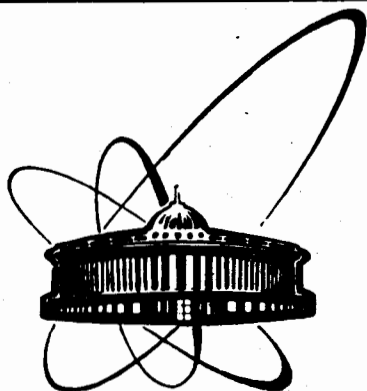


90-145



ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

Б-903

P19-90-145

С.Ю.Будяшова, В.И.Данилов

О ВОЗДЕЙСТВИИ МАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ  
НА БИОЛОГИЧЕСКИЕ ОБЪЕКТЫ  
Зеемановские уровни примесного атома  
в геомагнитном поле

Направлено в журнал "Биофизика"

1990

В предыдущей работе <sup>1/</sup> рассматривалось воздействие магнитного поля (МП) на биологические объекты. Это воздействие основывалось на взаимодействии вихревого электрического поля (ВЭП), индуцированного изменением МП во времени, со "связанными зарядами" (электроны, дырки) при их периодическом движении вокруг ядер примесных атомов.

Было показано, что под действием МП, в том числе и геомагнитного поля (ГМП), возможны вынужденные энергетические переходы из возбужденных состояний  $2P_{1/2}$  и  $2P_{3/2}$  в метастабильное состояние  $2S_{1/2}$ . Такие переходы с одного зеемановского уровня или подуровня на другой могут происходить при выполнении следующих условий:

$$\pm \mu_B \Delta B_{рез.} \sqrt{5} = W_i - W_k, \quad (1)$$

где  $i$  и  $k$  характеризуют набор квантовых чисел, определяющих положение энергетических уровней примесного атома в ГМП,  $\mu_B$  — магнетон Бора,  $\Delta B_{рез.}$  — резонансный перепад индукции МП за время  $\Delta t$ , которое ограничено неравенством

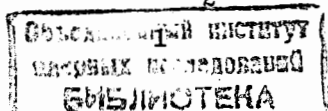
$$\Delta t = \frac{\Delta B}{(\partial B / \partial t)} < \tau_{n=2} \geq \hbar / \Gamma_{n=2}, \quad (2)$$

здесь  $\partial B / \partial t$  — скорость изменения индукции,  $n=2$  — главное квантовое число,  $\tau_{n=2}$  и  $\Gamma_{n=2}$  — время жизни и энергетическая ширина уровня примесного атома в  $2P$ -состоянии при ограничении на диэлектрическую постоянную среды  $\epsilon < 25$ .

Наличие примесей, роль которых могут выполнять различные микроэлементы, в квазикристаллических структурах живых клеток приводит к тому, что в зоне запрета будет располагаться водородоподобный энергетический спектр.

Этот спектр уровней энергии водородоподобного атома с зарядом ядра  $Z$  при учете спин-орбитального взаимодействия описывается следующим образом <sup>2/</sup>:

$$W = - \frac{Z^2 \cdot W_{иониз.}}{n^2} \left( 1 + \frac{(\alpha Z)^2}{n} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right), \quad (3)$$



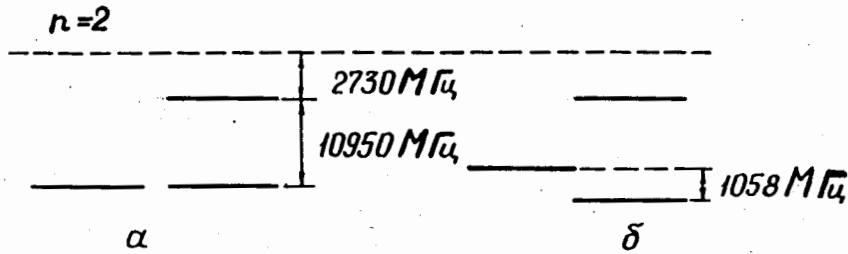


Рис. 1. Расположение энергетических уровней: а) без учета лэмбовского сдвига; б) с учетом лэмбовского сдвига для атома водорода при  $n = 2$ .

