

Посвящается памяти Б.К. Вайнштейна

СИСТЕМНО-СТРУКТУРНОЕ МОДУЛЬНОЕ ОБОБЩЕНИЕ КРИСТАЛЛОГРАФИИ СВЯЗАННОЙ ВОДЫ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ МЕХАНИЗМОВ ПРОЦЕССОВ В БИОСИСТЕМАХ НА АТОМНО-МОЛЕКУЛЯРНОМ УРОВНЕ

© 2011 г. Н. А. Бульенков

*Институт физической химии и электрохимии РАН, Москва
E-mail: lmt@phycr.ac.ru*

Поступила в редакцию 10.02.2011 г.

Рассмотрены основные причины современной научной революции, одним из следствий которой стало возникновение нанотехнологий и развитие междисциплинарного мегаестествознания, способного конструировать потенциально возможные атомные структуры и изучать механизмы протекающих в них процессов. Показана объединяющая роль кристаллографии для создания междисциплинарного знания. Для подобного обобщения кристаллографии понадобилось введение нового понятия “модуль”, отражающего универсальное условие стабильности всех реальных и потенциальных, равновесных и неравновесных структур вещества – их связность. Модульное обобщение кристаллографии охватывает все формы твердого тела, включая структуры связанной воды – системообразующей матрицы для самоорганизации и формообразования иерархических биосистем, которая определяет метрический отбор всех других структурных составляющих этих систем. Создана динамическая модель поверхностного слоя воды, который выполняет роль матрицы в образовании монослоев Ленгмюра и играет решающую роль в возникновении жизни на Земле.

ВВЕДЕНИЕ

В последние два десятилетия четко наметился общенаучный кризис в естествознании, имеющих следующие корни:

– редукционизм и отсутствие междисциплинарной связи между разными науками, хотя они стремятся к сближению, в особенности с биологией, при создании новых материалов методами нанотехнологии;

– отсутствие прямых экспериментальных и теоретических методов изучения структуры апериодических и неравновесных веществ, более сложных по своему строению, чем кристаллические;

– незнание структурных кооперативных механизмов различных процессов (особенно таких, как самоорганизация и формообразование), а также возможных превращений в указанных веществах.

Одной из причин глубокого кризиса в современной науке являются господствующие в ней позитивистские взгляды на создание новых знаний. Теории выводятся из эмпирических фактов посредством рациональной индукции, следовательно, теории и гипотезы являются вторичными по отношению к фактам и имеют самостоятельное значение. Из этого следует вывод, что науч-

ная революция получает все необходимое для нее только путем накопления новых экспериментальных знаний и их дальнейшего обобщения. В результате должен иметь место переход от инструментальной революции к концептуальной.

Другими не менее важными причинами этой научной революции являются: исчерпание фундаментальных научных заделов для создания новых технологий, обусловленное кризисом в науке и ее методологии; глобальный кризис в ресурсах и энергетике, а также наша цивилизация, исчерпавшая многие ресурсы для дальнейшего развития. Бурные темпы нанотехнологии являются только одним из следствий этой революции, результатом которой станет создание системно-структурного и междисциплинарного мегаестествознания, способного конструировать потенциально возможные структуры субъективной реальности и изучать на их моделях механизмы структурно-кооперативных процессов. Лучшими примерами реализации таких структур и возможных переходов в них являются биологические структуры, прошедшие долгий путь номогенетического детерминированного эволюционного развития. Поэтому переход к моделированию таких потенциально возможных структур начинается с использования данных о строении разных

иерархических уровней биосистем и учета влияния роли воды на их самоорганизацию и формообразование, так как все подобные системы содержат до 90% воды.

Для изучения роли воды требуется развитие методов системообразующей обобщенной кристаллографии. Подходы к развитию обобщенной кристаллографии и выявление ее основных особенностей, сделанное Дж. Берналом и А. Маккем [1, 2], показали, что они связаны с проблемами классической (решеточной) кристаллографии и, судя по полям ее охвата, имеют междисциплинарный характер. Сейчас наука впервые обращается к миру потенциальных возможностей и к методу дизайна, результаты которого должны совпадать с многочисленными косвенными экспериментальными данными. Исходя из знаний, полученных из созданных моделей и, главное, «траекторий» структурных механизмов возможных в них превращений, могут быть найдены необходимые компоненты и условия для создания соответствующего материала. Этим грядущая научная революция существенно отличается от предыдущих революций, которые изучали только вещи и явления объективно существующей реальности. Создание материалов нового типа, обладающих принципиально новыми свойствами, определяют лицо будущей цивилизации.

Цель этой работы – показать роль кристаллографии в ее обобщенной форме для создания единого системного междисциплинарного знания из ранее дифференцированных наук. Дж. Бернал писал [3], что “для структурализации живой материи, а потому для построения действительно обобщенной кристаллографии важное значение имеет понятие неевклидовой кристаллографии”.

СИСТЕМО-СТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ ОРГАНИЗАЦИИ ГЕТЕРОГЕННЫХ МНОГОУРОВНЕВЫХ ИЕРАРХИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Структурализм – это скорее класс взаимосвязанных подходов, имеющих общую основу – особое видение мира как целостной системы, состоящей из элементов, находящихся во взаимодействии друг с другом и окружающей средой. Вследствие этого возрастает эвристическая роль математики, и ее методы прямо переносятся в биологию, что делает математику непосредственным источником объяснения тех или иных процессов [4].

Системно-структурный анализ является логическим продолжением биологического структурализма, ведущим принципом которого является динамизм закономерного изменения структур, вследствие чего понятие «процесс» оказывается сопряженным с понятием “структура”. Значимость этого понятия определяется стабильностью и упорядоченностью структуры, что в свою очередь определяет повторяемость форм и их сим-

метрию, а также стабильность ее инвариантов. Создание такой рациональной морфологии, охватывающей все уровни жизни, является главной задачей теоретической биологии, потому что все свойства биосистем и механизмы их функционирования определяются в основном их строением. Своеобразие методологии биологических структуралистов состоит в обосновании процессов, происходящих со структурами, начиная с самых нижних уровней биологической самоорганизации.

Важной задачей структурализма является установление отношений и связей между частями, образующими целое. Часто, особенно на нижних уровнях организации, системы обладают симметрией. Однако по своему составу они являются гетерогенными, что мешает применять кристаллографию к изучению их строения. Поэтому важным для успешной реализации методологии структурализма является возможность выделения в гетерогенной иерархической биосистеме общей гомогенной структурной составляющей, обладающей системообразующими свойствами и обеспечивающей (а) единство целого из отобранных (по соразмерности с ней) других его структурных составляющих и (б) их пространственно-размерные отношения в биосистеме. Именно эту задачу решает системно-структурный анализ, и в случае успеха станет возможным применение геометрии, а точнее, обобщенной кристаллографии, к моделированию на атомно-молекулярном уровне идеальных предельно симметричных системообразующих гомогенных форм структурных составляющих гетерогенных биосистем.

НЕОБХОДИМОСТЬ СУЩЕСТВОВАНИЯ ОБЩЕЙ СИСТЕМООБРАЗУЮЩЕЙ СОСТАВЛЯЮЩЕЙ ГЕТЕРОГЕННЫХ ИЕРАРХИЧЕСКИХ СИСТЕМ

А. Пуанкаре так определил необходимость существования геометрии: “... если бы не было твердых тел, в природе не было бы геометрии” [5]. Для изучения структур симметричных форм, образованных из связанных между собой точек (атомов), необходимо применение раздела дискретной геометрии – кристаллографии с ее основным методом симметрии, но это применимо только к гомогенным структурам из одинаковых (эквивалентных) частиц. Однако все иерархические биосистемы являются гетерогенными системами, и поэтому должна существовать их общая системообразующая структурная составляющая, которая по соразмерности с собой подбирает другие структурные составляющие, взаимодействующие с ней и тем самым увеличивающие ее стабильность. Эта системообразующая составляющая должна быть иерархической гомогенной системой с дисконтинуальной структурой, для того чтобы система могла иерархически фрак-

тально развиваться, взаимодействуя на каждом уровне иерархии с соразмерными с ней другими структурными составляющими, сохраняя при этом в совокупности нативную форму природных биополимеров. Коренным отличием этой системообразующей составляющей биосистем от кристаллических тел может быть дисконтинуальное и иерархическое строение, допускающее ее пространственное “декорирование” другой соразмерной с ней структурной составляющей за счет слабых (водородных) связей, образованных между ними. Для самоорганизации молекулярных биосистем характерно обязательное промежуточное интермедиатное состояние, которое почти сохраняет архитектуру структуры в нативных формах при частичном разрушении структур системообразующей составляющей в уже сложившейся глобуле [6]. С этой точки зрения становится понятным возникновение теории номогенеза, оперирующей детерминированными формами морфологии, возникающими на разных уровнях иерархии и часто повторяющимися друг друга у организмов, далеких по их положению на эволюционном древе.

А.А. Любищев решение проблемы биохимической самоорганизации видел в создании новой, неевклидовой кристаллографии воды. “Видима, мыслима какая-то новая кристаллография ..., которая должна быть построена на своих постулатах, возможно весьма общих с постулатами, лежащими в основе некоторых форм биологической симметрии ...” [7] Увидев большое сходство морфологии морозных узоров на стекле с растительными формами, далее он пишет: “Классификация Федорова к ледяным узорам на стекле не применима, так как здесь не действует основной постулат Федорова: заполнение пространства элементами данного типа.” Правильность идеи создания обобщенной кристаллографии связанной воды как общей системообразующей структурной составляющей, определяющей форму гетерогенных биосистем, образованных из структурных форм воды и других составляющих, отобранных по соразмерности с ними, подтверждена мыслью М. Хайдеггера [8]: “Современная мысль почти только и делает, что гоняется за упущенным целым. ... Пока мы будем видеть целое только в конце наших построений, мы никогда не увидим конца нашим построениям.” Поэтому возможен единственный способ выделения целого – с самого начала процесса познания.

ИСХОДНЫЕ ЕВКЛИДОВЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ МОДУЛИ

Классический взгляд на кристаллохимию порождает неверный вывод о том, что кристаллы являются решетками из элементов симметрии, “украшенными” атомами. На самом деле элементы симметрии и, следовательно, решетка как подгруппа трансляций пространственной группы являются результатом локальных взаимодействий

атомов [9]. Вновь введенное понятие “кристаллический модуль” [10], отражающее геометрию локальной связанности в структуре кристалла, позволяет понять суть процесса самоорганизации любых стабильных структур, который напоминает процесс “вязания” путем завершения двумерных, а затем и образованных ими трехмерных замкнутых модульных петель. На основе понятия “кристаллический модуль”, который выделен из достоверно известной структуры и органично связан с понятием “решетка”, удалось создать модульное обобщение кристаллографии [11].

В кристаллических структурах по структурным мотивам Н.В. Белова, изображенных в координационных полиэдрах [12], можно однозначно выделить минимальные повторяющиеся фрагменты – “кристаллические модули” (“кванты” кристаллического состояния или “кристаллические молекулы” по Е.С. Федорову [13]), полностью определяющие стехиометрию, симметрию, дальний порядок и даже морфологию кристалла (строение и ориентацию его важнейших граней и ребер). Полиэдры кристаллических модулей при их трансляционном переносе охватывают все атомы структуры. В модуле атомы размещаются только на вершинах, ребрах и гранях его полиэдра и не содержатся внутри него. Поэтому модульное разбиение кристаллического пространства соответствует разбиению по всем химическим связям, включая слабые, и полной связанности структур, что согласовывается с более общими условиями их стабилизации по сравнению с энергетическим. Общепринятый критерий стабильности, соответствующий минимуму свободной энергии, относится только к частному случаю – равновесным кристаллическим структурам.

