

УДК 536.7:004.4:612(470.2)

DOI: 10.15372/KhUR2020219

Термодинамическое моделирование образования конкрементов в организме человека под воздействием состояния окружающей среды Кольского полуострова

С. И. МАЗУХИНА¹, К. В. ЧУДНЕНКО², П. С. ТЕРЕЩЕНКО³, С. В. ДРОГОБУЖСКАЯ⁴¹Институт проблем промышленной экологии Севера ФИЦ КНЦ РАН, Апатиты (Россия)

E-mail: simazukhina@mail.ru

²Институт геохимии им. А. П. Виноградова СО РАН, Иркутск (Россия)³Научно-исследовательский центр медико-биологических проблем адаптации человека в Арктике ФИЦ КНЦ РАН, Апатиты (Россия)⁴Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И. В. Тананаева ФИЦ КНЦ РАН, Апатиты (Россия)

(Поступила 01.08.19; после доработки 20.01.20)

Аннотация

Объективной оценкой состояния окружающей среды являются показатели здоровья человека. В Мурманской области по заболеваниям костно-мышечной системы и мочекаменной болезни выделяются города Кировск и Апатиты, а также Ловозерский район, население которых используют воду, формирующуюся в пределах гигантских щелочных массивов – Хибинского и Ловозерского, содержащих оксиды стронция, тория, бария и редкоземельных металлов. Путем физико-химического моделирования с использованием программного комплекса “Селектор” исследована система “раствор – кристаллическое вещество” с учетом условий окружающей среды и физиологических показателей организма человека. В качестве раствора использованы природные питьевые воды, желудочный сок, смесь питьевых вод и желудочного сока, в качестве кристаллического вещества – новообразованные фазы, равновесные с раствором. Исследованы химические формы миграции элементов, в том числе урана, и определены условия выпадения минеральных фаз в системе “природные воды – желудочный сок” в условиях пониженной и повышенной кислотности. Показано, что формы миграции элементов (Ni^{2+} , Ba^{2+} , Pb^{2+} , Sr^{2+}) остаются канцерогенными или токсичными при температурах и параметрах среды желудка. Предложенный подход открывает новые возможности в экологических и медико-экологических исследованиях.

Ключевые слова: моделирование, формы миграции элементов, минеральный обмен, геохимический барьер, апатит, уран

ВВЕДЕНИЕ

Исследованию причин заболевания костей, а также особенностей образования и роста

кристаллических фаз, входящих в состав формирующихся в организме человека конкрементов, посвящен ряд работ [1]. Полагают, что такого рода заболевания определяются эко-

гическим фактором и зависят от состояния окружающей среды конкретного региона [2, 3].

Здоровье людей и качество их жизни в значительной степени определяются состоянием изменяющейся во времени окружающей среды – природной, антропогенной и социальной. Связь фундаментальной науки немедицинского профиля с медициной сложилась издавна. Сегодня наращивание усилий в этом направлении особенно актуально вследствие увеличения и расширения техногенных и антропогенных воздействий на окружающую среду, в частности, более интенсивной эксплуатации глубинных недр [4]. В работе Л. И. Эльпинера и И. С. Зекцера подчеркивается связь здоровья населения с химическим составом подземных вод и антропогенных включений [5]. О влиянии загрязненных вод на здоровье населения индустриального региона Севера показано в работе Т. И. Моисеенко с соавт. [6]. По данным С. М. Кравченко [7], в настоящее время болезни костной системы широко распространены, при этом исследования не следует ограничивать только изучением человеческого организма, необходимо объединение усилий различных специалистов. Там же указано, что в гигантских щелочных массивах Кольского полуострова – Хибинах и Ловозере – в апатитах содержатся примеси оксидов стронция (до 39.31 %), редкоземельных элементов (до 24 %), тория (до 0.8 %), бария (до 1.1 %) [7]. Воды, формирующиеся в пределах и ближайшем обрамлении этих массивов, являются источниками водоснабжения городов и поселков.

Суммарно заболеваемость взрослого населения Мурманской области находится на уровне среднероссийских показателей. Однако по некоторым классам заболеваний и нозологическим формам, согласно данным доклада Министерства природных ресурсов и экологии Мурманской области [8], она превышает среднероссийские уровни: по новообразованиям, болезням эндокринной системы, расстройствам питания и нарушению обмена веществ, болезням костно-мышечной системы. По сумме всех заболеваний (с впервые установленным диагнозом) в разрезе территорий Мурманской области на первом месте по заболеваемости взрослого населения находится г. Апатиты, на втором – г. Кировск, на третьем – Ловозерский район.

Следует учитывать, что живой организм представляет собой сложную “лабораторию”, в которой непрерывно происходят различные процессы, связанные с обменом веществ, перераспреде-

лением химических элементов. При нарушении данной физиологической нормы биохимические реакции могут приводить к формированию патогенных минералов в организме человека, которые концентрируются в отдельных органах. Сегодня уже очевидно, что генезис минералов мочевых камней (кристаллических веществ) в организме человека во многом определяется экологическим фактором и зависит от состояния окружающей среды конкретного региона [1–3].

Качество вод (поверхностных и подземных), находящихся в зоне влияния горнопромышленного комплекса и используемых для питьевого водоснабжения населения Кольского региона, напрямую связано с последствиями индустриального освоения российской Арктики. Полный гидрохимический анализ вод родников и водозаборов Хибинского массива показал наличие тяжелых металлов и редкоземельных элементов (лантаноидов, актиноидов) [9].

Цель данной работы – изучить качественный и количественный состав системы “раствор – кристаллическое вещество” путем физико-химического моделирования с учетом условий окружающей среды и физиологических показателей организма человека, где раствор – природные питьевые воды, желудочный сок, смесь питьевых вод и желудочного сока, а кристаллическое вещество – новообразованные фазы, равновесные с раствором.

