

**АКАДЕМИЯ НАУК РЕСПУБЛИКИ ТАДЖИКИСТАН
ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ ИМ. С.У. УМАРОВА**

На правах рукописи

Умаров Насимджон Негматович

УДК 535.34.375.34. 541.64.543.422.23

**ВЛИЯНИЕ РАДИАЦИОННОГО ФОНА НА КОЛЕБАТЕЛЬНУЮ И
ВРАЩАТЕЛЬНУЮ ДИНАМИКУ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ГРУПП
РАСТИТЕЛЬНЫХ ПРИРОДНЫХ СОЕДИНЕНИЙ (ДОННИКА,
РЕПЕЙНИКА, ПОДОРОЖНИКА)**

Специальность: 01.04.07 – физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Душанбе-2018

Работа выполнена в лаборатории молекулярной спектроскопии Физико-технического института им. С.У. Умарова Академии наук Республики Таджикистан.

**Научные
руководители:**

Шукуров Турсунбой доктор химических наук, заведующий лабораторией молекулярной спектроскопии ФТИ им. С.У. Умарова АН РТ
Юсупов Изатулло Ходжаевич кандидат физ.-мат. наук, доцент, ведущий научный сотрудник лаборатории молекулярной спектроскопии ФТИ им.С.У. Умарова АН РТ

Официальные оппоненты:

Абдуманонов Абдуали док. физ.-мат. наук, доцент, заведующий лабораторией физики Худжандского научного Центра АН Республики Таджикистан
Низомов Зиёвуддин кандидат физ.-мат. наук, доцент кафедры естественнонаучных дисциплин филиал Национального исследовательского технологического университета «МИСиС» в г. Душанбе

Ведущая организация:

Институт химии им. В.И. Никитина АН Республики Таджикистан

Защита состоится 5 декабря 2018 года в 14⁰⁰ часов на заседании диссертационного совета 6D.КОА-031 при Физико-техническом институте им. С.У. Умарова Академии наук Республики Таджикистан по адресу: 734063, Республика Таджикистан, г. Душанбе, проспект Айни, 299/1, конференц-зал Тел: факс (992-372) 25-79-14.

Отзывы направлять по адресу: 734063, Республика Таджикистан, г. Душанбе, проспект Айни, 299/1, ФТИ АН РТ, диссертационный совет 6D.КОА-031, e-mail: shuro.ift@gmail.com.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке ФТИ им. С.У. Умарова АН РТ и на сайте www.phti.tj.

Автореферат разослан «__» _____ 2018 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета 6D.КОА-031,
кандидат химических наук, с.н.с.

Холов А.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Изучение свойств органических и неорганических соединений растительного происхождения, синтезирующихся в условиях непрерывного воздействия внешних факторов (радиационный фон, химический состав почвы, высота произрастания, температурный режим окружающей среды и пр.) является одной из важных задач физики, химии и других, смежных с ними, наук. Формирование молекулярной и надмолекулярной структур растительных соединений напрямую зависит от влияния внешних факторов. Анализ литературных данных показывает, что довольно часто исследования природных соединений проводятся на примере образцов растений, выращенных в условиях нормального радиационного фона. Однако бурное развитие промышленных предприятий, автотранспорта, добычи радиоактивного сырья и производства ядерного топлива привели к серьёзным нарушениям состояния окружающей среды, природных ландшафтов, к загрязнению атмосферы, почвы, воды, что стало представлять серьёзную экологическую опасность, в том числе и для роста и развития растений. Естественно, что изменение условий произрастания растений может отразиться на формировании как молекулярной, так и надмолекулярной структуры и свойствах лекарственных и пищевых растений. В связи с этим, возникает вопрос о необходимости исследования влияния внешних факторов на физико-химические свойства и химический состав органических соединений растений. Одним из эффективных способов изучения молекулярно-динамических и конформационных характеристик молекул биополимеров является их спектроскопическое исследование с привлечением метода ИК-спектроскопии и метода спиновых меток.

Актуальность подобных исследований определяется ещё и тем, что их результаты могут служить научной основой биомониторинга окружающей среды, на основе которого можно вырабатывать обоснованные предложения по улучшению качества лекарственных и пищевых продуктов растительного происхождения.

Цель работы заключалась в выявление влияния уровня радиационного фона места произрастания репейника, донника и подорожника на колебательную и вращательную динамику их гидроксильных групп спектроскопическими методами.

Для достижения поставленной цели были сформулированы следующие задачи:

-исследование влияния радиационного фона и места произрастания на изменение количества гидроксильных групп в составе молекул донника, репейника и подорожника;

-оценка энергии межмолекулярного взаимодействия гидроксильных групп в молекулах соединений изученных растений;

-изучение влияния уровня радиационного фона и места произрастания на вращательную подвижность гидроксильных групп молекул исследованных объектов;

-разработка метода модификации структуры растений спиновыми метками;

-исследование зависимости подвижности гидроксильных групп молекул растений от температуры и дозы радиации.

Научная новизна работы заключается в следующем:

-установлено, что количество гидроксильных групп в листьях растений с ростом уровня радиационного фона нелинейно уменьшается, а в корневищах изменяется экстремально (через максимум);

-показано, что после катионной обработки зависимость количества гидроксильных групп от уровня радиационного фона в листьях растений переходит от нелинейного падения к экстремальному, а для корневищ- от экстремального к линейному падению;

-выявлено общее уменьшение энергии межмолекулярного взаимодействия гидроксильных групп молекул для всех растений, не зависимо от составных частей, по мере роста уровня радиации;

-обнаружен рост вращательной подвижности молекул растений с ростом уровня радиации и концентрации пестицидов в почве;

-определены параметры молекулярной подвижности молекул растений в зависимости от уровня радиационного фона места произрастания в широком интервале температур;

-оценена эффективная энергия активации ($\Delta E_{эфф}$) вращательной диффузии молекул репейника и показана её корреляция с энергией механического разрушения образцов растения;

-установлено, что концентрация свободных радикалов в веществе растений уменьшается с ростом уровня радиационного фона по экспоненциальному закону.

Научно-практическая значимость работы заключается в том, что полученные молекулярно-динамические и спектроскопические характеристики соединений растений могут быть использованы в пищевой промышленности, медицине, фармакологии, парфюмерии и других отраслях народного хозяйства, способствуют развитию фундаментальных представлений о молекулярном строении биообъектов, при разработке путей целенаправленной модификации их структуры и свойств, а также при эко-мониторинге окружающей среды.

Защищаемые положения:

-влияние уровня радиационного фона на спектральные характеристики функциональных групп молекул растений;

-влияние уровня радиационного фона и концентрации пестицидов почвы на энергию межмолекулярного взаимодействия гидроксильных групп молекул растений;

-влияние температуры и уровня радиационного фона на частоту корреляции молекулярного движения нитроксильных радикалов, присоединённых к молекулам растений, измеренной ЭПР в трехсантиметровом диапазоне;

-высокая эффективность использования метода спиновых меток в качестве метода исследования структуры растительных соединений;

-обратная пропорциональность между эффективной энергией активации вращательной подвижности гидроксильных групп и уровнем радиационного фона в широком интервале температур.

