связей между атомами с нечетным количеством нейтронов или при наличии отдельного химического элемента, у которого наблюдается преобладание нейтронов над протонами, описываемое следующим уравнением: $n - p = 2k + 1$, где $k \in \mathbb{Z}$, n – нейтрон, p – протон, которое требует физического обоснования.

Для описания влияния изотопного состава молекул на скорость биохимических реакций нами выдвигается гипотеза, что стимулирующее либо подавляющее их влияние связано с деформацией химической связи, вызванное изменением изотопного состава и связанным с этой деформацией изменением энергии валентной связи. Изменение энергии химической связи обусловлено несколькими факторами [2, 16, 17], представленными ниже. С этой целью рассмотрим два атома, связанные ковалентной связью, расположенные на равновесном расстоянии a . Локализованное состояние электрона в атомах имеет волновые функции с экспоненциальной асимптотикой в виде затухающей экспоненты. Следовательно, в месте расположения электронов потенциал, создаваемый атомными остовами, расположенными на концах связи, можно представить в виде суперпозиции кулоновских потенциалов атомных остовов, т.е. ядер и сферически симметричных заполненных внутренних электронных оболочек, и экспоненциально спадающих потенциалов, обусловленных асимптотиками волновых функций внешних электронов:

$$V(r) = \frac{Ze^2}{r} + e^2 \frac{\exp(-\kappa r)}{r},$$

где Z – эффективный заряд атомного остова; e – энергия электрона; r – расстояние от электрона до ядра; κ – величина, обратная радиусу атома. В месте локализации валентных электронов в выше-

* Работа выполнена при финансовой поддержке госзадания ЮНЦ РАН (№ АААА-А19-119040390083-6) и РФФИ (проект № 20-34-90014).

приведенной формуле можно пренебречь вторым слагаемым и считать, что первый атом создает в месте расположения валентных электронов потенциал $V_1(r) = (Z_1 e^2)/r$, а второй атом – потенциал $V_2(r) = (Z_2 e^2)/(a-r)$. Следовательно, потенциал в месте расположения валентных электронов можно выбрать в виде

$$U(r) = (Z_1 e^2)/r + (Z_2 e^2)/(a-r), \quad 0 \leq r \leq a, \quad (1)$$

трехмерная химическая связь заменена на одномерную. Мы считаем, что такая замена вполне допустима, поскольку потенциал (1) является эмпирическим. В вышеприведенных формулах Z_1, Z_2 – безразмерные константы заряда электрона e , имеющие смысл зарядов атомных остовов в единицах; $r, a-r$ – расстояния от валентного электрона до первого и второго атомных остовов.

Валентные электроны располагаются в таком месте, где потенциальная энергия их взаимодействия с атомными остовами минимальна. Расстояние, на котором находится валентный электрон от атома номер 1, равно

$$r_0 = a \frac{\sqrt{Z_1}}{\sqrt{Z_1} + \sqrt{Z_2}}. \quad (2)$$

При этом энергия валентного электрона в равновесном положении равна

$$U_{\min} = \frac{e^2}{a} (\sqrt{Z_1} + \sqrt{Z_2})^2.$$

Равновесное положение электрона определяет химическую активность соединения, которую можно оценить, вычислив энергию взаимодействия электрона с атомными остовами. Химическая активность валентной связи определяется не только взаимным расположением атомов 1 и 2, но и взаимодействием атомных остовов с валентным электроном. Чем ниже энергия, тем менее активна химическая связь, поэтому тем больше требуется внешней энергии для активации ковалентной химической связи [18, 19]. На расстояние между атомами и энергию химической связи влияет несколько факторов. Причем в отличие от кулоновского взаимодействия и магнитных моментов валентных электронов, которые, вероятно, слабо зависят от изотопного состава химических элементов (и в настоящей статье не рассматриваются), взаимодействие магнитных моментов валентных электронов с магнитными моментами ядер атомов, взаимодействие магнитных моментов ядер атомов, приводящее к изменению расстояния между ними, эффект влияния размеров ядра на энергию валентного электрона и тепловые колебания атомов могут оказывать существенное влияние и более подробно представлены ниже.

