

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
ИНСТИТУТ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ

# Современные проблемы физической химии

*Научное издание*

Москва — 2005

УДК 541.1  
ББК 24.5  
С568

**Ответственные за выпуск**  
академик *Б.Ф.Мясоедов*, академик *А.Ю.Цивадзе*,  
доктор химических наук *Б.Г.Ершов*, доктор химических наук *Ю.И.Кузнецов*,  
доктор химических наук *А.Е.Чалых*, *А.А.Дяткина*

*Научное издание подготовлено и выпущено при финансовой поддержке  
Российского фонда фундаментальных исследований*

С568

**Современные проблемы физической химии. Modern Problems of Physical Chemistry.** – М.: Издательский дом «Граница», 2005. – 696 с., ил.  
ISBN 5-94691-139-2

Сборник содержит статьи, в которых проанализированы современное состояние и основные достижения Института по различным направлениям коллоидной химии и адсорбционных процессов, физической химии нанодисперсных и супрамолекулярных систем, проблем коррозии и противокоррозионной защиты, кристаллизации, радиохимии, химии высоких энергий и электрохимии. Тексты статей представлены в авторской редакции.

The collection contains articles, in which are analyzed modern state and basic achievements of the Institute in various directions including colloidal-surface phenomena and adsorption processes, physical chemistry of nanodimensional and supramolecular systems, problems of corrosion and corrosion protection, protective coatings, crystallization, radiation chemistry, high-energy chemistry, and electrochemistry. Articles are submitted in author's edition.

УДК 541.1  
ББК 24.5

ISBN 5-94691-139-2

© Институт физической химии  
Российской академии наук, 2005  
© Издательский дом «Граница», 2005

## ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	5
<i>А.Ю.Цивадзе</i> «60 лет Институту физической химии РАН»	6
<i>А.Ю.Цивадзе, Г.В.Ионова</i> «Развитие Периодического закона Д.И.Менделеева в области изучения необычных степеней окисления металлов»	17
<i>И.Г.Тананаев, Б.Ф.Мясоедов</i> «Современная радиохимия: основные этапы и перспективы развития»	40
<i>А.И.Русанов</i> «Фазовый и химический подходы к термодинамике наночастиц»	56
<i>Н.А.Бульёнков</i> «Роль модульного дизайна в изучении процессов системной самоорганизации»	71
<i>В.В.Арсланов, Л.С.Шейнина, М.А.Калинина</i> «Супрамолекулярная химия высокоорганизованных планарных систем»	94
<i>Г.Г.Маленков</i> «Компьютерное моделирование структуры и динамики атомно-молекулярных систем»	119
<i>В.И.Ролдугин</i> «Физикохимия коллоидных систем с фрактальной структурой»	137
<i>Н.Б.Урьев</i> «Физико-химическая динамика дисперсных систем и материалов»	166
<i>В.А.Ломовской</i> «Проблемы структурообразования в дисперсных системах»	193
<i>А.М.Емельяненко</i> «Изучение поверхностных явлений методами цифровой обработки видеоизображений межфазных границ»	210
<i>Л.Б.Бойнович</i> «Молекулярная структура жидкостей и поверхностные силы»	229
<i>Н.С.Поляков</i> , <i>А.А.Фомкин</i> «Адсорбция. Теория объемного заполнения микропор»	247
<i>Л.Д.Белякова, А.К.Буряк, О.Г.Ларионов</i> , «Применение хроматографии в физико-химических исследованиях»	264
<i>Р.Ш.Вартапетян, Е.В.Хозина</i> «Пористая структура жестких и деформирующихся адсорбентов и подвижность адсорбированных молекул»	287
<i>А.Е.Чалых, А.А.Щербина</i> «Переходные зоны в адгезионных соединениях»	311
<i>Е.М.Морозова</i> «Исследования в области синтеза полимеризационных пленкообразователей, получаемых эмульсионной или прямой радикальной полимеризацией мономеров акрилового ряда»	328
<i>Н.В.Чураев, В.Д.Соболев</i> «Поверхностные силы в нанодисперсиях»	345
<i>Б.В.Спицын, А.Е.Алексенко</i> «Развитие работ по химической кристаллизации алмаза в ИФХ РАН»	350

<i>Ю.М.Полукаров</i> «Электрокатализ в условиях совместного разряда ионов с образованием сплавов; структурные особенности синтезируемых сплавов, физические свойства» . . . . .	369
<i>М.Р.Тарасевич, В.А.Богдановская</i> «Селективные наноразмерные неплатиновые электрокатализаторы восстановления кислорода» . . . . .	378
<i>Н.Н.Андреев, Ю.И.Кузнецов</i> «Защита металлов летучими ингибиторами коррозии» . . . . .	390
<i>Ю.И.Кузнецов</i> «Ингибирование коррозии металлов в водных растворах» . . . . .	406
<i>А.И.Маршаков</i> «Взаимосвязь парциальных электродных реакций при коррозии металлов в кислых водных растворах кислородсодержащих окислителей» . . . . .	423
<i>Ю.В.Ляхоткин, Р.К.Чужко</i> «Химическое осаждение вольфрама, его карбидов и сплавов» . . . . .	439
<i>С.В.Олейник, Ю.И.Кузнецов</i> «Новые возможности получения защитных конверсионных покрытий на сталях и алюминиевых сплавах» . . . . .	453
<i>А.И.Щербаков, Г.П.Чернова</i> «Физико-химические основы повышения пассивируемости металлических материалов катодным легированием» . . . . .	467
<i>А.А.Михайлов, П.В.Стрекалов, Ю.М.Панченко</i> «Моделирование атмосферной коррозии металлов и коррозионное картографирование территорий» . . . . .	481
<i>В.Х.Алимов, А.Е.Городецкий, Р.Х.Залавутдинов, А.П.Захаров, В.М.Шарапов</i> «Некоторые физико-химические аспекты термоядерного материаловедения» . . . . .	498
<i>Б.Г.Ершов, А.В.Гордеев</i> «Диффузионно-кинетическая модель радиолиза воды и водных растворов» . . . . .	520
<i>Н.Б.Михеев, И.В.Мелихов, С.А.Кулюхин</i> «Процессы сокристаллизации в исследованиях физико-химических свойств радиоактивных элементов в различных средах» . . . . .	542
<i>А.М.Федосеев, А.Б.Юсов</i> «Взаимодействие ионов актинидов – U(VI), Np(IV),(V),(VI), Pu(IV),(VI) с силикат-ионами в водных растворах и синтез новых силикатных соединений актинидов» . . . . .	565
<i>А.А.Бессонов, М.С.Григорьев, Н.Н.Крот</i> «Синтез, изучение структуры и свойств новых соединений Pu (V)» . . . . .	580
<i>А.В.Пономарев, И.Е.Макаров, Б.Г.Ершов</i> «Электронно-лучевая конверсия газообразных углеводородов» . . . . .	599
<i>Е.В.Захарова, Е.П.Каймин</i> «Влияние техногенно-геохимических процессов на миграцию радионуклидов в геологической среде, вмещающей хранилища радиоактивных отходов» . . . . .	618
<i>В.М.Гелис, Э.А.Чувелева, Г.Б.Маслова, Л.А.Фирсова, В.В.Милютин, О.В.Харитонов, С.П.Кудрявцева, Е.А.Козлитин</i> «Современные сорбционно-хроматографические методы извлечения и разделения радионуклидов» . . . . .	633
<i>Н.А.Данилов, Ю.С.Крылов, Г.В.Корпусов, Г.В.Костикова</i> «Экстракционные методы в процессах изготовления детекторов нейтрино» . . . . .	651
<i>И.М.Косарева, М.К.Савушкина</i> «Научное обоснование метода глубинного захоронения жидких РАО» . . . . .	666
<i>В.Ф.Перетрухин, К.Э.Герман, А.Г.Масленников, А.А.Козарь</i> «Развитие химии и технологии технеция» . . . . .	681

Н.А. Бульёнков

## РОЛЬ МОДУЛЬНОГО ДИЗАЙНА В ИЗУЧЕНИИ ПРОЦЕССОВ СИСТЕМНОЙ САМООРГАНИЗАЦИИ<sup>1</sup>

### Введение

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» [1]. 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 объективной реальности, которая может быть реализована, в частности, методами нанотехнологий. В соответствии с известным высказыванием Г.Лейбница о математике как науке о возможных мирах, существенно изменится как роль математики в развитии теоретических основ естественных наук и технологий будущего, так и характер междисциплинарных взаимодействий естественных наук. Нанотехнология, в сущности, является «наукой конструирования». Она дает возможность, используя природные законы и процессы, конструировать и создавать на атомно-молекулярном уровне вещества «по заказу», которые раньше не существовали в природе. Важнейшими объектами становятся иерархические системы, а изучение процессов их самоорганизации и возможностей управления ими на атомно-молекулярном уровне будет отличительной чертой науки и технологий в XXI веке.

### 1. Тенденции развития нанотехнологий на современном начальном этапе

На этом этапе еще не до конца осознано, что нельзя найти выход из глобального «техногенного» кризиса современной цивилизации, принципиально не изменив способа научного мышления. Дело в том, что все имеющиеся фундаментальные научные заделы, созданные на основе методологии современной научной рациональности, практически уже реализованы. По мнению Г.Башляра<sup>2</sup>, наука реализовала свои теоретические схемы в проверочных экспериментах, сверяя свои представления с реальностью. Наука на новом этапе своего развития 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» [2]. Далее Г.Башляр пишет: «...иначе говоря, вслед за философией «как» появляется научная философия «а почему бы нет». Конструируя мир по образцу разума, научная деятельность будет целиком посвящена реализации рациональных ансамблей и будет обучаться на том, что конструирует. Поэтому целью новой науки будет не описание данности, а конструирование и предъявление к последующей реализации классов возможностей». Новый тип рациональности откроет «путь для ускоренного развития

<sup>1</sup> Эта статья будет опубликована в журнале «Биофизика» №3 за 2005 г.

<sup>2</sup> Гастон Башляр (1884–1962) – химик, физик, философ и историк науки, член Парижской Академии, директор Института истории наук. Основные труды: «Новый научный дух» (1934), «Философское отрицание» (1940) вошли в сборник «Новый рационализм».

антидогматичной, рискующей науки, потребует решительной перестройки мысли и смелых поисков» [2]. В современных взглядах на тенденции развития нанотехнологии наглядно отражается сосуществование двух типов рациональности: современной неклассической с господствующими квантово-механическими статистическими представлениями и грядущей постнеклассической (детерминистской), что особенно проявляется в двух различных стратегиях развития нанотехнологии на начальном этапе.

### *1.1. Стратегия «наноминиатюризации» по принципу «сверху вниз»*

Свое видение тенденции развития технологии будущего в канун 1960 года предложил Р.Фейнман в своей знаменитой речи, основным тезисом которой было «приглашение в новый наномир физики». «Поведение отдельных атомов подчиняется законам квантовой механики и не имеет аналогов в макроскопическом масштабе, поэтому «внизу» мы постоянно будем наблюдать новые закономерности и эффекты, предполагающие новые варианты использования. Известные нам принципы физики не запрещают создавать объекты «атом за атомом». Манипуляция атомами 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» [3]. Из этих прогнозов Р.Фейнмана оправдались лишь: 1) «новые закономерности и эффекты, возникающие по мере уменьшения размеров вещества ( $\leq 100$  нм)» и 2) «новые варианты использования» этих квантоворазмерных эффектов. Но главная проблема сборки из наночастиц материалов и устройств остается нерешенной в рамках представлений о возможности сборки наночастиц соответствующими манипуляторами, несмотря на то, что в 80-х годах прошлого века были созданы «глаза» и «пальцы» для создания и изучения таких материалов и устройств (сканирующие туннельные и атомно-силовые микроскопы). Хотя проблема «механической» сборки материалов и устройств из наночастиц осталась нерешенной, тем не менее, возникла иллюзия возможности перспективы развития нанотехнологии как дальнейшего продолжения стратегии «углубления» микроминиатюризации, целиком оправдавшей себя в электронике. Для развития нанотехнологии по такому сценарию достаточно обобщения и переформулировки уже имеющихся в современной науке понятий и представлений. «Но уже сейчас понятно, что в идеальном варианте (при использовании принципов самоорганизации структуры вещества на атомно-молекулярном уровне), такие материалы должны создаваться по принципу «снизу вверх», в отличие от практикуемого в настоящее время подхода к ультраминиатюризации «сверху вниз» (т.е. когда более мелкие объекты создаются из крупных)» [4]. Поэтому способность управлять самоорганизацией структуры материи становится отличительной чертой естественных наук и технологий XXI века.

