

РОССИЙСКАЯ  
АКАДЕМИЯ  
НАУК



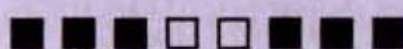
ИНСТИТУТ  
ФИЛОСОФИИ



Москва



# МЕТОДОЛОГИЯ НАУКИ: СТАТУС И ПРОГРАММЫ



Российская Академия Наук  
Институт философии

**МЕТОДОЛОГИЯ НАУКИ:  
СТАТУС И ПРОГРАММЫ**

Москва  
2005

## Содержание

Предисловие .....	3
-------------------	---

### РАЗДЕЛ I. МЕТОДОЛОГИЧЕСКИЕ ПРОГРАММЫ

<i>Г. Гутнер</i> Трансцендентализм и понимание субъективности .....	8
<i>В.С. Степин</i> Становление философии науки: первый и второй позитивизм .....	41
<i>А.П. Огурцов</i> Эмпиристская и трансценденталистская интерпретации причинности: М.Шлик и Э.Кассирер (сравнительный анализ) .....	70
<i>В.М. Розин</i> Эволюция представлений Г.П.Щедровицкого о науке .....	94
<i>В.В. Никитаев</i> Философия и власть: Георгий Щедровицкий (последний проект модерна) .....	125

### РАЗДЕЛ II. СТАТУС И ПРОБЛЕМЫ

<i>К.А. Павлов</i> Понимание как процедура логики научного открытия .....	177
<i>И.П. Меркулов</i> Эволюция когнитивных способностей .....	190
<i>А.Б. Бахур</i> Современные представления о сущности и содержании инженерной деятельности .....	209
<i>Н.А. Бульенков</i> Нанотехнологии и смена типов рациональности .....	223
<i>С.В. Илларионов</i> Из лекций по теории познания и философии науки .....	255

### ПРИЛОЖЕНИЕ

<i>Р.Беляетдинов</i> Концепт как единство слова и вещи у Иоанна Солберийского в «Металогике» .....	272
<i>Иоани Солберийский «Металогик» (пер. фрагментов и вступление Р.Беляетдинова) .....</i>	282

УДК 165  
ББК 15.13  
М 54

**Ответственные редакторы**

доктор филос. наук *А.П.Огурцов*

доктор филос. наук *В.М.Розин*

**Рецензенты**

доктор филос. наук *Л.Б.Баженов*

доктор филос. наук *В.Г.Марача*

М 54      **Методология науки: статус и программы.** — М., 2005. — 295 с.

Сборник — результат работы семинара Центра методологии и этики науки в 2002–2004 гг. В нем продолжается изучение различных программ и проблем философии науки, которое начато в сборнике «Методология науки: проблемы и история» (М., ИФ РАН, 2003). Наряду с анализом классических методологических программ (первого и второго позитивизма — В.С.Степин, трансцендентализма — Г.Б.Гутнер, логического эмпиризма и трансцендентализма в их понимании причинности — А.П.Огурцов) раскрыто содержание программы методологии, развитой известным отечественным философом Г.П.Щедровицким. Специально обсуждаются новые тенденции в методологии науки. Рассмотрены такие проблемы методологии науки, как эволюция когнитивных способностей (И.П.Меркулов), инженерная деятельность (А.Б.Бахур), нанотехнология и изменения в типах рациональности (Н.А.Бульенков), метод мысленного эксперимента (С.В.Илларионов). В приложении, завершающем сборник, печатаются перевод фрагментов из трактата Иоанна Солсберийского «Металогик». Сборник представляет интерес для историков науки, философов, для всех интересующихся методологическими проблемами научного знания.

ISBN 5-9540-0026-3

© ИФ РАН, 2005

## Предисловие

Статус философии науки в последние годы радикально изменяется: оставаясь исследовательской областью, она становится решающей областью философского преподавания. Поэтому весьма остро встает вопрос о подготовке и издании различных учебных пособий по философии науки. Данный сборник, конечно, не является учебным пособием для аспирантов, изучающих философию науки, но он может использоваться для более углубленного изучения того круга проблем, который уже давно выделен в качестве содержания одной из областей философии науки — методологии науки.

Надо сказать, что и в отечественной, и в зарубежной философии нет согласия относительно того, какие темы и какие методологические программы следует выделять в качестве приоритетных для философии науки. Более того, нет консенсуса и относительно статуса методологии науки в составе философии вообще и философии науки в частности. Так в статье Роберты Ландфредини «Философия науки» выделяются три подхода в философии науки: 1) аналитически-формальный подход, связанный с логическим эмпиризмом и основанный на различии Г.Рейхенбахом контекстов открытия и обоснования; 2) историко-дескриптивный подход, развиваемый в 70-е гг. прежде всего Т.Куном и П.Фейерабендом; 3) натуралистический подход, который настаивает на том, что методы аргументации, применяемые в современном естествознании, должны быть использованы в философии науки для того, чтобы решить ее фундаментальные проблемы (бихевиоризм У.Куайна, антропология М.Хессе, неврология Черчленда)<sup>1</sup>. Всем очевидно, что подобное расчленение философских концепций науки весьма схематично и далеко от реального исторического развития философии науки. Тем более, что в другой статье этой «Энциклопедии» — в статье «Метод / Методология», написанной А.Мертенсом, анализируются представления о методах научного познания, начиная с античности и кончая К.Поппером и Р.Карнапом<sup>2</sup>.

Конечно, трактовка основных программ в философии науки зависит от того, как понимается становление науки (связывается ли ее возникновение с античной культурой или же с экспериментально-эмпирической наукой XVII–XVIII вв. и ее философским осмысле-

<sup>1</sup> Lanfredini R. Wissenschaftsphilosophie // Enzyklopädie Philosophie / Hrsg. von H.J.Sandkuller. Bd. 2. Hamburg, 1999. S. 1219–1220.

<sup>2</sup> MERTENS A. Methode / Methodologie // Enzyklopädie Philosophie. Bd. 1. Hamburg, 1999. S. 832–840.

нием). И в отечественной литературе существуют различные точки зрения на процесс генезиса науки и становления философии науки: одни находят уже в античности развитые научные программы (например, П.П.Гайденко), другие связывают возникновение науки с XVII–XVIII вв., а философию науки с Просвещением (М.К.Петров), третьи — с позитивизмом XIX в. (В.С.Степин). Конечно, можно согласиться с тем, что философия науки — исследовательская область, окончательно сложившаяся в XX веке, что, сделав научное знание темой своей рефлексии, философия сформировала различные исследовательские программы и проекты изучения науки, а в тех подходах, которые в ней были развернуты в прошлом веке, можно выявить движение от изучения структуры научного знания к анализу роста научного знания. Очевидно, что концентрация исследовательских усилий на тематизации научного знания оказывает существенное воздействие и на саму постановку проблем гносеологии — аргументы от анализа науки становятся решающими и при изучении механизмов и процедур знания как такового, более того, философская тематизация науки оказывает воздействие и на само видение проблем метафизики и на возникновение новых тенденций внутри метафизики — можно напомнить генезис, например, метафизики процесса (наиболее ярким представителем которой является А.Уайтхед).

*Лингвистический поворот в философии науки*, который характерен как для аналитических направлений, прежде всего для логического эмпиризма, так и для фундаментальной онтологии, обратившейся к неогумбольдтианству и развернувшей программу критики и метафизики, и науки, стал основанием для осмысления структуры научного знания, репрезентированного в его языке. *Поворот к анализу роста знания*, начатый К.Поппером, потребовал изменения фундаментальных оснований философского изучения научного знания: в центре внимания оказались инновационные процессы в науке — выдвижения гипотез, их элиминации путем проб и ошибок, отбор гипотез и роль процедур критики и опровержения в выборе теории и т.д. Эволюционный подход к росту научного знания повлек за собой и утверждение эволюционной теории познания, признание за ней статуса натуралистического обобщения конкретных биологических, нейро-физиологических и психолого-когнитивных исследований.

Даже если признать то, что философия науки — детище XX века, остается ряд нерешенных вопросов: как относиться к аксиоматико-дедуктивной методологии, развернутой в античной математике и при-

нятой в качестве образца в науке, начиная с XVII в. вплоть до XX в.? Как быть с аналитической программой в методологии науки XVII—XVIII вв.? Как быть с индуктивистской программой, развернутой уже в XIX в. и получившей в XX в. не только сторонников, но и критиков? Конечно, специфика научного знания вплоть до XX в. анализировалась под углом зрения гносеологического изучения общих механизмов и процедур знания. Само собой разумеется, что и язык, и методы науки рассматривались в классической философии в контексте общегносеологической тематики. Но никто не будет отрицать того, что, начиная с философии Канта, европейская мысль стала исходить из «факта науки» в своих метафизических и гносеологических построениях, что уже в просветительской философии существовали размышления и о языке науки, и о ее идеальных объектах, и ее методах. Более того, именно в методе и философы, и сами ученые усматривали критерий научности.

В предшествующем сборнике по методологии науки уже были выявлены специфические методологические программы в истории философии<sup>3</sup>. Перечислим их:

1. Аналитическая методологическая программа.
2. Индуктивистская программа от Д.С.Милля до Р.Карнапа.
3. Эмпиристский феноменализм Э.Маха и Р.Авенариуса.
4. Конвенциализм А.Пуанкаре и П.Дюэма.
5. Логический эмпиризм и становление «стандартной концепции науки».
6. Логический атомизм Б.Рассела.
7. Операционализм П.Бриджмена, Г.Динглера.
8. Феноменологический анализ тематизации и кризиса науки.
9. Философия науки в контексте неорационализма (Э.Мейерсон, Г.Башляр).
10. Критический рационализм К.Поппера и проблема роста науки.
11. Наука в контексте социологии знания (Т.Кун).
12. Методология научных исследовательских программ И.Лакатоса.
13. Конструктивизм в интерпретации науки.
14. Поворот к риторике и теории аргументации и критика методологического принуждения (П.Фейерабенд и др.).
15. Новые тенденции в историографии науки и философия науки на рубеже XX и XXI веков.

---

<sup>3</sup> Розин В.М. От панметодологии к методологии с ограниченной ответственностью // Методология науки: проблемы и история. М., 2003. С. 3–47; Огурцов А.П. История методологии науки: реальные и виртуальные трудности // Там же. С. 221–242.

Отдельного внимания заслуживает судьба методологии науки в отечественной философии. При всем идеологическо-партийном давлении и на науку, и на философию методология науки была и является наиболее развитой областью исследований и в советской, и постсоветской России. В ней сформировались различные программы — от логики науки до логики научного исследования, от анализа методологических принципов (объяснения, симметрии, соответствия и др.) до изучения методов отдельных наук, объединяемых в методологические программы. Философию науки и в СССР, и в постсоветской России всегда отличали интерес к истории науки, стремление построить методологический анализ научного знания на базе историко-научных реконструкций. Отечественной методологии науки в данном сборнике посвящены две статьи (В.М.Розина, В.В.Никитаева), в которых с разных позиций рассматривается не только идейная траектория Г.П.Щетровицкого, но и судьба созданной им методологической школы.