Представленная работа продолжает исследования химического состава вод, формирующихся в пределах Хибинского массива [9].

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Использован комплексный подход, сочетающий мониторинг, физико-химическое (термодинамическое) моделирование природных вод и результаты их взаимодействия с биологическими средами человека. Исследование природных вод проведено на территории Кировско-Апатитского района Мурманской области (Россия). На рис. 1 представлены места отбора проб воды, которые также использовались в 2017 г. [9]. Проба 1 отобрана из фонтанирующей скважины в районе 10-го км автодороги “Апатиты – новый аэропорт Кировск”, а проба 5 – из родников у “дороги жизни” к юго-востоку от г. Апатиты.

Элементный анализ проб воды проводился с использованием методов: масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой с помощью прибора Elan 9000 DRC-e (PerkinElmer, США);

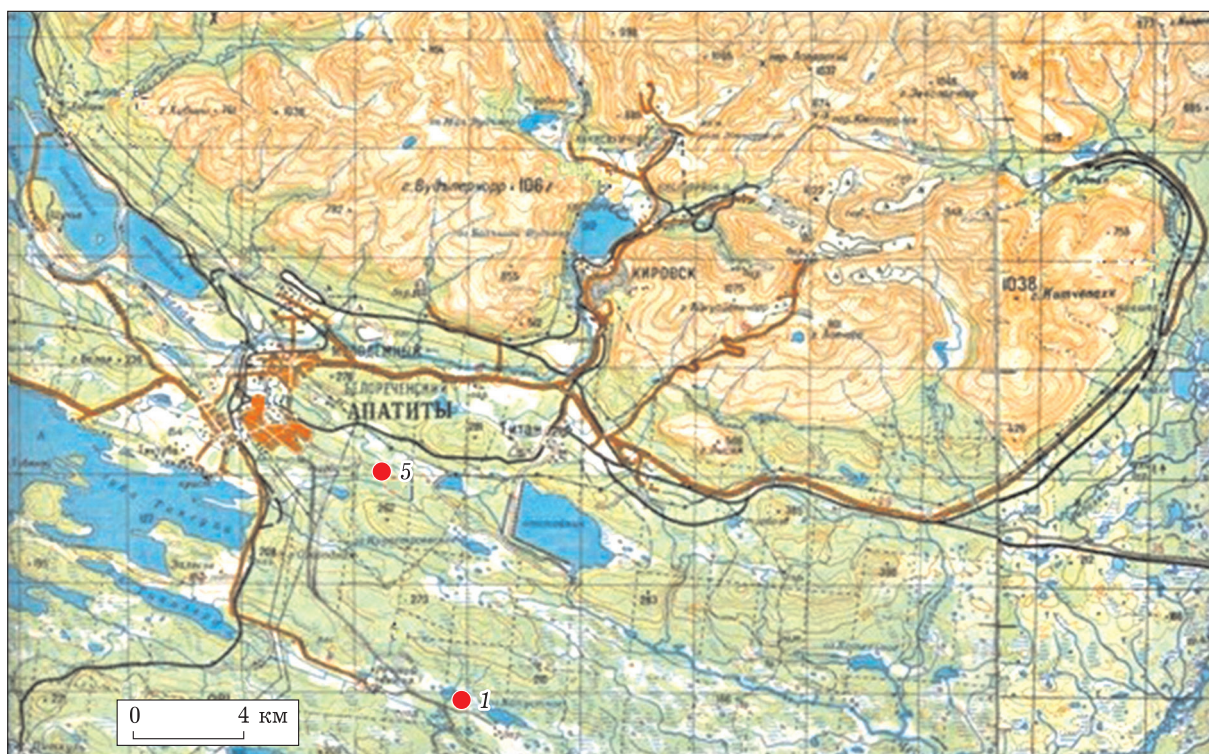


Рис. 1. Расположение точек отбора проб воды 1 и 5.

потенциометрии на анализаторе жидкости “Эксперт-001” (ООО “Эконикс-Эксперт”, Россия) и титриметрии.

Для термодинамического моделирования применен программный комплекс (ПК) “Селектор”, разработанный под руководством профессора И. К. Карпова (Институт геохимии им. Виноградова СО РАН, г. Иркутск). Программный комплекс снабжен системой встроенных баз термодинамических данных и модулем формирования моделей различной сложности. Используемый алгоритм, основанный на минимизации потенциала Гиббса моделируемой системы методом выпуклого программирования [10, 11], позволяет производить расчеты сложных химических равновесий в изобарно-изотермических, изохорных и адиабатических условиях в мультисистемах, где одновременно могут присутствовать водный раствор электролита, газовая смесь, жидкие и твердые углеводороды, минералы в виде твердых растворов и однокомпонентных фаз. С помощью ПК можно исследовать как многокомпонентные гетерогенные системы, так и мегасистемы, состоящие из взаимодействующих систем (резервуаров), связанных между собой и окружающей средой потоками вещества и энергии. В настоящей работе ПК “Селектор” использован для моделирования в системе

“жидкая фаза – минеральная твердая фаза”, “жидкая фаза – газовая фаза”.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Перед началом модельных исследований процессов, происходящих в желудке, из литературных источников была получена информация о химическом составе желудочного сока, объеме желудка и температуре в нем.

Согласно опубликованным данным, основными химическими компонентами желудочного сока являются: вода (995 г/л), хлориды (5–6 г/л), сульфаты (10 мг/л), фосфаты (10–60 мг/л), гидрокарбонаты натрия, калия, кальция, магния (0–1.2 г/л) и аммиак (20–80 мг/л). Общая концентрация натрия составляет 50 моль/л, калия – 15 моль/л, кальция – 5 мг/л. Кислотность желудка (pH) 1.5–7.4 [12–14].

