

О ВОЗМОЖНОМ МЕХАНИЗМЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ МИКРОВОЛНОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА БИОЛОГИЧЕСКИЕ МАКРОМОЛЕКУЛЫ

© 2016 г. В.Н. Никифоров, А.В. Иванов*, Е.К. Иванова**,
К.П. Тамаров, Б.Л. Оксенгендлер**

*Физический факультет Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова,
Москва, Ленинские горы, 1/2;*

E-mail: nvn@phys.msu.ru

**Российский онкологический научный центр им. Н.Н. Блохина МЗ РФ, 115478, Москва, Каширское шоссе, 23;*

***Институт химии и физики полимеров АН РУз, 700128, Узбекистан, Ташкент, ул. А. Кадыри, 7б*

Поступила в редакцию 10.02.15 г.

После доработки 23.04.15 г.

Предложена модель, описывающая процесс диссоциации водородной связи в кластерах воды при облучении электромагнитным полем в микроволновом диапазоне. Модель применима и для случая разрыва ковалентной связи молекулы воды в кластере. Если поглощение энергии происходит на границе раздела фаз кластеров воды и полимера (например, ДНК, хитозан), то возможна и деструкция полимерной цепи.

Ключевые слова: кластеры воды, микроволновое излучение, математическое моделирование.

Эксперименты, предназначенные для выявления роли микроволнового эффекта, в отличие от термических эффектов при облучении микроорганизмов электромагнитными волнами сверхвысокочастотного (СВЧ) диапазона, классифицируются как температурно-контролируемые и «сухие» эксперименты. Если эксперименты первого типа не дали надежного результата [1,2], то в экспериментах второго типа была установлена важная роль воды в биоцидных эффектах микроволн [3]. Так как вода является первоначальной средой, с помощью которой микроволны превращаются в тепло, и ДНК имеет диэлектрическую дисперсию при намного более низких частотах, чем вода, то в работах [3,4] был сделан вывод о том, что вода играет роль посредника передачи тепловой энергии биологической системе.

Немного позднее в экспериментах по облучению вирусной ДНК в водной среде микроволнами был надежно установлен эффект фрагментации ДНК [5], который не наблюдался при внешнем нагреве до температур, достигнутых в экспериментах по облучению микроволнами. Естественно, эффекты деструкции химической связи трудно наблюдать при непосредственном облучении ДНК по энергетическим соображе-

ниям, так как фотон микроволн имеет энергию порядка 10^{-5} эВ, в то время как ковалентная связь требует для диссоциации энергию до 10 эВ, т.е. в миллион раз больше. Таким образом, из этих работ надежно следует, что вода играет важную роль в процессах деструкции ДНК. Действительно, экспериментальные исследования нетепловых эффектов влияния микроволнового излучения на воду выявили три эффекта: увеличение оптической плотности в ближней ультрафиолетовой области, смещение химического сдвига протона в сильное поле, увеличение времени спин-решеточной релаксации у облученной воды по сравнению с необлученной [6]. Все эти результаты свидетельствуют об изменениях кластерных структур воды, связанных с разрывом водородной связи. При этом моделирование 57 и 60 молекулярных водных кластеров показало, что спектр собственных частот этих образований находится в миллиметровом и субмиллиметровом диапазонах [7], что позволяет предположить резонансное поглощение микроволнового излучения данными образованиями.

В этой ситуации возможен своеобразный эффект: энергия электромагнитных колебаний поглощается на частотах собственных колебаний кластера, которые затем из-за сил типа ван-дер-ваальсовых переводят энергию возбуж-

Сокращение: СВЧ – сверхвысокочастотный.

дения на колебания водородных и химических связей. Таким образом, кластеры воды играют роль нанопосредников в тепловом действии микроволн.

МОДЕЛЬ

Нами предпринята попытка построения простейшей микроскопической модели деструкции химической связи при воздействии электромагнитного излучения относительно низких частот через водных нанопосредников.