Структурный мотив акцентирует внимание на пустоте в виде незаселенного полиэдра. Поэтому, если добавить смежные с этой пустотой доли заселенных полиэдров вместе с атомами в их центрах и вершинах, по которым соединяются координационные полиэдры, образующие структурный мотив, то можно однозначно выделить трехмерную связанную петлю кристаллического модуля. На рис. 1 показаны структурные мотивы и соответствующие им кристаллические модули сфалерита (а), вюртцита (б), флюорита (в–д), NaCl (е–з) и NiAs (и–л). Координационные полиэдры катионов и анионов в структурах CaF₂ (в), (г) и NiAs (и), (к) различны и поэтому для них существуют два типа структурных мотивов, в зависимости от того, какими полиэдрами они образованы. Тем не менее для каждой из этих структур существует только один тип кристаллического модуля (ромбододекаэдр в CaF₂ (г) и полиэдр комбинации тригональной бипирамиды с дитригональной призмой в NiAs (л)). Кроме модулей этих простых кристаллических структур представлены структурные мотивы ReO₃ (м) и NbO

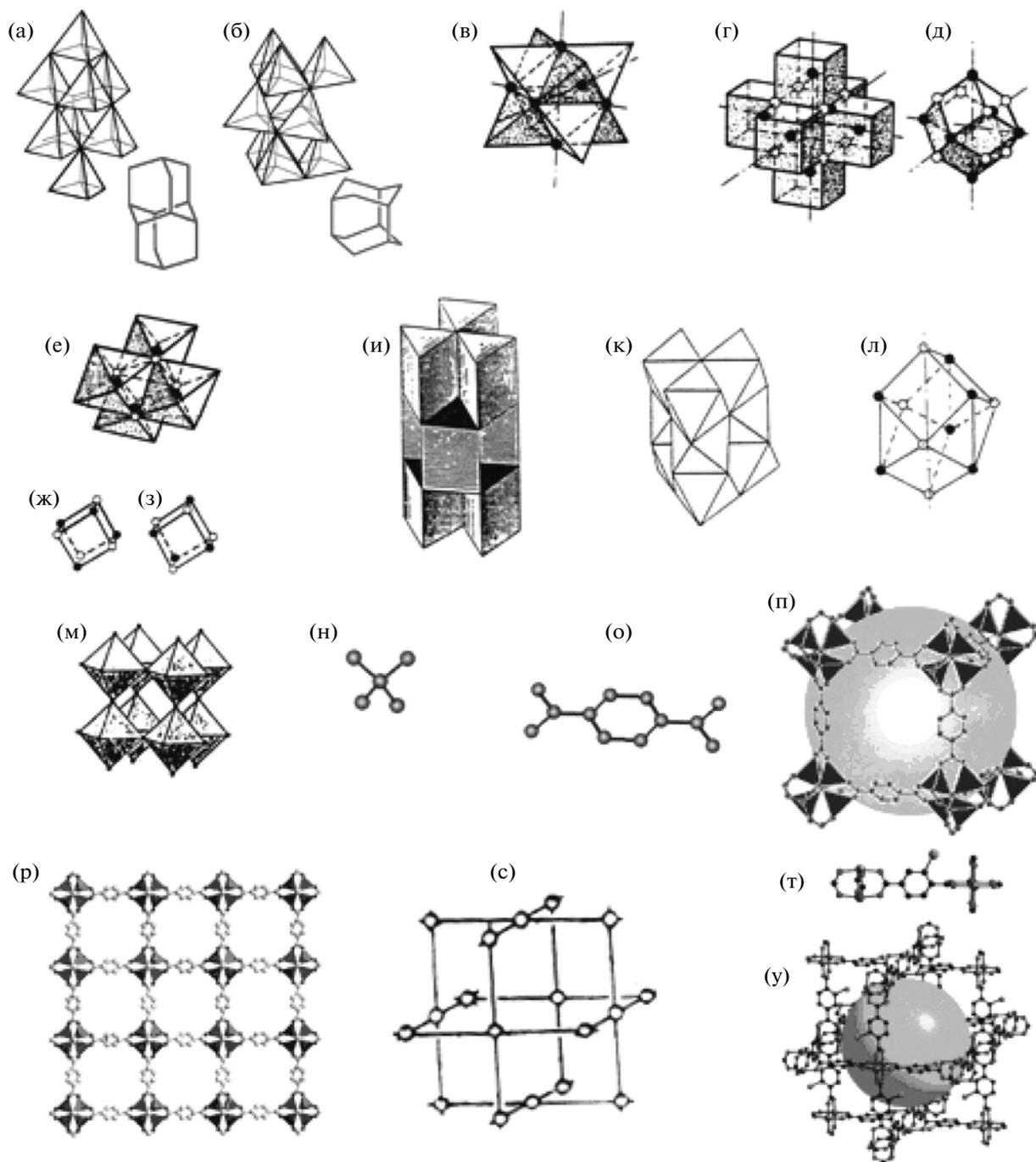


Рис. 1. Структурные мотивы кристаллических структур: (а, слева) – сфалерита (алмаза); (б, слева) – вюрцита (льда Ih); в, г – флюорита; е – NaCl; и, к – NiAs; м – ReO₃; с – NbO и соответствующие им модули: (а, справа) – сфалерита; (б, справа) – вюрцита; д – флюорита; ж, з – NaCl; л – NiAs; с – NbO. Молекулярные “строительные блоки”: н – Zn₄O; о – бензенидикарбоксилат (BDC) O₂–C–C₆H₄–C–O₂ и т – сложная органическая молекула, из которых синтезированы, подобные модулям – “прототипам” м, с, модули п, у кристаллических нанопористых структур типа [Zn₄O(BDC)₃] (р).

(с), по структурам которых созданы модули (п, у) из “молекулярных блоков” (н, о, т) [14].

Введение понятия “кристаллический модуль” изменяет взгляд на причину стабильности, так как внимание акцентируется не на минимуме

энергии, а на полной связанности структуры модуля. Поэтому в качестве “прототипов” дизайна мезопористых неравновесных кристаллических структур выбраны связанные структуры модулей, что обеспечивает возможность дальнейшего трех-

мерного развития модульных периодических структур до макроскопических размеров за счет очередного завершения трехмерных модульных петель по всем трем направлениям трансляций. Модульное строение является универсальным для всех типов стабильных структур, включая биологические, а процесс их самоорганизации в замкнутые двух- и трехмерные модульные “петли” может быть описан на атомном уровне закономерной последовательностью “внутренних координат” (межатомные расстояния (d_{ij}); валентные (α) и торсионные (θ) углы), определяющих геометрию модуля, либо на последующих уровнях алгоритмами модульного дизайна — бинарными операциями симметрии (трансляции, плоскость, двойная ось и центр симметрии), соединяющими модули в структуре.

Основной смысл введения понятия “кристаллический модуль” связан с тем, чтобы обойти нерешаемую сейчас аналитически проблему достижения связанности, т.е. проблему самоорганизации периодических и аperiodических структур. Такие структуры невозможно достоверно изучать современными теоретическими и экспериментальными методами, потому что в основе и тех и других лежит понятие “решетка”. Остается одно — найти такие кооперативные преобразования кристаллических модулей, которые не нарушали бы связанности их структуры и изменяли бы их евклидову природу, определяющую сплошное заполнение трехмерного евклидова пространства, ненапряженный характер образованной ими равновесной кристаллической структуры и линейную морфологию кристаллов (прямореберную и плоскогранную).

Кооперативное преобразование евклидовых кристаллических модулей в неевклидовы модули нелинейных структур искривленных пространств постоянной кривизны возможно путем введения в их замкнутую оболочку соответствующих дисклиний или диспираций¹. Например, кристаллические модули тетраэдрических структур алмаза и льда Ih можно преобразовать введением в их замкнутую оболочку “ $\pm 60^\circ$ ” диспираций в неевклидовы модули, оболочки которых остаются связанными и также образованы гексациклами, но с другими конформациями. При этом в них сохраняются подгруппы симметрии точечных групп исходных кристаллических модулей. Неевклидов модуль, полученный из модуля вюртцита — льда Ih, можно объединить в кластеры (по сплетениям групп симметрий), а эти кластеры — в одномерные кристаллические стержни, из которых мож-

но образовать дисконтинуальные системообразующие иерархические фрактальные структуры.

ЗАКОНОМЕРНЫЕ КООПЕРАТИВНЫЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ИСХОДНЫХ ТЕТРАЭДРИЧЕСКИХ МОДУЛЕЙ В НЕЕКЛИДОВЫ МОДУЛИ УПОРЯДОЧЕННЫХ ДИСКОНТИНУАЛЬНЫХ СТРУКТУР

Биологи первыми сформулировали эмпирические принципы самоорганизации систем, которые проявляются на всех иерархических уровнях: “система систем”, “узнавание” и “все или ничего” [15]. Согласно первому принципу, системы низших уровней являются частями систем последующих уровней, а согласно второму — эти части объединяются в целое только при строго определенной их взаимной ориентации. Наконец, последний принцип обуславливает единственно возможную “архитектуру” нативных (природных) форм биосистем, способных интегрироваться в системы последующих уровней, хотя все они характеризуются устойчивым неравновесием [16] и, следовательно, отсутствием глобального минимума энергии. Все три принципа утверждают детерминированный, а не статистический (случайный) способ самоорганизации систем.

Для самоорганизации иерархических систем характерны еще два важных условия: размеры частей системы должны соотноситься с размерами самой системы, как различные степени числа $\tau = 1.618\dots$ — пропорции “золотого сечения” (условие “золоточисленной метрики” частей и целого) [17] и интеграция частей в целое возможна только за счет слабых связей, необходимых для управления системой с помощью “обратных связей” при ее взаимодействии с внешней средой [15].

Самоподобие фрактальных структур в трехмерном пространстве наблюдается только для однородных системообразующих структур, смоделированных из точек (атомов) с симметрией их связей $I_h - \sqrt{3}m$ и $T-23$ и координационными числами 12 и 4. Точка является основным начальным элементом в евклидовой геометрии и поэтому во всех регулярных неевклидовых структурах модульной обобщенной кристаллографии она (атом) должна обладать симметрией либо икосаэдра (или дуального ему додекаэдра), либо левого или правого тетраэдра. Покажем взаимосвязь структур, образованных системами точек с указанными симметриями.

Плотнейшую ГЦК-упаковку равновеликих шаров можно разбить по кратчайшим расстояниям (связям) на два типа полиэдров (симплексов): правильные тетраэдры и октаэдры, вершины которых находятся на поверхности полых сфер. Плотные упаковки шаров в трехмерных сферическом (S^3) и гиперболическом (H^3) пространствах

¹ Линейные дисклинационные ($\pm\alpha_N$) и диспирационные (α_N/τ_N) дефекты несовместимы с кристаллическим (евклидовым) пространством, но параметры их преобразований соответствуют параметрам кристаллографических осей симметрии (α_N) с трансляционными компонентами.