где  $W_{\text{иониз.}}$  — энергия ионизации атома водорода,  $n$  — главное квантовое число,  $j$  — квантовое число, характеризующее полный момент.

Первый член в (3) при  $Z=1$  равен собственному значению энергии для атома водорода, а второй член дает представление о тонкой структуре его энергетических уровней.

Нас в последующем будет интересовать уровень с  $n=2$ , так как он характеризует наиболее устойчивое возбужденное состояние. В этом случае разность энергий уровней  $\Delta W$  между состояниями как  $2P_{1/2}$ , так и  $2S_{1/2}$  и состоянием  $2P_{3/2}$  составляет

$$\Delta W = \alpha^2 \frac{W_{\text{иониз.}}}{16} = 0,33 \cdot 10^{-5} W_{\text{иониз.}} = 0,385 \text{ см}^{-1} = 1,1 \cdot 10^4 \text{ МГц} \approx 4,5 \cdot 10^{-5} \text{ эВ}, \quad (4)$$

где  $W_{\text{иониз.}} = 2,1 \cdot 10^{-18}$  Дж (13,6 эВ).

В этом рассмотрении состояния  $2S_{1/2}$  и  $2P_{1/2}$  не отличаются друг от друга, схематическое изображение энергетических уровней возбужденного состояния приведено на рис. 1а.

Однако как экспериментальное наблюдение, так и теория показывают, что разность энергии между  $2S_{1/2}$  — и  $2P_{1/2}$  — состояниями не равна в точности нулю.

На рис. 1б схематически показано расположение энергетических уровней при учете лэмбовского сдвига для атома водорода при  $n=2$ .

В дальнейшем нас будет интересовать зеемановское расщепление уровней атома водорода в ГМП при  $B_0 < 10^{-4}$  Тл, при  $n=2$  для  $j = 3/2, 1/2$  и, соответственно,  $m_j = \pm 3/2, \pm 1/2$ .

Тогда формулы для различных компонент Р-состояния атома в МП имеют следующий вид <sup>/2/</sup>:

$$W(2P_{3/2}, m_j = \pm \frac{3}{2}, B_0) = \frac{4}{3} \mu_B B_0 m_j + \frac{1}{2} A, \quad (5)$$

$$W(2P_{3/2}, m_j = \pm \frac{1}{2}, B_0) = (\mu_B B_0 m_j - \frac{1}{4} A) + [(\mu_B B_0 m_j - \frac{1}{4} A)^2 + \frac{2}{9} \mu_B^2 B_0^2 - (\frac{4}{3} \mu_B B_0 m_j + \frac{1}{2} A)(\frac{2}{3} \mu_B B_0 m_j - A)]^{1/2}, \quad (6)$$

$$W(2P_{1/2}, m_j = \pm \frac{1}{2}, B_0) = (\mu_B B_0 m_j - \frac{1}{4} A) - [(\mu_B B_0 m_j - \frac{1}{4} A)^2 + \frac{2}{9} \mu_B^2 B_0^2 - (\frac{4}{3} \mu_B B_0 m_j + \frac{1}{2} A)(\frac{2}{3} \mu_B B_0 m_j - A)]^{1/2}. \quad (7)$$

В формулах (5), (6), (7)  $\mu_B$  — магнетон Бора,  $A = \frac{2}{3} \frac{\alpha^2 W_{\text{иониз.}}}{16}$  — постоянная тонкой структуры 2P-состояния. Для состояния  $2S_{1/2}$  ( $j=1/2, m_j = m_s = \pm 1/2$ ) расщепление уровней в магнитном поле имеет вид <sup>/2/</sup>

$$W(2S_{1/2}, m_j = m_s = \pm \frac{1}{2}, B_0) = 2 \mu_B B_0 m_j - A. \quad (8)$$