Достоверность полученных результатов подтверждается применением современных спектральных методов, использованием калиброванной аппаратуры, хорошей воспроизводимостью результатов в широком диапазоне внешних условий и согласием полученных результатов с экспериментальными данными других авторов.

Личный вклад автора. Автор принимал непосредственное участие в планировании опытов, в разработке и подготовке объектов исследования, измерении и обработке результатов, их обсуждении и подготовке основных материалов к публикации.

Апробация результатов исследований. Материалы диссертации доложены на: Международной конференции по физике конденсированного состояния, посвящённой 85-летию академика А.А. Адхамова (Душанбе, 17-18 октября 2013 г.); IV международной конференции «Современные проблемы физики» (Душанбе, 5 декабря 2014 г.); республиканской научно-практической конференции «Проблемы современной физики», (Худжанд, 2015 г.); Международной научно-практической конференции «Современные проблемы математических и естественных наук» (Казань, 8 июня 2015 г.); республиканской научной конференции «Современные проблемы физики конденсированного состояния» (Душанбе, 24 октября 2015г.); Международной научно-практической конференции «Новейшие достижения и успехи развития естественных и математических наук» (Краснодар, 25 июня 2016 г.); V международной конференции «Современные проблемы физики» (Душанбе, 18 ноября 2016 г.); Международной конференции «Перспективы развития физической науки» (Душанбе, 14 апреля 2017 г.); Международной конференции «Актуальные проблемы современной физики» (Душанбе, 18 апреля 2018 г.).

Публикации. По результатам исследования опубликовано 25 научных трудов, из которых 8 статей в рецензируемых научных журналах из Перечня

ВАК при Президенте Республики Таджикистан, 17 - в материалах докладов на международных и республиканских конференциях.

Объём и структура диссертации. Диссертация изложена на 122 страницах компьютерного текста и состоит из введения, литературного обзора, методической и экспериментальной частей, выводов и практических рекомендаций, списка литературы из 164 наименований и приложения. Работа иллюстрирована 24 таблицами и 29 рисунками.

Ключевые слова: функциональная группа, радиационный фон, спектроскопия, энергия, спиновая метка, радикал, вращательная подвижность.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы, сформулированы цели и задачи диссертационной работы, отражена её научная и практическая значимость.

В первой главе диссертации приводится анализ литературных данных по исследованию структуры и свойств природных органических соединений растительного происхождения различными физико-химическими методами. Показано, что подавляющая часть этих исследований относится к растительным объектам, выращенным в лабораторных высокостерильных условиях, которые существенно отличаются от дикорастущих растений, находящихся в условиях постоянного действия окружающей среды. Всё ещё остаются недостаточно изученными вопросы о влиянии техногенных (антропо-генных) факторов на структурные свойства функциональных групп растений, состава атмосферы и радиационного фона на параметры межмолекулярного взаимодействия, конформацию и молекулярную динамику и многие др. Совершенно не изучена связь между механическими свойствами растений и их структурными характеристиками. Исходя из этого формулируется постановка задачи исследования.

Во второй главе приведено краткое описание использованных в работе экспериментальных методов исследования, методики приготовления образцов материалов исследуемых растений, метода расчёта средней энергии

межмолекулярного взаимодействия водородных связей и определения среднего значения эффективной энергии активации, метода определения количества привитых к образцам нитроксильных радикалов, времени корреляции и частоты вращения в области медленного вращения радикалов.

В третьей главе приведены результаты ИК-спектроскопического исследования влияния внешних факторов на колебательно-вращательную подвижность функциональных групп молекул растений. Спектроскопические методы исследования органических и неорганических соединений являются наиболее результативными и современными в исследовании структуры и свойств полимеров, биополимеров и др. материалов. С помощью спектроскопических методов можно получить количественные данные о влиянии внешних и техногенных факторов на структуру и свойства биополимеров.

В первом и втором разделах приведены результаты исследования влияния уровня радиационного фона на спектральные характеристики и энергию межмолекулярного взаимодействия функциональных групп репейника и донника. Образцы репейника были собраны по краям хвостохранилища Дигмай в зонах с разными уровнями радиационного фона. Радиационная характеристика местности приведена в таблице 1.

Таблица 1

Характеристика места произрастания

| Место Произрастания | Радиационный фон, мкЗв/час |
|---------------------|----------------------------|
| точка А | 0,7 |
| точка В | 2,7 |
| точка С | 8,4 |

Примечание: Координаты места сбора растений: точка А (С 40° 13' 35", В 69°38'9"); точка В (С40° 13'32", В69° 38' 2"); точка С (С40°13'28"; В 69°37' 50").

Запись спектров проводилась на Фурье ИК-спектрометре IRAffinity-1. На рис.1 приведены примеры ИК-спектров образцов листьев репейника в области частот 4000-400 см⁻¹, собранных в точках (А,В,С) до и после катионной обработки (КО).

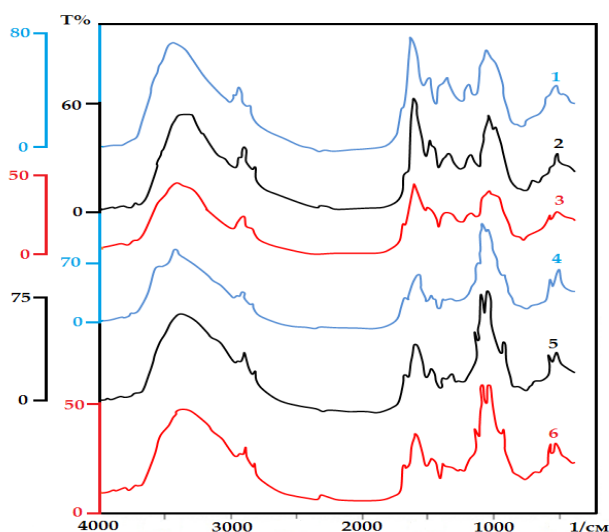


Рис. 1. ИК-спектры листьев репейника, собранного в точке: *A* (1–до КО), 4–после КО; *B* (2–до КО, 5–после КО); *C* (3–до КО, 6–после КО).

Сравнительный анализ показывает, что под действием радиационного фона в спектре листьев растений происходит сильный сдвиг от 30 см^{-1} до 78 см^{-1} , свидетельствующий об изменении количества гидроксилсодержащих групп, участвующих в меж- и внутримолекулярном взаимодействии. Возможно, это смещение связано как с изменением количественного содержания гидроксильных групп, так и с вкладом атомов азота, входящих в структуру хлорофилла.