### *1.2. Самоорганизация молекулярных ансамблей по принципу «снизу вверх» (супрамолекулярная химия)*

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 обычно начинается со структурной формулы соединения, образованного исключительно сильными главновалентными связями, но прогнозировать как будут взаимодействовать органические молекулы между собой уже за счет слабых межмолекулярных сил (5-7 ккал/моль) весьма трудно вследствие того, что большинство из этих сил ненаправленные. С помощью различных субстратов (ионы металла и т.д.) химикам удалось «объединить» органические молекулы в супрамолекулы за счет слабых межмолекулярных взаимодействий, которые проявляют специфические для биологических систем признаки распознавания и реагирования. Достижения супрамолекулярной химии за последние два десятилетия впечатляют. «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. И 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 био-

логии, охватывающая лишь системы, реально существующие в природе» [5]. Если сравнить биологию и супрамолекулярную химию по двум параметрам (сложности и разнообразию объектов), ясно, что 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 и 2) по бесконечному числу комбинаций, которыми можно соединять основные фрагменты в новые и новые структуры. Поэтому 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 их возможную химическую эволюцию. (Вопрос о том, почему невозможны формы жизни на основе супрамолекул, будет обсужден специально в разделе 4.6). Крупным недостатком супрамолекул по сравнению с молекулярными биосистемами и биомолекулами является то, что их очень редко удается закристаллизовать, а в крупные ансамбли их можно объединить только в жидких средах.

### *1.3. Самоорганизация ансамблей в жидких средах из органических молекул и супрамолекул (монослои Лэнгмюра, бислойные мембраны, мицеллы, жидкие и коллоидные кристаллы)*

В образовании этих ансамблей большое значение имеют водородные  $H$ -связи, ионные и гидрофобные взаимодействия молекул с растворителем, а также между собой. Подобные упорядоченные молекулярные ансамбли используются в современных технологиях электроники и в нанотехнологиях и имеют большое значение в самоорганизации биосистем. Жидкие биосистемы значительно разнообразнее и сложнее по строению вследствие их многоуровневого иерархического строения, хотя, в отличие от тех, что используются в нанотехнологии, они самоорганизуются только на основе универсального растворителя – воды, общего растворителя для всей живой материи. Природа самоорганизации молекулярных структур в жидких средах мало изучена. Как ни странно может показаться, но самоорганизацию таких систем перспективнее и удобнее изучать на жидких биосистемах, так как: 1) для структуры такого растворителя, как вода, характерны направленные тетраэдрические  $H$ -связи, что сильно облегчает задачу моделирования ее структуры; 2) очевидно, что те же направленные  $H$ -связи определяют взаимодействие гидрофильных групп органических молекул ансамблей с растворителем (водой) и 3) иерархический характер строения жидких биосистем сильно ограничивает число возможных моделей, на основе которых можно было бы создать модели структур последующих уровней. Очевидно, что для создания структурной теории самоорганизации биологических и биомиметических систем, которые найдут применение в нанотехнологиях будущего, необходимо изучать теоретические возможности молекул воды образовывать разнообразные иерархические структуры, на основе которых могла бы реализоваться иерархическая системная самоорганизация (см. разделы 4.3 – 4.6).

### *1.4. Самоорганизация по принципу «снизу вверх» кристаллических структур твердых нано- и мезопористых материалов (crystal engineering, scale solids frameworks [6,7], low density open frameworks porous solids [8])*

Другим важным достижением стратегии «снизу вверх» является конструирование и синтез кристаллических структур из определенных «молекулярных блоков» в виде небольших молекул. Образцами для дизайна таких структур являются повторяющиеся фрагменты (модули) простых структур неорганических соединений, таких, как  $ReO_3$ ,  $NbO$ ,  $CaF_2$  и т.д., в виде замкнутых двумерных петель, которые, в свою очередь, образуют связанные трехмерные полиэдры, не содержащие внутри себя никаких атомов. Симметрия «молекулярных блоков» должна соответствовать симметрии атомов в модульном полиэдре исходной структуры, выбранной в качестве прототипа. Принципиальное отличие исходных структур от конструируемых из «молекулярных блоков» по их подобию заключается в том, что если первые самоорганизуются в природе произвольно из отдельных атомов, то вторые только из молекул «блоков», при тщательной подборке веществ на каждой последовательной стадии многоступенчатого синтеза и при соблюдении необходимых условий. Поэтому такие структуры не могут самопроизвольно образовываться в природных условиях. Структура их прототипов однозначно устанавливается по данным рентгеноструктурного анализа. «Строительные блоки» могут быть в виде не только органических молекул, но и неорганических, и могут комбинироваться в гибридные структуры. В таких структурах используются только главновалентные

связи, и, хотя эти структуры стабильны, они не соответствуют минимуму энергии. Какие бы размеры ни имели «строительные» блоки, их положение (по симметрии) в конструируемой структуре будет тем же, что и в «прототипе», но по размерам элементарной ячейки решетки они будут значительно больше («Scale Crystal Chemistry»), (рис.1(м)-(у)) [6,7]. Структурные мотивы  $\text{ReO}_3$  (м) и  $\text{NbO}$  (с), по структурам которых созданы модули (п), (у) из «молекулярных блоков» (н), (о), (т), подобны исходным модулям – «прототипам» (м), (с). Кристаллическая мезопористая структура  $[\text{Zn}_4\text{O}(\text{O}_2\text{-C}_6\text{H}_4\text{-C-O}_2)_3]$  с модулем (п) показана на рис. 1(у) [6,7].

Свободный объем в структуре подобных мезопористых материалов может достигать 77,5%, и они способны адсорбировать молекулы  $\text{CH}_4$  до  $240 \text{ см}^3/\text{г}$  при 298К и 360 атм. Размеры пор в различных формах структур синтетических нанопористых алюмофосфатов ( $\text{AlPO}_4 - 11$ ,  $\text{AlPO}_4 - 5$ ,  $\text{VPI} - 5$  достигают соответственно 7; 8,5 и 11 Å) [8]. Помимо большого практического значения веществ с пористой структурой (катализ, сорбция, нанореакторы, разделение смесей и т.д.), это направление нанотехнологии расширяет номенклатуру новых соединений с кристаллической структурой. Число возможных кристаллических типов минералов и равновесных фаз, выделенных при изучении равновесных диаграмм состояния, оказалось весьма ограниченным, а все перспективные в практическом отношении вещества уже нашли свое применение в технике.

## 2. Модульный дизайн – основной метод динамической обобщенной кристаллографии

Вышеописанный (в разделе 1.4) метод дизайна кристаллических пористых структур по-настоящему не затрагивает проблемы структурной самоорганизации, так как считалось само собой разумеющимся, что наличие решетки определяет дальний порядок структуры кристалла и его симметрию. После изучения особенностей геометрии локального окружения в структуре кристаллов оказалось, что локальная упорядоченность, обусловленная локальной связностью структуры в результате действия химических связей, позволяет создавать протяженные периодические структуры [9].

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, является результатом локальных взаимодействий атомов [10]. Вновь введенное понятие «кристаллический модуль» [9,11], отражающий 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 [9]. На базе основного метода обобщенной кристаллографии – модульного дизайна можно создать потенциально возможные структуры, которые могут быть реализованы в нано- и биосистемах [12-14].

### 2.1. Исходные евклидовы кристаллические модули и их кооперативные преобразования в неевклидовы модули

В кристаллических структурах по структурным мотивам Н.В.Белова, изображенных в координационных полиэдрах [15], можно однозначно выделить минимальные повторяющиеся фрагменты – «кристаллические модули» («кванты» кристаллического состояния или «кристаллические молекулы» по Е.С.Федорову [16]), 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: 1) разбиению по всем химическим связям, включая и слабые, и 2) полной связанности структур, что соответствует более общему условию 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

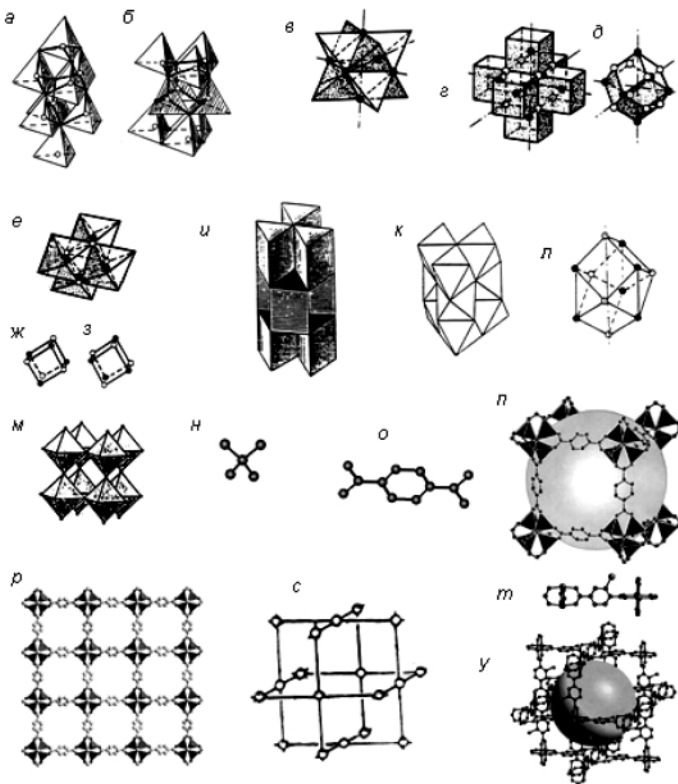


им кристаллические модули вюртцита (б), сфалерита (а), флюорита (в)-(д), NaCl (е)-(з) и NiAs (и)-(л). Координационные полиэдры катионов и анионов в структурах CaF<sub>2</sub> (в), (г) и NiAs (и), (к) различны и поэтому для них существуют два типа структурных мотивов, в зависимости от того, какими полиэдрами они образованы. Тем не менее, для каждой из этих структур существует только один тип кристаллического модуля (ромбододекаэдр в CaF<sub>2</sub> (г) и полиэдр комбинации тригональной бипирамиды с дитригональной призмой в NiAs (л)). Кроме модулей этих простых кристаллических структур, представлены структурные мотивы ReO<sub>3</sub> (м) и NbO (с), по структурам которых созданы модули (п), (у) из «молекулярных блоков» (н), (о), (т), подобные исходным модулям – «прототипам» (см. раздел 1.4).

