

НАНОСТРУКТУРЫ

математическая физика и моделирование



НАНОСТРУКТУРЫ

математическая физика и моделирование

Nanostructures.
Mathematical Physics & Modelling

2017, volume 17(2)

Наноструктуры. Математическая физика и моделирование

Редколлегия:

В.А. Аветисов, И.В. Волович, В.В. Гусаров, П.Н. Дьячков, Р.Г. Ефремов, М.В. Карасев (зам. главного редактора), Ю.Е. Лозовик, М.А. Мазо, В.П. Маслов (главный редактор), А.В. Махиборода (ответственный секретарь), А.Ю. Морозов, С.А. Никитов, Г.Э. Норман, Р.А. Сурис, В.А. Тулин, В.Е. Фортов, А.С. Холево, А.Р. Хохлов, А.В. Чаплик, Л.А. Чернозатонский, К.В. Шайтан

Электронная версия журнала размещается на сайте
<http://nano-journal.ru>

Адрес редакции:

123458, Москва, ул. Таллинская, д. 34, каб. 429
+7 (495) 916-88-76
nanostructures@hse.ru

Москва

© 2017, Европейский центр по качеству

Содержание

А.В. Махиборода, А.А. Подобин, А.В. Ильичёв Проблемы моделирования феномена самосборки (ч. II)	5
Ю.М. Брук, А.Л. Стасенко Ионно-кристаллические структуры и планеты. Опыт качественного моделирования	49
Д.М. Сергеев Особенности электротранспортных характеристик наноконтакта «AU – 1,8-nonadiyne – AU»	64
Семенов К.О. О процессе охлаждения лазерной мишени с образованием в ней криогенного топливного слоя	74
Информация и правила для авторов	85

Contents

A.V. Makhaboroda, A.A. Podobin, A.V. Ilichev Problems of modeling of the self-assembling phenomenon (pt. II)	5
Yu.M. Bruk, A.L. Stasenko On-Crystal Structures and Planets.An Experience of Qualitative Modeling	49
D.M. Sergeyev Peculiarities of electric transport characteristics of nanocontact «AU-1,8-nonadiyne-AU»	64
Semenov K.O. On the process of cooling of a laser target with formation of a cryogenic fuel layer in it.	74
The information and rules for authors	85

ПРОБЛЕМЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ФЕНОМЕНА САМОСБОРКИ (Ч. II)

А.В. Махиборода*, А.А. Подобин, А.В. Ильичёв

*Департамент прикладной математики МИЭМ,
Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»*

makhiboroda@yandex.ru

Поступила 28. 05. 18

В статье подводятся итоги обзора данных наблюдения процессов самосборки вирусных капсидов, изложенного в первой части. Формулируется главная задача математического моделирования самосборки как конструирование специфической знаковой системы, порождающей алгоритмическую динамику, адекватную процессам самосборки и не имеющей аналогов в современной компьютерной технике. Излагаются основы дискретной динамики, построенной на базе понятия дискретный аттрактор, обсуждаются возможности и перспективы построения математических моделей самосборки на базе дискретного аттрактора.

УДК 51-76

DOI: 10.31145/2224-8412-2017-17-2-05-48

Введение

В первой части настоящей статьи [1] был сделан обзор накопленных данных экспериментальных наблюдений процессов самосборки вирусных капсидов. Анализ данных наблюдений позволяет обосновать тезис о том, что процессы самосборки представляют собой специфическую форму алгоритмического поведения, реализованную на молекулярном уровне. Отсюда следует естественный вывод о том, что средства математического моделирования процессов самосборки должны воспроизводить алгоритмическую

* Работа выполнена в 2018 году при поддержке Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ

динамику, соответствующую данным наблюдения. Практика конструирования вычислительных средств и информационных технологий имеет адекватный теоретический фундамент, позволяющий строить разнообразные формальные модели алгоритмического поведения. Кроме того, в [1] показано, что во внутриклеточной среде имеется, по крайней мере одно, явление, а именно система синтеза белков, которая представляет собой алгоритмическую систему аналогичную современному компьютеру и управляемую линейными императивными языками. А поскольку данные экспериментов убедительно показывают, что явление самосборки основано на алгоритмической динамике, возникает непреодолимый соблазн использовать для нужд математического моделирования самосборки имеющийся аппарат теории алгоритмов. Особым доверием и значительной популярностью при математическом моделировании биологических явлений пользуется теория клеточных автоматов фон-Неймана [2, 3, 4]. Однако прежде чем сделать выбор применяемых математических средств необходимо обосновать их адекватность наблюдаемым явлениям.

В жизненном цикле белков сосуществуют и тесно взаимодействуют разные формы алгоритмического поведения, которые поддерживаются знаковыми системами разных типов. Первая это система синтеза первичной структуры белка. Первичная структура белка представляет собой полипептидную цепь, состоящую из аминокислотных остатков. Система синтеза первичной структуры полностью аналогична современному компьютеру и управляется знаковой системой, построенной на базе линейного императивного языка. Основные атрибуты этой знаковой системы идентифицированы и зафиксированы экспериментально. Это в первую очередь символьная копия первичной структуры белка, реализованная в молекулах ДНК в виде последовательности символов генетического кода. В составе знаковой системы существует комплекс процедур копирования и редактирования первичной записи, который завершается формированием матричной РНК. В составе знаковой системы существует также механизм интерпретации символьной копии, сосредоточенный в рибосомах, сопутствующих белках и транспортных РНК. Механизм интерпретации осуществляет управляемый синтез первичной структуры белка путём последовательного прогона матричной РНК через рамку чтения рибосомы и выполнения пошаговых процедур, где каждый шаг состоит из поиска, доставки и встраивания в полипептидную цепь соответствующей молекулы аминокислотного остатка. Далее начинается фолдинг белка, в ходе которого формируются структуры второго, третьего и четвёртого порядков. В итоге белок принимает форму глобулы, на поверхность которой «выпептливаются» определённые участки первичной цепи, образующие, так называемые активные центры.

Наблюдения ансамблей капсидных вирусных белков демонстрируют вторую форму алгоритмического поведения – самосборку вирусных капсидов. Здесь и возникает главная проблема – динамика поведения белков при построении вирусных капсидов носит явно алгоритмический характер, а атрибуты известных нам знаковых систем, порождающих алгоритмическую динамику, отсутствуют. В явлении самосборки вирусных капсидов отсутствует какой-либо аналог носителя символьной записи, представляющей копию собираемой структуры. Отсутствует манипулятор, собирающий и прикрепляющий капсидные белки друг к другу. Белки сами перемещаются, находят друг друга и осуществляют избирательные акты взаимодействия. Управление и глобальная регуляция процесса самосборки как целого является результатом локальных взаимодействий отдельных участников процесса. Вся управляющая процессом самосборки информация содержится непосредственно в участниках процесса. Набор капсидных белков представляет собой связанный ансамбль, являющийся носителем феномена распределённого молекулярного

программирования. Очевидно, что алгоритмическая динамика самосборки порождается знаковой системой другого типа, отличной от знаковых систем, построенных на базе линейных императивных языков, работающих в компьютерных системах и системах синтеза первичной структуры белков.

Разработка математической модели знаковых систем, порождающих алгоритмическую динамику, адекватную процессам самосборки и есть задача настоящей работы. А теперь посмотрим – чем может быть полезна теория клеточных автоматов для решения поставленной задачи. Теория клеточных автоматов изложена фон Нейманом в книге «Теория самовоспроизводящихся автоматов» [5]. Здесь необходимо отметить, что книга была издана после смерти фон Неймана его другом и соратником Артуром Бёрксом. Бёркс написал пространное введение, в котором подробно обсуждается концептуальная основа теории клеточных автоматов. Изложенное во введении, основано на подробных обсуждениях концептуальных проблем, которые вели Бёркс и фон Нейман при жизни. Во введении излагается очень важный и продуктивный методологический приём. Ввиду высокой сложности проблемы самовоспроизведения предлагается разделить её на два аспекта: логический и кинематический. При этом кинематика может быть очень сложной и для разных явлений самовоспроизведения различной, а вот логика будет для всех одна и её можно исследовать относительно независимо от кинематики. Далее Бёркс со слов фон Неймана излагает воображаемый модельный эксперимент, в котором кинематика носит механистический характер и намеренно упрощена до очевидности. Рассматривается океан, на поверхности которого плавают некие агрегаты и автомат сборщик. Агрегаты представляют собой компоненты, из которых собираются автоматы. Агрегаты помечены символами. Агрегатов всех типов неограниченно много и они совершают хаотические движения, как молекулы некоего газа. Это декларируется в модели с целью создания ситуации, в которой автомат сборщик обладает неограниченными возможностями сборки автоматов. Конструкция автомата сборщика состоит из стержня жёсткости, на который нанизываются агрегаты в определённой последовательности. Разные последовательности агрегатов образуют разные автоматы и создают некое разнообразие автоматов. Автомат сборщик так же представляет собой последовательность агрегатов, нанизанных на стержень жёсткости. На поверхности океана имеется также неограниченное количество стержней жёсткости. Автомат сборщик содержит в своём составе агрегат манипулятор и агрегат читающую головку. В читающей головке имеется лента, на которой расположена запись символьной цепи. Читающая головка продвигает ленту, обозревает текущий символ, а автомат по данному символу отыскивает соответствующий агрегат. Манипулятор захватывает найденный агрегат и нанизывает его на стержень жёсткости. Таким образом, автомат сборщик продвигает ленту в читающей головке и собирает автоматы из некоторого заданного класса автоматов. В данном модельном эксперименте создана безпроблемная кинематика и созданы очищенные условия для исследования логического аспекта самовоспроизведения.

Логика самовоспроизведения, предложенная фон Нейманом состоит в следующем. Автомат сборщик собирает автомат по записи на ленте. Затем он копирует ленту и вставляет её в читающую головку вновь собранного автомата. С этого момента вновь собранный автомат воспроизводит свои собственные копии. Такова логика самовоспроизведения и концептуальная основа теории клеточных автоматов. Далее, по словам автора введения, весь последующий текст книги излагает достаточно сложную формальную систему математического воплощения представленной концепции. Этот формализм и есть теория клеточных автоматов.

По нашему мнению в данной работе фон Неймана при изложении концептуальной

основы проблема логики самовоспроизведения проработана явно не достаточно. Все манипуляции с лентами это и есть кинематика. Логическая проблема самовоспроизведения требует ответа на вопрос – кто вставляет символьную копию автомата в его читающую головку первый раз и где он берёт эту символьную копию. Если авторы намерены создать самодостаточную логику самовоспроизведения, то в данном модельном эксперименте эти операции должен осуществлять автомат. В модели, изложенной фон Нейманом, эти важнейшие действия представляют собой посторонние факторы, которые разрушают идею логической замкнутости и самодостаточности процесса самовоспроизведения. На языке данного модельного эксперимента логическая проблема самовоспроизведения должна быть сформулирована следующим образом – может ли автомат создать символьную копию самого себя и как реально выполнить эту процедуру. По другим источникам можно понять, что фон Нейман это вполне осознавал и неоднократно обсуждал этот вопрос со своими коллегами. Мы не станем углубляться в эту проблему в настоящей статье и попытаемся ответить на следующий вопрос: быть может формализм теории клеточных автоматов окажется полезен для построения алгоритмической системы, адекватной процессам самосборки? На этот вопрос мы вынуждены дать отрицательный ответ. В соответствии с текстом книги теория клеточных автоматов является воплощением концепции сосредоточенного управления процессом. В основе знаковой системы, предложенной фон Нейманом, лежит символьная копия объекта, монтажные действия осуществляются централизованно специальным манипулятором, элементы пассивно плавают на поверхности и не обладают никакой монтажной активностью. Данные наблюдений процессов самосборки не соответствуют перечисленным концептуальным положениям. При самосборке символьная копия объекта отсутствует, манипулятор сборщик отсутствует, элементы активны и самостоятельно совершают избирательные монтажные акты.

Проблема математического моделирования феномена самосборки может быть решена только в результате разработки знаковой системы нового типа, не имеющей аналогов в существующих информационных технологиях.

1. Выбор языка описания проблем и задач моделирования самосборки

Настоящая статья носит существенно междисциплинарный характер и в качестве потенциальных читателей предполагает биологов, биохимиков, физиков, математиков, специалистов по информационным технологиям и ряду других отраслей науки и техники. Опыт участия в семинарах и личного общения показывает, что утверждения типа «на молекулярном уровне функционируют знаковые системы, поддерживающие алгоритмические формы поведения», как минимум вызывают недоумение, а в ряде случаев полное отторжение. Это парадоксально при условии, что во всех школьных учебниках ДНК подаётся как молекула, содержащая запись генетической информации. Фрагментарные факты существования информационных атрибутов на молекулярном уровне давно стали привычными и никого не удивляют, а вот системные утверждения об алгоритмическом поведении молекулярных ансамблей нуждаются в тщательном разьяснении и обосновании. В этих условиях выбор приемлемого для всех языка и изложение исходного понятийного аппарата может потребовать целых томов научного текста и выведет нас далеко за пределы возможностей написания журнальной статьи. К счастью эта работа уже проделана и освящена авторитетом целого списка Нобелевских лауреатов. Примерно в начале 80-х, середине 90-х сложилась новая дисциплина – супрамолекулярная химия (Supramolecular Chemistry). На русском языке это звучало бы как надмолекулярная хи-

мия. Имеется ряд монографий, переведенных на русский язык в частности «Супрамолекулярная химия: Концепции и перспективы», написанная основателем новой дисциплины, выдающимся французским химиком, лауреатом Нобелевской премии по химии 1987 года Жан Мари Леном [6, 7, 8].

Предметом изучения супрамолекулярной химии являются надмолекулярные структуры, образованные без ковалентных и водородных связей. Мы сразу же должны отметить, что вирусные капсиды, описанию которых посвящена вся первая часть статьи, как раз и являются такими надмолекулярными структурами. Приведём несколько цитат из монографии Лена [6], в которых формулируются задачи и идеология супрамолекулярной химии. «Супрамолекулярная химия исследует взаимодействия запрограммированных, несущих информацию молекул, это химия программируемых высокоселективных нековалентных взаимодействий». «Супрамолекулярные ансамбли состоят из большого числа комплементарных компонентов, хранящих на молекулярном уровне информацию о конкретных селективных взаимодействиях». Из этих высказываний следует, что создатели супрамолекулярной химии рассматривают вещество в качестве носителя информации, а определяющим фактором межмолекулярных взаимодействий считают информационное содержание молекул, участвующих в процессах агрегации. Второе важнейшее положение супрамолекулярной химии заключается в том, что молекулярные взаимодействия носят избирательный селективный характер и основаны на процедурах молекулярного узнавания. Оба эти положения носят взаимообусловленный и взаимодополняющий характер. Следующее важнейшее положение супрамолекулярной химии это положение о молекулярном программировании, которое проявляется в виде существования супрамолекулярных ансамблей, в которых развиваются запрограммированные процессы агрегации, приводящие к формированию сложно организованных систем, обладающих определённой структурой и функцией. Результатом программируемых процессов, протекающих в супрамолекулярных ансамблях является не формирование сплошных сред, а образование молекулярных машин с определённой архитектурой и с определёнными электро-, ионными-, фото-, термохимическими и другими свойствами. Это важно учитывать при выборе математических средств моделирования исследуемых явлений. Здесь речь идёт о математическом представлении поведения ограниченных молекулярных ансамблей и сборке единичных супрамолекулярных агрегатов. В этой ситуации неуместны аналитические модели, основанные на континуальном приближении, здесь требуются дискретные модели.

Значительную роль в методологической основе супрамолекулярной химии занимает концепция связывания по принципу «гость – хозяин» или её ещё называют «ключ – замок». В структуре взаимодействующих молекулярных объектов выделяются функциональные фрагменты, которые называют центрами связывания. В простейшем случае пара взаимодействующих центров связывания это впадина и выпуклость, имеющие комплементарные совмещающиеся формы. В процессе супрамолекулярного комплексообразования выделяются три фазы – фаза связывания, фаза узнавания и, наконец, закрепления. Подробно обсуждаются возможные физические характеристики комплементарных поверхностей и энергия связывания. В первую очередь оцениваются ион-ионные взаимодействия, энергия связи которых ($100-300 \text{ кДж-моль}^{-1}$) сравнима с ковалентным связыванием. Далее идут ион-дипольное взаимодействие с энергией связывания $50-200 \text{ кДж-моль}^{-1}$ и диполь-дипольные взаимодействия с энергией связывания $5-50 \text{ кДж-моль}^{-1}$ и, наконец, силы Ван-дер-Ваальса с энергией взаимодействия порядка 5 кДж-моль^{-1} . Однако проблема связывания в супрамолекулярной химии не ограничивается рассмотрением только потенциальных взаимодействий, в действительности имеет место самая широкая

трактовка этого явления. В том числе активно осваиваются такие экзотические с точки зрения химии как механическое шарнирное связывание. Некоторые варианты супрамолекулярного связывания приведены на рис. 1

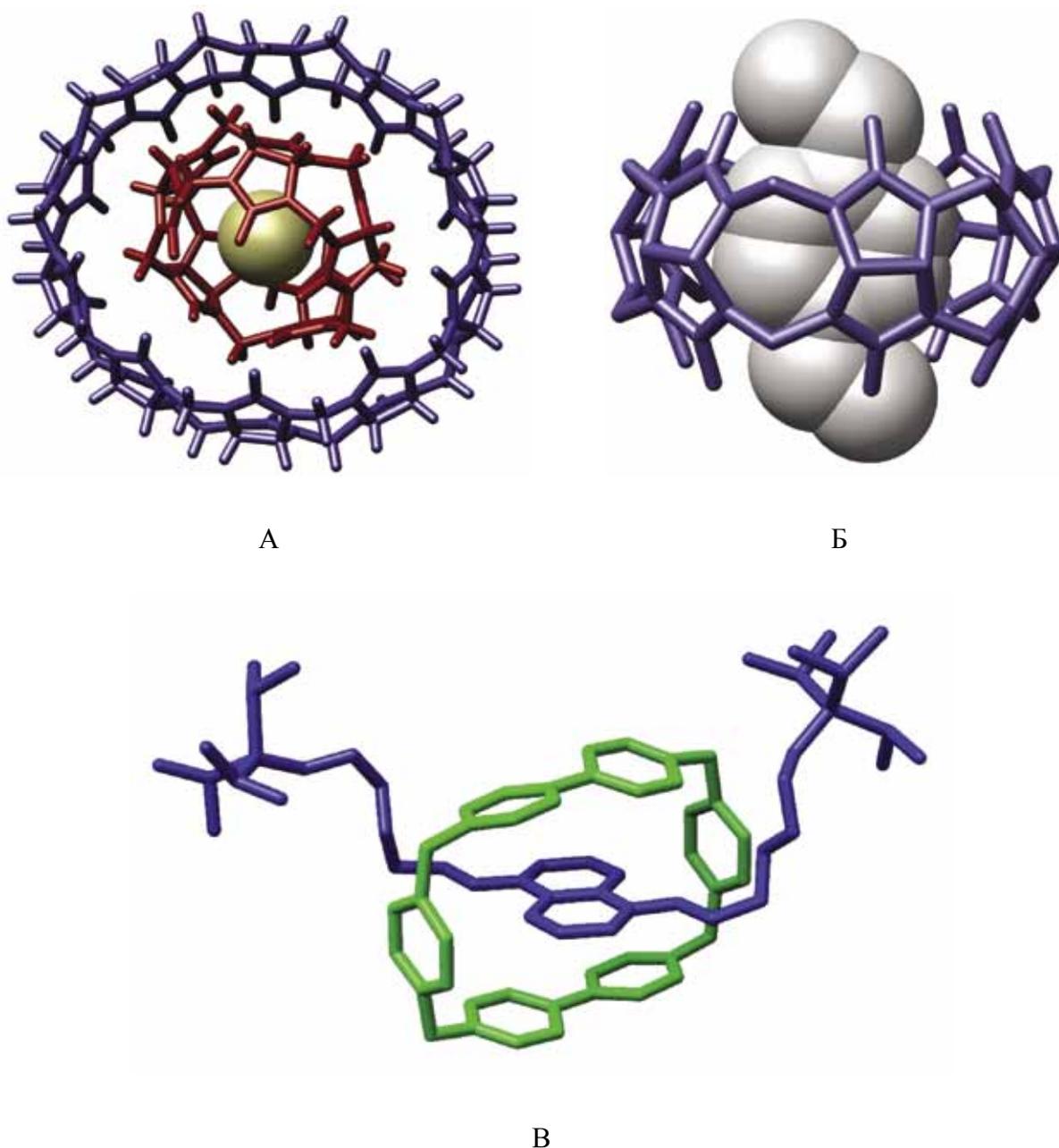


Рис. 1. Примеры связывания в супрамолекулярной химии

Особый интерес представляет связь, изображённая на Рис. 1 В. Это так называемая гантель, охваченная кольцом. В этой структуре между молекулами вообще нет непосредственно связывающего взаимодействия, и, тем не менее, это комплекс, объединённый механической связью, обладающий определённой подвижностью и достаточным запасом прочности. Аналогичным образом строятся супрамолекулярные структуры на основе переплетённых колец, состоящих из циклических полимеров. Существует сферический вирус, в котором второй слой капсида состоит из белков, образующих систему переплетённых колец наподобие кольчуги. При этом отдельные, замкнутые в кольцо молекуляр-

ные цепи не взаимодействуют друг с другом на уровне химических или потенциальных связей. Капсид этого вируса обладает высокой устойчивостью и не повреждается даже при длительном кипячении. Важно учитывать, что образование кольчужного плетения не может произойти при хаотических спонтанных движениях. Формирование кольчужного плетения требует согласованного поведения белков и развёртывания строго определённой последовательности монтажных действий.

