

## Спиновые технологии в повышении эффективности сельскохозяйственного растениеводства\*

Краснобрыжев В.Г.

Киев, тел.: +38(097) 560 9593, +38(044) 405 96 75.

E-mail: vkentron@gmail.com

Одно из кардинальных направлений спиновых технологий связано с их применением в сельском хозяйстве, с целью повышения урожайности сельскохозяйственных культур. Известно, что будущий урожай закладывается в период вегетации растений, активность которого зависит от скорости протекания биохимических реакций, агрохимического фона и температурных режимов.

Цель, достигаемая применением спиновых технологий - это повышение скорости биохимических реакций в вегетационный период, и соответственно, ускорение развития растений.

Скорость биохимической реакции может быть определена из следующего уравнения [1, 2]

$$K = (kT/2\pi\hbar) \cdot \exp(F^*/F) \cdot \exp(-\Delta H/kT) \quad (1)$$

где  $k$  - постоянная Больцмана;  $T$  - температура;  $\hbar$  - постоянная Планка;  $F^*$  – отнесенная к единице объема статистическая сумма синглетных спиновых состояний;  $F$  – отнесенная к единице объема статистическая сумма триплетных спиновых состояний;  $\Delta H$  - энтальпия активации.

Любая химическая реакция связана с перемещениями ядер атомов, из которых состоят молекулы реагентов, и с перестройкой их электронного окружения. Потенциальная энергия системы атомов определяется расположением электронов и ядер. Поскольку распределение электронов задано взаимным расположением ядер, то любому такому расположению соответствует единственное значение потенциальной энергии системы. Любой ядерной конфигурации будет соответствовать точка на поверхности потенциальной энергии. А переход молекулы с одной поверхности потенциальной энергии на другую связан с изменением электронного и/или *спинового состояния молекулы* [3, 4].

В биохимических реакциях большое значение имеет не только молекулярная, но и спиновая динамика, играющая в элементарных химических актах двоякую роль. С одной стороны, она активно влияет на механизм и кинетику реакции. С другой стороны, спиновая динамика очень чутко реагирует на молекулярную динамику элементарного химического акта.

---

\* Опубликовано только в электронной версии сборника.

Из спиновой химии известно [5], что химическими реакциями управляют два фундаментальных фактора - энергия и спин. При этом запрет химических реакций по спину непреодолим. Если в химической реакции сталкивающиеся молекулы имеют антипараллельные спины (синглетное состояние), образование химической связи происходит. Если взаимодействующие молекулы имеют параллельные спины (триплетное состояние), то молекула может образоваться только в триплетном, возбужденном состоянии. Поскольку такие состояния обычно лежат высоко по энергии, в подавляющем большинстве случаев химические реакции в триплетной паре невозможны.

Согласно правилу Вигнера, статистический вес встреч двух молекул в синглетном состоянии равен  $1/4$ , а статистический вес встреч в триплетном состоянии равен  $3/4$ . В подавляющем большинстве случаев основное состояние продуктов химической реакции является синглетным, и поэтому следует ожидать, что только четверть встреч реагирующих молекул могут дать продукт реакции. Такие процессы, как правило, протекают безактивационно, т.е. энергия активации реакции близка к нулю. Образующаяся молекула находится в основном электронном состоянии. Реакция протекает быстро и эффективно, если молекула имеет возможность отдать энергию, выделяющуюся при образовании связи, другим частицам или перераспределить ее между многими колебательными модами.

К особенностям спиновой динамики относится возможность когерентного контроля химических реакций [6, 7, 8]. В когерентных режимах можно ожидать увеличения выходов реакций, селективности процессов, самоочистки поверхностей от каталитических ядов и т.д. за счет увеличения статистического веса синглетных состояний встречающихся молекул до  $1/2$ . И эти ожидания подтвердились, особенно в химических осцилляторах с вынужденными, принудительными осцилляциями.