Самую высокую интенсивность имеют образцы, собранные в точке (*A*)- более 75 %, самую низкую - из точки (*C*) ~ 50 %. Интегральная интенсивность пропорциональна количеству функциональных групп и при изменении мощности радиационного фона она изменяется.

Для выяснения вклада гидроксильных и карбоксильных групп в формирование ИК-полос поглощений в исследованной области частот и для определения энергии межмолекулярных взаимодействий (ЭММВ) гидроксильных групп листья репейника подвергались катионообмену (КО) с 2%-ным водным раствором CuSO_4 . Особое внимание привлекают ИК-спектры образцов после КО изменением ряда характеристических полос поглощения, а также различием в интенсивности полос, изменением форм и положения максимумов полос, появлением новых полос и сглаживанием некоторых существующих (см. рис.1, кривые 4-6). Это свидетельствует об энергетической неравнозначности меж- и внутримолекулярных взаимодействий функциональных групп молекул репейника при

воздействии радиации. Совершенно аналогичные изменения спектроскопических характеристик имеют место и для образцов корневища репейника.

На рис. 2 приведена зависимость относительной интегральной интенсивности полос поглощения листьев и корневища репейника от уровня радиации. Как видно из кривой 1 рисунка, для листьев репейника до КО по мере роста уровня радиации интегральная интенсивность гидроксильных групп нелинейно уменьшается, а после КО зависимость приобретает экстремальный характер (кривая 3): вначале с ростом дозы наблюдается быстрый рост, а затем происходит её слабое падение.

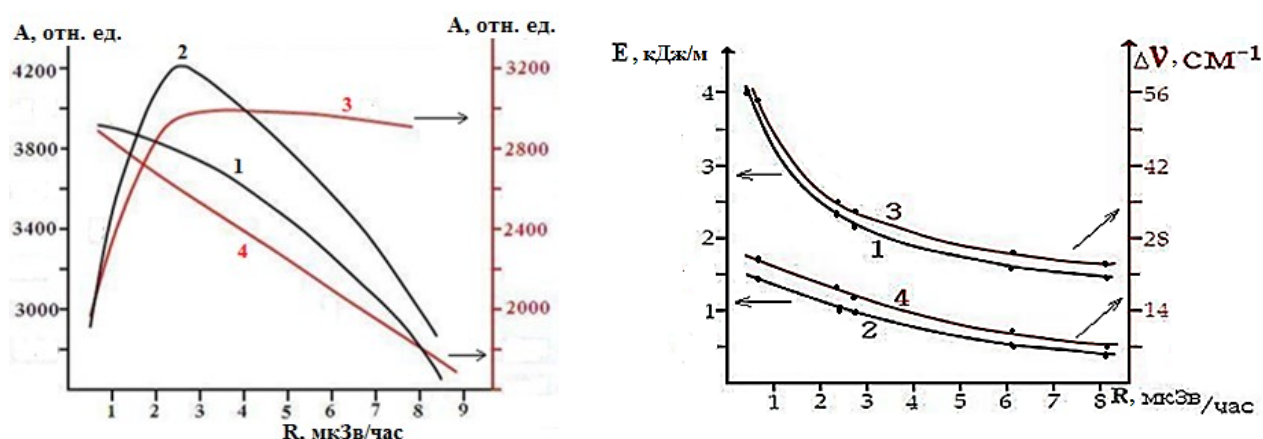


Рис. 2. Зависимость относительной интегральной интенсивности полос поглощения от уровня радиации: 1-листья до КО , 3-листья после КО; 2- корневище до КО, 4- корневище после КО.

Рис.3. Зависимость энергии межмолекулярного взаимодействия и смещения частоты полосы поглощения $\Delta\nu(\text{см}^{-1})$ в репейнике от уровня радиации: 1, 3 – листья; 2, 4 – корень.

Однако для образцов корневища наблюдается обратная картина (кривая 2)- до КО зависимость имеет экстремальный характер, после КО (кривая 4) переходит к практически линейному падению.

На рис.3 представлены зависимости энергии межмолекулярного взаимодействия и смещения максимума полос поглощения гидроксильных групп от мощности радиационного фона. Энергию межмолекулярного взаимодействия оценивалась по соотношению;

$$-\frac{\Delta\nu}{\nu} \approx \Delta E \frac{\rho}{D}. \quad (1)$$

Из рисунков можно видеть, что по мере увеличения уровня радиационного фона энергия межмолекулярного взаимодействия и смещение максимума полосы поглощения для листьев и корней репейника нелинейно уменьшаются.

На рис. 4 приведён сравнительный анализ относительной интегральной интенсивности от различных уровней радиационного фона для донника. Из рис. 4 можно видеть, что по мере увеличения мощности радиации значение относительной интегральной интенсивности для стеблей уменьшается почти в 1.5 раза, а для корневища около 2 раз.

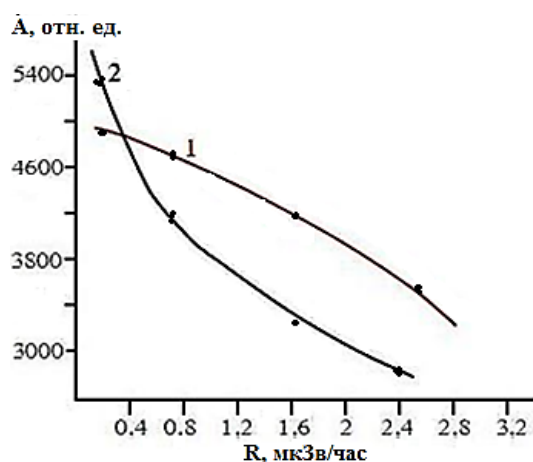


Рис. 4. Влияние уровня радиации места произрастания на относительную интегральную интенсивность поглощения донника: 1-стебель, 2-корень.

Это свидетельствует о том, что количество гидроксильных групп в структуре растений в процессе роста под действием радиации уменьшается.

Для образцов других растений наблюдаются качественно аналогичные закономерности влияния указанных внешних факторов на их спектроскопические характеристики.

Таким образом, приведённые данные свидетельствуют о том, что формирование системы меж- и внутримолекулярных водородных связей и молекулярно-динамические параметры функциональных групп молекул растений зависят от уровня радиационного фона, высоты над уровнем моря точки сбора, составной части растения и предварительной химической обработки. Эти факторы однозначно влияют на спектральные характеристики молекул растений.

В четвёртой главе изложены результаты исследования влияния уровня радиационного фона места произрастания, высоты точек сбора над уровнем моря и предварительной пестицидной обработки на кинетику накопления пара-

магнитных центров и молекулярно-динамические параметры молекул растений Северного Таджикистана методом ЭПР-спектроскопии.