Достаточно основательно в супрамолекулярной химии разрабатывается проблема комплементарности, которая характеризуется геометрической конфигурацией, потенциальным профилем, термодинамическими, кинетическими показателями. Кроме того, детально рассматривается динамическая составляющая взаимодействия [6]. Исследуется явление комплементарности на временной координате, что требует учёта динамики ядерных релаксаций и обнаружения согласованности и синхронизации движений взаимодействующих фрагментов.

Поскольку вирусный капсид это типичный объект изучения супрамолекулярной химии создатели этой новой дисциплины уделили значительное внимание проблеме самосборки. Создатели супрамолекулярной химии рассматривают явление самосборки в биологии как источник многочисленных и продуктивных аналогий. По их мнению, явление самосборки не следует считать исключительной прерогативой биологической науки. Исследования самых разнообразных супрамолекулярных объектов позволяют распространить опыт изучения явления самосборки за пределы биологических наук, исследующих поведение белков, клеток, тканей, эмбрионов и т. п. В супрамолекулярной химии изучаются принципы самосборки абиотических объектов. В связи с проблемой переноса методов исследования явления самосборки в область супрамолекулярной химии были предприняты попытки переосмысления многочисленных фактов наблюдений, накопленных в биологии. В первую очередь это касалось создания специальной терминологии, упорядочения взаимосвязанных явлений и построения иерархических конструкций. Обстоятельно на эту тему написано в [8].

В супрамолекулярной химии различают два разных метода управления агрегацией и сборкой, которые называют соответственно темплатированием и самосборкой. Темплатирование считается предшественником самосборки и его ещё называют шаблонированием. Наглядной иллюстрацией взаимодействия двух методов самосборки является сборка капсида вируса табачной мозаики (ВТМ). Формирование двухслойного диска, состоящего из двух колец, каждое из которых содержит по 17 молекул капсидного белка – это пример самосборки, происходящей спонтанно, в результате взаимодействия капсидных белков и без воздействия внешних факторов. Дальнейшее преобразование двухслойного диска в спираль и наращивание капсида путём пристыковки новых дисков под управлением вирусной РНК – это типичный пример темплатирования. При этом РНК управляет поддержанием размера капсида ВТМ с точностью до одной молекулы. К темплатированию следует также отнести процесс синтеза первичной структуры белка на рибосоме, здесь матричная РНК выступает как предопределяющий и направляющий фактор.

Важным свойством самосборки в отличие от темплатирования является факт безальтернативности протекания процесса при отсутствии внешнего управления. В связи с этим вводится понятие запрограммированного ансамбля элементов. При этом элемент участник самосборки как специфическая сущность получает название *тектон*, что в переводе с греческого означает *строительный элемент*. Подчёркивается самодостаточность набора тектонов. Всё что требуется для получения достаточно сложной нетривиальной итоговой структуры это присутствие заданного набора тектонов в некоторой

окрестности их взаимодействия и наличие требуемых условий среды. Далее многостадийные и многошаговые процессы агрегации протекают безальтернативно. Важным фактором считается относительно низкая энергия супрамолекулярных связей, что способствует возможности их разрыва в случае возникновения ошибки и запуска процесса репарации и самовосстановления. Свойство обратимости самосборки означает, что самосборка и саморемонт это по сути один процесс достижения устойчивого состояния термодинамического равновесия. Самодостаточность набора тектонов и предопределённость его поведения в ходе самосборки является проявлением специфического явления – молекулярного программирования.

В супрамолекулярной химии основополагающим понятием является селективное избирательное взаимодействие компонентов агрегации, основанное на явлении химического узнавания. Эта функция сложного взаимодействия, узнавания и связывания возлагается на специально выделенные сегменты в составе тектонов, которые получили название центров связывания. Центры связывания, располагаются на поверхности молекул или другими словами имеют определённую дислокацию и ориентацию на тектоне. Кроме того, центры связывания должны выполнять ряд сложных функций, определяющих динамику развития последовательности актов агрегации. Специалисты по супрамолекулярной химии утверждают, что движущим фактором, определяющим динамику самосборки, являются селективные взаимодействия, осуществляемые центрами связывания.

В разработанной терминологии также находит отражение факт иерархической обособленности процессов в явлении самосборки. Иерархия возникает в результате локализации в наборе тектонов обособленных кластеров. Обособленные кластеры никогда не пересекаются, тектоны, входящие в кластер взаимодействуют только внутри кластера, кластеры функционируют независимо и параллельно. В результате порождаются агрегаты и субагрегаты, которые начинают взаимодействовать между собой, образуя следующий уровень иерархии самосборки, позволяющий собирать более сложные и объёмные структуры. Для терминологического оформления этого явления в супрамолекулярной химии вводится дополнительный термин самоорганизация. Считается, что самосборка это процесс агрегации тектонов, а самоорганизация это процесс агрегации агрегатов и субагрегатов, продуктов самосборки.

Достаточно много внимания в супрамолекулярной химии уделяется концептуальному обоснованию динамической природы самосборки, часто используется термин самопроцессы. На наш взгляд использование этого экзотического термина говорит о подсознательном стремлении обособить проблему описания динамики самосборки от традиционного представления процессов как функций от времени. По умолчанию признаётся, что для описания динамики самосборки требуется дискретная причинно-следственная модель динамики. Много говорится о каскадных реакциях, которые представляют собой однозначную последовательность шагов, каждый из которых делает возможным следующий. При этом явно обозначается проблема регуляции процесса и понимания механизма остановки. В [8] утверждается, что решение проблемы остановки есть самая интригующая и амбициозная задача математического моделирования самосборки.

По проблеме исследования динамики самоподдерживающихся процессов определённый интерес представляют работы известного португальского биохимика Лима-де-Фариа [9], [10]. В частности книга «Эволюция без отбора. Автоэволюция формы и функции» [9], в которой подробно обсуждается идея самоподдерживающихся процессов и много внимания уделено проблеме самосборки. Нашего внимания заслуживает следующую

щая цитата из этой книги: «Случайность и зависимость от внешней информации чужды явлению самосборки».

В целом терминология и понятийный аппарат супрамолекулярной химии ещё не установился окончательно и находится в стадии становления и разработки. Этот процесс, по мнению разработчиков должен привести к становлению молекулярной информатики и семиохимии (или химической семиотики), в которых будут доминировать процессы молекулярного программирования, хранения, считывания и преобразования молекулярной информации.

Традиционно доминирующие представления о молекулярном поведении основаны на учёте энтропийных тенденций и оценке энергетических состояний молекул. При этом математические модели, как правило, основаны на усреднениях по большим ансамблям. При исследовании явлений молекулярной самосборки мы сталкиваемся с принципиально другой ситуацией. Процессы носят детерминированный алгоритмический характер. Движущим фактором процессов являются избирательные взаимодействия, которые направляются информационным содержанием сложных макромолекул. Заданные траектории самосборки строго выполняются при агрегации единичных объектов, состоящих из небольшого числа исходных компонентов.

Построение моделей самосборки в терминах информационного содержания молекул и функционирования знаковых систем требует серьёзного обоснования правомерности такого подхода. Цитирование литературы по супрамолекулярной химии избавляет нас от такой необходимости.

2. Концепция кодовых замков

В первой части настоящей статьи сформулированы основные требования и определён общий облик знаковых систем, порождающих алгоритмическое поведение адекватное данным наблюдениям процессов самосборки вирусных капсидов. В принципе существует готовность к изложению выбора математических средств и построению формальных знаковых систем на их основе. Однако, требуется выполнить ещё один шаг приближения к построению математических моделей – необходимо сконструировать среду, в которой эти модели могут быть реализованы. Мы определяем процедуру построения этой среды как процесс разработки концепции кодовых замков. Концепция кодовых замков состоит из ряда положений, содержание которых обобщает и концентрирует ранее накопленные данные экспериментальных наблюдений самосборки.

Положение 1. О кодовых замках и их дислокации. Основной отличительный признак явления самосборки это наличие у участников агрегации определённых функций и заданных форм поведения. Концепция кодовых замков определяет носителей этих функций. На поверхности капсидных белков экспериментально выявлены сайты связывания, ответственные за все функции избирательного взаимодействия. В модельной среде эту роль выполняют кодовые замки. Кодовые замки располагаются на поверхности белков и имеют определённую дислокацию. Кодовые замки осуществляют функции прикрепления и порождают силы удержания прикрепления. Кодовые замки это модельная абстракция и на первичных стадиях разработки моделей не нуждаются в определении природы этих сил и механизмов связывания. Определение физической реализации замков может быть отложено до стадии интерпретации модели. В модельном эксперименте достаточно постулировать факт наличия механизма связывания, сил удержания и определённой дислокации кодовых замков.

Важнейшей характеристикой кодовых замков является их дислокация на поверхности белков. Управляя расположением замков на поверхности белков можно справиться с

проблемой морфогенеза без привлечения экзотических сил морфогенетического поля и каких-либо других внешних воздействий. В работе [11] показано на наглядных примерах как, меняя расположения замков и выбирая правила захвата можно влиять на порождение простых геометрических форм. Примеры иллюстрируются на Рис. 2.

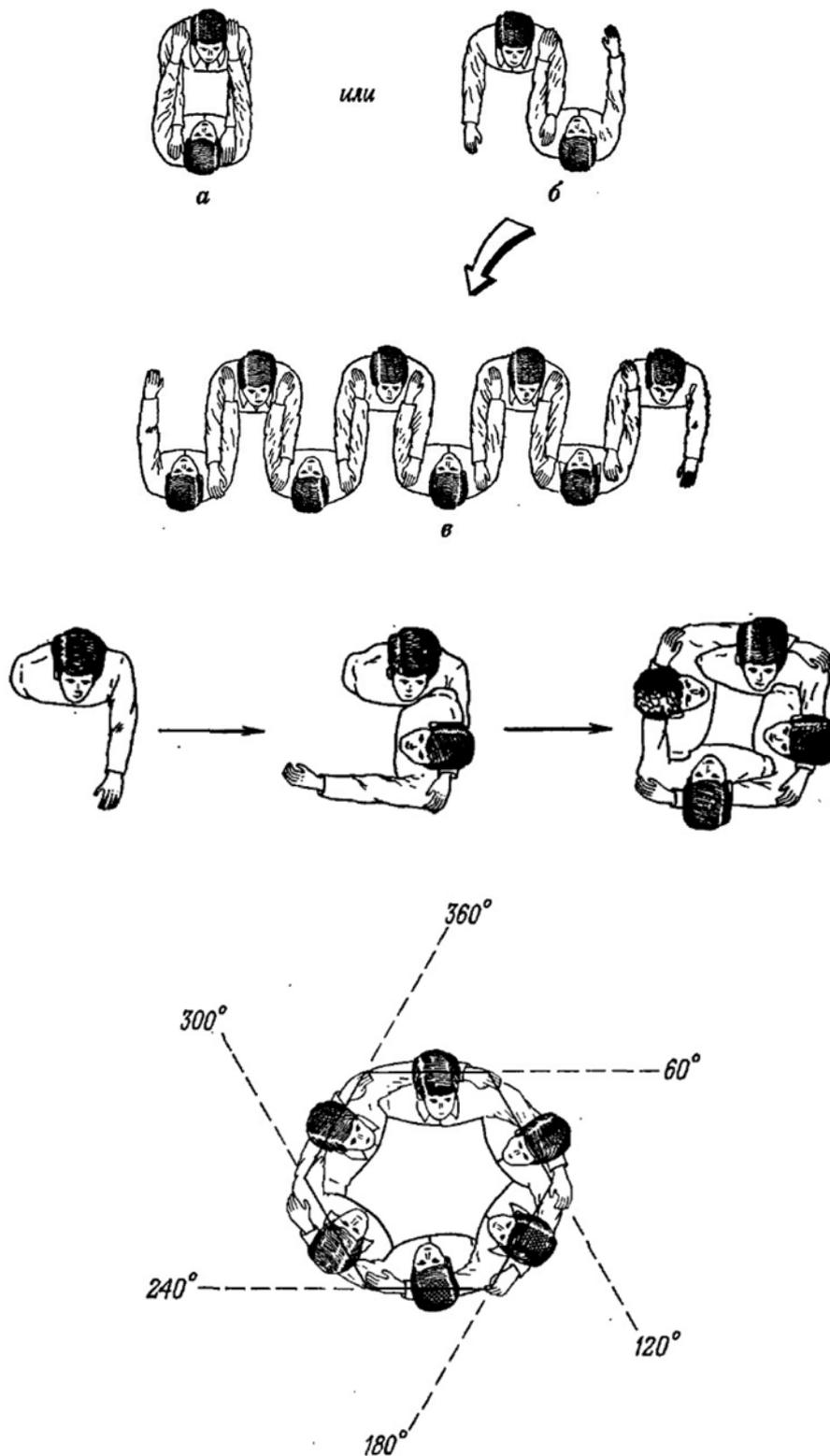


Рис. 2. Иллюстрация управления порождением простых геометрических форм выбором правил взаимодействия замков и их расположением (рисунок позаимствован из [11])

Примем в рамках модельного эксперимента, что исходные участники самосборки тектоны имеют сферическую форму и на их поверхности могут располагаться кодовые замки, которые представляют собой выступы в виде дисков. Ориентация дисков ортогональна радиусу. Посмотрим как расположение замков может повлиять на формообразование при их срабатывании. Результаты изображены на Рис. 3.

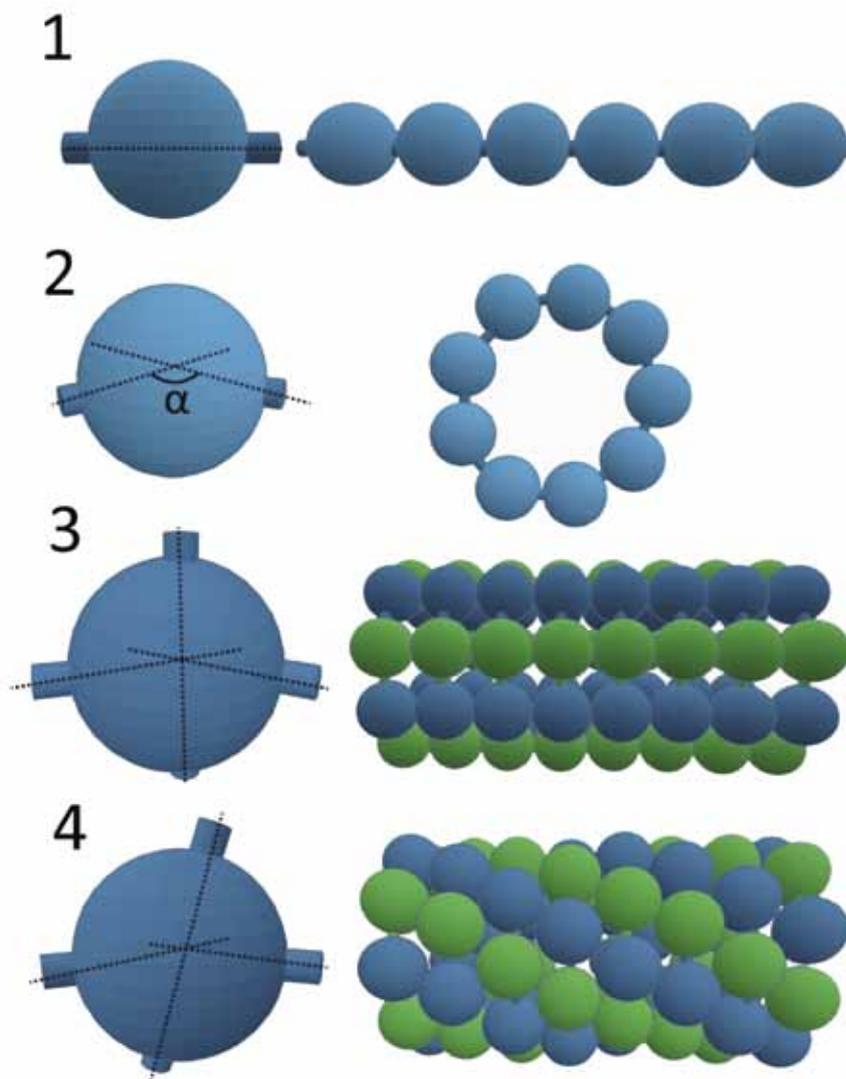


Рис. 3. Примеры формообразования как следствия расположения замков

На рис. 3.1 каждый тектон имеет два замка, расположенные на концах диаметра. Такой вариант расположения замков при их срабатывании порождает линейные структуры типа длинных усиков. На рис. 3.2 замки располагаются под некоторым углом в экваториальной плоскости. В результате их срабатывания тектоны располагаются в одной плоскости и могут собираться в кольца. Размеры колец будут определяться углом взаимного расположения замков. На рис. 3.3 к предыдущему варианту расположения замков прибавляется пара новых замков, лежащих на полюсах или на концах диаметра, ортогонального экваториальной плоскости. В этом случае кольца станут собираться в стопки и образовывать трубки с сосной укладкой тектонов по вертикали.