Конечно, выявление методологических программ во многом зависит от того, как определяется статус методологии науки в составе философии вообще и философии науки в частности. Не отождествляя философию науки с методологией науки, авторы сборника по-разному видят место методологии в составе философии науки: для одних — это ее средоточие, для других — одна из ее исследовательских областей. В философию науки помимо методологии входят *онтология и аксиология науки*: первая акцентирует внимание на тех онтологических схемах, на которых строится научное знание (от геометрических схем предьявленности пространства до картины мира), вторая обращает внимание на те ценности культуры, вне которых и без которых наука не может существовать и тем более развиваться. Помимо анализа методологических программ методология включает в предмет своей рефлексии исследование *конкретных методов* различных наук и тех *методологических принципов*, которые образуют инвариантное ядро многообразия исследовательских программ как серии теорий в рамках научной дисциплины<sup>4</sup>. Ряд новых проблем, в том числе и связанных со сменой принципов рациональности, воз-

<sup>4</sup> В этом отношении представляет несомненный интерес та программа по изучению методологических принципов физики, которая была развернута в Институте истории естествознания и техники АН СССР под руководством И.С.Алексеева, Б.М.Кедрова и Н.Ф.Овчинникова и которая нашла свое воплощение в ряде книг, посвященных принципам объяснения, простоты, соответствия, дополнительности, наблюдаемости, элементности (см. более подробно: Мамчур Е.А., Овчинников Н.Ф., Огурцов А.П. Отечественная философия науки: предварительные итоги. М., 1997).



никает благодаря тем изменениям, которые происходят в инженерной деятельности, в нанотехнологии. Этому и посвящены статьи А.Б.Бахура и Н.А.Бульenkова.

Само собой разумеется, редакторы данного сборника осознают, что изучение методологических программ и статуса методологии науки в составе философии науки, взаимоотношений методологии науки с онтологией и аксиологией науки далеко от завершения и приглашают читателей к обсуждению актуальных методологических проблем и истории науки, и современной науки.

*Редакторы*

### Нанотехнологии и смена типов рациональности

Конкретные подходы к принципиально новым проблемам, присущим нанотехнологиям, позволяют выделить необходимые кардинальные изменения в методологии науки, необходимые для решения этих проблем, и сопоставить их с изменениями, характерными для перехода от неклассической к постнеклассической парадигме, о которых в общих чертах говорят современные методологи.

Возникновение проблематики нанотехнологий в самом конце XX века отражает не только поиск путей преодоления глобального технологического, ресурсного и экологического кризисов, но и цивилизационного, заключающегося в необходимости изменения типа научной рациональности и самого характера нашей цивилизации. «Важной проблемой методологии науки является проблема изменения типа научной рациональности и смена направлений научно-технического прогресса как условие перехода к новому типу цивилизационного развития» (Стёпин В.С. // Вестн. РАН. 1997. Т. 67, № 5. С. 387–395). Если предыдущие парадигмы, включая и неклассическую, были устремлены на овладение реальностью, ограничивая себя только миром естественных явлений, то грядущая постнеклассическая парадигма ориентируется на выявление потенциальных возможностей в мире идеальной реальности, которая может быть реализована, в частности, методами нанотехнологий. Поэтому, очевидно, эту парадигму лучше именовать пропенсивной. В соответствии с вышесказанным и с известным тезисом «Математика — наука о возможных мирах» кардинально изменится роль математики в развитии теоретических основ естественных наук и технологий будущего. В связи с изменением типа рациональности произойдет изменение характера

междисциплинарных взаимосвязей математики и естественных наук. Неизбежное временное сосуществование новой и старой неклассической парадигмы отразилось в двух стратегиях развития нанотехнологий на современном начальном этапе (раздел 1). На примерах конкретных результатов конструирования (дизайна) пропенсивных детерминированных иерархических структур связанной воды — возможных матриц или «строительных лесов» для самоорганизации биологических систем показано: проявление признаков нового типа рациональности и пропенсивной (постнеклассической) парадигмы в основах и методологии дизайна этих структур и 2) изменение роли математики в развитии структурного дизайна — эффективного метода исследования в современной химии и биологии, а также в их совместном «детище» — нанотехнологии.

### **Тенденции развития нанотехнологий на современном начальном этапе**

На этом этапе научное сообщество еще не до конца осознало, что нельзя найти выход из глобального «техногенного» кризиса цивилизации, принципиально не изменив способа научного мышления, потому что все имеющиеся фундаментальные научные заделы, созданные на основе методологии классической рациональности, практически реализованы в современной технике и технологиях. По мнению Г.Башляра («Новый рационализм», 2002), наука реализовывала свои теоретические схемы в проверочных экспериментах, сверяя свои представления с реальностью. Новая наука не будет ограничиваться миром естественных явлений как единственным своим объектом, а устремится к «субъективной реальности», так называемой «вещи в себе», и «рациональная схема способна быть реализованной в классе искусственных, технически воспроизводимых феноменов». Иначе говоря, вслед за философией «как» появляется научная философия «а почему бы нет?» (Башляр Г. Новый рационализм. 2002. С. 32). Далее Г.Башляр пишет: «... по ту сторону субъекта, по эту сторону объекта современная наука базируется на проекте». «Духовная активность современной науки начинает конструировать мир по образцу разума. Научная деятельность целиком посвящена реализации рациональных ансамблей» (Там же. С. 36). Наука обучается на том, что конструирует. Цель новой науки не описывать данности, а представлять классы возможностей. Новый тип рациональности откроет путь для ускоренного развития антидогматической, рискующей науки, потребует реше-

тельной перестройки мысли и смелых поисков. В современных тенденциях развития нанотехнологий наглядно отразилось влияние сосуществующих двух типов рациональности и парадигм (неклассической, статистической и постнеклассической, пропенсивной, детерминированной), что нашло отражение в стратегиях подхода к развитию нанотехнологий.

#### *Ультраминиатюризация по принципу «сверху вниз»*

Свое видение технологии будущего сформулировал в канун 1960 г. Р.Фейнман в своей знаменитой речи «Внизу полным полно места: приглашение в новый мир физики»: «Поведение отдельных атомов подчиняется законам квантовой механики и не имеет аналогов в макроскопическом масштабе, поэтому «внизу» мы будем постоянно наблюдать новые закономерности и эффекты, предполагающие новые варианты использования. Известные нам принципы физики не запрещают создавать объекты «атом за атомом». Манипуляция атомами в принципе вполне реальна и не нарушает никаких законов природы. Практически все трудности ее реализации обусловлены лишь тем, что мы сами являемся слишком крупными и громоздкими, вследствие чего нам сложно осуществлять эти манипуляции» (Фейнман Р. // Рос. хим. журн. рос. хим. об-ва им. Д.И. Менделеева. 2002. XLVI, № 5. С. 6).

Из этих предположений Фейнмана оправдалась лишь возможность «наблюдать новые закономерности и эффекты» по мере уменьшения размеров вещества  $\leq 100$  нм (так называемые «квантоворазмерные эффекты») и «новые варианты их использования». Это вселило уверенность, что проблематика нанотехнологии в основном сводится 1) к изучению свойств наночастиц как особого фазового состояния вещества, 2) к созданию и использованию материалов и устройств, структура которых регулируется в нанометровом масштабе и 3) умению работать с ними. Правда, созданные лишь в 1980-х годах сканирующие туннельные и атомно-силовые микроскопы — «глаза» и «пальцы», необходимые для создания и изучения таких устройств, оказались достаточно эффективными лишь в качестве «глаз». В связи с этим проблема субмикронной сборки из наночастиц устройств остается нерешенной в рамках этих представлений. «В идеальном варианте (при использовании принципов самоорганизации вещества и «самосборки») такие материалы должны создаваться «снизу вверх» в отличие от практикуемого в настоящее время подхода к ультраминиатюризации «сверху вниз» (т.е. когда мелкие объекты со-

здаются из крупных)» (Роко М.К., Уильямс Р.С., Аливатос П. Нанотехнология в ближайшем десятилетии. Прогноз направлений исследования. М., 2002. С. 14). В докладах научной сессии РАН (декабрь 2002 г.) «От наноструктур до экономики, основанной на знаниях» сообщалось о создании устройств вакуумной нанoeлектроники, электронной нанолитографии, голографических и оптических наноустройств, биоорганической нанoeлектроники, биочипов, нанокристаллических структур в конструкционных материалах, об обнаружении наночастиц в космосе и в минералах и т.д. (Вестн. РАН. 2003. Т. 73, № 5. С. 387–463).

Это создает иллюзию возможности: 1) закономерного продолжения стратегии субмикроминиатюризации в электронике, 2) достаточности обобщения и переформулировки наших весьма относительных знаний, на основе которых возможно дальнейшее совершенствование техники и технологий, способных преодолеть глобальный цивилизационный кризис. Парадигмальные изменения в методологии науки в этой стратегии не требуются.

*Самоорганизация наноструктур по принципу «снизу вверх»  
(супрамолекулярная химия и «crystal engineering»)*

Результатом химического взаимодействия атомов являются химические соединения, отличающиеся от образующих их атомов по строению и свойствам. Структура химических соединений образована прочными главновалентными связями ( $\geq 70$  ккал/моль), а их кристаллические структуры соответствуют равновесному состоянию и минимуму энергии. Синтез органических молекул начинается со структурной формулы соединения, образованного исключительно сильными главновалентными связями, но зачастую прогнозировать, как будут взаимодействовать органические молекулы между собой за счет слабых межмолекулярных сил, весьма трудно вследствие того, что большинство из этих сил ненаправленные. С помощью различных субстратов (ионы металла и др.) удалось «объединить» органические молекулы в супрамолекулы за счет слабых межмолекулярных взаимодействий ( $< 5-7$  ккал/моль); причем проявились специфические для биологических систем признаки распознавания и реагирования. Достижения супрамолекулярной химии за последние два десятилетия впечатляющие. «Супрамолекулярную химию связывают с биологией двойственные отношения. Во многих химических исследованиях используются вещества биологической или биомиметической природы... Химическая и биологическая культуры все больше и больше сближаются. С другой стороны, вызов, брошенный химии,

состоит в создании абиотических систем, не существующих в природе, являющихся плодом воображения химика, обладающих желательными структурными особенностями и свойствами, отличными от тех, которыми обладают биологические системы... Не связанная ограничениями, накладываемыми требованиями, предъявляемыми к биологическим системам, абиотическая химия свободна в создании новых соединений и процессов. Область химии значительно шире, чем область биологии, охватывающая лишь системы, реально существующие в природе» (Лен Ж.-М. Супрамолекулярная химия. Концепции и перспективы. М., 1998. С. 236). Если сравнивать биологию и супрамолекулярную химию по двум параметрам (сложности и разнообразию объектов), то биологические объекты, будучи чрезвычайно сложными и необычайно разнообразными, все-таки построены из веществ, принадлежащих к очень ограниченному числу классов. Объекты супрамолекулярной химии явно уступают биологии по сложности своих объектов, но зато намного превосходят их: 1) по разнообразию и числу типов соединений, входящих в супрамолекулы в качестве образующих их фрагментов; 2) по бесконечному числу комбинаций, которыми можно соединять основные фрагменты в новые структуры. Далее Ж.-М.Лен полагает, что, достигнув контроля над супрамолекулярными структурами, функциями и организацией, возможно навести мост между живым и неживым, между жизнью и нежизнью, связав их в единую непрерывную цепь и приглашает исследовать «границы живых миров» и заняться химической эволюцией живых миров. Но оказалось, что супрамолекулы не могут объединяться в иерархические ансамбли без участия растворителей и их очень редко удается закристаллизовать. (Вопрос о невозможности создания новых форм жизни на основе супрамолекулярных ансамблей рассмотрен на с. 229–230.)