На рис. 5 представлены спектры ЭПР сухих листьев репейника в зависимости от радиационного фона места произрастания. Видно, что спектры

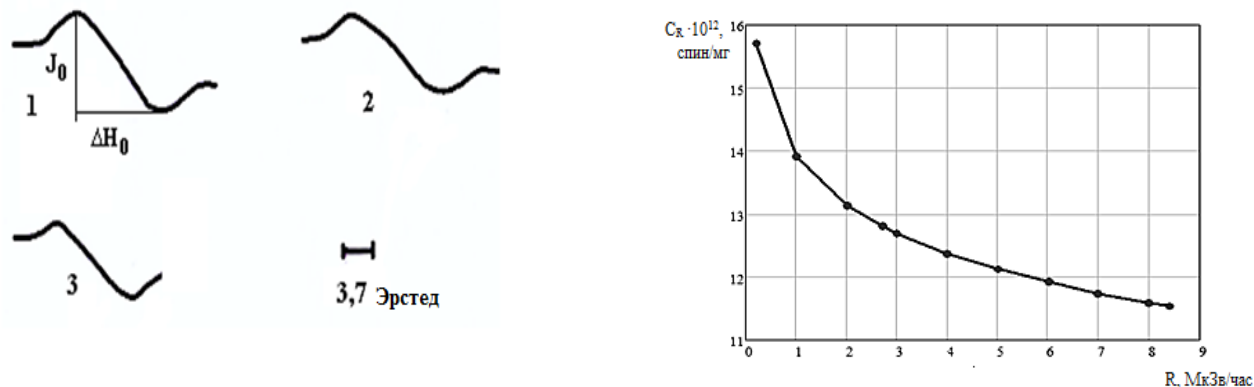


Рис.5. Спектры ЭПР листьев репейника из разных точек Дигмая: 1 – из точки А (0,2 мкЗв/ч) ; 2 – из точки В (2,7 мкЗв/ч); 3 – из точки С (8,4 мкЗв/ч).

Рис.6. Зависимость количества свободных радикалов C_R в листьях репейника от мощности радиационного фона местности R .

ЭПР растений из разных точек имеют различную интенсивность, но одинаковую ширину (ΔH_0). Синглетный характер спектров свидетельствует о суперпозиции сигналов ЭПР, то есть о наличии свободных радикалов разного типа и отсутствии сверхтонкого взаимодействия (СТВ).

На рис.6 представлена зависимость количества свободных радикалов в листьях репейника от мощности радиационного фона места произрастания.

Количество свободных радикалов рассчитывали по формуле:

$$C_R = C_{эт} \frac{J_0}{J_{эт}}, \quad (2)$$

где $C_{эт}$ – количество свободных радикалов в эталоне, $J_{эт}$, J_0 – интенсивность спектров ЭПР эталона и исследуемого образца соответственно.

Как видно из рисунка, максимальное количество свободных радикалов содержится у образцов из точки А с мощностью радиационного фона 0,20 мкЗв/ч, что не превышает норму. В точке С радиационный фон составляет 8,4 мкЗв/час, а содержание свободных радикалов наименьшее из всех.

Исследование образцов донника и подорожника ланцетного показало, что количество парамагнитных центров (свободных радикалов), содержащихся в составных частях этих растений зависит от влияния мощности радиационного фона, высоты над уровнем моря точки сбора и составной части растения.

Известно, что для многих полимерных материалов по мере роста дозы и времени облучения радиацией увеличивается количество парамагнитных центров. В нашем же случае для некоторых образцов материала растений наблюдается обратное явление, т.е. по мере роста дозы радиации количество парамагнитных центров уменьшается, что ранее никем не фиксировалось. О конкретном механизме такого поведения растений, видимо, пока говорить рано. Вероятнее всего, что в процессе биосинтеза структуры в организме растений параллельно вырабатываются своего рода ловушки-гасители активных парамагнитных центров.

Молекулярно-динамические и конформационные параметры молекул указанных объектов были исследованы методом спиновых меток с использованием стандартного нитроксильного радикала (НР).

В качестве объекта были отобраны листья репейника, выросшие при различных радиационных уровнях. Образцы предварительно модифицировали спиновой меткой НР (I), согласно методике приведённой в разделе 2.4 диссертации.

Спектры снимались при комнатных условиях на радиоспектрометре РЭ – 1306 в стандартных молибденовых ампулах с внутренним диаметром 3.0 мм. в которые помещали по 30 мг спин-меченого образца.

Концентрацию спин-меток определили путем сравнения интенсивностей спектров образца и эталонного водно-глицеринового раствора радикала-I при

77К согласно формулы

$$R_{обп} = R_{эм} \cdot \frac{h_{обп} (\Delta H_{обп})^2}{h_{эм} (\Delta H_{эм})^2} \quad (3)$$

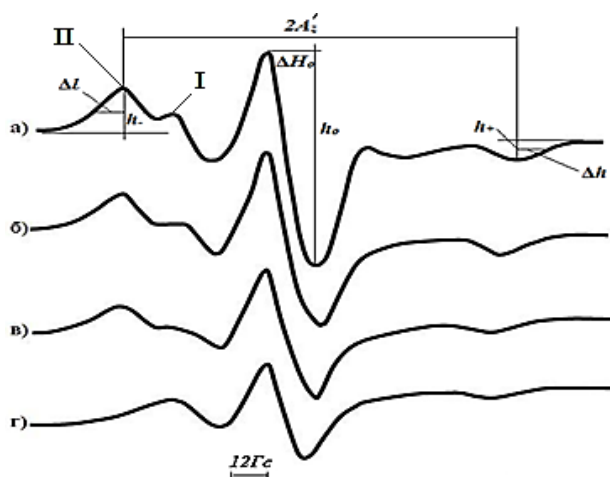


Рис. 7. ЭПР-спектры спин-меченых образцов листьев репейника в зависимости от радиационного фона места произрастания в мкЗв/час: а) 0.2, б) 0.7, в) 2.7, г) 8.4.

На рис. 7 представлены спектры ЭПР спин-меченых образцов листьев репейника. Видно, что с увеличением мощности радиационного фона концентрация присоединившихся спин-меток (R) уменьшается.

На рис.8. представлена зависимость количества гидроксильных групп от количества присоединившихся к молекулам репейника спин-меток. Видно, что

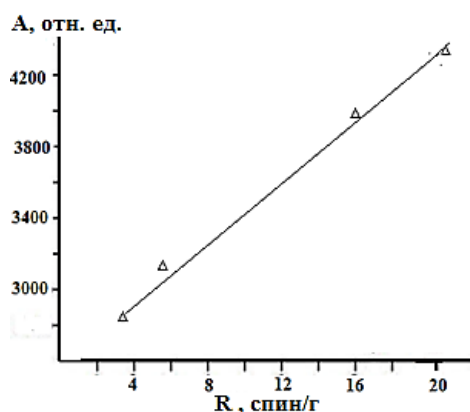


Рис.8. Зависимость интегральной интенсивности гидроксильных групп от количества присоединившихся спин-меток.

