

УДК 549.8:549.001.57

С.В.Кадурін, О.В.Чепіжко, В.М.Кадурін
Одеса. Державний університет

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ФОРМУВАННЯ ОРГАНО-МІНЕРАЛЬНИХ АГРЕГАТІВ У НИРКАХ ЛЮДЕЙ

Особливе місце в дослідженні мінералів займає моделювання процесів мінералоутворення – створення людиною зображення вивченої частини природного середовища, трансформованого в його логічне, математичне, фізичне або картографічне уявлення [2, 6, 7].

Одна з головних властивостей моделі – це її здатність у різній формі відображати або відтворювати оригінал. Іншою суттєвою характеристикою моделей є те, що вони вибірково подібні (тобто подібні на оригінали лише за окремими ознаками). Із цього випливає важлива особливість моделей: будучи носіями вибіркової подібності, вони не можуть бути в усьому подібні до оригіналу. Модель схожа на систему, що моделюється, проте обов'язково відрізняється від цієї системи.

Створення імітаційних моделей мінералогічного об'єкта пов'язано з певними труднощами перевірки їхньої адекватності об'єкту. Проте алгоритмізація факторів умов протікання мінералогічних процесів та створення бази даних дають змогу досить об'єктивно зобразити мінералогічні об'єкти у рамках моделі. Тип моделі, запропонований у даній роботі, об'єктивно відображає можливості принципів і методів подібності й моделювання.

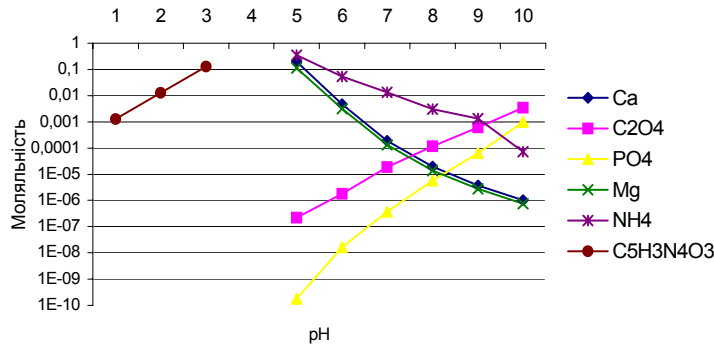
У процесі дослідження мінералів, у тім числі й біомінералів, фахівцям необхідно вирішувати так звану “зворотну задачу”. Сенс її полягає в тому, що мінеральне тіло, яке вивчається, вже пройшло всі етапи формування і зміни. Ці процеси наклали свій відбиток на мінеральний об'єкт, вони, так би мовити, “записані” в ньому. Завдання фахівця полягає в тому, щоби розпізнати наявну інформацію й зуміти її інтерпретувати, отже – відновити всю історію формування мінерального тіла. Біомінерали не є винятком. За наявними зразками ми намагаємося відновити умови й механізми їхнього утворення. Це означає, що ми рухаємося назад у часі, тобто вирішуємо “зворотну задачу”. Загалом же моделювання є засобом розв'язання “прямої задачі”: чи утворяться ті мінерали, які задані експериментально. Отже, моделювання є ідеальним засобом перевірки правильності запропонованих гіпотез.

Математичне моделювання – це система обчислень, які дають змогу розрахувати з тієї або іншою точністю імовірність розвитку досліджуваного процесу. Щодо процесів мінералоутворення в нирці людини використовують методику обчислення тривалості кристалічних фаз.

Насамперед необхідно визначити параметри системи, що розглядається. Відомо, що основними параметрами будь-якого мінералотворного середовища є температура, тиск, концентрація, pH , Eh . Саме вони визначають коефіцієнт перенасичення середовища, a , отже, і можливість існування тієї чи іншої кристалічної фази в розчині. Окремі параметри, в першу чергу – температура й тиск, стосовно до нирки

людини можна прийняти за постійну величину. Отже, основними параметрами мінералотворного середовища в нирці людини є концентрація речовин, що формують кристалічні фази, і pH середовища. Проаналізувавши макрохімічний склад виявлених уролітів, можна визначити основні іони, що формують кристалічні фази, наявні в нирках людей. Це іони Ca^{2+} , Mg^{2+} , NH_4^+ , $C_2O_4^{2-}$, PO_4^{3-} , $C_3H_3N_4O_3^-$.