Другим важным достижением стратегии «снизу вверх» является конструирование и синтез структур из определенных «молекулярных блоков» в виде небольших органических молекул, часто называемый «crystal engineering», позволяющий создавать нано- и мезопористые структуры по алгоритмам повторяющихся фрагментов (модулям) простейших кристаллических структур некоторых неорганических веществ. «Молекулярные блоки» объединяются между собой в этих структурах главновалентными связями и образуют устойчивые структуры материалов, перспективных для электроники, катализа, молекулярной фильтрации и сорбции, создания экономичных источников питания и т.д. В некоторых случаях регулярные нано- и мезополости в этих структурах используются как реакторы для получения наночастиц и их упорядоченного распределения в матрице таких материалов.

Молекулярную самоорганизацию наночастиц, органических молекул и супрамолекул можно реализовать, используя различные растворители, в том числе и воду, в виде ансамблей жидкокристаллических и коллоидных систем, монослоев Лэнгмюра, пленок Лэнгмюра-Блоджетт, сферических и цилиндрических мицелл и т.д., но все эти системы одноуровневые. Такие же ансамбли молекулярных систем, образованные на основе одного растворителя — воды, универсального для всей живой Природы, включены в структуры всех многоуровневых иерархических биосистем. Очевидно, что для создания структурной теории многоуровневой молекулярной самоорганизации биологических и биомиметических систем, которые будут использоваться в будущих нанотехнологиях, необходимо изучать возможности молекул воды образовывать разнообразные и иерархические структуры, на основе которых могла бы реализоваться иерархическая системная самоорганизация.

### **Модульный дизайн с неизвестным алгоритмом**

Вышеописанный метод дизайна типа «*crystal engineering*» относится к наиболее простой разновидности, в которой по известным простейшим кристаллическим модулям структур неорганических веществ, как по алгоритмам, собирались нано- и мезопористые периодические структуры либо из «строительных блоков» в виде органических молекул, либо — из кристаллических модулей других структур. В обоих случаях симметрии положений атомов в «алгоритмическом» модуле должна соответствовать симметрия органических молекул или повторяющихся фрагментов кристаллических структур простых по составу неорганических веществ, используемых в качестве «строительных блоков». А как быть, если надо конструировать детерминированные, но аperiodические пропенсивные структуры из модулей с неизвестной структурой и с неизвестным алгоритмом их сборки? Выход был найден следующим образом. Оказалось, что возможны однозначные кооперативные дисклинационные или диспирационные топологические преобразования типа «разрезание-склеивание» облочков исходных однозначно выделяемых модулей известных кристаллических структур без существенных изменений стереохимических параметров. Преобразованные таким образом неевклидовы модули можно соединять между собой по бинарным операциям симметрии, что открыло путь к дедуктивному созданию нелинейной обобщенной модульной кристаллографии детерминированных про-

пенсивных структур. Неевклидовы модули не могут сплошь заполнить трехмерное евклидово пространство, но могут распространяться в нем в виде одномерных стержней с периодической структурой диаметром  $\leq 1,5-2,0$  нм. Эти стержни в случае тетраэдрической симметрии атомов (молекул) могут образовывать самоподобные фрактальные структуры с той же симметрией и топологией, что и образующие их неевклидовы модули или их кластеры.

В целом же детерминированные структуры из преобразованных неевклидовых модулей являются неравновесными, нелинейными (по морфологии) и дисконтинуальными, в отличие от линейных, равновесных кристаллических структур классической кристаллографии.

В специальном «Приложении» даны в виде отдельных разделов объяснения: а) основных понятий модульного дизайна; б) принципов и объективных критериев эффективности его применения и в) уже реализованные автором возможности его применения, как основного метода динамической нелинейной модульной обобщенной кристаллографии (со ссылками на статьи автора по реализации модульного дизайна структур объектов обобщенной кристаллографии)». Основным достижением модульного дизайна является создание детерминированных иерархических систеобразующих структур связанной воды — матриц, а точнее «строительных лесов» в самоорганизации гетерогенных биосистем.

Динамический характер этих пропенсивных структур позволяет связать понятие «структура» с понятием «процесс». Вся система понятий метафизического философского рационализма относится к процессам: а) становления; б) эволюции; в) формообразования; г) функционирования; д) превращений; е) пространство-время и т.д. По мнению А.Уайтхеда, «подлинной сущностью реальности является процесс» (Уайтхед А.Н. Избр. труды по философии. М., 1990. С. 679).

### **Механизм процессов самоорганизации и формообразования биосистем и биомиметических материалов на основе фрактальных пропенсивных системообразующих структур воды**

Интеграции естественных наук и развитие системного подхода способствуют выявлению характера взаимосвязей различных частей материального мира, имеющих общую физико-химическую природу. Актуальным становится изучение процесса самоорганизации частей с определенным строением в системы, представляющие целост-



ную, иерархическую структуру и обладающие свойствами, отсутствующими у частей системы. Биологи первыми сформулировали принципы самоорганизации систем, проявляющиеся на всех иерархических уровнях: а) система систем; б) узнавания и в) все или ничего. Согласно первому принципу системы низших уровней являются частями систем последующих уровней, а по второму принципу — объединение частей в целое возможно только при их строго определенной взаимной ориентации. Последний принцип обуславливает единственно возможную «архитектуру» нативных форм из биосистем предыдущих уровней, хотя все эти системы характеризуются устойчивым неравновесием и отсутствием глобального минимума энергии. Помимо этих принципов для самоорганизации всех иерархических систем (природных и искусственно созданных, включая изобразительное искусство и архитектуру), по-видимому, важным является условие единой «золоточисленной» метрики частей и целого: линейные размеры частей и системы можно выразить в виде алгебраической суммы различных степеней числа  $\varphi = 1,618\dots$ , одновременно обладающего свойствами арифметической, геометрической и гармонической прогрессий. Кроме того, интеграция частей в целое в биосистемах возможна только за счет слабых связей вследствие:

1) необходимости образования «обратной связи», позволяющей реагировать на внешние воздействия, существенно не изменяя строения частей в соответствии с принципом «единство целого при свободе частей»;

2) неизбежных несущественных изменений в строении частей при их интеграции в структуры последующих уровней иерархии, что приводит к «ослаблению» симметрии в структуре частей при образовании из них системы следующего уровня. Для создания адекватной теории самоорганизации биосистем необходимо принимать во внимание роль их важнейшей составляющей — структур «связанной воды», образованных исключительно направленными слабыми *H*-связями. «Действительно, структура воды вызывает новую точку зрения на самую жизнь. До сих пор на воду смотрели как на более или менее нейтральную среду, заполняющую пространство между структурными элементами в клетке... Один из принципов биологии — организация: это означает, что две системы, составленные вместе определенным образом, составляют новую единицу, систему, свойства которой не аддитивны и не могут быть описаны посредством свойств составляющих. Живое вещество является как бы системой из воды и органического вещества. Вода не только *mater* жизни, но и *matrix* жизни, и биология, возможно, не преуспела до сих пор в понимании на-

и более очевидных функций из-за того, что она сосредоточила свое внимание на веществе в виде частиц, отделяя их от двух матриц — воды и электромагнитного поля» (Сент-Дьерди А. Биоэнергетика. М., 1960. С. 55–56).

Основной трудностью изучения самоорганизации биосистем является их взаимопроникающее (на всех уровнях) гетерогенное строение структур, состоящих из органических и водной структурных составляющих, причем для изучения последней в настоящее время не существует прямых экспериментальных методов. Эту проблему можно решить, если в соответствии с теорией номогенеза удастся дедуктивно вывести имманентные детерминированные матричные структуры воды.

### *Строение пропенсивных фрактальных иерархических структур связанной воды*

Метод модульного дизайна обобщенной кристаллографии позволяет создавать только гомогенные дисконтинуальные системообразующие структуры, которые определяют формообразование биосистем и, что не менее важно, реализуют «метрический отбор» соразмерных с ними структур органической составляющей биосистем на стадии образования интермедиатов (предельно гидратированных форм с той же структурой, что и в нативном состоянии), образующих со структурами воды многочисленные направленные *H*-связи.

Для создания системообразующих самоподобных иерархических структур необходимо, чтобы метрика частей ее различных уровней была «золоточисленной», т.е. выражалась бы в виде различных степеней числа  $\varphi$  или в виде их суммы. Для этого достаточно, чтобы в гомогенных структурах, образованных из атомов одного сорта, их симметрия, с учетом направленности связей, была тетраэдрической. Этому условию, наряду с возможностью частичной релаксации неизбежных напряжений в структурах из неевклидовых модулей, в гетерогенных биосистемах удовлетворяют только тетраэдрические (по направленности их слабых *H*-связей) молекулы воды. Молекулы воды в этих структурах можно представить в виде атомов кислорода с четырьмя тетраэдрическими *H*-связями, на которых находится по одному протону, но вблизи каждого атома кислорода должно быть не более двух протонов. Тетраэдрический валентный угол ( $109,5^\circ$ ) почти равен углу пентагона ( $108^\circ$ ), в котором диагональ в  $\varphi$  раз больше его стороны. Вследствие самодуальности как тетраэдра, так и пентагона только в тетраэдрических дисконтинуальных структурах и в пентагональных мозаиках Пенроуза возможны образования иерархических самоподобных структур с бесконечным числом уровней.

Дисконтинуальные иерархические структуры воды должны проявлять все особенности строения систем (системные свойства), а также обладать способностью быть основой для самоорганизации гетерогенных иерархических систем, т.е. обладать и системообразующими свойствами. «Золоточисленная метрика» частей должна быть как в структурах воды, так и в структуре органических составляющих, отобранных по соразмерности с ними. Системные свойства структур воды должны проявляться в нескольких отношениях: а) в симметрии и строении, соответствующих принципам системной самоорганизации; б) в нелинейных, «неаддитивных» свойствах этих структур воды; в) в разнообразии модульных структур, образованных одним типом модуля, но по разным алгоритмам; г) в соответствии с метрикой и морфологией реальных структур биосистем, установленных экспериментальными дифракционными методами. Создание таких детерминированных структур из унитарных моделей, обладающих системными свойствами, возможно по алгоритмам разнообразных степеней групп симметрии с симметрией икосаэдра или его подгрупп (*Bulienkov N.A.* in: *Quasicrystals and Discrete Geometry. The Fields Institute Monographs / Ed. J. Patera Amer. Mathem. Soc. Providence (RI). 1998. Vol. 10. P. 67–133*).