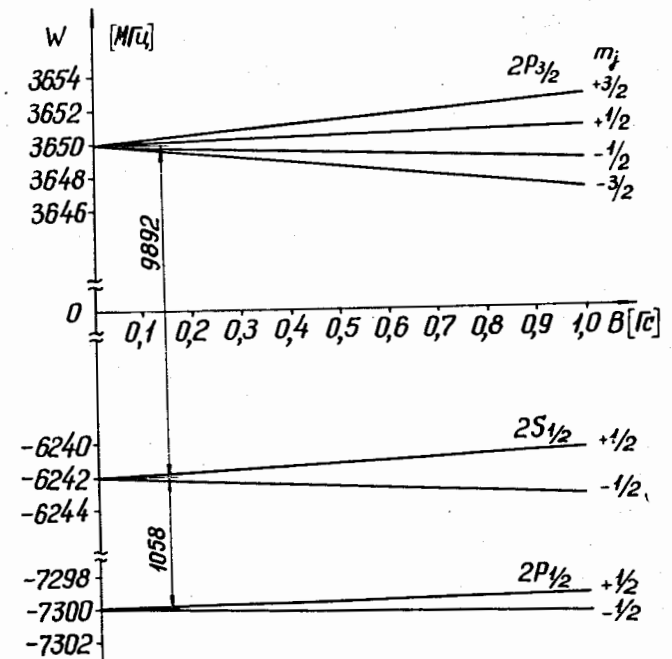


Рис. 2. Зависимость расщепления уровней энергии атома водорода от индукции магнитного поля при  $n=2$  и  $\epsilon=1$ .

Расщепление уровней в МП с учетом центра тяжести спектра для водорода при  $n=2$  показано на рис. 2. Между состояниями  $2S_{1/2}$  и  $2P_{1/2}$  энергетический сдвиг составляет 1058 МГц (лэмбовский сдвиг).

Как следует из представленного расположения энергетических зеемановских подуровней, ни о каком взаимодействии атома водорода при  $n=2$  с ГМП не может быть и речи, ибо для осуществления энергетических переходов (не говоря уже об их допустимости и возможности) требуются перепады полей  $\Delta B \sim 0,1 - 1$  Тл.

Однако воздействие ГМП на атомном уровне возможно, если предположить, что такими атомами являются примесные атомы, время жизни которых велико, а энергия ионизации близка к энергии теплового движения, то есть  $W_{\text{иониз.}} \geq kT \geq 2,5 \cdot 10^{-2}$  эВ.

В таблице приведены характерные параметры атома водорода ( $\epsilon = 1$ )<sup>1/2</sup> и дано сравнение с водородоподобными примесными атомами при диэлектрической постоянной  $\epsilon > 1$ . Эти данные могут быть использованы для качественных и грубых количественных оценок.

Постоянную тонкой структуры  $2P$ -состояния определим как

$$A = \frac{2}{3} \frac{\alpha^2 W_{\text{иониз.}}}{16\epsilon^4}, \quad (9)$$

так как  $\alpha_\epsilon = \alpha/\epsilon$ ,  $W_{\text{иониз.}} = W_{\text{иониз.}}/\epsilon^2$  (см. таблицу).

На рисунках 3-5 представлено при учете спин-орбитального взаимодействия расщепление энергетических уровней водородоподобного

Таблица

Параметры	$\epsilon = 1$	$\epsilon > 1$
Постоянная тонкой структуры	$\alpha = e^2/\hbar c$	$\alpha/\epsilon$
"Радиус" атома	$r_B \sim \hbar/a m c$	$r_B \epsilon$
Импульс	$p = \hbar/r_B$	$p/\epsilon$
Энергия уровней	$W = \alpha^2 m c^2$	$W/\epsilon^2$
Полная вероятность распада возбужденного состояния	$\beta \sim \alpha^5 m c/\hbar$	$\beta/\epsilon^5$
Среднее время жизни состояния	$t = 1/\beta$	$t\epsilon^5$
Радиационная ширина уровня	$\Gamma \sim \alpha^5 W$	$\Gamma/\epsilon^7$

