

МЕТОД ВЫЧИСЛЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТОВ ДЕПОЛЯРИЗАЦИИ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ И БИОЛОГИЧЕСКИХ СТРУКТУР ПРОИЗВОЛЬНОЙ ФОРМЫ

О.А. Горобченко

Харьковский Национальный Университет им. В.Н. Каразина, пл. Свободы 4, 61077, Харьков, Украина
e-mail: gorobchenko@library.univer.kharkov.ua

Поступила в редакцию 29 октября 2003 г.

Разработан эффективный алгоритм и программа для расчета коэффициентов деполяризации тел произвольной формы методом дискретного приближения. Рассчитаны коэффициенты деполяризации таких геометрических форм как плоский диск, сфера, цилиндр, полусфера, конус, октаэдр, спираль, модели пространственной структуры сывороточного альбумина (heart-shape) и реальной структуры сывороточного альбумина человека, построенной на основе рентгеноструктурных координат (Protein Data Bank, структура 1bm0).

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: коэффициент деполяризации, диэлектрическая проницаемость, дисперсные частицы.

При расчете эффективной диэлектрической проницаемости сложных систем [1, 2], к которым, в частности, относятся такие биологические объекты как растворы биополимеров и макромолекул, коллоидные растворы, растворы полиэлектролитов, клеточные суспензии и ткани необходим учет формы частиц-включений, отличающихся многообразием и неоднородностью строения. Для этих целей используют коэффициент деполяризации частиц, который зависит только от формы частицы и не зависит от ее объема. До настоящего времени частицы аппроксимировали простыми геометрическими объектами (сферы, эллипсоиды, пластины, цилиндры). Для таких объектов возможен аналитический расчет коэффициентов деполяризации, задающих форму частицы. Подробный обзор методов расчета эффективной диэлектрической проницаемости для дисперсных систем с частицами простых форм приведен в работе [3]. Однако исследование диэлектрических свойств биологических сред требует принимать во внимание реально существующую геометрию частиц и их индивидуальные особенности. С этой целью в настоящей работе разработан эффективный алгоритм и программа для расчета коэффициентов деполяризации тел произвольной формы методом дискретного приближения. Показана возможность применения метода для случая макромолекул белков, используя данные рентгеноструктурного анализа.

ТЕОРИЯ

Если незаряженное проводящее тело произвольной формы поместить в однородное электрическое поле напряженностью E , то тело приобретет некоторый дипольный момент P . В тензорной форме связь между E и P можно записать как

$$\frac{4\pi}{V} n_{ik} P_k = E_i \quad (1)$$

где n_{ik} - тензор второго ранга. Его главные значения обозначаются, как n_x, n_y, n_z и называются коэффициентами деполяризации [4]. Они зависят только от формы тела, но не от его объема. Однако нахождение данных параметров для случая тела произвольной формы представляет собой непростую задачу.

Действительно, пусть произвольное заряженное проводящее тело, занимающее область пространства V , находится в однородном поле E . Тогда потенциал поля вне тела должен удовлетворять уравнению Лапласа

$$\Delta\varphi = 0 \quad (2)$$

с граничным условием

$$\varphi|_S = const, \quad (3)$$

где S задает все точки поверхности, ограничивающей объем V . Получить решение уравнения в явном виде для тела произвольной формы не представляется возможным из-за очевидных трудностей в математическом описании поверхности S , и, следовательно, в удовлетворении граничному условию (3).

Среди подходов к определению поля заряженного проводящего тела произвольной формы может

использоваться метод дискретного приближения (ДП) [5, 6]. От прочих методов он отличается тем, что не накладывает никаких ограничений на форму и структуру материала заряженного проводящего тела. По этой причине этот метод и был использован в данной работе. Рассмотрим подробнее метод ДП.

Заменим исследуемое заряженное проводящее тело дискретной системой достаточно малых объектов, расположив их в узлах кубической решетки, равномерно заполняющей объем. Выберем в качестве таких объектов шары как наиболее удобные для расчетов, хотя объекты любой другой формы также подходят.