Рассмотрим вначале фактор взаимодействия магнитных моментов валентных электронов с магнитными моментами ядер атомов. Энергия взаимодействия с магнитным моментом ядра первого атома равна

$$U(r) = \frac{\mu_1 \mu_2}{r^3} - \frac{3(\mu_1 r)(\mu_2 r)}{r^5}. \quad (3)$$

Здесь

$$\mu_1 r = \mu_1 r \cos \theta_1, \quad \mu_2 r = \mu_2 r \cos \theta_2, \quad 0 \leq \theta_1, \quad \theta_2 \leq \pi.$$

Вследствие тепловых колебаний углы θ_1, θ_2 между радиус-вектором r , соединяющим атомы 1 и 2, и магнитными моментами $\bar{\mu}_1$ и $\bar{\mu}_2$ меняются случайным образом с нулевым средним значением. Поэтому усреднение выражения (3) по тепловым колебаниям атомов приводит к обращению в нуль второго слагаемого. Усредненное значение $\bar{U}_1(r) = \frac{\mu_1 \mu_2}{r^3}$ можно записать в виде

$$\bar{U}_1(r) = \frac{\zeta_1 e^2 a^2}{r^3}, \quad \text{где } \zeta_1 - \text{эмпирическая величина, которая для диполь-дипольного взаимодействия}$$

играет ту же роль, что и заряд Z_1 атомного остова первого атома.

Подобное взаимодействие магнитного момента валентного электрона со вторым атомом приводит к дополнительному вкладу в его энергию, которая равна $\bar{U}_2(r) = \frac{e^2 \zeta_2 a^2}{(a-r)^3}$, где ζ_2 – величина

на, аналогичная ζ_1 для второго атома. Множитель a^2 в обоих выражениях введен из соображений размерности. Указанные взаимодействия приводят к появлению дополнительного вклада в энергию взаимодействия валентного электрона с первым и вторым атомами

$$U(r) = \frac{Z_1 e^2}{r} + \frac{Z_2 e^2}{a-r} + \frac{\zeta_1 e^2 a^2}{r^3} + \frac{\zeta_2 e^2 a^2}{(a-r)^3}. \quad (4)$$

Два последних слагаемых меньше первых, так как они описывают взаимодействие магнитного типа, которое нерелятивистски мало по сравнению с взаимодействием электрического типа, т.е. первым и вторым слагаемым. Это позволяет нам разделить потенциальную энергию взаимодействия (4) на два слагаемых:

– доминирующую часть

$$U_0(r) = \frac{Z_1 e^2}{r} + \frac{Z_2 e^2}{a-r}, \quad (5)$$

– малую поправку

$$\Delta U(r) = \frac{e^2 \zeta_1 a^2}{r^3} + \frac{e^2 \zeta_2 a^2}{(a-r)^3}, \quad (6)$$

откуда

$$U(r) = U_0(r) + \Delta U(r). \quad (7)$$

Наличие дополнительного слагаемого $\Delta U(r)$ потенциального взаимодействия изменяет как расположение валентного электрона, так и его энергию.

Новое положение электрона, обусловленное его магнитным взаимодействием с ядрами, находится из условия минимума U .

Выполняя дифференцирование выражения (7), получаем

$$\frac{Z_1 e^2}{r^2} - \frac{Z_2 e^2}{(a-r)^2} + \frac{e^2 \zeta_1 a^2}{r^4} 3 - \frac{e^2 \zeta_2 a^2}{(a-r)^4} 3 = 0. \quad (8)$$

