

УДК 591.044

В.О. Новіков

## ФОРМУВАННЯ ФРАКТАЛЬНОЇ КЛАСТЕРНОЇ СТРУКТУРИ БІОЛОГІЧНОЇ РІДИНИ

*Розглянуто модель формування фрактальних кластерів біологічної рідини на поверхні клітини при різних кутах вигину міжмолекулярних зв'язків. Показано можливість утворення „молодих” та „старих” кластерів.*

Стан здоров'я та передчасне старіння людини є однією з актуальних проблем не тільки медицини, а й економіки. Тому необхідно проводити пошук методів корекції стану організму. Для цього слід визначити основну мішень, що здатна ефективно сприймати корегуючу дію та виступати ініціатором оптимізації функціонального стану всього організму.

Організм можна розглядати як ієрархію біологічних структур в різномасштабних шкалах часу. В якості структур розглядають ієрархію молекул, макромолекул, клітин, організмів і т.д. Розподіл часу уявленої релаксації систем різних ієрархій дозволяє робити висновки про можливість вивчення процесів структуроутворення на різних рівнях живої системи. На певних проміжках часу ці системи можна вважати квазізакритими, для яких використовують закон часової ієрархії [1]. Відповідно до цього закону, спостерігається зростання часу життя при переході від більш низьких структур до більш високих:

$$\dots \ll t^m \ll t^{im} \ll t^{organism} \ll t^{pop} \ll \dots, \quad (1)$$

$$\bar{G}^{im} = \frac{1}{V} \int \frac{\partial \tilde{G}^{im}}{\partial m}(x, y, z) dx dy dz \rightarrow \min, \quad (2)$$

де  $t^m$  – середній час життя молекул в організмі, що приймають участь в метаболізмі;  $t^{im}$  – середній час життя міжмолекулярних структур тканин організму, що оновлені в процесі його розвитку;  $t^{organism}$  – середній час життя організму;  $t^{pop}$  – середній час життя популяції;  $\bar{G}$  – питома функція Гібса (питома вільна енергія Гібса) утворення конденсованої фази речовини  $\tilde{G}$ ;  $V$  – об'єм системи;  $m$  – маса мікрооб'єктів, що виділені;  $x, y, z$  – координати; « $\rightarrow$ » – означає, що  $\bar{G}$  є питомою; « $\sim$ » – підкреслює гетерогенність системи.

Еволюція таких систем на тривалих етапах повинна протікати у бік зменшення функції Гібса (вільної енергії Гібса) систем. Якщо питома величина функції Гібса утворення молекулярних структур тканин організму в онтогенезі повинна зменшуватися, тоді необхідно, щоб хімічний склад цих тканин змінювався за віком живого організму. Закон часових ієрархій дозволяє виділити у відкритих біосистемах квазізакриті підсистеми та дослідити їх розвиток та еволюцію шляхом вивчення зміни питомої функції Гібса, утворення більш вищих структур (j) з структур нижчих рівнів (j – 1). Зміна хімічного складу повинна бути спрямована у бік, що визначено другим законом термодинаміки. При цьому із загальних фізико-хімічних уявлень припускають, що зміна функції стану живих систем пов'язана з самодовільною заміною води на супрамолекулярні структури, що утворені органічними та неорганічними компонентами. Така заміна обумовлена зміною характеру взаємодії води з біологічними молекулами, який і визначається, у першу чергу, структурою води, що знаходиться у взаємозв'язку з енергетикою організму.

Вода як в навколишньому середовищі, так і в організмі характеризується кластерною структурою. Для живого організму специфіка кластерної структури води є відбиттям його функціонального стану. Кластери води мають складну форму, яку досить важко описати математичним шляхом. Проблему можна вирішити, використовуючи модель фрактальної структури об'єкта спостереження.

Перше чергове питання пов'язане з визначенням місця розташування кластерів по відношенню до сусідніх структурних елементів організму і взаємозв'язком їх структурних особливостей.