Известно, что в кристаллах и в больших молекулах ангармонизм приводит к существованию в них высоковозбужденных локализованных колебательных состояний, столь отличных от состояний линейных систем [8]. Физика этих процессов сводится к тому, что при больших амплитудах возбуждения одного осциллятора частоты двух слабо взаимодействующих осцилляторов сильно различаются, так как собственная частота ангармонического осциллятора зависит от его амплитуды. Это приводит к нарушению резонанса и к малой вероятности передачи всей энергии от одного осциллятора к другому. Альтернативной системой существования таких локальных мод является система двух взаимодействующих ангармонических осцилляторов с разными частотами колебаний, один из которых резонансно взаимодействует с внешним периодическим полем. Такой системой в реальности может явиться вода [6,9]. Кластеры воды на границах раздела фаз (в системе «вода–биологический объект») выстраиваются в определенном порядке, при этом все кластеры колеблются с одинаковой частотой, приобретая одну общую частоту [6,7]. При комнатной температуре 18°C частота колебаний кластера равна $6,79 \cdot 10^9$ Гц [10]. При воздействии электромагнитного поля близкой частоты кластер возбуждается и амплитуда колебания становится большой. При слабом взаимодействии с нормальными колебаниями атомов в кластере такое состояние с локальной модой будет существовать достаточно долго. Вследствие этого время перехода энергии целиком без размена с одного осциллятора на другой возрастает. Математически такая ситуация описывается системой из двух уравнений:

$$\begin{cases} \ddot{X}_1 + \gamma_1 \dot{X}_1 + \Omega_0^2 X_1 + \lambda X_1^3 = \frac{\beta}{M} X_2 + \frac{F_0}{M} e^{i\omega t}, \\ \ddot{X}_2 + \gamma_2 \dot{X}_2 + \omega_0^2 X_2 + \lambda X_2^3 = \frac{\beta}{\mu} X_1. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь X_1 и X_2 – координаты первого и второго осцилляторов, Ω_0 – нулевая частота

первого осциллятора, ω_0 – нулевая частота второго осциллятора, ω – частота внешнего электромагнитного поля, λ и β – параметры, характеризующие соответственно ангармонизм и силу связи обоих осцилляторов M и μ – масса первого и второго осцилляторов соответственно, F_0 – амплитуда силы внешнего поля.

Учитывая, что $M \gg \mu$, и пренебрегая членом ангармоничности обоих осцилляторов, а также их затуханием, упростим задачу, моделируя систему двумя гармоническими осцилляторами:

$$\begin{cases} \ddot{X}_1 + \Omega_0^2 X_1 = \frac{F_0}{M} e^{i\omega t}, \\ \ddot{X}_2 + \omega_0^2 X_2 = \frac{\beta}{\mu} X_1. \end{cases} \quad (2)$$

Эту систему уравнений решим для двух случаев: 1) в общем случае, когда частота первого осциллятора не совпадает с частотой внешнего поля, т.е. $\Omega_0 \neq \omega$, решается система двух неоднородных дифференциальных уравнений второго порядка с помощью метода функции Грина [11] и 2) при резонансном взаимодействии первого осциллятора с внешним полем, т.е. при $\Omega_0 = \omega$.

1) В общем случае при $\Omega_0 \neq \omega$ решение системы уравнений при внешнем поле $F(t) = F_0 \cos \omega t$ приводит к следующему выражению для координаты второго осциллятора:

$$X_2 = \frac{F_0 \beta}{M \mu} \frac{1}{\omega_0^2 (\omega^2 - \Omega_0^2)} [\cos \Omega_0 t - \cos \omega t]. \quad (3)$$

Предположим, что при $t = \tau^*$ амплитуда колебания второго осциллятора такая, что значение энергии осциллятора равно энергии диссоциации Q (рисунок). Тогда уравнение можно переписать в виде

$$\begin{aligned} X_2^* &= \frac{F_0 \beta}{M \mu} \frac{1}{\omega_0^2 (\omega^2 - \Omega_0^2)} [\cos \Omega_0 \tau^* - \cos \omega \tau^*] = \\ &= \sqrt{\frac{2Q}{\omega_0^2 \mu}}. \end{aligned} \quad (4)$$

Переставляя константы в одну сторону уравнения, получим

$$\cos \Omega_0 \tau^* - \cos \omega \tau^* = \frac{M \omega_0 (\omega^2 - \Omega_0^2)}{F_0 \beta} \sqrt{2Q \mu} \leq 2. \quad (5)$$

Параметры, входящие в данное уравнение и соответствующие случаю микроволнового об-

лучения кластеров воды и разрыва водородной связи [8,10], принимают следующие значения:

$$\Omega_0 = 6,79 \cdot 10^9 \text{ Гц}, \omega_0 = 5 \cdot 10^{13} \text{ Гц}, \omega = 7 \cdot 10^9 \text{ Гц}, \\ M = 57 \cdot (m_O + 2m_H) = 57 \cdot 3 \cdot 10^{-23} \text{ г} = 1,71 \cdot 10^{-21} \text{ г}, \\ \mu = m_H = 0,167 \cdot 10^{-23} \text{ г}, Q = 25 \text{ кДж/моль}.$$