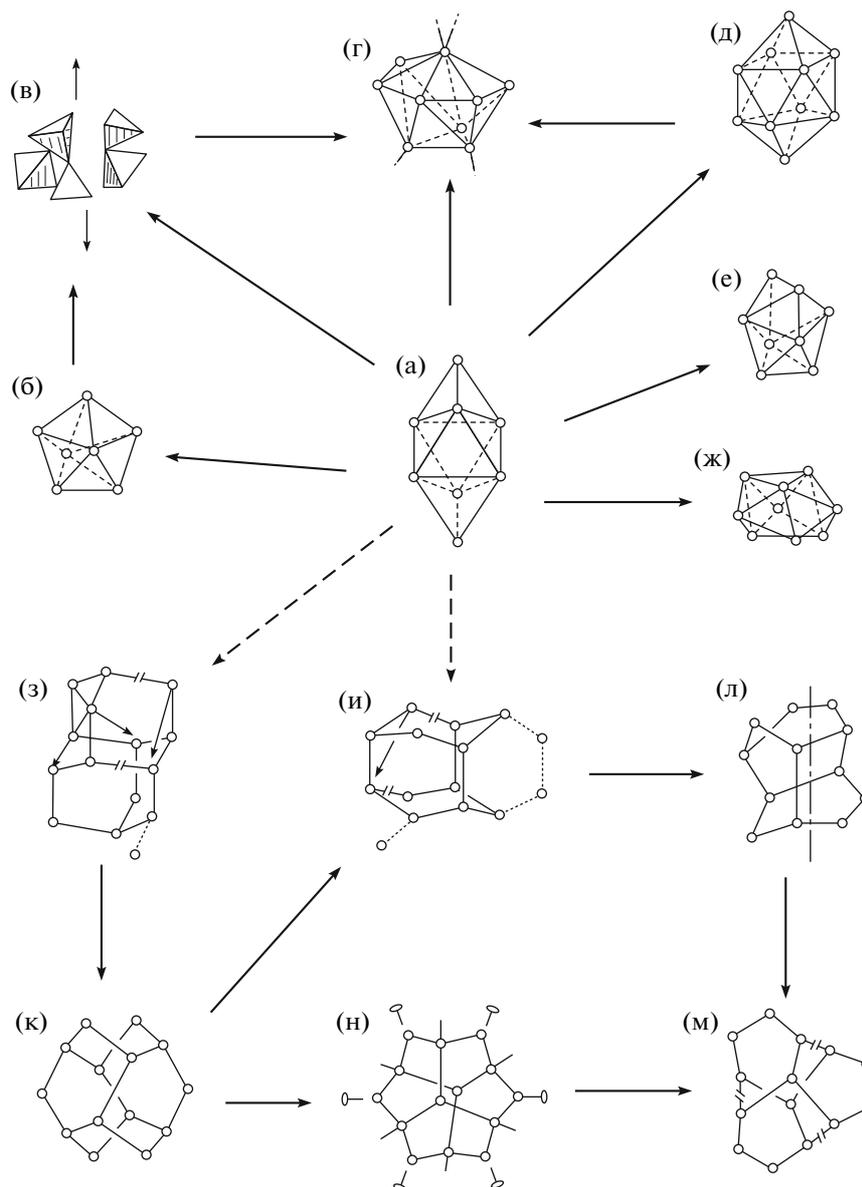


Рис. 2. Канализированная система из кристаллических евклидовых модулей (а, з, и, н) и преобразованных неевклидовых модулей: а – R -модуль ГЦК-решетки; б–г – модули регулярных политопов из плотных упаковок шаров в H^3 - и S^3 -пространствах; д–ж – модули аморфной структуры статистически упакованных равновеликих шаров с постоянной плотностью; з – кристаллический модуль алмаза; и – кристаллический модуль льда Ih; к–м – преобразованные неевклидовы тетраэдрические модули; н – кристаллический модуль плотной модификации Si “BC-8”.

разбиваются только на почти правильные тетраэдры (углы между ребрами мало отличаются от 60° , а сами ребра слегка искривлены). Из двух тетраэдров и одного октаэдра можно образовать ромбоэдрический модуль рис. 2а, который одновременно является и примитивной R -ячейкой в кубической кристаллической упаковке шаров, что подтверждает органическую взаимосвязь понятий “модуль” и “решетка” в классической кристаллографии [18]. Дисклинационные преобразования кристаллического R -модуля ГЦК-упаковки (рис. 2а) превращают его в так называемые “полиэдры Бернала” (рис. 2д–2ж) – модули

аморфной структуры статистической упаковки из равновеликих шаров с постоянной плотностью [19]. На рис. 2б–2г показаны модули регулярных плотных упаковок шаров в S^3 - и H^3 -пространствах, которые образованы только тетраэдрическими симплексами [18]. Из R -модуля ГЦК-упаковки путем введения “базисных” атомов можно получить модуль кристаллической структуры алмаза (сфалерита), представляющий две ГЦК-структуры, вставленные друг в друга и смещенные на длину межатомной связи в направлении $\langle 111 \rangle$ (рис. 2д). В кристаллическом модуле алмаза, состоящем из 14 атомов и 7 гексациклов с кон-

формацией “кресло”, заключена вся информация не только о дальнем порядке, но и о морфологии кристаллов алмаза в виде октаэдров. Гексациклы модуля определяют строение и ориентацию важнейших граней алмаза (октаэдра), так как гексациклы являются двумерными модулями атомных сеток этих граней, а нормали, проведенные из центра модуля к плоскостям гексациклов, совпадают по направлению с нормальными граней октаэдра. Периодическое атомное строение ребер октаэдрических граней определяется атомными цепочками, общими для смежных гексациклов. Алгоритм самоорганизации кристаллической структуры алмаза можно представить в виде димера из двух тетраэдрических атомов с фиксированным значением торсионных углов всех связей $\theta = 60^\circ$ [20]. Из гексагональной плотнейшей упаковки с тем же R -модулем (рис. 1а) подобным образом можно получить модуль гексагональной алмазоподобной структуры вюртцита (льда Ih) (рис. 2и). Диспирационные “ $\pm 60^\circ$ ” преобразования модулей, содержащие дисклинационную (α_N) и трансляционную (τ_n) компоненты винтовых осей симметрии, содержащихся в пространственных группах их кристаллов, позволяют кооперативно преобразовать кристаллические модули алмаза (рис. 2д) и льда Ih (рис. 2и) в неевклидовы модули (рис. 2к и 2л соответственно) без значительных искажений в их структуре по сравнению с кристаллическими [11, 18]. В свою очередь возможно кооперативное преобразование этих неевклидовых модулей в кристаллический модуль плотной модификации Si “BC-8” [21] (рис. 2н) и в модульный кластер – элемент структуры связанной воды [11] (рис. 2м). Последний кооперативно может преобразовываться в додекаэдрический модуль 5^{12} кристаллических структур газогидратов.

Таким образом, возможны кооперативные взаимные преобразования модулей тетраэдрических кристаллических структур алмаза, льда Ih, плотной модификации Si “BC-8” и кристаллогидратов в неевклидовы модули, причем эти преобразования образуют замкнутую динамическую канализированную систему [18] вследствие весьма жестких условий полной стыковки тетраэдрических связей в стабильных структурах.

ТРЕХМЕРНОЕ ЕВКЛИДОВО ПРОСТРАНСТВО – ЕСТЕСТВЕННОЕ ПРОСТРАНСТВО ДЛЯ СТРУКТУР ЛЮБОЙ ФОРМЫ СТАБИЛЬНОГО НЕРАВНОВЕСНОГО СОСТОЯНИЯ

Метрики трехмерных неевклидовых пространств постоянной кривизны (S^3 – сферического и H^3 – гиперболического) в малых объемах могут быть локально совмещены с метрикой трехмерного евклидова пространства, которое ха-

рактеризуется тем, что сумма углов треугольника ($\alpha + \beta + \gamma$) всегда равна 180° , независимо от увеличения его размеров. Расстояния между двумя любыми точками измеряются только по соединяющей их прямой. В S^3 - и H^3 -пространствах сумма углов треугольника не равна 180° и, что, самое главное, разница $\delta = (\alpha + \beta + \gamma) - 360^\circ$ изменяется по мере самоподобного увеличения размеров треугольников, а расстояния между вершинами треугольников измеряются по кривым, соединяющим эти вершины: в S^3 – выпуклые кривые, в H^3 – вогнутые [22]. Следовательно, при росте структур, например, в S^3 -пространстве, расстояния между атомами (длины связей) увеличивались бы по мере удаления от точки начала роста, а сами связи становились бы криволинейными и более длинными. Химические связи соответствуют центральному силам, поэтому они прямолинейны, их энергия сильно изменяется в зависимости от изменения их длины по сравнению с равновесными в кристаллических структурах. Возможность локального совмещения евклидова пространства с метрикой пространств S^3 и H^3 соответствует изменению длин связей и изменению валентных и торсионных углов связей вследствие упругой деформации структуры из преобразованных неевклидовых модулей. В результате структуры из этих модулей в отличие от исходной кристаллической при своем образовании способны поглощать “внешнюю” энергию в виде упругих напряжений. При деструкции таких структур энергия будет выделяться, тогда как при плавлении кристаллов она поглощается. В евклидовом трехмерном пространстве возможно только одномерное распространение неевклидовых модулей, в результате чего образуются фрактальные стержневые структуры из неевклидовых модулей или из их кластеров [23].

Модульная концепция самоорганизации всех стабильных структур позволяет охватить континуальные равновесные кристаллические структуры из евклидовых модулей ($\Delta E < 0$) и неравновесные напряженные структуры из преобразованных неевклидовых модулей ($\Delta E > 0$). Аморфные неравновесные структуры всегда являются континуальными комбинаторными полимодульными структурами: либо из кристаллических модулей известных полиморфных модификаций данного вещества [24], либо из нескольких типов преобразованных неевклидовых модулей [10]. Кооперативный механизм (без участия точечных дефектов) обратимых процессов выделения и растворения микрокристаллов кобальтовой шпинели в кристаллах легированного кобальтом корунда (при отжиге в различных средах) через промежуточную стадию локальной аморфизации показан в [23]. Также создана модульная модель кооперативного процесса локального образования нано-

кристаллов (**нк**) в пленках аморфного кремния (*a*-Si) с образованием нанокompозита (**нк** + *a*-Si) [25]. Аморфное состояние можно рассматривать как стабильное активированное состояние, способное поглощать энергию локальными напряженными структурами, или как структуры, образованные либо из неевклидовых модулей, либо из кристаллических модулей различных модификаций, в том числе нестабильных в обычных условиях. Подобное запасание энергии с последующим ее частичным выделением в ходе релаксации локальных напряжений в виде флуоресцентного поляризованного излучения в совершенных кристаллах CdS также показано на основе модели бимодульных солитоноподобных дефектов [26].