Введение понятия «кристаллический модуль» изменяет взгляд на причину стабильности, так как внимание акцентируется не на минимуме энергии, а на полной связанности структуры модуля. Именно поэтому в качестве «прототипов» дизайна мезопористых неравновесных кристаллических структур выбраны связанные структуры модулей, что обеспечивает возможность дальнейшего трехмерного развития модульных периодических структур до макроскопических размеров за счет поочередного завершения трехмерных модульных петель по всем трем направлениям трансляций. Модульное строение является универсальным для всех типов стабильных структур, включая и 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 ( $\alpha$ ) и торсионные ( $\theta$ ) 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 ими трехмерного евклидова пространства, ненапряженный

характер образованной ими равновесной кристаллической структуры и линейную морфологию кристаллов (прямоугольную и плоскогранную). Кооперативное преобразование евклидовых кристаллических модулей в неевклидовы модули нелинейных структур искривленных пространств постоянной кривизны возможно путем введения в их замкнутую оболочку соответствующих дисклинаций или диспираций<sup>1</sup>. Например, кристаллические модули тетраэдрических структур алмаза и льда I<sub>H</sub> можно



**Рис. 1.** Структурные мотивы кристаллических структур: (а) – сфалерита (алмаза); (б) – вюртцита (льда I<sub>H</sub>); (в), (г) – флюорита; (е) – NaCl; (и), (к) – NiAs; (м) – ReO<sub>3</sub>; (с) – NbO и соответствующие им модули: (а) – сфалерита; (б) – вюртцита; (д) – флюорита; (ж), (з) – NaCl; (л) – NiAs; (с) – NbO [11]. Молекулярные «строительные блоки»: (н) – Zn<sub>4</sub>O; (о) – бензенидикарбоксилат (BDC) O<sub>2</sub>-C-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>-C-O<sub>2</sub> и (т) – сложная органическая молекула, из которых синтезированы, подобные модулям – «прототипам» (м), (с), модули (п), (у) кристаллических нанопористых структур типа [Zn<sub>4</sub>O(BDC)<sub>3</sub>] (р) [6].

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

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 II, можно объединить в кластеры (по сплетениям групп симметрий), а эти кластеры — в одномерные кристаллические стержни, из которых можно образовать дисконтинуальные системообразующие иерархические фрактальные структуры.

## 2.2. Кооперативные преобразования тетраэдрических кристаллических модулей в неевклидовы модули регулярных дисконтинуальных структур

Плотнейшую гранецентрическую кубическую (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 разбиваются только на почти правильные тетраэдры (углы между ребрами мало отличаются от  $60^\circ$ , а сами ребра слегка искривлены). Из двух тетраэдров и одного октаэдра можно образовать ромбоэдрический модуль рис.2 (а), который одновременно является и примитивной R-ячейкой в кубической кристаллической упаковке шаров, что подтверждает органическую взаимосвязь понятий «модуль» и «решетка» в классической кристаллографии [9]. Дисклинационные преобразования кристаллического R-модуля ГЦК-упаковки (рис.2 (а)) превращают его в так называемые «полиэдры Бернала» (рис.2 (д) — (ж)) — модули аморфной структуры статистической упаковки из равновеликих шаров с постоянной плотностью [17]. На рис.2 (б) — (г) показаны модули регулярных плотных упаковок шаров в  $S^3$ - и  $H^3$ - пространствах, которые образованы только тетраэдрическими симплексами [9]. Из R-модуля ГЦК-упаковки путем введения «базисных» атомов можно получить модуль кристаллической структуры алмаза (сфалерита), представляющей две ГЦК-структуры, вставленные друг в друга и смещенные на длину межатомной связи в направлении  $\langle 111 \rangle$  (рис.2 (д)). В кристаллическом модуле алмаза, состоящем из 14 атомов и 7 гексациклов с конформацией «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  $\theta = 60^\circ$  [9,18]. Из гексагональной плотнейшей упаковки с тем же R-модулем (рис. 1 (а)) подобным образом можно получить модуль гексагональной алмазоподобной структуры вюртцита

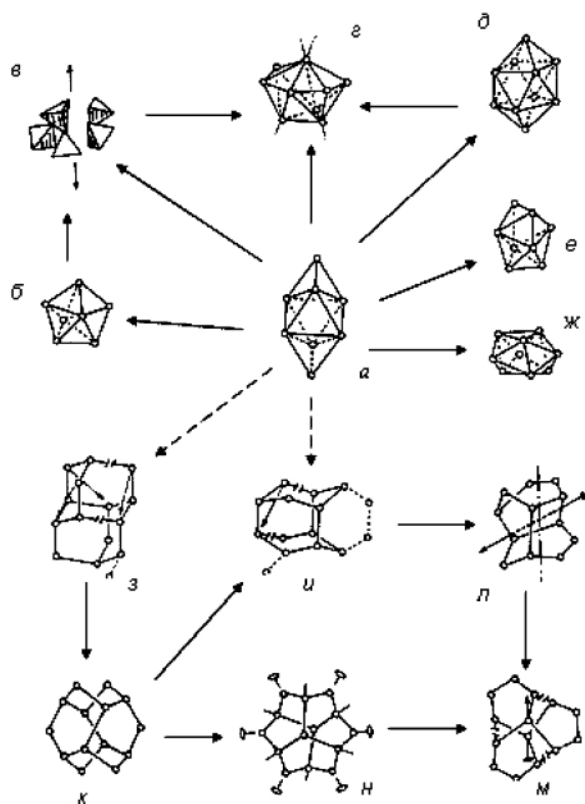


Рис. 2. (а) — (и). Канализированная система из кристаллических евклидовых модулей (а), (з), (и), (н) и преобразованных неевклидовых модулей [9]: (а) — R-модуль ГЦК решетки; (б) — (г) — модули регулярных политопов из плотных упаковок шаров в  $H^3$ - и  $S^3$ - пространствах; (д) — (ж) — модули аморфной структуры статистически упакованных равновеликих шаров с постоянной плотностью; (з) — кристаллический модуль алмаза; (и) — кристаллический модуль льда II; (к) — (м) — преобразованные неевклидовы тетраэдрические модули; (н) — кристаллический модуль плотной модификации Si «BC-8».

Рис. 2. (а) — (и). Канализированная система из кристаллических евклидовых модулей (а), (з), (и), (н) и преобразованных неевклидовых модулей [9]: (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 II; (к) — (м) — преобразованные неевклидовы тетраэдрические модули; (н) — кристаллический модуль плотной модификации Si «BC-8».

(льда ІН) (рис. 2 (и)). Диспирационные « $\pm 60^\circ$ » преобразования модулей, содержащие дисклинационную ( $\alpha_N$ ) и трансляционную ( $\tau_n$ ) компоненты винтовых осей симметрии, содержащихся в пространственных группах их кристаллов, позволяют кооперативно преобразовать кристаллические модули алмаза (рис. 2 (д)) и льда ІН (рис. 2 (и)) в неевклидовы модули (рис. 2 (к)) и (рис. 2 (л)) соответственно без значительных искажений в их структуре по сравнению с кристаллическими [9,19]. В свою очередь, возможно кооперативное преобразование этих неевклидовых модулей в кристаллический модуль плотной модификации Si «BC-8» [20] (рис. 2 (н)) и в модульный кластер – элемент структуры связанной воды [19] (рис. 2 (м)). Последний кооперативно может преобразовываться в додекаэдрический  $5^{12}$ -модуль кристаллических структур газогидратов.

Таким образом, возможны кооперативные взаимные преобразования модулей тетраэдрических кристаллических структур алмаза, льда ІН, плотной модификации Si «BC-8» и кристаллогидратов в неевклидовы модули, причем эти преобразования образуют замкнутую динамическую канализированную систему [9] вследствие весьма жестких условий полной стыковки тетраэдрических связей в стабильных структурах.

### *2.3. 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 совмещены с метрикой трехмерного евклидова пространства, которое характеризуется тем, что сумма углов треугольника ( $\alpha + \beta + \gamma$ ) всегда равна  $180^\circ$ , 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  $180^\circ$  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 [21]. Следовательно, при росте атомных 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 центральным силам, поэтому они прямолинейны, их энергия сильно изменяется в зависимости от изменения их длины по сравнению с равновесными. 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 [9, 22] (см. раздел 4.2).

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 [23], либо из нескольких типов преобразованных неевклидовых модулей [24]. 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 нанокристаллов (нк) в пленках аморфного кремния ( $a$ -Si) с образованием нанокомпозита (нк +  $a$ -Si) [25]. Аморфное состояние можно рассматривать как стабильное активированное состояние, способное поглощать энергию локальными напряженными структурами, образованными 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].

#### 2.4. Принципы модульного дизайна и объективные критерии его достоверности

При обычных методах моделирования структур после присоединения отдельного атома к разным позициям в структуре рассчитываются значения потенциальной энергии, а затем сравниваются с предыдущими. В модульном дизайне атомы присоединяются только к тем позициям в структуре, в которых было бы возможно замыкание модульных петель при минимальном присоединении числа атомов. Формально этот процесс можно представить как присоединение модульного полиэдра с той же ориентацией, что и у вновь образовавшегося модуля после присоединения к структуре отдельных атомов, завершивших полиэдр модуля. Дизайн из модульных полиэдров соответствует выполнению условия стабильности структур – полной стыковке всех связей, а, следовательно, и возможности модульного разбиения по всем связям вновь созданной структуры. В симметричных структурах модули соединяются между собой обычно по смежным граням, ребрам и вершинам, причем таким соединениям однозначно соответствуют бинарные операции симметрии  $m$ ,  $\bar{1}$  и  $2$ ).

Самоорганизация структур связанной воды происходит не из модулей, а за счет присоединения димеров к «выступам» (t-h)-гексациклов. Но внутренние координаты ( $d$ ,  $\Theta$  и  $\alpha$ ) не имеют, в отличие от кристаллов, точных фиксированных значений, а дисконтинуальный характер структур воды из преобразованных неевклидовых модулей допускает ветвление путей их агрегирования. Поэтому модульный дизайн по определенным алгоритмам соединения модулей в структуре является эффективным методом создания структур всех известных стабильных форм конденсированного состояния. Важным принципом модульного дизайна является необходимое условие наличия последовательности структурных состояний, связанных между собой, либо возможными эволюционными изменениями их структур, как в иерархических системообразующих структурах воды [12, 19, 27], так и в икосаэдрических металлических кластерах [28] и квазикристаллах [9, 29].

Другим принципом является стремление реализовать параметрический, а не комбинаторный модульный дизайн, что позволяет создавать структуры с максимально возможной симметрией, вплоть до длиннопериодических структур «кристаллических аппроксимантов», например, квазикристаллов всех четырех известных типов симметрии из одного и того же структурного инвентаря (кластеров из модулей и иерархических модулей из них) [29]. 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.

Таким образом, модульный дизайн является основным методом модульной динамической обобщенной кристаллографии, поскольку метод симметрии – основной метод классической кристаллографии – сохранился как при создании локальных структур самих модулей, так и в их соединениях между собой при дизайне структур. В отличие от классической кристаллографии, кристаллические структуры которой можно изучать достоверно экспериментальными методами, модульная динамическая кристаллография может изучать структурные процессы формообразования, эволюции, самоорганизации и кооперативных превращений, изучение которых невозможно современными методами. Опыт многочисленных успешных реализаций модульного дизайна разных типов структур обобщенной кристаллографии (см. раздел 2.5) позволяет говорить о возможности существования критериев его достоверности. 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) возможность компьютерной реализации детерминированных модульных структур по алгоритмам модульного дизайна;

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

4) преемственность идей и соответствие тенденциям развития современной науки;

5) 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;

6) детерминированный характер структур должен определяться алгоритмами в виде модулей и их соединений по операциям симметрии сплетений групп, а в случае более простых структур модульный алгоритм самоорганизации может быть выражен и через «внутренние координаты», широко применяемые в структурной химии [28];

7) созданная модель объекта исследования должна соответствовать всей совокупности его взаимосвязанных свойств по принципу «все или ничего».

