

Шаталова Т.А.¹, Гаташ С.В.² [©]

¹ Инженер, ² к.б.н., доцент ¹ кафедра физики низких температур, ² кафедра молекулярной и медицинской биофизики, Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина

ВЫЧИСЛЕНИЕ ОБЪЕМНОЙ ДОЛИ СФЕРИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ И МАТРИЧНОЙ СРЕДЫ В АГРЕГАТЕ

Аннотация

В данной работе представлен расчет объемной доли сферических частиц и матричной среды для модели агрегата, приближенной к реальным условиям в процессе формирования агрегатов клеток в дисперсной системе с геометрической точки зрения.

Ключевые слова: объемная доля агрегата, агрегация клеток.

Keywords: volume fraction of aggregate, aggregation of cell.

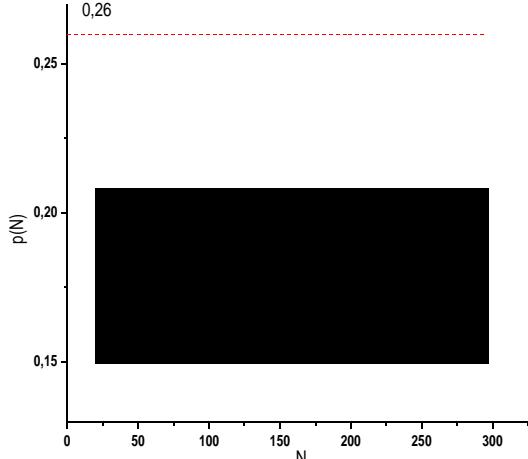
При построении правильной математической модели биофизических процессов, происходящих в суспензии на уровне клеток, различные цитофотометрические данные могут давать разностороннюю информацию о физических и химических параметрах исследуемой системы, характере взаимодействия объектов между собой, параметрах, влияющих на общую стабильность системы важных для фундаментальных исследований. Так, например, при исследовании диэлектрических свойств биологических дисперсных систем необходимо принимать во внимание реально существующую геометрическую форму частиц [1-3]. В настоящей работе сделана попытка найти объемную долю сферических частиц и матричной среды для модели агрегата, приближенной к реальным условиям в процессе формирования агрегатов клеток с геометрической точки зрения, что в дальнейшем позволит вычислить вклад в диэлектрическую проницаемость агрегацию клеток в дисперсной системе. Данные поправки могут быть применены для интерпретации результатов диэлектрических измерений клеточных суспензий. С их помощью может быть определен вклад размера и формы в величину диэлектрической проницаемости суспензий в различных состояниях, при агрегации клеток.

В предложенной нами модели предусматривается, что в процессе агрегации клетка принимает сферическую форму и может при сближении присоединиться к клеточному агрегату любой стороной с одинаковой вероятностью. Это позволяет каждую сферическую частицу представить в виде шара заключенного внутри сферы, а клеточный агрегат представить кластером плотно упакованных и жестко связанных между собой шаров, имеющих сферическую форму, которая является энергетически более выгодной. Однако в данном случае мы будем рассматривать не идеально гладкую сферу, а сферу, имеющую на своей поверхности некоторое количество шаров (клеток) вне границ основной сферы. Агрегат в таком случае будет состоять из N шаров с радиусом r , расположенных внутри сферы и N_{surf} , числа шаров, расположенных в поверхностном слое кластера. Диэлектрические свойства такого агрегата будут зависеть от степени агрегации частиц и от объемной доли матричной среды в агрегате, которая будет существенно отличаться от свойств самих частиц в агрегате. Вычисление доли свободного объема, т.е. отношения объема пустот, заключенных между сферами кластера к полному объему кластера, производилось следующим образом. Фактически, долю свободного объема можно получить простым вычитанием плотности упаковки D из единицы [4-6]. Однако при таком способе вычисления берется отношение свободного объема, заключенного между упаковываемыми шарами к объему заданной области - в данном случае - сферы, лежащей полностью внутри кластера. Нам же необходимо получить отношение свободного объема к полному объему кластера. Таким образом, необходимо учесть полный объем сфер, лежащих на поверхности кластера. Тогда долю свободного объема r можно приближенно выразить через плотность пространственной упаковки D следующим образом. Считая, что шары на поверхностном слое кластера распределены неравномерно, то для подсчета объема шаров лежащих на поверхности агрегата используем формулу: $V_{surf}=2/3 \pi r^3 N_{surf}(N)$ (1), где r - радиус упаковываемых сфер, $N_{surf}(N)$ - число шаров в поверхностном слое кластера. Объем минимальной сферы включающей в себя

клuster из N шаров без учета шаров, лежащих на поверхности сферы: $V_{es}=4/3 \pi (R_{es}(N)-r)^3$, (2), где, $R_{es}(N)$ – радиус минимальной сферы, включающей в себя кластер из N шаров, тогда объем пустот заключенный между сферами кластера будет равен: $V_{p}=V_{es}-D V_{es}$ (3). Полный объем кластера будет равен: $V_{kl}=V_{es}+V_{surf}$ (4). Таким образом, объемная доля матричной среды в агрегате составляет:

$$p = (1-D) \frac{V_{es}}{V_{kl}} = (1-D) \frac{4/3\pi(R_{es}(N)-r)^3}{4/3\pi(R_{es}(N)-r)^3 + 2/3\pi r^3 N_{surf}(N)} = \frac{1-D}{1 + \frac{N_{surf}(N)}{2(R_{es}/r-1)^3}} \quad (5)$$

Величина N_{surf} приближенно вычислялась на основании плотности плоской укладки окружностей D_2 [4, 5]. Используя это выражение получаем:



$$N_{surf}(N) = \frac{4\pi(R_{es}(N)-r)^2 D_2}{\pi r^2} \quad (6)$$

Тогда выражение для p принимает вид:

$$p = \frac{1-D}{1 + \frac{2D_2}{(R_{es}(N)/r-1)}} \quad (7)$$

Рис.1. Зависимость доли свободного объема от числа шаров в кластере

Отношение $R_{es}(N)/r$, может быть аппроксимировано выражением $\sqrt[3]{(2,3+N)/0,54}$ [6].