За сутки в желудке взрослого человека вырабатывается около 2 л желудочного сока. Базальная (т. е. в состоянии покоя, не стимулированная пищей, химическим стимуляторами и т. п.) секреция у мужчин составляет: желудочного сока – 80–100 мл/ч, соляной кислоты – 2.5–5.0 ммоль/ч, пепсина – 20–35 мг/ч. Секреция у женщин меньше на 25–30 %. Максимальная продукция соляной кислоты у мужчин может

ТАБЛИЦА 1

Результаты мониторинга и моделирования водных проб 1 и 5 и желудочного сока

Параметр	Питьевая вода				Желудочный сок	
	Проба 1		Проба 5		АД	РМ
	АД	РМ	АД	РМ		
pH	8.22	8.50	8.03	8.28		1.23
Eh, В		0.748		0.765		0.092
T, °C	3	3	3	3	38	38
<i>Концентрация форм элементов, мг/л:</i>						
Ca	$3.43 \cdot 10^1$	$3.24 \cdot 10^1$	$2.23 \cdot 10^1$	$2.16 \cdot 10^1$	5.03	5.03
Na	6.01	6.00	5.15	5.13	$1.16 \cdot 10^3$	$1.16 \cdot 10^3$
K	4.19	4.19	0.79	$7.87 \cdot 10^{-1}$	$5.90 \cdot 10^2$	$5.90 \cdot 10^2$
Mg	4.98	4.76	1.32	1.28		
Fe	$7.6 \cdot 10^{-2}$	$7.64 \cdot 10^{-2}$	$6.7 \cdot 10^{-1}$	$6.65 \cdot 10^{-1}$		
Fe ²⁺		$9.05 \cdot 10^{-14}$		$1.79 \cdot 10^{-12}$		
Fe(OH) ₃		$1.00 \cdot 10^{-2}$		$8.68 \cdot 10^{-2}$		
Fe(OH) ₄ ⁻		$6.36 \cdot 10^{-3}$		$3.28 \cdot 10^{-2}$		
FeO ₂ ⁻		$2.26 \cdot 10^{-3}$		$1.17 \cdot 10^{-2}$		
HFeO ₂		$1.01 \cdot 10^{-1}$		$8.79 \cdot 10^{-1}$		
FeO ⁺		$4.03 \cdot 10^{-3}$		$5.82 \cdot 10^{-2}$		
Mn	$2.3 \cdot 10^{-3}$	$2.29 \cdot 10^{-3}$	$1.44 \cdot 10^{-1}$	$1.44 \cdot 10^{-1}$		
Mn ²⁺		$2.28 \cdot 10^{-3}$		$1.44 \cdot 10^{-1}$		
MnSO ₄		$2.56 \cdot 10^{-5}$		$1.69 \cdot 10^{-3}$		
Cl ⁻	$5.2 \cdot 10^{-1}$	$5.20 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^{-1}$	$1.00 \cdot 10^{-1}$	$5 \cdot 10^3$	$4.95 \cdot 10^3$
P		$5.50 \cdot 10^{-3}$	$9.4 \cdot 10^{-3}$	$9.40 \cdot 10^{-3}$	3.18	3.18
NO ₃ ⁻	$6.7 \cdot 10^{-1}$	$6.69 \cdot 10^{-1}$	$6.2 \cdot 10^{-1}$	$3.98 \cdot 10^{-1}$		
HCO ₃ ⁻	$1.04 \cdot 10^2$	$1.34 \cdot 10^2$	$6.46 \cdot 10^1$	$7.70 \cdot 10^1$		$5.00 \cdot 10^{-3}$
O ₂		3.23		7.93		
CO ₂		1.03		$9.93 \cdot 10^{-1}$		$3.53 \cdot 10^2$
H ₂ S		–		–		3.19
CH ₄		–		–		$1.39 \cdot 10^1$
Ag	$1.6 \cdot 10^{-3}$	$1.64 \cdot 10^{-3}$	$3.4 \cdot 10^{-3}$	$3.36 \cdot 10^{-3}$		
Ag ⁺		$3.97 \cdot 10^{-11}$		$1.23 \cdot 10^{-10}$		
AgNO ₃		$2.45 \cdot 10^{-3}$		$4.57 \cdot 10^{-3}$		
U	$1.5 \cdot 10^{-3}$	$1.51 \cdot 10^{-3}$	$1.1 \cdot 10^{-4}$	$1.16 \cdot 10^{-4}$		
HUO ₄ ⁻		$3.14 \cdot 10^{-4}$		$1.53 \cdot 10^{-5}$		
UO ₃		$1.52 \cdot 10^{-3}$		$1.25 \cdot 10^{-4}$		
UO ₂ OH ⁺		$7.84 \cdot 10^{-7}$		$1.07 \cdot 10^{-7}$		
Ba ²⁺	$1.81 \cdot 10^{-2}$	$1.80 \cdot 10^{-2}$	$4.8 \cdot 10^{-3}$	$4.75 \cdot 10^{-3}$		
BaCO ₃		$1.26 \cdot 10^{-4}$		$1.16 \cdot 10^{-5}$		
Sr ²⁺	$1.88 \cdot 10^{-1}$	$1.83 \cdot 10^{-1}$	$5.9 \cdot 10^{-2}$	$5.83 \cdot 10^{-2}$		
SrCO ₃		$2.36 \cdot 10^{-3}$		$2.63 \cdot 10^{-4}$		
SrHCO ₃ ⁺		$6.49 \cdot 10^{-3}$		$1.21 \cdot 10^{-3}$		
Zn	$2.7 \cdot 10^{-3}$	$2.67 \cdot 10^{-3}$	$2.02 \cdot 10^{-1}$	$2.02 \cdot 10^{-1}$		
Zn ²⁺		$1.90 \cdot 10^{-3}$		$1.62 \cdot 10^{-1}$		
ZnOH ⁺		$9.58 \cdot 10^{-4}$		$4.95 \cdot 10^{-2}$		
Ni ²⁺	$1.2 \cdot 10^{-3}$	$1.21 \cdot 10^{-3}$		$9.63 \cdot 10^{-3}$		
Hg	$1.7 \cdot 10^{-4}$	$1.74 \cdot 10^{-4}$	$1.7 \cdot 10^{-4}$	$1.66 \cdot 10^{-4}$		
HgO		$1.88 \cdot 10^{-4}$		$1.80 \cdot 10^{-4}$		