### *2.5. Поля охвата обобщенной кристаллографии, ее характерные особенности и реализация возможностей модульного дизайна*

Впервые эту проблему поставили Дж.Бернал и его ученик А.Маккей [10, 30-32]. Целью создания такого обобщения кристаллографии является охват ее методами всего многообразия форм стабильных структур конденсированного состояния. Для такого обобщения необходимо введение нового понятия «модуль», более общего, чем «решетка», отражающего универсальность метода самоорганизации структур всех форм стабильных состояний, включая кристаллы. А.Маккей [31] перечислил 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 с регулярным строением; 4) конечное число элементов (кластеры), из которых образована структура; 5) агрегирование этих элементов путем включения других составляющих (компонент); 6) иерархическое агрегирование со многими уровнями с общими операциями 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. Метод модульного дизайна позволил реализовать многое из того, что было намечено ими: 1) двумерные мозаичные структуры иерархических систем [9]; 2) идеальные фрактальные самоподобные структуры с глобальной симметрией  $T_{23}$ ,  $D_3$ ,  $C_2$  [22]; 3) кристаллические структуры аппроксимантов квазикристаллов и производные от них апериодические структуры [9, 29]; 4) самоорганизация икосаэдрических металлических кластеров по разным алгоритмам [28]; 5) комбинаторная полимодульная структура аморфных тел [9, 23]; 6) биомиметические наноконкомпозиты [14]; 7) самоорганизация бислойных мембран и монослоев Лэнгмюра на поверхностном слое воды ( $G_2^3$ -P622) [12, 33]; 8) «золоточисленная метрика» и ее роль в образовании иерархических структур систем [27]; 9) спиральные модульные структуры связанной воды, по метрике и симметрии соответствующие метрике периодических биополимеров и являющиеся матрицами для их самоорганизации [12, 19]; 10) кооперативные солитоноподобные бимодульные дефекты в совершенных алмазоподобных кристаллах [26,34]; 11) взаимосвязь морфогенеза кристаллов с их модульным строением [11] и т.д. Кроме того, была установлена взаимосвязь основных элементов детерминированных структур связанной воды [9] со структурой тетраэдрически «декорированного» четырехмерного икосаэдра – политопа {3,3,5} [35], что подтверждает наличие надежного фундаментального обоснования у модульного обобщения кристаллографии системообразующих тетраэдрических иерархических структур связанной воды – матриц самоорганизации биосистем. Компьютерная реализация системообразующих структур связанной воды возможна только с использованием принципов модульного дизайна [36].

Применение модульного дизайна для создания структур разных форм стабильного неравновесного состояния показывает не только эффективность модульной обобщенной кристаллографии, но и общность процессов формообразования в живой и неживой природе на основе универсального модульного механизма самоорганизации и общего критерия структурной стабильности (связанности).

В отличие от жидких тел, структурные формы стабильного конденсированного состояния сохраняют структуру и форму значительное время. Но от кристаллов их отличает отсутствие глобального минимума свободной энергии, нелинейность форм и состояние относительно устойчивого неравновесия. По этой причине минимум свободной энергии для апериодических и неравновесных структур не может быть критерием их устойчивости.

### **3. Имманентные структуры воды в номогенезе биосистем**

Биологи первыми сформулировали эмпирические принципы самоорганизации систем, которые проявляются на всех иерархических уровнях: а) «система систем», б) «узнавание» и в) «все или ничего» [37]. 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 [38] и, следовательно, отсутствием глобального минимума энергии. Все три принципа утверждают детерминированный, а не статистический (случайный) способ самоорганизации систем.

Кроме того, для самоорганизации иерархических систем характерны еще два важных условия: 1) 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) [39] (см. раздел 4.4) и 2) интеграция частей в целое возможна только за счет слабых связей, необходимых для управления системой с помощью «обратных связей» при ее взаимодействии с внешней средой [37]. Слабые связи, объединяющие части системы, позволяют реагировать на внешние воздействия, существенно не изменяя строения частей системы в соответствии с принципом, действующим в природе – «единство целого при свободе частей» [40]. Кроме того, роль слабых сил в самоорганизации систем важна еще и потому, что при сборке иерархических систем происходит изменение строения сложившихся уровней под влиянием вновь возникающих. Следует отметить, что характерной чертой будущих законов физики Р.Фейнман считал неизбежное «ослабление симметрии» [41].

### 3.1. Существующие подходы к изучению самоорганизации систем

Возможны два подхода в методологии изучения систем: редукционизм (изучение строения целого путем изучения строения частей) и системный интегратизм (познание возможно только если рассматривать проблему в целом, поскольку целое есть нечто большее, чем сумма частей). Помимо того, эти подходы различаются по взглядам на механизм самоорганизации систем (статистический или детерминированный). Современные статистические (континуальные) теории системной самоорганизации (диссипативные структуры, «динамический хаос» и аттракторы в синергетике) [42] не рассматривают конкретного атомно-молекулярного строения частей систем. Кроме того, в этих подходах нельзя учесть роль важнейшей структурной составляющей биосистем – «связанной воды», образованной исключительно слабыми направленными Н-связями. В итоге доминирования статистического подхода проблемы биологии можно разделить на два класса: те, которые современная биология в состоянии решить и те, в отношении которых она бессильна. «По-видимому, в нашем теперешнем складе мышления отсутствует что-то очень важное, целое измерение, без которого нельзя найти подход к этим проблемам. Вода не только *mater* жизни, но и *matrix* жизни, и биология, возможно, не преуспела до сих пор в понимании наиболее очевидных функций из-за того, что она сосредоточила свое внимание на веществе в виде частиц, отделяя их от двух матриц – воды и электромагнитного поля» [43].

Детерминированный характер самоорганизации систем связан с концепцией имманентности форм и их эволюции, закономерный характер которой определяется неким внутренне присущим строением. А.Уайтхед<sup>1</sup> считает, что «концепция имманентности была бы применима только в том случае, если бы нам удалось получить достоверную метафизическую теорию, согласно которой характер природы объектов зависит от их взаимных связей, а сама взаимосвязь определяется их внутренней природой» [44].

Основной трудностью создания модели детерминированной морфологии эволюции и самоорганизации биосистем является их взаимопроникающее на всех иерархических «уровнях» гетерогенное строение из органических и водной структурных составляющих, причем для изучения последней в настоящее время не существует прямых экспериментальных методов. Как найти выход из этого положения? Биологами отмечалось повторение паттернов форм в живой природе как у растений, так и у организмов (миметия), существующих в совершенно различных условиях и далеких по своему положению на эволюционном дереве. Это явление совершенно не согласуется с теорией дарвиновской эволюции, движущей силой которой является случайный по своей природе «естественный отбор», ответственный за формирование [45]. А.А.Любищев, один из творцов современной теории номогенеза (закономерной эволюции), утверждал, что «законы формы имеют не историческую (филогенетическую), а номогенетическую природу, и эти законы, как платоновские идеи, существуют вне времени. Отсюда – понимание роли симметрии и рациональности в строении организма. Логика этих рассуждений приводит с неизбежностью к выводу, что в эволюции нет подлинного новообразования форм» [46]. Обнаружив морфологическое сходство морозных узоров на стекле с растительными формами, А.А.Любищев окончательно пришел к выводу о решающей роли имманентных структур воды в самоорганизации форм живой природы, а развитие теоретиче-

<sup>1</sup> А.Уайтхед (1861–1947) – выдающийся математик, логик и философ. Совместно с Б. Расселом создал основополагающий труд по математической логике – трехтомную «Principia Mathematica».

ской биологии связывал с созданием новой (обобщенной) неевклидовой кристаллографии [47]. Ее отличие от классической (линейной, континуальной) определяется двумя признаками: а) нелинейностью и б) дисконтинуальностью, т.е. отказом от принципа сплошного заполнения пространства повторяющимися элементами структуры и возникновением нелинейных форм (спирали, скрученные ленты, линейчатые поверхности, сферы и т.д.). Системные структуры с детерминированным упорядоченным строением можно создать, только используя симметричный метод обобщенной кристаллографии – модульный дизайн. Но этот метод применим в случае использования структурных составляющих, эквивалентных по форме и составу. Следовательно, возможность применения в теории детерминированного номогенетического морфогенеза имманентных структур ограничена только структурами гомогенной системообразующей составляющей, на основе которых может самоорганизоваться гетерогенная биосистема.

### *3.2. Образование интермедиатов – обязательный этап в самоорганизации биосистем*

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». Повидимому, 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 простых ферментов [43]. 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 же 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 Т-кластерах) структур воды в их стабильной конструкции «строительных лесов» интермедиатов, образованных спиральями (30/11) и Т-кластерами (см. раздел 4.1) и определяющих «архитектуру» структуры нативной глобулы. В глобуле или в образующих ее доменах содержится не более 6-7 элементов вторичной структуры белков. Следует напомнить, что существует всего 9 типов доменов больших глобул [48].

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»).

Подобная модель самоорганизации архитектуры структур белка нативной формы на предварительных стадиях интермедиатов – предельно гидратированных форм с той же архитектурой, что и у нативных форм биосистем, позволила бы исключить и неразрешимую проблему анализа взаимодействий только между органическими составляющими биосистем. В нативных формах со структурой интермедиатов эти взаимодействия вторичны и только стабилизируют структуру нативных форм, частично разрушая водные структуры при переходе от интермедиатов к нативным формам.

## **4. Имманентные тетраэдрические системообразующие модульные структуры связанной воды**

Для решения поставленной задачи – построения модели структурной самоорганизации гетерогенных иерархических биосистем – необходимо создать методом модульного дизайна гомогенные дисконтинуальные системообразующие структуры. Эти структуры определяют формообразование биосистем и, что не менее важно, реализуют «метрический отбор» соразмерных с ними структур органической составляющей биосистем, которые на стадии образования интермедиатов могут образовывать с соразмерными структурами воды многочисленные направленные Н-связи.

Для создания системообразующих самоподобных иерархических гомогенных структур необходимо, чтобы метрика всех частей их различных иерархических уровней была «золоточисленной», т.е. выражалась бы в виде различных степеней числа  $\tau$  или в виде их сумм [9, 49]. Для этого достаточно, чтобы в гомогенных дисконтинуальных иерархических структурах, образованных из атомов или молекул одного сорта, их симметрия, с учетом направленности связей, была тетраэдрической и с торсионным углом Н-связей, близким к

38°<sup>1</sup> [18, 19]. Этому условию, наряду с возможностью частичной релаксации неизбежных напряжений в структурах из неевклидовых модулей, удовлетворяют только тетраэдрические молекулы воды и SiO<sub>2</sub>. Их можно представить в виде атомов кислорода с четырьмя тетраэдрическими Н-связями, на которых находятся протоны, по одному на каждой из них: по два вблизи атома кислорода и по два в удалении от него. Тетраэдрический валентный угол (109,5°) почти равен углу пентагона (108°), в котором диагональ в τ раз больше его стороны. Вследствие того, что тетраэдр и пентагон самодуальны, только в тетраэдрических дисконтинуальных структурах и пентагональных мозаиках Р. Пенроуза возможны образования иерархических самоподобных системных структур с бесконечным числом уровней [9].

#### 4.1. Особенности симметрии и системные свойства модульных 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: а) в соответствии симметрии и строения принципам системной самоорганизации; б) в нелинейной морфологии модульных структур воды; в) в разнообразии модульных структур, образованных одним типом модулей, но собранных из них по разным алгоритмам сплетений групп и г) в соответствии с особенностями структур обобщенной кристаллографии, сформулированными А. Маккеем [31].

Сплетения групп симметрии адекватно описывают строение иерархических структур, соответствующих принципам системной самоорганизации, но их симметрия приближительная (ослабленная), а не точная, как в кристаллах. [9]. Пассивная (Р) точечная группа сплетения, соответствующая части системы и смещенная на вектор *r* от центральной точки активной (А) точечной группы всей системы, образуют вместе с ней сплетения этих групп с симметрией, равной произведению группы пересечения (G) пассивной и активной групп и орбитальной группы (L), соответствующей группе, тождественной мультидвойникованию. Сплетения групп симметрии  $A = G \times L = (P_r \cap A) \times L = P_r^c \times A$  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 Т (без учета протонной упорядоченности на Н-связях) образуют димер с торсионным углом  $\Theta \approx 38^\circ$  с симметрией сплетения групп  $T_{r_1}^c \times D_3$ ,  $T_{r_1}^c \cap D_3 = C_3$  (рис. 3 (а)). С учетом направленности всех своих тетраэдрических связей два димера образуют двумерный модуль в виде замкнутой петли (t-h) – гексацикла с конформацией «твист-ванна»:  $(T_{r_1}^c \times D_3)_{r_2}^c \times D_2$ ,  $D_{3r_2} \cap D_2 = C_2$  (рис. 3 (б)). Два (t-h)-гексацикла образуют трехмерный H<sub>1</sub>-модуль с симметрией  $[(T_{r_1}^c \times D_3)_{r_2}^c \times D_2]_{r_3}^c \times C_2$  (рис. 3 (в)), который можно получить «+60°» диспирационным преобразованием кристаллического модуля льда IH (рис. 1 (к)). «Тройник» (триплет) из HL-модулей с симметрией  $[(T_{r_1}^c \times D_3)_{r_2}^c \times D_2]_{r_3}^c \times C_2]_{r_4}^c \times D_3$ ,  $(C_2 \cap D_3 = C_3)$  (рис. 3 (г)) на следующем уровне образует «четверник» в виде Т-кластера – фрактального аналога тетраэдрического атома с глобальной тетраэдрической симметрией Т сплетения групп  $\langle [(T_{r_1}^c \times D_3)_{r_2}^c \times D_2]_{r_3}^c \times C_2]_{r_4}^c \times D_3 \rangle_{r_5}^D \times T$  (рис. 3 (д), (е)), самоподобно повторяющий его по симметрии и геометрии [9, 27].