Но прежде чем обсудить возможность такого контроля, кратко суммируем, что такое когерентность в квантовой механике. Рассмотрим некоторую молекулярную систему. Оператор энергии этой системы обозначим через  $\hat{H}$ . Стационарные (собственные) состояния  $\psi_k$  и уровни энергии этих стационарных состояний  $E_k$  находятся из решения уравнения Шредингера

$$\hat{H}\psi_k = E_k \psi_k \quad (2)$$

Согласно квантовой механике система может находиться в состоянии линейной суперпозиции стационарных состояний

$$\psi = \sum_k c_k \psi_k \quad (3)$$

Измеряемой величиной является квадрат модуля волновой функции

$$|\psi|^2 = \sum_k |c_k|^2 |\psi_k|^2 + \sum_k \sum_n c_k^* c_n \psi_k^* \psi_n \quad (4)$$

Эта величина состоит из двух частей. Первое слагаемое в правой части отражает населенности  $|c_k|^2$  стационарных состояний  $\psi_k$  в линейной суперпозиции. Очень

интересным является второе слагаемое в правой части этого выражения. Оно показывает, что вклады разных стационарных состояний в наблюдаемую величину интерферируют. Это интерференционное слагаемое изменяется со временем согласно уравнению

$$|\Psi(t)|^2 = \sum_k |c_k|^2 |\Psi_k|^2 + \sum_k \sum_n c_n^* c_k \Psi_n^* \Psi_k \exp[-(E_k - E_n)t / \hbar] \quad (5)$$

Видно, что именно за счет перекрестных произведений стационарных состояний интерференционная картина изменяется со временем. Величины  $c_n^* c_k$  ( $n \neq k$ ) характеризуют когерентность состояния квантовой системы.

Эти общеизвестные положения квантовой механики непосредственно проектируются на реагирующие системы. Обозначим через  $\Psi_{\text{нач}}$  начальное состояние молекулярной системы (исходное состояние реагентов) и через  $\Psi_{\text{кон}}$  конечное состояние молекулярной системы (состояние продуктов реакции). Следует ожидать, что при движении вдоль координаты реакции (от состояния реагентов к состоянию продуктов реакции) молекулярная система будет проходить через суперпозицию состояний  $\Psi_{\text{нач}}$  и  $\Psi_{\text{кон}}$ . А это означает, что при движении вдоль координаты реакции, т.е. в ходе элементарного акта химической реакции важную роль может играть квантовая когерентность.

Как отмечалось выше, спиновая динамика активно влияет на механизм и кинетику реакций. При движении вдоль координаты реакции из начального в конечное состояние молекулярная система будет проходить через суперпозицию состояний, т.е. когерентность в химической реакции играет важную роль. Обратимся к работе [9]. Пусть в начальный момент времени,  $t = 0$ , система находится в состоянии **1** с энергией  $E_1$ , и пусть имеется состояние **2** с энергией  $E_2$ , равной  $E_1$ , т.е.  $E_2 = E_1$ . Предположим, что эти два состояния связаны некоторым взаимодействием с матричным элементом перехода, равным  $V$ . Обсудим вероятность  $p(t)$  найти систему в любой момент времени в состоянии **2**. Временная зависимость этой вероятности очень сильно зависит от когерентности. Если переход из начального состояния **1** в конечное состояние **2** происходит некогерентным образом, то со временем происходит выравнивание населенностей этих состояний, и после достижения  $p = 1/2$ , населенности этих состояний в дальнейшем сохраняют значение  $1/2$ . В случае когерентного движения искомая вероятность равна

$$P = \sin^2(Vt / \hbar). \quad (6)$$

Два обстоятельства в этом результате совершенно замечательные:

- а) эта вероятность осциллирует, т.е. она не изменяется монотонно, как это ожидается для некогерентного движения;
- б) эта вероятность в определенные моменты времени достигает значения 1. Когда при  $Vt / \hbar = \pi/4$  эта вероятность становится равной  $1/2$ , оба состояния оказываются равнозаселенными. Переход из начального состояния в конечное

продолжается как бы по инерции дальше, до полного перехода системы в состояние **2** и т.д. Этот пример показывает, что когерентность может играть очень важную роль в элементарных химических актах.