Сплетения групп симметрии адекватно описывают строение иерархических структур, соответствующих всем принципам системной самоорганизации, но симметрия в них приближительная (ослабленная), а не точная, как в кристаллах. Пассивные ( $P$ ) группы сплетения, смещенные на вектор  $r$  от центральной ( $A$ ) группы, образуют вместе с ней сплетения этих групп с глобальной симметрией, равной произведению группы пересечения групп  $G = P_{(r)} \cap A$  и орбитальной группы  $L$ , соответствующей группе мультидвойникования. Принцип «система систем» описывается сплетениями групп симметрии ( $P_{(r)} \cap A$ )  $L$  на всей последовательности иерархических уровней. Принципу «узнавания» в сплетениях групп симметрии соответствует группа пересечения групп частей ( $P$ ) и целого ( $A$ ). Принцип «все или ничего», отражающий однозначность системной самоорганизации, которая, в свою очередь, обусловлена однозначностью: 1) симметрии сплетения групп как произведения группы пересечения  $G$  и орбитальной группы  $L$  при заданных структурах частей и группах пересечения, а также 2) векторов  $r$ , соответствующих радиусам орбит  $P$ -групп в сплетениях на каждом уровне иерархии.

Значение основополагающего в биологии закона неаддитивности четко сформулировал А. Сент-Дьерди: «Это важнейшее уравнение биологии ( $1+1>2$ ) справедливо для всех объектов от самых простых до самых сложных. Если живая природа отличается по своим свойст-

вам 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». («Биоэлектроника», «Мир». 1971. С. 10). В континуальных 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 в пространстве только в направлениях их ребер. В дисконтинуальных иерархических модульных структурах воды, формально образованных универсальными структурными единицами — модулями (триплетами и  $T$ -кластерами) возможно несколько алгоритмов их соединения между собой по различным группам пересечения  $G = P_{(n)} \cap A$  и орбитальным группам  $L$ . В результате в дисконтинуальных структурах воды каждый алгоритм соединения модулей между собой соответствует: а) новой структуре со своей метрикой и морфологией, обычно нелинейной (спирали, скрученные ленты, кольца) и б) фрактальному самоподобию. На каждом уровне иерархического соединения модулей образуются новые структуры со строением и свойствами, которых не было в исходных частях. Образующиеся структуры становятся частями в последующих уровнях иерархии и создают новые возможности для дальнейшей эволюции структур и разнообразия самоподобных фрактальных структур.

Это можно продемонстрировать на примере эволюционного развития самоподобных фрактальных структур из универсального  $T$ -кластера, из которого можно образовать одномерную структуру кристаллического стержня  $[T]_{\infty}$  с симметрией  $G_1^3 - p6_322$ . Этот кристаллический стержень можно представить в виде трехрядной спирали из спиралей 30/11, образованных из неевклидовых  $H$ -модулей, полученных «+60°» диспирационным преобразованием модуля исходной кристаллической структуры льда  $1H$ . Из фрагментов  $p6_322$  стержня длиной, соответствующей  $1/3$ ,  $2/3$  и полному периоду «с» этой спирали, можно образовать фрактальные кластерностержневые структуры, самоподобные  $T$ -узлу или его частям ( $L$ -триплет,  $H$ -модуль, «твист-ванна») с масштабами подобия  $M_j = 3j\varphi + 1$ , где  $j=1; 2; 3$  для  $c/3$ ,  $2c/3$  и  $c$  соответственно. Таким образом, если  $T$ -кластер является фрактальным аналогом тетраэдрического атома в  $T$ -кластере, то сам стержень соответствует тетраэдрической  $H$ -связи в этом кластере. На последующих уровнях ( $i=1, 2, \dots, \infty$ ) каждая фрактальная структура  $T_j^i$  кластера подобна  $T$ -кластеру с масштабом подобия  $T_j^i$  кластера, равного  $M=(3j\varphi+1)^i$ . Фрактальные размерности водных структур могут быть следующие:  $d_{Fi} = 2,28$ ;  $d_{Fii} = 2,04$ ;  $d_{Fiii} = 1,87$ .

**Какие проблемы биологической самоорганизации «решают» фрактальные структуры связанной воды?**

Самоподобные иерархические структуры воды позволяют решить важнейшую для биосистем проблему масштабов иерархических уровней, сохраняющих те же морфологические паттерны. Например, паттерн филлотаксиса проявляется как у планктона, так и у подсолнечника, размеры которых различаются на несколько порядков. Одной из самых важных особенностей строения имманентных структур связанной воды, определяющих самоорганизацию и морфологию биосистем, является их фрактальность. Трехмерное евклидово пространство оказалось неоднородным в отношении возможности распространения в нем неевклидовых модулей и кластеров в виде стержневых одномерных кристаллических структур, которые могут состыковываться между собой в самоподобные иерархические модули детерминированных фрактальных структур. В этих самоподобных структурах отношение числа молекул воды со «свободной»  $H$ -связью, по которой возможно соединение с другими структурами, к общему числу молекул воды в такой структуре постоянно и равно  $\approx 0,7$ . Это означает, что около 70% всех молекул воды находятся на поверхности фрактальных структур, имея в среднем по одной «свободной»  $H$ -связи. Если бы структуры воды были континуальными, то на более высоких уровнях иерархии это отношение уменьшалось бы и движущие силы интегратазма биосистем также уменьшались бы по мере иерархического развития.

Рассматривая проблему биологического системного интегратазма и его движущих сил, В.А.Энгельгардт отмечал, что «возникновение системы связей при образовании целого из его разрозненных частей должно рассматриваться как самое коренное первичное условие интеграции» (Энгельгардт В.А. // *Вопр. философии*. 1970. № 11. С. 103–115). Это условие предполагает, что «у частей, из которых должно образоваться целое, имеется налицо определенное число свойств, обеспечивающих возможность возникновения связей между ними». Это соответствует обсуждаемой структурной модели самоорганизации биосистемы за счет образования многочисленных направленных  $H$ -связей между соразмерными структурными составляющими воды и биополимеров. Фрактальная природа структур связанной воды предохраняет их от фазового перехода в кристаллическую структуру льда  $IN$  при сильных охлаждениях. Поэтому если своевременно удалить всю неструктурированную воду, биосистемы переносят многократные циклы замораживания-размораживания.

Системообразующие структуры воды, стабилизированные системой  $H$ -связей с соразмерными с ними структурами органических составляющих, образуют обязательные для биологической самоорганизации промежуточные предельно гидратированные стадии интермедиатов, в которых структуры воды выполняют роль матриц или «строительных лесов». Поскольку природу строить некому, по-видимому, структуры самих «строительных блоков» ответственны за процесс строительства. Возникает вопрос: «Кто является архитектором в номогенетической самоорганизации биосистем?». В случае самоорганизации пространственной структуры глобул белков ( $\alpha$ -спиралей и  $\beta$ -цепей), соразмерных с основными элементами структуры воды: (30/11)-спирали и T-кластеры. Таким образом, опосредованно генетический код косвенным образом определяет «внутренние параметры» (длину спиралей 30/11, углы их пересечения между собой в T-кластерах и углы скручивания) в жесткой стабильной структуре «строительных лесов» интермедиатов нативной глобулы, содержащей не более 6–7 элементов вторичной структуры белков в глобуле или в образующих ее доменах. Следует напомнить, что существует всего 9 типов доменов больших глобул. Затем в уже сложившейся глобуле структуры воды частично и обратимо разрушаются, снижая энергию в системе «белок — вода». Архитектура структуры интермедиата сохраняется и в нативной форме глобулы за счет возможности взаимодействия аминокислотных остатков между собой в уже сложившейся структуре глобулы при частичном разрушении «строительных лесов» — структур воды. Подобная модель самоорганизации структур на предварительных стадиях образования интермедиатов позволяет исключить неразрешимую проблему анализа и расчета взаимодействий только между органическими составляющими биосистем. В нативных формах боковые цепи аминокислотных остатков отобраны в ходе эволюции первичной структуры белка таким образом, чтобы взаимодействие между ними в уже сложившейся глобуле на стадии интермедиата сохранили бы ее структуру после частичного разрушения «строительных лесов» из структур воды, за счет чего происходит снижение энергии в системе «белок-вода».

Помимо ранее упоминавшихся проблем масштабирования иерархических уровней, подобия морфологических паттернов и особенности интегратизма в иерархических биосистемах, фрактальная природа имманентных структур воды, определяющая движущие силы самоорганизации, позволила также понять взаимосвязь таких проблем строения и функционирования биосистем, как: 1) левизна-правизна в живой природе и специфичность геометрии характерного для нее

пространства и 2) структурная энергия биосистем. В.И.Вернадский на основе обобщения эмпирического материала считал, что левизнаправизна является одним из существенных атрибутов живой природы, а «тела живого вещества, возможно, отвечают не евклидову пространству, а одному из римановых геометрических пространств» (*Вернадский В.И.* Проблемы биохимии. IV. О правизне и левизне. М.—Л., 1940. С. 14).

Рассмотрим, как эта гипотеза согласуется с конкретной геометрией самоподобных фрактальных структур связанной воды из стержней, образованных  $T$ -кластерами из неевклидовых модулей.  $T$ -кластер является фрагментом центральной части политопа  $\{3,3,5\}$  — четырехмерного икосаэдра, относящегося к сферическому  $S^3$ -пространству постоянной кривизны, одному из возможных пространств Римана. Этот фрагмент, состоящий только из тетраэдрических симплексов, из которых только  $1/5$  часть заполнена такими же атомами, но таким образом, чтобы у всех атомов была тетраэдрическая координация. Подобное заполнение  $1/5$  части тетраэдрических симплексов в икосаэдрической структуре соответствует раскраске граней икосаэдра в пять цветов, но так, чтобы смежные по ребрам грани не были одинаково окрашены. Возможны только два варианта такой раскраски: либо левый, либо правый. Таким образом, левизнаправизна в строении тел живой природы является следствием того, что формообразование биосистем обусловлено спецификой «унитарных кирпичей» строения системообразующих иерархических фрактальных структур воды. Образующие эти структуры  $T$ -кластеры, относящиеся к  $S^3$ -пространству, могут быть только локально вложены в виде стержней из них в трехмерное евклидово пространство — естественное пространство для любой стабильной атомной структуры.

Наконец, с неевклидовой природой модулей фрактальных структур связанной воды связаны их энергоадсорбирующие возможности. При образовании этих структур необходимо затратить энергию, которая выделяется при их разрушении. В биосистемах энергия, необходимая для образования структур воды, возможно, выделяется при гидролизе аденозинтрифосфата (АТФ). В биосистемах АТФ вполне может быть аналогом бензина в двигателе внутреннего сгорания, а водные структуры — «рабочим телом» биомашин. А.Сент-Дьерди полагал, что «биологические функции могут заключаться в образовании и нарушении водной структуры» (Биоэнергетика. С. 55).

