

Т.С. ВЛАСЕНКО,¹ Д.А. ГАВРЮШЕНКО,^{1,2} К.В. ЧЕРЕВКО,^{1,2} Л.А. БУЛАВІН^{1,2}¹ Інститут проблем безпеки атомних електростанцій НАН України
(Вул. Лисогірська, 12, Київ 03028; e-mail: vlasenko.tata@gmail.com)² Київський національний університет імені Тараса Шевченка, фізичний факультет
(Просп. Академіка Глушкова, 4, Київ 03127; e-mail: k.cherevko@knu.ua)

ВПЛИВ РАДІАЦІЙНОГО ОПРОМІНЕННЯ НА ПАРАМЕТРИ ПОЛЕГШЕНОЇ ДИФУЗІЇ МОДЕЛЬНОЇ МЕДИКО-БІОЛОГІЧНОЇ СИСТЕМИ

УДК 512, 536.755

В рамках нерівноважної статистичної термодинаміки розвинуто теоретичну модель дифузії в обмежених багатокомпонентних рідинних системах за наявності радіаційного опромінення, що дозволяє визначити стаціонарні дифузійні потоки з урахуванням спричинених опроміненням змін у рівноважній частині коефіцієнта дифузії. Для низки модельних розчинів проведено оцінку ентропійних внесків у рівноважну частину коефіцієнта дифузії, спричинених зміною термодинамічних властивостей рідинних систем під впливом радіаційного опромінення. Показано, що опромінення медико-біологічних рідинних систем в неперервному режимі може призводити до збільшення насичення тканин киснем за рахунок зменшення стабілізаційних ефектів, що спостерігаються при полегшеній дифузії за відсутності опромінення.

Ключові слова: полегшена дифузія, коефіцієнт дифузії, радіаційне опромінення, біологічна система, ідеальний розчин.

1. Роль дифузійних процесів в медико-біологічних рідинних системах за наявності радіаційного опромінення

Дифузія – один з базових процесів, що забезпечують функціонування медико-біологічних систем. На сьогодні, визначення характеристик дифузійних процесів є невід’ємною складовою досліджень в таких галузях, як медицина, генетика та інших. Тож наявність великої кількості експериментальних та теоретичних робіт в цій області не є несподіваним. Іншим важливим напрямком в дослідженнях медико-біологічних об’єктів є визначення впливу радіаційного опромінення на їх функціонування. Цікавим видається поєднання цих напрямків, адже для цілої низки задач необхідне розуміння впливу радіаційного опромінення на процеси переносу в рідинних системах. В першу чергу не-

обхідно відзначити медицину, адже променева терапія застосовується давно, і на сьогодні в радіаційній медицині існує широкий спектр технологій: від класичного рентгену і до сучасних методик, що передбачають лікування пацієнтів протонними або іонними променями [1, 2]. На жаль, таке лікування все ще може спричинити негативний вплив і на здорові тканини. Розуміння фізичних механізмів, що призводить до зміни термодинамічних властивостей біологічних рідин при опроміненні та відповідних змін у параметрах процесів переносу, може дати можливість вдосконалити існуючі методики з метою мінімізації негативних наслідків.

Зовсім нещодавно в радіаційній медицині з’явився новий напрям досліджень – вивчення можливостей терапії опроміненням (рентгенівським, пучками електронів та протонів) в імпульсному режимі з підвищеною, у порівнянні з класичним підходом, енергією, що дозволяє значно знизити негативний вплив на здорові тканини (FLASH ефект) [3–5]. Наприклад, в роботі [6] встановлено зниження нейротоксичності опромінення для мишей при використанні FLASH-радіотерапії. На сьогодні відсутнє повне розуміння причин, що пояснюють більшу, у порівнянні зі стандартними методиками радіотерапії, безпечність FLASH опромі-

Цитування: Власенко Т.С., Гаврюшенко Д.А., Черевко К.В., Булавін Л.А. Вплив радіаційного опромінення на параметри полегшеної дифузії модельної медико-біологічної системи. *Укр. фіз. журн.* **68**, №8, 527 (2023).

Citation: Vlasenko T.S., Gavryushenko D.A., Cherevko K.V., Bulavin L.A. Influence of irradiation on the parameters of facilitated diffusion in a model medical-biological systems. *Ukr. J. Phys.* **68**, No. 8, 525 (2023). <https://doi.org/10.15407/ujpe68.8.525>.

ISSN 0372-400X. *Укр. фіз. журн.* 2023. Т. 68, № 8

нення для здорових тканин. Одне з можливих пояснень, що розглядаються на роль ключових – можливе зниження концентрації кисню та гіпоксія здорових тканин [7] через FLASH-ефект. Такий механізм є перспективним кандидатом, оскільки ряд представлених в літературі досліджень показує зменшення терапевтичного ефекту опромінення при зменшенні концентрації кисню в тканинах [8]. Така залежність має і фізичне пояснення, адже згідно з існуючими експериментальними дослідженнями, зменшення концентрації кисню в рідинних системах приводить до зменшення утворення радикалів (наприклад, H_2O_2) при опроміненні [6].

В рамках розглянутої гіпотези важливим є дослідження можливих механізмів зменшення концентрації кисню в здорових тканинах. Слід зауважити, що на сьогодні існує достатня кількість прикладів успішного застосування фізичних моделей для пояснення процесів, що відбуваються в медико-біологічних системах (див., наприклад, [9, 10]). Отже, окрім біологічних ефектів, важливу роль у зміні концентрації кисню в тканинах за використання FLASH-радіотерапії можуть відігравати і фізичні механізми, а саме – зміни у величині дифузійних потоків під впливом радіаційного опромінення. Очевидно, що в цьому випадку коректна оцінка ефективності зазначеної технології значною мірою залежатиме від коректності оцінки впливу радіаційного опромінення на процеси переносу кисню.

Ще одна сфера, яку слід згадати, – це генетика. Один з сучасних методів розведення передбачає опромінення насіння або в рідинному середовищі, або сухого насіння з різним вмістом води [11, 12]. Існуючі дослідження дозволяють припустити, що зміни характеристик процесів переносу в рідинних системах при опроміненні можуть бути частиною пояснення спостережуваних показників мутації та виживання. Подібні процеси можуть бути важливими при дослідженні впливу опромінення на складні біологічні об'єкти, наприклад, ДНК [13, 14]. Коли подвійна спіраль ДНК розірвана основним пучком, то вона може відновитись як правильно, так і ненормально. Оскільки у живих організмах зазначені процеси відбуваються в рідинному середовищі, вплив дифузійних процесів може бути важливим для оцінки ймовірності потрапляння саме потрібних компонент молекул у

пошкоджені місця, що є важливим для прогнозування результатів процесу відновлення.