Максимальная разница косинусов равняется двум, что соответствует минимальным значениям константы связи и амплитуды силы внешнего поля. Амплитуду силы внешнего поля можно рассчитать на основе напряженности поля при интенсивности СВЧ-поля, равной $I \sim 10^{-3} \text{ Вт/см}^2$. Напряженность электромагнитного поля находится из уравнения $E \approx 20\sqrt{I}$ и равна $1,57 \text{ В/см}$. Тогда $F_0 = 2,5 \cdot 10^{-17} \text{ Н}$ и $\beta = 20 \text{ кг/с}^2 \approx 1 \text{ эВ/А}^2$.

Решая уравнение при заданных значениях параметров, мы можем оценить время $\tau^* \approx 1,5 \cdot 10^{-8} \text{ с}$, что соответствует времени накопления энергии на втором осцилляторе, достаточной для диссоциации водородной связи. В случае разрыва химической связи Q и β будут другими.

2) В случае резонансного взаимодействия первого осциллятора с внешним полем, т.е. когда $\Omega_0 = \omega$, система уравнений (2) принимает следующий вид:

$$\begin{cases} \ddot{X}_1 + m^2 X_1 = a \sin mt, \\ \ddot{X}_2 + \omega_0^2 X_2 = \frac{\beta}{\mu} X_1, \end{cases} \quad (6)$$

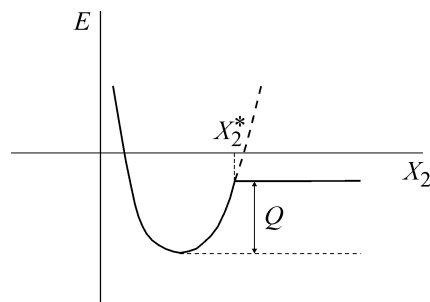
где $m = \omega = \Omega_0$ и $a = \frac{F_0}{M}$.

Решая эту систему уравнений [11], получаем для координаты второго осциллятора

$$X_2 \approx \frac{F_0 \beta}{M m \mu} \left[-\frac{2m}{\omega_0^4} [\cos mt - \cos \omega_0 t] + \frac{1}{\omega_0^3} [\sin mt - \sin \omega_0 t - \omega_0 t \sin mt] \right]. \quad (7)$$

В этом случае время τ^* , необходимое для диссоциации связи, также можно рассчитать на основе уравнения (4). Оценки этих выражений показывают, что во втором резонансном случае τ^* оказывается порядка 10^{-8} с и незначительно отличается по сравнению с первым случаем.

3) Большой интерес представляет сравнение рассмотренного механизма перекачки энергии СВЧ-поля через кластер воды с каналом увеличения энергии колебаний быстрого осциллятора при непосредственном его взаимодействии с СВЧ-полем с частотой ω , что соответствует случаю СВЧ-облучения макромолекулы без во-



Потенциальная энергия для быстрого гармонического осциллятора. При достижении координаты осциллятора происходит диссоциация химической связи.

ды. Тогда для уравнения движения быстрого осциллятора имеем [12]:

$$\ddot{X}_2 + \omega_0^2 X_2 = \frac{F_0}{\mu} e^{i\omega t}. \quad (8)$$

Решение этого уравнения при начальных условиях $t = 0, X_2 = \dot{X}_2 = 0$ имеет вид:

$$X_2 = \frac{F_0}{\mu(\omega_0^2 - \omega^2)} \cos \omega t. \quad (9)$$

Тогда условие диссоциации химической связи за время $\tilde{\tau}^*$ имеет следующий вид:

$$Q = \frac{1}{2} \omega_0^2 \mu X_2^2 = \frac{1}{2} \frac{F_0^2}{\mu \omega_0^2} \cos^2 \omega \tilde{\tau}^*. \quad (10)$$

Подстановка параметров Q, F_0, μ, ω из пункта 1 показывает, что всегда $Q \gg \frac{1}{2} \frac{F_0^2}{\mu \omega_0^2}$,