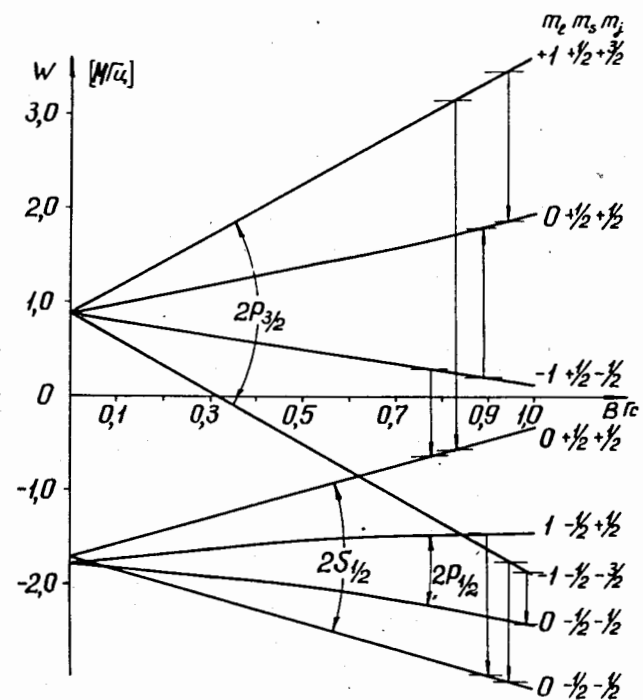


Рис. 3. Зависимость расщеплений уровней энергии атома водорода от индукции магнитного поля при  $n=2$  и  $\epsilon=8$

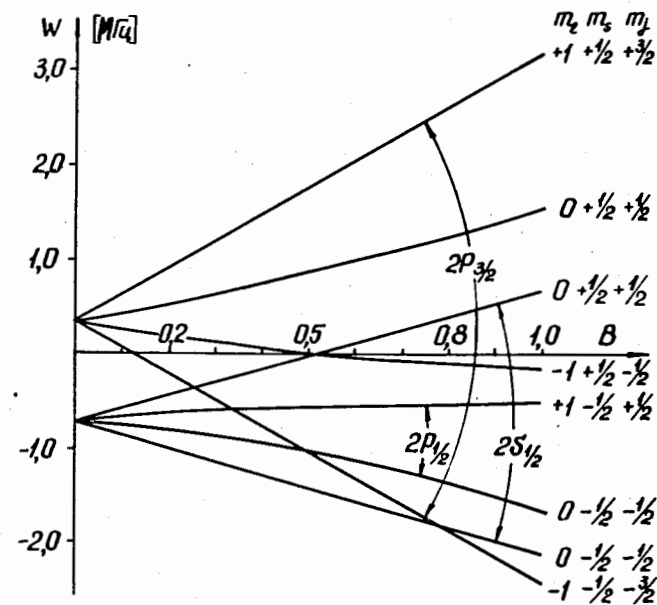


Рис. 4. Зависимость расщепления уровней энергии атома водорода от индукции магнитного поля при  $n=2$  и  $\epsilon=10$ .