На рис. 3.4 вертикальный диаметр поворачивается под небольшим углом к экваториальной плоскости. В этом случае вертикальная укладка производится со сдвигом и по вертикали образуются спиральные линии. Заметим, что смоделировать спиральную укладку мономеров, аналогичную структуре капсида ВТМ при принятых упрощениях уже не удаётся. Для построения спирали ВТМ необходим более точный учёт формы мономера и дополнительные данные об ориентации замков, имеющих более сложную протяжённую форму. (В рассмотренном примере была принята квазиточечная концепция замков, в которой учитывалась только точка расположения замка на сферической поверхности тектона). Рассмотренный пример нам понадобился для иллюстрации того, что проблему формообразования можно моделировать не воздействием внешних сил, а внутренним устройством тектонов.

Положение 2. О кодовых метках и правилах взаимодействия замков. Следующая важнейшая особенность явления самосборки это селективность и избирательность взаимодействий участников процесса агрегации. Учёт этого факта приводит к необходимости постулировать существование в модельной среде кодовых меток, привязанных к замкам. Если факт избирательности взаимодействий установлен экспериментом, в модельной среде это свойство должно быть поддержано постулированием индикаторной разметки участников процесса. Поскольку носителями взаимодействий мы определили центры связывания в виде замков, замки должны быть помечены кодами и, таким образом стать кодовыми замками. Установление физической природы кодовых меток, выбор носителей комбинаторики и прочее не важны для модельного эксперимента и могут быть отложены до стадии интерпретации модели. Если существует физическое разнообразие, позволяющее идентифицировать определённое множество различных кодовых замков, в модельном эксперименте их можно занумеровать. А если есть множество натуральных номеров, то их можно для удобства моделирования заменить, например, двоичными кодами. Важно понять, что наличие требуемого разнообразия кодовых меток не должно противоречить реальному устройству белков.

Поддержка структурного разнообразия, порождающего возможность индикаторной разметки большого числа кодовых замков, основывается на способности белков к конформационным трансформациям. Важно на начальной стадии разработки модельной среды оценить потенциал допустимого кодового разнообразия. Если судить по данным состава и структуры вирусных капсидов, порядок кодового разнообразия должен составлять тысячи, а возможно и десятки тысяч допустимых кодовых состояний. В работе [12] приводятся оценки конформационной подвижности белков. Приведённые в статье оценки обнадеживающие, и позволяют рассчитывать на реализуемость требуемого кодового разнообразия.

Для определения функций кодовых замков необходимо также выбрать логику срабатывания замков по состоянию кодов. Здесь допустимо значительное разнообразие, поскольку физическая интерпретация замков пока не определена. Следует учитывать, что комплементарность замков может носить не только пространственный характер, но и временной. Совместимость замков может быть реализована как взаимодействие колебательных процессов с элементами синхронизации или резонанса. Следовательно, на уровне работы с кодовыми метками можно рассматривать срабатывания кодовых замков по совпадению кодов, по их инверсии или по другим операторам совмещения.

Положение 3. О кодовых трансформациях. Принимается порядок срабатывания кодовых замков, при котором в функции сработавшего замка входят мероприятия по подготовке следующего шага агрегации. Сработавшие замки выбывают из процесса и для его продолжения должны быть созданы или активированы следующие наборы

замков. Это означает, что на поверхности белка создаются один или несколько новых кодовых замков и этим новым замкам присваиваются новые значения кодов. Процесс создания новых замков не обязательно должен осуществляться в результате значительной перестройки в укладке полипептидной цепи в составе третичной и четвертичной структуры белка. Все необходимые основы сайтов связывания могут быть сформированы в ходе фолдинга и пребывать в неактивном, замаскированном состоянии. В функции активных действующих кодовых замков в таком случае необходимо ввести действия по демаскированию и активации новых замков и присвоению им новых значений кодов. Новые значения кодов порождаются в результате преобразования предыдущих. Следовательно, в состав кодовых замков входят кодовые преобразователи, которые осуществляют кодовые трансформации. Кодовые трансформации это и есть динамическое ядро процесса самосборки, которое поддерживает процесс, определяет механизм его остановки и обеспечивает обратимость процесса.

Кроме кодовых трансформаций в функции кодовых замков входит также реализация механизма движения замков и изменения их дислокации. Данные наблюдений самосборки фиксируют процессы изменения формы агрегатов и субагрегатов вирусных капсидов. Это, например, преобразование двухслойного диска в спираль у вируса табачной мозаики или сжатие мягкого чехла у хвостового отростка фага T4. Образование формы определяется дислокацией замков, а трансформация формы – перемещениями замков. Следовательно, в набор функций, выполняемых замками должна входить способность к их передислокации.

Положение 4. О связности кодовых замков при локализации агрегатов и субагрегатов. Кодовые замки после выполнения текущего шага агрегации управляют процессами подготовки следующего шага – создают новые замки, осуществляют кодовые трансформации и транслируют новые коды в новые замки. Всё это означает, что в пределах молекулы капсидного белка существуют пути передачи управляющих сигналов и кодовых состояний. Это предположение можно считать вполне обоснованным, с учетом того, что белок это единая полипептидная цепь. По данным наблюдения самосборки зафиксированы многоуровневые процессы агрегации, в которых агрегаты и субагрегаты выступают как самостоятельные целостные участники процесса, взаимодействуя между собой. Это означает, что кодовые замки, поддерживающие взаимодействия агрегатов должны управлять всей совокупностью кодовых замков, размещённых на поверхности всего агрегата. Следовательно, при формировании агрегатов и субагрегатов выстраиваются пути передачи сигналов и кодовых состояний, охватывающие весь агрегат как целое. Эту функцию поддержания информационной связности агрегата выполняют кодовые замки, которые осуществляют не только силовое удержание прикреплённых белков, но и трансляцию управляющих сигналов и кодовых состояний.

Положение 5. О межмолекулярной коммуникации. Если явление самосборки основано на селективных избирательных взаимодействиях, участники процесса агрегации должны «видеть и узнавать» друг друга. А это значит, что должны существовать и выполняться функции межмолекулярной коммуникации. Целесообразно представить эти функции как многошаговую сортировку, обеспечивающую последовательность актов пространственного обособления кластеров, участвующих в сборке агрегатов и субагрегатов. Так, например, при сборке фага T4 явно обособляются группы белков, образующих головку, хвостовой отросток и фибриллы. Для успешного выполнения параллельной и независимой сборки перечисленных агрегатов необходимо пространственно разделить группы белков, образующих эти агрегаты. Далее вну-

три группы, поддерживающей сборку агрегата, выделяются подгруппы, образующие сборку субагрегатов. Например, в составе хвостового отростка отдельно и независимо собирается опорная плита. Опорная плита, в свою очередь собирается из шести стоек. И так далее пошаговый процесс селекции, сортировки и пространственного обособления групп белков доходит до отбора одной молекулы, которая выполняет конкретный монтажный акт.

Проблема движения участников самосборки и их пространственной селекции является наименее разработанной и слабо освещённой в публикациях. Тем не менее, при конструировании среды модельного эксперимента она должна быть обозначена и определена как совокупность постулатов, иначе модель не будет работать. Среда существования самосборки вирусных капсидов это водное окружение. В иных условиях самосборка не наблюдалась. Вероятным носителем межмолекулярных взаимодействий и обмена сигналами можно признать акустические колебания, распространяющиеся в водной среде благодаря упругим свойствам сетки водородных связей. Определённую роль в организации молекулярных движений может выполнять клеточный матрикс. И, наконец, в соответствии с предложенной гипотезой носителями обозначенных функций межмолекулярной коммуникации должны быть всё те же кодовые замки.

3. Основы дискретной динамики

3.1. Дискретный аттрактор

Основой динамического ядра самосборки является положение о том, что кодовые замки, выполнившие текущий шаг агрегации готовят условия выполнения следующего шага. Сработавшие кодовые замки создают новые активные замки и загружают в них новые значения кодов. Новые значения кодов порождаются как функции от предыдущих значений. Практически в модели должна быть реализована ситуация при которой имеется определённое конечное множество кодовых состояний и функциональный преобразователь, заданный на этом множестве. В математике такое построение называется структурой, заданной оператором F на конечном множестве $R = \{r_1, r_2, r_3, \dots, r_n\}$. Поскольку моделирование предполагается осуществлять программными методами как численный эксперимент, множество кодов будет представлено в виде регистровых состояний компьютера, которые можно интерпретировать как битовые векторы или как натуральные целые. В дальнейшем для задания множества кодов мы будем указывать разрядность регистров, а различные кодовые наборы по числу элементов будут масштабироваться по степеням двойки.

Оператор F может задаваться различными способами – символической записью в некоторой алгебре, записью строк операторов языка программирования, графиком отображения R в R . В данном случае график представляет собой набор точек на целочисленной решётке. Если точки на графике соединяют непрерывной линией, то это делается только для наглядности, принципиальное значение имеют только координаты расположения точек. Набор точек на целочисленной ортогональной решётке можно воспринимать как матрицу смежности ориентированного графа. Назовём его G_F , графом, порождаемым функцией F . Вершинами графа являются состояния регистров задающих множество кодов R . Рёбра определяются как упорядоченные пары $(r, F(r))$.

Кодовый замок, выполняющий операции порождения новых кодов работает как генератор рекуррентной последовательности в режиме самообращения. Схематически это изображено на Рис. 4.

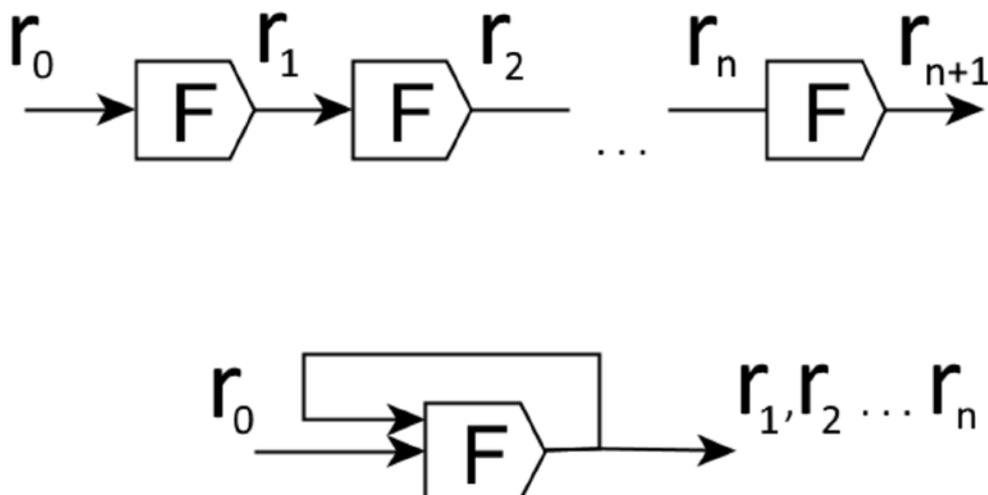


Рис. 4. Генерация рекуррентной последовательности.

Порождаемые кодовыми замками кодовые последовательности это и есть динамический каркас процесса самосборки. Важно, что динамика носит при этом саморазвивающийся характер и порождается в результате выполнения самообращающейся процедуры. Как следует из рис. 4 эта процедура представляет собой автосуперпозицию функции F . Если мы хотим понять как развиваются кодовые последовательности в результате автосуперпозиции функции F , мы должны обратиться к представлению оператора F в виде графа. Каждая конкретная кодовая последовательность, порождаемая замком в режиме самообращения, представляет собой маршрут на графе G_F . Других кодовых последовательностей замки не производят. Для понимания динамики процессов агрегации и управляемого конструирования математических моделей самосборки необходимо исследовать графовые представления структур, заданных функциональными операторами на конечных множествах. Идея представления конечных структур с оператором F в виде ориентированного графа принадлежит В. И. Арнольду. Мы будем опираться на ряд фундаментальных работ В. И. Арнольда, которые тематически объединяются одним названием – исследование геометрии функциональных пространств, заданных на конечных множествах. Работы изложены в целом ряде публикаций, например, [13, 14, 15]. Арнольд называл эти графы монадами, подчёркивая таким архаическим термином их фундаментальный смысл и значение. Мы считаем более приемлемым в данной ситуации называть их графами кодовых переходов.

Графы кодовых переходов образуют узкий специализированный класс и их свойства достаточно очевидны. Коды из заданного набора образуют множество вершин графа, каждый код имеет только однократное вхождение в граф. Граф всегда имеет хотя бы один цикл, поскольку множество кодов конечно, а оператор F всюду определён, рано или поздно набор возможных значений F будет исчерпан и произойдёт повтор уже использованных кодов. Если циклов более одного, граф распадается на непересекающиеся подграфы, или компоненты связности, каждая из которых стягивается к своему циклу. Между циклами рёбер не может быть, поскольку это нарушает функциональность оператора. Каждая вершина графа всегда имеет только одно исходящее ребро. Входящих рёбер может быть сколько угодно, в том числе и ни одного или от всех вершин. Цикл может включать весь набор кодов либо состоять из одной вершины с ребром петлёй. Примеры графов кодовых переходов приведены на Рис. 5.

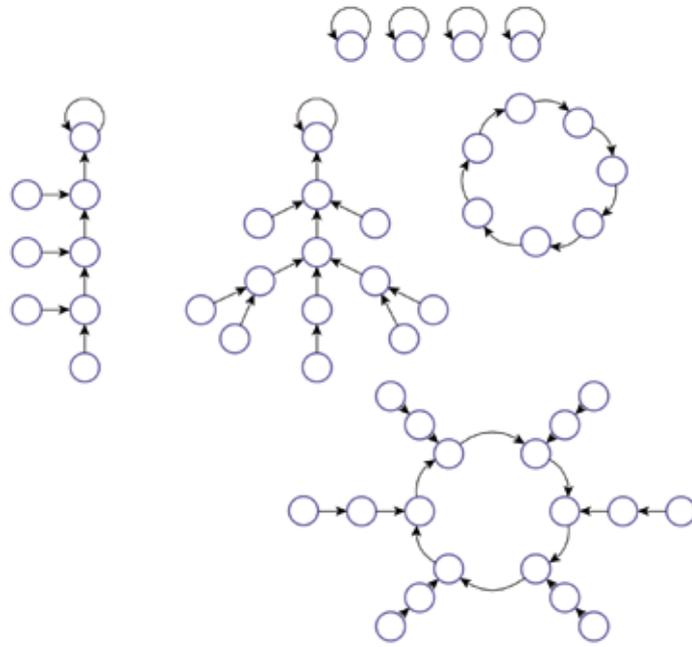


Рис. 5. Примеры графов кодовых переходов

Имеется определённая зависимость между видом графика отображения F и структурой графа G_F . На рис. 6 можно проследить, как свойства графика функции F проецируются на свойства графа кодовых переходов

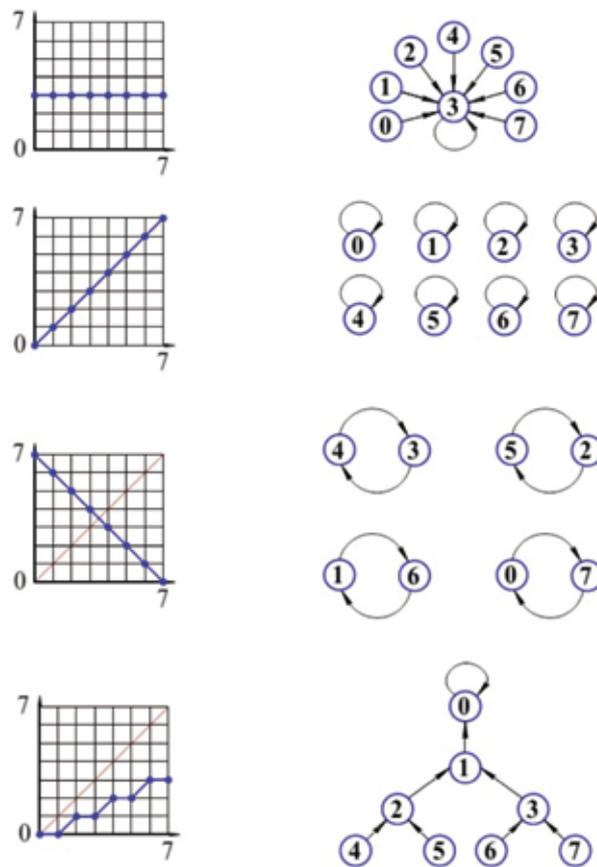


Рис. 6. Взаимосвязи графика функции и порождаемого графа G_F

Например, признаком существования одноэлементного цикла является принадлежность точек графика главной диагонали. Признаком бинарного дерева является наличие в графике пар точек, лежащих на одной горизонтали. Таким образом по виду графика можно протестировать все структурные особенности графа G_F .

Графы кодовых переходов образуют динамический каркас процесса агрегации и самосборки. Рассмотрим пример, иллюстрирующий это утверждение. Исходный набор кодовых состояний задаётся 4-х разрядным регистром и содержит 16 значений от 0000 до 1111 в двоичном обозначении. Для удобства изложения далее станем изображать кодовый набор также и в десятичном представлении от 0 до 15. Оператор F представляет собой следующую последовательность элементарных операций: над исходным операндом выполняется операция циклического сдвига на один разряд, далее полученный результат складывается с исходным операндом по модулю 2. На рис. 7 приводится график заданного отображения и соответствующий ему граф кодовых переходов.