В багатьох випадках для медико-біологічних об'єктів характерним є наявність підсистем, обмежених в просторі, що, як відомо (див., наприклад, [15–17]), може призводити до змін характеристик фізичних процесів, які в таких підсистемах відбуваються. Одним з надзвичайно важливих процесів, що спостерігається в обмежених підсистемах, є процес так званої полегшеної дифузії, який відбувається при наявності зворотних хімічних реакцій в системі між речовиною, що дифундує (субстрат) та носієм (макромолекулам, що містяться всередині системи). Це призводить до того, що загальний дифузійний потік складається з двох компонент, а саме, з потоку безпосередньо субстрату та потоку комплексу субстрат-носії. Так, процес переносу кисню гемоглобіном, оцінка характеристик якого під впливом опромінення може бути важливою для радіотерапії, є прикладом саме полегшеної дифузії [18]. Більш того, експериментально встановлено, що міоглобін (Mb) полегшує дифузю O_2 в клітині [19, 20], і на сьогодні є ціла низка робіт, присвячених як теоретичному, так і експериментальному вивченню зворотного зв'язування O_2 міоглобіном і його трансляційній дифузії в клітині [21, 22]. Полегшена дифузія кисню за допомогою міоглобіну особливо ефективна за низьких парціальних тисків субстрату, а її внесок в дифузійний потік залежить від градієнта концентрації комплексу носій-субстрат.

З наведеного огляду можна зробити висновок про те, що вивчення впливу радіаційного опромінення на процеси дифузії в рідинних системах є надзвичайно важливим для медико-біологічних задач. Водночас на сьогоднішній день фізичні моделі, здатні дати достовірні кількісні результати щодо характеристик процесів дифузії в рідинних системах під опроміненням, – відсутні. Наша стаття присвячена саме аналізу змін в характеристиках процесів полегшеної дифузії в рідинних системах під впливом радіаційного опромінення, що можуть бути викликані змінами структурних та термодинамічних властивостей рідинних систем.

2. Стаціонарна дифузія в обмежених медико-біологічних системах

На сьогодні існує низка різних підходів для опису процесів дифузії, наприклад, теорії, які, викори-

стовуючи певні модельні представлення щодо будови речовини та взаємодії між частинками, описують дифузію за допомогою кінетичних рівнянь, або феноменологічні теорії, що описують це явище в найбільш загальному вигляді. Сучасні експериментальні і теоретичні результати, отримані в рамках описаних підходів, свідчать про те, що коефіцієнт дифузії може суттєво залежати від локальних концентрацій в системі. Очевидно, що це не можна врахувати в межах формалізму класичного закону Фіка, що довгий час використовувався для визначення дифузійного потоку в обмежених системах.

Для випадку полегшеної дифузії перспективним є розвинення узагальненої теоретичної моделі в рамках нерівноважної термодинаміки, основні співвідношення якої протягом останніх десятиріч було обґрунтовано в межах загальної статистичної теорії, що дає теоретичні методи для визначення коефіцієнтів Онсагера (феноменологічних за своєю природою), та встановити межі застосування лінійної теорії. Вона базується на квантово-механічному описі ізольованої системи багатьох частинок [23, 24]. В межах зазначеного підходу з'являється можливість описувати полегшену дифузію в системах, що знаходиться далеко від границь стійкості (тобто виключимо з розгляду область, в якій рівняння стають нелокальними з пам'яттю [25, 26]), використовуючи фізичні властивості мембранних систем і моделюючи хімічні реакції як міжмолекулярну взаємодію. Перевагою такої моделі повинна стати можливість врахувати залежність коефіцієнта дифузії від локальних концентрацій та тисків. Описаний підхід раніше було застосовано для опису стаціонарної дифузії речовини в системі, що являє собою плоскопаралельний шар, обмежений напівпроникними стінками (мембранами), в якому речовина "першого" типу n_1 дифундує в m -компонентному розчині [27, 28]. При цьому вважалось, що

- Стінки є проникними лише для речовини першого типу. За таких умов існуватиме потік лише речовини першого типу $J_1 \neq 0$, в той час як потоки інших речовин будуть відсутні $J_2 = J_3 = J_4 = \dots = J_m = 0$.

- Система знаходиться далеко від границь стійкості, що виключає необхідність використання нелокальних рівнянь з пам'яттю.

- Вважається, що в системі підтримується градієнт концентрації речовини, яка дифундує шляхом

підтримки її сталої концентрації на границях:

$$\begin{cases} x_1(z=0) = x_0, \\ x_1(x=l) = x_l, \end{cases} \quad (1)$$

причому $x_0 > x_l$, $x_l \neq 0$.

- Напівпроникність стінок приводить до виникнення в системі осмотичних явищ, що зумовлює необхідність враховувати зміну хімічних потенціалів компонент з тиском. Наявність осмотичного тиску дозволяє пояснити відсутність дифузії речовин, які знаходяться між напівпроникними стінками, при наявності градієнта її концентрації.

- В усіх рівняннях враховуватимемо залежність хімічних потенціалів як від концентрацій, так і від тиску, тобто, по суті будемо враховувати інформацію про рівняння стану системи.

- Розглядається стаціонарний процес дифузії за відсутності зовнішніх полів, за постійної температури. Перехресні ефекти при цьому не враховуються. Стаціонарність процесу дозволяє коректно позбутися другої похідної в рівнянні дифузії, при цьому залишається можливість знаходження залежності величини потоку від різниці концентрацій.

- Модель є одномірною, а потік дифундуючої речовини є перпендикулярним до стінок мембранної системи.

Для випадку двокомпонентної системи, коли всередині плоскопаралельного шару знаходяться тільки дифундуюча речовина та носій, який зумовлює існування процесу полегшеної дифузії, було отримано загальну систему рівнянь для визначення дифузійних потоків:

$$\begin{cases} J_1 = -2kL_1 \nabla x_1 \left\{ \left[\frac{1}{x_1} + \frac{\partial}{\partial x_1} \ln \gamma_1 \right] + \right. \\ \left. + \frac{v_{10} + kT \frac{\partial}{\partial p} \ln \gamma_1}{v_{20} + kT \frac{\partial}{\partial p} \ln \gamma_2} \left[\frac{1}{1-x_1} - \frac{\partial}{\partial x_1} \ln \gamma_2 \right] \right\}, \\ \nabla x_2 = -\nabla x_1, \\ \nabla P = -\frac{2kT \left[\frac{\partial}{\partial x_1} \ln \gamma_2 - \frac{1}{1-x_1} \right]}{v_{20} + kT \frac{\partial}{\partial p} \ln \gamma_2} \nabla x_1. \end{cases} \quad (2)$$

та вираз для коефіцієнта дифузії $D(T, p, x_1)$:

$$\begin{aligned} D(T, p, x_1) = & 2kL_1 \left\{ \left[\frac{1}{x_1} + \frac{\partial}{\partial x_1} \ln \gamma_1 \right] + \right. \\ & \left. + \frac{v_{10} + kT \frac{\partial}{\partial p} \ln \gamma_1}{v_{20} + kT \frac{\partial}{\partial p} \ln \gamma_2} \left[\frac{1}{1-x_1} - \frac{\partial}{\partial x_1} \ln \gamma_2 \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3)$$

Необхідно відзначити, що вираз (3) для коефіцієнта дифузії визначає його суттєву залежність від параметрів термічного рівняння стану досліджуваної системи. Слід особливо підкреслити можливість чіткого розділення рівноважних та нерівноважних властивостей системи. Так, в загальному випадку в виразі (3) L_1 відповідає за нерівноважні властивості, які в статистичній механіці отримуються з розв'язків рівняння Ліувілля з нерівноважною функцією розподілу. А вираз в дужках описує рівноважні властивості і відповідає рівноважній функції розподілу.