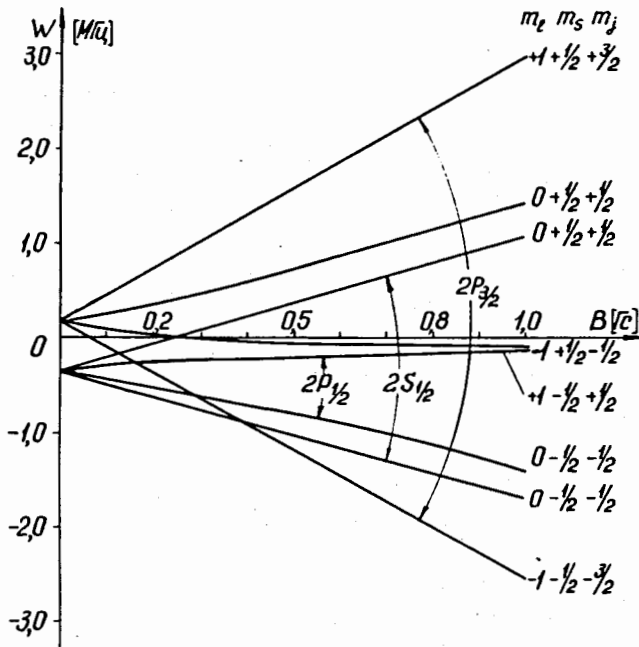


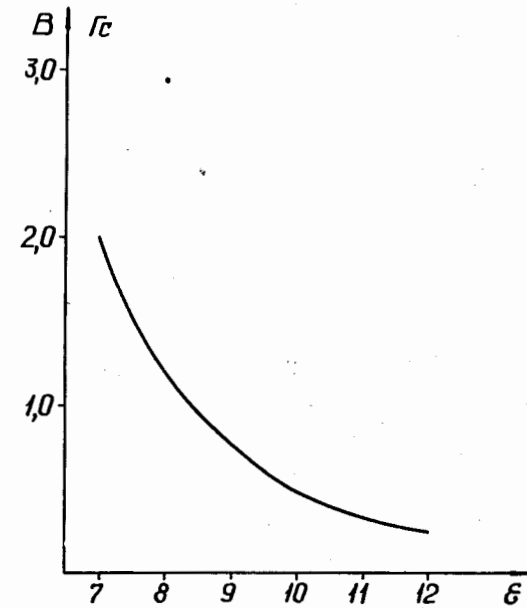
Рис. 5. Зависимость расщепления уровней энергии атома водорода от индукции магнитного поля при  $n = 2$  и  $\epsilon = 12$ .

атома при  $n = 2$  и диэлектрической постоянной  $\epsilon = 8, 10, 12$  соответственно в зависимости от индукции постоянного магнитного поля Земли  $B_0 \approx 1$  Гс.

Так, на рис. 3 и рис. 4 видны точки пересечения энергетических уровней, в окрестности которых в соответствии с правилами отбора и временами жизни уровней возможны резонансы и, таким образом, осуществимо взаимодействие ГМП с биологическими объектами. Точка пересечения уровня  $2P_{3/2}$  ( $m_l = -1, m_s = -1/2, m_j = -3/2$ ) с уровнем  $2S_{1/2}$  ( $m_l = 0, m_s = +1/2, m_j = +1/2$ ) при  $B_0 \approx 0,6 \cdot 10^{-4}$  Тл (рис. 3) указывает на квадрупольный резонанс, а расстояние между уровнями  $2S_{1/2}$  ( $m_l = 0, m_s = +1/2, m_j = +1/2$ ) и  $2P_{3/2}$  ( $m_l = -1, m_s = +1/2, m_j = -1/2$ ) свидетельствует о том, что при небольшом превышении  $\epsilon = 8$  при поле  $B \approx 10^{-4}$  Тл между ними становится возможным магнитодипольный резонансный переход.

При  $\epsilon = 12$  (рис. 5) видны участки, на которых энергетические уровни с одинаковыми значениями квантовых чисел для состояний  $2P_{3/2}$  ( $m_l = 0, m_s = +1/2, m_j = +1/2$ ),  $2S_{1/2}$  ( $m_l = 0, m_s = +1/2, m_j = +1/2$ ) и  $2P_{1/2}$  ( $m_l = 0, m_s = -1/2, m_j = -1/2$ ),  $2S_{1/2}$  ( $m_l = 0, m_s = -1/2, m_j = -1/2$ ) не пересекаются и становятся параллельными, что является характерным признаком того, что зеемановское расщепление энергетических уровней примесных атомов следует рассматривать в ГМП, как в "сильном" МП.