Принцип «узнавания» в сплетениях групп симметрии реализуется группой пересечения групп симметрии частей (Р) и целого (А) 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 *r*.

<sup>1</sup> Тетраэдрический угол 109,5° Н-связей воды (Н-О...Н-О...Н-О), почти равный углу 108° пентагона, определяет наличие в структурах воды осей симметрии пятого порядка (при торсионном угле ~38°). Отношение длины ребра тетраэдра к расстоянию от его центра до вершины также равно τ, как и отношение длины диагонали пентагона к его стороне. Параметр торсионного угла Н-связей ( $\Theta \approx 38^\circ$ ) сохраняет свое значение только в начале каждого иерархического уровня и это, по-видимому, ограничивает «размывание» значений не только этой, но и остальных внутренних координат по мере завершения каждого уровня.



4.2. 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» [50]. 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 связанной воды, формально образованных универсальными структурными единицами: Н-модулями, триплетами или Т-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: а) новой структуре со своей метрикой и «морфологией», обычно нелинейной (спирали, скрученные ленты, кольца) [19], б) фрактальному самоподобию [9, 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  $r$ . Системное (неаддитивное) эволюционное развитие можно показать на примере образования самоподобных фрактальных структур из универсального Т-кластера. (рис. 3 (д), (е)), который можно образовать как из Н-модуля (рис. 3 (в)), так и из L-триплетов (рис. 3 (г)). Далее из Т-кластеров можно образовать одномерную структуру кристаллического стержня с симметрией  $G_1^3 r_6 22$  [9] (рис. 4 (а)). Этот кристаллический стержень можно представить в виде трехрядной спирали (рис. 4 (а)) из спиралей (30/11) (рис. 4 (б)), образованных из неевклидовых Н-модулей (рис. 3 (в)). Из фрагментов  $r_6 22$  стержня длиной, соответствующей  $1/3$ ,  $2/3$  и полному периоду «с» этой спирали, можно образовать фрактальные кластерно-стержневые структуры,

самоподобные как Т-кластеру (рис. 4 (д)), так и всем его частям на различных уровнях образования его структуры (L-триплет (рис. 3 (г)), Н-модуль (рис. 3 (в)), «твист-ванна» (рис. 3 (б)) с масштабами подобия  $M_j = (3j\tau + 1)$ , где  $j = 1; 2; 3$  для «с/3», «2с/3» и «с» соответственно [9]. Таким образом, если Т-кластер является аналогом тетраэдрического атома во фрактальной структуре  $T_j^i$ -кластера, то сам стержень со-

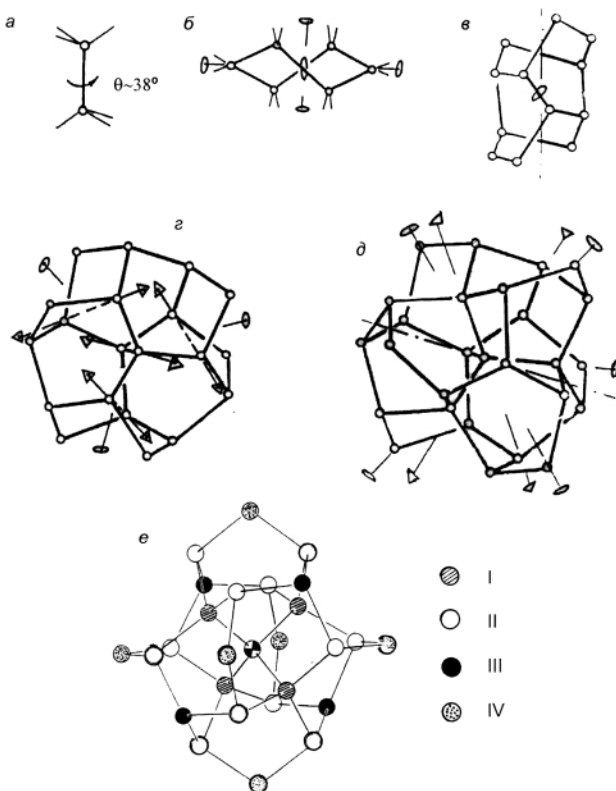
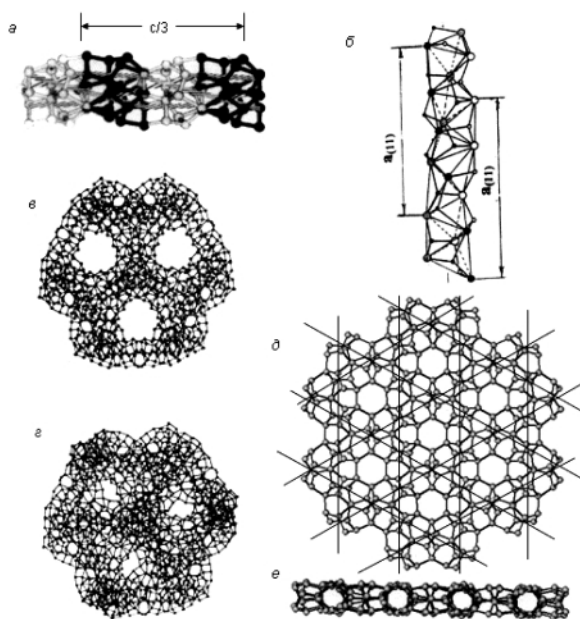


Рис. 3. Системная сборка модулей и модульных кластеров структур связанной воды [9]: (а) – димер из двух тетраэдрических молекул воды; (б) – двумерный модуль гексацикла типа «твист-ванна» из двух димеров; (в) – трехмерный  $H_{L,D}$ -модуль (левый, правый) из двух двумерных гексациклов, тождественный модулю, полученному преобразованием кристаллического модуля льда  $IH$  (рис. 2 (л)); (г) – комплексный «тройник» (триплет, 20 молекул  $H_2O$ ) из трехмерных  $H_{L,D}$ -модулей; (д) – комплексный «четверник» (Т-кластер, 27 молекул  $H_2O$ ) из триплетов в установке по оси  $C_3$ ; (е) – Т-кластер в установке по оси  $C_4$ , атомы которого соответствуют вершинам четырех платоновых тел с треугольными гранями, соединенных тетраэдрическими связями: I – тетраэдр, II – икосаэдр, III – дуальный тетраэдр и IV – октаэдр.



**Рис. 4.** Системообразующая структура связанной воды из унитарных модулей: (а) – кристаллический стержень  $G_1^3-6_322$  в виде трехрядной спирали из спиралей 30/11 из Т-кластеров, выделенных графически [27]; (б) – спираль 30/11 из  $H_L$ -модулей, образованная их трансляцией с поворотом на угол  $36^\circ$ ; (в) – структура фрактала  $L_1^1$ , самоподобного триплету (рис. 3 (г)) с глобальной симметрией  $D_3$ , с масштабом подобия  $M_1^1=(3\times\tau+1)$  и фрактальной размерностью 2,28; (г) – структура фрактала  $T_1^1$ , самоподобного Т-кластеру (рис. 3 (д)) с глобальной симметрией Т-23 с тем же масштабом подобия и фрактальной размерностью; (д) – двумерная кристаллическая структура поверхностного слоя воды ( $G_2^3-P622$ ) с периодом  $a = 12,2\text{\AA}$ , определяющая ее поверхностное натяжение и самоорганизацию биомембран и монослоев Лэнгмюра; тонкие линии, образующие сетку-кагеме, соответствуют осям спиралей (30/11), которые параллельны плоскости слоя; (е) – структура поперечного сечения слоя толщиной  $\sim 5\text{\AA}$ ; видны каналы спиралей 30/11, перпендикулярные плоскости сечения слоя.

отвечает 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:  $d_{Fr} = 2,28$ ;  $d_{FrII} = 2,04$  и  $d_{FrIII} = 1,87$  [9].

Таким образом, самоподобные фрактальные структуры воды позволяют решить важнейшую для самоорганизации биосистем проблему масштабов иерархических уровней с сохранением морфологических паттернов, различающихся на много порядков. Например, паттерн филотаксиса проявляется как у планктона, так и у подсолнечника, размеры которых различаются на пять порядков. Модульный дизайн позволил создать следующие типы структур связанной воды с нелинейной морфологией: а) полярные ( $S_M$ ) и биполярные ( $S_{M/2}$ ) спирали-матрицы для самоорганизации М-РНК, А-, В-, Z-ДНК; б) спиральные ленты; в) кольцо [20]; г) трехмерные фрактальные решетки – каркас структуры биокристаллов [9, 13]; д) структуру поверхностного слоя воды в виде двумерной кристаллической структуры из L-триплетов ( $G_2^3-P622$ ) [20, 27], определяющую ее поверхностное натяжение и являющуюся матрицей для самоорганизации бислоевых мембран и монослоев Лэнгмюра [33] (рис. 4 (д), (е)), а также е) цилиндрические и сферические оболочки мицелл и капсул вирусов [13] на основе структуры поверхностного слоя ( $G_2^3-P622$ ) и его самоподобного фрактального аналога.

Надо отметить, что в действительности эти структуры могут образовываться не из модулей, а из димеров молекул воды в присутствии органических молекул или биомолекул, соразмерных с топологией и метрикой водных системообразующих структур. На стадии химической эволюции биосистем первичными были структуры воды, которые могли стабилизироваться и иерархически усложняться только в присутствии определенных молекул, связанных с ними слабыми Н-связями.

Поскольку модульный механизм самоорганизации стабильных структур является универсальным для объектов живой и неживой природы [51], то при модульном дизайне гомогенных системообразующих структур – матриц биологической самоорганизации используется модульная сборка структур. Это обусловлено тем, что сложным образом изменяются параметры «внутренних координат» при переходе от одного уровня иерархии к последующему.

#### 4.3. Взаимосвязь некоторых проблем строения и функционирования биосистем с фрактальной природой иерархических структур связанной воды

Принцип «все или ничего» не только является одним из принципов системной самоорганизации, но может играть важную роль и в методологии системных исследований, позволяя увидеть с единой общей позиции взаимосвязь ранее не связанных между собой проблем, если удастся найти «ключ» к решению наиболее существенной из них. Одной из самых важных особенностей строения имманентных структур связанной воды, определяющих самоорганизацию биосистем, является их детерминированная фрактальность. Трехмерное евклидово пространство по от-

ношению к структурам из неевклидовых модулей оказалось неоднородным. В нем неевклидовы модули можно только одномерно распространять по закономерным траекториям в виде кластерно-стержневых структур, образующих детерминированные иерархические модульные самоподобные фракталы. Помимо ранее упоминавшихся проблем масштабирования иерархических уровней и подобия морфологических паттернов, фрактальная природа имманентных структур воды, определяющих самоорганизацию молекулярных биосистем, позволила понять взаимосвязь таких проблем строения и функционирования биосистем, как: 1) левизна – правизна в живой природе и специфичность геометрии характерного для нее пространства; 2) особенности интегратизма в иерархических системах и его движущие силы и 3) структурная энергия биосистем.