Розглянута модель дозволяє визначити дифузійний потік речовини в обмежених системах для різних модельних розчинів [29–31]. Для цього необхідно конкретизувати характер взаємодії між частинками розчину (тобто тип розчину) та характер можливих хімічних реакцій за допомогою коефіцієнта активності у виразі для хімічного потенціалу

$$\begin{aligned} \mu_i(T, \rho, c_1 \dots c_n) &= \\ &= \mu_{i0}(T, \rho) + kT \ln c_i \gamma_i(T, \rho, c_1 \dots c_n), \end{aligned} \quad (4)$$

де μ_{i0} – хімічний потенціал чистої речовини для i -го компонента, $\gamma_i(T, \rho, c_1 \dots c_n)$ – активність i -го компонента.

На сьогодні існує низка різних моделей розчинів, що описують реальні рідинні системи. Наприклад, ідеальний і регулярний розчини, або розчини з хімічними потенціалами компонент, що визначаються співвідношеннями Маргулеса, Скетчарда-Хаммера та іншими. Для практичного використання цих моделей необхідно знати феноменологічні сталі, які входять у рівняння для коефіцієнта активності у виразі (4). Одним з можливих підходів для їх визначення може бути підхід на основі методів теорії збурень в ізобаро-ізотермічному ансамблі [32]. При цьому врахування різних порядків теорії збурень дозволяє визначити значення коефіцієнтів активності для розчинів різних типів. Наприклад, для систем з невалентною взаємодією, що знаходяться далеко від критичної точки або межі стійкості в другому порядку теорії збурень справедливі такі вирази [32]:

$$\begin{aligned} \ln \gamma_1 &= n_2^2 \left(\Phi_{12} - \frac{1}{2}(\Phi_{11} + \Phi_{22}) - 3\Phi_{111} + 2\Phi_{112} - \right. \\ &\left. - \Phi_{122} \right) + 2n_2^3(\Phi_{111} - \Phi_{222} - \Phi_{112} + \Phi_{122}), \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \ln \gamma_2 &= n_1^2 \left(\Phi_{12} - \frac{1}{2}(\Phi_{11} + \Phi_{22}) - 3\Phi_{222} + 2\Phi_{122} - \right. \\ &\left. - \Phi_{112} \right) + 2n_1^3(\Phi_{222} - \Phi_{111} - \Phi_{122} + \Phi_{112}), \end{aligned} \quad (6)$$

де функції Φ_{ijk} є залежними виключно від температури й тиску

$$\begin{aligned} \Phi_{iii} &= \frac{1}{2} \int_{\langle V(T,P,N) \rangle_0} f_0(r_1, r_2, r_3) \left[e^{-\beta \psi_{ii}(r_{12})} - 1 \right] \times \\ &\times \left[e^{-\beta \psi_{ii}(r_{13})} - 1 \right] dr_{12} dr_{13}, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{ijj}(ijj) &= \frac{1}{2} \int_{\langle V(T,P,N) \rangle_0} f_0(r_1, r_2, r_3) \times \\ &\times \left\{ \left[e^{-\beta \psi_{ij}(r_{12})} - 1 \right] \left[e^{-\beta \psi_{ij}(r_{13})} - 1 \right] + \right. \\ &\left. + 2 \left[e^{-\beta \psi_{ii}(r_{12})} - 1 \right] \left[e^{-\beta \psi_{ij}(r_{13})} - 1 \right] \right\} dr_{12} dr_{13}. \end{aligned} \quad (8)$$

Наведені вирази (5)–(8) являють собою відомі емпіричні співвідношення Маргулеса [33]:

$$\begin{aligned} \ln \gamma_1 &= \frac{a_1}{2} n_2^2 + \frac{a_2}{3} n_2^3, \\ \ln \gamma_2 &= \frac{a_1 + a_2}{2} n_1^2 - \frac{a_2}{3} n_1^3, \end{aligned} \quad (9)$$

де

$$\begin{aligned} a_1 &= 2\Phi_{12} - \Phi_{11} - \Phi_{22} - 6\Phi_{111} + 4\Phi_{112} - 2\Phi_{122}, \\ a_2 &= 6(\Phi_{111} + \Phi_{122} - \Phi_{112} - \Phi_{222}). \end{aligned} \quad (10)$$

Рівняння (5)–(10) можуть дозволити врахувати зміни в міжчастинковій взаємодії, що за певних енергій опромінення спостерігатимуться в рідинних системах [34]. Водночас зміни в величині дифузійного потоку можуть спостерігатись і у випадку врахування лише ентропійних внесків у термодинамічний потенціал бінарної системи. Це можна побачити, дослідивши полегшену дифузю в мембранній системі в рамках моделі ідеального розчину (модель, в якій при змішуванні внесок ентропійних факторів в термодинамічні потенціали домінує над енергетичними, якими можна знехтувати, і, відповідно, внесок коефіцієнта активності в (4) тотожно дорівнює нулю). Хімічний потенціал в такому наближенні задається виразом

$$\mu_1(T, p, x_1) = \mu_{10}(T, p) + kT \ln x_1. \quad (11)$$

На рис. 1 наведено одержані раніше результати розрахунків величини дифузійного потоку в залежності від різниці концентрації на границях мембрани за відсутності опромінення [31].

Наведені результати виявляють суттєву нелінійність в залежності потоку від різниці концентрацій $(x_l - x_0)$. Цікаво, що така поведінка спостерігається саме у випадку ідеального розчину, тобто з урахуванням лише ентропійного внеску в зміну термодинамічного потенціалу при змішуванні. Необхідно підкреслити, що виявлене в розрахунках відхилення від класичної лінійної залежності зумовлене коректним врахуванням залежності коефіцієнта дифузії в рівняннях переносу від польових змінних системи.

Аналіз представлених результатів вказує на те, що за малих значень величини $(x_l - x_0)$ спостерігається практично лінійна залежність потоку, але зі зростанням $x_0 - x_l$ залежність $J_1(x_l - x_0)$ суттєво відхиляється від лінійної. При цьому має місце помітний стабілізуючий ефект, який проявляється в тому, що величина потоку слабо залежить від різниці концентрації дифундуючої речовини на границях мембранної системи.