Модульный дизайн позволил создать следующие типы нелинейных морфологий структур связанной воды: а) полярные ( $S_M$ ) и биполярные ( $S_{M/2}$ ) спирали-матрицы для самоорганизации  $m$ -РНК,  $A$ -,  $B$ -

Z-ДНК; б) спиральные ленты; в) кольцо; г) трехмерные фрактальные решетки — каркас структуры биокристаллов, определяющий их метрику; д) структуру поверхностного слоя воды в виде двумерной кристаллической структуры из  $L$ -триплетов ( $G_2^3 - P622$ ), определяющую ее поверхностное натяжение и также являющуюся матрицей для самоорганизации бислойных мембран и монослоев Лэнгмюра, а также е) цилиндрические и сферические капсулы вирусов и мицеллы на основе структуры поверхностного слоя ( $G_2^3 - P622$ ).

Следует отметить, что подобный подход к изучению процесса самоорганизации биосистем на молекулярном уровне позволяет «состыковать» эволюцию живой природы на Земле с эволюцией образования ее литосферы, которая ей предшествовала. Вода и кремнезем являются стабильными и «конечными» продуктами геохимической деятельности в процессе формирования литосферы. Проявление «метрического отбора» структурных составляющих биоминерального нанокompозита (кости) по соразмерности с метрикой системообразующих структур воды и соответствия структурных составляющих кости, определяющие высокоупорядоченное строение этого природного композита (см. в разделе «Приложение»).

### **Нанотехнология и изменения в методологии естественных наук**

В настоящее время так же трудно представить будущее развитие нанотехнологии в целом и тем более техники на ее основе, как во времена Фарадея предвидеть все нынешние достижения в области электротехники, средств коммуникаций, энергетики и электроники. Но на основании аргументации в данной статье, посвященной самоорганизации биосистем только одной из областей нанотехнологии — наноматериалам и наноматериаловедению, все же можно составить представление о кардинальных изменениях в методологии создания и изучения наноматериалов, а также междисциплинарных связях естественных наук с математикой, по следующим причинам.

Во-первых, центральной проблемой для всех отраслей нанотехнологии является управление самоорганизацией структур на атомно-молекулярном уровне. Во-вторых, системные функциональные свойства наноматериалов, определяемые строением и составом, делают понятия «материал» и «устройство» почти тождественными. Важно установить, существует ли преемственность и соответствие между изменениями в методологии, необходимыми для создания



метода модульного дизайна — основного метода симметричного конструирования и исследования пропенсивных структур, своего рода «лоции» возможного развития нано- и биомиметических систем, и признаками нарождающейся постнеклассической пропенсивной парадигмы. Кроме того, в образовавшемся блоке наук «Nanosciences» (математика, биология, химия и физика) происходят существенные изменения как в междисциплинарных взаимосвязях естественных наук, так и роли математики в создании их теоретических основ по сравнению с теми, которые были характерны для господствовавшей почти весь XX век неклассической статистической парадигмы. Наконец, важно оценить влияние этих изменений в методологии на общественное сознание и культуру в целом.

*Соответствие методологий пропенсивной  
постнеклассической парадигмы и модульного  
дизайна — основного метода обобщенной  
кристаллографии*

Для перехода от неклассической парадигмы к постнеклассической характерны следующие признаки. Объектами изучения становятся системы со сложным иерархическим аperiodическим строением и системными свойствами, для изучения которых пока нет достоверных ни теоретических, ни экспериментальных методов. «Дополнительность» различных экспериментальных косвенных методов, основанных на одних и тех же статистических представлениях, не позволяет создать альтернативных моделей этих структур, что почти исключает возможность их критики и дальнейший прогресс. Самоорганизация биосистем по принципу «все или ничего» не соответствует статистическим механизмам их образования. Адекватность модели свойствам изучаемого объекта определяется ее эвристическим потенциалом (постановка новых проблем и выработка подходов к их решению). Например, модель самоорганизации биосистем на основе системообразующих имманентных структур воды и необходимость «метрического» отбора ими других структурных составляющих биосистем по своей «золоточисленной метрике» позволяет подойти к решению важнейшей проблемы о возможности многообразия форм жизни на разных основах, в том числе и на основе разнообразных супрамолекулярных ансамблей. В супрамолекулярной химии, как и в биосистемах, слабые связи играют решающую роль в самоорганизации структур. Отличие заключается в том, что в первом случае нет общей системообразующей составляющей в виде структур воды и,

следовательно, нет и метрического отбора соразмерных с ними органических составляющих, способных на основе системообразующих структур воды образовать иерархическую биосистему. Поэтому, отличаясь от биосистем разнообразием состава используемых фрагментов, ансамбли супрамолекулярной химии не могут быть основой многих других иерархических систем, необходимых для возникновения других форм жизни и поэтому формы жизни без участия воды представляются маловероятными. Сходство морфологических паттернов биосистем и материалов нанотехнологий с малым числом иерархических уровней, использующих водосодержащие среды, обусловлено тем, что одни и те же системообразующие самоподобные структуры воды определяют их морфологию, одинаковую на разных масштабных уровнях иерархий.

Другим важным признаком является изменение методологии создания модели (переход от индуктивного обобщения косвенных экспериментальных данных, при отсутствии даже приблизительного представления о характере строения изучаемого объекта, к ее дедуктивному выводу). Это вполне соответствует представлениям о том, что «мир не состоит из стационарных объектов, как вещей, обладающих актуально данными свойствами. Он скорее набор потенциальных возможностей, лишь часть из которых может актуализироваться» (*Стёпин В.С. // Алексеев И.С. Деятельностная концепция познания и реальности. М., 1995. С. 475*). Создание идеальных объектов в виде моделей аппроксимантов пропенсивных структур и далее их «регрессивная» эволюция позволяет создавать на их основе менее симметричные, но совершенные формы, сохраняя при этом важные структурные инварианты, признаки их общности с аппроксимантом.

Другой особенностью рассматриваемого парадигмального перехода является переход от изучения линейных (аддитивных) кристаллических структур объектов к нелинейным (неаддитивным), но с тем же детерминированным строением, что характерно и для строения системообразующих матричных структур связанной воды (см. «Приложение»).

Важнейшим свойством системообразующих структур воды является их дисконтинуальное строение, обусловленное «компромиссным» локальным совмещением метрики неевклидовых модулей с метрикой линейного трехмерного евклидова пространства — естественного для любой стабильной атомной структуры. Но в этом пространстве неевклидовы модули могут регулярно распространяться только по строго определенным направлениям, образуя фрактальные детерминированные иерархические структуры. В этом отношении

трехмерное пространство оказалось неоднородным и дисконтинуальным, а следовательно, в нем невозможно образование случайных флуктуаций, что не соответствует основным положениям статистической неклассической парадигмы. Эту важнейшую особенность будущей кристаллографии системообразующих структур предвидел А.А.Любищев: «Классификация Е.С.Федорова к ледяным узорам неприменима, так как здесь не действует основной постулат Фёдорова: заполнение пространства элементами данного тела. Видимо, мыслима какая-то новая кристаллография, которую с полным правом (по образцу с неевклидовой геометрией) можно назвать «нефедоровской» и которая должна быть построена на своих постулатах, возможно, весьма общих с постулатами, лежащими в основе некоторых форм биологической симметрии» (Любищев А.А. // Знание—сила. 1973. № 5. С. 26–29).

О значении локальных особенностей пространства писал Р. Фейнман как об одной из важнейших черт будущих физических законов: «Я сильно подозреваю, что простые представления о геометрии, распространенные на очень маленькие участки пространства, неверны. Говоря это, я, конечно, пробиваю брешь в общем здании физики, ничего не говоря о том, как ее заделать» (Фейнман Р. Характер физических законов. М., 1968. С. 184). С этими особенностями локальных структур из неевклидовых модулей в трехмерном евклидовом пространстве связаны неизбежные упругие напряжения. Локальные переходы евклидовых модулей кристаллической матрицы в неевклидовы вызывают изменение длин связи, их валентных и торсионных углов, поэтому возможен обратимый переход этих локальных структур из неевклидовых модулей в кристаллическую структуру матрицы со вспышкой когерентного излучения (Осиньян Ю.А., Нетрий В.Д., Бульенков Н.А. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1987. Т. 51, № 9. С. 1458–1464). Это вполне соответствует утверждению Г.Башляра о том, что «энергетические обмены определяют материальные изменения, а материальные изменения обуславливают энергетические обмены» (Новый рационализм. С. 213). Вполне возможно также существование детерминированных «химических траекторий» в виде таких последовательных промежуточных активированных состояний в структуре вещества. Очевидно, этими энергоадсорбирующими центрами обусловлен низкотемпературный механизм механохимического синтеза нанокристаллов фаз, иногда даже отсутствующих на равновесных диаграммах состояния. Напряженный характер структур из неевклидовых модулей и их способность недиссипативно поглощать энергию обусловили необходимость введения более общего крите-

рия стабильности, пригодного как для равновесных, так и для неравновесных структур. В отличие от жидких тел эти объекты являются структурными формами стабильного конденсированного состояния, так как их структура и форма сохраняются значительное время. Но от кристаллов их отличает отсутствие глобального минимума свободной энергии, нелинейность или отсутствие форм и состояние относительно устойчивого неравновесия. По этой причине минимум свободной энергии для аperiодических и неравновесных структур не может быть критерием их устойчивости. В кристаллах, в которых решетку можно выбрать многими способами, самоорганизация определяется не ее наличием, а силами межатомных взаимодействий. Вся информация, необходимая для возникновения дальнего порядка, содержится в повторяющемся фрагменте кристаллической структуры (модуле), заключенном в сфере радиусом от  $3R$  до  $5R$ , где  $R$  — радиус сферы вписанный в максимальную пустоту структуры. Поэтому критерием стабильности как кристаллической, так и любой другой формы стабильного конденсированного состояния следует считать полную стыковку связей в структурах, обеспечивающую их «конструкционную» стабильность.

Общий критерий стабильности как для равновесных и неравновесных структур, так и для структур живой и неживой природы проявляется в общности принципов модульного структурообразования всех стабильных форм конденсированного состояния. 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 ( $\Delta E > 0$ ), на образование которых требуется энергия. Отказ от критерия стабильности в виде энергетического минимума, отражающего идею баланса, также соответствует «статистической познавательной модели, которая рассматривает мир как совокупность балансов, средних и инвариантов» (Чайковский Ю.В. Исследования по математической биологии. Пушкино, 1996. С. 173).