Как можно было бы реализовать то, что называется когерентным контролем реакции в данном примере? Предположим, что возбужденная молекула, из состояния **2**, может, например, диссоциировать. Наибольший выход продуктов распада получится в том случае, когда в результате когерентного движения система полностью оказывается в состоянии **2**, т.е. в момент времени, который удовлетворяет условию

$$Vt / \hbar = 1/2 (2n + 1) \pi, n = 0, 1, 2, \dots \quad (7)$$

Из этого примера видно, что можно оптимизировать химическое превращение, используя когерентный характер движения системы вдоль координаты реакции.

Вернемся к уравнению (1). Из него видно, что увеличить скорость биохимической реакции возможно за счет увеличения температуры и снижения энергии активации. Но так как эти величины температуры являются нормируемыми, единственной доступной для управления остается активационная энтропия  $S_a/k = F^*/F$ .

Перепишем уравнение (1) в следующем виде.

$$K = A \cdot \exp(F^*/F)$$

$$A = (kT/2\pi v \hbar) \cdot \exp(-\Delta H/kT)$$

Вычислим скорость биохимической реакции в условиях термодинамического равновесия со следующими спиновыми состояниями в единице объема, определяемых правилом Вигнера -  $F^* = 250000$ ;  $F = 750000$ :

$$K_1 = A \cdot \exp(250000/750000) = 1,39 A.$$

Для когерентного состояния реагентов  $F^* = 500000$ ;  $F = 500000$

$$K_2 = A \cdot \exp(500000/500000) = 2,73 A.$$

Как видим, скорость биохимической реакции увеличилась в два раза, при этом надо учитывать, что рассмотренный нами пример является идеальным.

Специфичность спиновых взаимодействий проявляется в передаче упорядоченной ориентации одной системы ядерных спинов другой и в самопроизвольном установлении при этом единой «средневзвешенной» ориентации различно (в том числе противоположно) направленных спинов. Ввиду направленного характера и возможности накопления ориентационного воздействия (в отличие от хаотических возмущений) оно может оказаться достаточным для упорядочивания не только микро, но и макросистем.

Это взаимодействие признается квантовой механикой, согласно которой главную роль в установлении спин-спинового равновесия играет некоторое особое (полевое) взаимодействие тождественных частиц. Оно согласуется с концепцией «А-полей» Р.

Утиямы [10], согласно которой каждому независимому параметру частицы  $a_i$ , удовлетворяющему закону сохранения, соответствует свое материальное поле  $A_i$ , через которое осуществляется взаимодействие между частицами, соответствующее данному параметру.

В качестве примера влияния спинового поля на вегетирующие растения могут быть приведены результаты исследований по прорастанию и силе роста зерен пшеницы. Исследования проводились на пшенице «Донская полукарликовая». Проращивание осуществлялось в чашках Петри. Параметры, контролируемые в ходе экспериментов – температура, освещенность, влажность. Ход эксперимента: – на этапе контроля, в чашках Петри проращивалось 100 зерен пшеницы в течение 120 часов. По истечению запланированного периода осуществлялось измерение длины ростков и определение их количественного распределения. В последующих этапах (этап 2 и 3) зерна пшеницы подвергались воздействию спинового поля, осуществлялось их проращивание, по 100 шт на опыт, в течении 120 часов, после чего проводилось измерение длины ростков и определение их количественного распределения. В ходе эксперимента контролировалась температура воздуха -  $21,5 \pm 0,50^\circ\text{C}$ , полив – 20 мл воды в сутки, постоянное освещение.

Гистограммы эффективности прорастания зерен пшеницы приведены на рис. 1.

а) контрольный опыт



б) эксперимент: когерентное состояние зерен пшеницы



в) эксперимент: декогеризация спинового состояния



Рис. 1. Результаты эксперимента по проращиванию пшеницы

Эксперименты по воздействию спинового поля на проращиваемые зерна пшеницы осуществлялось через их фотонегативное изображение.