Примечание. АД – аналитические данные, РМ – результаты моделирования, Eh – окислительно-восстановительный потенциал.

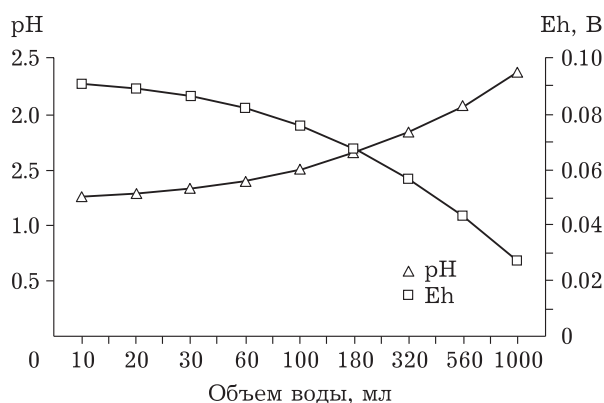


Рис. 2. Влияние объема воды в системе на показатели pH и Eh среды в желудке при взаимодействии 100 мл желудочного сока и водной пробы 1.

достигать 22–29, у женщин – 16–21 ммоль/ч [12, 15–18].

После анализа информации в качестве аналитических данных (АД) были выбраны следующие параметры в желудке – химический состав желудочного сока, мг: Са 5.03, Na 1160, К 590, Р 3.18, HCl 5000, H₂CO₃ 1200, SO₄²⁻ 10, NH₄OH 80; содержание воды 993 г; средняя температура 38 °С; давление 1 · 10⁵ Па (1 бар).

В табл. 1 представлены АД (результаты мониторинга) и результаты моделирования (РМ) водных проб 1 и 5 и желудочного сока.

Сравнение АД и РМ представленных систем указывает на различие значений кислотности, окислительно-восстановительного потенциала (Eh) и концентраций основных элементов. Следует обратить внимание на содержание и химические формы железа в водных пробах 1 и 5. Концентрация железа в воде достаточно низкая. При этом оно присутствует в гидратированной форме в степени окисления +3, поскольку в системе есть кислород. Моделируемая кислотность находится в пределах теоретически возможной кислотности в желудке.

При взаимодействии природных питьевых вод с желудочным соком происходит резкое изменение концентраций элементов. Это можно соотнести с таким широко используемым в минералогии и литологии понятием, как геохимический барьер – зоной, которая служит естественным условием образования минера-

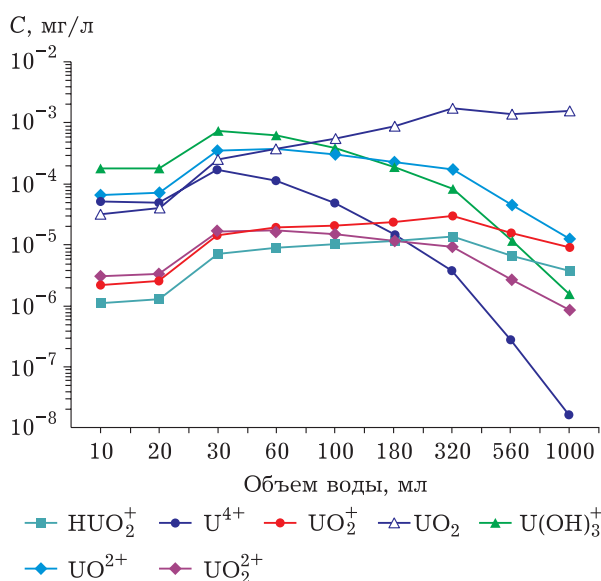


Рис. 3. Влияние объема воды в системе на формы миграции урана при взаимодействии 100 мл желудочного сока и водной пробы 1.

лов и руд, где одна геохимическая обстановка сменяется другой [19].

На рис. 2 представлены изменения значений pH и Eh при взаимодействии 100 мл желудочного сока и водной пробы 1 при изменении объема воды в системе от 10 до 1000 мл. Анализируя полученные данные, можно констатировать радикальное изменение обстановки: по мере поступления воды в желудок уменьшаются значения Eh (рис. 3), что сказывается на поведении поливалентных элементов, например урана, который считается ядовитым [19].

Видно, что происходит качественное и количественное изменение форм миграции урана: при малых объемах воды в системе (10–60 мл) преобладают четырехвалентные комплексы U(OH)₃⁺, UO²⁺, возрастает концентрация UO₂²⁺. Концентрации четырех- и шестивалентных комплексов урана различаются в пределах одного порядка при малых объемах воды (от 10 до 100–180 мл) в желудке. При увеличении объема воды от 100 до 1000 мл значения Eh снижаются от 0.076 до 0.027 В (см. рис. 2), и преобладающей формой в системе становится UO₂ (см. рис. 3).