между этими параметрами имеется хорошая корреляция. Это означает, что в результате изменений в структуре растения под действием радиационного фона, уменьшается число участков или групп молекул, которые могут быть местом присоединения радикала в процессе его диффузионного внедрения в образец.

Оценка частот и активационных параметров вращения спин-меток позволяет более точно сформулировать, как радиационный фон и экологические факторы сказываются на молекулярно-динамических параметрах молекул растений.

Время корреляции вращений спин-меток τ_c определяется по относительным изменениям спектрального параметра $2A'_z$ с помощью формулы

$$\tau_c = 8 \cdot 10^{-10} \left(1 - \frac{2A'_z}{2A''_z} \right)^{-1,16} \quad (4)$$

Спектры ЭПР спин-меченых образцов (рис. 7) при комнатной температуре представляют собой суперпозицию двух сигналов и сильную заторможенность вращательной подвижности спиновой метки с временем корреляции $\tau_c \leq 10^{-8}$ с, что характеризует неоднородность аморфных областей образцов в местах присоединения метки и свидетельствует об изменении системы меж- и внутримолекулярных водородных связей в области частот гидроксильных групп, что подтверждает данные по ИК-спектроскопии.

В табл.2 приведены спектральные параметры спин-меченых листьев репейника в зависимости от радиационного фона.

Таблица 2

Параметры спектров ЭПР спин-меченых листьев репейника в зависимости от радиационного фона места произрастания

| Место Произрастания | Δl , Гс | Δh , Гс | $\Delta H_{\text{обр}}$, Гс | $2A'_z$, Гс | h'/h | $\tau_c \cdot 10^8$, с | $R_{\text{обр}} \cdot 10^{16}$ спин/Г |
|--------------------------------|-----------------|-----------------|------------------------------|--------------|--------|-------------------------|---------------------------------------|
| точка А-0.2 <i>мкЗв/час</i> | 12 | 10.8 | 24 | 218 | 0.4 | 0.47 | 22 |
| точка В-0.7 <i>мкЗв/час</i> | 9.6 | 10 | 21.6 | 210 | 0.25 | 0.41 | 13 |
| точка С-2.7 <i>мкЗв/час</i> | 8.4 | 7.2 | 18 | 204 | 0.17 | 0.36 | 5.3 |
| точка D-8.4 <i>мкЗв/час</i> | 7.2 | 5.6 | 16.8 | 177 | - | 0.25 | 3.7 |

Из табл. 2 и рис. 7 следует, что для листьев репейника параметры Δl и Δh в спектрах ЭПР, относящихся к медленно вращающемуся радикалу (II), изменяются в зависимости от радиационного фона места произрастания, а параметр h'/h является очень чувствительным и изменяется интенсивно, что характеризует появление нового компонента сигнала ЭПР, относящегося к быстро вращающемуся радикалу (I). Это свидетельствует о появлении сверхтонкой струк-

туры (СТС) в спектрах исследуемых образцов, уменьшении низкопольных и высокопольных компонентов в сигнале ЭПР, время корреляции которых характеризует изменение системы меж- и внутримолекулярных водородных связей в областях присоединения меток.

На рис.9 приведен график изменения относительного параметра h'/h от радиационного фона места произрастания. Можно видеть, что параметр h'/h при увеличении уровня радиационного фона уменьшается не линейно, а при больших уровнях радиации, возможно, стремится к нулю.

Таким образом, на основании полученных результатов можно заключить, что изменения значений ЭПР-спектроскопических параметров, времени корреляции вращательной подвижности и появление сверхтонкой структуры в спектрах листьев репейника связаны с уровнем радиационного фона местности, т.е. радиация влияет на формирование молекулярной структуры и свойства органических соединений растений.

В разделе 4.5 приводятся результаты исследования корреляции между молекулярно-динамическими и механическими характеристиками репейника. Необходимо отметить, что исследование влияния уровня радиационного фона на прочностные и тепловые характеристики материала растений важно с точки зрения технологии их переработки. Подобные исследования дают дополнительную информацию о влиянии радиации на молекулярную структуру, механические и тепловые характеристики растений.

На рис.10 приведены зависимости разрывной прочности листьев репейника от температуры для образцов с разными предысториями: 1 –из точек с допустимым уровнем радиации, 2 –из точек с уровнем радиации 8,4 мкЗв/час.

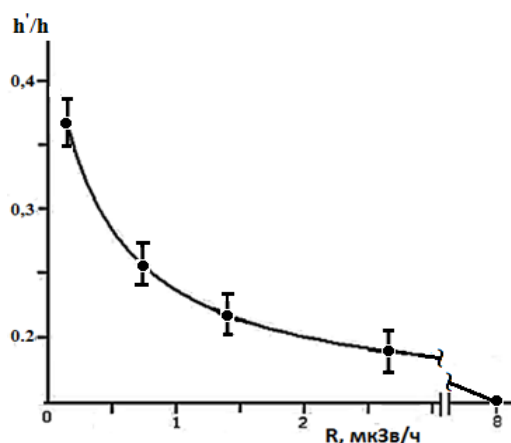


Рис. 9. Зависимость параметра h'/h от радиационного фона места произрастания листьев репейника.

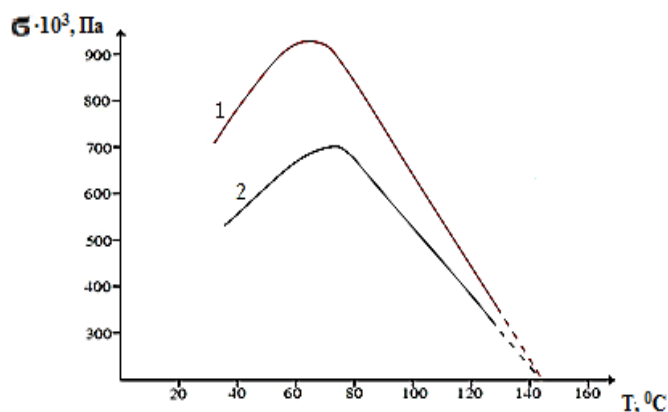


Рис.10. Температурная зависимость прочности листьев репейника:1- образцы из точек с допустимым радиационным фоном;2-образцы из точек с радиационным фоном 8,4 мкЗв/час.

Можно видеть, что зависимость носит экстремальный характер. Вначале с ростом температуры для обоих образцов наблюдается небольшой рост прочности. Это упрочнение, вероятно, связан с удалением излишней влаги, ослабляющей межмолекулярное взаимодействие в собственно растительном материале. Дальнейший рост температуры приводит к практически линейному спаду прочности.