Як видно з аналізу результатів, зміни у рівноважній частині коефіцієнта дифузії (3) можуть призводити до суттєвих змін у величині потоку дифундуючої речовини. Таким чином, при визначенні впливу радіаційного опромінення на дифузійні процеси в медико-біологічних рідинних системах наявність структурних змін внаслідок впливу стаціонарного радіаційного опромінення може відігравати суттєву роль у змінах характеристик дифузійних потоків.

3. Вплив радіаційного опромінення на структурні і термодинамічні властивості медико-біологічних рідин

Одним з можливих механізмів змін в структурі та термодинамічних властивостях рідинних систем під впливом зовнішніх факторів є відхилення функції розподілу швидкостей від розподілу Максвелла, типового для стану рівноваги [35]. Підґрунтям механізму є передача імпульсу від "активних" частинок, що налітають – тим, які утворюють рідину. Отже, опромінення призведе до зміни коефіцієнтів A та ϕ , характерних для розподілу Максвелла в

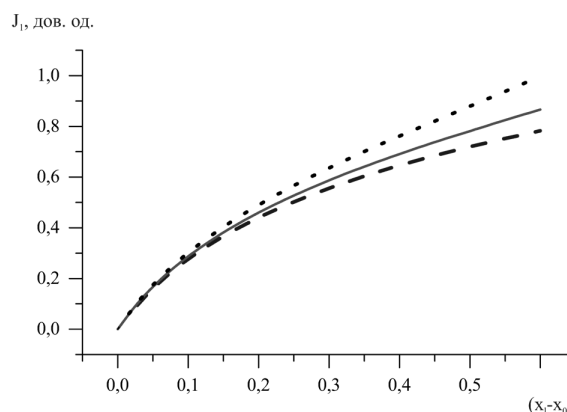


Рис. 1. Залежність нормованого дифузійного потоку J_1 від різниці концентрацій на границях мембрани $(x_l - x_0)$ за різних значень відношення $\frac{v_{10}}{v_{20}}$ в рамках моделі ідеального розчину. Штрихи відповідають $\frac{v_{10}}{v_{20}} = 0,01$; суцільна лінія відповідає $\frac{v_{10}}{v_{20}} = 0,2$; точки відповідають $\frac{v_{10}}{v_{20}} = 0,5$

рівноважному стані

$$f(p) = A \exp(-\phi p^2), \quad (12)$$

де p – імпульс частинок системи.

Необхідно відзначити, що подібні механізми змін є притаманними для різних систем. Наприклад, існують роботи, присвячені дослідженню властивостей нерівноважних систем в рамках підходу нерівноважної функції розподілу [36, 37], або використовують розклад функцій розподілу по імпульсах відносно локальних максвеллівських розподілів [38]. Однією з таких задач є вивчення поведінки газу в плоскому потоці Куетта, що може бути розв'язана за допомогою модифікації функції розподілу Максвелла поліномами Соніна. Іншою задачею є визначення особливостей газу, що бере участь в хімічних реакціях. Для її розв'язку необхідно врахувати зміни в функції розподілу по швидкостях [39]. Така система має чимало спільного з рідинною системою під дією опромінення, оскільки в процесі радіолізу в рідинах з'являється значна кількість нових взаємодіючих частинок [40]. Особливою областю є дослідження відхилень від максвеллівського розподілу для систем в стаціонарному стані. Наприклад, степеневий закон розподілу за швидкостями в гранулярних газах [41], та немасвеллівський розподіл за швидкостями, що спостерігається в рідинах у зовнішньому полі в стаціонарному стані [42–44].

Раніше авторами розглядався описаний вище механізм, а саме, в рамках формалізму ланцюжка рівнянь Боголюбова–Борна–Гріна–Кірквуда–Івона (ББГКІ) було розвинено підхід для визначення зміни термодинамічних властивостей та структури рідинних систем внаслідок дії стаціонарного ізотропного радіаційного опромінення [45]. Необхідно зауважити, що зазначений підхід має певні обмеження на характер радіаційного опромінення. В класичному підході ланцюжок рівнянь Боголюбова застосовується для опису рідинної системи саме за умови термодинамічної рівноваги [46, 47]. Водночас, за певних умов його можна використати і для визначення структури нерівноважної системи. Розглянемо, що відбувається з рідинною системою при стаціонарному опроміненні. Передача енергії від налітаючих частинок до частинок, що складають рідинну систему, призводить до різких змін швидкості останніх. Це означає, що фазовий об'єм не зберігається, і, відповідно, застосування механіки Гамільтона для опису такої системи є некоректним. Очевидно, що це робить неправомірним і використання ланцюжка рівнянь Боголюбова для опису процесу. Ситуація дещо змінюється, якщо не розглядати детально складний процес еволюції системи від суто нерівноважного стану (одразу після початку опромінення) до стаціонарного нерівноважного стану. При цьому система проходить низку проміжних станів, які характеризуються своїми наборами часів релаксації. У загальному випадку, після збурення система еволюціонує до стану рівноваги. Якщо розглянути стале у часі джерело енергії, то в такій задачі постійне опромінення не дозволяє рідинній системі перейти в рівноважний стан, і тому вона залишається в певному стаціонарному нерівноважному стані. Виходячи з ідей Боголюбова [48], можна стверджувати, що через певний проміжок часу, достатній для кількох зіткнень, спостерігається хаотизація руху частинок. Після цього в розподілі за швидкостями настає квазірівновага, а еволюція системи регулюватиметься зміною макроскопічних параметрів та зовнішніми факторами. Отже, модель для визначення параметрів рідинної системи під опроміненням в стаціонарному нерівноважному стані на базі ланцюжка рівнянь Боголюбова є застосовною для випадку, коли стан системи визначається не шляхом, який використовується для його досягнення, а макроскопічними параметрами та прин-

ципом мінімуму виробництва ентропії з фіксованим зовнішнім впливом, що не дозволяє системі перейти в рівноважний стан [23, 49, 50]. Тоді ланцюжок рівнянь Боголюбова можна використовувати за умови, що залежність від часу врахована в нерівноважній функції розподілу n -го порядку $F_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_n, t)$ через залежність від часу t макроскопічних параметрів:

$$F_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_n, t) = F_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_n, \rho(t), T(t), \text{Ext}(t)), \quad (13)$$

де $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n$ – координати частинок, $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_n$ – імпульси частинок, $\text{Ext}(t)$ – вплив зовнішніх факторів.

Таким чином, можна виділити основні положення, що дозволили розвинути зазначений підхід для визначення впливу зовнішніх факторів на рідинній системі [51, 52]:

- стаціонарне опромінення рідинної системи призводить до зміни функції розподілу частинок за імпульсами;
- зміна функції розподілу за імпульсами призводить до змін у структурі системи, а саме: приводить до зміни радіальних функцій розподілу;
- зміна термодинамічних параметрів нерівноважної рідинної системи під опроміненням в стаціонарному стані є наслідком структурних змін в системі.