ОСОБЕННОСТИ СИММЕТРИИ И СИСТЕМНЫЕ СВОЙСТВА МОДУЛЬНЫХ САМОПОДОБНЫХ ИЕРАРХИЧЕСКИХ СТРУКТУР СВЯЗАННОЙ ВОДЫ

Дисконтинуальные гомогенные иерархические структуры воды должны проявлять все особенности строения систем для того, чтобы на их основе могли самоорганизовываться гетерогенные иерархические системы. Системные свойства проявляются в способности образовывать принципиально новые структуры в зависимости от способа соединения в них модулей (частей). “Золоточисленная метрика” частей должна проявляться как в структуре воды, так и в структуре органических составляющих, соразмерных с ней по гидрофильным группам, способным образовывать Н-связи. Поэтому между структурами воды, органическими и другими составляющими биосистем должны существовать соразмерность и определяемые ею взаимные соответствия структурных направлений. Системные свойства структур воды должны проявляться в нескольких отношениях: в соответствии симметрии и строения принципам системной самоорганизации; в нелинейной морфологии модульных структур воды; в разнообразии модульных структур, образованных одним типом модулей, но собранных из них по разным алгоритмам сплетений групп симметрии и в соответствии с особенностями структур обобщенной кристаллографии, сформулированными А. Маккеем [27].

Сплетения групп симметрии адекватно описывают строение иерархических структур, соответствующих принципам системной самоорганизации, но их симметрия приближительная (ослабленная), а не точная, как в кристаллах. [18]. Пассивная (*P*) точечная группа сплетения, соответствующая части системы и смещенная на вектор **r** от центральной точки активной (*A*) точечной группы всей системы, образует вместе с ней сплетения этих групп с симметрией, равной произведению группы пересечения (*G*) пассивной и активной групп и орбитальной группы (*L*), соот-

ветствующей группе, тождественной мультидвойникованию. Сплетения групп симметрии $A = G \times L = (P_r \cap A) \times L = P_r^L s A$ отражают основные принципы системной самоорганизации, потому что принцип “система систем” описывается произведением групп симметрии на всей последовательности иерархических уровней. Покажем это на примере системных структур воды на первых пяти уровнях. Две тетраэдрические молекулы воды с симметрией *T* (без учета протонной упорядоченности на *H*-связях) образуют димер с торсионным углом $\theta \approx 38^\circ$ с симметрией сплетения групп $T_{r_1}^{C_2} s D_3$, $T_{r_1} \cap D_3 = C_3$ (рис. 3а). С учетом направленности всех своих тетраэдрических связей два димера образуют двумерный модуль в виде замкнутой петли (*t-h*)-гексацикла с конформацией “твист-ванна”: $(T_{r_1}^{C_2} s D_3)_{r_2}^{C_2} s D_2$, $(D_{3_2} \cap D_2) = C_2$ (рис. 3б). Два (*t-h*)-гексацикла образуют трехмерный H_L -модуль с симметрией $[(T_{r_1}^{C_2} s D_3)_{r_2}^{C_2} s D_2]_{r_3}^{C_2} s C_2$ (рис. 3в), который можно получить “+60°” диспирационным преобразованием кристаллического модуля льда Ih (рис. 1к). “Тройник” (*L*-триплет) из H_L -модулей с симметрией $\{(T_{r_1}^{C_2} s D_3)_{r_2}^{C_2} s D_2\}_{r_3}^{C_2} s C_2\}_{r_4}^{C_3} s D_3$, $(C_2 \cap D_3 = C_2)$ (рис. 3г) на следующем уровне образует “четверник” в виде *T*-кластера – фрактального аналога тетраэдрического атома с глобальной тетраэдрической симметрией *T*-23 сплетения групп $\langle \{(T_{r_1}^{C_2} s D_3)_{r_2}^{C_2} s D_2\}_{r_3}^{C_2} s C_2\}_{r_4}^{C_3} s D_3 \rangle_{r_5}^{D_2} s T$ (рис. 3д, 3е), самоподобно повторяющий его по симметрии и геометрии [18, 27]. *L*-триплеты и *T*-кластеры являются узлами пересечений или скрещивания спиралей (30/11) в структурах связанной воды.

Если два взаимопроникающих тетраэдра повернуть друг относительно друга по тройной оси, связывающей центры обоих тетраэдров, на $\sim 38^\circ$ (рис. 2а), то расстояния между их ближайшими несвязанными вершинами увеличатся в τ раз по сравнению с длиной ребер тетраэдров и станут в τ^4 раз больше длины валентной связи и в τ^2 раз длиннее Н-связи. На последующих уровнях иерархии структур связанной воды также сохраняется “золоточисленная метрика”. В структуре *T*-кластера – самого симметричного кластера в природе (рис. 3е) как фрагмента тетраэдрически декорированного четырехмерного икосаэдра, “золоточисленная метрика” проявляется во всем. В его структуре можно выделить 12 спиралей (30/11) и шесть спиралей (40/9) с индексами их осей $\langle \tau^2 \tau 1 \rangle$ и $\langle \tau^2 10 \rangle$ в кубических координатах этого кластера. Эти спирали обладают декагональной “золоточисленной симметрией”, так как все образующие их молекулы H₂O находятся на трех и четырехзаходных винтовых осях 10₁. Централь-

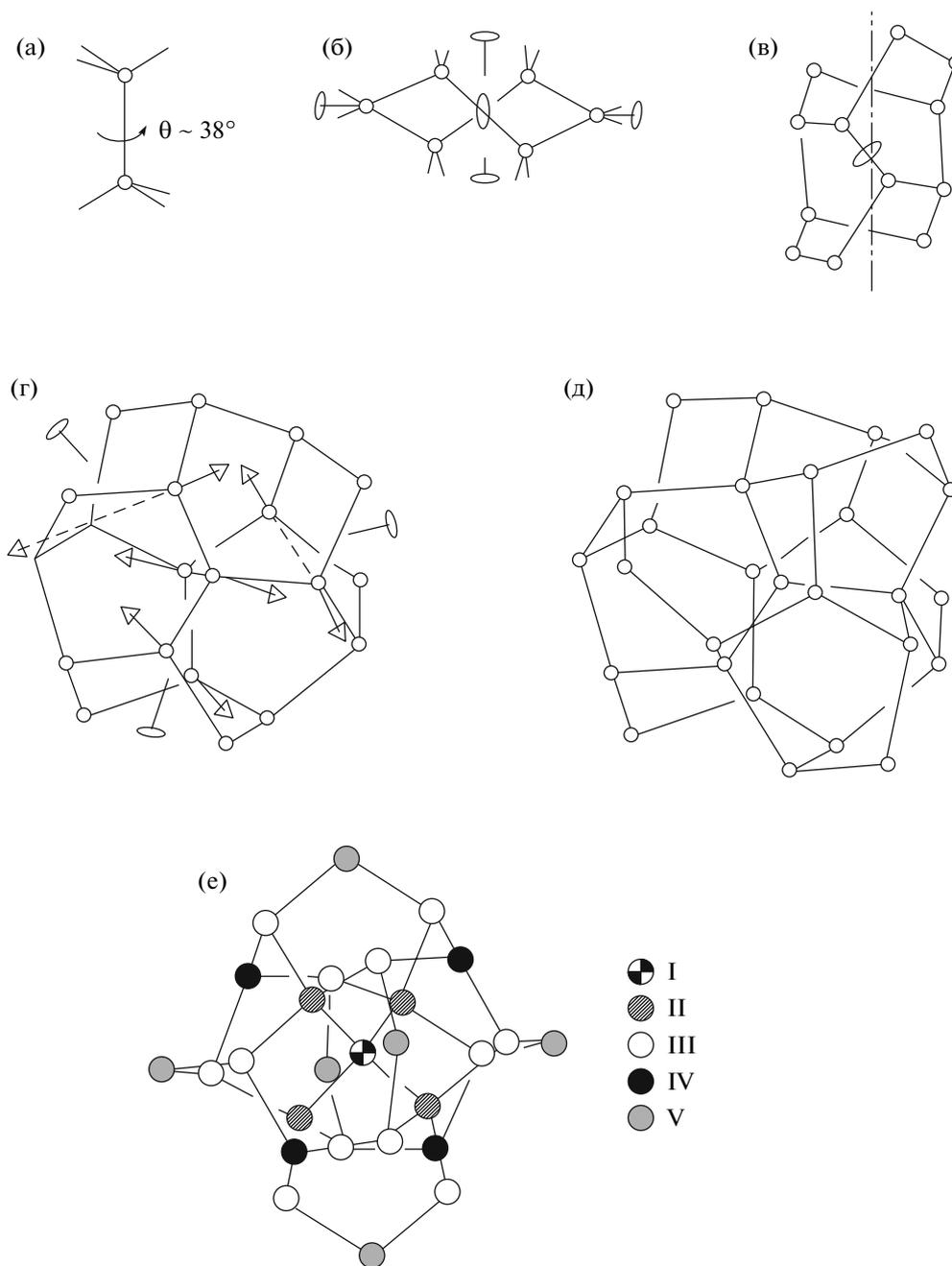


Рис. 3. Системная сборка модулей и модульных кластеров структур связанной воды: а – димер из двух тетраэдрических молекул воды; б – двумерный модуль гексацикла типа “твист-ванна” из двух димеров; в – трехмерный $H_{L,D}$ – модуль (левый, правый) из двух двумерных гексациклов, тождественный модулю, полученному преобразованием кристаллического модуля льда Ih (рис. 2л); г – комплексный “тройник” (триплет, 20 молекул H_2O) из трехмерных $H_{L,D}$ -модулей; д – комплексный “четверник” (T -кластер, 27 молекул H_2O) из триплетов в установке по оси C_3 ; е – T -кластер с центральным атомом I в установке по оси C_4 , остальные атомы T -кластера соответствуют вершинам четырех платоновых тел с треугольными гранями, соединенных тетраэдрическими связями: II – тетраэдр, III – икосаэдр, IV – дуальный тетраэдр и V – октаэдр.

ный атом T -кластера (атом I на рис. 3е) делит его четыре оси C_3 в отношении 1 : τ , а длина оси C_3 в этом кластере в τ^2 раз больше длины Н-связи. Длина ребра икосаэдра, представляющего в T -кластере вторую координационную сферу (атомы III на рис. 3е), равна длине Н-связи, умноженной

на τ , а расстояния между вершинами двух противоположных ребер икосаэдра в τ^2 раз больше длины Н-связи. Вершины икосаэдрической координационной сферы T -кластера, “вписанной” в четвертую октаэдрическую координационную сферу (атомы V на рис. 3е), делят ребра октаэдра в отношении 1 : τ .

Отношение длины ребер октаэдра в последней координационной сфере (атомы V) T -кластера к длине Н-связи равно τ^2 , а отношение расстояний до вершин икосаэдра (вторая координационная сфера, атомы III) и большого тетраэдра (атомы IV) к длине Н-связи равно τ (рис. 3е). Через “золоточисленную метрику” можно выразить векторы r_n ($n = 1 \dots 4$) в сплетениях групп симметрии T -кластера. Напомним, что T -кластер является фрактальным аналогом тетраэдрического атома в иерархических самоподобных структурах с масштабом подобия $M_j^i = (3j\tau + 1)^i$, поэтому на всех последующих уровнях иерархической самоорганизации системообразующих структур воды “золоточисленная метрика” сохраняется и проявляется в номогенетическом морфогенезе иерархических биосистем [28].

Принцип “узнавания” в сплетениях групп симметрии реализуется группой пересечения групп симметрии частей (P) и целого (A) систем. Принцип “все или ничего”, отражающий однозначность системной самоорганизации, проявляется в однозначности структуры и симметрии сплетения групп как произведения группы пересечения G и орбитальной группы L при заданных структурах частей, группах пересечения и векторах g .