Максимум разрывной прочности для образцов 1 приходит на температуру примерно 60-65 °С, а для пораженных образцов 2 на 75 °С. Для определения энергии U_0 и коэффициента γ из уравнения долговечности были найдены значения T_0 и σ_0 которые получены графическим способом по данным рис.10 путём экстраполяции зависимости $\sigma=f(T)$ к значениям $\sigma=0$ и $T=0$, затем с помощью формул

$$U_0=2.3RT_0(\lg \tau+13) \quad (5) \quad \gamma= U_0/ \sigma_0 \quad (6)$$

были определены значения кинетических параметров уравнения долговечности

$$\tau = \tau_0 \exp [(U_0 - \gamma\sigma) / RT] \quad (7)$$

где: τ - долговечность-время с момента нагружения образца до разрыва; σ - напряжение в момент разрыва образца; T - абсолютная температура; R - универсальная газовая постоянная; U_0 - энергия активации разрушения в отсут-

ствие напряжения; γ - структурно-чувствительная постоянная образца; τ_0 - предэкспоненциальный множитель, принимаемый равным 10^{-13} с.

Результаты экспериментов показали, что энергия активации механического разрушения образцов 1 и 2 практически одинакова, в то время как структурно-чувствительный коэффициент γ по мере роста уровня радиации точки сбора повышается, а значение прочности уменьшается. Постоянство величины энергии активации разрушения говорит о том, что в обоих случаях разрушению подвергается одни и те же внутримолекулярные связи.

В табл. 3 приведены параметры спектров ЭПР спин-меченых образцов составных частей донника, собранного из разных мест. Из таблицы следует, что параметры Δh и Δl в спектрах ЭПР, относящиеся к медленно вращающемуся радикалу, изменяются в зависимости от радиационного фона места произрастания и составной части растения. Наблюдается корреляция между изменениями

Таблица 3

Параметры спектров ЭПР спин-меченых образцов составных частей донника в зависимости от места произрастания

| Место произрастания и высота над ур. моря, м | R, мкЗв/ч. | Сост. части | Δl , Гс | Δh , Гс | ΔH_0 , Гс | $2A'_{zz}$, Гс | $\tau_c \cdot 10^{-8}$ с | h'/h |
|--|------------|-------------|-----------------|-----------------|-------------------|-----------------|--------------------------|--------|
| Худжанд, 380 | 0.28 | Стебель | 12.0 | 13.2 | 30.0 | 190.8 | 0.304 | 1.00 |
| | | Листья | 12.0 | 12.0 | 27.6 | 183.6 | 0.277 | 0.90 |
| | | Корень | - | - | - | - | - | - |
| Гулистон, 400 | 0.10 | Стебель | 10.8 | 19.2 | 16.8 | 181.2 | 0.269 | 0.41 |
| | | Листья | 9.60 | 7.2 | 28.8 | 183.6 | 0.277 | 1.08 |
| | | Корень | 9.60 | 13.2 | 25.2 | 183.6 | 0.277 | 0.43 |
| Дигмай, 450 | ~3.90 | Стебель | 13.2 | 14.4 | 27.6 | 190.8 | 0.304 | 1.00 |
| | | Листья | 8.40 | 12.0 | 26.4 | 183.4 | 0.271 | 0.36 |
| | | Корень | 7.20 | 9.60 | 26.4 | 193.2 | 0.314 | 0.33 |

параметров $2A'_z$ и Δl , Δh . Эти изменения трактуются как появление нового компонента в сигнале ЭПР, относящегося к быстровращающемуся радикалу, что является доказательством увеличения вращательной подвижности спиновой метки с временем корреляции $\tau_c \leq 10^{-7}$ с.

Таким образом, на основании полученных экспериментальных данных можно заключить, что: параметры вращательной диффузии радикала, введённого в макромолекулы растений одного и того же генетического происхождения, зависят от уровня радиационного фона и др. физических факторов окружающей среды. По мере роста уровня радиации параметры, характеризующие медленно вращающийся радикал, изменяются незначительно, а параметр h'/h - отношение амплитуды низкопольных линий слабоимобилизованных меток, относящихся к быстро вращающемуся радикалу, весьма чувствителен к конформационной подвижности молекул, что свидетельствует о структурных изменениях в составных частях растений.

ОБЩИЕ ВЫВОДЫ

1. Впервые с использованием метода ИК-спектроскопии проведено исследование влияния радиационного фона места произрастания на количественное содержание функциональных групп молекул соединений дикорастущих репейника, донника и подорожника ланцетного. Установлено, что концентрация функциональных групп в молекулах указанных растений с ростом мощности радиационного фона точки сбора в зависимости от составной части растения, предварительного катионного обмена меняется от экстремального (с максимумом) до линейного и нелинейного падения [*Межд. конф. «Перспективы развития физической науки».- Душанбе .- 2017.- С.72-74.*].

2. Проведена оценка энергии межмолекулярного взаимодействия (ЭММВ) гидроксильных групп в репейнике, доннике и подорожнике ланцетном в зависимости от мощности радиационного фона, высоты над уровнем моря точки сбора, составной части растения и предварительной химической обработки. Показано, что с ростом мощности фона во всех изученных случаях энергия межмолекулярного взаимодействия нелинейно снижается от ~ 12 кДж/моль до 1,5 кДж/моль [*Вестник ТНУ.-2014.- 1/4(153) .- С.208-213., Учёные записки ХГУ.-*

2016.- №4(39).- С.52-59., *v*-межд. конф. «Современные проблемы физики».- Душанбе.-2016.- С.108-110.].

3. Методом ЭПР в сочетании с методом спиновых меток исследовано влияние радиационного фона и высоты над уровнем моря точки сбора, составной части растения и предварительной химической обработки на молекулярную динамику репейника, донника и подорожника ланцетного. Установлено, что с ростом мощности фона вращательная подвижность (обратная времени корреляции) функциональных групп молекул растений увеличивается, в то время как концентрация привитых меток (равно концентрация функциональных гидроксильных групп) заметно падает, что, очевидно, связано с деструкцией материала растений, образованием микродефектов и пр. [ДАН РТ.- 2015.- Т.58.- №4.- С. 309-315., ДАН РТ.- 2016.- Т.59.- № 9-10.- С. 392-398.].

4. Найдена корреляция между изменениями в ИК-спектрах и количеством спиновых меток присоединённых к функциональным группам молекул растений

5. Показано, что под влиянием радиационного фона и пестицидов возрастает вращательная подвижность спиновых меток (ν), присоединившихся к макромолекулам образцов растений, радиация разрыхляет структуру веществ на всех уровнях формирования функциональных групп структуры растений, начиная с листьев и кончая корнями [ДАН РТ.- 2016.- Т.59.- № 9-10.-С. 392-398., *Межд. конф. «Актуальные проблемы современной физики».- Душанбе .- 2018.- С.153-155.*].

