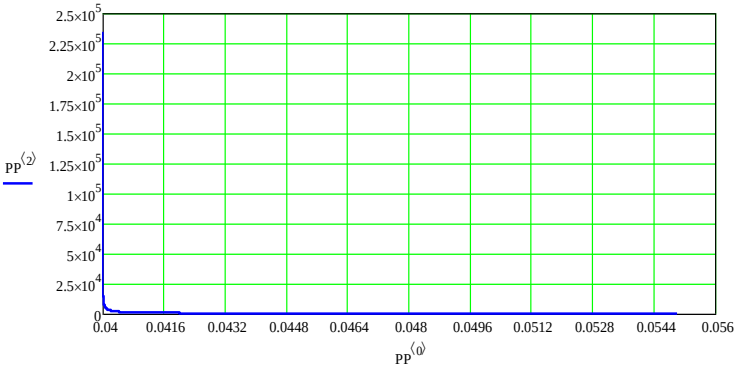

Рисунок 5 – ρ≠const; μ≠const; h≠const; k≠const

Как видно из графиков наибольшее влияние на градиент давления оказывают изменения плотности газа ρ и параметров стыка k и h.

Пренебрежение изменением параметров газа и стыка приводит к заниженным на порядок и более результатам

Выводы:

При расчете герметичности уплотнительных устройств со значительным перепадом давлений газа на входе встык и выходе из стыка необходимо учитывать изменения плотности газа и параметров стыка по его длине.

Список литературных источников

1 Начовний І.І. Розробка математичної моделі течії газу крізь торцеві стики ущільнювальних елементів при пружному контакті мікро – нерівностей [Текст] / І.І. Начовний , І.М. Кузяєв, Ів.І. Начовний // Матеріали І Всеукраїнської наук.-техн.конф., 3-5 листопада 2015 р. Компютерне моделювання та оптимізація складних систем (КМОСС -2015)В 2-х ч. – Дніпропетровськ: ДВНЗ УДХТУ, 2015.-4.1.-с.131-134.

2 Демкин Н.Б. Качество поверхности и контакт деталей машин [Текст] /Н.Б. Демкин, Э.В.Рыжов.- М.:Машиностроения, 1981.- 244 с.

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДИСОЦІАЦІЇ БІОПОЛІМЕРІВ ДНК, ЩО СТИМУЛЬОВАНІ РЕАКЦІЙНО-АКТИВНИМИ НІТРОГЕНВМІСНИМИ СПОЛУКАМИ

Огурцов О.М., Близнюк О.М., Клещев М.Ф.

[1]Національний технічний університет "Харківський політехнічний інститут", Харків, Україна

Проблема селективного керування концентрацією та шляхами перетворення нітроген (I) оксиду (закису азоту) являється однією з потенціальних технологій керованої модифікації властивостей біоматеріалів, оскільки N_2O має сильно виражені канцерогенні властивості, як прекурсор цілого спектру радикалів, що стимулюють дисоціацію біополімерів ДНК [1]. Позаяк N_2O є найбільш

поширеним інгаляційним анестетиком, то дослідження можливих шляхів патологічного метаболізму N_2O є актуальною медичною проблемою. В попередній роботі запропоновано застосуванням NSK-моделі (nonsteady kinetic model) для аналізу дозових кривих процесів, що стимульовані модифікацією біоматеріалів електронними збудженнями, стосовно систем, реакційна активність яких суттєво залежить від присутності N_2O. Як було показано в роботі [2], в атмосфері N_2O електронно-стимульовані процеси дисоціації біополімерів ДНК перебігають в 1,5–1,9 раз ефективніше, порівняно з атмосферою O_2 або N_2 [2,3]. Притому ефективність саме електронно-стимульованих процесів, в яких утворюються реакційно-активні нітрогенвмістні сполуки, RNS (reactive nitrogen species), зростає в 7,2 рази в присутності N_2O. Більшість RNS або безпосередньо, або при взаємодії з другими радикалами викликають руйнування біополімерів ДНК. Так N_2O_3 є сильним дезамінуючим агентом азотистих основ ДНК, що перетворюють гуанін в ксантін та оксанозін, аденін в гіпоксантін, цитозін в урацил, 5-метілцитозін в тимін. N_2O_3 може взаємодіяти з вторинними амінами, утворюючи канцерогенні N-нітрозаміни, які руйнують біополімери ДНК алкілірованням.