В.И.Вернадский в результате обобщения эмпирического материала считал, что энантиоморфность является одним из существенных атрибутов живой природы, а «тела живого вещества, возможно, отвечают не евклидову пространству, а одному из римановых геометрических пространств» [52].

Рассмотрим, как эта гипотеза согласуется с конкретной геометрией самоподобных фрактальных тетраэдрических структур связанной воды из стержней, образованных Т-кластерами из неевклидовых модулей. Т-кластер является фрагментом центральной части тетраэдрически «декорированного» политопа  $\{3,3,5\}$  – четырехмерного икосаэдра, относящегося к сферическому  $S^3$ -пространству, одному из возможных пространств Римана [35]. Этот фрагмент состоит только из тетраэдрических симплексов, из которых  $1/5$  часть заполнена такими же атомами, но таким образом, чтобы у всех атомов была тетраэдрическая координация. Подобное заполнение  $1/5$  части тетраэдрических симплексов в структуре политопа  $\{3,3,5\}$  соответствует раскраске граней икосаэдра в пять цветов, но так, чтобы смежные по ребрам грани икосаэдра не были одинаково окрашены. Возможны только два варианта такой раскраски: либо левый, либо правый [9]. Таким образом, левизна – правизна в строении тел живой природы является следствием того, что формообразование биосистем обусловлено системообразующими иерархическими фрактальными и тетраэдрическими структурами воды, которым эта энантиоморфность имманентно присуща. Следствием генезиса структуры Т-кластера от четырехмерного икосаэдра (рис. 2 (е)) является хотя и не совсем точная, но исключительно высокая симметрия и золоточисленная метрика его структуры. Вокруг центральной точки Т-кластера из 27 атомов можно выделить четыре вложенных друг в друга координационных сферы в виде четырех платоновых тел со всеми треугольными гранями (I – тетраэдр, II – икосаэдр, III – дуальный первому тетраэдр, IV – октаэдр), вершины которых объединены в связную структуру только тетраэдрическими связями (рис. 3 (е)) [9, 11]. Образующие эти структуры Т-кластеры, относящиеся к  $S^3$ -пространству, локально вложены в трехмерное евклидово пространство – естественное пространство для любой стабильной структуры, образуя в нем дисконтинуальные и фрактальные модульные структуры.

Рассматривая проблему биологического системного интегратизма 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». Это условие предполагает, что «у частей, из которых должно образоваться целое, имеется налицо определенное число свойств, обеспечивающих возможность возникновения связей между ними» [37]. Это сделанное в общих чертах заключение соответствует обсуждаемой в данной статье структурной модели самоорганизации биосистемы за счет образования многочисленных направленных Н-связей между соразмерными системообразующими составляющими воды и связанными с ними биополимерами. Движущая сила, определяющая интегративные возможности системообразующих структур связанной воды, обусловлена не только высоким отношением числа «свободных» Н-связей к общему числу молекул  $H_2O$  в ее структурах, но и тем, что это отношение не уменьшается по мере неизбежного увеличения структур связанной воды при переходе к последующим иерархическим уровням.

Если бы структуры воды были континуальными, то это отношение и движущие силы интегратизма быстро уменьшались бы по мере иерархического развития. Но во фрактальных самоподобных структурах это отношение практически постоянно для всех уровней и равно  $\sim 0,7$  «свободной» Н-связи на каждую молекулу воды в структуре [22]. Это означает, что около 70% всех молекул воды находятся на поверхности стержней, образующих фрактальные структуры, и каждая из них имеет по одной «свободной» Н-связи. Кроме того, фрактальная природа структур связанной воды предохраняет их от фазового перехода в кристаллическую структуру льда ИН при сильных охлаждениях. Поэтому, если своевременно удалить всю оставшуюся неструктурированную воду из биосистем, то они могут переносить многократные циклы замораживания – размораживания.

Наконец, с неевклидовой природой модулей структур связанной воды связаны ее энергоадсорбирующие возможности. При своем образовании эти структуры могут поглощать химическую энергию, выделяющуюся при гидролизе молекул АТФ. При частичном или полном разрушении

структур воды выделяется энергия, затраченная на их образование. Используя соответствующие потенциалы, была рассчитана зависимость «запасенной» и упругой энергии в структурах воды от числа образующих их молекул. По мере увеличения диаметра модульных кластеров и стержней из них увеличивается их «энергоадсорбирующая» способность (максимальная для стержня  $r_{6,322}$ ) [36]. Поэтому вполне возможно, что эти структуры могут функционировать в качестве «рабочего тела» в биомашинах [53]. А.Сент Дьерди считал, что «биологические функции могут фактически заключаться в образовании и нарушении водной структуры» [43].

В настоящее время известно атомное строение большинства белков, превращающих химическую энергию гидролиза АТФ в механическую, тем не менее, остается непонятным принцип действия их мотор-доменов. Причину этого, заключающуюся в необходимости коренного изменения некоторых наших научных представлений, образно выразил Г.Башляр: «Чтобы представить роль становящегося научного духа, надо поставить вопрос типа «Можно ли использовать энергию водопада в Альпах живущим в Париже, Москве или в Нью-Йорке?» перед человеком, живущим в «доэлектрическую эпоху». Эту разницу между механическим и электрическим веком охарактеризовал Поль Валери, представляя себе Декарта, бьющегося над задачей динамо-машины. Никакое знание устройства не помогло бы Декарту понять принцип ее работы, т.е. ее физиологию» [2].

#### *4.4. Необходимость «золоточисленной метрики» в системообразующих структурах воды и метрического отбора (по соразмерности с ними) других структурных составляющих в иерархических гетерогенных биосистемах*

Общеизвестна роль «золотого числа»  $\tau = 1,618\dots$  в различных отраслях науки и искусства, а также в архитектуре. Необходимость создания такой метрики, основанной на числе  $\tau$ , для проблем иерархической системной самоорганизации очевидна, учитывая и уникальные арифметические свойства этого числа, соответствующие арифметической, геометрической и гармонической прогрессиям, а также их аддитивные ( $\tau^n = \tau^{n-1} + \tau^{n-2}$ ) и мультипликативные ( $\tau^n = \tau \times \tau \times \dots \times \tau$ ) свойства. Именно эти свойства «золотого отношения» определяют периодическое (линейное, аддитивное) строение первичной структуры основных цепей пептидов и нуклеиновых кислот в их нелинейных спиральных формах вторичной структуры [53]. В сложных иерархических системных структурах и композициях, по мере возрастания количества и числа типов образующих их частей, точность их подгонки друг к другу будет возрастать. В биосистемах взаимная «подгонка» структурных составляющих облегчена за счет образования слабых Н-связей между матричными структурами связанной воды и  $-C=O$ ,  $-NH$ -группами основных цепей биополимеров. Дисконтинуальные структуры связанной воды как системообразующие составляющие биосистем и «строительные леса» определяют их архитектуру, потому что обладают всеми свойствами системных иерархических структур, включая взаимопроникающее самоподобие и принципы системной самоорганизации.

По «золоточисленной метрике» матричных структур связанной воды осуществляется «метрический отбор» только четырех типов мономеров основных цепей периодических биополимеров и трех структур минералов в биоминеральных композитах. Рассмотрим проявление «золоточисленной метрики» в модульных структурах связанной воды, начиная с ее молекулы.

Валентный угол молекул воды  $H-O-H$ , равный  $104,5^\circ$ , близок по своему значению к величинам угла ( $109,5^\circ$ ) между Н-связями, которые соединяют молекулы  $H_2O$  со своими ближайшими соседями в структурах льда и связанной воды, и угла ( $108^\circ$ ) пентагона. Межатомное расстояние  $O-H$  равно  $1\text{ \AA}$  в молекуле воды, а длина водородной связи  $O-H\dots O$  равна  $\sim 2,7\text{ \AA}$  и протон делит ее в отношении  $1:\tau$ . Ребро тетраэдра из четырех молекул  $H_2O$ , скоординированных четырьмя Н-связями вокруг пятой молекулы в его центре, равно длине Н-связи, умноженной на  $\tau$ , и в  $\tau^3$  раз длиннее валентной связи  $O-H$ .

Если два взаимопроникающих тетраэдра повернуть относительно друг друга по тройной оси, связывающей центры обоих тетраэдров, на  $\sim 38^\circ$  (рис. 2 (а)), то расстояния между их ближайшими несвязанными вершинами увеличатся в  $\tau$  раз по сравнению с длиной ребер тетраэдров и станут в  $\tau^4$  раз больше длины валентной связи и в  $\tau^2$  раз длиннее Н-связи. На последующих уровнях иерархии структур связанной воды также сохраняется «золоточисленная метрика». В структуре Т-кластера – самого симметричного кластера в природе (рис. 3 (е)) как фрагмента тетраэдрически декорированного четырехмерного икосаэдра, «золоточисленная метрика» проявляется во всем. В его структуре можно выделить 12 спиралей ( $30/11$ ) и 6 спиралей ( $40/9$ ) с индексами их осей  $\langle \tau^2 \tau 1 \rangle$  и  $\langle \tau^2 10 \rangle$  в кубических координатах этого кластера. В свою очередь, эти спирали обладают декагональной «золоточисленной симметрией», так как все образующие их молекулы  $H_2O$  находятся на трех- и четырехзаходных винтовых осях  $10_1$ . Центральный атом Т-кластера делит его четыре оси  $C_3$  в отношении  $1:\tau$ , а длина оси  $C_3$  в этом кластере в  $\tau^2$  раз больше длины Н-связи. Длина ребра икосаэдра, пред-

ставляющего в Т-кластере II координационную сферу, равна длине Н-связи, умноженной на  $\tau$ , а расстояния между вершинами двух противоположных ребер икосаэдра в  $\tau^2$  раз больше длины Н-связи. Вершины икосаэдрической II координационной сферы Т-кластера, «вписанной» в IV октаэдрическую координационную сферу, делят ребра октаэдра в отношении 1: $\tau$ .

Отношение длины ребер октаэдра в последней координационной сфере Т-кластера к длине Н-связи равно  $\tau^2$ , а отношение расстояний до вершин икосаэдра (II координационная сфера) и большого тетраэдра к длине Н-связи равно  $\tau$  (рис. 3 (e)). Через «золоточисленную метрику» можно выразить вектора  $r_n$  ( $n = 1..4$ ) в слетениях групп симметрии Т-кластера. Напомним, что Т-кластер является фрактальным аналогом тетраэдрического атома в иерархических самоподобных структурах с масштабом подобия  $M_j^T = (3j\tau + 1)^T$ , поэтому на всех последующих уровнях иерархической самоорганизации системообразующих структур воды «золоточисленная метрика» сохраняется и проявляется в номогенетическом морфогенезе иерархических биосистем. Динамические свойства подобных систем обусловлены способностью поддерживать свою устойчивость за счет сохранения структурной связанности при непрерывных кооперативных преобразованиях. Учитывая огромную роль направленных Н-связей в номогенетической самоорганизации на основе системообразующих структур воды, становится понятной большая роль атомов (H, N, C, O, P, S) в эволюции биосистем, участвующих в образовании Н-связей в составе групп NH; -C=O;  $[PO_4]^{3-}$  и -SH, в первую очередь, со структурами воды.

#### 4.5. Проявление метрического отбора структурных составляющих в природном биоминеральном композите (кости)

Проявление метрического отбора на примере костной ткани необходимо показать по следующим причинам: 1) структура костей стабильна, упорядочена, подробно изучена дифракционными методами и электронной микроскопией; 2) в организмах кости образуются из гелей коллагена, причем объем минерального компонента – гидроксилатапата (НАР) в кости практически равен объему замещенной им структурированной воды при постоянном содержании органического вещества [54]; 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.