*Изменение роли математики в развитии естественных наук и характера их междисциплинарных связей*

Изменение роли математики в развитии естественных наук также следует отнести к важнейшим изменениям, характеризующим смену неклассической парадигмы на постнеклассическую. Ныне актуальна проблема: является ли геометрия всеобщей доказательной про-

граммой знания в силу того, что она строго фиксирует неизменность исходных постулатов и все еще остается эталоном методологически доказательного знания и самого доказательства. «Если определять науку как уровень понимания мира, то уровень развития самой науки связан не с уровнем достигнутого знания, а с умением критически пересматривать принятые догмы, умением точно формулировать свои теории и, наконец, с целостностью видения мира. Уровень науки следует связывать с уровнем философско-методологической рефлексии» («А.А.Любищев», М., 1982. С. 102). Цели математизации естественных наук А.А.Любищев видел в достижении некоторого уровня четкости утверждений (ясного выделения постулатов и отчетливого понимания статуса различных утверждений) и в обнаружении некоторой математической структуры, воплощенной в описываемом явлении. По его мнению, «уровень математизации науки зависит не столько от существующих возможностей, сколько от ощущения ее необходимости». Математику он рассматривал как средство для вывода естественных наук на номогенетический уровень. Любищев так же точно определил признаки и принципы настоящей науки: «Настоящая наука начинается там, где в основе знания лежит точно сформулированная теория с указанием сфер ее применимости. Важным эвристическим принципом являются утверждения: 1) все разрешенное достаточно полной теорией должно существовать в природе и 2) в системе фактов надо искать фундаментальные математические законы, воплощающие эти факты» (Там же. С. 111). Это проявляется в тенденции геометризации естественных наук и возникновении различных структуралистских методологических движений в естествознании, и в первую очередь в биологии.

Математика кардинально изменяет свою роль в развитии естественных наук, она перестает быть неким формальным языком науки и способом оформления ее результатов («служанка наук»), она вновь становится «царицей наук». Возрастает эвристическая роль математики в естественных науках: ее результаты прямо переносятся в них и становятся непосредственными источниками новых знаний. Например, в построенной нами иерархической декагональной мозаике Пенроуза по общепринятым в математике локальным правилам сборки тайлов установлена геометрическая прогрессия (с модулем  $1,902 = (\phi^2 + 1)^{1/2}$ ) в законе увеличения расстояний центров новых систем последующих уровней иерархии от общего глобального центра ( $3,816 = \phi^2 + 1 = 1,902^2$ ) (The Field Monograph Institute), которая почти в точности совпадает с геометрической прогрессией (с модулем 2) в знаменитом эмпирическом законе Тициуса-Бодде ( $R_n = 4 + 3 \times 2^n$ ), описыва-

ющем увеличение расстояний планет в Солнечной системе от ее центра (Ньетто М.М. Закон Тициуса-Бодде. М., 1976). Роль математики как «непосредственного источника знания» в биологии можно показать на примере трехмерных системообразующих пропенсивных структур из частиц с тетраэдрической симметрией направленности их соединения между собой. Очевидно, что «физико-химическая конкретика» (состав частиц, тип связей) не была заложена в основу их дедуктивного вывода, который был чисто геометрическим, и далее структуры отбирались по соответствующим реалиям этой «конкретики» (Бульенков Н.А. // Биофизика. 1991. Т. 36, № 2. С. 181–243; Лобышев В.И., Соловей А.Б., Бульенков Н.А. // Биофизика. 2003. Т. 48, № 6. С. 1011–1021). Частичная релаксация неизбежных напряжений в этих структурах из неевклидовых модулей, необходимая для достижения их стабильности, возможна только в случае слабых связей типа водородных, а их тетраэдрическая направленность возможна только в структурах воды, образованных этими *H*-связями вследствие: 1) близости значений углов сильных валентных связей (*O-H*)  $\approx 104^\circ$  и тетраэдрических слабых *H*-связей (*O-H...O-H*), ( $\approx 109,5^\circ$ ) и 2) способностью молекул воды образовывать с соседними молекулами в структуре по четыре *H*-связи. Здесь уместно процитировать А. Уайтхеда: «Идея выбора живой природой для своих объектов неких моделей избранных форм не должна противоречить идее, что эти модели возникают в природе в результате тех или иных физико-химических процессов» (Уайтхед А.Н. Избр. работы по философии. М., 1990. С. 589).

Такая роль математики будет способствовать изживанию редукционизма в естественных науках и их переходу к системной методологии, а также к подлинной реализации деятельностного подхода в методологии как на уровне «субъективной реальности», где будут выявляться, а не формироваться модели «избранных форм», так и на стадиях их актуализации на уровне объективной реальности, создавая промежуточные структурные модели (прекурсоры, темплаты и т.д.), необходимые для реализации «генерального плана» моделей этих избранных форм.

Заметно изменится роль физики в развитии естественных наук от доминирования в качестве «идеального примера» для подражания в достижении ими статуса «точной науки» до, по меньшей мере, положения равноправного члена в наметившемся единстве в виде цикла «Nanosciences», отказавшись от идеи тотальной «физикализации» естественных наук (внедрение статистических представлений и идей об относительности экспериментальных методов). В радикальном виде эту тенденцию еще в начале XX века сформулировал Д.Холдейн:

«Нет никаких оснований сомневаться в том, что наступит время, когда появится точка соприкосновения биологии с физикой. Но можно с уверенностью сказать, что если при этом одна из наук поглотит другую, то этой другой наукой будет физика» (*Лима-де-Фариа А. Эволюция без отбора. Автоэволюция форм и функций. М., 1991. С. 115*). Эта точка зрения отлично выражает возрастающую и, возможно, лидирующую роль биологии в естественных науках и технологиях будущего, но вряд ли можно думать о поглощении одной наукой другой. Очевидно дальнейшее более тесное взаимодействие естественных наук в едином естествознании с более целостным видением мира и с более возрастающей ролью биологического понимания сложности системной иерархичности и взаимосвязей.

В самой биологии и особенно в ее наиболее редуccionистской области — молекулярной биологии — вполне возможна «революция» коперниканского типа, заключающаяся в переносе центра внимания с «видимых» экспериментальными методами органических структурных составляющих на «невидимую» ими общую водную структурную составляющую, объединяющую все составляющие биосистем в единое целое со строго определенной структурой и определенными функциональными свойствами. Без этого поворота в научном сознании мы не сможем полностью понять механизмов самоорганизации биосистем, формообразования и функционирования. В традиционном для современной биологии утверждении, что физические свойства воды совершенно идеально приспособлены для нужд живых систем, по-видимому, перепутаны причина и следствие. «Живая система была, если можно так выразиться, «сконструирована» применительно к такому растворителю, как вода. Свойства молекул воды были частью программы, заложенной в эволюционную «вычислительную машину». Поэтому неудивительно, что конечный результат так хорошо подогнан к этим свойствам» (*Грин Д., Гольдбергер Р. Молекулярные аспекты жизни. М., 1968. С. 21*).

Безусловно, возрастет и роль химии, особенно в развитии нанотехнологии. Уже сейчас очевидна тенденция слияния различных ветвей химии (органическая, неорганическая, биоорганическая, коллоидная и т.д.) в общую химическую науку на основе, в первую очередь, развивающихся структурных представлений, названную Ж.-М. Леном «Structural Chemistry», с более высоким уровнем ее геометризации и развития теоретико-групповых методов (*Лен Ж.-М. Супрамолекулярная химия. Концепции и перспективы. М., 1998. С. 25*). Методы нанотехнологии, особенно в области создания биомиметических и биоминеральных нанокompозитов, возможно, заложат эксперименталь-

ную основу изучения самоорганизации и формообразования биосистем на абиотической стадии химической эволюции живой природы и ранних стадиях возникновения жизни.

### *Социокультурный вызов*

Познавательная модель естественных наук обычно заимствуется из наук общественных и из техники (*Карпинская Р.С., Лисев И.К., Огурцов А.П.* Философия природы: коэволюционная стратегия. М., 1991.) и поэтому «оказалось возможным вчерне описать развитие европейского научного мировоззрения за последнюю тысячу лет (с X по XX в.в.). Античность и Восток таким образом описать не удастся» (*Чайковский Ю.В.* Исследования по математической биологии. Пушино, 1996. С. 172). В настоящий период эта закономерность также будет нарушена вследствие необходимости коренного пересмотра типа западной рациональности и невозможности дальнейшего развития в направлении модернизации техногенной цивилизации.

Поэтому необходима подготовка сознания научного сообщества и всего общества к неизбежности таких коренных изменений, в первую очередь, в отношении к природе и в понимании того, что направление дальнейшего прогресса цивилизации должно быть принципиально иным. Помимо этого надо осознать, что должен измениться и сам тип человеческой жизнедеятельности, причем не только современного эгоистического общества потребления «золотого миллиарда», но и остальной части человечества. Очень трудно объяснить потребителю благ современной цивилизации, что массовое стремление к благополучию и «гедонизму» на фоне экологических и техногенных катастроф, неизбежного скорого исчерпания невозобновляемых природных ресурсов и экономических кризисов ведет к неминуемой катастрофе. Но при этом социокультурная деятельность ученых и деятелей культуры не должна порождать атмосферу страха и апокалипсиса, характерного для «общества риска». Нужно найти очень точные слова и привести примеры успешных реализаций принципиально новых технологий, радикально способствующих устранению цивилизационного кризиса.

Возрастание роли биологических принципов в таких технологиях, заимствованных у Природы, должно способствовать «новому пониманию необходимости гармоничного взаимодействия человека с Природой, что откроет путь к синтезу новых культурных традиций, в первую очередь Востока, и создаст предпосылки для нового цикла



цивилизационного развития» (Стёпин В. С. // Вестн. РАН. 1997. Т. 67, № 5. С. 387–395). Усвоение этих традиций Востока и Античности ускоряет создание нового типа рациональности.

Актуальной проблемой нашего времени является сближение двух других типов рациональности. Научной и метафизическо-философской, так как, по Любищеву, «Наука снова, как и в античные времена оказалась в ситуации “необходимости вытаскивать само себя за волосы”, не имея достаточно эффективных методов исследования и адекватных предстоящим задачам теоретических представлений». Поэтому важной проблемой является искоренение мифа в сознании общества о непреодолимых противоречиях и антагонизме материализма и идеализма, вечно борющихся антиподов, но так и не одержавших победу друг над другом. Возникает задача разъяснения роли идеализма в развитии теоретических основ естественных наук и их математизации — необходимого условия для их дальнейшего плодотворного развития (в традиции А.А.Любищева «Линии Демокрита и Платона в истории культуры»).

Обращение к античному идеализму — платонизму в виде двух типов реальности (субъективной и объективной) позволило создать целостный подход к важнейшей проблеме изучения био- и наносистем: их самоорганизацию и формообразование, в котором использованы конкретные представления дискретной геометрии и ее раздела — кристаллографии, а также структурной химии и биологии. В связи с необходимостью осознания существования субъективного типа реальности в виде пропенсивных структур, в том числе и детерминированных фрактальных структур воды — матриц для самоорганизации иерархических биосистем со специфической «золоточисленной» метрикой, важно развеять миф о магических и непонятных нам свойствах пропорций «золотого сечения» — важнейшего условия образования самоподобных иерархических систем и критерия эстетического совершенства.