Способность урана к комплексообразованию, с одной стороны, имеет положительный эффект: в таком виде элемент быстрее выводится из организма, с другой – отрицательный, поскольку распределение его по организму ведет к концентрированию в критических органах, где возможно замещение (например, в костях –

фосфора и кальция) [20]. Так, например, уран в значительной степени связывается в организме с гидрокарбонатными группами [21]. Соединения урана всасываются в желудочно-кишечном тракте (около 1 %), в легких – 50 %. Основными органами депонирования как растворимых, так и нерастворимых соединений урана являются селезенка, почки, скелет, печень, легкие и бронхолегочные лимфатические узлы [22]. На характер распределения оказывает влияние валентность урана. Шестивалентный уран накапливается в почках (до 20 %), в скелете (10–30 %) и в незначительном количестве откладывается в печени. Четырехвалентный уран накапливается в печени и селезенке – до 50 %, в костях и почках – до 10–20 %. Такое распределение связывают с тем, что четырехвалентный уран легко присоединяется к белкам и не проникает через мембраны, шестивалентный уран такими свойствами не обладает [23, 24]. Согласно [24], в костной ткани уран откладывается на поверхности мельчайших кристаллов гидроксиапатита в результате ионного обмена Ca^{2+} на UO_2^{2+} . Каждый ион UO_2^{2+} прочно связывается с двумя соседними фосфатными группами на поверхности кристаллов, освобождая Ca^{2+} . Формой соединения урана в костной ткани, по-видимому, является отенит – $\text{Ca}(\text{UO}_2)_2(\text{PO}_4)_2 \cdot 10-12\text{H}_2\text{O}$ – один из самых распространенных минералов зоны окисления урановых месторождений. Уран не входит в кристаллическую структуру апатита, но адсорбируется на нем. Также отмечено, что у рыб содержание урана в костях в десятки раз выше, чем в мышцах [24].

*Исследование трансформации системы
"природные воды – желудочный сок"
при изменяющейся кислотности желудка*

Рассмотрим возможные формы миграции элементов, полученных в физико-химической модели [25], в результате взаимодействия природных вод (проба 5) с желудочным соком в зависимости от концентрации (С) в желудке соляной кислоты: 1) рН 2.02, $E_h = +0.044$ В, $C(\text{HCl}) = 2872.3$ мг/л (повышенная кислотность желудка); 2) рН 6.24, $E_h = -0.218$ В, $C(\text{HCl}) = 2284.6$ мг/л (пониженная кислотность желудка).

Анализ результатов моделирования при повышенной кислотности желудка (рис. 4) показывает, что с увеличением объема воды в желудке в растворе растет содержание ионов Ca^{2+} , Ni^{2+} , Ba^{2+} , Pb^{2+} . Среди форм миграции урана преобладает UO_2 . Также отмечается рост

значений рН, изменение условий на восстановительные (при объеме воды более 320 мл) и выпадение сульфидов.

Ионные формы (Ni^{2+} , Ba^{2+} , Sr^{2+} , Pd^{2+}) миграции указанных канцерогенных или токсичных элементов относятся к числу наиболее токсичных и остаются таковыми при температурах и условиях среды желудка [26]. Способность заменять кальций в костях – одно из наиболее коварных последствий воздействия неорганических соединений свинца, бария и стронция.

На рис. 5 представлены результаты моделирования влияния объема воды в системе при пониженной кислотности желудка (рН 6.24) на изменения параметров среды желудка и содержание (*m*, моль) твердых фаз при взаимодействии 100 мл желудочного сока и водной пробы 5.

Согласно представленным результатам (см. рис. 5), пониженная кислотность способствует камнеобразованию, анемии (выпадение FeS_2). Образование твердых фаз может происходить не в желудке; твердые минеральные фазы могут быть транспортированы из желудка в другие органы и ткани. Так, образование апатита зафиксировано некоторыми исследователями в биологических средах [27]. В работе [2] указано, что частота встречаемости гидроксиапатита ($\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{OH}$) в почечных камнях у жителей различных регионов составляет от 23 до 31.5 %, витлокита – до 4.9 %. В почечных камнях жителей Омской области зафиксировано образование SiO_2 (0.6 %). По данным работы [2], в образцах почечных камней присутствуют 34 элемента, в том числе Ca, K, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Ni, Cu, Zn, Ga, As, Se, Br, Rb, Sr, Y, Zr, Nb, Mo, W, Pb, Hg, Th, U, Ag, Cd, In, Sn, Sb, Te, I, Cs, Ba, а также актиноидов и лантаноидов. Это подчеркивает необходимость исследования полного гидрохимического состава вод, потому как ионы редкоземельных элементов могут иногда заменять не только ионы щелочноземельных, но и переходных металлов, в то время как обратная замена на ионы щелочноземельных элементов невозможна [24].

Основными органами депонирования урана являются почки, печень и кости. В костях человека и животных около 70 % приходится на гидроксиапатит $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{OH}$. Гидроксид-ионы могут замещать ионы F, Cl, O. Кальций может быть изоморфно замещен рядом элементов (Sr, U, Ba и другими), что вызывает болезни костей и зубов у населения.