РАЗНООБРАЗИЕ И “НЕАДДИТИВНОСТЬ” ДИСКОНТИНУАЛЬНЫХ ИЕРАРХИЧЕСКИХ МОДУЛЬНЫХ СТРУКТУР СВЯЗАННОЙ ВОДЫ

Значение основополагающего в биологии закона неаддитивности четко сформулировал А. Сент Дьерди. “Это важнейшее уравнение биохимии ($1 + 1 > 2$) справедливо для всех объектов от самых простых до самых сложных. Если живая природа отличается по своим свойствам от неживой, то не в том, что она подчиняется другим законам, а в том, что в живой природе “объединение” по закону ($1 + 1 > 2$) заходит значительно дальше, чем в неживой” [29]. В континуальных и равновесных кристаллических структурах выполняется закон аддитивности, в соответствии с которым по мере роста кристалла изменяется только его объем, а не структура, так как элементарные ячейки решетки могут транслироваться только линейно в пространстве и только в направлениях их ребер. В модульных структурах, формально образованных универсальными структурными единицами – H -модулями и их кластерами (триплетами или T -кластерами), возможно несколько алгоритмов их соединения между собой по различным группам пересечения ($P_r \cap A = G$), но при условии, если эти структуры дисконтинуальные. В результате в детерминированных структурах каждый алгоритм соединения модулей между собой соответствует новой структуре со своей мет-

рикой и “морфологией”, обычно нелинейной (спирали, скрученные ленты, кольца) [11] и фрактально самоподобной [18, 22]. На каждом уровне иерархического соединения модулей могут возникнуть новые возможные варианты сплетений групп, определяющих новые свойства и строение, которых не было в исходных частях системы. Далее эти структуры становятся частями на последующих уровнях и создаются новые возможности для эволюции системных структур на последующих уровнях, создавая разнообразие детерминированных новых или самоподобных фрактальных структур.

Кроме того, разнообразие структур может быть достигнуто за счет использования в сплетениях с одинаковой симметрией различных векторов g . Системное (неаддитивное) эволюционное развитие можно показать на примере образования самоподобных фрактальных структур из универсального T -кластера (рис. 3д, 3е), который можно образовать как из H -модуля (рис. 3в), так и из L -триплетов (рис. 3г). Далее из T -кластеров можно образовать одномерную структуру кристаллического стержня с симметрией $G_1^3 - p6_322$ [18] (рис. 4а). Этот кристаллический стержень можно представить в виде трехрядной спирали (рис. 4а) из спиралей (30/11) (рис. 4г), образованных из неевклидовых H -модулей (рис. 3в). Из фрагментов $p6_322$ стержня длиной, соответствующей $1/3$, $2/3$ и полному периоду “ c ” этой спирали, можно образовать фрактальные кластерно-стержневые структуры, подобные как T -кластеру (рис. 4в), так и всем его частям на различных уровнях образования его структуры (L -триплет (рис. 3г), H -модуль (рис. 3в), “твист-ванна” (рис. 3б)) с масштабами подобия $M_j^i = (3j\tau + 1)^i$, где $j = 1; 2; 3$ для “ $c/3$ ”, “ $2c/3$ ” и “ c ” соответственно [18]. Таким образом, если T -кластер является аналогом тетраэдрического атома во фрактальной структуре T_j^i -кластера, то сам стержень соответствует в ней тетраэдрической связи. На последующих уровнях ($i = 1, 2, \dots, \infty$) каждая фрактальная структура T_j^i -кластера i -уровня собирается из фрагментов стержней $[T_j^{i-1}]_\infty$ (масштаб подобия T_j^i -кластера равен $M_j^i = (3j\tau + 1)^i$). Фрактальные размерности тетраэдрических структур могут быть следующие: $d_{F_1} = 2.28$, $d_{F_{II}} = 2.04$ и $d_{F_{III}} = 1.87$ [18].

Вода является единственно возможным простым по составу веществом, молекулы которого обладают в твердом и жидком состояниях четырьмя тетраэдрическими слабыми Н-связями, и для построения структуры связанной воды достаточно знать только положения атомов О, а атомы Н находятся на Н-связях, соединяющих атомы О. Фрактальный аналог I порядка спирали воды (30/11) может взаимодействовать через соразмер-

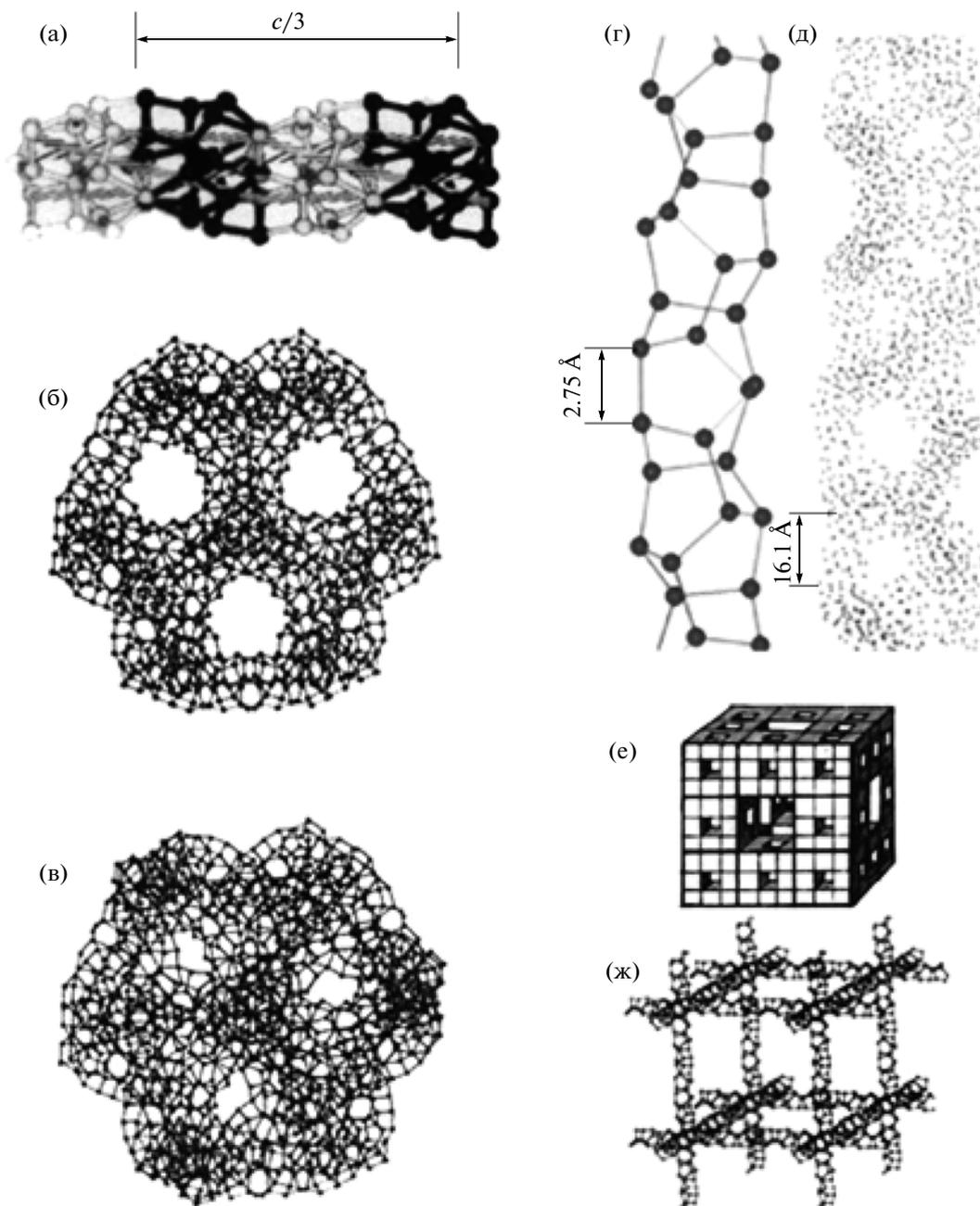


Рис. 4. Системообразующая структура связанной воды из унитарных модулей: а – кристаллический стержень $G_1^3 - p6_322$ в виде трехпрядной спирали из спиралей (30/11) из T -кластеров, выделенных графически; б – структура фрактала L_1^1 , подобного триплету (рис. 3 г) с глобальной симметрией D_3 , с масштабом подобия $M_1^1 = (3 \times \tau + 1) = 5.85$ и фрактальной размерностью 2.28; в – структура фрактала T_1^1 , подобного T -кластеру (рис. 3д) с глобальной симметрией $T-23$ с тем же масштабом подобия и фрактальной размерностью; г – спираль (30/11) из H -модулей с длиной H -связи 2.75 Å, образованная их трансляцией с поворотом на $\sim 36^\circ$; д – фрактальная структура, подобная структуре спирали (30/11) с длиной стержней, подобных H -связям (2.75 Å), равной $(27/5) \times 3 = 16.2$ Å; е – фрактальная решетка Мандельброта, где минимальная элементарная ячейка соответствует ячейке решетки на рис. 4ж; ж – дисконтинуальная (фрактальная) решетка, образованная спиральями (30/11) и T -кластерами с периодами, равными $a_n = 10\tau(m + n\tau^{-2})$ Å и углами пересечения спиралей (30/11) в узлах решетки 60° , $\sim 72^\circ$ и $\sim 90^\circ$.

ные с ней Н-связи с доменами из трех витков α -спиралей пептидов². Во фрактале длина стержня, соответствующая длине Н-связи (2.75 Å), равна 16.18 Å, что почти равно длине трех витков α -спиралей пептидов (18/5) с периодом 27 Å, т.е. (27/5) \times 3 = 16.2 Å. Это подтверждается экспериментальными данными изучения структуры клатрина в виде полого полиэдра $5^{12}6^8$ с ребрами, декорированными пептидами [30]. Многообразии трехмерных структур из спиралей (30/11) и T -кластеров представляют “фрактальные” дисконтинуальные решетки, определяющие образование упорядоченных структур с периодичностью метрики биокристаллов и коллоидных кристаллов по формуле $a = 10\tau(m + n\tau^{-2})$, где m и n – целые числа [18].

Системообразующие структуры воды, стабилизированные системой Н-связей с соразмерными с ними структурами органических составляющих, могут образовывать наблюдаемые в самоорганизации молекулярных биосистем промежуточные, предельно гидратированные структуры интермедиатов, в которых структуры воды могут выполнять роль “строительных лесов”. По-видимому, затем в уже сложившейся глобуле структуры воды частично и обратимо разрушаются, снижая энергию в системе “белок – вода”. С этим, возможно, связано функционирование глобул белков как ферментов [31]. Архитектура структуры интермедиата сохраняется в нативной форме глобулы за счет возможности взаимодействия аминокислотных остатков в уже сложившейся структуре глобулы при частичном разрушении “строительных лесов”, образованных структурами воды. Возникает вопрос: Кто является “архитектором” в номогенетической самоорганизации биосистем? В случае самоорганизации пространственной структуры глобул белков им, несомненно, является генетический код. Он кодирует длину и последовательность жестких элементов вторичной структуры, соразмерных с основным элементом структуры воды – спиралью (30/11). Таким образом, опосредованно генетический код косвенным образом определяет “внутренние параметры” (длина псевдопериода $a_{(n)}$, угол скручивания $\alpha_{(n)}$ и угол пересечения спиралей в T -кластерах) структур воды в их стабильной конструкции “строительных лесов” интермедиатов, образованных спиралью (30/11) и T -кластерами и определяющих “архитектуру” структуры нативной глобулы. В глобуле или в образующих ее доменах содержится не более шести–семи элементов вторичной структуры бел-

ков. Следует напомнить, что существует всего девять типов доменов больших глобул [32].