Крім прямої дисоціації біополімерів ДНК RNS являються генотоксичними, перед усім за рахунок мутацій G:C та A:T внаслідок дезамінування ДНК [3]. Утворення RNS стимулює епігенетичні порушення, насамперед внаслідок нітрування амінокислоти тирозин з утворенням 3-нітротирозіну (NTYR). NTYR-білки являються маркерами багатьох патогенних станів, включаючи діабет, гастрит та рак легенів. Посттрансляційна модифікація дезактивує антіонкобілки p53 за рахунок формування дісульфідних зв'язків та, одночасно, активує протоонкогени ras-p21 внаслідок S-нітрозилювання (утворення тіонітритів) та утворення NTYR. Крім того, RNS інгібують репараційні ферменти ДНК; активують деякі ген-супресорні ферменти, такі, ік ДНК-метілтрансфераза, які подавляють експресію генів; стимулюють ангіогенез та супресію імунітету, інгібуючи проліферацію лімфоцитів [1–3].

Альтернативою ензиматичному формуванню RNS є утворення RNS безпосередньо в біопрепараті, що стимулюється електронними збудженнями. Так, дисоціативне приєднання DEA (dissociative electron attachment) до N_2O низькоенергетичних електронів LEE (low energy electrons) з енергіями 0–30 эВ приводить до утворення O^- в реакції $e^- + N_2O \rightarrow N_2 + O^-(^3P)$ з енергією дисоціації ~1 эВ, що більш ніж в шість разів менше, за аналогічну енергію для генерації іонів оксиґену при DEA киснем [1–3].

В свою чергу іони оксиґену ініціюють утворення RNS в реакціях $O^- + N_2O \rightarrow NO_2^- + N$ та $O^- + N_2O \rightarrow NO^- + NO$. Далі NO^- в іон-молекулярній реакції $NO^- + N_2O \rightarrow NO_2^- + N_2$ конвертується в NO_2^-. Аналогічно, при взаємодії O^- та NO^- з N_2O утворюються $N_2O_2^-$ та $N_3O_2^-$. Крім RNS результатом DEA до N_2O може бути утворення реакційно-активних оксиґен-вмістних сполук, ROS (reactive oxygen species), наприклад, O_2^- в реакції $O^- + N_2O \rightarrow N_2 + O_2^-$ або молекулярного оксиґену

$N_2O + O(^1D) \rightarrow N_2 + O_2$, який руйнує ДНК, стимулюючи утворення пероксірадикалів ДНК- $O_2^- \bullet$ [1–3].

Результати експериментів по радіаційно-стимульованій дисоціації біополімерів ДНК в атмосфері N_2O при опроміненні Х-променями або комбінованої дії Х-променів та LEE показали, що спочатку плазміди ДНК знаходились в суперспіралізованій SC-конформації (supercoiled Cf). Одноланцюговий розрив ДНК-нитки SSB (single strand break) в такій плазміді переводив плазміду в кільцеву конформацію – С-конформацію (circular Cf). Одночасний розрив двох ниток ДНК DSB (double strand break) переводив плазміду в лінійну L-конформацію (LC). Нами досліджено кінетику синхронного зменшення відсоткового вмісту ДНК в SC-конформації та зростання відсоткового вмісту ДНК в С-конформації внаслідок SSB-дисоціації подвійної спіралі ДНК для випадків опромінення зразка Х-променями (1,5 кеВ) або одночасного опромінення як Х-променями (1,5 кеВ), так і низькоенергетичними електронами LEE (0–30 еВ) в атмосфері N_2O. Одержані експериментальні результати дослідження кінетики росту ДНК в L-формі внаслідок DSB-дисоціації ДНК при опроміненні в атмосфері N_2O зразку Х-променями (1,5 кеВ) або при одночасному опроміненні як Х-променями (1,5 кеВ), так і низькоенергетичними електронами LEE (0–30 еВ). Поглинання Х-променів та LEE зразком в атмосфері N_2O приводить до формування RNS та ROS, які відповідають мобільним локалізованим збудженням MTE (mobile trapped excitations). В NSK-моделі кінетика накопичення продуктів дисоціації можна описати рівнянням $C = C_{\text{макс}}\left(1 - \exp\left[-\left(k_{\text{лок}} C_{\text{DNA}}^0 + k_{\text{дел}} + k_{\text{дис}}\right)\cdot t\right]\right)$, де $k_{\text{лок}}$ – константа швидкості локалізації збудження на ДНК; $k_{\text{дел}}$ – константа швидкості де локалізації збудження з ДНК; $k_{\text{дис}}$ – константа швидкості дисоціації ДНК; C_{DNA}^0 – вихідна концентрація ДНК [2,3]. Порівнюючи результати моделювання з експериментальними даними можна визначити фактор підсилення *EF* (enhancement factor) процесів дисоціації ДНК за рахунок низькоенергетичних електронів $EF = \dfrac{K_{\text{X+LEE}}}{K_{\text{X}}}$, де $K = k_{\text{лок}} C_{\text{DNA}}^0 + k_{\text{дел}} + k_{\text{дис}}$. Для SC-конформації ДНК: $EF_{\text{SC}} = 1{,}88 \pm 0{,}05$. Для С-конформації ДНК: $EF_{\text{C}} = 1{,}59 \pm 0{,}07$. Для L-конформації ДНК: $EF_{\text{L}} = 1{,}51 \pm 0{,}08$. Ці значення в межах похибки співпадають з експериментально одержаними значеннями для SC, C та L конформацій (1,9 ± 0,2, 1,6 ± 0,3 и 1,5 ± 0,4, відповідно) [1–3].