Відповідно до фрактальної біології, будь-який організм, орган чи жива клітина вважаються здоровими та працездатними, якщо їх морфологія та фізіологія мають фрактальну структуру. Фрактальність води грає вирішальну роль при еволюції молекулярних біосистем послідовних рівнів ієрархії: симетричні особливості „водних фракталів” узгоджуються з топологією молекул більшості відомих білків та амінокислот. Молекули води утворюють „кістяк”, який обростає молекулами тільки тих речовин, що можуть стикуватися зі структурами води. Тобто генетичний код можна записати на водній матриці.

Групою вчених у 1984 р. [2] встановлено, що у системі вода/поверхня існує граничний шар, де фрактальні кластери приєднуються до гачкоподібних виступів білків або ліпідів клітин. З віком стан складових білків (ліпідів) змінюються – з’являються “молоді” та “старі” органічні речовини. Таким чином, виникає наступне припущення: якщо в організмі існують так звані “молоді” та “старі” органічні речовини та з’єднання, які впливають на формування структури оточуючого водяного середовища, тоді певно існують і аналогічні “молоді” та “старі” кластери води.

**Метою** роботи є моделювання процесу формування водяних кластерів організмів різних вікових категорій. При моделюванні виходили з того, що воді придатні деякі властивості кристалу, для якого характерне зменшення ступенів свободи за рахунок впливу поверхні. Утворення поверхневого шару представляє собою один із різновидів процесу типу „епітаксія”. Рідкий квазікристал води, який зростає і утворюється водневими зв’язками, більш стійкий з точки зору розпаду та більш виражений з точки зору геометрії. Чим ближче до поверхні, тим вища стійкість.

Перехід з одного стану в інший вимагає затрати енергії на утворення поверхні розділу рідина – рідкий квазікристал; перетворення пройде тоді, коли вона буде менше енергії переходу в більш стійкий стан. Вільна енергія системи  $dG$  визначається як алгебраїчна сума двох членів, що характеризують поверхню  $E_n$  і об’єм  $E_{об.}$ :

$$dG = S \cdot \sigma - V \cdot dG_V, \quad (3)$$

де  $S$  – площа поверхні;  $\sigma$  – поверхневий натяг ( $\sigma_{води}=0,0727$  н/м);  $V$  – об’єм;  $dG_V$  – різниця між вільною енергією одиниці об’єму неструктурованої води та кластера води.

Спочатку утворюється зародок кластера на поверхні клітини, а потім проходить формування фрактального кластера. В залежності від структурного та енергетичного стану поверхні клітини, формування кластера характеризується вигином усіх водневих зв’язків у структурі води з обертанням деяких молекул та утворенням нових з половини розірваних зв’язків комплексу (рис. 1).

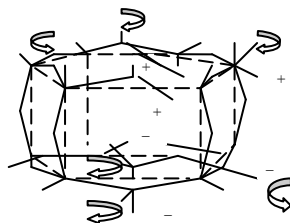


Рис. 1. Обертання зв’язків при утворенні кластера

За різними даними кластер вміщує від 20 до 150 молекул води. Зміну вільної енергії об’єму при формуванні фрактального кластера із неструктурованої води супроводжується зміною кутів між молекулами, що можна представити наступним чином:

$$dG_V = dU_0 + \frac{1}{2} K_r \sum_{ij} \Delta r_{ij}^2 + \frac{1}{2} K_\alpha \sum_{jk} \Delta \alpha_{jk}^2, \quad (4)$$

де  $\Delta r_{ij}$  – зміна кута між  $i$ - та  $j$ -ю молекулами;  $\Delta \alpha_{jk}$  – зміна кута зв’язку між  $j$ - та  $k$ -ї молекулами;

$K_r = 0,19 \cdot 10^5$  мдін/см;  $K_\alpha = 0,0362 \cdot 10^5$  мдін/см – силові сталі;  $dU_0$  – енергія енергетичного бар’єру.