Эволюция первичной структуры пептидных цепей направлена таким образом, чтобы взаимодействия их аминокислотных остатков сохраняли бы в нативной форме белка структуру интермедиата после частичного разрушения структур воды (“строительных лесов”).

ДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ ВОДЫ И ЕГО ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА

П. Лаплас рассматривал поверхностный слой (ПС) жидкости как тонкую сплошную пленку, обладающую упругими свойствами твердого тела [33]. Были предприняты неоднократные попытки изучить дифракционными методами кристаллическое или упорядоченное квазикристаллическое строение ПС жидких металлов и концентрированной серной кислоты [34]. Мгновенное образование ПС жидкостей, постоянство значений определяемого им поверхностного натяжения, возможность образования на нем нанокристаллов некоторых неорганических веществ со стороны водного субстрата и ряд других фактов позволили сделать вывод, что структура ПС воды представляет собой связную упорядоченную пленку твердого тела. Модульный дизайн – основной метод модульного системного обобщения кристаллографии – позволяет построить связанную структуру ПС воды из одного типа выделенных модулей (рис. 3в–3д).

В [35] подробно разобраны все вопросы, касающиеся моделирования структуры ПС воды, ее динамических свойств и атомно-молекулярного механизма переходов в ней при образовании на ней монослоя Ленгмюра. Самоорганизация ПС воды происходит путем присоединения димеров к выступам твист-гексациклов, но при моделировании структур приходится пользоваться модулями, так как при переходе к кластерному строению из модулей, а затем к соединению модульных кластеров между собой и далее к следующим иерархическим уровням внутренние координаты атомов несколько изменяются.

Триплеты из 20 молекул H_2O (рис. 3в) можно объединить между собой по общим инвариантным ($t-h$)-гексациклам, выделенным на рис. 5а, в связанную двумерную дисконтинуальную кристаллическую структуру (G_2^3-P622 , $a = 10.2$ Å при длине Н-связи, равной 2.75 Å) (рис. 5а, 5б), но вследствие неизбежно возникающих напряжений при соединении кластеров из неевклидовых триплетов координаты эквивалентных атомов будут несколько менять свои значения и поэтому для этого типа кристаллов невозможно воспользоваться симметричным размножением координат точек. На рис. 5г показан разрез такого слоя тол-

² В соразмерности структур спиралей воды (30/11) и α -спиралей белка легко убедиться, разрезав обе спирали параллельно их осям и наложив их друг на друга наружными сторонами. При этом обнаруживается узкая полоска совпадающих узлов гидрофильных групп –СО и –NH основной цепи α -спирали и свободных Н-связей спирали (30/11). Угол между осями спиралей составляет около 7°.

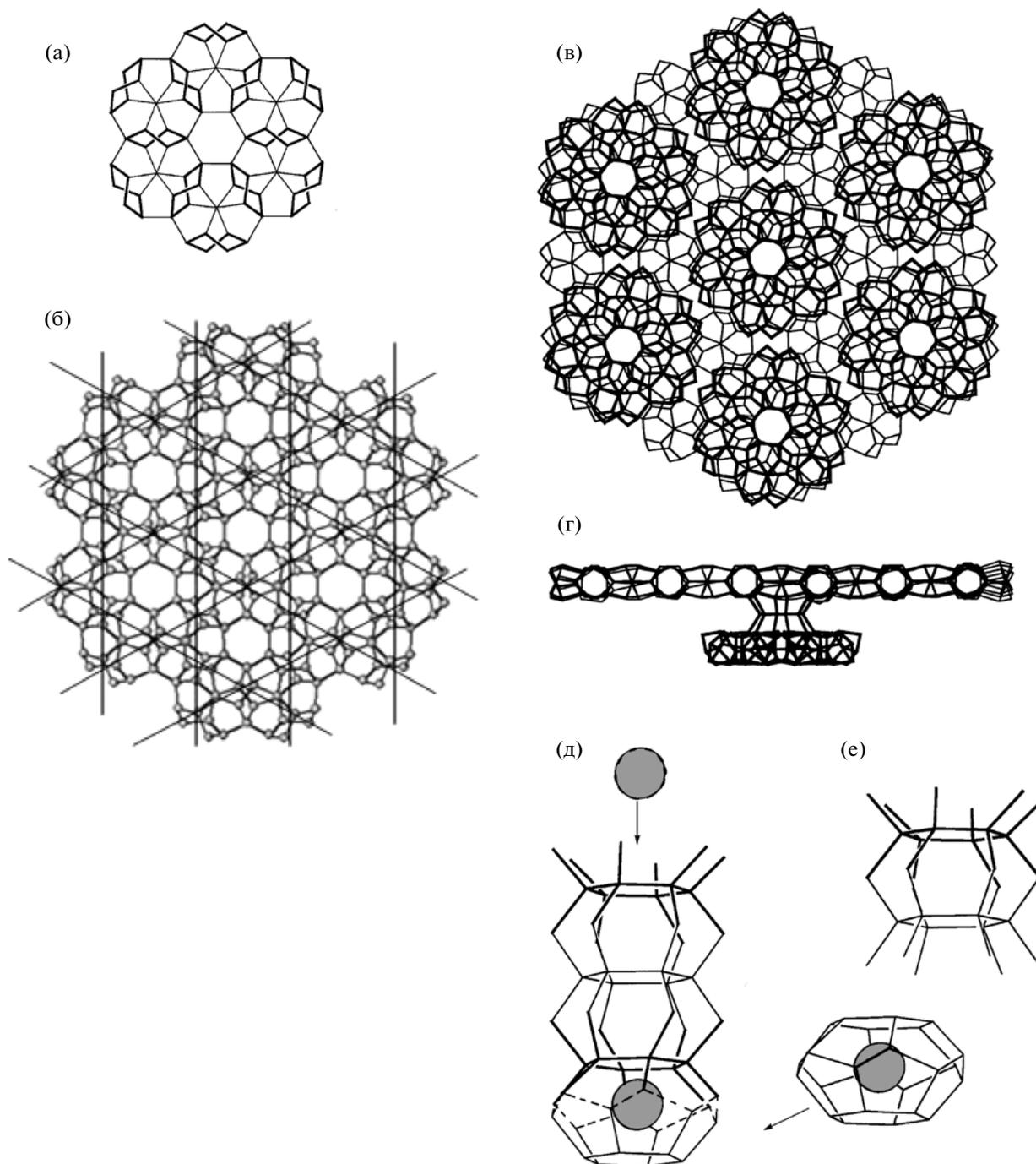


Рис. 5. Гексагональный кластер из шести триплетов, соединенных по смежным твист-ваннам с гексагональным каналом в центре (а); двумерный кристаллический аппроксимант ПС воды с показанной прямыми линиями сеткой-кагоме из осей каналов спиралей (30/11) (б); гексагональные кластеры второго слоя (жирные линии), повернутые на $\sim 30^\circ$ относительно первого слоя (в); поперечный разрез первого слоя (вид вдоль одного из трех направлений осей каналов) с присоединенным к нему через плоский гексагон гексагональным кластером второго слоя (г); образование гексагональных каналов в направлении, перпендикулярном слою из триплетов и возможность молекулам газа проникать из воздуха в объем воды (д); растворение этих молекул в клатратной форме в виде полиэдров $5^{12}6^2$ (е).

щиной $\sim 5 \text{ \AA}$, состоящий из периодически повторяющихся каналов спиралей 30/11, подкрученных и потому соответствующих формуле $8/3$. Спирали компланарны ПС воды, а их оси, ука-

занные на рис. 5б прямыми линиями, образуют гексагональную сетку-кагоме.

В сетке свободных Н-связей в ПС воды (рис. 6а) можно выделить гексагоны, вершины

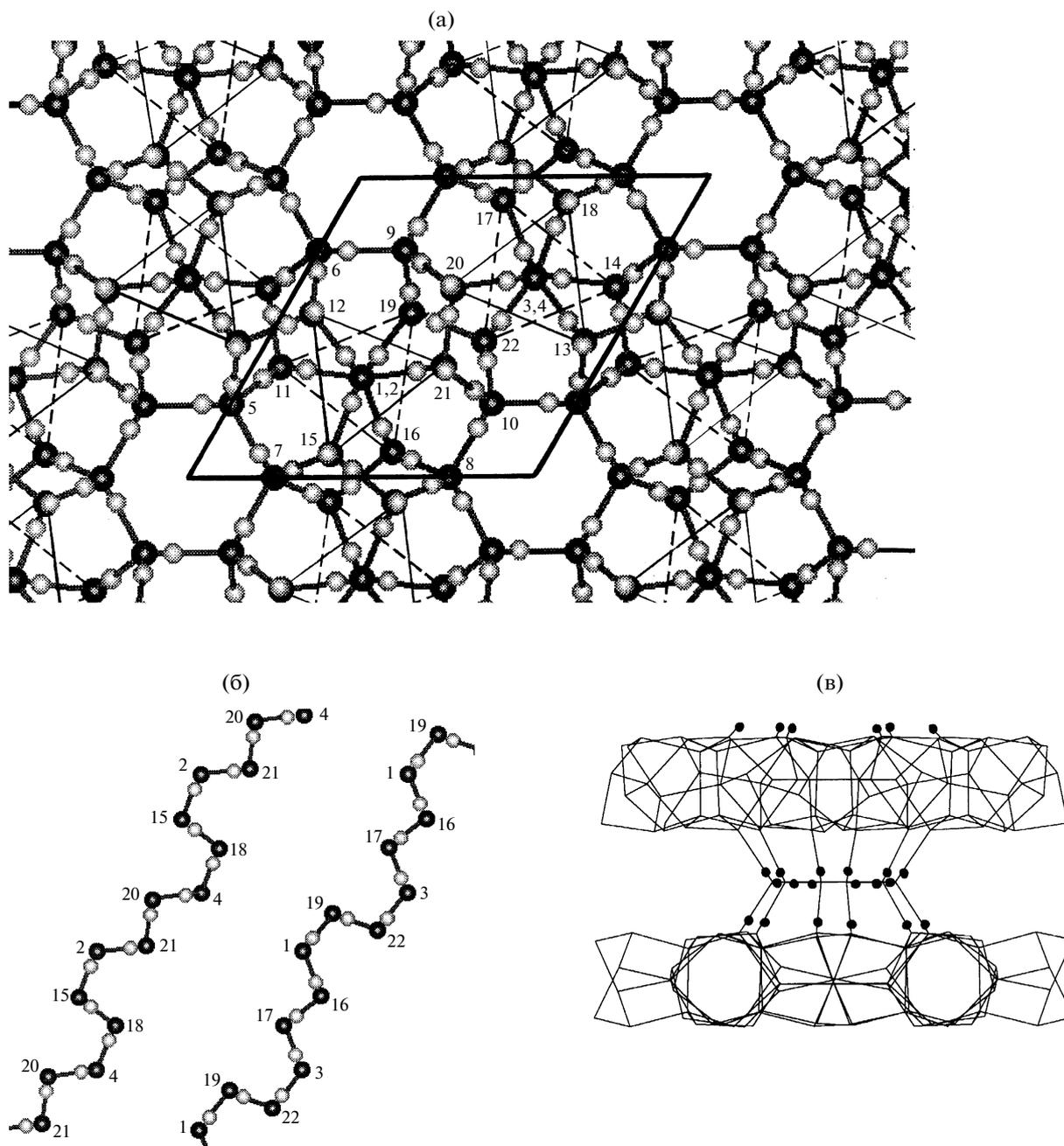


Рис. 6. Протонная упорядоченность в структуре ПС воды: а – элементарная ячейка структуры кристаллического аппроксиманта ПС воды с возможным упорядоченным расположением атомов Н в ней; б – цепочки давидовских солитонов на обеих сторонах ПС, нумерация атомов О соответствует рис. 5а; в – возникновение двойного электрического слоя в структуре ПС воды при соответствующем упорядочении атомов Н.