Пусть шар радиуса a находится во внешнем однородном поле \vec{E} . Будем искать потенциал этого поля в виде $\varphi = \varphi_0 + \varphi_1$, где $\varphi_0 = -\vec{E} \cdot \vec{r}$ - потенциал внешнего поля, а φ_1 - искомое изменение потенциала, вызванное шаром. Ввиду симметрии шара функция φ_1 может зависеть только от одного постоянного вектора \vec{E} . Единственное такое решение уравнения Лапласа, обращающееся в 0 на бесконечности, имеет вид:

$$\varphi_1 = -const \cdot \vec{E} \cdot \nabla \left(\frac{1}{r} \right) = const \cdot \frac{\vec{E} \cdot \vec{r}}{r^3}, \quad (4)$$

где \vec{r} - вектор, задающий точку наблюдения. Для удовлетворения граничного условия (3) необходимо, чтобы на поверхности шара φ было постоянным, отсюда находим $const = a^3$, так что

$$\varphi = -\vec{E} \cdot \vec{r} \left(1 - \frac{a^3}{r^3} \right) = -Er \cos \theta \left(1 - \frac{a^3}{r^3} \right), \quad (5)$$

где θ - угол между \vec{E} и \vec{r} .

Если наше тело аппроксимировано системой из N шаров, мы можем определить потенциал на i -м шаре φ_i как

$$\varphi_i = - \sum_{j=1}^N E_j r_{ij} \cos \theta_{ij} \left(1 - \frac{a^3}{r_{ij}^3} \right), \quad (6)$$

где \vec{r} - вектор, соединяющий i -ый и j -ый шар. Воспользовавшись известным соотношением

$$\vec{E} = -\nabla \varphi, \quad (7)$$

получаем систему из N уравнений:

$$\vec{E}_i = \nabla \left(\sum_{j=1}^N E_j r_{ij} \cos \theta_{ij} \left(1 - \frac{a^3}{r_{ij}^3} \right) \right). \quad (8)$$

Эта система может быть решена методом простых итераций. Зная поле на каждом шаре \vec{E}_i , легко найти потенциал в произвольной точке:

$$\varphi = - \sum_{j=1}^N E_j r \cos \theta \left(1 - \frac{a^3}{r^3} \right). \quad (9)$$

А зная потенциал, из известного соотношения

$$\varphi - \varphi_0 = \frac{Ex}{r^3} \frac{V}{4\pi n_x} \quad (10)$$

получить коэффициенты деполяризации n_x, n_y, n_z .

Точность метода ДП контролируется сравнением аналитического решения для коэффициентов деполяризации шара (для которого из соображений симметрии, очевидно, что $n_x = n_y = n_z = \frac{1}{3}$) с результатом, полученным при помощи метода ДП. В общем случае, можно выделить два источника погрешностей, возникающих при вычислении коэффициентов деполяризации методом ДП. Первый из них связан с представлением непрерывного (монокристаллического) тела набором элементарных рассеивателей (шаров). Другой источник погрешностей связан с приближенностью решения системы линейных алгебраических уравнений. Тем не менее, метод ДП обеспечивает хорошую точность.

РЕЗУЛЬТАТЫ

На основе вышеизложенной теории был разработан эффективный вычислительный алгоритм и создана компьютерная программа для расчета коэффициентов деполяризации тел произвольной формы методом дискретного приближения. Она дает хорошее согласие с аналитическим решением для тел стандартной формы. На рис. 1-3 представлены геометрические объекты стандартной формы и их коэффициенты деполяризации (рис. 1 – плоский диск: $n_x = n_y = 0; n_z = 1$; рис. 2 – бесконечный цилиндр: $n_x = 0; n_y = n_z = 0.5$; рис. 3 – сфера: $n_x = n_y = n_z = \frac{1}{3}$).