Загальна зміна вільної енергії системи при утворенні фрактального кластера відповідає змінам вільної енергії об’єму кластера за рахунок вигину кутів між молекулами та енергії взаємодії з поверхнею клітини з урахуванням геометричної особливості кластера і може бути представлена формулою:

$$dG = n \cdot dG_V + dG_F - \eta \cdot n^{2/3} \cdot \sigma \cdot [2(1 - \cos \theta) - \sin^2 \theta \cdot \cos \theta], \quad (5)$$

де  $dG_F$  – енергія ансамблю теплового електромагнітного поля організму, що визначаються за допомогою рівняння:  $dG_F = -kT \ln Z = kT \ln(1 - e^{-h\nu/kT})$  Проаналізуємо зміну вільної енергії системи при утворенні фрактального кластеро-водяного середовища організму. При цьому будемо виходити з наступних, визначених вище положень та допущень:

Кут між молекулами за зв’язком  $O \dots H - 4^\circ$  ( $\Delta r_{ij}$ ). Довжина зв’язку  $H \dots O$  складає  $1,77 \text{ \AA}$ . Довжина

зв’язку  $O \dots O$  складає  $2,75 \text{ \AA}$ . Кут вигину між молекулами за зв’язком  $O \dots O$  будемо змінювати від  $10^\circ$  до  $30^\circ$  ( $\Delta \alpha_{jk}$ ). Кут між поверхнею клітини та зародком кластера змінимо при  $30^\circ, 45^\circ, 50^\circ$  і  $125^\circ$ . Показник,

що характеризує енергетичну перевагу в формуванні об'єму або поверхні  $r = \frac{dG_{об.}}{dG_n}$ . Результати представлені на рис. 2. Для усіх аналізованих значень співвідношення між змінами об'ємної та поверхневої енергій мають подібний характер. Зростання кількості молекул в системі від 6 до 10 не змінює, або навіть, незначно збільшує показник  $r$ , що вказує перевагу формування поверхні системи. Винятком є випадок при утворенні системи з вигином кута  $\alpha$  в  $20^\circ$ . Криві 1 і 2 на рис. 2 проходять через максимум при  $n=10$  моль, з послідовним інтенсивним зниженням. В цьому випадку інтенсивність формування менш енергоємного об'єму зародка кластера зростає при кількості молекул, що складає  $n=10$  моль, причому при куті  $\alpha=30^\circ$  ця перевага утворення об'єму зародка більш виражена. В моделі з кутом  $\alpha=20^\circ$  максимум не спостерігається, певна поверхня утворюється при меншій кількості молекул. В молекулярному проміжку 30 – 50 молекул відбувається зміна формування кластера в дві фази: для всіх кутів  $\alpha$  у разі кутів  $\theta=30^\circ, 45^\circ$ , і для  $\alpha=10^\circ$  і  $30^\circ$  у разі моделі з кутом  $\theta=50^\circ$  та  $125^\circ$  (на рис. 2 перехід показано пунктирною лінією). Як відзначено раніше, подібний перехід може свідчити на користь формування фрактального кластера. Для моделі з кутом  $\alpha=20^\circ$   $\theta=50^\circ$  і  $125^\circ$  навпаки спостерігається більший вигін кривої, що може вказувати на ущільнення кластера та формування спрощеної форми. При однаковій динаміці змін показника  $r$  для всіх випадків величина та інтенсивність його змін більш значна для випадку значення кутів  $\alpha=30^\circ$ ,  $\theta=50^\circ$  та  $125^\circ$ . Для моделі  $\theta=125^\circ$  збільшення кількості молекул в системі викликає зростання показника  $r$ , що викликає ріст поверхні.