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 спиралах  $3_{10}$  ( $\cong 30/11$ ), расстояния вдоль оси спирали между остатками, группами -C=O или -NH основной цепи равно 2,82 Å [55], почти соответствующее длине Н-связи. Группы -C=O и -NH одиночных спиралей  $3_{10}$  не образуют «внутриспиральных» Н-связей, как в  $\alpha$ -спиралях. Спирали коллагена сильно гидратированы и поэтому объединяются в трехрядные спиралы ( $p6_322, c=84,66 \text{ \AA}$ ), повышающие стабильность пространственной структуры и образующие кристаллическую структуру (C2:  $a = 173,5 \text{ \AA}$ ;  $b = 14,06 \text{ \AA}$ ;  $c = 25,31 \text{ \AA}$ ) [56] в виде слегка искаженной гексагональной упаковки фибрилл коллагена ( $b \approx \sqrt{3} \times c$ ).

В структуре НАР ( $Ca_5[PO_4]_3OH$ ) можно выделить по оси «с» два типа колонок, образованных тригональными призмами, «заселенных» ионами Ca. Эти колонки призм соединяются между собой  $[PO_4]$ -тетраэдрами. Метрика структуры НАР:  $C6_3/m$ ;  $a = 9,52 \text{ \AA}$ ;  $c = 6,88 \text{ \AA}$  [57].

Метрика спиралей 30/11 – основного элемента водных структур – определяется трансляционно-осевым  $a_t = 1,48 \text{ \AA}$  и угловым  $a_t = (360^\circ \times 11)/30 = 132^\circ$  параметрами для длины Н-связи, равной 2,8 Å [9]. Помимо истинного периода спирали (30/11), равного  $a_{(30)} = 1,48 \times 30 = 44,4 \text{ \AA}$  и  $\alpha_{(30)} = 132^\circ \times 30 = 3960^\circ = 0^\circ$  (по  $mod\ 360^\circ$ ), возможны еще два значения псевдопериодов  $a_{(11)} = 1,48 \times 11 = 16,28 \text{ \AA}$ ;  $\alpha_{(11)} = 132^\circ \times 11 = 1452^\circ = +12^\circ$  (по  $mod\ 360^\circ$ ) и  $a_{(19)} = 1,48 \times 19 = 28,12 \text{ \AA}$ ;  $\alpha_{(19)} = 132^\circ \times 19 = 2508^\circ = -12^\circ$  (по  $mod\ 360^\circ$ ), причем  $a_{(11)} + a_{(19)} = a_{(30)}$ . Минимальные отклонения  $a_{(11)}$  и  $a_{(19)}$  от нуля несущественны, так как легко «компенсируются» за счет малых искажений слабых Н-связей.

Метрики периодов решеток НАР и коллагена связаны целночисленными отношениями с вышеуказанными значениями периодов  $a_{(19)}$  и  $a_{(30)}$  спирали 30/11 воды:  $3a_{НАР} (3 \times 9,52 = 28,56 \text{ \AA}) \approx a_{(19)} (28,12 \text{ \AA})$ ,  $\Delta = 1,56\%$ ;  $4c_{НАР} (4 \times 6,88 = 27,52 \text{ \AA}) \approx a_{(19)} (28,12 \text{ \AA})$ ,  $\Delta = 2,36\%$ ;  $2b_{coll} (2 \times 14,06 = 28,12 \text{ \AA}) \approx a_{(19)} (28,12 \text{ \AA})$ ,  $\Delta = 0\%$ . Соразмерность метрик решеток НАР и коллагена со структурами воды делает их соразмерными и между собой ( $4c_{НАР} \approx 2b_{coll}$ ;  $3a_{НАР} \approx 2b_{coll}$ ;  $25c_{НАР} (6,88 \times 25 = 172 \text{ \AA}) \approx a_{coll} (173,5 \text{ \AA})$ ,  $\Delta = 0,86\%$ , что особенно важно для образования направленных Н-связей между кристаллами НАР и фибриллами коллагена в биоминеральном композите, после того, как структуры воды в гелях коллагена будут «замещены» кристаллами НАР. Но при этом, как в интермедиах биосистем, также сохраняется структура из волокон коллагена, которая была в гелях.

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:  $\alpha_{\text{coll}}$  ( $173,5 \text{ \AA}$ )  $\approx 7c_{\text{coll}}$  ( $25,31 \times 7 = 177,17 \text{ \AA}$ ),  $\Delta=2,08\%$  и  $\alpha_{\text{coll}}$  ( $173,5 \text{ \AA}$ )  $\approx 12b_{\text{coll}}$  ( $14,06 \times 12 = 168,8 \text{ \AA}$ ),  $\Delta=2,75\%$ . Эти сетки из волокон, образующие структуру цилиндрических слоев остеона, «армированы» по Н-связям удлиненными по оси «с» кристаллитами НАР: с одной стороны слоя в ориентации [0001] ( $25c_{\text{НАР}} \approx \alpha_{\text{coll}}$ )  $25 \times 6,88 \text{ \AA} = 173,5 \text{ \AA}$  ( $\Delta=0,8\%$ ), а с другой – по перпендикулярному направлению [1010] ( $3\alpha_{\text{НАР}} \approx 2b_{\text{coll}}$ )  $3 \times 9,52 \text{ \AA} \approx 2 \times 14,06 \text{ \AA}$  ( $\Delta=1,54\%$ ). Следствием образования такой специфически упорядоченной структуры биоминерального композита является эластичность и высокая ударная вязкость кости, отсутствующая у образующих ее составляющих [58].

Используя модели структур воды в виде спиралей (30/11) и трехрядных спиралей ( $\rho 6_3 22$ ), можно показать их взаимодействие с фосфатными группами  $[\text{PO}_4]^{3-}$  в присутствии ионов  $\text{Ca}^{2+}$  и процесс стадийного локального превращения структуры упорядоченного геля коллагена в структурный мотив НАР.

Подводя итоги, можно сказать, что концепция таких системообразующих иерархических структур воды как матрицы («matrix») для самоорганизации фибриллярных биополимеров [12,19], «строительных лесов» («scaffolding») для самоорганизации глобулярных белков [27] и «метрического сита» для отбора других соразмерных структурных составляющих создает перспективные подходы к трем основным проблемам, оставшимся нерешенными, несмотря на все достижения молекулярной биологии: 1) самоорганизация пространственных структур глобул белков («folding»); 2) движущая сила эволюции первичных структур биополимеров и 3) принципы действия белков – «машин» и других молекулярных биосистем. Представление о структурах воды как о «рабочем теле» биомолекулярных машин заполняет недостающее звено в теории Э.Бауэра о структурной энергии напряженных состояний глобул белка [38], по-видимому, наиболее гидратированных. Эта теория не объясняет причин перехода структур глобул белков в напряженное «рабочее» состояние.

#### *4.6. Возможны ли отличные от земной формы жизни на основе ансамблей супрамолекулярной химии?*

В связи с отсутствием общей иерархической системообразующей составляющей с «золоточисленной метрикой», в ансамблях супрамолекулярной химии можно рассмотреть, насколько справедливо утверждение Ж.-М.Лена о возможности создания многообразия форм жизни на их основе, так как в этом случае невозможен «метрический отбор» составляющих, способных образовать целостные иерархические системы.

Как в супрамолекулярной химии, так и в нанотехнологиях с «водонесодержащими» средами слабые силы играют решающую роль в самоорганизации структур их продуктов. Различие состоит в том, что в обоих этих случаях нет общей системообразующей составляющей в виде структур воды, а, следовательно, нет и метрического отбора соразмерных органических и неорганических составляющих, способных на основе структур воды образовать иерархическую систему на стадии интермедиата. Поэтому, отличаясь от биосистем разнообразием состава, ансамбли супрамолекулярной химии не могут быть основой других иерархических систем, необходимых для возникновения множества различных форм жизни [5]. С этой точки зрения возможность возникновения иных форм жизни без участия структур воды представляется маловероятной. Сходство морфологических паттернов биосистем и материалов нанотехнологий с применением водосодержащих сред обусловлено тем, что одни и те же системообразующие структуры воды определяют их морфологию.

Самоорганизация биосистем на основе системообразующих структур воды позволяет рассматривать эволюцию живой природы на Земле как этап, следующий за геологической эволюцией образования ее литосферы и геохимических процессов в ней, которые предшествовали биологической эволюции. Вода и кремнезем являются стабильными и «конечными» продуктами геохимической деятельности в процессе формирования литосферы и поэтому их роль является исключительной на следующей ступени эволюции материи на Земле [59].

### **5. Изменения в методологии естественных наук и в их междисциплинарных взаимосвязях**

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. Тем не менее, можно составить представление о кардинальных изменениях в методологии науки, необходимых для успешного изучения процесса самоорганизации наноматериалов и

биомолекулярных систем, а также в междисциплинарных связях естественных наук между собой и с математикой. Принципиально новые научные задачи, обусловленные новыми объектами научного познания и новыми областями исследования, непосредственно определяют научный прогресс, при этом методы исследования и методология науки также должны изменяться. Поэтому для оценки правильности выбранного направления изучения процессов самоорганизации и полученных результатов важно установить, существует ли преобладание и соответствие изменений в методологии, которые необходимы для создания и реализации метода модульного дизайна, с признаками грядущей постнеклассической парадигмы [1]. При этом становится важным закономерное соответствие парадигмальных изменений в науке, начавшихся во второй половине XX века, со сменой познавательных моделей в биологии. Статистическая познавательная модель дарвинизма и его современной модификации – синтетической теории эволюции постепенно уступает свои позиции детерминистской теории номогенеза. Отсутствие целостного системного видения и взаимосвязанности проблем формообразования и эволюции первой познавательной модели исключает постановку проблемы самоорганизации и единства закона формообразования в живой и неживой природе.

### *5.1. Соответствие методологии модульного дизайна – основного метода обобщенной кристаллографии – особенностям постнеклассической парадигмы*

Для перехода от неклассической статистической парадигмы к постнеклассической детерминированной характерны следующие признаки. Объектами изучения становятся системы со сложным иерархическим аperiodическим строением и системными свойствами, для изучения которых пока нет ни достоверных теоретических, ни экспериментальных методов. Адекватность модели свойствам изучаемого объекта определяется ее эвристическим потенциалом: постановка новых проблем и выработка подходов к решению этих проблем и тех, которые не удавалось разрешить прежними методами. Например, модель самоорганизации биосистем на основе системообразующих имманентных структур воды и необходимость «метрического» отбора 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, на основе разнообразных супрамолекулярных ансамблей. При отсутствии общей иерархической системообразующей составляющей в виде структур воды и метрического отбора соразмерных с ними органических составляющих невозможно создать многоуровневые иерархические системы, подобные биосистемам. Сходство биологических паттернов биосистем и материалов нанотехнологий возможно при использовании водосодержащих сред.

Важной особенностью новой постнеклассической парадигмы является изменение методологии создания моделей и теорий – переход от индуктивного обобщения обычно косвенных экспериментальных данных, часто при отсутствии даже приблизительного представления о характере строения изучаемого объекта, к 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» [60].

Другой особенностью современного изменения парадигмы является переход от изучения линейных (аддитивных) кристаллических структур объектов к нелинейным иерархическим системам, но с тем же детерминированным строением, что и в системообразующих матричных структурах связанной воды.

Важнейшим свойством таких структур является их дисконтинуальное строение, обусловленное локальным «компромиссом» метрик их неевклидовых модулей с метрикой линейного трехмерного евклидова пространства – естественного для любой стабильной атомной структуры. В этом пространстве неевклидовы модули могут регулярно распространяться только по строго определенным направлениям, образуя фрактальные кластерно-стержневые иерархические структуры. В этом отношении трехмерное евклидово пространство оказалось неоднородным и дисконтинуальным, и, следовательно, в нем невозможно образование случайных флуктуаций, и в этом случае статистическая неклассическая парадигма неэффективна. Эту важнейшую особенность будущей кристаллографии системообразующих структур предвидел А.А.Любищев [47]. 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» [41]. С этими особенностями локальных структур из неевклидовых модулей в трехмерном евклидовом пространстве связаны неизбежные упругие напряжения. Локальные перехо-

ды евклидовых модулей кристаллической матрицы в неевклидовы вызывают изменение длин связи, их валентных и торсионных углов. Возможен обратимый переход этих локальных структур из неевклидовых модулей в кристаллическую структуру матрицы со вспышкой когерентного излучения [27]. Это вполне соответствует утверждению Г.Башляра о том, что «энергетические обмены определяют материальные изменения, а материальные изменения обуславливают энергетические обмены» [2]. Вполне возможно также существование детерминированных «химических траекторий» в виде таких последовательных промежуточных активированных состояний в структуре вещества. Этими энергоадсорбирующими центрами, по-видимому, обусловлен низкотемпературный механизм механохимического синтеза нанокристаллов фаз через неизбежную промежуточную стадию аморфизации.