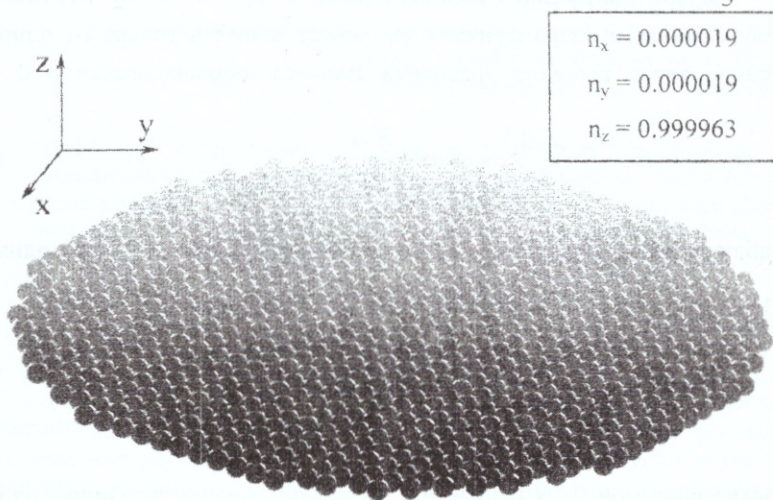


Рис. 1. Плоский диск и его коэффициенты деполяризации.

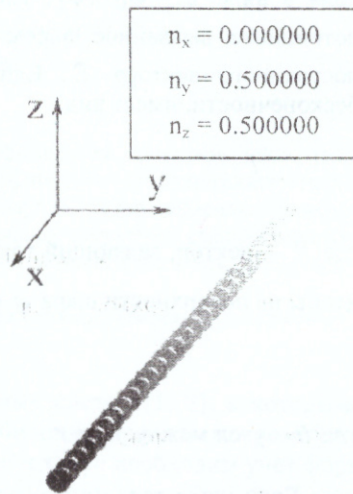


Рис. 2. Бесконечный цилиндр и его коэффициенты деполяризации.

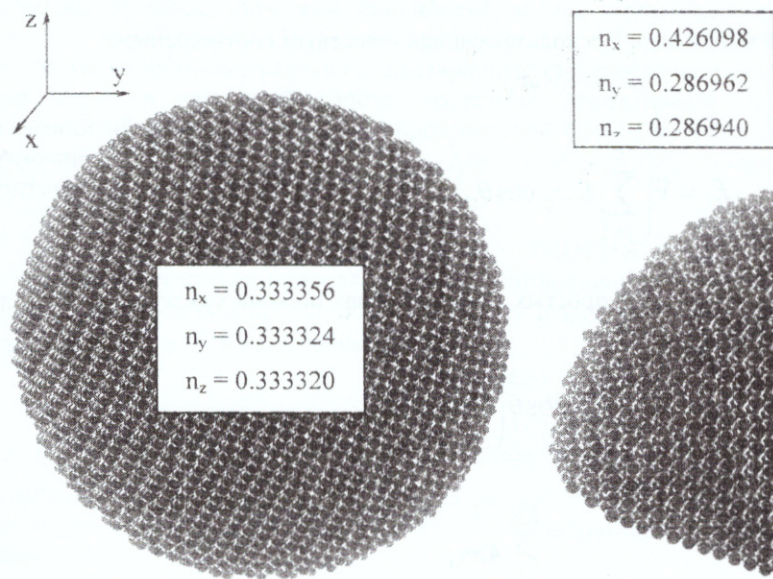


Рис. 3. Сфера и ее коэффициенты деполяризации.