Подставляя данное выражение в уравнение (7), получаем зависимость доли свободного объема от числа шаров в кластере. Вид функции $p(N)$ показан на рис. 1 (пунктирной линией представлена горизонтальная асимптота). Следует отметить, что приближения, принятые при выводе выражения (7), выполняются тем точнее, чем больше N . При малых значениях N оценка для $p(N)$ получается завышена.

Объемная доля сферических частиц в агрегате определяется совершенно аналогично. Их объем внутри агрегата равен $V^{es}D$, снаружи агрегата V^{surf} .

$$q = \frac{V_{es}D + V_{surf}}{V_{es} + V_{surf}} = \frac{4/3\pi(R_{es}(N)-r)^3 D + 2/3\pi r^3 N_{surf}(N)}{4/3\pi(R_{es}(N)-r)^3 + 2/3\pi r^3 N_{surf}(N)} = \frac{D + \frac{N_{surf}(N)}{2(R_{es}(N)/r-1)^3}}{1 + \frac{N_{surf}(N)}{2(R_{es}(N)/r-1)^3}} \quad (8)$$

$$q = \frac{D + \frac{2D_2}{(R_{es}(N)/r-1)}}{1 + \frac{2D_2}{(R_{es}(N)/r-1)}} \quad (9)$$

Как видим, очевидное условие $p+q=1$ выполняется.

В экспериментальной и теоретической биофизике в целом достигнут значительный прогресс [7-14]. Полученные в этой статье выражения расширяют наши знания в области биофизики и могут

использоваться для внесения поправок, в расчеты исследований, результаты которых зависят от реальной геометрической формы клеток.

Литература

1. С.С. Духин, В.А. Шилов - Диэлектрические явления и двойной слой в дисперсных системах и полиэлектролитах. – К.:Наукова думка. – 1972. – 207 с.
2. V. Kaatze, K. Lautschan, R. Pottei - Dielectric relaxation spectroscopy on dimyristoyl phosphatidyl choline–packaged gramicidin A // J. Mol. Lipids. – 1984. – V. 28, № 4. – P.249-270.
3. С.В. Гаташ, Л.Д. Степин - Диэлектрическая проницаемость неупорядоченных дисперсных систем с частицами различной формы и структуры // Радиофизика и электроника: Сб. науч. тр. – 2001. – Т. 6, № 1. – С.150-153.
4. Д. Гильберт, С. Кон-Фоссен Наглядная геометрия. – М.: Наука. 1981.– 344 с.
5. Н. Дж. А.Слоэн Упаковка шаров // В мире науки. –1984. – № 3. – С. 72-82.
6. S.V. Gatash, Ye.A. Domanov - Model for dynamics of platelet aggregate formation in shear force flow// Біофізич. Вісн. – 2001. – № 525 С.76-80.
7. С.В. Гудков, И.Н. Штаркман, А.В. и др. – Гуанозин и инозин (рибоксин) элиминируют долгоживущие белковые радикалы, образующиеся при воздействии рентгеновского излучения // ДАН. – 2007. – Т.413. – С.264-267.
8. S.V. Gudkov, V.I. Bruskov, A.V. Chernikov et al. – Oxygen-dependent auto-oscillations of water luminescence triggered by the 1264 nm radiation // Journal of Physical Chemistry B. – 2011. – Т.115. – №23. – P. 7693-7698.
9. A.V. Chernikov, S.V. Gudkov, I.N. Shtarkman, V.I. Bruskov – Oxygen effect in heat-induced DNA damage // Biophysics. – 2007. – Т.52. – №2. – С. 185-190.
10. I.N. Shtarkman, S.V. Gudkov et al. – Effect of amino acids on x-ray-induced hydrogen peroxide and hydroxyl radical formation in water and 8-oxoguanine in DNA // Biochemistry (Moscow). – 2008. – V.73. – №4. – P. 470-478.
11. С.В. Гудков, О.Э. Карп и др. – Образование активных форм кислорода в воде под действием видимого и инфракрасного излучений в полосах поглощения молекулярного кислорода // Биофизика. – 2012. – Т.57. – №1. – С. 5-13.
12. S.V. Gudkov, S.A. Garmash, I.N. Shtarkman, et al.– Long-lived protein radicals induced by x-ray irradiation are the source of reactive oxygen species in aqueous medium // Doklady Biochemistry and Biophysics. – 2010. – Т.430. – №1. – P.1-4.
13. N.R. Asadullina, A.M. Usacheva, V.S. Smirnova, S.V. Gudkov – Antioxidative and radiation modulating properties of guanosine-5'- monophosphate // Nucleosides, Nucleotides and Nucleic Acids. – 2010. – Т.29. – №10. – С. 786-799.
14. Chernikov A.V., Bruskov V.I., Gudkov S.V.- Heat-induced formation of nitrogen oxides in water // J. Biol. Phys. - 2013. - V.39. - P.687-699