Порядок проведения эксперимента.

На первом, контрольном, этапе в трех чашках Петри в течение 120 часов проращивалось по 100 зерен пшеницы. По истечении 120 часов осуществлялось измерение длины ростков и определялось их количественное распределение по длинам. В ходе эксперимента контролировалась температура воздуха -  $21,5 \pm 0,5^{\circ}\text{C}$ , полив – 20 мл воды в сутки, постоянное освещение.

После контрольного этапа чашки Петри были сфотографированы, фотопленка проявлена и разрезана на слайды. Затем был проведен эксперимент, в ходе которого слайды с изображением чашек Петри подвергались воздействию немодулированного (этап 2) и модулированного (этап 3) статическим спиновым полем. Схема эксперимента представлена на рис.2.

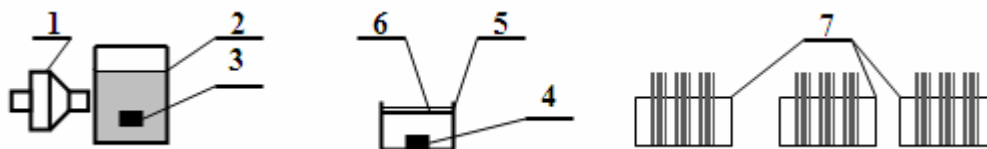


Рис. 2.

**1** – генератор спинового поля, **2** – резонатор, **3** – чип-транслятор, **4** – чип-индуктор, **5** – модулятор, **6** – слайды с изображением чашек Петри, **7** – чашки Петри с проращиваемыми зернами пшеницы

После включения генератора спинового поля **1** происходит возбуждение резонатора спиновых состояний **2** до требуемого уровня. Одновременно с возбуждением резонатора происходит возбуждение чип-транслятора **3**, который за счет эффекта запутанных состояний осуществляет трансляцию этих спиновых состояний на чип-

приемник 4, размещенный в модуляторе 5. В модуляторе 5 СП, передаваемое от чип-индуктора 4, модулируется и подается на слайды 6, находящиеся в запутанном состоянии с чашками Петри 7, что обуславливает спиновые изменения в проращиваемых зернах пшеницы. Эти изменения проявляются в увеличении количества синглетных состояний и, соответственно, ускорении хода биохимических реакций и увеличении скорости прорастания пшеницы.

Как и в контрольном опыте, проращивание зерен осуществлялось в чашках Петри по 100 зерен в каждой, в течении 120 часов, после чего проводилось измерение длины ростков и определение их количественного распределения по длинам. Результаты статистической обработки экспериментальных данных приведены на графиках рис. 3.