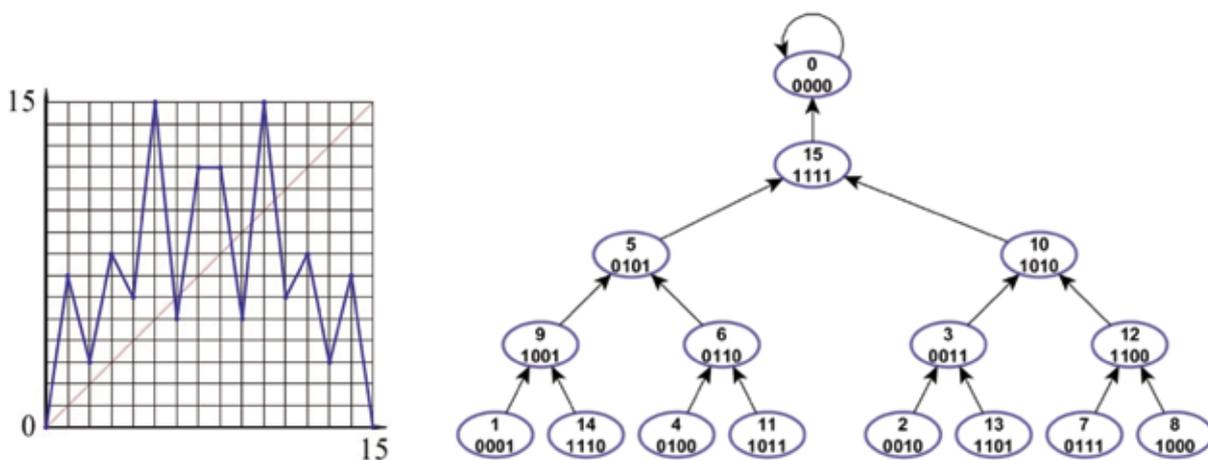


Рис. 7. Граф кодовых переходов со взаимноинверсными предшественниками

График отображения симметричен и состоит из пар точек, лежащих на одной горизонтали. Это означает, что граф представляет собой регулярное бинарное дерево. Особенность данного графика состоит в том, что каждая такая пара является взаимноинверсной при двоичном представлении кодов. Следовательно, для графа справедливо утверждение о том, что все его внутренние вершины имеют пары взаимноинверсных предшественников.

Допустим, что имеется некий набор тектонов, в котором все кодовые замки работают по правилу срабатывание двух попарно инверсных кодов, и в каждом из них размещён преобразователь кодов в виде оператора F . На Рис. 8 изображены элементарные шаги самосборки, сопряжённые с графом кодовых переходов. Элементарный шаг самосборки соответствует фрагменту графа кодовых переходов, состоящему из трёх смежных вершин, выделенных контурной обводкой. Вершины предшественники обозначают коды срабатывающих замков. В результате срабатывания замков происходит стыковка двух тектонов, образуется субагрегат и в нём создается новый кодовый замок для следующего шага агрегации. При выполнении двух элементарных шагов самосборки, изображённых на рис 8А и рис. 8Б формируются субагрегаты с новыми замками, коды которых также взаимноинверсны и определяют выполнение третьего шага, изображённого на рис. 8В. Связность процесса определяется структурой графа кодовых переходов.

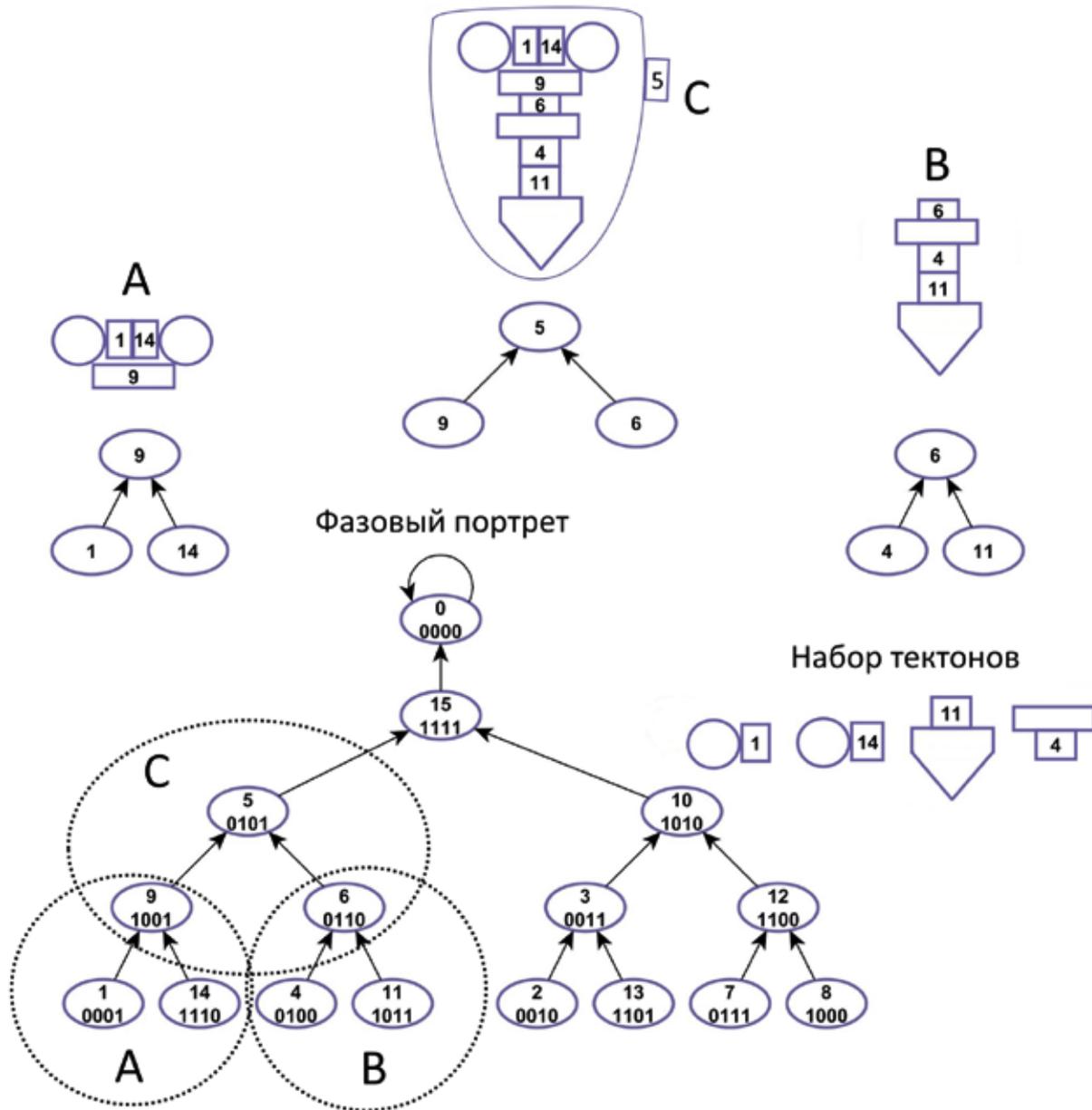


Рис. 8. Элементарные шаги самосборки, порождаемые графом кодовых переходов при срабатывании замков по инверсии кодов

В иллюстрации взаимодействия кодовых замков, изображённой на Рис. 8 рассмотрено правило срабатывания замков по взаимной инверсии кодов. Возможны и другие правила срабатывания кодовых замков, например, по совпадению кодов. На рис. 9 изображён порядок порождения элементарных шагов самосборки графом кодовых переходов при срабатывании по совпадению кодов.

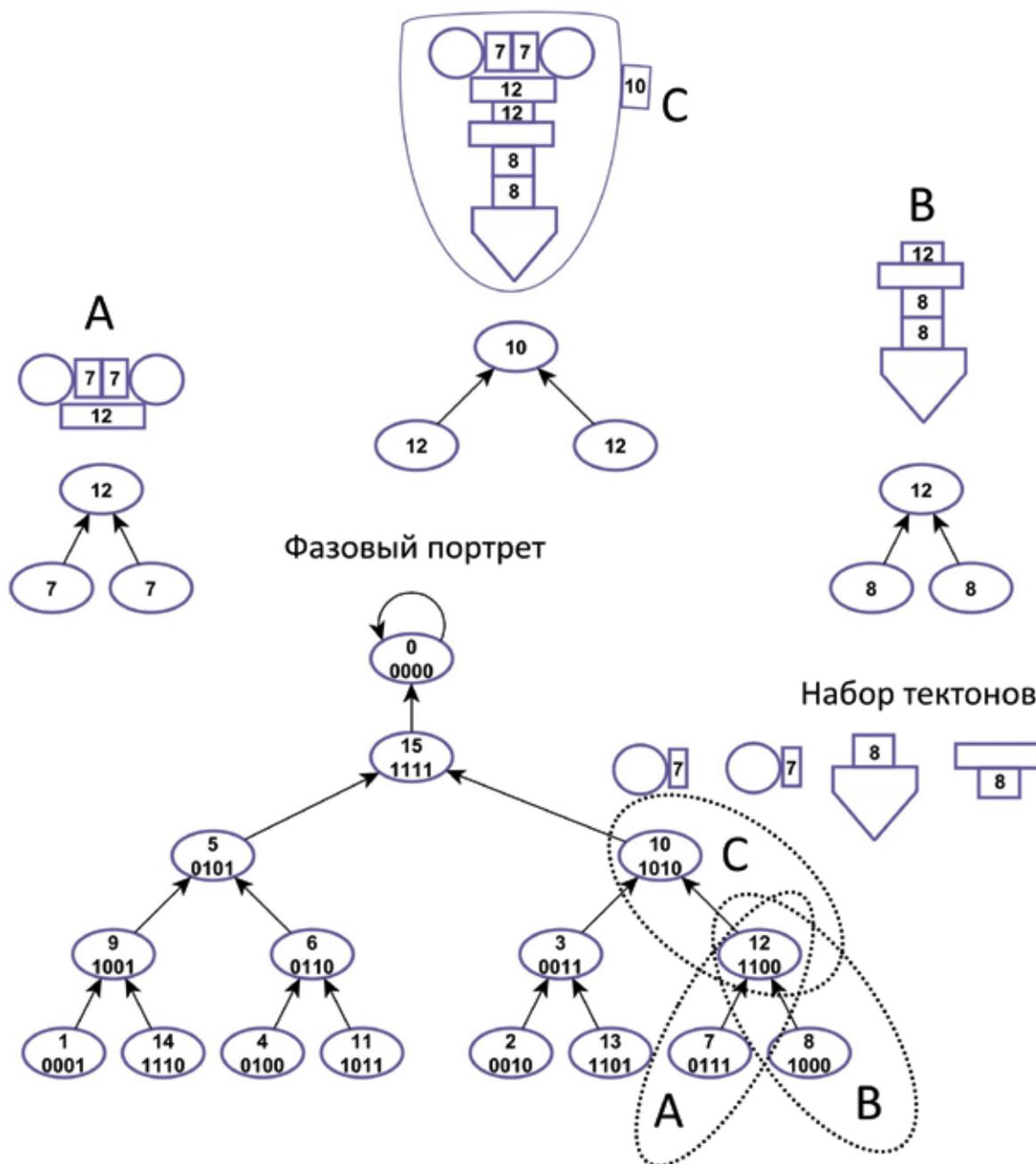


Рис. 9. Элементарные шаги самосборки, порождаемые графом кодовых переходов при срабатывании замков по совпадению кодов

Важно, что графы кодовых переходов всегда сходимы к определённому циклу. При этом особый интерес представляют графы, сходящиеся к одноэлементному циклу, который мы назовём самовозвратным полюсом. Кодовые последовательности, порождаемые кодовым замком в режиме самообращения преобразователя F, представляют собой маршруты на графе кодовых переходов. По определению кодового замка в нём не предусмотрен специальный механизм остановки, но по достижению самовозвратного полюса он будет порождать один и тот же код и развитие кодовой последовательности как бы прекратится. Другими словами граф кодовых переходов приводит замок в состояние динамического равновесия. Если внешнее воздействие изменит состояние кодового замка,

кодовый замок возобновит движение по графу кодовых переходов и всегда вернётся в равновесное состояние. Таким образом, свойства графа кодовых переходов обеспечивают финальность и устойчивость динамики поведения кодовых замков.

А теперь можно сделать определения основных понятий дискретной динамики:

Дискретный аттрактор это динамическая система, имеющая в своём составе множество регистровых состояний \mathbf{R} , функциональный оператор \mathbf{F} , отображающий \mathbf{R} в \mathbf{R} и оператор автосуперпозиции \mathbf{F} .

Фазовый портрет дискретного аттрактора это граф кодовых переходов \mathbf{G}_F порожаемый функцией \mathbf{F} .

Если имеется определённый набор тектонов и во все кодовые замки данного набора загружен один и тот же оператор \mathbf{F} , весь набор принадлежит одному фазовому портрету \mathbf{G}_F . Граф кодовых переходов формирует топологию функционального пространства, в котором существуют и двигаются кодовые замки тектонов. Текущий код замка позиционирует его место на графе, а движения могут осуществляться только к смежным вершинам. Таким образом набор тектонов, не связанных никакими прямыми управляющими воздействиями превращается в связный кластер, реализующий запрограммированный процесс строго согласованных актов агрегации. Назовём это явление **функциональной когерентностью**.

Программирование кластера состоит из двух этапов. На первом этапе осуществляется выбор оператора \mathbf{F} и конструирование фазового портрета \mathbf{G}_F . На этом этапе создаётся топология функционального пространства и всё множество возможных динамических траекторий самосборки. Второй этап программирования это выбор начальных кодов и их размещение в наборе тектонов. Выбирая начальные коды, мы выбираем пути на графе \mathbf{G}_F , которые будут извлечены запущенным процессом самосборки. Не обязательно использовать в конкретных ситуациях весь граф \mathbf{G}_F . Возможность выбора определённой части путей на графе через назначение начальных кодов и их размещение в кодовых замках тектонов значительно повышает гибкость программирования самосборки.

Важно отметить, что динамика самосборки программируется графом кодовых переходов, но сам граф в явном виде отсутствует – он нигде не представлен в виде символической записи. Конструктивно дискретный аттрактор задаёт только функции и отношения. Граф реализуется в динамике и может быть актуализован только как результат наблюдения за поведением тектонов.

3.2. Конструирование фазовых портретов

Главная задача построения моделей самосборки в описанной среде модельного эксперимента сводится к конструированию фазовых портретов с заданной структурой. В результате многочисленных эмпирических построений была сформирована базовая библиотека функциональных преобразователей, порождающих типовые структурные элементы графов кодовых переходов. Их сравнительно немного: это регулярные бинарные деревья; длинные циклы, образующие кольцевые структуры; наборы коротких циклов и самовозвратных полюсов; цепи, завершающиеся самовозвратными полюсами и прочее. Особую группу типовых структур образуют деревья, у которых для каждой внутренней вершины существуют пары взаимноинверсных предшественников. Эта работа была выполнена с применением простого, но эффективного программного инструмента «ФАНСКАН». В интерфейсном сегменте программы имеется возможность формирования рекуррентного генератора в виде образующих регистров, заданной разрядности и функционального оператора. Далее программа строит график отображения как совокупность точек на ортогональной целочисленной решётке и соответствующий этому графику граф.

При построении программы «ФАНСКАН» были обнаружены нетривиальные особенности структур, представляющих собой функциональные операторы, заданные на конечных множествах. Конечность образующего множества структуры означает, что при вычислении значений оператора существует граница в виде определённого значения N , при превышении которого, следует применять операцию взятия остатка по модулю N , (**Rest mod N**). Если график функции представляет собой линию, быстро уходящую вверх, его значения в результате выполнения оператора **Rest mod N** возвращаются в границы заданной ортогональной целочисленной решётки. График аperiodической быстро растущей функции превращается в пилу, заполняющую всю плоскость с определённым периодом. На графе это выражается образованием древовидных структур.

Фактически график функционального оператора в данной модели существует на замкнутой тороидальной поверхности и всегда представляет собой замкнутую линию, навитую на тор. А точнее на целочисленную решётку, нанесенную на поверхность тора. Изображение графика функции на плоской целочисленной решётке есть результат разрезки тора и его проекции на плоскость. Но при этом не следует забывать, что на самом деле мы имеем дело с линией, навитой на поверхность тора. Этот топологический феномен проявляется следующим образом. Допустим, что мы зададим разрядность образующих регистров и функциональный оператор и построим соответствующий граф. Далее сохраним тот же оператор и станем менять разрядность образующих регистров, то есть менять число элементов в структуре. При этом в графе не просто изменяется число вершин, а могут происходить существенные изменения топологии графа. Односвязные графы заменяются многосвязными, деревья преобразуются в кольца и прочее. Это есть следствия перестройки целочисленной решётки и деформации графика на тороидальной поверхности. Перечисленные эффекты важны для формирования базовой библиотеки рекуррентных генераторов, порождающих графы с типовыми структурами. Типовые структуры порождаются не только заданием функции, но и выбором разрядности регистров.

Далее для решения задачи построения фазовых портретов с заданной топологией необходимо научиться конструировать сложные структуры графов из простых библиотечных модулей. Рассмотрим простую операцию конкатенации регистровых секций, образующих рекуррентные генераторы. При конкатенации регистровых секций происходит их совмещение без каких либо связей между ними. Просто правая секция является носителем старших разрядов вновь образованного регистра, а левая носителем его младших разрядов. Преобразователи работают синхронно, но независимо, каждый над своей секцией. Операция конкатенации изображена на Рис. 8.

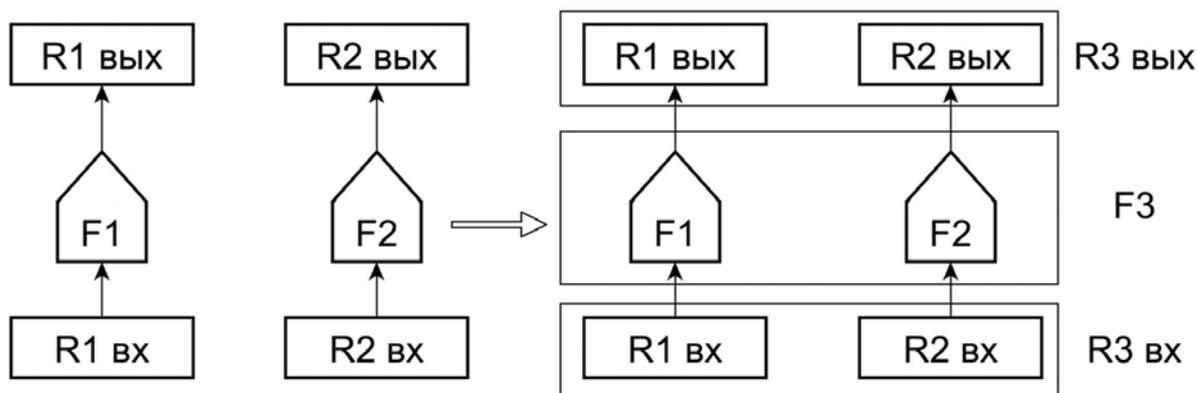


Рис. 10. Операция конкатенации

Попробуем изобразить график вновь образованной функции. Это не простая задача. График отображения секции старших разрядов будет представлен совокупностью точек на тороидальной целочисленной решётке. Далее придётся в каждую точку графика старшей секции встроить тор меньшего масштаба для представления графика секции младших разрядов. На плоской проекции, полученной в результате разрезки торов, мы получим совмещение решёток большого и малого масштабов. Точки графика старшей секции будут нанесены на узлы решётки большого масштаба, а графики секции младших разрядов будут многократно повторены в решётках меньшего масштаба у каждой точки графика секции старших разрядов. Таким образом будет построен вложенный фрактальный график, представляющий результат операции конкатенации регистровых секций. Результат изображён на Рис. 11.