Необходимо переиздать, снабдив хорошими комментариями, труды, книги крупнейших знатоков этой проблемы: М. Гика «Эстетика пропорций в природе и искусстве» (М., 1936), Ле Корбюзье «Модульор» (М., 1976), Д.Хэмбидж «Динамическая симметрия в архитектуре» (М., 1936), Э.Мессель «Пропорции в античности и средние века» (М., 1936) и др. «Золотое сечение» — это не только эстетический критерий в архитектуре и изобразительном искусстве. Оно должно получить серьезное теоретическое обоснование и должно быть включено в язык и методы современного естествознания. Надо издавать книги, четко и доступно излагающие эти проблемы для школьников, такие, как книга А.В.Волошинова «Пифагор» (М.: Просвещение, 1993). Осо-

знание вечности критериев красоты и эстетики, добра и зла позволят человечеству преодолеть последствия массовой культуры — тяжелого наследия постиндустриального и информационного общества. В связи с этим следует вспомнить слова А.Эйнштейна в письме к Ле Корбюзье — создателю «Модулора», гармонизирующего эстетическую среду обитания человека: «Это гамма пропорций, которая делает плохое трудным, а хорошее легко достигаемым» (*Ле Корбюзье. Модулор. М., 1976. С. 14*).

## Приложение

### *Исходные евклидовы кристаллические модули и их кооперативные преобразования в неевклидовы модули*

В кристаллических структурах по структурным мотивам Н.В.Белова можно однозначно выделить минимальные повторяющиеся фрагменты — «кристаллические модули» («кванты» кристаллического состояния или «кристаллические молекулы» по Е.С.Фёдорову), полностью определяющие стехиометрию, симметрию, дальний порядок кристалла и даже морфологию кристалла вплоть до строения и ориентации его важнейших граней и ребер. Полиэдры кристаллических модулей при их трансляционном переносе охватывают все атомы структуры. В модуле атомы размещаются только на его вершинах, ребрах и гранях. Поэтому модульное разбиение кристаллического пространства соответствует: 1) разбиению по всем химическим связям, включая и слабые, и 2) полной связанности структур — более общему условию их стабилизации. Общепринятый критерий стабильности, соответствующий минимуму свободной энергии, относится только к равновесным кристаллическим структурам.

Кооперативное преобразование евклидовых кристаллических модулей в неевклидовы модули нелинейных структур искривленных пространств возможно путем введения в их замкнутую оболочку соответствующих дисклинаций или диспираций. Например, кристаллические модули тетраэдрических структур алмаза и льда  $IH$  можно преобразовать введением в их оболочку « $\pm 60^\circ$ » диспираций в неевклидовы модули, оболочки которых также образованы гексациклами, но с другими конформациями. При этом в них сохраняются подгруппы симметрии точечных групп исходных кристаллических модулей. Неевклидов модуль, полученный из модуля льда  $IH$ , можно объединить в кластеры (по сплетениям групп симметрий), а эти кластеры —

в одномерные кристаллические стержни, из которых можно образовывать дисконтинуальные системообразующие иерархические фрактальные структуры.

Модульное строение является универсальным для всех типов стабильных структур, включая и биологические, а их самоорганизация в замкнутые двух- и трехмерные модульные «петли» может быть описана либо закономерными последовательностями «внутренних координат» (межатомные расстояния ( $d_{ij}$ ); валентные ( $\alpha$ ) и торсионные ( $\theta$ ) углы), определяющих геометрию модуля, либо алгоритмами модульного дизайна — бинарные операции симметрии (трансляции или плоскость, двойная ось и центр симметрии), соединяющие модули в структуре.

### *Принципы модульного дизайна*

При обычных математических методах моделирования структур после присоединения отдельного атома к разным позициям в структуре рассчитываются, а затем сравниваются значения потенциальной энергии. В геометрическом методе модульного дизайна атомы присоединяются только к тем позициям в структуре, в которых было бы возможно замыкание модульных петель при минимальном присоединении атомов. Формально этот процесс можно представить как присоединение модульного полиэдра с той же ориентацией, что и у вновь образовавшегося модуля при присоединении к структуре отдельных атомов. Дизайн только из модульных полиэдров соответствует выполнению условия стабильности структур — полной стыковке всех связей, а следовательно, и возможности модульного разбиения вновь созданной структуры. Самоорганизация структур связанной воды происходит не из модулей, а за счет присоединения димеров к «выступам» гексациклов типа «твист-ванна». Но в этих структурах «внутренние координаты» ( $d$ ,  $\theta$ , и  $\alpha$ ) не имеют, в отличие от кристаллов, фиксированных значений, а дисконтинуальный характер структур допускает ветвление путей агрегирования модулей в них. Поэтому модульный дизайн по определенным алгоритмам, соответствующим бинарным операциям в сплетениях групп симметрии и по которым соединены модули в структуре, является эффективным методом создания стабильных структур.

Важным принципом модульного дизайна является необходимое условие наличия последовательности структурных состояний, связанных между собой либо возможными эволюционными изменениями их структур (например, в иерархических системообразующих структурах воды), либо во взаимных канализированных кооперативных переходах модулей и их кластеров.

Другим принципом является стремление к параметрическому, а не комбинаторному модульному дизайну, что позволяет создавать структуры аппроксимантов с максимально возможной симметрией, вплоть до длиннопериодических структур «кристаллических аппроксимантов», например, квазикристаллов всех четырех типов симметрии из одного и того же структурного инвентаря (кластеров модулей и иерархических модулей из них). Из этих аппроксимантов методом «регрессивной эволюции» («сверху вниз») можно получить все известные состояния аperiодических квазикристаллов вплоть до металлических стекол, сохраняя структурные инварианты низших уровней иерархии. Реконструкция высокосимметричных структур из менее упорядоченных («снизу вверх») невозможна.

*Возможны ли объективные критерии достоверности модульного дизайна?*

Опыт многочисленных успешных реализаций модульного дизайна разных типов структур обобщенной кристаллографии позволяет дать утвердительный ответ.

К числу таких критериев можно отнести:

1) возможность дедуктивного вывода детерминированных модульных структур по принципу «снизу вверх» из минимального числа структурных инвариантов при соблюдении геометрических законов структурной химии;

2) исходные инварианты (неевклидовы модули) должны быть выведены из модулей достоверно известных кристаллических структур путем их кооперативных преобразований: дисклинационным или диспирационным по параметрам простых или винтовых осей симметрии в пространственной группе исходной кристаллической структуры;

3) детерминированный характер структур должен определяться алгоритмами в виде модулей и их соединений по операциям симметрии сплетений групп, а в более простых случаях модульный алгоритм самоорганизации может быть выражен и через «внутренние координаты», широко применяемые в структурной химии;

4) возможность компьютерной реализации детерминированных модульных структур по алгоритмам модульного дизайна;

5) последовательность эволюционного и дедуктивного развития моделируемой структуры (например, в случае металлических икосаэдрических кластеров достоверность определяется всей последовательностью структур кластеров, соответствующих одному ряду «магических чисел»);

б) созданная модель должна соответствовать всей совокупности взаимосвязанных свойств по принципу «все или ничего»;

7) преемственность идеям и тенденциям развития современной науки.

*Поля охвата модульной обобщенной кристаллографии и возможности ее основного метода — модульного дизайна*

Впервые эту проблему поставили Дж.Бернал (Дж.Д.Бернал, С.Х.Карлайл (1968) «Кристаллография». Т. 13, № 5. С. 910–918). Целью создания такого обобщения кристаллографии является охват ее методами всего многообразия форм стабильных структур конденсированного состояния, включая и дисконтинуальные структуры. Для такого обобщения необходимо введение нового понятия, более общего, чем «решетка», но органически связанного с ним и отражающего универсальность метода самоорганизации структур всех форм стабильных состояний, включая и кристаллы. Введение понятия «кристаллический модуль, соответствующего разбиению структуры по всем химическим связям, а также возможность его кооперативных преобразований в неевклидовы модули путем введения дисклинаций или диспираций позволили реализовать модульное обобщение кристаллографии, используя модульный дизайн при сохранении метода симметрии. А.Маккей (Маккей А. // Кристаллография. 1981. Т. 26, № 5. С. 910–919; Маккей А. // Структурные исследования кристаллов. М., 1996. С. 435–445) интуитивно показал характерные особенности обобщенной кристаллографии, назвав ее «новой наукой о структуре вещества на атомном уровне»: 1) квазиидентичность; 2) локальные области симметрии; 3) искривленные (нелинейные) пространственные элементы морфологии; 4) конечное число элементов (кластеры), из которых образована структура; 5) агрегирование этих элементов путем включения других составляющих (компонент); 6) иерархическое агрегирование со многими уровнями и общие операции симметрии; 7) ветвящиеся пути агрегирования универсальных структурных единиц, приводящие к многообразию неравновесных структур обобщенной кристаллографии. Соответствие этим особенностям структур обобщенной кристаллографии будет далее показано на примерах модульных иерархических структур воды с системными свойствами. Кроме того, Дж.Бернал и А.Маккей показали возможные поля охвата обобщенной кристаллографии (Бернал Дж. Возникновение жизни. М., 1969. С. 338–350; A.L.Mackey (1986) // Symmetry: Unifying Human Understanding. P. 21–39 /Ed. I. Hargittai, Pergamon Press). Ме-

тод модульного дизайна позволил реализовать многое из того, что намечено Берналом и Маккеем: 1) двумерные мозаичные структуры иерархических систем [1]; 2) идеальные фрактальные самоподобные структуры с глобальной симметрией  $T-23$ ,  $D_3$ ,  $C_2$  [2]; 3) кристаллические структуры аппроксимантов квазикристаллов и произвольные от них апериодические структуры [1,3]; 4) самоорганизацию икосаэдрических металлических кластеров по разным алгоритмам [4]; 5) комбинаторная полимодульная структура аморфных тел [5,6]; 6) биомиметические нанокомпозиты [7]; 7) самоорганизацию бислойных мембран и монослоев Лэнгмюра на поверхностном слое воды [8,9]; 8) «золоточисленная метрика» и ее роль в образовании иерархических структур систем [1]; 9) спиральные модульные структуры связанной воды, по метрике и симметрии соответствующие известным формам ДНК и м-РНК [9,10]; 10) надмолекулярную самоорганизацию капсул вирусов на основе фрактальных структур воды [11]; 11) кооперативные солитоноподобные бимодульные дефекты в совершенных алмазоподобных кристаллах [12,13]; 12) взаимосвязь морфогенеза кристаллов с их модульным строением [14–16] и т.д. Кроме того, была установлена взаимосвязь основных элементов детерминированных структур связанной воды со структурой четырехмерного икосаэдра — политопа {3,3,5}, что подтверждает наличие надежного фундамента у модульного обобщения кристаллографии системообразующих иерархических структур связанной воды — матриц самоорганизации биосистем. Таким образом, методами модульного дизайна удалось реализовать программу, намеченную Дж. Берналом и А. Маккеем, в виде «полей охвата обобщенной кристаллографии».

Для этого раздела приведена библиография статей автора по реализации методами модульного дизайна вышеприведенных структурных объектов обобщенной кристаллографии.