Як видно з третього пункту, для визначення характеристик рідинної системи в стаціонарному нерівноважному стані під опроміненням необхідно встановити зв'язок між зміною радіальних функцій розподілу в системі і зміною термодинамічних властивостей.

В рамках описаного в [45] підходу було отримано вираз для модифікованого ланцюжка ББГКІ для однокомпонентної системи в стаціонарному нерівноважному стані:

$$-\frac{\partial g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)}{\partial \mathbf{r}_1} \int \frac{\mathbf{p}_1}{m} f_2(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) \partial \mathbf{p}_1 \partial \mathbf{p}_2 + \frac{\partial \Phi(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)}{\partial \mathbf{r}_1} g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \int \frac{\partial f_2(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)}{\partial \mathbf{p}_1} \partial \mathbf{p}_1 \partial \mathbf{p}_2 + \rho \int \frac{\partial \Phi(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3|)}{\partial \mathbf{r}_1} g_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) d\mathbf{r}_3 \times \int \frac{\partial f_2(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)}{\partial \mathbf{p}_1} \partial \mathbf{p}_1 \partial \mathbf{p}_2 = 0 \quad (14)$$

і введено новий параметр T_{eff} , що дозволило записати рівняння у вигляді

$$kT_{\text{eff}} \frac{\partial g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)}{\partial \mathbf{r}_1} + \frac{\partial \Phi(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)}{\partial \mathbf{r}_1} g_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \rho \int \frac{\partial \Phi(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3|)}{\partial \mathbf{r}_1} g_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) d\mathbf{r}_3 = 0, \quad (15)$$

де враховано, що

$$kT_{\text{eff}} \int \frac{\partial f_2(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)}{\partial \mathbf{p}_1} d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2 = - \int \frac{\mathbf{p}_1}{m} f_2(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2. \quad (16)$$

Аналіз рівнянь (14), (15) показав, що у випадку однорідної рідинної системи в стаціонарному стані в рівняннях замість термодинамічної температури з'являється новий параметр kT_{eff} , що пов'язаний зі зміненою імпульсною частиною $f_2(\mathbf{p}_1^k, \mathbf{p}_2^l)$ дво-частинкової функції розподілу [51–53]. Подібність структури рівнянь (14), (15) до рівнянь ББГКІ у випадку рівноважних систем дозволила припустити, що параметр “ефективна температура” kT_{eff} для випадку нерівноважної рідинної системи в стаціонарному стані під опроміненням буде відігравати роль термодинамічної температури в сенсі визначення структурних і термодинамічних властивостей. При цьому параметр “ефективна температура” є відмінним від термодинамічної температури системи і дорівнює температурі відповідної рівноважної системи, що має структуру і термодинамічні властивості, які аналогічні тим для нерівноважної системи. Аналіз результатів також показав, що єдиною причиною різниці між “ефективною” та термодинамічною температурами є зміни в функції розподілу за імпульсами.

В подальшому, результати було природним чином узагальнено на багатокомпонентні системи. Для ефективних температур в такому випадку можна записати [45]:

$$kT_{\text{eff}}^{kl} = - \frac{\int \frac{\mathbf{p}_1^k}{m_k} f_2(\mathbf{p}_1^k, \mathbf{p}_2^l) d\mathbf{p}_1^k d\mathbf{p}_2^l}{\int \frac{\partial f_2(\mathbf{p}_1^k, \mathbf{p}_2^l)}{\partial \mathbf{p}_1^k} d\mathbf{p}_1^k d\mathbf{p}_2^l}, \quad (17)$$

$$l, k = 1 \dots M,$$

де $f_2(\mathbf{p}_1^k, \mathbf{p}_2^l)$ – імпульсна частина двохчастинкової функції розподілу компонент l та k . Перехресні доданки в рівнянні (17) не залежать від порядку компонент, тобто $(T_{\text{eff}}^{kl} = T_{\text{eff}}^{lk})$.

Відзначимо, що рівняння (17) визначають декілька “ефективних температур” підсистем $1l, 2l, \dots$. Такі якісні результати відповідають результатам статистичної теорії релаксаційних процесів для систем, що складаються з підсистем із слабкою взаємодією [23], для яких є прийнятним існування кількох різних температур.

Одержані теоретичні результати пізніше було підтверджено в комп'ютерному експерименті з дослідження поведінки води під впливом α -частинок з енергіями в діапазоні 0,05–0,25 КеВ/частинку методами молекулярної динаміки [54], де було показано, поведінка коефіцієнту самодифузії в залежності від T_{eff} , відповідає літературним даним його залежності від термодинамічної температури. Така збіжність підтвердила припущення щодо фізичного значення “ефективної температури”.

4. Процеси переносу в рідинних системах в умовах опромінення. Ентропійні ефекти

Як вже зазначалося, ефект впливу опромінення на процеси переносу в рідинних системах можна поділити на дві частини. Перша – ентропійний внесок, що може бути описано введенням нової температури в системі (17) і який може впливати на величину потоків при заміні термодинамічної температури на величину ефективної температури в рівняннях (2) та (3). Друга – енергетичний внесок, що у випадку радіаційного опромінення може виникати, наприклад, внаслідок зміни параметрів міжчастинкової взаємодії та призводити до змін у хімічних потенціалах компонентів. В загальному випадку опромінення рідинної системи призведе до виникнення як ентропійних внесків у термодинамічний потенціал, так і енергетичних.

Розглянемо найпростіший випадок з ентропійними внесками. Припустимо, що енергія опромінення залишається достатньо малою, аби в системі не відбувався радіоліз. (Наприклад, для опромінення води α -частинками з літературних даних можна побачити [55], що це є енергії менше від 1 КеВ/частинку. За таких енергій диференціальний переріз іонізації майже дорівнює нулю, а ймовірність виникнення непружних зіткнень з утворенням вторинних електронів є досить низькою. Виходячи з наведених результатів, можна припустити, що у вибраному діапазоні енергій опромінен-

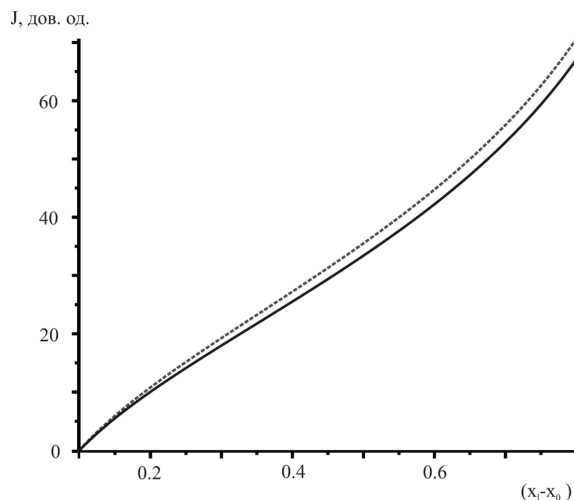


Рис. 2. Залежність величини дифузійного потоку J_1 від величини $(x_l - x_0)$ за різних значень T_{eff}^{ij} для ідеального розчину $\frac{v_{10}}{v_{20}} = 0,1$: Суцільна лінія відповідає $T_{\text{eff}}^{11} = T_{\text{eff}}^{22} = T_{\text{eff}}^{12} = 300$ К; штрихована лінія відповідає $T_{\text{eff}}^{11} = 320$ К $T_{\text{eff}}^{22} = 300$ К $T_{\text{eff}}^{12} = 310$ К