Отравление такими тяжелыми металлами, как свинец, ртуть и уран, вызывает нарушение

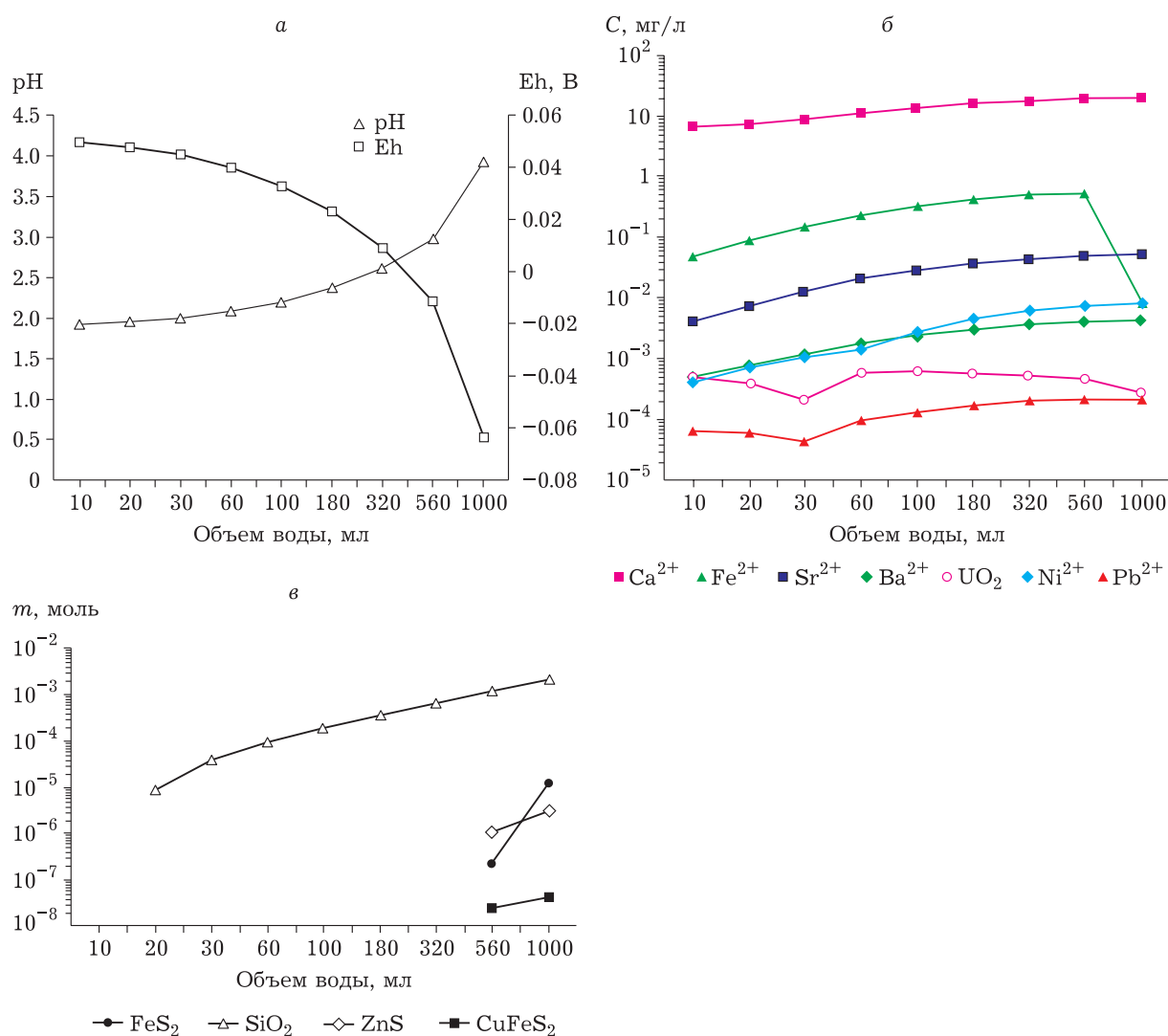


Рис. 4 Влияние объема воды в системе на изменение показателя pH и Eh среды желудка (а), концентрации (С) различных форм металлов в растворе (б) и содержания (m) твердых фаз в системе (в) при взаимодействии 100 мл желудочного сока и водной пробы 5. Начальные условия: pH 2.02, Eh = +0.044 В, C(HCl) = 2872.3 мг/л.

функции почек [28]. Показано, что индивидуальные особенности организма влияют на формы миграции элементов, а значит и на их усвояемость.

Результаты подтверждены независимыми исследователями, применявшими методы рентгенофазового анализа и ИК-спектроскопии при исследовании состава камней жителей различных регионов [2].

Следует особо отметить, что Всемирная организация здравоохранения увеличила для урана норматив в питьевой воде с 2 до 30 мкг/л, несмотря на то что “получение ориентировочного значения для урана в питьевой воде является сложным”. Так, у исследуемых добровольцев в “группе без эффекта” были отмечены повышен-

ное диастолическое артериальное давление, систолическое артериальное давление и выделение глюкозы с мочой. Кроме того, действующий норматив (30 мкг/л) не защищает детей, людей с предрасположенностью к гипертонии или остеопорозу, с хроническими заболеваниями почек, а также лиц с предыдущим длительным воздействием урана на организм [29].

Таким образом, в работе впервые представлены формы миграции элементов не в неживой природе, а в условиях человеческого организма (на примере желудка). Взаимодействие желудочного сока с водой подобно возникновению геохимических барьеров, т. е. таких физико-химических условий, когда происходит изменение валентности элементов, концентрации, форм ми-