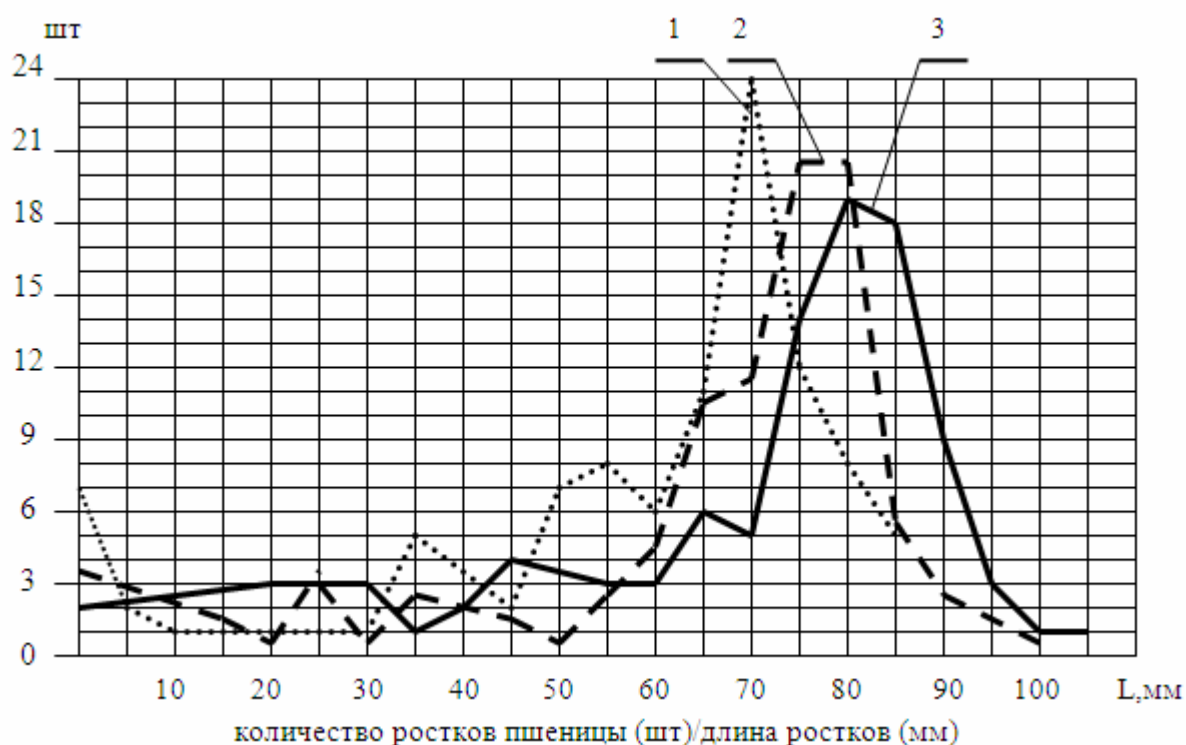


Рис. 3.

1 - длина ростков пшеницы в контрольном опыте (общая длина ростков -  $L_{\text{общ}} = 5915$  мм);

2 - длина ростков пшеницы в эксперименте: немодулированное статическое спиновое поле (общая длина ростков -  $L_{\text{общ}} = 6495$  мм);

3 - длина ростков пшеницы в эксперименте: статическое модулированное спиновое поле (общая длина ростков -  $L_{\text{общ}} = 7005$  мм).

## Литература

1. Николаев Л.А., Тулупов В.А. Физическая химия. М., Высшая школа, 1964.
2. Лейдлер К. Кинетика органических реакций. М., 1966.
3. Бучаченко А.Л., Салихов К.М., Молин Ю.Н., Сагдеев Р.З. Магнитные и спиновые эффекты в химических реакциях. Новосибирск: Наука, 1978.
4. Buchachenko A.L., Frankevich E.L. Chemical generation and reception of microwaves. N.Y., 1994.
5. Бучаченко АЛ. Химия на рубеже веков: свершения и прогнозы // Успехи химии. 1999. Т. 68. С. 85-102.

6. G. Kothe, M. Bechtold, G. Link, E. Ohmes, J. -U. Weidner Chem Phys Lett, 283, 51 (1998).
7. W. Hohmann, D. Lebender, J. Muller, N. Schinor, F. Schneider J.Phys Chem A, 101,9132(1997).
8. S. Jakubith, H. H. Rotermund, W. Engel, A. von Oertzen, G. Ertl. Phys. Rev. Lett, 65, 3013(1990).
9. Салихов К. М. [10](#) лекций по спиновой химии. / Химия и компьютерное моделирование. Бутлеровские сообщения. 2001. Том 1. № 4. [http://chem.kstu.ru/butlerov\\_comm/vol1/cd-a1/data/JCHEM&CS/russian/n4/appl4/chph1/10.htm](http://chem.kstu.ru/butlerov_comm/vol1/cd-a1/data/JCHEM&CS/russian/n4/appl4/chph1/10.htm)
10. Утияма Р. К чему пришла физика. (От теории относительности к теории калибровочных полей). М., Знание, 1986, 224 с.
11. Краснобрыжев В.Г. Спинорные поля и их генерация. <http://entron.narod.ru/>.