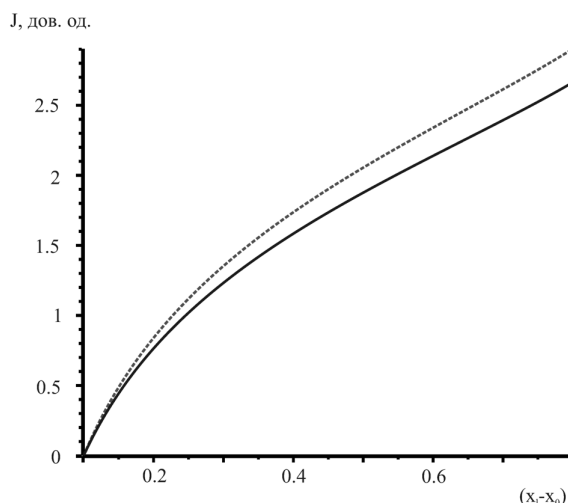


Рис. 3. Залежність величини дифузійного потоку J_1 від величини $(x_l - x_0)$ за різних значень T_{eff}^{ij} для ідеального розчину $\frac{v_{10}}{v_{20}} = 0,01$: Суцільна лінія відповідає $T_{\text{eff}}^{11} = T_{\text{eff}}^{22} = T_{\text{eff}}^{12} = 300$ К; штрихована лінія відповідає $T_{\text{eff}}^{11} = 320$ К $T_{\text{eff}}^{22} = 300$ К $T_{\text{eff}}^{12} = 310$ К

ня в процесі передачі енергії переважають пружні зіткнення, а вода залишається однокомпонентною системою). Таке припущення є суттєвим, оскільки дозволяє на всіх етапах використати рівняння для потоків дифундуючої речовини для двокомпонентної системи. Оскільки нас цікавлять ентропійні

внески – скористаємося моделлю ідеального розчину (11). Враховуючи те, що під опроміненням в двокомпонентній системі з'являється 3 нових параметри для визначення структурних і термодинамічних властивостей (див. (17)), систему рівнянь (2) можна переписати у вигляді

$$\begin{cases} J_1 = -2k \frac{L_1}{T_{\text{eff}}^{12}} \frac{dx_1}{dz} \left\{ \frac{T_{\text{eff}}^{11}}{x_1} + \frac{v_{10}}{v_{20}} \frac{T_{\text{eff}}^{22}}{1-x_1} \right\}, \\ \frac{dx_2}{dz} = -\frac{dx_1}{dz}, \\ \frac{dp}{dz} = \frac{2kT}{v_{20}} \frac{1}{1-x_1} \frac{dx_1}{dz}. \end{cases} \quad (18)$$

Тоді після інтегрування за умови (1) для потоку маємо вираз:

$$J_1 = -\frac{2kL_1}{lT_{\text{eff}}^{12}} \left(\ln \frac{x_l T_{\text{eff}}^{11}}{x_0} - \frac{v_{10}}{v_{20}} \ln \frac{(1-x_l) T_{\text{eff}}^{22}}{1-x_0} \right). \quad (19)$$

Одержані залежності величини дифузійного потоку від різниці концентрацій для модельних співвідношень T_{eff}^{11} , T_{eff}^{22} та T_{eff}^{12} наведено на рис. 2 та 3.

Як видно з аналізу рис. 1–3, радіаційне опромінення призводить до зменшення стабілізуючого ефекту в явищі полегшеної дифузії в обмежених системах. Це проявляється в меншому відхиленні величини дифузійного потоку від лінійної залежності при збільшенні різниці концентрацій на границях мембрани у порівнянні з таким за відсутності опромінення. Означений ефект призводить до збільшення величини потоку дифундуючої речовини для великих градієнтів концентрації, що може пояснити менший вміст кисню в тканинах при застосуванні FLASH-терапії у порівнянні з класичним підходом. При імпульсному опроміненні за час між імпульсами буде відбуватись релаксація системи, і, відповідно, зменшення дифузійного насичення тканин киснем за рахунок стабілізуючого ефекту. При класичному підході з неперервним опроміненням, незважаючи на меншу інтенсивність опромінення, середнє значення дифузійного потоку кисню буде більшим. Це може призводити до підвищення концентрації кисню в здорових тканинах, що збільшує ризик негативних наслідків [7].

Як можна побачити з аналізу одержаних даних, зменшення величини відношення парціального мольного об'єму речовини, що дифундує через мембрану, до парціального мольного об'єму

розчинника призводить до збільшення ефекту від опромінення. Така поведінка свідчить про важливість виявленого ефекту для біологічних систем, де у випадку полегшеної дифузії біологічно активної речовини через мембрани відношення $\frac{v_{10}}{v_{20}}$ є надзвичайно малим (наприклад, полегшена дифузія кисню в розчинах міоглобіну чи гемоглобіну).

Необхідно ще раз підкреслити, що досліджуваний в роботі ефект має виключно ентропійне походження і спричинений збільшенням “ефективної температури” нерівноважної системи в стаціонарному стані. Для одержання повної картини явища в подальшому необхідно дослідити більш складні моделі, що включатимуть аналіз енергетичних внесків.

5. Висновки

Нами було досліджено можливий вплив радіаційного опромінення на процеси дифузії в обмежених медико-біологічних рідинних системах. При цьому розглядався зв'язок змін у структурних та термодинамічних властивостях рідинних систем внаслідок опромінення із особливостями процесів дифузії. А саме, розроблену раніше в рамках нерівноважної термодинаміки модель для опису стаціонарної дифузії в обмежених системах було розвинуто для випадку наявності радіаційного опромінення. В моделі було введено можливість врахувати зміну структурних характеристик системи внаслідок радіаційного опромінення, що дало змогу дослідити вплив радіаційного опромінення (наприклад, опромінення пучками електронів або важких іонів) на величину потоку дифундуєчої речовини. Визначено зв'язок змін у величині дифузійного потоку з “ефективними температурами”, що характеризують термодинамічні властивості нерівноважної рідинної системи в стаціонарному стані за наявності опромінення. Аналіз одержаних даних показав, що

- Врахування залежності коефіцієнта дифузії від концентрацій та тиску в процесах стаціонарної полегшеної дифузії призводить до виникнення ефектів стабілізації та насичення у величині дифузійного потоку у порівнянні з моделями з постійними коефіцієнтами дифузії.