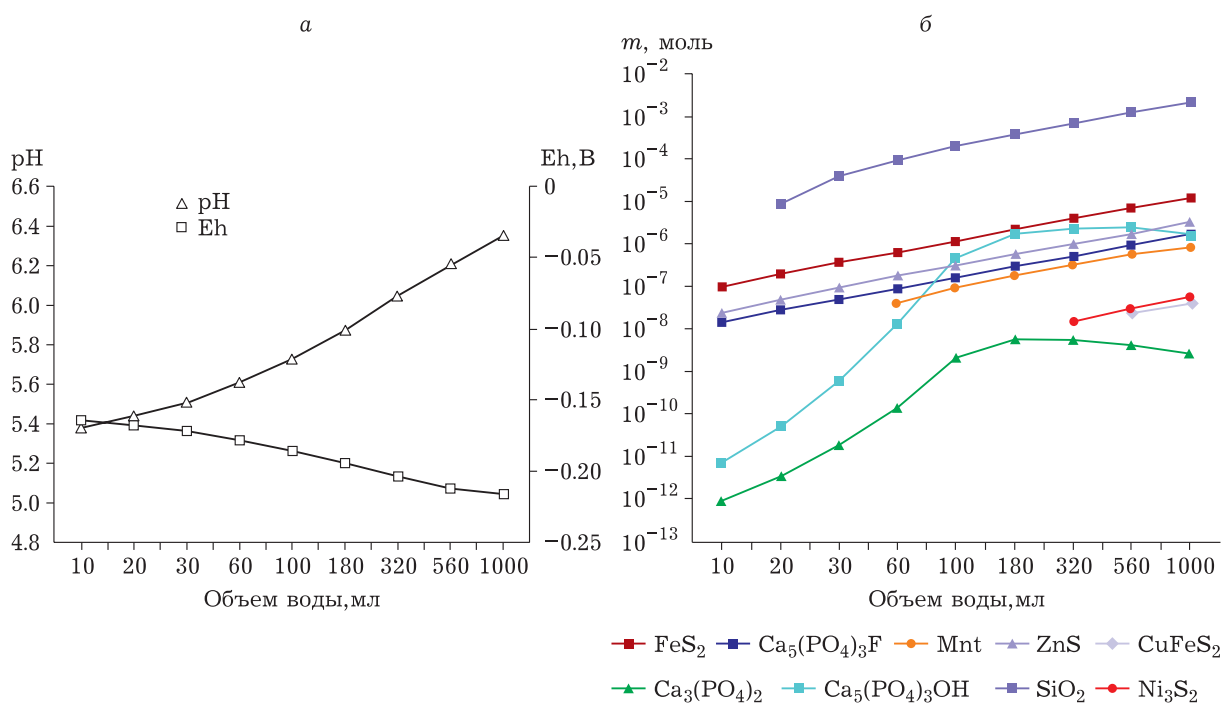


Рис. 5. Влияние объема воды в системе на изменение показателей pH и Eh среды желудка (а) и содержания (m) твердых фаз в системе (б) при взаимодействии 100 мл желудочного сока и водной пробы 5. Начальные условия: pH 6.24, Eh = - 0.218 В, $C(\text{HCl}) = 2284.6$ мг/л. Mnt – монтмориллонит.

грации. Проведенные исследования – первое приближение для понимания этиологии и процессов, происходящих в организме.

Применение метода физико-химического моделирования позволило:

- оценить параметры pH, Eh модели желудочного сока;

- показать изменение параметров pH, Eh модели желудочного сока в условиях недостатка и избытка HCl;

- исследовать химические формы миграции элементов в системе “природные воды – желудочный сок” в условиях пониженной и повышенной кислотности, определить состав минеральных фаз, которые могут быть транспортированы из желудка в другие органы и ткани;

- установить, что при пониженной кислотности желудка железо переходит из раствора в твердые фазы, что может быть причиной возникновения анемии. Для устранения данной проблемы необходимо восстановить кислотно-щелочные параметры данной системы;

- выявить форму миграции урана, заменяющую кальций в костной ткани;

- показать формы миграции канцерогенных или токсичных элементов (Ni^{2+} , Ba^{2+} , Pb^{2+} , Sr^{2+}), которые остаются токсичными при температурах и параметрах среды желудка.

Исследования открывают перспективы для изучения влияния концентраций отдельных элементов при изменении параметров желудочного сока, температуры и различных типов вод.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложенный подход позволил исследовать трансформацию форм миграции при переходе “внешняя среда – организм человека” в рамках единой мультисистемы, а не по упрощенной схеме. Показано, что обнаруженные формы миграции канцерогенных или токсичных элементов (никель, барий, стронций, свинец) при температурах и параметрах среды желудка относятся к числу наиболее токсичных (Ni^{2+} , Ba^{2+} , Pb^{2+} , Sr^{2+}). Несмотря на то что организм позиционируется как открытая система к внешней среде, определенные геохимические параметры, к которым можно отнести изменение объема, pH, Eh, температуры среды, показывают возникновение в желудке человека геохимических барьеров, связанных с резким ростом концентрации элементов, осаждением твердых фаз, сменой валентности у поливалентных элементов. Так, при повышенной кислотности выявлен ион урана, способный заменять кальций в костях. Полученный результат может иметь

свое продолжение – коррекцию концентрации урана с помощью водоподготовки или иных средств.