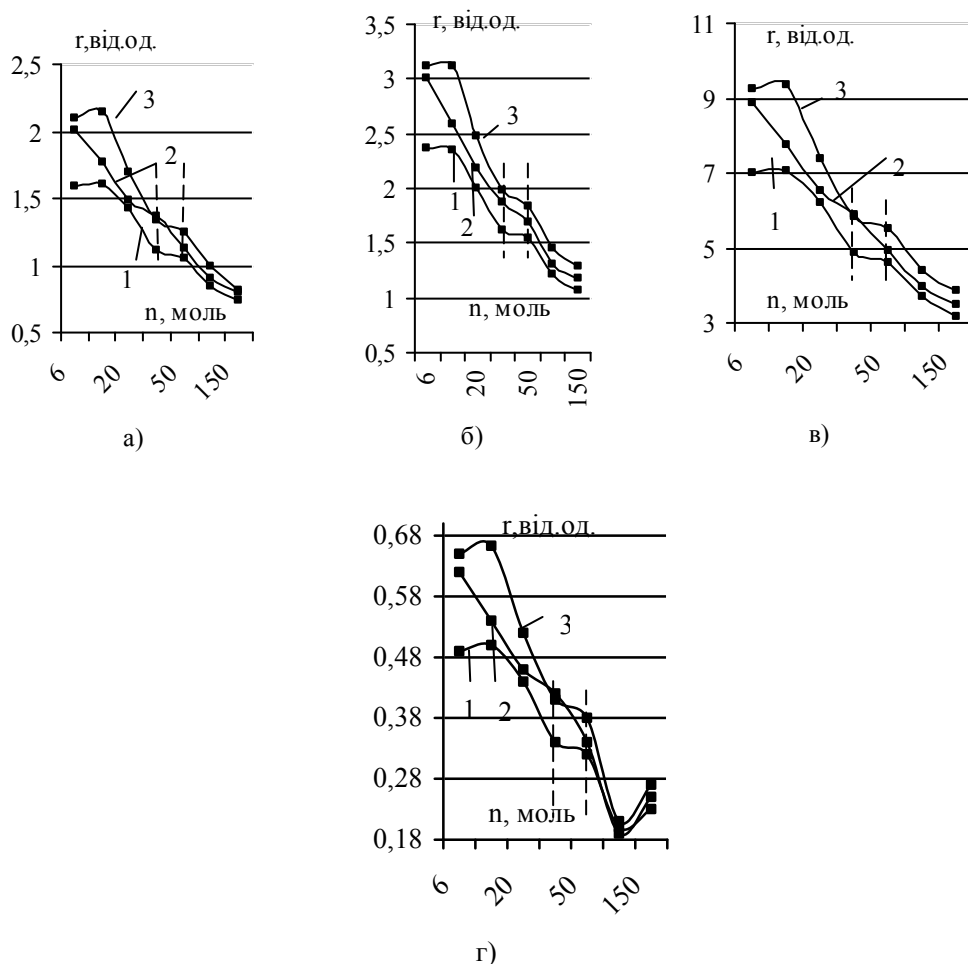


Рис. 2. Залежність показника  $r$  (при  $\theta$ : а –  $30^\circ$ , б –  $45^\circ$ , в –  $50^\circ$  і г –  $125^\circ$ ) від числа молекул в системі та кута вигину  $\alpha$  зв'язків: 1 –  $10^\circ$ ; 2 –  $20^\circ$ ; 3 –  $30^\circ$

Виходячи з приведенного судження про правила встановлення фрактальної розмірності, використовували в якості міри значення змін вільної енергії поверхні та об'єму при формуванні фрактального кластера. На відміну від загальноприйнятих норм визначення фрактальної розмірності за показниками маси або геометричного розміру об'єкта, використані енергетичні показники структуроутворення і, тому вони можуть відрізнятися від топологічних але вони показують енергетичну спрямованість процесу.

Коефіцієнт форми:

$$A = \frac{dG_{\Pi}}{dG_{об.}^{2/3}}. \quad (6)$$

Фрактальна розмірність:

$$D = \frac{\ln dG}{(0,5 + K)(\ln S - \ln A)}, \quad (7)$$

де  $K$  – коефіцієнт структурних особливостей поверхні (дефекти, дендриди і т.ін.).