т.е. разрыв химической связи при непосредственной раскачке быстрого осциллятора невозможен. Этот результат находится в полном соответствии с экспериментом по влиянию СВЧ-поля на сухую ДНК [3].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, предлагается упрощенная теоретическая модель, описывающая процесс диссоциации водородной связи в кластерах воды при облучении электромагнитным полем в микроволновом диапазоне. В принципе предлагаемая модель применима и для случая разрыва ковалентной связи молекулы воды в кластере. Если поглощение энергии происходит на границе раздела фаз кластеров воды и полимера (например, ДНК, хитозан), то возможна и деградация полимерной цепи. Особая роль поверхности раздела фаз и гидратных оболочек

макромолекул отмечается в ряде работ [13–15]. Обнаружена структуризация водосодержащих сред при их контакте с материалами, включающими в поверхности контакта микро- и наноразмерные неоднородности. Показано, что структуризация водных слоев оказывается принципиальным условием существования наблюдаемых эффектов при взаимодействии низкоинтенсивных микроволновых излучений с водными средами, в том числе и появлении биологических эффектов, используемых в современных биомедицинских технологиях.

Авторы выражают свою глубокую благодарность проф. В.В. Ржевскому и доценту В.Г. Певгову за ряд полезных замечаний.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. B. A. Welt, C. H. Tong, J. L. Rossen, and D. B. Lund, *Appl. Environ. Microbiol.* **60**, 482 (1994).
2. R. V. Lechowich, L. R. Beuchat, K. J. Fox, and F. H. Webster, *Appl. Microbiol.* **17**, 106 (1969).
3. D. K. H. Jeng, K. A. Kaczmarek, A. G. Woodworth, and G. Balasky, *Appl. Environ. Microbiol.* **53**, 2133 (1987).
4. G. R. Vela and J. F. Wu, *Appl. Environ. Microbiol.* **37**, 550 (1979).
5. Y. Kakita, N. Kashige, K. Murata, et al., *Microbiol. Immunol.* **39**, 571 (1995).
6. Л. Д. Гапочка, М. Г. Гапочка, А. Ф. Королев и др., *Вестн. МГУ. Сер. 3. Физика. Астрономия* **35** (4), 71 (1994).
7. I. P. Buffey, W. Byers-Brown, and H. A. Gebbie, *Chem. Phys. Lett.* **148** (4), 281 (1988).
8. А. А. Овчинников и Н. С. Эрихман, *Успехи физ. наук* **138** (2), 289 (1982).
9. С. В. Зенин, *Основы биофизики воды* (Центр Регион, Москва, 2011).
10. О. В. Мосин, *Воздействие электромагнитных волн низкой интенсивности на воду и биологические объекты*. http://www.mmbio.ru/pdf/st_4.pdf, 2009.
11. Г. Корн и Т. Корн, *Справочник по математике* (Наука, Москва, 1973).
12. Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика. Т. 1. Механика* (Наука, Москва, 1988).
13. Н. И. Сеницын и В. А. Ёлкин, *Биомед. технологии и радиоэлектроника*, № 5–6, 34 (2006).
14. Н. И. Сеницын, В. А. Ёлкин, Р. В. Сеницына и О. В. Бецкий, в сб. *Материалы ежегодной науч.-практич. конф-ии «Инновации РАН – 2010»* («Слово», Казань, 2010), сс. 124–128.
15. М. В. Зюзин, И. В. Мосягина, В. И. Денисов и С. Д. Захаров, в сб. *Материалы науч. симп. «Механизмы участия воды в биоэлектромагнитных эффектах»* («Новые высокие технологии», Москва, 2013), сс. 150–155.

On a Possible Mechanism of the Effect of Microwave Radiation on Biological Macromolecules

V.N. Nikiforov*, A.V. Ivanov**, E.K. Ivanova***,
K.P. Tamarov*, and B.L. Oksengendler***

*Faculty of Physics, Moscow State University, Leninskie Gory 1/2, Moscow, 119991 Russia

**Blokhin Russian Cancer Research Center, Kashirskoe shosse 23, Moscow, 115478 Russia

***Institute of Polymer Chemistry and Physics, Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, ul. A. Kadiry 7b, Tashkent, 100128 Uzbekistan

A model describing the process of dissociation of hydrogen bonding in water clusters when irradiated by electromagnetic field in the microwave range is suggested. The model is also applicable for the case of rupture of the covalent bond of the water molecule cluster. If the energy absorption occurs at the interface of water and polymer clusters (e.g., DNA, chitosan), degradation of the polymer chain is possible.

Key words: water clusters, microwave radiation, mathematical simulation