6. Оценена эффективная энергия активации ($\Delta E_{эфф}$) вращательной диффузии спиновой меток для образцов репейника. Показана строгая корреляция между прочностными характеристиками и структурой растений, что согласуется с современными представлениями о связи прочности материалов с их микроструктурой [ДАН РТ.-2017.- Т.60.-№5-6. С.230-235.,*Вестник.- ТНУ.- 2017.- №1/4. С.117-121*].

А Н Н О Т А Ц И Я

на автореферат диссертации Умарова Насимджона Негматовича на тему «Влияние радиационного фона на колебательную и вращательную динамику функциональных групп растительных природных соединений (донника, репейника, подорожника)» на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Ключевые слова: функциональная группа, радиационный фон, спектроскопия, энергия, спиновая метка, радикал, вращательная подвижность.

В автореферате обоснованы актуальность исследования, степень научной разработанности темы, цель и научные задачи, научная новизна, научно-практическая значимость исследования и вкратце основное содержание работы.

В работе рассматриваются влияние радиационного фона, высоты над уровнем моря и предварительной химической обработки на колебательную и вращательную подвижность функциональных групп молекул растений, энергия межмолекулярного взаимодействия водородной связи, относительное количество функциональных групп, концентрации парамагнитных центров, время корреляции, количество присоединившихся спин-меток в молекулах растений, энергия активации и механические характеристики растений.

Структура работы состоит из введения, четырёх глав, разделённых на параграфы, заключения и списка использованной литературы. В основе структуры диссертации лежат экспериментальные методы спектроскопии и спиновых-меток, которые определяют влияние внешних факторов на структуру и свойства природных соединений.

А Н Н О Т А Т С И Я

ба автореферати диссертатсияи Умаров Насимҷон Негматович дар мавзӯи «Таъсири фони радиатсионӣ ба динамикаи лаппандагӣ ва чархзании гуруҳҳои функционалии пайвастагиҳои растанигӣ (зардбеда, мушхор, зуф)» барои дарёфти дараҷаи илмии номзади илмҳои физикаю математика аз рӯи ихтисоси 01.04.07- физикаи ҳолатҳои конденсӣ

Калимаҳои калидӣ: гуруҳи функционалӣ, фони радиатсионӣ, спектроскопия, энергия, нишонаи спинӣ, радикал, ҳаракатнокии чархзанандагӣ.

Дар автореферат мубрам будани мавзӯи тадқиқот асоснок карда шуда, дараҷаи коркарди илмии мавзӯъ, мақсад ва вазифаи рисолаи диссертационӣ, навигарии илмии рисола, аҳмияти илмӣ-амалии тадқиқот, мазмуни мухтасари рисола оварда шудааст.

Дар рисола оид ба таъсири фони радиатсионӣ, баландии макони сабзиш нисбат ба баҳр, коркарди пешакии химиявӣ ба ҳаракатнокии лаппандагӣ ва чархзанандагии гуруҳҳои функционалии молекулаҳои растаниӣ, энергияи байнимолекулавии алоқаҳои гидрогенӣ, миқдори интенсивнокии интегралӣ нисбӣ, миқдори марказҳои парамагнитӣ, вақти корелятсионӣ, пайвастшавии миқдори нишонаҳои спинӣ ба молекулаҳои растаниӣ, энергияи фаъолнокии вайроншавӣ ва характеристикаҳои механикӣ оварда шудааст.

Рисола аз муқаддима, чор бобҳои ба зербобҳо тақсимшуда, хулоса ва рӯйхати адабиёти истифода шуда иборат мебошад. Асоси сохтори рисола ро таҷрибаҳо бо усулҳои спектроскопӣ ва нишонаҳои спинӣ, ки таъсири омилҳои берунаро ба сохтор ва хосияти пайвастагиҳои табиӣ муайян мекунад ташкил медиҳад.

ANNOTATION

to the synopsis of Nasimjohn Negmatovich Umfrov's thesis

«The influence of Radiation Background on Vibrational and Rotational mobility of the plants natural Compound's Functional Groups» presented for a scientific degree of candidate of physical-mathematical sciences on speciality 01.04.07- physics of condensed state

Key words: functional group, radiation background, spectroscopy, energy, spin lable, radical, rotational mobility.

In his synopsis the author substantiates the actuality of research, the level of scientific elaborateness of the theme, goal and scientific tasks, scientific novelty, scientific-practical significance of research and a brief basic content of the work.

A paper includes the influence of radiation background, altitude over the sea level and preliminary chemical processing over vibrational and rotational mobility of the functional groups composing molecules of plants, an energy of intermolecular interaction of hydrogen bound, relative quantity of the functional groups, concentration of the paramagnetic centers, correlation time, quantity of the spin lables entered into the plants molecules, activation energy and mechanical properties of the plants.

The content of the work is composed of introduction, four chapters divided into the paragraphs, conclusion and a list of references. The dissertation is grounded on the experimental spectroscopy methods and spin lables which allow to determine an impact of the external factors on the structure and properties of natural compounds.

Основное содержание диссертации изложено в следующих публикациях:
Статьи, опубликованные в научных журналах, рекомендованных ВАК при Президенте Республики Таджикистан

1. **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 // Доклады АН Республики Таджикистан, 2014.-Т. 57.- №1.- С. 32-36.
2. **Умаров, Н.** Влияние экологических факторов на молекулярное строение корней донника лекарственного (*Melilotus officinalis* (L.) Pall) / **Н. Умаров**, С.Ш. Давлатмамадова, Т. Шукуров, А. Усмонов, Р. Марупов // там же, 2014.-Т. 57.- №3.- С. 215-219.
3. Юсупов, И.Х. Исследование молекулярной структуры растения донник лекарственный (*Melilotus officinalis* L.) методом спиновых меток / И.Х. Юсупов, А.Д. Бахдавлатов, Т. Алидодов, **Н. Умаров**, Р. Марупов // Доклады АН Республики Таджикистан, 2015.- Т.58.- №4.- С. 309-315.
4. Юсупов, И.Х. ЭПР-спектроскопических свойств листьев репейника (*Arctium tomentosum* Mill.) в зависимости от радиационного фона местности / И.Х. Юсупов, **Н.Н. Умаров**, Р. Марупов // Доклады АН Республики Таджикистан, 2015.- Т.- 58.- № 9.- С. 813-818.
5. Юсупов, И.Х. Исследование конформационной подвижности в структуре лекарственного растения репейника (*Arctium tomentosum* Mill.) методом спиновых меток / И.Х. Юсупов, **Н. Н. Умаров**, Р. Марупов // Доклады АН Республики Таджикистан, 2016.-Т.59.-№9-10.-С.392-398.
6. **Умаров, Н.Н.** Исследования влияния дозы радиационного фона на спектральные характеристики лекарственного донника (*Melilotus officinoalis* L.) методом ИК- и ЭПР- спектроскопии // **Н. Н. Умаров**, Т. Шукуров, И.Х. Юсупов, Р. Марупов // // Учёные записки ХГУ, 2016. -№4 (39).- С.52-60.
7. Юсупов, И.Х. Молекулярно-динамические и физико-механические характеристики лекарственного репейника / И.Х. Юсупов, **Н.Н. Умаров**, Р. Марупов // ДАН РТ.-2017.- Т.60.-№5-6. С.230-235.
8. Юсупов, И.Х. Исследование радиационной зависимости молекулярно-динамические и физико-механические характеристик лекарственного репейника методом спиновых меток / И.Х. Юсупов, **Н.Н. Умаров**, Р. Марупов // Вестник Таджикского национального университета. Серия естественных наук, 2017.- №1/4. С. 117-121.