Рис. 6. Точка пересечения энергетических уровней разрешенного перехода из состояния  $2P_{3/2}$  ( $m_l = -1, m_s = +1/2, m_j = -1/2$ ) в состояние  $2S_{1/2}$  ( $m_l = 0, m_s = +1/2, m_j = +1/2$ ) атома водорода.



В этом случае моменты количества движения: орбитальный  $\vec{l}$  и спиновый  $\vec{s}$ , прецессируют в поле каждый в отдельности, а квантовое число  $m_l$  становится "хорошим" квантовым числом, свидетельствующим о выделенности в пространстве электронной орбиты относительно направления поля  $\vec{B}_0$ .

На рис. 6 представлена кривая при равенстве энергий уровней, для которых разрешен магнитодипольный переход ( $\Delta m_l = -1, \Delta m_s = 0$ ) из состояния  $2P_{3/2}$  ( $m_l = -1, m_s = +1/2, m_j = -1/2$ ) в состояние  $2S_{1/2}$  ( $m_l = 0, m_s = +1/2, m_j = +1/2$ ) в зависимости от  $B_0$  и диэлектрической постоянной  $\epsilon$ .

Для расчета возможных магнитных дипольных и магнитных квадрупольных переходов соотношения (5)-(8) перепишем в более удобном для расчетов виде применительно к "сильному" ГМП. Ограничив точность расчетов до квадратичных членов  $(A_\epsilon / \mu_B B_0)^2 \approx 0,1$ , получим

$$W(2P_{3/2}, m_j = +\frac{3}{2}) = 2\mu_B B_0 + \frac{1}{2} A_\epsilon, \quad (10)$$

$$W(2P_{3/2}, m_j = -\frac{3}{2}) = -2\mu_B B_0 + \frac{1}{2} A_\epsilon, \quad (11)$$

$$W(2P_{3/2}, m_j = +\frac{1}{2}) \approx \mu_B B_0 + \frac{1}{4} A_\epsilon + \frac{5}{8} \frac{A_\epsilon^2}{\mu_B B_0 + A_\epsilon}, \quad (12)$$

$$W(2P_{3/2}, m_j = -\frac{1}{2}) \approx \frac{3}{4} A_\epsilon + \frac{5}{8} \frac{A_\epsilon^2}{\mu_B B_0 + A_\epsilon}, \quad (13)$$

$$W(2P_{1/2}, m_j = +\frac{1}{2}) \approx -\frac{3}{4} A_\epsilon - \frac{5}{8} \frac{A_\epsilon^2}{\mu_B B_0 + A_\epsilon}, \quad (14)$$

$$W(2P_{1/2}, m_j = -\frac{1}{2}) = -\mu_B B_0 + \frac{1}{4} A_\epsilon - \frac{5}{8} \frac{A_\epsilon^2}{\mu_B B_0 - A_\epsilon}, \quad (15)$$

$$W(2S_{1/2}, m_j = +\frac{1}{2}) = \mu_B B_0 - A_\epsilon, \quad (16)$$

$$W(2S_{1/2}, m_j = -\frac{1}{2}) = -\mu_B B_0 - A_\epsilon. \quad (17)$$

Разность энергий уровней с одинаковыми наборами квантовых чисел имеет следующий вид:

$$\Delta W_{2P_{3/2} - 2S_{1/2}} \approx \frac{5}{4} A_\epsilon + \frac{5}{8} \frac{A_\epsilon^2}{A_\epsilon + \mu_B B_0}, \quad (18)$$

$$\Delta W_{2P_{1/2} - 2S_{1/2}} \approx \frac{5}{4} A_\epsilon - \frac{5}{8} \frac{A_\epsilon^2}{A_\epsilon + \mu_B B_0}. \quad (19)$$