Поскольку выше было установлено, что энергия взаимодействия магнитных диполей электрона с атомными остовами меньше их кулоновского взаимодействия, следует, что учет взаимодействия магнитных моментов приведет к незначительному смещению положения электрона. Таким образом, искать решение уравнения (8) следует в виде $r = r_0 + \Delta r$, $\Delta r \ll r_0$, где Δr – малая поправка к r_0 , возникающая вследствие смещения электрона из положения равновесия, из-за его взаимодействия с магнитными моментами ядер. Подставляя $r = r_0 + \Delta r$ в (8), получаем

$$\frac{Z_1}{(r_0 + \Delta r)^2} - \frac{Z_2}{(a - r_0 - \Delta r)^2} + \frac{3\zeta_1 a^2}{(r_0 + \Delta r)^4} - \frac{3\zeta_2 a^2}{(a - r_0 - \Delta r)^4} = 0. \quad (9)$$

Для нахождения смещения Δr выполним разложение по малому параметру $\Delta r / r_0$ в каждом из четырех слагаемых. Тогда смещение электрона из положения равновесия под влиянием магнитных моментов ядер изотопов равно

$$\Delta r = \frac{\frac{3\zeta_2 a^2}{(a - r_0)^4} - \frac{3\zeta_1 a^2}{r_0^4}}{\frac{2Z_2}{(a - r)^3} - \frac{2Z_1}{r_0^3} - \frac{12\zeta_1 a^2}{r_0^5} + \frac{12\zeta_2 a^2}{(a - r_0)^5}}. \quad (10)$$

Рассчитаем изменение энергии валентного электрона, обусловленное его взаимодействием с магнитными моментами ядер:

$$\Delta E = U(r_0 + \Delta r) - U_0(r_0).$$

Поскольку отношение $\Delta r / r_0$ и поправка к потенциалу ΔU малы, то при вычислении поправки к энергии можно заменить $\Delta U(r_0 + \Delta r)$ на $U(r_0)$.

Далее разность потенциалов $U_0(r_0 + \Delta r) - U_0(r_0)$ можно разложить по указанному выше малому параметру.

Таким образом, выражение для поправки к энергии может быть записано в следующей форме:

$$\Delta E = U(r_0 + \Delta r) - U_0(r_0) = U(r_0) + \frac{dU(r_0)}{dr} \Delta r - U_0(r_0) = \Delta U(r_0) + \frac{d\Delta U(r_0)}{dr} \Delta r. \quad (11)$$

В уравнении (11) первое слагаемое описывает смещение потенциальной энергии валентного электрона по вертикали (увеличение энергии), второе – по горизонтали вследствие смещения, что отражено на рис. 1.

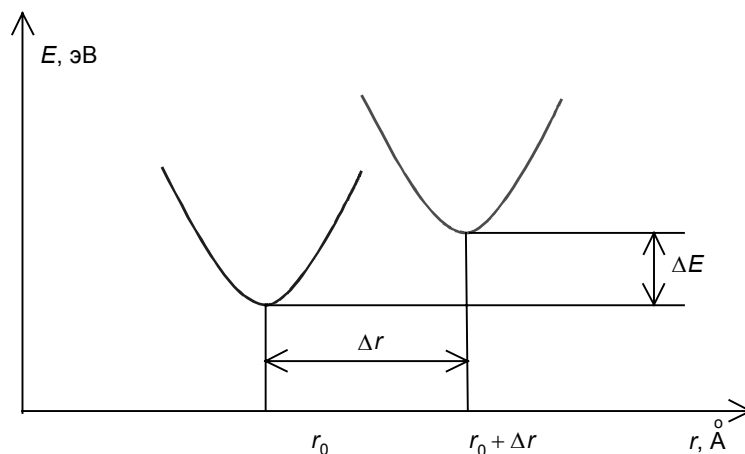


Рис. 1. Изменение энергии валентного электрона, обусловленное его взаимодействием с магнитными моментами ядер

Рассмотрим теперь взаимодействие магнитных моментов ядер атомов, которое приводит к уменьшению расстояния между атомами и к увеличению суммарного потенциала обоих взаимодействующих ядер в точке равновесного положения электрона, т.е. к активизации химической связи.