Таким образом, метод термодинамического моделирования открывает новые перспективы в экологических и медико-экологических исследованиях для лучшего понимания химии протекающих процессов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и Министерства образования и науки Мурманской области в рамках научного проекта № 17-45-510640 “Геохимическая оценка подземных вод Хибинского массива (возраст и идентификация происхождения подземных вод, химический состав, формы миграции элементов)”.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1 Голованова О. А. Биоминералогия мочевых, желчных, зубных и слюнных камней из организма человека: автореф. дис. ... д-ра геол.-минерал. наук. Томск, 2009. 41 с.
- 2 Голованова О. А., Цапаев С. А. Фазовый, элементный, аминокислотный, структурный состав минералов почечных камней // *Бутлер. сообщ.* 2012. Т. 32, № 12. С. 96–103.
- 3 Зузук Ф. В. Тяжелые металлы в уролитах // *Химия уст. разв.* 2002. Т. 10, № 3. С. 281–295.
- 4 Экология человека в изменяющемся мире / Под ред. В. А. Черешнева. Екатеринбург: УрО РАН, 2006. 562 с.
- 5 Эльпинер Д. И., Зекцер И. С. Междисциплинарный подход к оценке использования подземных вод для питьевых целей // *Водные ресурсы.* 1999. Т. 26, № 4. С. 389–396.
- 6 Моисеенко Т. И., Мегорский В. В., Гашкина Н. А., Кудрявцева Л. П. Влияние загрязнения вод на здоровье населения индустриального региона Севера // *Водные ресурсы.* 2010. Т. 37, № 2. С. 199–208.
- 7 Кравченко С. М. Кальций-фосфорное отношение в геохимических ландшафтах и его влияние на здоровье человека // *Геоэкология. Инженерная экология. Гидрогеология. Геокриология.* 1998. № 1. С. 30–36.
- 8 Министерство природных ресурсов и экологии Мурманской области [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://mpr.gov-murman.ru> (дата обращения: 05.07.2017).
- 9 Мазухина С. И., Пожиленко В. И., Дрогобужская С. В., Сандимиров С. С. Результаты исследования химического состава подземных вод в Хибинском массиве и его окрестностях (Кольский регион Балтийского щита) // *Материалы III Всерос. науч. конф. с междунар. участием “Геологическая эволюция взаимодействия воды с горными породами”.* 20–25 августа 2018, Чита. С. 122–126.
- 10 Авченко О. В., Чудненко К. В., Вах А. С. Анализ минеральных парагенезисов методом минимизации потенциала Гиббса. М.: Геос, 2018. 254 с.
- 11 Чудненко К. В. Термодинамическое моделирование в геохимии: теория, алгоритмы, программное обеспечение, приложения. Новосибирск: Акад. изд-во “Гео”, 2010. 287 с.
- 12 Ройтберг Г. Е., Струтынский А. В. Внутренние болезни. Система органов пищеварения: Учеб. пособие. М.: МЕДпресс-информ, 2007. 560 с.
- 13 Коротько Г. Ф. Желудочное пищеварение. Краснодар: Изд. ООО БК “Группа Б”, 2007. 256 с.
- 14 Бородулин В. И. Тополянский А. В. Справочник практического врача в 2-х книгах. М.: Оникс: Мир и Образование, 2007. 752 с.
- 15 Сапин М. Р., Билич Г. Л. Анатомия человека: в 3 т. Т. 2. Функциональная анатомия пищеварительной и дыхательной систем, мочеполового аппарата, органов иммунной и лимфатической систем, органов внутренней секреции и сердечно-сосудистой системы. М.: ГЭОТАР-Медиа, 2008. 496 с.
- 16 Feher J. *Quantitative Human Physiology (2nd Edition). An Introduction. Print Book & E-Book*, 2017. P. 785–795.
- 17 Привес М. Г., Лысенков Н. К., Бушкович В. И. Анатомия человека: Учебник. 12-е изд., перераб. и доп. СПб.: МАПО, 2017. 724 с.
- 18 Blanco A., Blanco G. *Medical Biochemistry*. Cambridge: Academic Press, 2017. 826 p.
- 19 Перельман А. И. Геохимия: Учеб. для геол. спец. вузов. 2-е изд., перераб. и доп. М.: Высш. шк., 1989. 531 с.
- 20 Барановская Н. В., Игнатова Т. Н., Рихванов Л. П. Уран и торий в органах и тканях человека // *Вестн. Том. гос. ун-та.* 2010. № 339. С. 182–188.
- 21 Штреффер К. Радиационная биохимия. Пер. с нем. / Под ред. Е.Ф. Романцева. М.: Атомиздат, 1972. 200 с.
- 22 Seldén A. I., Lundholm C., Edlund B., Högdahl C., Ek B.-M., Bergström B. E., Ohlson C.-G. Nephrotoxicity of uranium in drinking water from private drilled wells // *Environ. Res.* 2009. Vol. 109, No. 4. P. 486–494.
- 23 Уран, энергетика и промышленность [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://ueip.org/technology/dejstvieurana.htm> (дата обращения: 05.07.2019).
- 24 Москалев Ю. И. Минеральный обмен. М.: Медицина, 1985. 288 с.
- 25 Mazukhina S.I., Chudnenko K. V., Tereshchenko P. S., Drogobuzhskaya S. V., Ivanov S. V. Modeling: The New Prospects of Studying Biological Systems as Illustrated by the Human Stomach // *Processes and Phenomena on the Boundary Between Biogenic and Abiogenic Nature / O. V. Frank-Kamenetskaya, D. Yu. Vlasov, E. G. Panova, S. N. Lessovaia (Eds.)*. 2020, P. 872.
- 26 Mazukhina S., Tereshchenko P., Drogobuzhskaya S., Pozhilenko V. The speciation of chemical elements in water and their possible impact on human health // *E3S Web of Conferences. EDP Sciences*, 2019. Vol. 98. P. 07017.
- 27 Izatulina A. R., Nikolaev A. M., Frank-Kamenetskaya O. V., Kuzmina M. A., Malyshev V. V. Bacterial mechanisms of pathogenic crystallization in the human body // *VI Int. Symp. “Biogenic – abiogenic interactions in natural and anthropogenic systems”*. Saint Petersburg: VVM publishing Lld, 2018. P. 21.
- 28 Chatterjea M. N., Shinde Rana. *Textbook of Medical Biochemistry (8th Ed.)*. 2012, p. 94.
- 29 Frisbie S. H., Mitchell E. J., Sarkar B. World Health Organization increases its drinking-water guideline for uranium // *Environ. Sci. Process Impacts*. 2013. Vol. 15, No. 10. P. 1817–1823.