которых также охватывают все молекулы H_2O со свободными Н-связями. По этим гексагонам возможен только один тип соединения слоев из триплетов через промежуточные плоские гексациклы, в результате чего происходит поворот слоев друг относительно друга по оси канала из плоских гексациклов на $\sim 30^\circ$ (рис. 5в, 5г). Вследствие этого по каждому второму гексагональному каналу первого слоя из триплетов можно присоединить

не целый слой, подобный первому, а только кластеры из шести триплетов, изображенные на рис. 5а. Эти кластеры не только повернуты, но между ними имеются зазоры, не позволяющие им образовать общий слой, подобный первому, по общим ($t-h$)-гексациклам (рис. 5в). Такие гексагональные каналы проницаемы для некрупных ионов и молекул газов воздуха и H_2O (рис. 5д), а их структура объясняет механизм образования

замкнутой оболочки из молекул H_2O вокруг каждой молекулы растворенного газа (рис. 5е). Эта оболочка необходима для предотвращения объединения молекул газа в микропузырьки и последующего удаления их из воды. Механизм растворения газов по данным каналам показан на рис. 5д, 5е.

В результате такого строения ПС воды имеет место кристаллическая дисконтинуальная структура общего слоя триплетов с несвязанными в целом выступами гексагональных каналов. Подобное строение ПС жидкостей предвидел Дж. Бернал [36]: “Я подозреваю, что ПС жидкостей оказывается практически кристаллическим и притом на достаточную глубину ...”

В ПС воды возникает двойной электрический слой с высокой электрической проводимостью и проницаемостью для ионов (рис. 6в). Высокая проводимость ПС воды при его диэлектрической поляризации объясняется возникновением в его двумерной структуре двух типов непрерывных цепочек солитонов (...О–Н...О–Н...О–Н) и (Н–О...Н–О...Н–О...) (рис. 6а, 6б) [37]. На рис. 6а выделена элементарная ячейка структуры ПС воды, а тонкими сплошными и пунктирными линиями выделены молекулы H_2O со свободными Н-связями на верхней и нижней стороне слоя.

При попадании воды на гидрофобную поверхность возможен механизм кооперативного превращения гидрофильной внешней поверхности ПС воды в гидрофобную, для чего необходимо устранить на ней все свободные Н-связи. Это достигается присоединением к триплетам дополнительных молекул H_2O для превращения их в T -кластеры, у которых в слое остается по одной свободной Н-связи. Затем эта свободная Н-связь устраняется с поверхности ПС воды “переворачиванием” ее внутрь T -кластера [35].

Смачиваемость ПС воды поверхностей различных веществ определяется взаимодействием свободных Н-связей с соразмерными с ней гидрофильными группами структуры смачиваемой поверхности. Кооперативные перестройки структуры ПС воды под влиянием сжатия в монослоях Ленгмюра и при взаимодействии с гидрофильными участками “реагирующих” с ними молекул удобнее всего наблюдать на изотермах сжатия, так как появляется возможность сравнения экспериментально наблюдаемых площадей, приходящихся на одну молекулу ПАВ на каждом ее изломе, с теоретическими значениями. Последовательность изменений структуры ПС воды от аппроксиманта до минимального значения периода гексагональной решетки (рис. 7а–7д) сохраняет связанность и важнейший структурный инвариант в виде гексагональной решетки. Зная периоды решеток этих разновидностей структуры ПС воды и число взаимодействующих с ними мо-

лекул ПАВ, можно определить площадь, приходящуюся на одну молекулу в слое. Другой важнейшей характерной особенностью являются три молекулы ПАВ, приходящиеся на ячейку гексагональной решетки, начиная от аппроксиманта ($a = 10.2 \text{ \AA}$, $N = 3$, $30 \text{ \AA}^2/\text{мол. ПАВ}$), затем сетчатой ($a = 9.7 \text{ \AA}$, $N = 3$, $27.16 \text{ \AA}^2/\text{мол. ПАВ}$), слюдоподобной ($a = 8.9 \text{ \AA}$, $N = 3$, $22.86 \text{ \AA}^2/\text{мол. ПАВ}$) и, наконец, предельной деформируемой фибриллярной структурой с гексагональной сеткой свободных Н-связей ($a = 4.45 \text{ \AA}$, $N = 1$, $17.15 \text{ \AA}^2/\text{мол. ПАВ}$)³. Рассчитанные площади на молекулу ПАВ хорошо совпадают с экспериментальными данными [35]. Интересно отметить, что молекула ПАВ в монослое Ленгмюра не изменяет своих первоначальных позиций, включая момент достижения максимального поджатия слоя. Возможное положение молекул ПАВ на слое отмечено на рис. 7а–7г вершинами треугольников.

На основании этой модели ПС воды можно построить модели морфологических паттернов в виде цилиндрических и сферических мицелл, системообразующих фрактальных структур капсул вирусов и основ для создания цилиндрических кристаллов белков и различных видов пленок на основе сетки-кагоме в цитоплазматической системе [38], а также бислоиные мембраны и везикулы. В случае ПС воды с гексагональной решеткой замкнутые поверхности с положительной и отрицательной кривизной образуются путем введения в этот слой дисклинаций величиной $\pm 60^\circ$.

ВОЗНИКНОВЕНИЕ ЖИЗНИ НА ЗЕМЛЕ НА ПОВЕРХНОСТИ ОКЕАНА

Вода является стабильным и конечным продуктом предыдущей стадии эволюции на Земле, образование которого завершает геохимическую стадию образования ее литосферы при достижении параметров температуры и давления, соответствующих существованию жидкой воды на поверхности Земли. Структуры связанной воды, возникающие на границах раздела с другими твердыми и жидкими фазами или с поверхностью отдельных крупных структурированных молекул и их регулярных объединений, являются следствием этих контактов. Они имеют определенную структуру, принадлежащую в зависимости от смачиваемости к детерминированной последовательности структур ПС воды, начиная от аппроксимантной и кончая фибриллярной. Однако аппроксимантная структура связанной воды в поверхностном слое может существовать самостоя-

³ В аппроксимантной и сетчатой структурах ПС воды молекулы ПАВ могут занять только половину позиций молекул воды со свободными Н-связями, так как расстояния между гидрофобными цепями молекул ПАВ не должно быть меньше 4.4 \AA , что соответствует длине ребра тетраэдра из молекул воды.

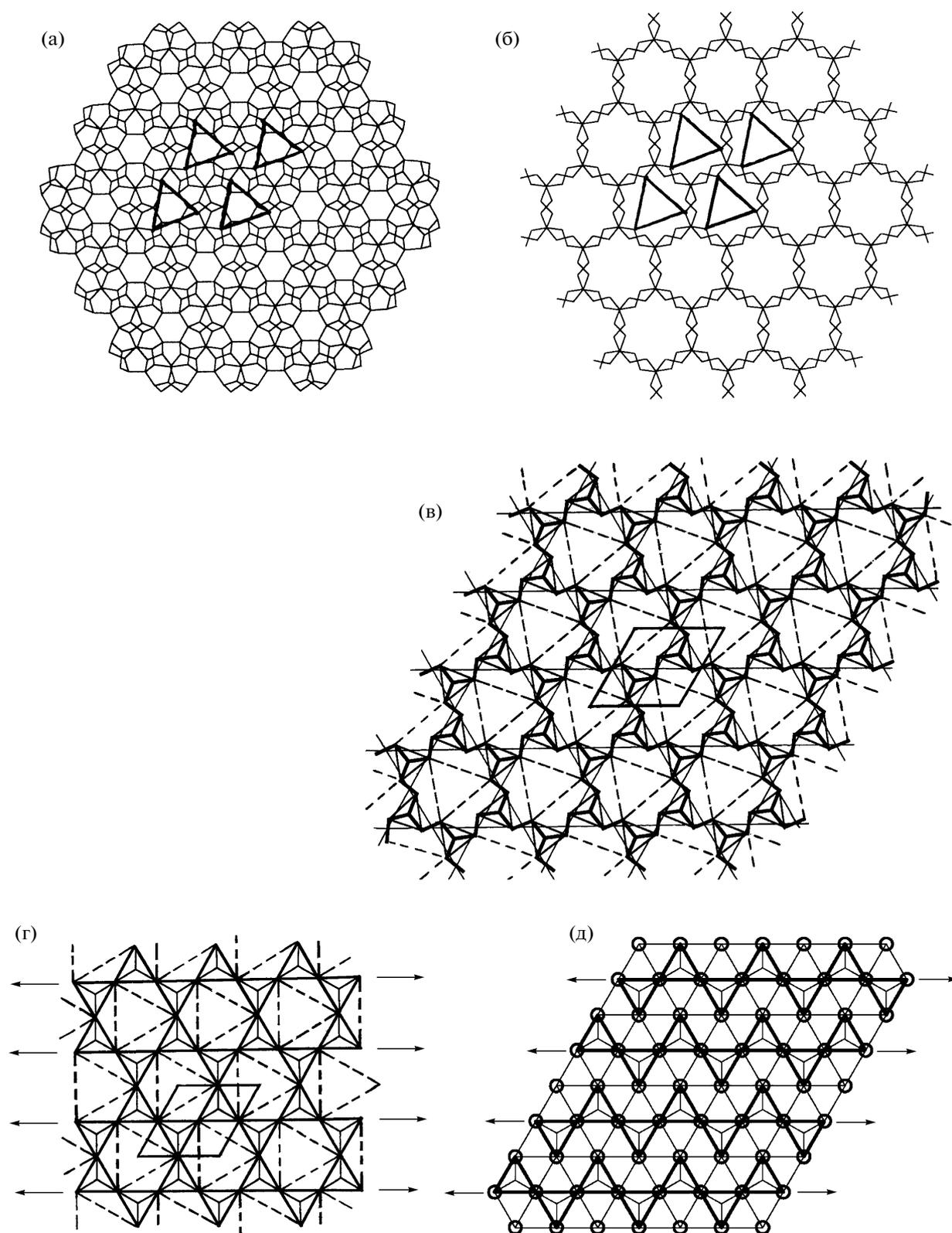


Рис. 7. Двумерная кристаллическая структура ПС воды по мере увеличения внешнего давления на монослой Ленгмюра жирных кислот при неизменном закреплении молекул ПАВ на ПС воды (в вершинах треугольников на рис. 7а–7г); а – аппроксимант (G_2^3 -P622, $a = 10.2 \text{ \AA}$, $N = 3$); б – сетчатая структура (G_2^3 -P622, $a = 9.7 \text{ \AA}$, $N = 3$); в – верхняя сторона сетчатой структуры; г – слидоподобная структура (G_2^3 -P622, $a = 8.9 \text{ \AA}$, $N = 3$); д – фибриллярная структура с гексагональной сеткой свободных Н-связей ($a = 4.45 \text{ \AA}$, $N = 1$).