Розробка нових високоефективних технологій радіаційної модифікації матеріалів електронними збудженнями належить до актуальних напрямків сучасного пошуку в галузі високих технологій, та водночас використання опромінення пучками фотонів та низькоенергетичних часток для керованої модифікації властивостей молекулярних матеріалів дозволяє як безпосередньо стимулювати руйнування міжатомних зв’язків за рахунок локалізації електронного збудження на цьому зв’язку, так і генерувати реакційно-активні

радикали поблизу зв'язків, що атакуються. Для контролю процесів дисоціації необхідний сайт-специфічний дистанційний безперервний аналітичний метод контролю стану зразків під опроміненням, як складову частину якого пропонується використовувати запропонований раніше нестаціонарний кінетичний метод, застосування якого в даній роботі дозволило достатньо точно описати кінетику дисоціації біополімерів ДНК, що стимульована реакційно-активними нітроген-вмістними сполуками, що утворюються в результаті електронно-стимульованого розкладання молекул N_2O в зразках біопрепаратів.

Список літературних джерел

1. Hussain S.P. Radical Causes of Cancer / S.P. Hussain, L.J. Hoseth, C.C. Harris // Nature Reviews Cancer. – 2003. – V. 3. – P. 276–286.

2. Огурцов А.Н. Кинетическое моделирование разложения оксида азота (I) в технологиях очистки хвостовых газов и стимулированной диссоциации биополимеров ДНК / Огурцов А.Н., Близнюк О.М. // Интегрированные технологии и энергосбережение. – 2012. – №4. – С. 48–53

3. Alizadeh E. Soft X-ray and Low Energy Electron-Induced Damage to DNA under N_2 and O_2 Atmospheres / E. Alizadeh, P. Cloutier, D. Hunting, L. Sanche // The Journal of Physical Chemistry B. – 2011. – V. 115. – P. 4523–4531.

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ЗБІРКИ СКЛАДЕНОЇ ОБОЛОНКИ

Олевський В.І.[1], Олевська Ю.Б.[2], Шапка І.В.[1]

[1] ДВНЗ «Український держаний хіміко-технологічний університет», Дніпро, Україна

[2] Національний гірничий університет, Дніпро, Україна

Складальні операції є заключним етапом виготовлення машин, де проявляються всі накопичені технологічні недосконалості [1]. Особливий інтерес представляє процес складання складених оболонок і втягування їх у контейнер (втягування вала у втулку) під дією осьової рушійної сили, що відповідає, наприклад, горизонтальній збірці багатоступеневих твердопаливних ракет контейнерного базування. Досвід складання показує, що поєднання з лінійним базам (по довжині) не викликає ускладнень, а поєднання кутових баз (по куту розвороту вала щодо втулки) виявляється складним і вимагає істотних додаткових витрат. Розв'язання проблеми можливе шляхом моделювання з урахуванням технологічних відхилень на основі запропонованого в [2] методу.

Для наведеного в таблиці 1 набору недосконалостей був реалізований імітаційний експеримент. Розіграш випадкової матриці експерименту при нормальному розподілі параметрів в зазначених діапазонах задавалися за методикою, описаної в [2].