- Радіаційне опромінення рідинної системи зменшує стабілізаційний ефект, що спостерігається при полегшеній дифузії в обмежених системах за відсутності опромінення. Для значної різниці

концентрацій на границях мембрани величина дифузійного потоку збільшується у порівнянні з таким за відсутності радіаційного опромінення.

- Вплив радіаційного опромінення рідинної системи на параметри полегшеної дифузії збільшується при зменшенні величини відношення парціальних мольних об'ємів речовини, що дифундує через мембрану, до розчинника.

- Збільшення величини потоку дифундуєчої величини під впливом опромінення може сприяти збільшенню концентрації кисню в тканинах біологічних об'єктів при неперервному режимі опромінення (класичний підхід) у порівнянні з FLASH-терапією і, відповідно, збільшувати ймовірність негативних ефектів для здорових тканин при проведенні радіаційної терапії.

- Врахування зміни параметрів дифузійних процесів в медико-біологічних рідинах під впливом опромінення є обов'язковим при розробці нових методик опромінення в медицині, біології та ін.

Автори вдячні професору В.М. Сисоєву за плідні обговорення ідей, які лежать в основі представлених в статті досліджень. Дослідження були частково фінансовані в рамках гранту 22К-04-12 цільової програми наукових досліджень НАН України.

1. A.J. Lomax, T. Boehringer, A. Coray, E. Egger, G. Goitein, M. Grossmann, P. Juelke, S. Lin, E. Pedroni, B. Rohrer, W. Roser, B. Rossi, B. Siegenthaler, O. Stadelmann, H. Stauble *et al.* Intensity modulated proton therapy: A clinical example. *Med. Phys.* **28** (3), 317 (2001).
2. O. Jäkel, C.P. Karger, J. Debus. The future of heavy ion radiotherapy. *Med. Phys.* **35** (12), 5653 (2008).
3. S. Horsney, T. Alper. Unexpected dose-rate effect in the killing of mice by radiation. *Nature* **210** (5032), 212 (1966).
4. V. Favaudon, L. Caplier, V. Monceau, F. Pouzoulet, M. Sayarath, C. Fouillade, M.F. Poupon, I. Brito, P. Hupé, J. Bourhis, J. Hall, J.J. Fontaine, M.C. Vozenin. Ultra-high dose-rate flash irradiation increases the differential response between normal and tumor tissue in mice. *Sci. Transl. Med.* **6** (245), 245ra93 (2014).
5. G. Zhou. Mechanisms underlying flash radiotherapy, a novel way to enlarge the differential responses to ionizing radiation between normal and tumor tissues. *Radiation Medicine and Protection* **1** (1), 35 (2020).
6. P. Montay-Gruel, K. Petersson, M. Jaccard, G. Boivin, J.F. Germond, B. Petit, R. Doenlen, V. Favaudon, F. Bochud, C. Bailat, J. Bourhis, M.C. Vozenin. Irradiation in a flash: Unique sparing of memory in mice after

- whole brain irradiation with dose rates above 100 Gy/s. *Radiother. Oncol.* **124** (3), 365 (2017).
7. J.D. Wilson, E.M. Hammond, G.S. Higgins, K. Petersson. Ultra-high dose rate (flash) radiotherapy: Silver bullet or fool's gold? *Frontiers in Oncology* **9**, 1563 (2020).
 8. P. Wilson, B. Jones, T. Yokoi, M. Hill, B. Vojnovic. Revisiting the ultra-high dose rate effect: Implications for charged particle radiotherapy using protons and light ions. *Brit. J. Radiol.* **85** (1018), e933 (2012).
 9. A. Chalyi, A. Vasilev, E. Zaitseva. Synaptic transmission as a cooperative phenomenon in confined systems. *Condensed Matter Physics* **20** (1), 13804 (2017).
 10. A.V. Chalyi, E.V. Zaitseva. Strange attractor in kinetic model of synaptic transmission. *J. Phys. Studies* **11** (3), 322 (2007).
 11. T. Abe, Y. Kazama, T. Hirano. Ion beam breeding and gene discovery for function analyses using mutants. *Nucl. Phys. News* **25** (4), 30 (2015).
 12. H. Ichida, R. Morita, Y. Shirakawa, Y. Hayashi, T. Abe. Targeted exome sequencing of unselected heavy-ion beam-irradiated populations reveals less-biased mutation characteristics in the rice genome. *Plant J.* **98**, 301 (2019).
 13. E. Alizadeh, A.G. Sanz, G. Garcia, L. Sanche. Radiation damage to DNA: The indirect effect of low-energy electrons. *Phys. Chem. Lett.* **4** (5), 820 (2013).
 14. M. Spothem-Maurizot, M. Davidkova. Radiation damage to dna-protein complexes. *J. Phys.: Conf. Ser.* **261**, 012010 (2011).
 15. K.A. Chalyy, L.A. Bulavin, A.V. Chalyi. Dynamic scaling and central component width of critical opalescence spectrum in liquids with restricted geometry. *J. Phys. Studies* **9** (1), 66 (2005).
 16. K.A. Chalyi, K. Hamano, A.V. Chalyi. Correlating properties of a simple liquid at criticality in a reduced geometry. *J. Mol. Liq.* **92**, 153 (2001).
 17. A.V. Chalyi, A.N. Vasil'ev. Strange attractor in kinetic model of synaptic transmission. *J. Mol. Liq.* **84**, 203 (2000).
 18. J. Murray. On the molecular mechanism of facilitated oxygen diffusion by haemoglobin and myoglobin. *Proc. R. Soc. Lond. B.* **179**, 95 (1971).
 19. J. Wittenberg. The molecular mechanism of hemoglobin facilitated oxygen diffusion. *J. Biol. Chem.* **241**, 104 (1966).
 20. B. Wittenberg, J. Wittenberg, P. Caldwell. Role of myoglobin in the oxygen supply to red skeletal muscle. *J. Biol. Chem.* **250**, 9038 (1975).
 21. B. Wittenberg, J. Wittenberg. Myoglobin function reassessed. *J. Experim. Biol.* **206**, 2011 (2003).
 22. I.A. Jelicks, B.A. Wittenberg. Nuclear magnetic resonance studies of sarcoplasmic oxygenation in the red cell-perfused rat heart. *Biophys. J.* **68**, 2129 (1995).
 23. D.N. Zubarev, V. Morozov, G. Ropke. *Statistical Mechanics of Nonequilibrium Processes: Relaxation and Hydrodynamic Processes* (John Wiley & Sons, 1997) [ISBN: 978-3527400843].
 24. C. Ward. Effect of concentration on the rate of chemical reactions. *J. Chem. Phys.* **79**, 5605 (1983).
 25. V.M. Sysoev, A.V. Chalyi. Correlation functions and dynamical structure factor of a nonisotropic medium near the critical point. *Theor. Math. Phys.* **19** (2), 515 (1974).
 26. V.M. Sysoev, A.V. Chalyi. Correlation functions and dynamical structure factor of a nonisotropic medium near the critical point classical fluid in a gravitational field. *Theor. Math. Phys.* **26** (1), 82 (1976).
 27. Л.А. Булавін, Д.А. Гаврюшенко, В.М. Сисоєв, К.В. Черевко. Виробництво ентропії в обмежених системах в процесі полегшеної дифузії. Загальний вираз для потоків. *ДАН* **12**, 70 (2012).
 28. Л.А. Булавін, Д.А. Гаврюшенко, В.М. Сисоєв, К.В. Черевко. Розрахунок функції виробництва ентропії в процесах дифузії за наявності хімічних реакцій. *ДАН* **7**, 67 (2012).
 29. Д.А. Гаврюшенко, О.В. Коробко, В.М. Сисоєв, К.В. Черевко. Вироблення ентропії в процесі дифузії в плоскопаралельній порі у випадку розчину Маргулеса. *Укр. фіз. журн.* **58** (10), 988 (2013).
 30. Д.А. Гаврюшенко, О.В. Коробко, В.М. Сисоєв, К.В. Черевко. Продуктування ентропії в процесі дифузії в плоскопаралельній порі у випадку розчину Скетчарда-Хамера. *Укр. фіз. журн.* **59** (7), 732 (2014).
 31. Л.А. Булавін, Д.А. Гаврюшенко, О.В. Коробко, В.М. Сисоєв, К.В. Черевко. Дифузійні потоки та продуктування ентропії в плоскопаралельній порі у випадку ідеального розчину. *ДАН* **5**, 76 (2014).
 32. В.М. Сисоєв, И.А. Фахретдинов, С.Г. Шпырко. Термодинамическая теория возмущений и потенциал Гиббса тройных растворов. *Журн. физ. хим.* **71**(12), 2142 (1997).
 33. В.А. Дуров, Е.П. Агеев. *Термодинамическая теория растворов* (Изд-во МГУ, 1987) [ISBN: 5-354-00190-0].
 34. D. Gavryushenko, K. Taradii. Вплив радіаційного опромінення на фізичні властивості рідин. *Укр. фіз. журн.* **60** (8), 763 (2015).
 35. Y. Kolesnichenko. Distribution function for nuclear fusion reaction products in a stationary thermonuclear reactor. *Nucl. Fusion* **15**, 35 (1975).
 36. Y.V. Kalyuzhnyi, S.T. Cui, P.T. Cummings, H.D. Cochran. Distribution function of a simple fluid under shear: Low shear rates. *Phys. Rev. E* **60** (2), 1716 (1999).
 37. H. Gan, B. Eu. Integral equation of the dynamic pair-correlation function for nonequilibrium simple fluids. *Phys. Rev. A* **43** (10), 5706 (1991).
 38. W. Loose, S. Hess. Nonequilibrium velocity distribution function of gases: Kinetic theory and molecular dynamics. *Phys. Rev. A* **37** (6), 2099 (1988).
 39. K. Takayanagi. On the theory of chemically reacting gas. *Prog. Theor. Phys.* **6** (4), 486 (1951).
 40. I. Draganic. Radiolysis of water: a look at its origin and occurrence in the nature. *Rad. Phys. Chem.* **72**, 181 (2005).