Поскольку для органических соединений характерна ковалентная связь, то в качестве модельного потенциала, описывающего взаимодействие атомов друг с другом, выбирается потенциал Леннарда-Джонса

$$U_{12} = U_0 \left[\left(\frac{a_0}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{a_0}{r} \right)^6 \right], \quad (12)$$

где U_{12} – потенциальная энергия взаимодействия атомов 1 и 2; U_0 и a_0 – параметры.

Равновесное положение атомов друг относительно друга определяется минимумом потенциальной энергии U_{12} . Приравняв производную $\frac{dU_{12}}{dr}$ к нулю

$$U_0 \left[12 \left(\frac{a_0}{r} \right)^{13} - 12 \left(\frac{a_0}{r} \right)^7 \right] = 0, \quad (13)$$

находим, что параметр a_0 имеет смысл равновесного расстояния между атомами.

Величина минимальной потенциальной энергии взаимодействия $U_{12\min} = -U_0$, что позволяет трактовать величину U_0 как энергию связи атомов 1 и 2.

Учтем, что при замене атомов их изотопами с ненулевыми значениями магнитных моментов ядер возникает дополнительная энергия взаимодействия, равная

$$\Delta U_{12}(r) = \frac{ba_0^3}{r^3},$$

отсюда

$$U_{12}(r) = U_0 \left[\left(\frac{a_0}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{a_0}{r} \right)^6 \right] + \frac{ba_0^3}{r^3}, \quad (14)$$

где a_0 – первоначальное расстояние; b – параметр, имеющий размерность энергии, который характеризует величину диполь-дипольного взаимодействия ядер.

Мы считаем, что магнитные моменты атомов 1 и 2 вследствие теплового движения свободно вращаются вокруг оси, соединяющей атомы 1 и 2, и образуют с этой осью углы θ_1 и θ_2 , меняющиеся в интервале от 0 до 2π , поэтому среднее значение косинусов этих углов равно нулю.

Новое расстояние между атомами 1 и 2 определяется, как и раньше, через минимум потенциальной энергии и при дальнейшем отсутствии a_0 из (14) получим

$$\frac{dU}{dr} = -12 \frac{U_0}{a_0} \left[\left(\frac{a_0}{r} \right)^{13} - \left(\frac{a_0}{r} \right)^7 \right] - 3 \frac{ba_0^3}{r^4} = 0.$$

Данное уравнение можно переписать так:

$$-4 \frac{U_0}{a_0} \left[\left(\frac{a_0}{r} \right)^{13} - \left(\frac{a_0}{r} \right)^7 \right] - 3 \frac{ba_0^3}{r^4} = 0. \quad (15)$$

Ищем решение последнего уравнения в виде $r = a_0 + \Delta r$, где $\Delta r \ll a_0$, преобразуем два первых слагаемых в (15):

$$\left(\frac{a_0}{r} \right)^{13} - \left(\frac{a_0}{r} \right)^7 = \left(\frac{a_0}{a_0 + \Delta r} \right)^{13} - \left(\frac{a_0}{a_0 + \Delta r} \right)^7 \approx \left(1 - 13 \frac{\Delta r}{a_0} \right) - 1 + 7 \frac{\Delta r}{a_0} = -6 \frac{\Delta r}{a_0}. \quad (16)$$

Для оставшегося слагаемого выражение получаем аналогично.

Уравнение для нового расстояния между атомами 1 и 2 можно записать как

$$-4 \frac{U_0}{a_0} \left(-6 \frac{\Delta r}{a_0} \right) - \frac{3b}{a_0} \left(1 - 4 \frac{\Delta r}{a_0} \right) = 0$$

или

$$24 \frac{U_0}{a_0^2} \Delta r + 12 \frac{b}{a_0^2} \Delta r = \frac{3b}{a_0}. \quad (17)$$