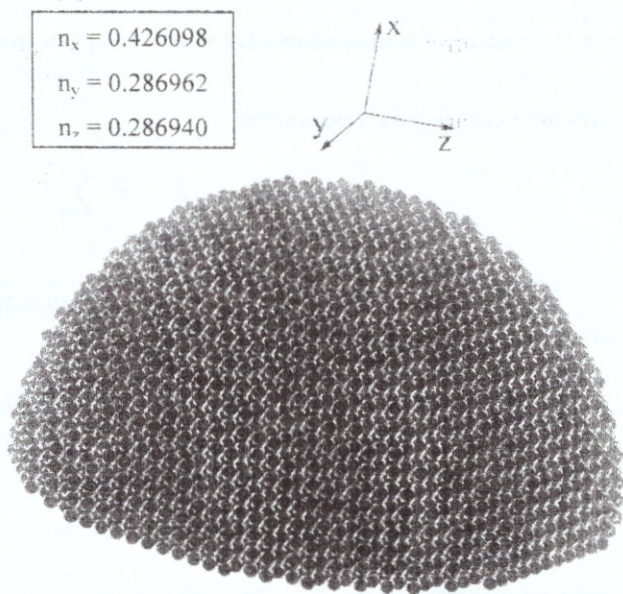


Рис. 4. Полусфера и ее коэффициенты деполяризации.

Рис. 4-7 показывают тела произвольной формы и их коэффициенты деполяризации (рис. 4 – полусфера; рис. 5 – конус; рис. 6 – октаэдр – структура кристаллов белка из микроорганизмов *Bacillus thuringiensis* [7]; рис. 7 - спираль). Рис. 8 и 9 задают модели кристаллической структуры сывороточного альбумина. Форма на рис. 8 задается соотношением (в цилиндрических координатах r, φ, z)

$$r(\varphi, z) = \frac{\sqrt{1-z^2}}{3} \left[1 + \cos \varphi + \sqrt{(\cos \varphi)^3 + 2(\sin \varphi)^4} \right] \tag{11}$$

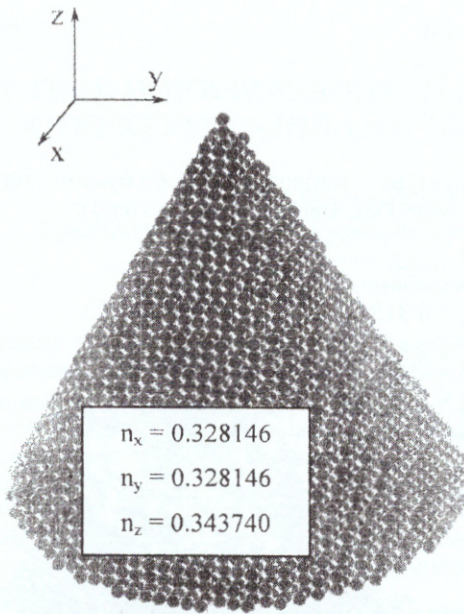


Рис. 5. Конус и его коэффициенты деполяризации.

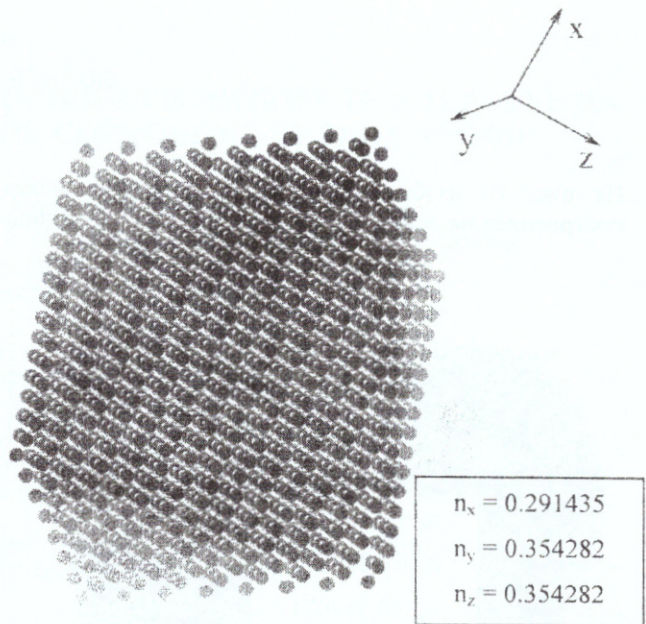


Рис. 6. Октаэдр – структура кристаллов белка из микроорганизмов *Bacillus thuringiensis* и его коэффициенты деполяризации [7].