Из (18) и (19) следует, что при  $\mu_B B_0 \rightarrow \infty$

$$\Delta W_{2P_{3/2} - 2S_{1/2}} = W_{2P_{3/2}}(m_j = -\frac{1}{2}) - W_{2S_{1/2}}(m_j = +\frac{1}{2}) \approx +\frac{5}{4} A_\epsilon. \quad (20)$$

Энергетический зазор между состояниями  $2P_{1/2}$  и  $2P_{3/2}$

$$\Delta W_{2P_{3/2} - 2P_{1/2}} = W_{2P_{3/2}}(m_j = -\frac{1}{2}) - W_{2P_{1/2}}(m_j = +\frac{1}{2}) \approx +\frac{5}{4} \frac{A_\epsilon^2}{\mu_B B_0} \quad (21)$$

при увеличении поля  $B_0$  стремится к нулю.

Наличие постоянного по величине энергетического зазора между состояниями  $2P_{1/2}$  и  $2S_{1/2}$  в соответствии с (20) представляет физический интерес, ибо в этих состояниях возможны вынужденные переходы с одного энергетического уровня на другой не с помощью магнитного поля, а другим способом, например изменением во времени температуры, обусловленной конформационными колебаниями поверхности и объема живых клеток.

Весьма важно иметь представление о временах жизни водородоподобных примесных атомов.

Возможность образования примесного центра со своим временем жизни определяется в общем случае локализацией электрона на акцепторном или донорном уровнях. В частности, если этот процесс происходит за счет тепловой энергии решетки, то он имеет флуктуационный характер.

В этом случае его вероятность, отнесенная к единице времени, равна <sup>4/</sup>

$$p = p_0 / (e^{W_{a,g} / kT} - 1), \quad (22)$$

где  $W_a$  или  $g$  определяется глубиной локального примесного уровня относительно границ валентной зоны или зоны проводимости.

Соответствующее время жизни дырок на акцепторном уровне или электронов на донорном уровне при температуре "Т" можно оценить из выражения

$$t = 1/p = t_\epsilon (e^{W_{a,g} / kT} - 1), \quad (23)$$

где  $t_\epsilon = t(\epsilon)$  в соответствии с таблицей и определяет время жизни одиночного примесного атома в среде с диэлектрической постоянной  $\epsilon$ .

С учетом этого оценку времени жизни примесного атома можно сделать с помощью следующего отношения:

$$t_\epsilon = t_\epsilon^5 (e^{W_{a,g} / kT} - 1). \quad (24)$$

Согласно проведенным исследованиям <sup>5/</sup> для образования свободных носителей заряда в ДНК необходима активация около 0,20 эВ. В то же время расчеты энергетических зон ДНК, рассматриваемой как чистый полупроводник, дают ширину запрещенной зоны около 4 эВ. Это дает возможность полагать, что ДНК обладает свойствами примесного полупроводника.

Так, по этому вопросу в работе <sup>5/</sup> говорится: "...по-видимому, надо принять, что в ДНК содержатся примеси, а энергетические уровни электронов этих примесей располагаются между валентной зоной и зоной проводимости". И далее: "Примесные уровни, по всей вероятности, обусловлены содержащимся в ДНК структурированным железом. Наличие этих примесей в ДНК доказано многими авторами с помощью исследований методом ЭПР".

Учитывая, что структура молекул ДНК является наиболее устойчивой к любому типу возмущающих воздействий, можно положить

для последующих оценок при энергии ионизации  $W_{a,g} \approx 0,2$  эВ, что ниже значение диэлектрической постоянной  $\epsilon = 8$ .

Для получения ограничений на численные значения  $\epsilon$  и  $W_{a,g}$  попытаемся оценить заселенности уровней при  $n = 1$  и  $n = 2$ . Для заселенности уровней, когда примесные атомы находятся на нижнем ( $n = 1$ ) и следующем ( $n = 2$ ) уровне, в условиях термодинамического равновесия в соответствии со статистической механикой отношение концентрации атомов на двух любых уровнях определяется соотношением

$$N_2/N_1 = \exp(-\Delta W/kT), \quad (25)$$

где  $\Delta W$  — энергетический зазор между двумя состояниями.