Оскільки особливості формування структури поверхні визначаються співвідношенням змін вільних енергій поверхні та об'єму, то формула для визначення коефіцієнта структурних особливостей поверхні фрактального кластера має вигляд:

$$K = \frac{dG_{об.} - dG_n}{dG \cdot n}, \quad (8)$$

де  $\overline{dG}$  – середнє значення обох енергій з урахуванням кількості одиниць системи.

Збільшення кількості молекул в системі викликає зростання фрактальної розмірності у всіх випадках, при збереженні особливостей індивідуального характеру зростання в певних моделях. При куті  $\alpha = 10^\circ$  спостерігається зростання  $D$  зі збільшенням  $n$  для моделей з кутом  $\theta = 45^\circ, 50^\circ$  і  $125^\circ$ . Для моделі з кутом  $\theta = 30^\circ$ , при кількості молекул більше 50, значення  $D$  знижується до 2,69. При аналізі залежності показника  $r$  від кількості молекул в системі та вигину кутів між зв'язками зроблено припущення, що, починаючи з 50 молекул, формується фрактальний кластер, а в сукупності зі зниженням значення  $D$ , це може свідчити про утворення жорсткого кластера. У моделі з кутом  $\theta = 45^\circ$  ріст  $D$  для кутів  $\alpha = 10^\circ$  і  $30^\circ$  проходить ідентично, а для кута  $\alpha = 20^\circ$ , при переході від 6 молей до 10 молей, фрактальність падає, що вказує на можливість утворення сферичної дефектної структури, яка при збільшенні кількості молекул втрачає розгалуженість поверхні і переходить до більш спрощеної форми. У моделі з кутом  $\theta = 50^\circ$  ріст  $D$  для кутів  $\alpha = 20^\circ$  і  $30^\circ$  проходить майже однаково. Більш складна залежність для моделі з кутом  $125^\circ$ . Так, при  $\alpha = 10^\circ$  поверхня кластера змінюється від жорсткової до гладкої, а при  $\alpha = 20^\circ$  і  $30^\circ$  можливість утворення жорсткової форми можливо і при кількості молекул більше 100. Таким чином, можна припустити, що для утворення водяних фрактальних кластерів більш здатні приєднання на гачкоподібні виступи ліпідів або білкових молекул. Для їх утворення зміна вільної енергії найменша, що дозволяє формувати кластери зі складною шорстковою поверхню.

За отриманими результатами можна констатувати наступне:

– при відсутності захворювань системи молодого організму працюють узгоджено, а його вільна енергія мінімально достатня. Протягом життя організм піддається різного роду впливам, які поступово збивають узгодженість роботи системи. Її розбалансування призводить до росту вільної енергії. Старий організм має мінімальну достатню внутрішню енергію, а підвищення вільної енергії сприяє перебудові фундаменту системи – водяного матрикса за рахунок зміни розмірів та форми фрактальних кластерів. При утворенні кластерів старий організм, з одного боку, може витратити невеликі енергетичні резерви, з іншого, завдяки самозбереженню, повинен дотримуватися необхідності їх ефективної витрати. Крім того, з віком змінюється стан клітин – частково втрачаються гачкоподібні виступи ліпідних або білкових молекул. Тому водяні кластери, напевно, більше контактують з клітиною і утворюють більш спрощені форми, для яких обертання в системі ускладнене. Таким чином, шляхом енергетичного моделювання процесу формування фрактальних кластерів показано можливість утворення „старих” та „молодих” кластерів.

#### ЛІТЕРАТУРА:

1. Гладышев Г.П. Об истории создания термодинамической теории происхождения жизни. Биологическая эволюция и старение живых существ // Вестн. новых медиц. технол. – 2003. – Т.Х. – №4. – С. 87-88.
2. Постнов С.Е. Роль воды пограничного слоя в живом организме. Биофизическая модель // Биомедиц. Радиоэлект. – 2008. – №12. – С. 52-56.

НОВІКОВ Всеволод Олександрович – викладач-стажист кафедри інформаційно-вимірювальних технологій електроніки та інженерії Херсонського національного технічного університету.

Наукові інтереси:

– біотехнічні системи корекції та діагностування функціонального стану організму.