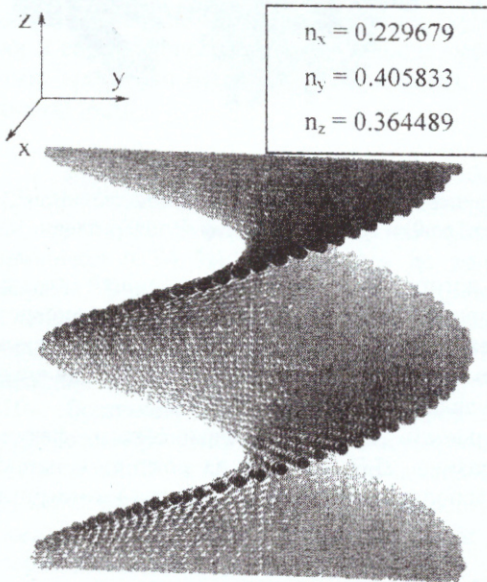


Рис. 7. Спираль и ее коэффициенты деполяризации.

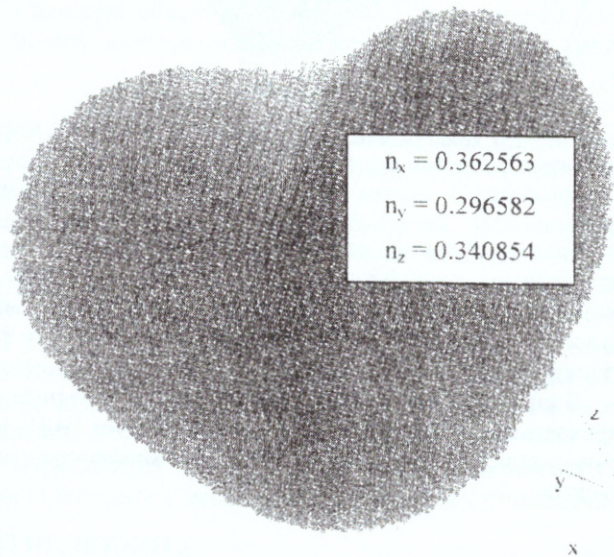


Рис. 8. Модель структуры сывороточного альбумина (11) и ее коэффициенты деполяризации.

Форма на рис. 9 задается соотношением:

$$r(\varphi, z) = \frac{\sqrt{1-z^2}}{5} \left[1 + \cos \varphi + \sqrt{(\cos \varphi)^3 + 2(\sin \varphi)^4} + \right. \\ \left. + 2|\cos \varphi|^{1.5} \Phi(\cos \varphi) \sqrt{(\cos[\arctan^3 \sqrt{tg \varphi}])^6 + (\sin[\arctan^3 \sqrt{tg \varphi}])^6} \right] \quad (12)$$

где Φ – так называемая функция Хевисайда:

$$\Phi(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ 0.5, & x = 0 \\ 1, & x > 0 \end{cases} \quad (13)$$

На рис. 10 изображена реальная кристаллическая структура сывороточного альбумина человека, построенная на основе рентгеноструктурных координат (Protein Data Bank, структура 1bm0).