Следует упомянуть, что поскольку взаимодействие магнитных моментов атомов 1 и 2 имеет характер притяжения, то постоянная $b < 0$. Следовательно, дополнительное взаимодействие между атомами приводит к уменьшению расстояния между ними. В этом случае находим искомую поправку к расстоянию между атомами Δr :

$$\Delta r = \frac{b}{a_0} \frac{1}{8 \frac{U_0}{a_0^2} + 4 \frac{b}{a_0^2}}, \quad \Delta r = a_0 \frac{b}{8U_0 + 4b} \approx a_0 \frac{b}{8U_0}. \quad (18)$$

Рассчитаем изменение энергии связи между атомами, обусловленное изменением расстояния между ними:

$$\Delta E = U(a_0 + \Delta r) - U_0(a_0) = U_0(a_0 + \Delta r) + \Delta U(a_0 + \Delta r) - U_0(a_0).$$

Последнюю формулу можно записать в виде

$$\Delta E = U_0(a_0) + \Delta r \left(\frac{dU_0}{dr} \right)_{a_0} + \Delta U(a_0) + \Delta r \left(\frac{d\Delta U}{dr} \right)_{a_0} - U_0(a_0) = \Delta U(a_0). \quad (19)$$

При выводе формулы (19) второе слагаемое обращается в нуль, поскольку a_0 – это равновесное расстояние между атомами, предпоследнее слагаемое имеет порядок Δr^2 и мало по сравнению с остальными слагаемыми.

Тогда

$$\Delta E = -\frac{ba_0^3}{a_0^3} = -b, \quad b < 0, \quad \Delta r < 0.$$

Для вычисления изменения энергии валентного электрона используем следующую формулу:

$$\Delta E_e = \frac{Z_1 e^2}{r} + \frac{Z_2 e^2}{a-r}. \quad (20)$$

В последней формуле r определяет положение валентного электрона (ранее оно определяло расстояние между атомами); a – это новое равновесное расстояние между атомами. Чтобы избежать путаницы, обозначим ранее рассчитанное изменение расстояния между атомами через Δa , т.е. $a = a_0 - \Delta a$.

Тогда изменение потенциальной энергии электрона равно

$$\Delta E_e = \frac{Z_1 e^2}{r} + \frac{Z_2 e^2}{a-r} - \frac{Z_1 e^2}{r} - \frac{Z_2 e^2}{a_0-r} = \frac{Z_2 e^2}{a-r} - \frac{Z_2 e^2}{a_0-r}. \quad (21)$$

Преобразуем первое слагаемое в этой формуле:

$$\frac{Z_1 e^2}{a_0 - \Delta a - r} = \frac{Z_2 e^2}{a_0 - r} \frac{1}{1 - \frac{\Delta a}{a_0 - r}} \approx \frac{Z_2 e^2}{a_0 - r} \left(1 + \frac{\Delta a}{a_0 - r} \right) = \frac{Z_2 e^2}{a_0 - r} + \frac{Z_2 e^2 \Delta a}{(a_0 - r)^2}. \quad (22)$$

Используя рассчитанное ранее найденное равновесное расстояние r , получаем окончательную формулу для расчета изменения энергии электрона вследствие изменения расстояния между атомами 1 и 2

$$\Delta E = \frac{Z_2 \Delta r}{(a_0 - r)^2}, \quad (23)$$

где Δr – смещение положения электрона вследствие изменения расстояния между атомами,

$$\Delta r = \Delta a \frac{\sqrt{Z_1}}{\sqrt{Z_1} + \sqrt{Z_2}}. \quad (24)$$

Рассмотрим эффект влияния размеров ядер на энергию валентного электрона. Механизм этого взаимодействия следующий: при добавлении нейтронов в ядро его размеры растут, а заряд остается прежним. Поскольку размеры ядра изменяются, то изменяется и область электростатического взаимодействия электрона с ядром. Для расчета поправки энергии электрона вследствие указанного эффекта используем квантово-механическую теорию возмущений.