41. E. Ben-Naim, B. Machta, J. Machta. Power-law velocity distributions in granular gases. *Phys. Rev. E* **72**, 021302 (2005).
42. A. Alastuey, J. Piasecki. Approach to a stationary state in an external field. *J. Stat. Phys.* **139** (6), 991 (2010).
43. A. Gervois, J. Piasecki. Stationary velocity distribution in an external field: A one-dimensional model. *J. Stat. Phys.* **42**, 1091 (1986).
44. S.B. Zhu, J. Lee, G.W. Robinson. Non-maxwell velocity distributions in equilibrated fluids. *Chem. Phys. Lett.* **163** (4,5), 328 (1989).
45. L.A. Bulavin, K.V. Cherevko, D.A. Gavryushenko, V.M. Sysoev, T.S. Vlasenko. Radiation influence on the temperature-dependent parameters of fluids. *Phys. Rev. E* **93**, 032133 (2016).
46. N. Bogolyubov. *Studies in Statistical Mechanics* (North-Holland, 1962), Vol. 1, Chap. Problems of dynamical theory in statistical physics, p. 5 [ISBN: 978-1124106755].
47. K. Gurov. *Basics of Kinetic Theory (Bogolyubov Method)* (Nauka, 1966).
48. *Probability and Related Topics in Physical Sciences, Lectures in Applied Mathematics*, Vol. 1. Edited by M. Kac (Interscience Publishers, Inc., 1959) [ISBN: 978-0821800478].
49. S.R. de Groot, P. Mazur. *Non-Equilibrium Thermodynamics* (Dover, 2011) [ISBN: 978-0486647418].
50. I. Prigogine. *Etude Thermodynamique des Phenomenes Irreversibles* (Dunod, 1947).
51. D. Gavryushenko. Influence of irradiation on condensed matter structure. *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Phys. Math.* **3**, 329 (2012).
52. D. Gavryushenko, V. Sysoev, T. Vlasenko. Changes in the liquids structure characteristics under the irradiation. *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Phys. Math.* **2**, 287 (2013).
53. T.S. Vlasenko. Effect of an external action on a pair distribution function in a steady state. *JETP Letters* **99**, 270 (2014).
54. K. Cherevko, D. Gavryushenko, V. Sysoev, T. Vlasenko, L. Bulavin. On the mechanism of the radiation influence upon the structure and thermodynamic properties of water. In: *Modern Problems of the Physics of Liquid Systems*. Edited by L. Bulavin, L. Xu (Springer, 2019).
55. S. Uehara, H. Nikjoo. Monte Carlo track structure code for low-energy alpha-particles in water. *J. Phys. Chem. B* **106**, 11051 (2002).

Одержано 14.06.23

*T.S. Vlasenko, D.A. Gavryushenko,
K.V. Cherevko, L.A. Bulavin*

INFLUENCE OF IRRADIATION ON THE PARAMETERS OF FACILITATED DIFFUSION IN A MODEL MEDICAL-BIOLOGICAL SYSTEMS

A theoretical model of the diffusion in confined multicomponent systems under irradiation has been developed in the framework of the non-equilibrium thermodynamics formalism. The model allows the stationary diffusion flows to be determined taking the irradiation-induced changes in the equilibrium part of the diffusion coefficient into account. Entropy contributions to the equilibrium part of the diffusion coefficient due to the changes in the thermodynamic properties of liquid systems under irradiation are evaluated for a number of model solutions. It is shown that the permanent irradiation of medical-biological systems can increase the oxygen concentrations in the tissues by reducing the stabilizing effects that are observed in the facilitated diffusion regime without irradiation.

Keywords: facilitated diffusion, diffusion coefficient, irradiation, biological system, ideal solution.