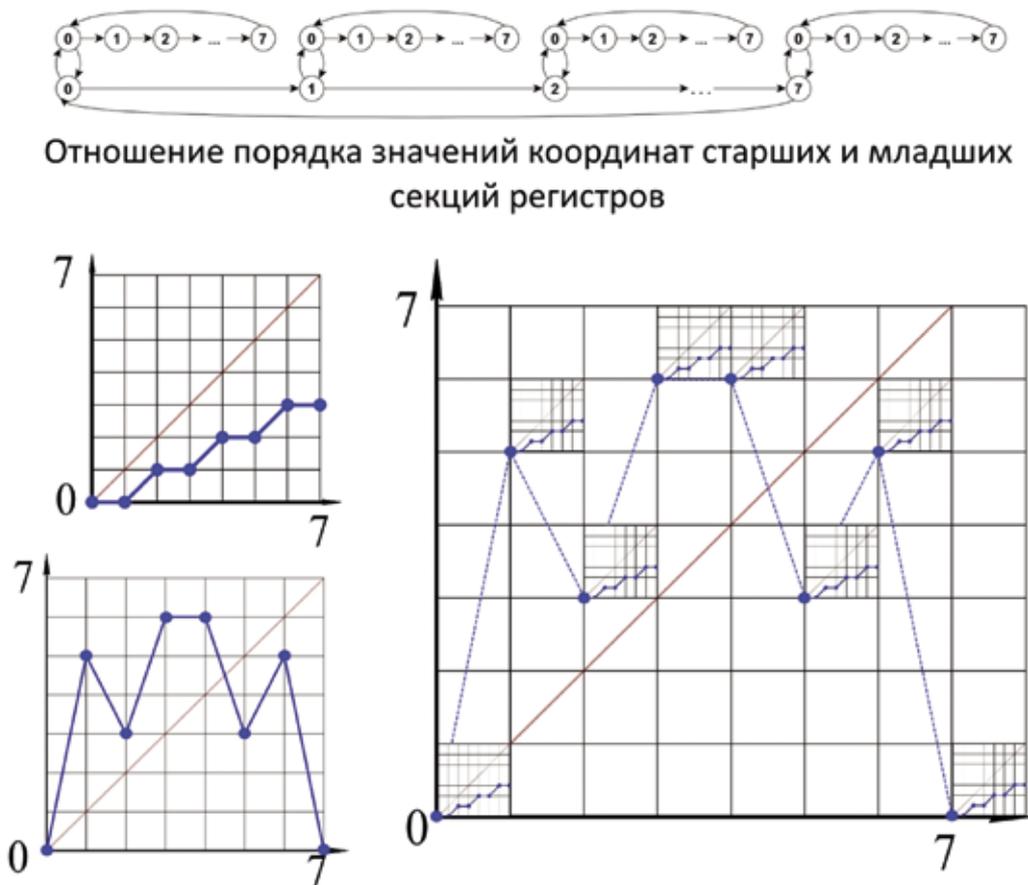


Рис. 11. Образование фрактального графика при конкатенации

Отношение порядка на полученной координатной сетке изображено на рисунке в виде графа. Упорядоченность значений координат локализуется отдельно в пределах старшей и младшей секции разрядов с замыканием по тороидальным поверхностям.

При многократном повторении операции конкатенации будут строиться многократно вложенные фрактальные графики. По графикам можно судить о том, какие изменения произойдут с графами. Оказалось, что простая операция конкатенации порождает совсем не тривиальные трансформации графов. Многочисленные эмпирические построения средствами программы «ФАНСКАН» позволили выйти на построение алгебры операций над графами в результате применения конкатенации. Некоторые результаты приведены на Рис. 12

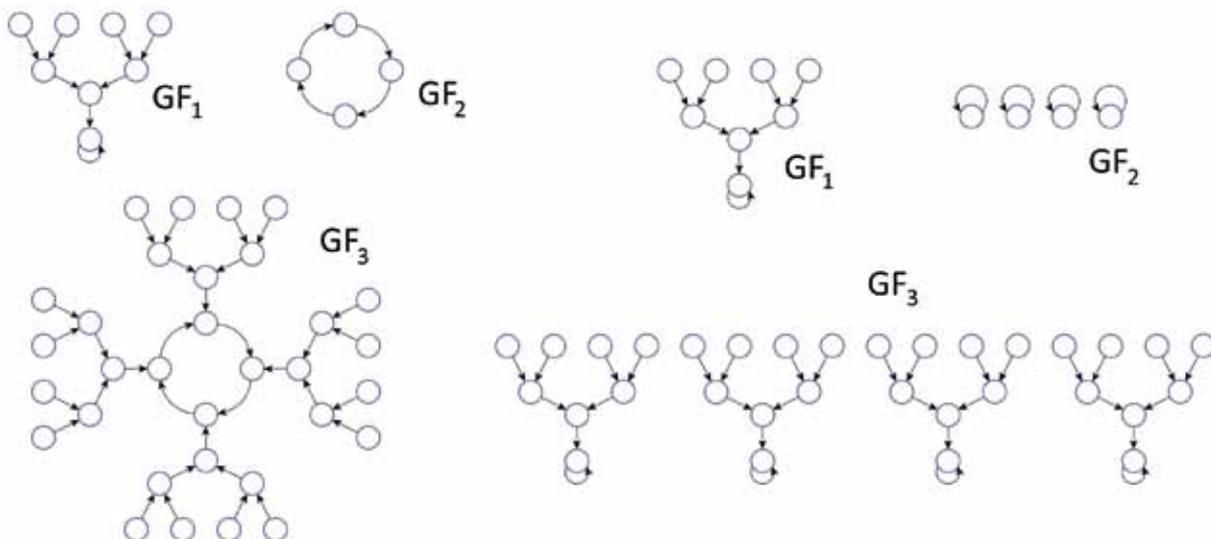


Рис. 12. Примеры конструирования фазовых портретов в результате конкатенации регистровых секций

Таким образом, в рамках дискретной динамики разработаны инструменты конструирования фазовых портретов с заданной топологией.

3.3. Дискретный репеллер и реверсивный аттрактор

Не всегда процесс самосборки укладывается в сходящиеся траектории, порождаемые дискретным аттрактором, как это изображено на Рис. 7. Не всегда элементарный акт самосборки означает срабатывание двух активных кодовых замков и порождение вместо них одного нового замка. Часто в ходе самосборки создаются агрегаты (или капсумеры) содержащие несколько активных замков, а при выполнении элементарного шага самосборки взамен пары сработавших кодовых замков создаётся несколько новых. Динамическая траектория самосборки может развиваться по расширяющейся ветвящейся процедуре. Для моделирования расширяющихся траекторий самосборки необходимо создать дискретный репеллер, работающий аналогично аттрактору как самообращающийся преобразователь кодов. Для реализации репеллера необходим преобразователь, работающий по принципу – один код на входе порождает набор кодов на выходе. Для этого достаточно объединить несколько функциональных преобразователей в гирлянду, как показано на Рис. 13

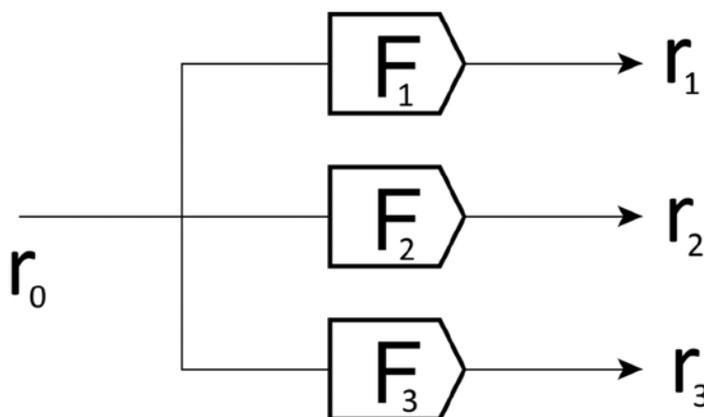


Рис. 13. Гирлянда образующая дискретный репеллер

Каждый, полученный на выходе гирлянды код может быть передан на её вход и стать источником порождения следующего кодового набора. Репеллер порождает ветвящийся ориентированный граф, рёбра которого направлены от корня к листьям. Вследствие конечности множества кодов, рано или поздно запас кодов будет исчерпан и произойдёт повторное порождение кодов, ранее входивших в набор вершин графа. Это означает образование циклов на графе. При этом в одной компоненте связности может быть несколько циклов, поскольку граф порождается не функциональным отображением. Циклы, состоящие из одной вершины, охваченной петлёй, которые мы называем самовозвратными полюсами так же могут существовать в графе кодовых переходов репеллера. Пример графа кодовых переходов, порождаемого репеллером, изображён на Рис. 14.

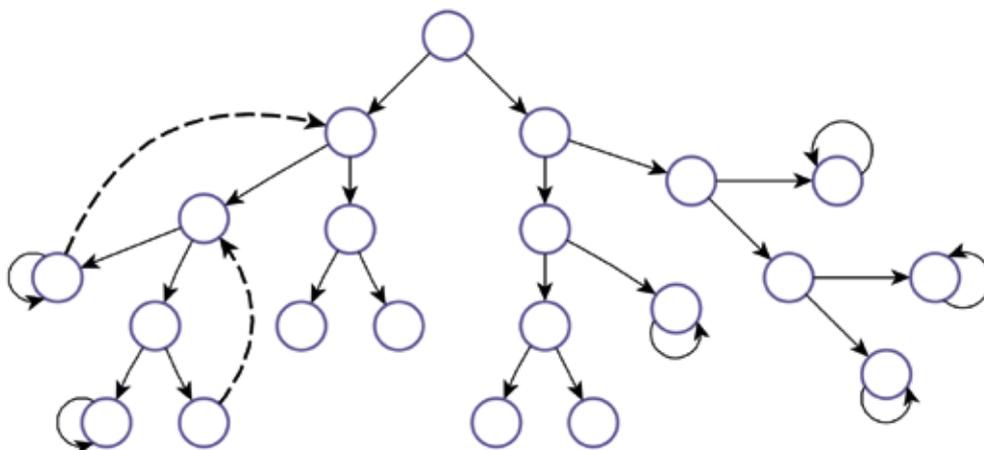


Рис. 14. Граф кодовых переходов двухэлементного репеллера

На репеллере также как и в аттракторе реализуется режим самообращения и движения по графу. Если некий код порождается повторно, это означает, что репеллер повторно воспроизведёт всю ветвь, исходящую из этой вершины. Если порождается самовозвратный полюс, репеллер входит в данной точке процесса в равновесное состояние рекуррентного псевдоостанова. Возможно конструирование репеллера, достигающего равновесных состояний во всех ветвях. Такой репеллер называется финальным.

Репеллеры необходимы для построения фазовых портретов моделей самосборки, поскольку часть траекторий процесса построения сложных структур представляют собой расширяющиеся ветвящиеся процессы. Кроме того, для работы моделей необходимо обеспечить возможность продвижения по фазовому портрету в обоих направлениях – от листьев к корню и от корня к листьям. Проблема здесь заключается в том, что в соответствии с принятой идеологией динамической реализации, фазовый портрет никогда не актуализуется в виде символической записи, фазовый портрет это процесс. С целью продвижения по фазовому портрету в прямом и обратном направлениях необходимо освоить технологию синтеза реверсивных аттракторов. Для построения реверсивного аттрактора в дополнение к заданному аттрактору необходимо синтезировать сопряжённый с ним репеллер, сохраняющий структуру графа и инвертирующий его рёбра.

Допустим, что исходный граф есть бинарное дерево, тогда сопряжённый с ним репеллер должен образовывать гирлянду из двух функциональных преобразователей, которые совместно реализуют отображение обратное по отношению к функции, задающей исходный фазовый портрет. Процедура синтеза сопряжённого репеллера проиллюстрирована на Рис. 15

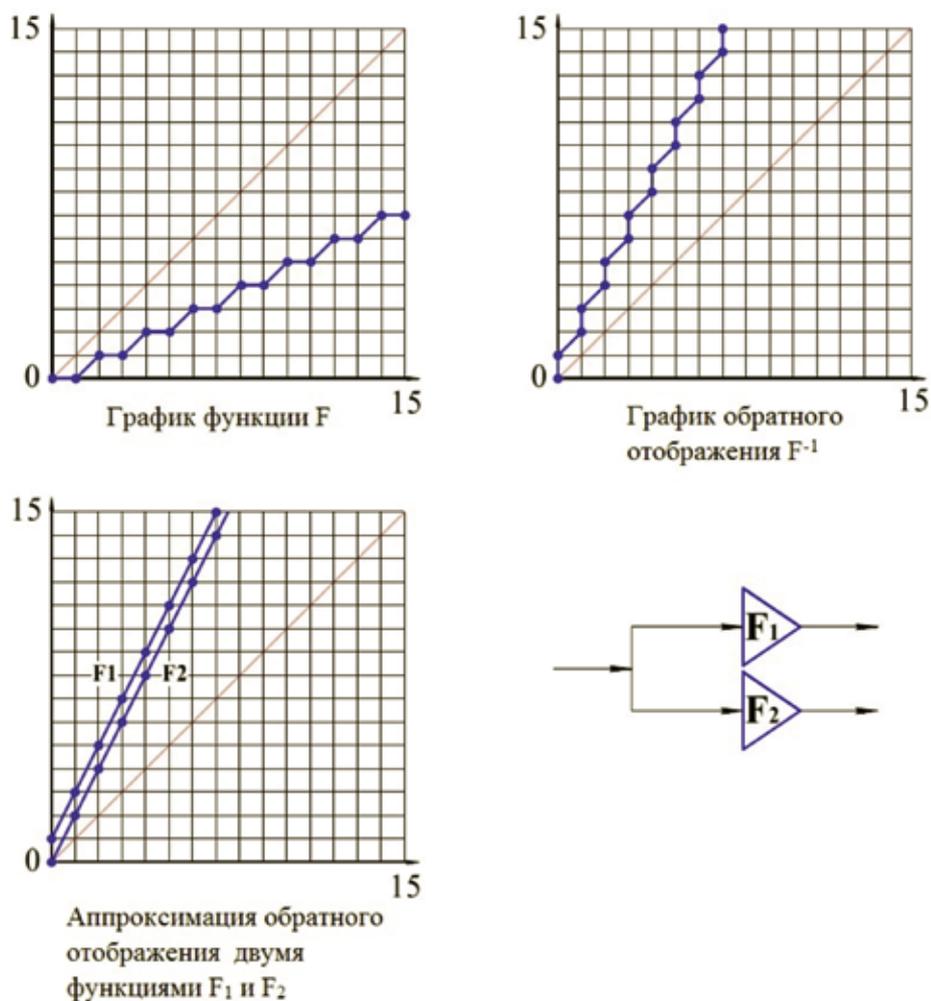


Рис. 15. Операции построения семейства сопряженных функций для реверсивного аттрактора

По данному графику необходимо построить обратное отображение. Для этого надо выполнить операцию замены координат, что достигается поворотом исходного графика вокруг главной диагонали. График обратного отображения изображён на рис. 15 б. Обратное отображение не является функциональным и далее надо решить задачу синтеза набора сопряжённых функций, покрывающих, полученный график обратного отображения. Перечисленные действия изображены на рис. 15.

Эта задача не имеет общего решения. В каждом конкретном случае путём подбора можно найти множество вариантов покрытия графика обратного отображения функциональными графиками и искать среди них приемлемые по критерию удобства реализации сопряжённых функций. Из полученного таким образом набора сопряжённых функций составляется гирлянда для реализации репеллера, дополнительного к заданному аттрактору.

3.4. Метод маскирования кодов и странный аттрактор

Фазовые портреты, порождаемые дискретным аттрактором, подчинены серьёзному ограничению – каждый код из заданного кодового набора имеет однократное вхождение в граф кодовых переходов. Вследствие этого кодовые последовательности, которые могут воспроизводить кодовые замки, всегда являются неповторяющимися и не могут содержать повторные вхождения кодов. Однако в реальных процессах самосборки часто происходит

многократная агрегация одноптипных тектонов, имеющих в своих кодовых замках идентичные коды. Следовательно, фазовый портрет должен содержать повторяющиеся кодовые последовательности. В дискретной динамике имеется целый ряд приёмов, позволяющих преодолеть это ограничение. Один из этих приёмов маскирование части разрядов кода. Требуемая кодовая комбинация извлекается из под маски как часть разрядов полного кода, а остальные разряды пребывают в скрытом состоянии и не участвуют в операциях взаимодействия кодовых замков. Операция маскирования не оказывает никакого воздействия на механизм порождения фазового портрета, она касается только результатов наблюдения за развитием процесса. При этом в видимой части существенно сокращается набор действующих кодов. Это приводит к тому, что структура графа остаётся прежней, а распределение кодов по вершинам существенно меняется вследствие появления повторных включений кодов в обозначения вершин. Рассмотрение конкретного примера в данном случае достаточно громоздко, но мы можем сделать ссылку на работу [16], в которой подробно рассмотрен такой пример. В этом примере в результате конкатенации трёх регистровых секций построено полное сильно ветвящееся дерево, а в результате маскирования получена возможность извлечения нумерации всех вершин предшественников для всех внутренних вершин графа. Управляя выбором начальных кодов можно извлечь из данного графа кодовую последовательность с заданным числом повторений требуемого кода.

Рассмотрим проявления эффекта маскирования на следующем примере, который изображён на Рис. 16.

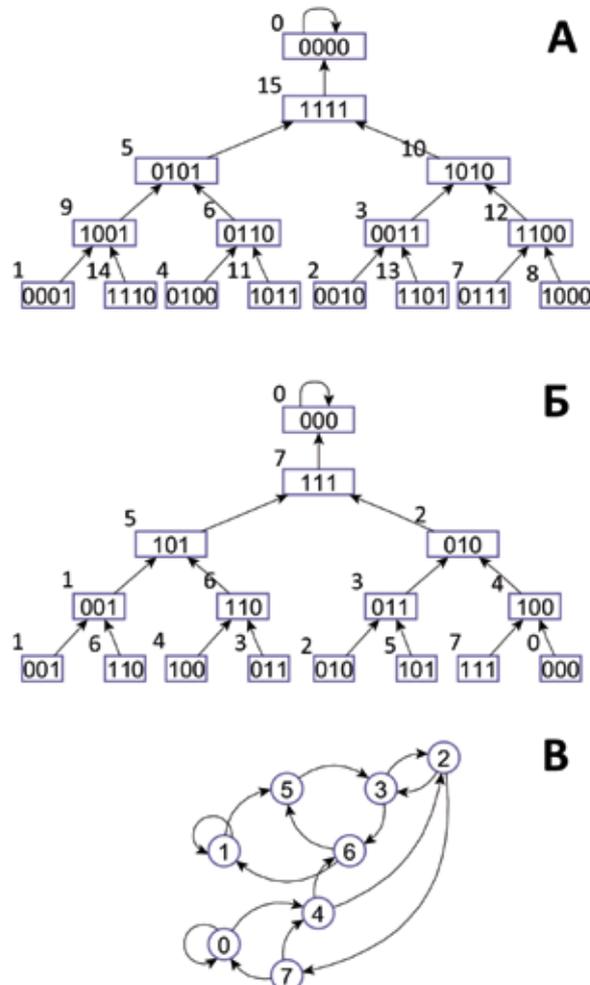


Рис. 16. Проявления эффекта маскирования

Возьмём один из ранее рассмотренных дискретных аттракторов, фазовый портрет которого изображён на Рис. 16 А. Вершины обозначены 4-х разрядными двоичными кодами и соответствующими натуральными номерами. Замаскируем один старший разряд и представим произошедшие изменения в графе (Рис. 16 Б). Граф сохраняет свою структуру, меняются обозначения вершин, появляются повторные вхождения кодов. Число возможных кодов сокращается вдвое, следовательно, каждый код используется дважды. Представленный результат наблюдения определяется возможностями наблюдателя. В данном случае наблюдателю доступен весь механизм устройства аттрактора и в том числе принятые правила маскирования.