Электростатический потенциал внутри заряженного ядра изотопа запишем так:

$$\varphi(r) = \begin{cases} \frac{3Ze}{2R} - \frac{Zer^2}{2R^3}, & r \leq R, \\ \frac{Ze}{r}, & r > R. \end{cases} \quad (25)$$

Здесь R – радиус ядра, при этом ядро принято для упрощения сферическим.

Потенциальная энергия взаимодействия валентного электрона с электростатическим полем ядра равна

$$U(r) = e\varphi(r).$$

При присоединении дополнительных нейтронов к ядру изменяется потенциал электростатического поля внутри ядра, при этом вне ядра потенциал не изменяется. Следовательно, для того чтобы подсчитать изменение энергии валентного электрона при увеличении размеров ядра, необходимо учитывать взаимодействие электронов с ядром только во время нахождения электрона в поле ядра.

Для расчета энергии взаимодействия электрона с ядром при его нахождении в поле ядра используем квантово-механическую теорию возмущений. Искомая энергия

$$E = \langle \psi | U(r) | \psi \rangle ,$$

где $\psi(r)$ – волновая функция валентного электрона.

Часть энергии электрона, находящегося в S -состоянии, обусловленная его пребыванием в поле ядра, равна

$$E = \int U(r) |\psi(r)|^2 d^3r .$$

Здесь $U(r) = \frac{3Ze^2}{2R} - \frac{Ze^2 r^2}{2R^3}$ и интегрирование производится в пределах поля ядра.

Выполняя интегрирование, получаем

$$E = \int_0^R \left(\frac{3Ze^2}{2R} - \frac{Ze^2 r^2}{2R^3} - \frac{Ze^2}{r} \right) \frac{1}{8\pi a_B^3} e^{-r/a_B} 4\pi r^2 dr .$$

Учитывая, что радиус орбиты электрона a_B намного больше радиуса ядра R , т.е. $R \ll a_B$, то последний интеграл можно оценить по теореме о среднем:

$$E = \frac{Ze^2}{4R} \left(\frac{R}{a_B} \right)^3 - \frac{Ze^2 R^2}{4a_B^3} - \frac{Ze^2}{6R} \left(\frac{R}{a_B} \right)^3 = -\frac{Ze^2}{6R} \left(\frac{R}{a_B} \right)^3 = -\frac{Ze^2 R^2}{6a_B^3} .$$

Приведенная формула дает тот вклад в энергию электрона, который обусловлен движением в поле ядра.

Влияние размеров ядра при изменении изотопного состава может быть получено из предыдущей формулы, если считать, что увеличение размеров ядра мало по сравнению с самим радиусом ядра $R = R_0 + \Delta R$ и $\Delta R \ll R_0$. Тогда изменение энергии при замене изотопа может быть описано формулой

$$\Delta E = E(r_0 + \Delta r) - E(r_0) = \frac{dE}{dR_0} \Delta R ,$$

$$\Delta E = -\frac{Ze^2 R_0}{3a_B^3} \Delta R , \quad (26)$$

что в целом подтверждает возможность реализации нейтронного эффекта (BADz-эффект [2]) за счет делокализации электронной плотности в ядрах тяжелых нерадиоактивных изотопов, даже при нулевом (а также другом целочисленном) значении спина ядра и отсутствии у него магнитного момента.

Рассмотрим также эффект, вызываемый изменением расстояния между атомами вследствие их тепловых колебаний. Предполагая, что имеет место закон равномерного распределения энергии по степеням свободы, из которого следует, что среднее значение полной энергии атома равно $3/2 kT$ и средняя потенциальная энергия колебания равна средней кинетической энергии (теорема Вириала), находим

$$\frac{m\omega^2 A^2}{2} = \frac{3kT}{2} , \quad (27)$$

где m – масса атома, которую приближенно можно считать массой ядра; A^2 – среднее значение квадрата амплитуды колебаний; k – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура.