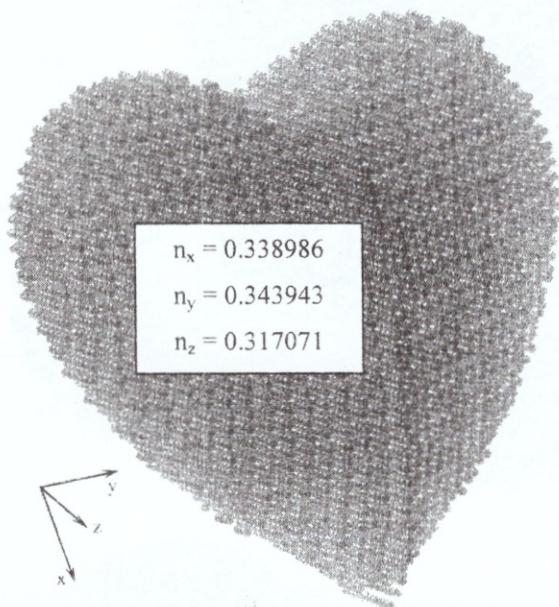


Рис. 9. Модель кристаллической структуры сывороточного альбумина (12) и ее коэффициенты деполяризации.

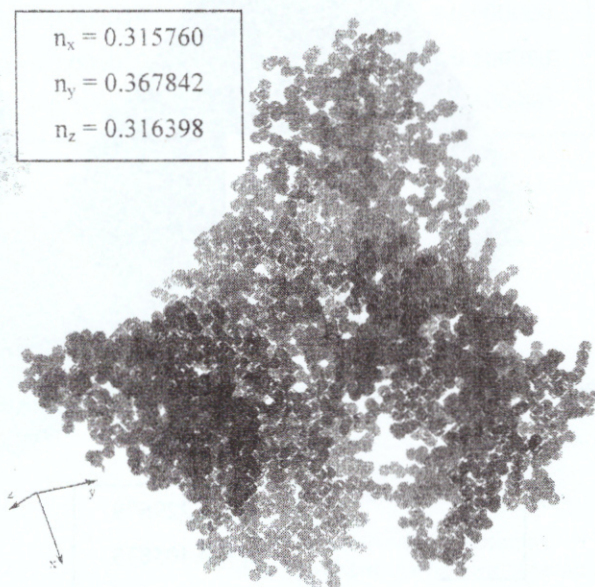


Рис. 10. Реальная кристаллическая структура сывороточного альбумина человека (Protein Data Bank, файл 1bm0) и ее коэффициенты деполяризации.

Таким образом, разработанный вычислительный алгоритм позволяет с хорошей точностью рассчитывать коэффициенты деполяризации тел произвольной формы методом дискретного приближения. В общем случае метод может быть применен для любых геометрических, химических или биологических структур (ДНК, клетки) с заданной формой и топологией поверхности для решения различных задач, требующих определения коэффициентов деполяризации.

Благодарности. Выражаю искреннюю признательность аспиранту физического факультета Харьковского национального университета им. В.Н. Каразина Д.В. Петрову за помощь в написании вычислительной программы для расчета коэффициентов деполяризации и визуализации геометрических объектов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1 Gatash S.V., Styopin L.D. Dielectric permittivity of heterogeneous disperse systems // Telecommunications and Radio Engineering. – 1999. – 53, №7-8. – p. 200-203.
- 2 Sergey Gatash, Olga Gorobchenko, Olga Khoruzhaya, Vsevolod Kashpur, Vladimir Maleev. Dielectric permittivity of heterogeneous disperse systems with particles of various shapes and structure under influence of physical factors // 2th International Conference "Broadband Dielectric Spectroscopy and its Applications" (IDS & DRP 2002). – Leipzig. – 2002. – Т.55.
- 3 Степин Л.Д. Исследование диэлектрических свойств дисперсных систем: Дис. ... канд. физ.-мат. наук. Харьков, 1965. –196 с.
- 4 Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред.–ИФМЛ, М.,–1959. – 532 с.
- 5 Draine B.T. The discrete-dipole approximation and it's application to the interstellar graphite grains // Astrophys. J. – 1988. – V. 333. – p. 848–872.
- 6 Draine B.T., Flatau P.J. Discrete-dipole approximation for scattering calculations // J. Opt. Soc. Am. A. – 1994. – V. 11. – p. 1491–1498.
- 7 Вайнштейн Б.К. Биологические кристаллы // Физический Энциклопедический словарь. – М.: Сов.энциклопедия, 1983.