А теперь представим себе наблюдателя, которому внутренний механизм устройства аттрактора не доступен. Наблюдатель видит только 3-х разрядные коды, извлечённые из под маски и строит граф по наблюдению шагов работы преобразователя кодов. Здесь надо сделать некоторое дополнение. Будем считать, что у аттрактора есть внутренний тестовый режим работы, при котором он перебирает весь кодовый набор и для каждого значения как начального демонстрирует пошаговый процесс достижения псевдоостанова в самовозвратном полюсе. Наблюдатель фиксирует видимые ему кодовые переходы и строит по ним фазовый портрет. Результат такого построения представлен на Рис. 16 В. На этом графе принят принцип однократного вхождения кодов в граф и число вершин равно числу кодовых комбинаций. А число рёбер осталось прежним и в результате нарушен принцип функциональности отображения, при котором из каждой вершины всегда исходит только одно ребро. Теперь на графе существует несколько циклов и переходы между циклами. Но главное заключается в том, что для наблюдателя, динамика поведения аттрактора становится непредсказуемой, несмотря на полное представление фазового портрета. Предсказуемым оказывается только один факт – после определённого числа шагов аттрактор всегда останавливается в состоянии 000. Хотя в ряде случаев аттрактор попадая в состояние 000 и успешно минует его. По каким маршрутам развивается процесс предсказать невозможно, хотя все возможные маршруты известны. После длительных наблюдений можно определить частоты встречаемости определённых маршрутов и построить распределения вероятностей.

Простая операция маскирования одного разряда превращает нормальный дискретный аттрактор в качественно другое явление – в странный аттрактор. Это очень поучительный пример, который демонстрирует, что качественная оценка ситуации может определяться не свойствами аттрактора, а возможностями наблюдателя.

3.5. Поток как знаковая система, операции над потоками

В конце XIX начале XX века разразился так называемый кризис оснований математики. В теории множеств обнаружили парадоксы и вся деятельность по созданию теоретико-множественного фундамента современной математики была поставлена под сомнение. Вскоре после первых эмоциональных потрясений возобладал деятельный прагматизм и математический мир приступил к разработке программ выхода из кризиса. До наших дней дошли две программы – программа Гильберта и программа Брауэра. Соответственно математический конструктивизм и математический интуиционизм. Оба направления антагонистичны и взаимоисключающие. Подавляющее большинство математиков присягнули Гильберту и программа математического конструктивизма успешно развивается вплоть до настоящего времени. Интуиционизм Брауэра современники считали не более чем курьёзом полезным лишь в том смысле, что он позволил конструктивистам уточнить и укрепить свои позиции. Однако интуиционизм как научное направление в определённых нишах со-

хранился до наших дней и имеет достаточно авторитетных сторонников в мировой математической науке.

Основные положения математического интуиционизма изложены в книге Гейтинга «Интуиционизм» [17], а также у Клини [18] и у Драгалина [19]. Брауэр отрицал правомерность использования теории множеств в качестве фундамента для построения теории континуума и обоснования анализа. Он утверждал, что логика рассуждений, исторически сложившаяся из практики обращения с конечными множествами была без должного обоснования и оценки перенесена в область обращения с бесконечностью. По мнению Брауэра применение идеи актуальной бесконечности неправомерно в математических построениях, а допустима лишь парадигма потенциальной бесконечности. Теория множеств это статическая экстенциональная конструкция. Первая и основная аксиома теории множеств это аксиома экстенциональности – множество определяется своими элементами. Для того чтобы задать множество необходимо в явном виде предъявить либо его элементы, либо их символьную копию. Для бесконечных множеств это невозможно в принципе. Следовательно, бесконечные объекты несовместимы со статикой и идеями экстенциональности. В качестве альтернативы Брауэр предложил задавать бесконечные объекты средствами строящих процедур, которые могут продолжаться неограниченно и тем самым представляют воплощение идеи потенциальной бесконечности. На этой идейной основе интуиционисты занялись построением теории интуиционистского континуума и намеревались заново обосновать и переписать весь анализ. Понятно, что это не вызвало энтузиазма в широких кругах математиков, поскольку по мнению практиков анализ прекрасно работает и без обоснования, и тем более не нуждается в переобосновании.

Но вот настал век информационных технологий и мы столкнулись с информационными объектами, которые в принципе конечные, но очень большие. Размерность информационного разнообразия далеко превосходит астрономические числа, такие, например, как число атомов в видимой части вселенной. Комбинаторика квадратного поля двоичных сенсорных элементов размерностью 100×100 составляет 2^{10000} (или примерно 10^{3000}) состояний. Масса доступной наблюдениям части вселенной оценивается как эквивалент порядка 10^{200} атомов водорода. Для покрытия конечного информационного разнообразия при экстенциональном представлении просто не хватит вещества во всей вселенной. В этой ситуации идеология Брауэра приобретает совсем другой смысл и цену. В информационных технологиях целесообразно принять парадигму непрямого представления объектов через строящие процедуры в силу наличия ресурсных ограничений.

Основополагающее понятие интуиционистской математики это понятие ПОТОК. Термин ввел Брауэр (голландское *spreiding*, английское *spread*). Поток это строящая процедура, процесс, рассматриваемый как альтернатива статическому понятию множества. У разных авторов при определении потока используется разная символика и существует некоторое разнообразие вариантов определения. Нюансы связаны с поставленными задачами – приспособить понятие поток к решению проблемы построения интуиционистского континуума. На более поздних этапах разработки интуиционистской математики сфера применения потока была существенно расширена и появилось даже определение финитарных потоков. Мы изложим свою интерпретацию, несколько отличную, но сохраняющую самое ценное – методологическую сущность. А сущность понятия поток состоит в том, что сконструирована абстрактная схема, динамический каркас широкого класса строящих процедур, обслуживающих неэкстенциональную парадигму математических построений. В рамках экстенциональной парадигмы в теоретических построениях между реальным объектом и его символическим представ-

лением устанавливается отношение изоморфизма. Так, например, если мы намерены задать граф (или зафиксировать его в памяти компьютера) мы должны перечислить все его вершины и все рёбра. В неэкстенциональной парадигме теоретический инструмент должен создавать на символическом уровне компрессивное представление объекта и дополнять его процедурой декомпрессии, позволяющей развернуть построение полноценного объекта в динамике. Компрессивные формы представления сложных многомасштабных объектов неразрывно связаны с процедурами декомпрессии – это вторая сторона медали при определении потока. В этом смысле можно процитировать Клини [18]: «Похоже, что нтуиционистам удалось эффективное представление бесконечных объектов конечными средствами».

Итак, поток \mathbf{M} это пара взаимодействующих законов выбора \mathbf{D}_1 и \mathbf{D}_2 . Закон выбора \mathbf{D}_1 это закон порождения веерной развёртки числовых последовательностей. Элементарная процедура выбора это порождение набора чисел. При этом не важно, чем именно порождается набор, вычислительной процедурой или бросанием костей. Далее каждый элемент сгенерированного числового набора становится агентом продолжения процесса и на следующих шагах порождаются новые наборы чисел. То есть по определению Брауэра в рамках закона выбора \mathbf{D}_1 разворачивается веерная развёртка порождения ветвящихся пучков числовых последовательностей. Если мы отследим каждую числовую последовательность в отдельности, то выяснится, что она является продуктом работы рекуррентного генератора, порождающего каждое следующее число как функцию от предыдущего. Из определения Брауэра следует, что в основе развития веерного процесса в \mathbf{D}_1 лежит самообращающаяся процедура или по терминологии супрамолекулярной химии самопроцесс. Продолжая эту линию и учитывая возможность расширительного толкования интуиционистских построений, мы можем интерпретировать закон потока \mathbf{D}_1 как реализацию дискретного аттрактора. Здесь допускается реализация аттрактора, репеллера и реверсивного аттрактора и, разумеется, построение финитарных сходящихся потоков.

Закон потока \mathbf{D}_2 это процедура сопоставления чисел и числовых последовательностей из \mathbf{D}_1 объектам произвольной природы из заранее заданного набора. Такое определение, допускающее расширительное толкование, до сих пор оставалось не более чем данью приличиям. В литературе по проблемам интуиционистской математики излагаются в основном построения средствами потока числовых множеств. При этом объектами сопоставления являются числовые последовательности. Мы же намерены, наконец, воспользоваться скрытым потенциалом понятия поток и предложить в качестве объектов сопоставления использовать заранее заданные наборы элементарных актов взаимодействия тектонов, которые выполняются в ходе развёртывания процесса самосборки. В таком виде поток является формализованным представлением структуры и функции кодовых замков. А поскольку устройство потока не требует больших ресурсных затрат механизм потока можно встроить в каждый элемент участвующий в самосборке и таким образом реализовать программируемый набор тектонов. Сделанные нами уточнения позволяют утверждать, что определённая интерпретация Брауэровского потока как раз и является искомой знаковой системой, порождающей алгоритмическую динамику адекватную наблюдениям процессов самосборки.

Ранее обсуждался состав и функции знаковой системы, построенных на базе линейных императивных языков. Знаковая система содержит символьную запись, которая является символьной копией объекта и имеет статус гибко изменяемой программы. Знаковая система имеет в своём составе средства редактирования записей, которые представляют возможности программирования результатов деятельности знаковой

системы. И, наконец, в знаковой системе имеются средства интерпретации записей в виде выполнения вычислений или сборки первичной полипептидной цепи. В определённом нами потоке символьная запись реализована динамически в виде дискретного аттрактора, который в отличие от символьных цепей может порождать нетривиальные символьные последовательности с различной топологией и имеющие статус фазовых портретов. В рамках дискретной динамики имеются средства редактирования фазовых портретов. Это операции конкатенации, которые поддерживают алгебру операций над графами. Это и есть инструмент программирования потоков или конструирования требуемых фазовых портретов. В целом закон потока D_1 представляет программируемое динамическое ядро процесса, заданное самообращающейся процедурой. Средства интерпретации символики, порождаемой в D_1 , сосредоточены в D_2 и воплощаются в виде набора правил поведения кодовых замков. Замки управляются кодами и могут рассматриваться как интерпретаторы кодов. Поток содержит все необходимые атрибуты знаковых систем, но при этом кардинально отличается от знаковых систем, основанных на линейных императивных языках.

Потоковая знаковая система и её функционирование адекватны данным наблюдения процессов самосборки. Аттрактор и набор правил поведения замков настолько просты в реализации, что могут быть размещены во всех участниках самосборки – тектонах. Поскольку во все тектоны загружается один аттрактор все тектоны принадлежат одному фазовому портрету. Каждый тектон несёт в себе текущие коды своих кодовых замков и таким образом позиционирован на фазовом портрете. Трансформации кодов производятся аттрактором и ведут тектон по фазовому портрету. В результате набор не связанных внешним управлением тектонов, представляет собой строго согласованный ансамбль с запрограммированным поведением. Все атрибуты явления самосборки присутствуют в данном модельном наборе тектонов.

Для продвижения практики построения моделей самосборки средствами потока требуется разработка техники конструирования сложных потоков из простых базовых потоков, поддерживающих типовые фрагменты. Первые шаги в этом направлении были описаны как приёмы конкатенации аттракторов. В рамках потока эта операция приобретает системное оформление. Конкатенация осуществляет расширение наборов кодовых полей, которые могут быть обособлены не только функциональными преобразователями в рамках закона D_1 , но и разным назначением в правилах интерпретации, что находит своё отражение в средствах интерпретатора в D_2 . В целом конкатенация в потоке означает горизонтальную интеграцию. Различные варианты конкатенации формирует набор операций композиции потоков.

Более интересными и результативными по своим возможностям оказываются операции вертикальной интеграции потоков – операции суперпозиции потоков. При выполнении суперпозиции потоков кодам, выработанным в D_1 , интерпретатор D_2 ставит в соответствие другие потоки. Это мощный приём облегчающий программирование потока. Кроме того, таким образом формируется иерархия процессов самосборки, соответствующая фактам наблюдения. Потоки нижних этажей суперпозиции управляют сборкой агрегатов и субагрегатов. Поток верхнего этажа управляет стыковкой агрегатов и формирует финальную стадию самосборки сложной многоэлементной конструкции.

Знаковые системы, порождающие алгоритмическую динамику и построенные на базе Брауэровского потока и дискретного аттрактора, обладают целым рядом уникальных свойств. Основным уникальным свойством потоковых знаковых систем следует признать реализацию компрессивного, сжатого представления многоэлементных объек-

тов в виде компактных символических конструкций. Остальные уникальные свойства потоков являются следствием компрессии и поэтому необходимо сразу определиться с иллюзией нарушения здравого смысла и принципов сохранения. Компрессия возможна только в условиях вырождения комбинаторики. Чем выше степень компрессии символического представления многомерных объектов, тем уже класс реальных конструкций, которые сможет породить поток в режиме декомпрессии. В потоковых знаковых системах могут породиться не любые мыслимые и немыслимые комбинаторно допустимые конструкции, а только очень незначительная их часть, образующая очень узкий класс конструкций, допустимых в потоке. При этом, чем выше степень сжатия символьных представлений, тем выше степень вырожденности комбинаторики. Вырожденность комбинаторики, в свою очередь, приводит к тому, что некоторые структурные фрагменты многократно повторяются и продукты порождения потока обладают определёнными видами симметрии.

Ближайшим следствием компрессии является эффективность технологии программирования потоков. Это видно на примере использования операции конкатенации как инструмента выполнения операций над графами. Объединение двух 8-разрядных секций в один 16-разрядный кодовый преобразователь позволяет реализовать в сжатом представлении вполне определённый, однозначно заданный граф кодовых переходов размерностью 64000 вершин. Легко представить для сравнения трудоёмкость построения такого графа при прямом экстенциональном программировании. Например, построить списковую структуру, содержащую 64000 элементов.

Поток, в который в качестве динамического ядра встроен дискретный аттрактор всегда сходим к определённому циклу и, следовательно, обладает устойчивостью. Устойчивость дискретного аттрактора обеспечивает обратимость динамики самосборки, механизмы самовосстановления, регуляции размеров и программируемой остановки процесса в заданном финальном состоянии.

Явление функциональной когерентности поддерживает феномен распределённого управления, который позволяет набору не связанных прямым управлением элементов взаимодействовать между собой согласованно по запрограммированным траекториям единого фазового портрета.

4. Примеры построения моделей самосборки

4.1. Моделирование самосборки двухслойного диска

В предыдущих разделах был изложен понятийный аппарат, необходимый для построения моделей самосборки. Это основные понятия супрамолекулярной химии, это положения концепции кодовых замков и основы дискретной динамики. Далее мы рассмотрим несколько показательных примеров моделирования процессов построения отдельных агрегатов и субагрегатов, демонстрирующих некоторые базовые механизмы самосборки. Рассмотрим процесс самосборки двухслойного диска, продукта первой фазы построения капсида вируса табачной мозаики. (Полное изложение процесса самосборки капсида ВТМ приводится в первой части настоящей статьи [1]). Наличие двухслойного диска было надёжно зафиксировано экспериментом, а его состав и форма установлены в ходе рентгеноструктурного анализа. Напомним, что капсид ВТМ состоит из 2130 молекул белка одного единственного типа. Двухслойный диск состоит из двух плоских колец, каждое из которых содержит по 17 молекул капсидного белка. На Рис. 17 изображены два разных варианта реконструкции процессов сборки двухслойного диска в виде двух разных диаграмм. Первой появилась реконструкция, при-

веденная на Рис. 17,1. По этой реконструкции совершенно логично предполагалось, что сначала собираются плоские кольца, состоящие из 17 молекул, а затем эти кольца стыкуются и образуют двухслойные диски. Двухслойный диск является устойчивой конструкцией и далее процесс стыковки колец не продолжается сам по себе. Для продолжения процесса требуется присутствие вирусной РНК.