Из последней формулы (27) находим, что средняя амплитуда колебаний равна

$$A = \frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{3kT}{m}} .$$

При изменении изотопного состава масса ядра приобретает добавку Δm , тогда увеличение массы приводит к уменьшению амплитуды колебаний на величину

$$\Delta A = \frac{\Delta m}{2m\omega} \sqrt{\frac{3kT}{m}}, \quad (28)$$

где m – масса легкого изотопа.

Считая, что это уменьшение колебания амплитуды приблизительно равно уменьшению расстояния между атомами, находим, что равновесное положение валентного электрона сдвигается на такую же величину в сторону, противоположную тяжелому изотопу.

Выше была получена формула (24) для равновесного положения электрона, находящегося между атомами, где Δr – смещение положения электрона вследствие изменения расстояния между атомами:

$$\Delta r = \Delta A \frac{\sqrt{Z_1}}{\sqrt{Z_1} + \sqrt{Z_2}}.$$

Здесь ΔA приводится формулой (28).

Увеличение энергии вследствие изменения расстояния было рассчитано ранее в формуле (23). Из приведенных расчетов следует, что увеличение энергии электрона пропорционально \sqrt{T} , т.е. BADz-эффект оказывается температурно-зависимым в отличие от ранее рассчитанных эффектов взаимодействия магнитных моментов, которые от температуры не зависели.

Заключение

Таким образом, изменение интенсивности изотопного воздействия на естественные гетерогенные системы, подтвержденное различными работами [1, 3, 7, 20], происходит не только в зависимости от концентрации отдельных нерадиоактивных изотопов (^{25}Mg , ^{29}Si , ^{67}Zn), но также от их способности формировать определенные пары (например, ^{17}O – ^2H , ^{18}O – ^1H , ^{13}C – ^{18}O , ^{12}C – ^{15}N , ^{13}C – ^2H , ^{15}N – ^{18}O). Через химические связи этих пар реализуется, помимо термодинамических и кинетических изотопных эффектов, нейтронное туннелирование, приводящее к появлению парадоксально-го изотопного эффекта, обусловленного, вероятно, нейтронным BADz-эффектом, что в совокупности с термодинамической и кинетической составляющими изотопного влияния на гетерогенную систему обеспечивает существенные колебания ее функциональной активности при возникновении фракционирования ряда стабильных изотопов. Поэтому косвенным подтверждением реализации нейтронного эффекта могут служить имеющиеся факты селективного накопления отдельных изотопов и их комбинаций в гетерогенных системах по сравнению с окружающей средой, что может быть обусловлено их взаимодействием между собой.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Henkel S., Ertelt M., and Sander W. // Chemistry. – 2014. – V. 20(25). – P. 7585–7588. DOI: 10.1002/chem.201402064.
2. Howie R.T., Scheler T., Guillaume C., and Gregoryanz E. // Phys. Rev. B. – 2012. – V. 86. – P. 214104.
3. Campos L.M., Warriar M.V., Peterfy K., et al. // J. Am. Chem. Soc. – 2005. – V. 127(29). – P. 10178–10179. <https://doi.org/10.1021/ja052487n>.
4. Letuta U.G. and Berdinskiy V.L. // Bioelectromagnetics. – 2017. – V. 38(8). – P. 581–591.
5. Basov A., Fedulova L., Vasilevskaya E., et al. // Molecules. – 2019. – V. 24(22). – P. 4101. DOI: 10.3390/molecules24224101.
6. Buchachenko A., Bukhvostov A., Ermakov K., et al. // Archiv. Biochem. Biophys. – 2019. – V. 667. – P. 30–35.
7. Ek C., Garbaras A., Yu Z., et al. // PLoS ONE. – 2019. – V. 14(5). – P. e0211304.
8. Karlson A.M.L., Reutgard M., Garbaras A., et al. // R. Soc. Open Sc. – 2018. – V. 5(2). – P. 171398.
9. Dzhimak S.S., Basov A.A., Elkina A.A., et al. // Jundishapur J. Natur. Pharmaceutical Products. – 2018. – V. 13(2). – P. e69557. DOI: 10.5812/jjnpp.69557.
10. Xie X. and Zubarev R.A. // Sci. Rep. – 2015. – V. 5. – P. 9215. DOI: 10.1038/srep09215.
11. Fedulova L.V., Basov A.A., Vasilevskaya E.R., et al. // Current Pharmaceutical Biotechnology. – 2019. – V. 20(3). – P. 245–253. DOI: 10.2174/1389201020666190222184814.
12. Zuev A.G., Rozanova O.L., Tsurikov S.M., et al. // Biology Bull. – 2019. – V. 46(5). – P. 457–465.
13. Basov A., Fedulova L., Baryshev M., et al. // Nutrients. – 2019. – V. 11(8). – P. 1903. DOI: 10.3390/nu11081903.
14. Letuta U.G. and Shailina D.M. // Dokl. Biochem. Biophys. – 2018. – V. 479(1). – P. 111–113.