*«Метрический отбор» структурных составляющих природного биоминерального нанокомпозита (кости) [7]*

Проявление метрического отбора нагляднее и убедительнее показать на примере костной ткани по следующим причинам: 1) структура костей стабильна, высокоупорядочена, подробно изучена дифракционными методами и электронной микроскопией; 2) в организме кости образуются из жидкокристаллических гелей коллагена, причем объем минеральной составляющей этого биокompозита — гидроксиапатита (*НАР*) практически равен объему «замещенной» им структурированной воды при постоянном содержании органическо-

го вещества; 3) метрика кристаллических структур *НАР* и коллагена позволяет показать не только соразмерность их структур со структурами воды, но и выявить ориентационные отношения, объясняющие закономерную укладку структурных составляющих в биоминеральном композите и его уникальные системные свойства.

Коллаген — основной фибриллярный белок соединительных тканей с регулярной аминокислотной последовательностью  $(Gly, X, Y)_n$ , где *Gly* — глицин, а позиции *X* и *Y* чаще всего занимают *Pro* (пролин), *Hyp* (гидроксипролин) и *Ala* (аланин). В левых одиночных спиральях  $3_{10}$  ( $\equiv 30/11$ ), расстояния вдоль оси спирали между остатками, группами  $-C=O$  или  $-NH$  основной цепи равно  $2,82 \text{ \AA}$ , почти соответствующее длине *H*-связи в воде. Группы  $-C=O$  и  $-NH$  одиночных спиралей  $3_{10}$  не образуют «внутриспиральных» *H*-связей, как в  $\alpha$ -спиральях, поэтому для достижения стабильности структуры спиралей коллагена они сильно гидратированы и объединяются в трехрядные правые спиральи ( $p6_322, c=84,6 \text{ \AA}$ ). Сильно гидратированные трехрядные спиральи коллагена образуют кристаллическую структуру ( $C2: a=173,5 \text{ \AA}; b=14,06 \text{ \AA}; c=25,31 \text{ \AA}$ ). В структуре *НАР* ( $Ca_3[PO_4]OH$ ) можно выделить по оси «*c*» два типа колонок, образованных тригональными призмами, заселенных ионами *Ca*. Эти колонки призм соединяются между собой  $[PO_4]$ -тетраэдрами. Метрика структуры *НАР*:  $C^6/m; \alpha=9,52 \text{ \AA}; c=6,88 \text{ \AA}$ .

Метрика спиралей  $30/11$  — основного элемента водных структур определяется трансляционно-осевым  $\alpha_i = c/30 = 44,4/30 = 1,48 \text{ \AA}$ , где *c* — период этой спирали и угловым  $\alpha_i = \frac{360^\circ \times 11}{30} = 132^\circ$  параметрами для длины *H*-связи, равной  $2,8 \text{ \AA}$ . Помимо истинного периода спирали ( $30/11$ ), равного  $\alpha_{(30)} = 1,48 \text{ \AA} \times 30 = 44,4 \text{ \AA}$  и  $\alpha_{(30)} = 132^\circ \times 30 = 3960^\circ = 0^\circ$  (по *mod*  $360^\circ$ ), возможны еще два значения псевдопериодов  $\alpha_{(11)} = 1,48 \text{ \AA} \times 11 = 16,28 \text{ \AA}$ ;  $\alpha_{(11)} = 132^\circ \times 11 = 1452^\circ = +12^\circ$  (по *mod*  $360^\circ$ ) и  $\alpha_{(19)} = 1,48 \text{ \AA} \times 19 = 28,12 \text{ \AA}$ ;  $\alpha_{(19)} = 132^\circ \times 19 = 2508^\circ = -12^\circ$  (по *mod*  $360^\circ$ ), причем  $\alpha_{(11)} + \alpha_{(19)} = \alpha_{(30)}$ . Минимальные отклонения  $\alpha_{(11)}$  и  $\alpha_{(19)}$  от нуля несут незначительны ( $\sim 1^\circ$  на одно звено спирали) и легко «компенсируются» за счет малых искажений слабых *H*-связей.

Метрики периодов решеток *НАР* и коллагена связаны целночисленными отношениями с вышеуказанными значениями периодов  $a_{(19)}$  и  $a_{(30)}$  спирали  $30/11$  воды:  $3a_{НАР} (3 \times 9,52 = 28,56 \text{ \AA}) \approx a_{(19)} (28,12 \text{ \AA})$ ,  $\Delta = 1,56\%$ ;  $4c_{НАР} (4 \times 6,88 = 27,52 \text{ \AA}) \approx a_{(19)} (28,12 \text{ \AA})$ ,  $\Delta = 2,36\%$ ;  $2b_{(coll)} (2 \times 14,06 = 28,12 \text{ \AA}) = a_{(19)} (28,12 \text{ \AA})$ ,  $\Delta = 0\%$ . Соразмерность метрик

решеток  $HAР$  и коллагена со структурами воды делает их соразмерными и между собой ( $4c_{HAР} \approx 2b_{(coll)}$ ;  $3a_{HAР} \approx 2b_{(coll)}$ ;  $25c_{HAР} (6,88 \times 25 = 172 \text{ \AA}) \approx a_{(coll)} (173,5 \text{ \AA})$ ,  $\Delta = 0,86\%$ , что особенно важно для образования направленных  $H$ -связей между кристаллами  $HAР$  и фибриллами коллагена в биоминеральном композите, после того, как структуры воды в гелях коллагена будут «замещены» растущими нанокристаллами  $HAР$ . Но при этом, как в интермедиатах биосистем, сохраняется такая же структура из волокон коллагена, которая была в исходных гелях (хрящах).

В цилиндрических слоях структуры остеона — элемента природной костной ткани — спирали коллагена ориентированы в слоях по двум взаимно перпендикулярным направлениям, что определяется соразмерностью периодов их решетки:  $a_{(coll)} (173,5 \text{ \AA}) \approx 7c_{(coll)}$  ( $25,31 \times 7 = 177,17 \text{ \AA}$ ),  $\Delta = 2,08\%$  и  $a_{(coll)} (173,5 \text{ \AA}) \approx 12b_{(coll)}$  ( $14,06 \times 12 = 168,8 \text{ \AA}$ ),  $\Delta = 2,75\%$ . Эти сетки из волокон, образующие структуру цилиндрических слоев остеона, «армированы» по соразмерным  $H$ -связям с кристаллитами  $HAР$ , удлинёнными по оси: с одной стороны слоя в ориентации  $[0001]$  ( $25c_{HAР} \approx a_{(coll)}$ ), а с другой — по перпендикулярному направлению  $[1010]$  ( $3a_{HAР} \approx 2b_{(coll)} = 3 \times 9,52 = 28,56 \text{ \AA}$  и  $2 \times 14,06 = 28,12 \text{ \AA}$ ). Следствием образования такой специфически упорядоченной структуры биоминерального композита является эластичность и высокая ударная вязкость кости, отсутствующая у образующих ее составляющих.

Библиография статей автора по реализации модульного дизайна пропенсивных структур-объектов нелинейной обобщенной кристаллографии:

1. *Bulienkov N.A.* (1998) Three Possible Branches of Determinate Modular Generalization of Crystallography in «Quasicrystals and Discrete Geometry», The Fields Institute Monographs. Vol. 10. P. 67–134. Editor J.Patera, Amer. Mathem. Soc., Providence, R.I.

2. *Бульенков Н.А.* (1990) Самоорганизация триплетных структур «связанной воды» в виде идеальных фракталов с глобальной симметрией  $D_3$  и  $T-23$  // Кристаллография. Т. 35, № 1. С. 147–154.

3. *Bulienkov N.A., Phan Van An* (2003) Crystalline types of the approximants of 3-dimensional quasicrystals of various symmetries. Proc. of 48<sup>th</sup> International SAMPE Symposium «Advancing Materials in the Glodal Economy — Applications, Emerging Markets and Evolving Technologies», May 2003, Long Beach, CA, USA. Book 1, p. 1191–1202.

4. *Бульенков Н.А., Тытик Д.Л.* (2001) Модульный дизайн икосаэдрических металлических кластеров // Изв. РАН. Сер. хим. Т. 50, № 1. С. 1–19.



5. Бульенков Н.А., Тытик Д.Л. (2001) Универсальность модульного строения и возможности модульного дизайна структур наноматериалов // Сб. трудов V Всерос. конф. «Физикохимия ультрадисперсных систем». Ч. I. Екатеринбург, 2001. С. 31–40.
6. Bulienkov, Phan Van An (1999) Modular Design of Nanocomposite Structures Based on  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and Mechanisms of Structural Transformations Therein, CD-Proceedings of 12<sup>th</sup> International Conference on Composite Materials, paper 658, p. 1–10, Paris, July 5<sup>th</sup>–9<sup>th</sup> 1999.
7. Phan Van An and Nikolai A. Bulienkov (2000) Vital Problems of Nanocomposite Structure and Possibilities of their Modular Design in «Materials Science Research International», vol. 6, 1, p. 22–28. (The Society of Materials Science, Japan).
8. Бульенков Н.А. (1988) Периодические дисперсионно-модульные структуры «связанной воды» — возможные конструкции, определяющие конформации биополимеров в структурах их гидратов // Кристаллография. Т. 33, № 2. С. 422–444.
9. Bulienkov N.A. (2003) The role of system-forming modular water structures in self-organization of biological systems // Journal of Molecular Liquids. 106, issues 2–3. P. 257–275.
10. Бульенков Н.А. (1991) Возможная роль гидратации как ведущего интеграционного фактора в организации биосистем на различных иерархических уровнях // Биофизика. Т. 36, № 2. С. 181–243.
11. Бульенков Н.А. (1990) Параметрическая фрактально-триплетная структура «связанной воды» замкнутых поверхностей и возможность надмолекулярной самоорганизации капсул вирусов на их основе // Кристаллография. Т. 35, № 1. С. 155–159.
12. Бульенков Н.А. (1986) Кооперативный (бимодульный) механизм образования различных преципитатов в бездислокационном кремнии // ДАН СССР. Т. 290, № 3. С. 605–610.
13. Осипьян Ю.А., Негрий В.Д., Бульенков Н.А. (1987) Характерные особенности люминесценции и новый тип конфигурационных дефектов в пластически деформированных кристаллах CdS // Изв. АН СССР. Сер. физ. Т. 51, № 9. С. 1458–1464.
14. Бульенков Н.А. (1998) Обоснование понятия «кристаллический модуль» // Вестн. Нижегород. ун-та им. Н.И.Лобачевского. Сер. «Физика твердого тела», посвящ. памяти акад. Н.В.Белова. С. 19–30.
15. Lobyshev V.I., Solovey A.B., Bulienkov N.A. (2003) Computer construction of modular structures of water // Journal of Molecular Liquids. 106, issues 2–3. P. 277–297.
16. Лобышев В.И., Соловей А.Б., Бульенков Н.А. (2003) Компьютерный модульный дизайн параметрических структур связанной воды // Биофизика. Т. 49, № 6. С. 1104–1112.