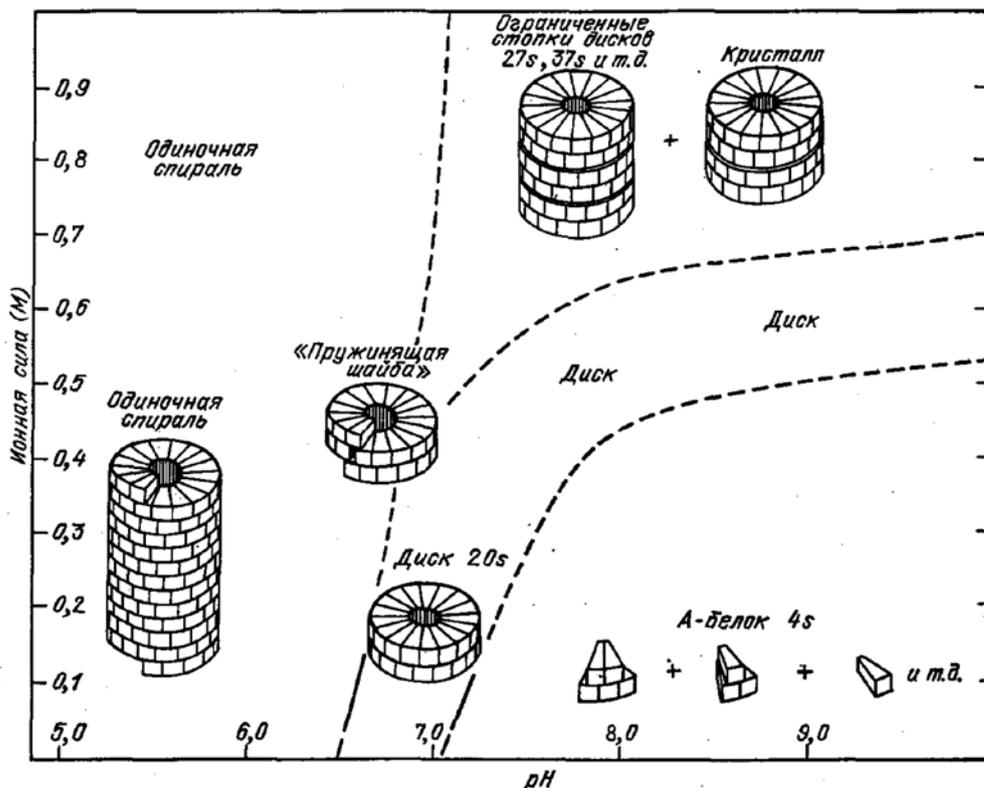
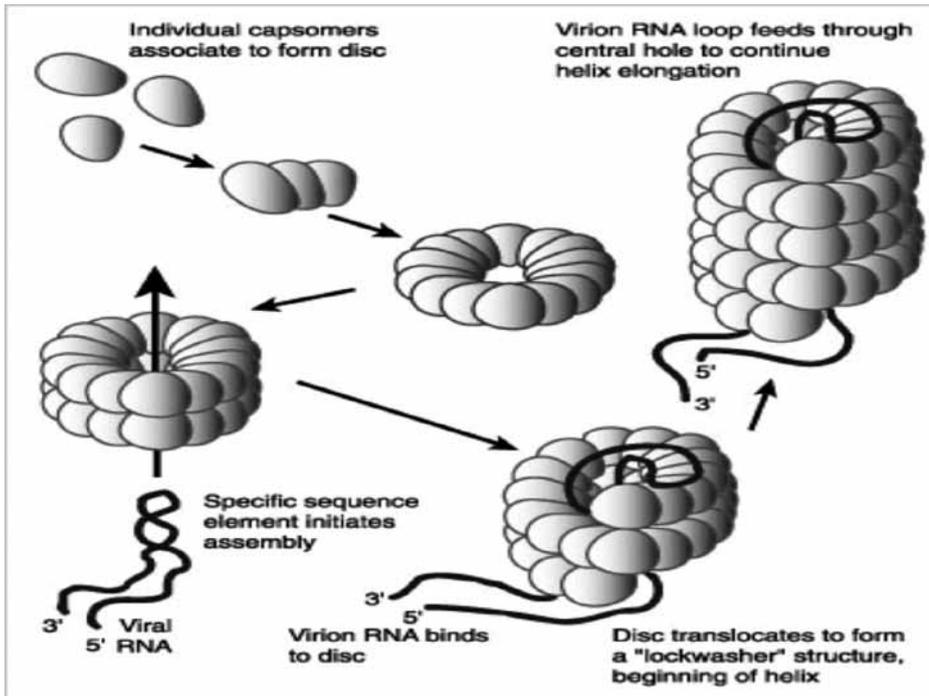


Рис. 17. Реконструкции процесса самосборки ВТМ

Однако далее выяснилось, что промежуточная стадия однослойного кольца длительное время не наблюдалась и была предложена другая, более достоверная реконструкция, принадлежащая Клугу [20] и изображённая на Рис. 17, 2. По этой реконструкции фаза сборки однослойного кольца вообще отсутствует и сразу собираются двухслойные фрагменты диска. Таким образом, для моделирования процесса самосборки двухслойного диска мы приняли за основу реконструкцию Клуга, изображённую на диаграмме Рис. 17. 2 как наиболее достоверную.

Считается, что каждый белок в составе полностью собранного капсида ВТМ имеет четыре задействованных сайта связывания – два горизонтальных и два вертикальных. Следовательно, в модельном эксперименте мы определяем тектон как геометрическую фигуру, изображённую на Рис. 18, имеющую четыре кодовых замка, которые на разных фазах существования тектона могут быть замаскированы или активированы. Будем считать, что направляющим фактором образования формы и состава кольца является геометрия тектона и дислокация горизонтальных замков, как это проиллюстрировано на Рис. 3 и описано в предыдущем тексте. В модели принимаются правила срабатывания для вертикальных кодовых замков по совпадению кодов, для горизонтальных кодовых замков по инверсии. В связи с этим горизонтальные замки в каждом тектоне взаимноинверсные, что условно обозначено знаками плюс и минус. На Рис. 18 изображена диаграмма начальной фазы работы модели.

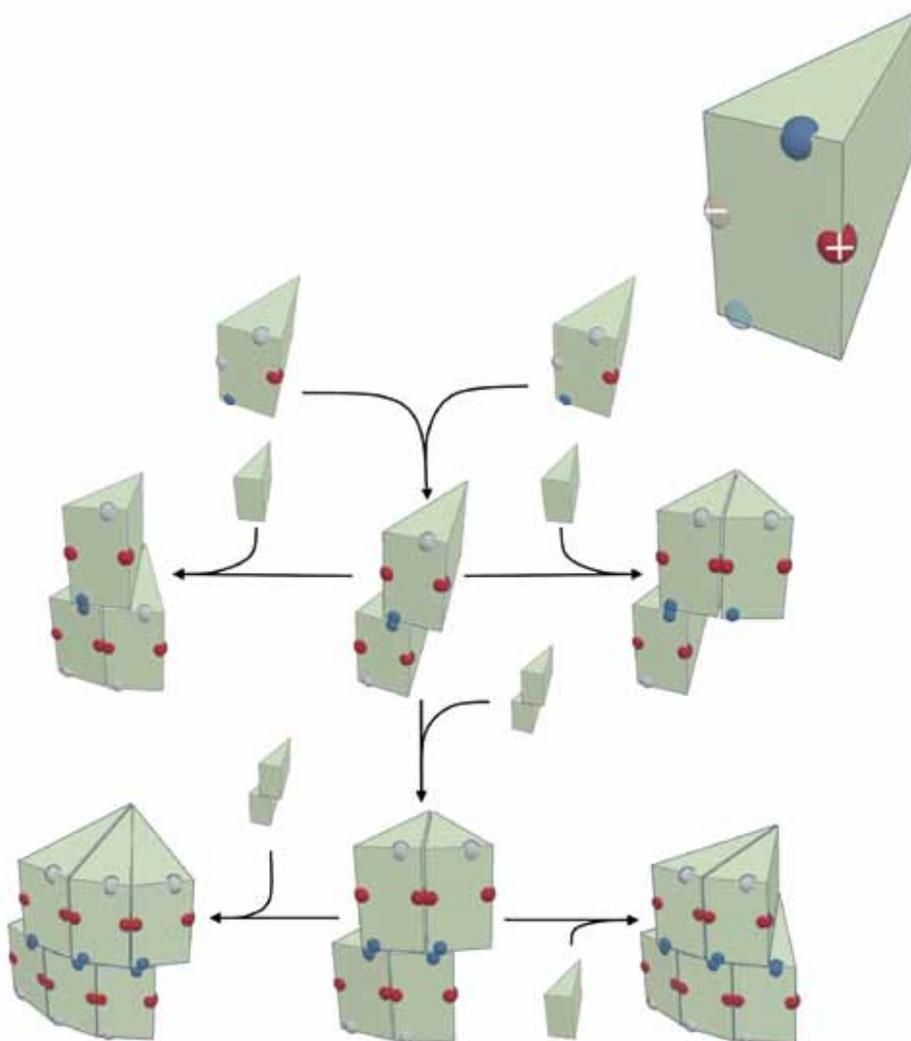


Рис. 18. Диаграмма начальной фазы работы модели самосборки двухслойного диска.

В верхней части рисунка даётся увеличенное изображение схемы тектона с дислокацией кодовых замков. В исходном состоянии активированы кодовые замки, отмеченные цветом – это один вертикальный и один горизонтальный замок. В течение всего процесса сборки двухслойных дисков у всех тектонов в активированном состоянии находится только один вертикальный замок, вследствие чего, могут собираться только двухслойные конструкции, имеющие на своих внешних поверхностях замаскированные вертикальные замки. Активация вторых вертикальных замков может осуществляться только в определённых условиях в присутствии вирусной РНК, что и создаёт механизмы дальнейшей сборки капсида из двухслойных дисков.

При заданных начальных состояниях исходного набора тектонов на первых шагах сборки существует возможность только вертикальной интеграции, при которой создаётся димер вертикальная стойка, как это изображено на Рис. 18. В модель вводится следующее правило – при срабатывании вертикальных замков активируются вторые горизонтальные замки. Это открывает пути горизонтальной интеграции. При этом горизонтальный рост может осуществляться присоединением димеров стоек, а также присоединением мономеров. На Рис. 18 изображены возможные пути роста вертикальной стойки за счёт присоединения мономеров и димеров. При срабатывании горизонтальных замков также происходит активация ранее замаскированных горизонтальных замков с «отрицательными» инверсными кодами. Кроме присоединения мономеров и димеров стоек, возможно также объединение более крупных субагрегатов, представляющих собой двухслойные сектора разной протяжённости.

Описанная модель действительно имеет алгоритмическую динамику, которая может приводить к сборке двухслойных дисков в соответствии с диаграммой, приведенной на Рис. 17, 2. При этом запас исходных мономеров должен быть неограниченным. Динамика процесса сборки в модели такова, что после образования первых димеров для каждого мономера есть две возможности – либо присоединиться к димеру и продолжить рост, либо прореагировать с другим мономером и образовать новый димер. В реальных условиях ограниченного набора исходных мономеров лишь очень немногие экземпляры смогут покрыть весь путь сборки полноценных двухслойных дисков. Большая часть исходного материала будет потрачена на недостроенные субагрегаты. Такой исход не соответствует данным наблюдений. В реальности не наблюдалось сколь-нибудь заметное количество недостроенных субагрегатов. Хотя вопрос о полноте использования наличного строительного материала прямо не ставился по косвенным признакам можно утверждать, что «выход годных» в технологии самосборки близок к 100%. Следовательно, модель необходимо соответствующим образом корректировать.

Необходимо ввести параметр, ограничивающий время жизни димера. В модель вводится новое правило по которому, если димер в течение определённого отрезка времени не стал агентом продолжения процесса роста, он распадается. Кроме того, все субагрегаты должны иметь ограниченное время жизни, которое растёт с ростом субагрегата. При каждом акте приращения субагрегата, должен запускаться процесс пересчёта, длительность которого должна определяться размером субагрегата. Только при завершении сборки двухслойного диска процесс пересчёта блокируется и завершённый агрегат переходит в стабильное состояние. В случае если субагрегат, не успевает завершить рост, он распадается и даёт материал для роста более продвинутых экземпляров.

При принятии перечисленных правил, результаты функционирования модели могут быть приближены к реальности данных наблюдения. Возникает вопрос – насколько

ко правдоподобно одновременное существование и взаимодействие процессов сборки и разборки вирусных капсидов. Проблема разборки вирусных капсидов возникла в связи с разработкой технологий адресной доставки лекарственных препаратов к определённым органам и тканям с использованием модифицированных вирусных капсидов в качестве контейнеров. Это направление разработок упоминалось в первой части настоящей статьи. Есть ряд работ, в которых детально обсуждается проблема разборки вирусных капсидов, см. например [21]. На рис 19 приводится иллюстрация предполагаемого явления управляемой осыпи капсида палочковидного вируса.

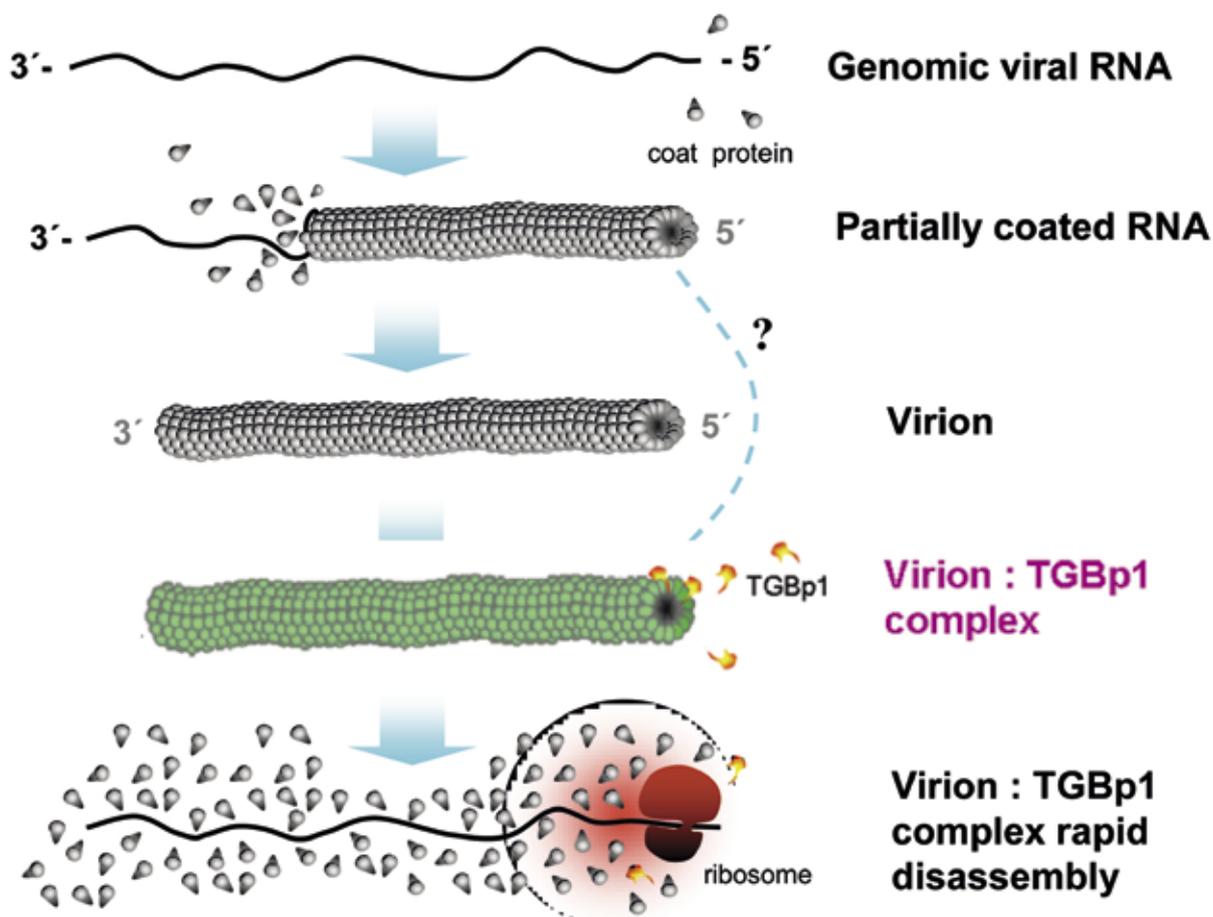


Рис. 19. Явление разборки вирусного капсида

Несмотря на то, что сообщений о прямых наблюдениях явления разборки вирусных капсидов пока не имеется, гипотеза о возможности управляемого отключения сайтов связывания не оценивается как неправдоподобная. Во всяком случае, процедура включения ранее замаскированных сайтов связывания в ходе развёртывания процесса самосборки зафиксирована как факт наблюдения. Следовательно, активность сайтов связывания на поверхности белков в принципе управляемая.

К настоящему времени получено множество микроснимков, на которых изображаются результаты спонтанной агрегации капсидных белков в отсутствие РНК. Ниже на Рис. 20 приводится один из таких снимков.

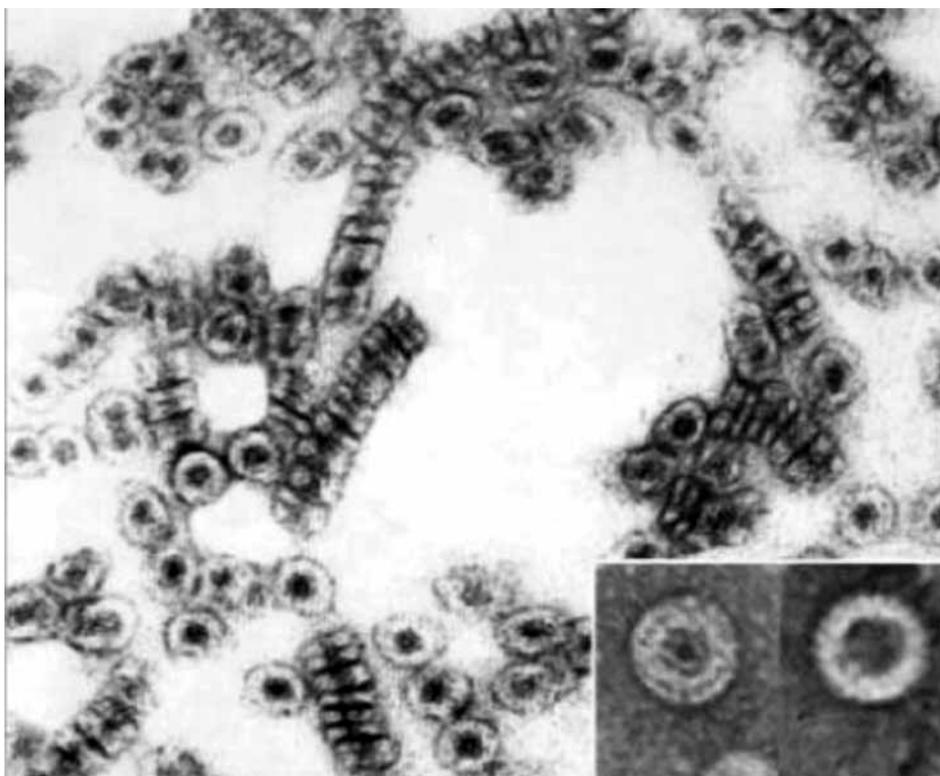


Рис. 20. Микрофотография продуктов агрегации двухслойных дисков без участия РНК

На рис. 20 приведены изображения результатов спонтанной агрегации капсидных белков вируса штриховатой мозаики ячменя, который имеет палочковидную форму, во многом подобную капсиду ВТМ. На этом снимке можно отчётливо видеть как двухслойные, так и однослойные диски. Мы можем вернуться к начальному этапу построению модели и выбрать первый вариант процесса, изображённый на Рис. 17, 1, в котором сначала собираются однослойные диски. Принятые нами правила построения моделей и разработанный понятийный аппарат позволяют привести модель в соответствие с данными наблюдения. Управляя параметрами интенсивности сборки и разборки можно воспроизвести ситуацию, при которой на выходе будут наблюдаться определённые количества двухслойных и однослойных дисков, как это зафиксировано на снимке Рис. 20.

Мы намеренно выбрали для примера столь неоднозначный случай. Несмотря на кажущуюся простоту рассматриваемого агрегата, процедура его самосборки далеко не простая, а ситуация в целом далека от простоты и однозначности. Именно поэтому в данной области математические модели алгоритмического поведения необходимы как дополнительный инструмент исследования.

4.2. Моделирование процесса самосборки жёсткой трубки хвостового отростка бактериофага Т4

Рассмотрим пример построения модели сборки ещё одного фрагмента, жесткой внутренней трубки хвостового отростка бактериофага Т4. В качестве исходных данных будем использовать общий сценарий сборки хвостового отростка изображённый на Рис. 21. Данный сценарий подробно разбирался в первой части настоящей статьи и позаимствован из обзора [22]. Для удобства изложения мы вынуждены повторить рисунок. Хвостовой отросток состоит из базовой плиты, на которой собирается жёст-

кая трубка, охваченная мягким чехлом. Сборка жёсткой трубки изображена в начале третьей строки С данной диаграммы. Жёсткая трубка состоит из 138 белков gp 19 и представляет собой вертикальную стопку из 23 колец. Каждое кольцо состоит из 6 молекул белка gp 19.