Применительно к примесным центрам для  $W_{a,g} \approx 0,20$  эВ при  $\Delta W = 0,15$  эВ  $N_2/N_1 \approx 2 \cdot 10^{-3}$ .

Таким образом, при  $n = 2$  в возбужденном состоянии может находиться в зависимости от  $\epsilon < 25$  доля примесных атомов от нескольких десятых до единиц процентов от их общего числа. При взаимодействии МП с таким большим количеством атомов ( $10^9 - 10^{10}$ ) из-за большого времени жизни  $2S_{1/2}$ -состояния возможно накопление энергии (см. /6/) с последующим переходом в состояние  $1S_{1/2}$ .

В целом концепция примесных атомов в живых клетках как рецепторов МП позволяет сделать следующие выводы:

1. При диэлектрической постоянной  $\epsilon = 8$  в постоянном ГМП при  $B_0 > 0,2$  Гс расщепление зеемановских энергетических уровней можно рассматривать, как в "сильном" МП. При этом орбитальное квантовое число  $m_l = \pm 1$  становится "хорошим" числом. С физической точки зрения это означает выделенность орбиты электрона примесного атома в плоскости, перпендикулярной оси квантования, по направлению векторов индукции ГМП.

2. При  $\epsilon > 8$  имеет место пересечение зеемановских энергетических уровней, когда разность их энергий в состояниях  $2P$  и  $2S$  обращается в нуль. В окрестности этих точек возможны магнитодипольные переходы под действием вариаций ГМП с амплитудой  $\leq 3 \cdot 10^{-6}$  Тл.

Другие магнитодипольные переходы возможны в следующих случаях:

$$2P_{3/2} (m_l = -1, m_s = +\frac{1}{2}, m_j = -\frac{1}{2}) \rightarrow 2S_{1/2} (m_l = 0, m_s = +\frac{1}{2}, m_j = -\frac{1}{2}),$$

$$2P_{3/2} (m_l = -1, m_s = -\frac{1}{2}, m_j = -\frac{3}{2}) \rightarrow 2S_{1/2} (m_l = 0, m_s = -\frac{1}{2}, m_j = -\frac{1}{2}),$$

$$2P_{1/2} (m_l = +1, m_s = -\frac{1}{2}, m_j = +\frac{1}{2}) \rightarrow 2S_{1/2} (m_l = 0, m_s = -\frac{1}{2}, m_j = -\frac{1}{2})$$

3. Определение минимального значения  $\Delta V_{\text{мин}}$ , при котором осуществляется взаимодействие МП с биологическими объектами, имеет большое биофизическое значение и может рассматриваться наряду с экспериментальным определением времени жизни  $2P$ -и  $2S$ -состояний примесных атомов как основа для построения моделей возможного управления во времени процессами, которые могут происходить в живых клетках и их системах.

4. Несмотря на то, что полученные в работе результаты носят качественный характер, они могут служить основой для выбора параметров МП, которые будут наиболее эффективными при решении задач, возникающих в магнитобиологии.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Данилов В.И. — Препринт ОИЯИ Р19-90-137, Дубна, 1990.
2. Бете Г., Солпитер Э. — Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. М.: Гос. изд. физ.-мат. литературы, 1960, с.133, 324, 447.
3. Собельман И.И. — Введение в теорию атомных спектров. М.: Наука, 1977, с.204.
4. Адирович Э.И. — Некоторые вопросы теории люминесценции кристаллов. М.: Наука, 1956, с.124.
5. Ладик Я. — Квантовая биохимия для химиков и биологов. М.: Мир, 1975, с.133, 141.
6. Данилов В.И., Паршинцев В.В., Туркин В.В. — Биофизика, 1984, т.29, №2, с.320.

Рукопись поступила в издательский отдел  
26 февраля 1990 года.