Напряженный характер структур из неевклидовых модулей и их способность недиссипативно взаимодействовать с энергией соответствует введению более общего критерия стабильности структур, пригодного как для равновесных, так и для неравновесных структур. 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. Отказ от критерия стабильности в виде энергетического минимума, отражающего идею баланса, соответствует отходу от «статистической познавательной модели, которая рассматривает мир как совокупность балансов, средних и инвариантов» [61] и изменяет роль математики.

### *5.2. 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 переход от неклассической парадигмы к постнеклассической. Ныне актуальна проблема: является ли геометрия всеобщей доказательной программой знания в силу того, что она строго фиксирует неизменность исходных постулатов и все еще остается эталоном методологически доказательного знания и самого доказательства. 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» [62]. Математику он рассматривал как средство для вывода естественных наук на номогенетический уровень. Тенденция геометризации отчетливо проявляется в естественных науках и в 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, выраженных наиболее часто в виде уравнений, («служанка наук») и вновь приобретает метафизическую роль «царицы наук». Возрастает эвристическая роль математики в естественных науках: ее результаты прямо переносятся в них как непосредственные источники новых знаний. Такая роль математики в биологии очевидна на примере модульного дизайна трехмерных системообразующих структур из «частиц» с тетраэдрической симметрией с учетом направленности их связей. Физико-химическая «конкретика» (состав частиц, тип связей) изначально не была заложена в основу дедуктивного вывода, который был чисто геометрическим. Далее структуры отбирались по соответствующим структурно-геометрическим реалиям, согласующимся с этой «конкретикой». Например, исходя из условий частичной релаксации неизбежных напряжений в этих структурах из неевклидовых модулей, необходимой для достижения их стабильности, ясно, что релаксация возможна только в случае слабых Н-связей. Тетраэдрическая направленность Н-связей возможна только в структурах воды, образованных ими вследствие: 1) близости значений углов между сильными валентными связями (Н-О-Н)  $\approx 104^\circ$  и тетраэдрическими слабыми Н-связями (О-Н...О-Н...О-Н)  $\approx 109,5^\circ$  и 2) способностью молекул воды образовывать с соседними молекулами в структуре по четыре Н-связи. 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 [44].





Такая метафизическая роль математики будет способствовать изживанию редукционизма в естественных науках и их переходу к системной методологии. На всех стадиях реализации избранных сконструированных форм необходимо создавать модели промежуточных стадий, без чего невозможна их реализация в целом.

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 наук в виде цикла «Nanosciences». Очевидно дальнейшее более тесное взаимодействие естественных наук в едином естествознании с более целостным видением мира и, по-видимому, с все возрастающей ролью биологического понимания сложности системной иерархичности и взаимосвязей.

В самой биологии и, особенно, в ее наиболее редукционистской области – молекулярной биологии вполне возможна «революция» коперниканского типа, заключающаяся в переносе центра внимания с «видимых» современными экспериментальными методами органических структурных составляющих на «невидимую» ими общую водную системообразующую структурную составляющую, объединяющую все составляющие биосистем в единое целое со строго определенной структурой и определенными функциональными свойствами. Без этого поворота в научном сознании невозможно понять механизмы самоорганизации биосистем, формообразования, эволюции 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» [63].

Безусловно, возрастает и роль химии, особенно в развитии нанотехнологий. Уже сейчас очевидна тенденция слияния различных ветвей химии (органическая, неорганическая, биоорганическая, коллоидная и т.д.) в общую химическую науку и, в первую очередь, на основе развития структурных представлений во всех ее ветвях и названную Ж.-М. Леном «Structural Chemistry» [5]. Методы нанотехнологии, особенно в области создания биомиметических и биоминеральных нанокомпозитов, возможно, заложат экспериментальную основу изучения процессов самоорганизации, эволюции и формообразования биосистем на ранних стадиях возникновения жизни.

## Литература

1. Степин В.С. // Вестник РАН. 1997. Т.67, №5. С.387.
2. Башляр Г. Новый рационализм, пер. с франц., ИП «Тривиум», 2000. 373 с.
3. Фейнман Р. // Журнал Рос. Хим. Общества им. Д.И. Менделеева. 2002. XLVI. №5. С.6.
4. Рокко М.С., Уильямс Р.С., Аливатос П. Нанотехнология в ближайшем десятилетии. Прогноз направлений исследования. М.: Мир. 2002. 284 с.
5. Лен Ж.-М. Супрамолекулярная химия. Концепции и перспективы. Новосибирск.: Наука СО РАН. 1998. 333 с.
6. O'Keeffe M., Eddaoudi M., Li H., Reineke T., Yaghi O.M. // J. of Solid State Chem. 2000. V.152, №1. P.3.
7. Li H., Eddaoudi M., Yaghi O.M. // Nature. 1999. V.402. P.277.
8. Davis M.E. // Nature. 2002. V.417. P.813.
9. Bulienkov N.A. in Quasicrystals and Discrete Geometry. The Fields Inst. Monogr. Ed. J. Patera. Amer. Mathem. Soc., Providence (RI) 1998. V.10. P.67.
10. Маккей А.Л. в сб.: Структурные исследования кристаллов. М.: Наука. Физматлит. 1996. С.430.
11. Бульенков Н.А. в сб.: Вестник Нижегородского Ун-та им. Н.И. Лобачевского. Сер. Физика тв. тела. 1998. вып.1. С.19.
12. Бульенков Н.А. // Биофизика. 1991. Т.36, №2. С.181.
13. Бульенков Н.А. // Кристаллография. 1990. Т.35, №1. С.155.
14. Phan Van An, Bulienkov N.A. // Mat. Sci. Research Intern. (The Soc. of Mater. Sci., Japan). 2000. V.6, №1. P.22.
15. Белов Н.В. Структура ионных кристаллов и металлических фаз. М.-Л. Изд-во АН СССР, 1947, 236 с.



16. Федоров Е.С. Структура и симметрия кристаллов. М.-Л. Изд-во АН СССР, 1949, 630 с.
17. Бернал Дж.Д. // Кристаллография 1962. Т.7, №4. С.507.
18. Yasushi Ysh. // Techn. Rep. ISSP, 1987. Ser.A., №1. P.1.
19. Бульенков Н.А. // Кристаллография, 1988. Т.33, №2. С.422.
20. Гончаров А.Ф. // УФН. 1987. Т.152, №2. С.317.
21. Кокстер Г.С.М. Введение в геометрию. М.: Наука Физматлит. 1966, 647 с.
22. Бульенков Н.А. // Кристаллография. 1990. Т.35, №1. С.147.
23. Bulienkov N.A., Phan Van An. CD Proc. of 12th Intern. Confer. on Composite Mater. 1999. paper 658. P.1.
24. Бульенков Н.А. // ДАН СССР. 1985. Т.284, №6. С.1392.
25. Желиговская Е.А., Бульенков Н.А. Тезисы докладов на I Всероссийской Конференции по наноматериалам, 2004, Москва. С.211.
26. Осипьян Ю.А., Негрий В.Д., Бульенков Н.А. // Изв. АН СССР, сер. Физич. 1987, Т.51, №9. С.1458.
27. Bulienkov N.A. // J. of Mol. Liquids, 2003. V.106, №2-3. P.277.
28. Бульенков Н.А., Тытик Д.Л. // Изв. РАН, сер. Химич., 2001. Т.50, №1. С.1.
29. Bulienkov N.A., Phan Van An. Proc. of 48th Intern. SAMPE Symposium 2003. Long Beach. CA USA. Book 1. P.1191.
30. Бернал Дж.Д., Карлайл С.Х. // Кристаллография. 1968. Т.13, №5. С.927.
31. Маккей А.Л. // Кристаллография, 1981. Т.26, №5. С.910.
32. Mackey A.L. in: Symmetry: Unifying Human Understanding. Ed. I. Hargittai. Pergamon Press, N.-Y. 1986. P.21.
33. Бульенков Н.А., Клечковская В.В. Тезисы докладов на III нац. Конференции «РСНЭ» Москва. 2001. С.194.
34. Бульенков Н.А. // ДАН СССР 1986. Т.290, №6. С.1392.
35. Coxeter H.S.M. Regular Complex Polytopes. Cambridge University Press. 1984.
36. Лобышев В.И., Соловей А.Б., Бульенков Н.А. // Биофизика. 2003. Т.48, №6. С.1011.
37. Энгельгардт В.А. Познание явлений жизни М.: Наука. 1985, 303 с.
38. Бауэр Э.С. Теоретическая биология Москва – Ижевск. Dynamics, 2001, 279 с.
39. Шевелев И.Ш., Марутаев М.А., Шмелев И.П. Золотое сечение М. Стройиздат. 1990, 342 с.
40. Любищев А.А. Проблемы формы систематики и эволюции организмов. М.: Наука. 1982, 276 с.
41. Фейнман Р. Характер физических законов М.: Мир. 1968, 184 с.
42. Князева Е.Н., Курдюмов С.П. Законы эволюции и самоорганизации сложных систем М.: Наука. 1994, 320 с.
43. Сент-Дьердьи А. Биоэнергетика. М.: Мир. 1960, 138 с.
44. Уайтхед А.Н. Избранные работы по философии М. «Прогресс». 1990, 713 с.
45. Берг Л.С. Труды по теории эволюции. Номогенез М.: Наука. 1977, с.343.
46. Любищев А.А. // Природа. 1973, №10. С.42.
47. Любищев А.А. // Знание – сила. 1973, №5. С.26.
48. Orengo C.A., Johns D.T., Thornton J.M. // Nature, 1994, V.372. P.273.
49. Бульенков Н.А. Тезисы докладов на III съезде биофизиков России, Воронеж 2004, Т.1. С.328.
50. Сент-Дьердьи А. Биоэлектроника М.: Мир. 1971, 79 с.
51. Бульенков Н.А., Тытик Д.Л. в сб. трудов V Всероссийской конференции «Физико-химия ультрадисперсных систем». Екатеринбург, 2001, ч.I. С.31.
52. Вернадский В.И. Проблема геохимии IV «О правизне и левизне» М.-Л.: Изд-во АН СССР. 1940, 14 с.
53. Бульенков Н.А. Тезисы докладов на II съезде биофизиков России. Москва 1999. Т.III. С.761.
54. Ньюман У., Ньюман М. Минеральный обмен кости. М.: Мир. 1961, 270 с.
55. Рис Э., Стернберг М. От клеток к атомам М.: Мир. 1988, 141 с.
56. Belia I., Eaton M., Brodsky B., Verman H.M. // Science. 1994. V.266. P.75.
57. Костов И. Минералогия М.: Мир. 1971, 584 с.
58. Бэссет А. Молекулы и клетки, выпуск 2. М.: Мир. 1967. С.163.



59. Лима де Фариа А. Эволюция без отбора. Автоэволюция форм и функций. М.: Мир. 1991, 371 с.
60. Степин В.С. в сб. «И.С. Алексеев. Деятельностная концепция познания и реальность» М. RUSSO. С.475.
61. Чайковский Ю.В. в сб. Исследования по математической биологии. Пущино. 1996. С.173.
62. Шрейдер Ю.А. в сб. «А.А. Любищев» Л.: Наука, 1982. С.102.
63. Грин Д., Гольдбергер Р. Молекулярные аспекты жизни М.: Мир. 1968, 399 с.