Обчислення тривалості кристалічних фаз – це складання системи рівнянь, в яку входять рівняння тривалості сполук, що розглядаються, рівняння дисоціації шавлевої, ортофосфорної та сечової кислот і рівняння масової кількості фосфатних сполук у розчині. Розв'язання цієї системи ми здійснювали способом підстановки, при цьому активність усіх компонентів виражали через активність іона водню. Отже, активність кожного іона, що розглядається, залежить від значення pH розчину. Перейти від значень активності до молярності можна шляхом обчислення спочатку іонної сили розчину, а потім – коефіцієнта активності кожного іона. Це дає змогу обчислити рівноважні значення молярності кожного іона при кожному конкретному значенні pH середовища. На підставі отриманих результатів побудовано діаграму (див. рисунок).



Рівноважні значення молярності компонентів, що досліджуються в нирці людини

Як видно з діаграми, поля стійкості, розмежовані лініями рівноваги для катіонів та аніонів, мають різне положення щодо запропонованих координат. Лінії рівноваги катіонів мають нахил праворуч, аніонів – ліворуч. Області між лініями аніонів і катіонів – це поля стійкості їхніх сполук. Порівнюючи цю діаграму з результатами клінічних спостережень [3], неважко знайти низку принципів подібностей. Зокрема, у процесі медичних досліджень виявлено, що фосфатні уроліти утворюються в середовищі, pH якого становить понад 7,0, а саме таке твердження впливає з наведеної діаграми.

Так само співпадають інтервали формування оксалатних і уратних уролітів: Для оксалатів клінічно виділений інтервал pH становить 5,5–7,0, а для уратів – менше 4,0. Ці інтервали підтверджено нашими обчисленнями.

Діаграма дає змогу побудувати теоретичну модель формування уролітів. З цієї метою проаналізуємо лінію $pH = 8,0$. Як видно з діаграми, навіть при дуже незначній концентрації (10^{-6} моль/л) фосфати магнію й кальцію вже близькі до перетину лінії рівноваги, тобто, перебувають у метастабільній фазі кристалізації. Взага-

лі-то при концентрації 10^{-5} моль/л повинен почати кристалізуватися боб'єрит, однак це дуже рідкісний мінерал, який у вигляді самостійної кристалічної фази в уролітах не зустрічається. Причина цього явища, вочевидь, полягає в наступному: у метастабільних умовах, при невисокій концентрації катіонів *Ca* та *Mg* і аніонів PO_4 у результаті запального процесу (пієлонефриту) в сечу проникають молекули білка. За [1, 4], структура білкової молекули за багатьма параметрами подібна до кристалічної структури апатиту. Схожість їх настільки значна, що спостерігається процес кристалізації апатиту на структурованій молекулі білка. Таким чином, у нирці органічна речовина є матрицею для зародження фосфату кальцію, вона перешкоджає утворенню фосфату магнію. Це призводить до формування кристалічної затравки для наступного розвитку уроліту. В середині поля стійкості фосфату *Ca* на даному зародку і починає формуватися фосфатний уроліт. У полі стійкості оксалатів на ньому формуються оксалати *Ca*. Подібні випадки ми неодноразово фіксували під час досліджень центральних частин оксалатних уролітів.

В області підвищеної лужності (див. рис.) знаходиться поле стійкості струвіту. Воно обмежене лінією рівноважного вмісту фосфат-іона праворуч і лінією рівноважного вмісту іона NH_4^+ ліворуч. За високих концентрацій у лужному середовищі може існувати оксаміт – надзвичайно рідкісний оксалат амонію. Це пояснюється положенням його поля стійкості.

В умовах підвищеної кислотності, як видно з діаграми, утворюються кристалічні різновиди сечової кислоти. Зазвичай їхня поява зумовлена одночасним виникненням великої кількості зародків, що призводить до формування такого ефекту, як утворення “піску”. Цей факт, нарівні з положенням поля стійкості уратів в області більших концентрацій, свідчить про те, що для них характерна спонтанна кристалізація.