тельно, так как он также приходится на границу раздела “вода–газ, пары H_2O ” и его структура не подвержена внешним воздействиям. Поэтому ПС воды является неисчерпаемым источником триплетов, которые к тому же обладают энантиморфизмом (правым или левым), возникшим под действием циркулярной поляризации солнечного света и вызванным протонной упорядоченностью в ПС воды [39].

На ПС воды могут происходить топохимические реакции полимеризации вследствие возможности иммобилизации на его поверхности отобранных по соразмерности с ним мономеров и за счет непрерывного подвода энергии извне (солнечный свет, электрические разряды в атмосфере, энергоабсорбирующие структуры ПС воды, механическая энергия волн). Образование хиральных цепей биополимеров будет сопровождаться организацией их пространственной структуры с помощью соразмерных с ними триплетных кластеров воды из ПС [35], а пространственная структура биополимеров является необходимым условием для их функционирования. Таким образом, появляется возможность одновременного развития пространственных структур ДНК, РНК и белков на основе “строительных лесов” из триплетов связанной воды, соединенных между собой спиралями (30/11). Генетический код явился результатом последующего взаимосогласованного взаимодействия в рамках имеющихся потенциальных возможностей для этих структур. Возможность концентрирования этих продуктов топохимических реакций заключается в образовании мицелл разного типа из структуры ПС воды, а затем и бислойных мембран из них и их слиянии или разделении без вытекания содержимого [35]. Глобальное распространение продуктов абиотической эволюции по поверхности океана возможно за счет ветра и волн. Следует вспомнить слова К. Поппера [40]: “Для перехода от неживой материи к живой необходима новая способность — способность решать проблемы без чьего-либо вмешательства и без наличия особой жизненной силы.”

Рассмотрим возможность недиссипативного взаимодействия энергии со структурами воды и их роль в функционировании биосистем. Под недиссипативной миграцией энергии подразумевается перемещение квантовой энергии на значительные расстояния в клетке, причем энергия квантов не рассеивается. “Для такой миграции энергии характерно еще и то, что передача энергии происходит с некоторой “целеустремленностью”, т.е. энергия может усваиваться только определенными группами атомов, служащими приемниками энергии.” [41]. Таким образом, “энергетические обмены определяют материальное изменение, а материальные изменения обуславливают энергетические обмены”. Это

приводит к “динамизации вещества” по “химической траектории изменения структуры вещества” [41]. Процессы миграции энергии могут иметь место только там, где поглощенный извне квант энергии может сохраняться в виде потенциальной энергии в виде возбужденного состояния или обладающей избытком энергии химической перегруппировки. Однако мигрирующая энергия не должна непременно поступать извне, она может образовываться и внутри данной системы вследствие химической реакции [41].

Возможным типом недиссипативного поглощения упругой энергии твердым телом могут служить неевклидовы преобразования исходных кристаллических модулей в упруго напряженные, но связанные неевклидовы модули, возникшие вследствие кооперативных преобразований и характерные для системообразующих дисконтинуальных структур связанной воды. Вполне возможно, что химическая энергия гидролиза АТФ расходуется на образование таких напряженных структур связанной воды, выполняющих роль “домкрата”, переводящего мало напряженную биомолекулу в более напряженное состояние. После выполнения заданной работы стержень из молекул воды с симметрией $р6_322$ может кооперативно перейти в стержень кристаллической структуры льда I_h , который тут же превращается в жидкую воду. Д. Грин и Р. Гольбергер по этому поводу писали [42], что “... при уменьшении количества структурированной воды в системе энергия выделяется. В ходе катализа молекула фермента может разбухать или, наоборот, становиться более компактной.”

Таким образом, учитывая роль системообразующей составляющей связанной воды в морфологии, образовании и функционировании биосистем, удалось найти подходы к решению основных задач биологии, перед которыми оказалась бессильной редуccionистская молекулярная биология, имевшая дело только с одной структурной составляющей биосистем (органической).

Дж. Бернал писал по этому поводу [3]: “Чтобы понять строение белка, надо прежде всего структурно понять нечто более общее всему живому, то, в чем возникла жизнь, я говорю о воде.”

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Теперь наметим взаимосвязь системно-структурного подхода и междисциплинарности — необходимого условия для создания мегаестествознания, без которого невозможно дальнейшее развитие науки, которая сосредоточит свое внимание на изучении субъективного мира потенциальных возможностей и их последующей реализации методами нанотехнологий и им подобными. Поэтому становится очень существенной роль методов дизайна — единственного пока способа создавать модели потенциально возможных

структур. Ж.-М. Лен назвал дизайн основной идеей будущих технологий [43].

Переход к атомно-молекулярному моделированию и анализу структурных механизмов на основе создаваемых динамических моделей стал возможным благодаря достижениям науки на предыдущем этапе – изучению строения кристаллических тел и строения различных орбит электронов в связях в равновесных структурах и их возможных искажений. Таким образом, все естествознание может сосредоточиться на изучении моделей, построенных с учетом всей совокупности структурных составляющих на атомно-молекулярном уровне и, главное, перейти к изучению механизмов процессов в них, что позволит расширить применение атомно-молекулярного анализа к последующим уровням системы. С учетом роли симметрии и методов дискретной геометрии в решении этих проблем становится ясной роль обобщенной кристаллографии в качестве системообразующего ядра для дальнейшего развития междисциплинарного мегаестествознания. Прав был А. Эддингтон, который писал [44], что “идеал, к которому мы стремимся, заключается в объединении всех наших знаний о физическом мире в единую науку, положения которой могут быть выражены в терминах геометрических или квазигеометрических концепций.” Правильность этого взгляда подтверждает все нарастающая геометризация наук о материи.

Автор выражает искреннюю благодарность Е.А. Желиговской за помощь и плодотворное участие в работе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бернал Дж.Д., Карлайл С.Х. // Кристаллография. 1968. Т. 13. № 5. С. 927.
2. Bulienkov N.A., Phan Van An. Proc. of 48th Intern. SAMPE Symposium 2003. Long Beach. CA USA. Book 1. P. 1191.
3. Бернал Дж.Д. Возникновение жизни. М.: Мир, 1966. 356 с.
4. Сондерс П. // Знание – сила. 1989. № 5. С. 33.
5. Пуанкаре А. О науке. М.: Наука, 1990. 735 с.
6. Вайнштейн Б.К. Современная кристаллография. М.: Наука, 1979. Т. 2. 359 с.
7. Любичев А.А. // Знание – сила. 1973. № 5. С. 26.
8. Хайдеггер М. Что такое метафизика? М.: Академический проект, 2007. 303 с.
9. Маккей А.Л. // Структурные исследования кристаллов. М.: Наука, 1996. С. 430.
10. Бульенков Н.А. // Докл. АН СССР. 1985. Т. 284. № 6. С. 1392.
11. Бульенков Н.А. // Кристаллография. 1988. Т. 33. № 2. С. 422.
12. Белов Н.В. Структура ионных кристаллов и металлических фаз. М.-Л.: Изд-во АН СССР, 1947. 236 с.
13. Федоров Е.С. Структура и симметрия кристаллов. М.-Л.: Изд-во АН СССР, 1949. 630 с.
14. O'Keeffe M., Eddaoudi M., Li H. et al. // J. Solid State Chem. 2000. V. 152. № 1. P. 3.
15. Энгельгардт В.А. Познание явлений жизни. М.: Наука, 1985. 303 с.
16. Бауэр Э.С. Теоретическая биология. М.; Ижевск: Динамика, 2001. 279 с.
17. Швелев И.Ш., Марутаев М.А., Шмелев И.П. Золотое сечение М.: Стройиздат, 1990. 342 с.
18. Bulienkov N.A. Fields Inst. Monographs. V. 10. Quasicrystals and Discrete Geometry / Ed. Patera J. Providence, Rhode Island: Am. Math.Soc., 1998. P. 67.
19. Бернал Дж.Д. // Кристаллография. 1962. Т. 7. № 4. С. 507.
20. Yasushi Ishii // Techn. Rep. ISSP. A. 1987. № 1881. P. 1.
21. Гончаров А.Ф. // УФН. 1987. Т. 152. № 2. С. 317.
22. Кокстер Г.С.М. Введение в геометрию. М.: Наука, 1966. 648 с.
23. Бульенков Н.А. // Кристаллография. 1990. Т. 35. № 1. С. 147.
24. Bulienkov N.A., Phan Van An. // CD Proc. of 12th Intern. Confer. on Composite Mater. 1999. Paper 658. P. 1.
25. Желиговская Е.А., Бульенков Н.А. // Кристаллография. 2008. Т. 53. № 6. С. 1126.
26. Осипьян Ю.А., Негрий В.Д., Бульенков Н.А. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1987. Т. 51. № 9. С. 1458.
27. Маккей А.Л. // Кристаллография. 1981. Т. 26. № 5. С. 910.
28. Бульенков Н.А. // Биофизика. 2005. Т. 50. № 5. С. 934.
29. Сент-Дьердьи А. Биоэлектроника М.: Мир, 1971. 79 с.
30. Fotin A., Cheng Y., Sliz P. et al. // Nature. 2004. V. 432. P. 573.
31. Сент-Дьердьи А. Биоэнергетика. М.: Мир, 1960. 138 с.
32. Orengo C.A., Johns D.T., Thornton J.M. // Nature. 1994. V. 372. P. 273.
33. Лаплас П.С. Изложение системы мира. М.: Наука, 1982. 368 с.
34. Талмуд Д.Л., Бреслер С.Е. Поверхностные явления. М.; Л.: ГТТИ, 1934. 131 с.
35. Бульенков Н.А., Желиговская Е.А. // Журн. физ. химии. 2006. Т. 80. № 10. С. 1784.
36. Бернал Дж.Д. // Кристаллография. 1962. Т. 7. № 4. С. 50.
37. Давыдов А.С. Солитоны в биоэнергетике. Киев: Наук. думка, 1986. 156 с.
38. Бульенков Н.А., Желиговская Е.А. // Тез. V Всерос. каргинской конф. “Полимеры-2010”, Москва, 21–25 июня 2010 г. С. 206.
39. Бульенков Н.А. // Биофизика. 1991. Т. 36. № 2. С. 181.
40. Понпер К.Р. Объективное знание. Эволюционный подход. М.: УРСС, 2002. 378 с.
41. Башляр Г. Новый рационализм. Биробиджан: Издательский Проект “Триумф”, 2000. 374 с.
42. Грин Д., Гольдбергер Р. Молекулярные аспекты жизни М.: Мир, 1968. 400 с.
43. Лен Ж.-М. Супрамолекулярная химия. Концепции и перспективы. Новосибирск: Наука. Сиб. отд-ние, 1998. 333 с.
44. Томпсон М. Философия жизни. М.: Торговый дом “Гранд”, 2003. 292 с.