Статьи, опубликованные в материалах конференции

9. Исследование лекарственного растения донника произрастающего в северном Таджикистане / **Н. Умаров**, А. Усмонов, Т. Шукуров, С.Ш. Давлатмамадова // Материалы международной конференции по физике конденсированного состояния. Душанбе, 2013.- С.193-196.
10. **Умаров, Н.** Исследование природы водородных связей «ланцетьевого подорожника» (*Plantago lanceolata. L*) в зависимости от экологии и уровня радиоактивности место произрастания методом ИК спектроскопии / **Н. Умаров**, А. Усмонов, Т. Шукуров // Вестник Таджикского национального университета. Серия естественных наук, 2014.- 1/4(153) С. 208-213.
11. Усмонов, А. Исследование влияния радиационных излучений и экологии местности на спектроскопические характеристики лекарственного растения полыни метельчатой методом ИК-спектроскопии / А. Усмонов, Т. Шукуров, **Н. Умаров** // Материалы международной научно-практической конференции. «Современные проблемы математических и естественных наук в мире». Казань, 2015.- Вып. 2.- С. 38-43.
12. **Умаров, Н.** Исследование влияния экологических и радиационных факторов на природу водородных связей стеблей и листьев ланцетового подорожника лекарственного (*Plantago lanceolata.L*) / **Н. Умаров**, А.Усмонов, Т. Шукуров //Материалы республиканской конференции. «Проблемы современной физики».-Худжанд.-2015.- С.199-200.
13. Усмонов, А. Исследование природы водородных связей корней подорожника ланцетный в зависимости от места произрастания методом ИК-спектроскопии/ А.Усмонов, **Н. Умаров**, Т. П. Шукуров// Материалы IV - международной конференции. «Современной проблемы физики».- Душанбе.-2015.- С.80-83.
14. **Умаров, Н.Н.** ИК-спектроскопическое исследование влияния радиоактивного фона местности на спектральные свойства лекарственного растения гулявника (*Sisymbrium officinale Scop.*)/ **Н.Н. Умаров**, А. Усмонов, Т.П. Шукуров //Материалы республиканской научной конференции «Современные проблемы физики конденсированного состояния».- Душанбе.- 2015.- С.77-80.
15. **Умаров, Н.Н.** Исследования спектральных характеристик листьев донника лекарственного (*Melilotus officinalis (L.)*) методом ИК-спектроскопии / **Н.Н. Умаров**., А Усмонов, Т. П. Шукуров//Учёные записки ХГУ.- 2015.- №2.-С.36-44.
16. **Умаров, Н.Н.** Исследование влияния экологии, местопроизрастания и радиоактивного фона местности на оптические характеристики тростника (*Phragmites*) методом ИК-спектроскопии/ **Н.Н. Умаров**., А Усмонов, Т. П. Шукуров//Учёные записки ХГУ.- 2015.- №3.-С.46-52.

17. **Умаров, Н.Н.** Влияния дозы радиации и места произрастания на формирование водородной связи лекарственного репейника (*Arctium tomentosum* Mill.) / **Н.Н. Умаров**, Т. Шукуров, А. Усмонов // v-международной конференции «Современные проблемы физики».- Душанбе.-2016.- С.108-110.
18. **Умаров, Н.Н.** Влияние экологических условий места произрастания на ЭПР-спектроскопические свойства подорожника ланцетового (*Plantago lanceolata* L.)/ **Н.Н. Умаров**, И.Х. Юсупов // там же .- С. 110-112.
19. Исследование влияния различных доз радиационного фона на спектральные характеристики лекарственного донника методом ИК-и ЭПР-спектроскопии/ Т.Шукуров, И.Х. Юсупов, **Н.Н. Умаров**, Р. Марупов // там же.- С.117-119.
20. Юсупов, И.Х. Исследование конформационной подвижности в структуре лекарственного растения репейника (*Arctium tomentosum* Mill.) методом спиновых меток/И.Х. Юсупов, **Н.Н. Умаров**, Р. Марупов//там же- С.124.
21. **Умаров, Н.Н.** Исследование влияния радиационного фона местопроизрастания на спектральные характеристики лекарственного растения репейника (*Arctium tomentosum* Mill.) методом ИК- спектроскопии / **Н.Н. Умаров**, А. Усмонов, Т.Шукуров // Мат. межд. конф. «Проблемы разработки месторождений полезных ископаемых».-Бустон.-2016.- С.163-166.
22. Юсупов, И.Х. Исследование влияния радиационного фона на спектральные характеристики лекарственного донника (*Melilotus officinoalis* (L.) методом ЭПР-спектроскопии / И.Х. Юсупов **Н.Н. Умаров**, Р. Марупов // Межд. научно-практической конф. «Новейшие достижения и успехи развития естественных и математических наук». - Краснодар.-2016.-С.23-26.
23. **Умаров, Н.Н.** Влияние радиационного фона места произрастания на спектральные характеристики репейника (*Arctium tomentosum* Mill) / **Умаров, Н.Н.**, Шукуров Т, Марупов Р. // Международной конференции «Перспективы развития физической науки».- Душанбе .- 2017.- С.72-74.
24. **Умаров, Н.Н.** Влияние условий произрастания на прочность листьев репейника (*Arctium tomentosum* Mill) / **Н.Н. Умаров.** И.Х. Юсупов, Р. Марупов //Международной конференции «Перспективы развития физической науки».- Душанбе .- 2017.- С.69-72.
25. Юсупов, И.Х. Влияние пестицидов на вращательную подвижность спин-меченных образцов подорожника / И.Х. Юсупов, **Умаров Н.Н.**, Марупов Р.// Международной конференции «Актуальные проблемы современной физики».- Душанбе .- 2018.- С.153-155.

Поступило в печать 01.09.2018 г.
Подписано в печать 10.09.2018 г. Бумага белая.
Гарнитура литературная. Печать цифровая. Усл.печ.л. 1,75.
Тираж 100 экз. Заказ №129.

Отпечатано в типографии «Нури маърифат».
735700 г. Худжанд, 20 квартал, учебный корпус №3.