Особливе місце при вивченні органо-мінеральних агрегатів у нирках людини займають уроліти змішаного складу. Їх дослідження засвідчили, що зміна оксалатних і фосфатних фаз відбувається дуже часто і без значних зупинок росту й розчинення раніше сформованої фази. Як уже зазначалося, в деяких оксалатних уролітах трапляються фосфатні центри кристалізації. Уроліти ж, в які входить уратна складова, завжди мають одну або більше зон розчинення. Зазвичай такі зони утворюються на межі різних кристалічних фаз. Найяскравіше це проявлено у випадку, коли в центральній частині уролітів розміщуються урати, а на периферії – оксалати. Урати найсильніше розчиняються, тому зміна фази, що кристалізується, завжди супроводжується яскраво вираженим розчиненням уратного ядра уроліту. У разі, коли на оксалатних уролітах починають формуватися урати, на межі поділу двох середовищ фіксується товстий прошарок органічної речовини, що наочно свідчить про достатньо тривалу зупинку росту уроліту. Випадків, коли в одному уроліті наявні уратні й фосфатні кристалічні фази, ми не зафіксували.

Отже, на підставі визначення парагенезису як послідовного виділення мінералів з одного і того ж джерела [5] можна зробити висновок, що в комплексі уролітів наявні дві парагенетичні асоціації – фосфатно-оксалатна та уратна.

Отримані результати дають змогу сформулювати низку положень, які визначають модель формування уролітів.

Зародження оксалатних і фосфатних уролітів відбувається на зародку, в основі якого знаходиться молекула білка. На ній спочатку, за принципом епітаксiального наростання, формується апатитова кристалічна структура, а згодом починає утво-

рюватися основна мінеральна фаза. Зародження уратних уролітів відбувається іншим шляхом – це спонтанна кристалізація з пересиченого розчину.

Подальший ріст кожного виду уроліту відбувається в певних умовах, визначальними серед яких є pH середовища і концентрація мінералотворних компонентів. Мінеральні фази уролітів, що формуються, визначаються двома парагенетичними асоціаціями: фосфатно-оксалатною (боб'єрит, апатит, ювеліт – уделіт – струвіт – оксаміт) та уратною (урикіт та інші кристалічні різновиди сечової кислоти). Ріст уролітів відбувається пошарово з формуванням сферолітів. У деяких випадках в оксалатних уролітах можливо формування великих (до 2,5 мм) кристалів уделіта, які звичайно вкривають поверхню уроліта друзами й щітками.

Часткове розчинення уролітів спостерігається досить часто. Найбільш зазнають впливу цих процесів уратні уроліти. Слідом за частковим розчиненням починається новий етап росту. Інколи він може супроводжуватися зміною мінеральної фази, що кристалізується.

1. *Голубев С.Н.* Биоминерализация и предбиологическая эволюция // Актуальные вопросы современной палеоальгологии. К., 1986. С. 15–17.
2. *Зелинский И.П., Черкез Е.А., Гузенко А.В.* Инженерно-геологические прогнозы и моделирование. Одесса, 1983.
3. *Кораго А.А.* Введение в биоминералогію. С.-Пб, 1992.
4. *Костецкий Э.Я., Алексанов С.А.* О возможности синтеза нуклеопротеидов на матрице апатита // Докл. АН СССР. 1981. № 4. С. 6–14.
5. *Лазаренко Е.К.* Основы генетической минералогии. Львов, 1963.
6. *Розовский Л.Б., Зелинский И.П.* Инженерно-геологические прогнозы и моделирование. Одесса, 1975.
7. *Штофф В.А.* О роли модели в познании. Л., 1963.

S.V.Kadourin, O.V.Tchepizhko, V.M.Kadourin

MATHEMATICAL MODELLING OF ORGANIC-MINERAL AGGREGATES FORMATION IN KIDNEYS OF THE PEOPLE

The paper is devoted to the results of mathematical modelling of formation of organic-mineral aggregates in kidneys of the people. It is established that the growth of each kind of urolites occurs in the certain conditions, main among which are pH of environment and concentration of mineral-forming components. The mineral phases formed urolites are determined by two paragenetic associations.

Стаття надійшла до редколегії 09.06.2000