15. Basov A.A., Kozin S.V., Bikov I.M., et al. // *Biology Bull.* – 2019. – V. 46(6). – P. 531–535. DOI: 10.1134/S1062359019060049.
16. Петриев И.С., Болотин С.Н., Фролов В.Ю. и др. // *Изв. вузов. Физика.* – 2018. – Т. 61. – № 10. – С. 131–135.
17. Petriev I.S., Bolotin S.N., Frolov V.Y., et al. // *Bull. Russ. Acad. Sci.: Physics.* – 2018. – V. 82(7). – P. 807–810.
18. Olgun A. // *Theor. Biol. Med. Modelling.* – 2007. – V. 4. – P. 9. DOI: 10.1186/1742-4682-4-9.
19. Dzhimak S.S., Drobotenko M.I., Basov A.A., et al. // *Dokl. Biochem. Biophys.* – 2018. – V. 483. – P. 359–362. DOI: 10.1134/S1607672918060169
20. Zubarev R.A. // *Genomics Proteomics Bioinformatics.* – 2011. – V. 9(1–2). – P. 15–20.

Поступила в редакцию 17.01.2020.

¹ Кубанский государственный университет, г. Краснодар, Россия

² Южный научный центр РАН, г. Ростов-на-Дону, Россия

³ Кубанский государственный аграрный университет, г. Краснодар, Россия

⁴ Кубанский государственный медицинский университет, г. Краснодар, Россия

Джимак Степан Сергеевич, к.б.н., доцент каф. радиофизики и нанотехнологий КубГУ, ст. науч. сотр. лаб. проблем распределения стабильных изотопов в живых системах ЮНЦ РАН, e-mail: jimack@mail.ru;

Копытов Геннадий Филиппович, д.ф.-м.н., профессор, зав. каф. радиофизики и нанотехнологий КубГУ, e-mail: g137@mail.ru;

Тумаев Евгений Николаевич, д.ф.-м.н., профессор каф. теоретической физики и компьютерных технологий КубГУ, e-mail: tumayev@phys.kubsu.ru;

Исаев Владислав Андреевич, д.ф.-м.н., профессор, зав. каф. теоретической физики и компьютерных технологий КубГУ, e-mail: vlisaev.v@yandex.ru;

Монсеев Аркадий Викторович, науч. сотр. отдела науки КубГАУ, e-mail: moiseew_a@rambler.ru;

Малышко Вадим Владимирович, к.м.н., науч. сотр. лаб. проблем распределения стабильных изотопов в живых системах ЮНЦ РАН, ассистент каф. общей хирургии КубГМУ, e-mail: intro-2@rambler.ru;

Елкина Анна Анатольевна, аспирантка КубГУ, мл. науч. сотр. лаб. проблем распределения стабильных изотопов в живых системах ЮНЦ РАН, e-mail: 013194@mail.ru;

Барышев Михаил Геннадьевич, д.б.н., профессор каф. радиофизики и нанотехнологий КубГУ, зав. лаб. проблем распределения стабильных изотопов в живых системах ЮНЦ РАН, e-mail: science-pro@kubsu.ru.