Факты наблюдения, которые необходимо воспроизвести при моделировании:

- Сборка трубки происходит только на опорной плите, до завершения сборки плиты белки gp 19 не взаимодействуют между собой.
- Отдельные кольца как промежуточные субагрегаты не наблюдаются.
- Существует регулятор, который поддерживает длину трубки, равную 23 кольцам в вертикальной стопке.

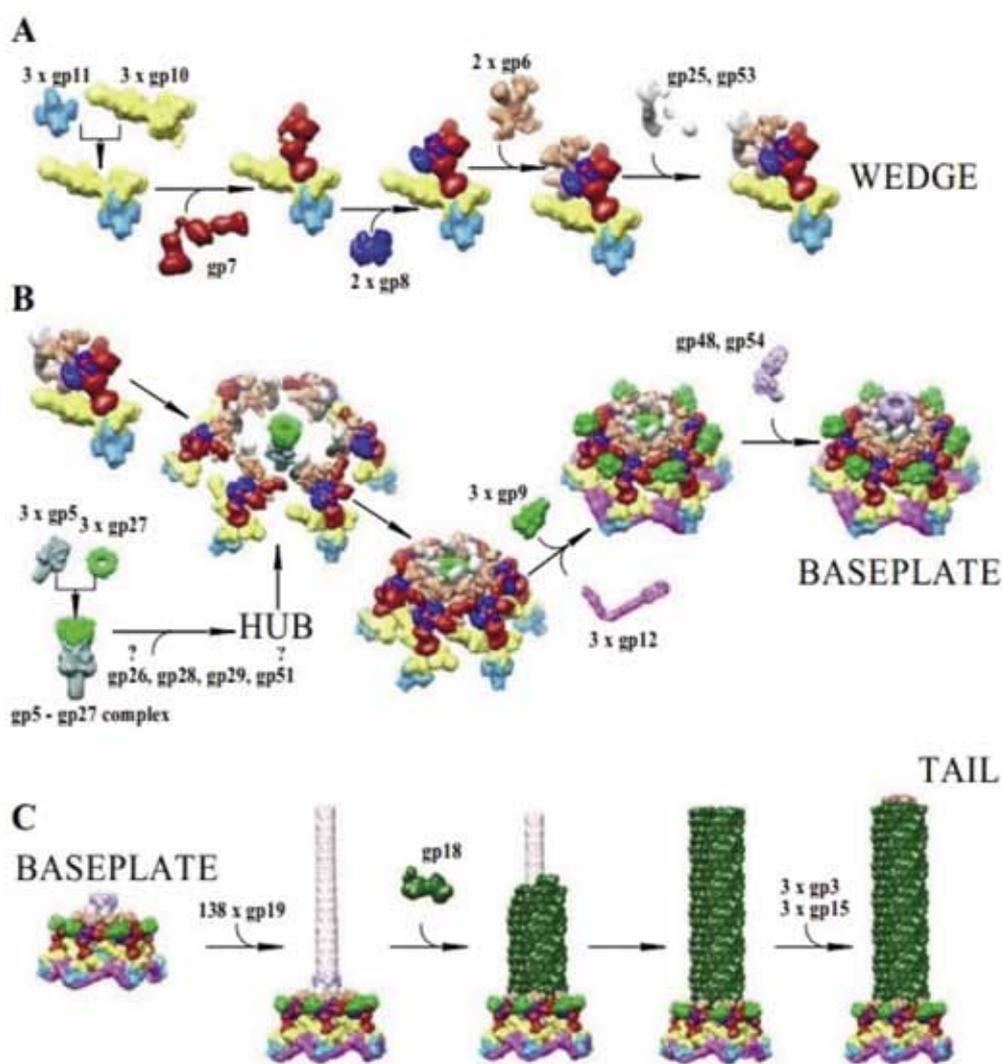


Рис. 21. Сборка хвостового отростка бактериофага Т4

В рамках модельного эксперимента конструируется исходный строительный элемент – тектон, который является модельным заменителем капсидного белка gp 19. Геометрия тектона в данном случае не важна и намечена условно, важно наличие четырёх кодовых замков аналогов сайтов связывания в белках – это два вертикальных и два горизонтальных замка, расположенных ортогонально. Правило срабатывания кодовых замков по инверсии кодов. В исходном состоянии активирован один вертикальный и один горизонтальный замок. В этой ситуации взаимодействия тектонов исключены.

Как изображено на Рис. 21 строка В, сборка базовой плиты завершается построением в центре шестиэлементного венчика, образованного белками gr48 и gr54. Это и есть платформа для начала сборки жёсткой трубки. В момент завершения сборки венчика, на поверхности его элементов активируются замки с кодами инверсными кодам вертикальных замков тектонов gr 19. С этого момента начинается процесс сборки жёсткой трубки. Процесс сборки жёсткой трубки проиллюстрирован на Рис. 22.

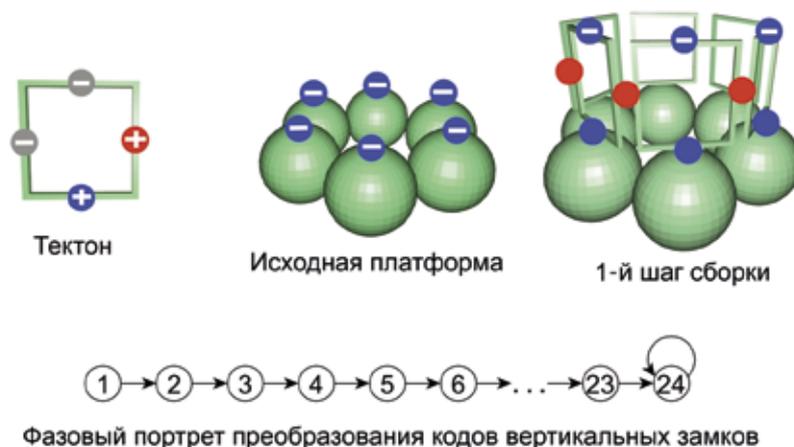


Рис. 22. Процесс сборки жёсткой трубки хвостового отростка бактериофага T 4

На первом шаге сборки срабатывают активированные вертикальные замки и тектоны заполняют первый слой трубки. При срабатывании вертикальных замков в каждом тектоне активируются оставшиеся горизонтальные и вертикальные замки. Это открывает пути срабатывания горизонтальных замков и готовит условия для заполнения второго слоя трубки. Далее аналогичным образом формируется второй слой и подготавливаются условия образования следующего слоя.

Для управления ростом жёсткой трубки в вертикальных замках реализуется механизм кодовых трансформаций. Это значит, что в вертикальные кодовые замки встроен преобразователь кодов и при каждом срабатывании вертикальные замки меняют свои коды по кодовым переходам фазового портрета. Динамика вертикального роста жёсткой трубки определяется фазовым портретом. Фазовый портрет должен обеспечить 23 шага вертикального роста и остановку на последнем 23 шаге. Требуемый фазовый портрет изображён на Рис. 22. Специфика данного примера заключается в том, что на каждом шаге сборки активные вертикальные замки должны порождать один и тот же код инверсный вертикальному коду тектона gr19, а по определению в графе кодовых переходов возможно только однократное вхождение кодовых комбинаций. Проблема решается путём маскирования части разрядов, представляющих кодовую комбинацию. Полная кодовая комбинация состоит из двух секций – открытой и замаскированной. Открытая секция доступна для взаимодействия кодовых замков, а замаскированная скрыта внутри тектона. Кодовый преобразователь это пошаговый счётчик, реализующий простейшую операцию плюс единица. Скрытая под маской секция представляет младшие разряды счётчика. До тех пор пока секция младших разрядов не достигнет переполнения, открытая секция старших разрядов сохраняет своё начальное состояние. На 23 шаге при переходе к 24 шагу очередная операция приращения счётчика вызывает переполнение замаскированной секции и перенос единицы в открытую секцию, что вызывает смену хранимого в ней кода. В соответствии с топологией фазового портрета это состояние является полюсом стабильности и далее не меняет своего состояния. А в этом стабильном состоянии даль-

нейший рост трубки невозможен. Если же произойдёт разрушение трубки и от неё будет оторвана некоторая её часть, на границе разрыва откроются коды инверсные кодам вертикальных замков белков gp 19 и фазовый портрет возобновит управляемый рост. При этом точки обрыва фиксируются внутренней разметкой, которая содержится в скрытой под маской секции младших разрядов счётчика. Рост возобновится с прерванных позиций и завершится при восстановлении заданного размера трубки.

4.3. Моделирование самосборки стойки базовой плиты бактериофага T4

Рассмотрим пример моделирования процесса самосборки начального элемента опорной плиты хвостового отростка фага T4 – стойки, изображённой на Рис. 23 в верхней строке А. Сведения, которые приводятся в обзоре [22] достаточно скудные и построить полную картину не позволяют. В самых общих чертах фазовый портрет сборки может приблизительно выглядеть так, как это изображено на Рис. 23.

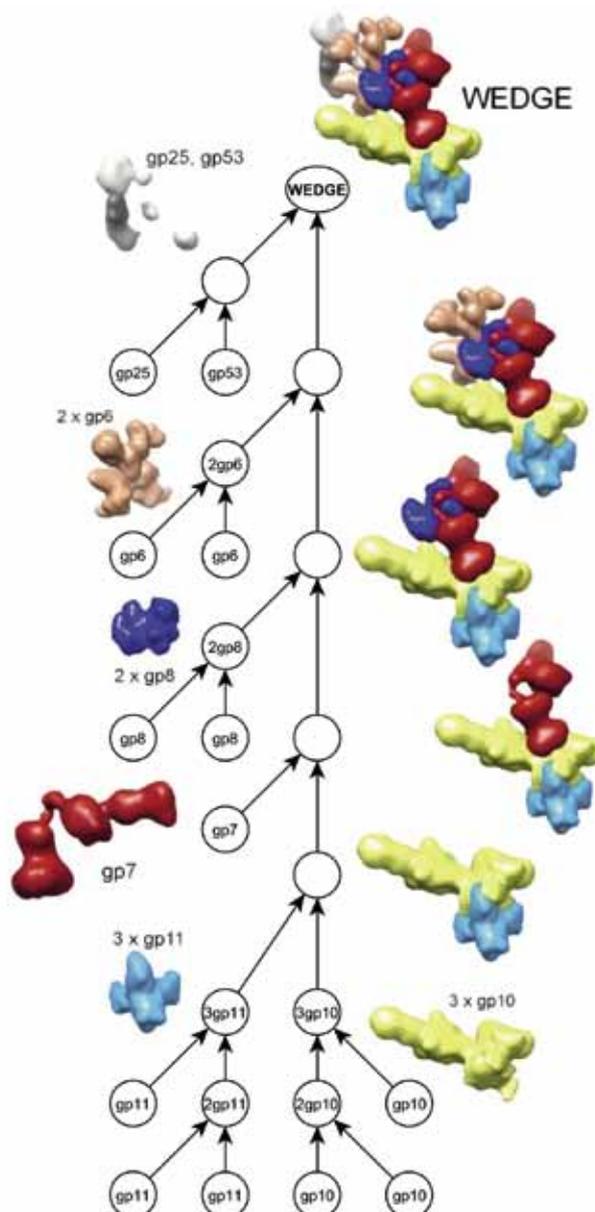


Рис. 23. Приблизительная структура фазового портрета сборки стойки опорной плиты фага T4

Ценность приведенного на Рис. 23 фазового портрета заключается в том, что он фиксирует данные наблюдений, имеющиеся к настоящему времени. Отталкиваясь от этого приблизительного фазового портрета можно сделать более детальную реконструкцию в терминах и понятиях, разработанной нами гипотезы кодовых замков.

Рассмотрим более детально начальный фрагмент процесса, а именно сборку Т-образной конструкции, состоящей из трёх молекул белка gp10. Исходный тектон, заменяющий в модели белок gp10 имеет форму вытянутой палочки и должен содержать на своей поверхности как минимум 5 кодовых замков с разными начальными кодами и разными механизмами срабатывания. Это два замка на противоположенных концах палочки с логикой срабатывания по инверсии и три замка в средней части. Один из замков в средней части срабатывает по инверсии, остальные два с логикой срабатывания по совпадению кодов. В начальном состоянии активны все замки срабатывающие по инверсии, это два замка на концах палочки и один в средней части. В этом состоянии существуют условия для срабатывания концевых замков, что приводит к образованию длинной палочки из двух тектонов. При срабатывании первой пары замков один концевой замок маскируется, а другой претерпевает кодовую трансформацию и в него загружается код инверсный коду активного замка в средней части тектона. На втором шаге сборки к длинной палочке присоединяется третий тектон и образуется Т-образная конструкция. При этом маскируются концевые замки вновь присоединённого тектона и активируется ещё один замок в его средней части и таким образом создаётся точка для последующего присоединения ассоциации из трёх белков gp11. После присоединения трёх белков gp11 активируется следующий замок в средней части белка gp10 и в него загружается код, необходимый для присоединения белка gp7. В целом структура приведенного фазового портрета доступна для синтеза средствами дискретной динамики, что делает возможным построение математических моделей наблюдаемых явлений самосборки.

Таким образом, отталкиваясь от грубого каркасного представления процесса, полученного на основе данных экспериментальных наблюдений можно осуществить модельную реконструкцию и построить более детальный фазовый портрет сборки всего агрегата. Далее по полученному в реконструкции каркасу фазового портрета следует синтезировать порождающую функцию и выбрать значения кодов, которые присваиваются начальным состояниям тектонов. Это и есть математическая модель управления сборкой заданного агрегата. Рассмотренный пример показывает, что созданный нами понятийный аппарат позволяет осуществлять модельные реконструкции, согласующиеся с данными экспериментальных наблюдений.

5. Проблемы физической реализации

Изложенная в разделе 2 концепция кодовых замков представляет собой полный набор функций, необходимых для существования модели. Декларированный перечень согласуется с данными экспериментальных наблюдений. Основная проблема выбора физической реализации заключается в том, что она должна быть совместима со всеми пятью положениями концепции. Сайты связывания мы рассматриваем как кодовые замки, которые должны обеспечивать силы связывания и удержания взаимодействующих молекул и при этом быть кодоспецифичными и создавать условия избирательности взаимодействий. Кодовые замки должны быть управляемыми и включаться или выключаться по определённым сигналам в определённых условиях. В кодовых замках должны быть реализованы механизмы кодовых трансформаций, позволяющие загружать в замки разные коды. Кодовые замки должны поддерживать информационную связность всей конструкции или отдельных её сегментов и быть способными транслировать сигнальные и кодо-

вые обмены. И, наконец, кодовые замки должны воспринимать друг друга на расстоянии в некоторой окрестности взаимодействия и узнавания. Важно также определить порядок объёмов кодового разнообразия. Например, для бактериофага Т4 объём кодового разнообразия должен быть порядка сотни тысяч различных состояний. В построении капсида фага Т4 участвует порядка 200 типов белков, каждый белок может иметь на своей поверхности 4-5 сайтов связывания, в образовании определённого субагрегата в составе капсида может участвовать несколько сотен однотипных молекул, а обратимость самосборки обеспечивается кодовой разметкой и пространственной привязкой участников сборки, в итоге получается примерно 10^5 кодовых состояний.

Если придерживаться статической модели устройства кодовых замков, при которой комплиментарные профили формируются пространственно, а силы сцепления имеют потенциальный характер и порождаются распределением зарядов на профилях – удовлетворить всем перечисленным требованиям одновременно представляется весьма проблематичным. Определённую надежду подают исследования избирательных взаимодействий в супрамолекулярной химии, которые рассматривают возможность формирования комплиментарных профилей на временной координате. (Об этом мы упоминали в разделе 1 настоящей статьи). Вовлечение временной координаты выводит нас на представление участников процесса самосборки как сложных колебательных систем. В этом смысле значительный интерес вызывают работы, направленные на исследование конформационной подвижности белков как следствия колебательных процессов в структуре и функциях полипептидных цепей. Очень интересная модель молекулы белка изложена в работе [23] – это модель так называемой армированной капли. Прочитав некоторые положения этой статьи.

Модель армированной капли предполагает наличие в макромолекуле белка совмещения двух фазовых состояний – твёрдого тела и вязкой жидкости. На Рис. 24 представлена упрощённая схема устройства белковой глобулы. Элементы вторичной структуры образуют довольно жесткий спиральный каркас, окружённый подвижными боковыми группами. Эти боковые группы образуют как бы жидко-подобную «опушку» с вязкостью 100 пуаз вокруг жёсткого каркаса с модулем упругости 1 ГПа.

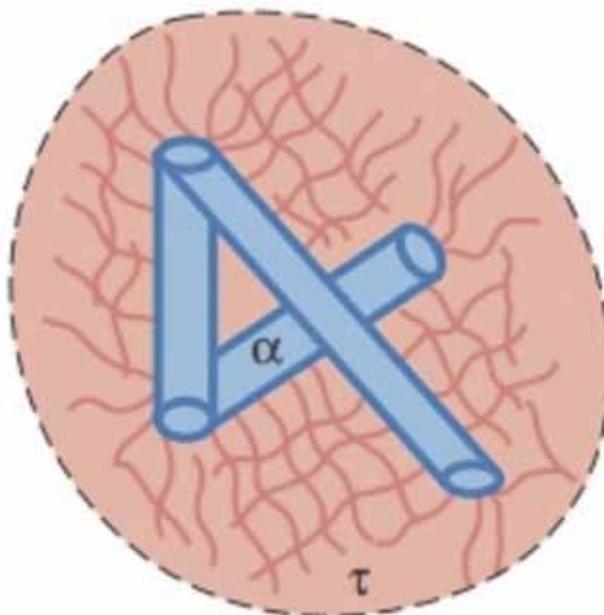


Рис. 24 Модель армированной капли для белковой глобулы

Жидкоподобная внутрибелковая среда характеризуется достаточно быстрыми временами конформационной релаксации и не является непреодолимым препятствием для движения атомных групп в определённых пределах. Но эта же среда будет резко тормозить перемещения атомных групп, геометрия которых не вписывается в пределы, определяемые упругими элементами данной конструкции. Структура армированной капли создаёт условия для организации стереоспецифичных взаимодействий. Исследование явления конформационных релаксаций макромолекул оказалось достаточно продуктивным, некоторые интересные результаты изложены в [24], [25].

Нас в первую очередь интересует потенциальная возможность представления функций кодовых замков как результата осуществления избирательной диффузии. При этом избирательность может быть обеспечена стереоспецифичным взаимодействием, в том числе и на временной координате. Проникновение боковых атомных групп может происходить по направлениям флуктуирующих щелей при условии временной синхронизации флуктуаций. Кроме того, колебательная модель функционирования кодовых замков позволяет выдвинуть гипотезу их пространственного взаимодействия в водной среде вследствие распространения акустических колебаний. При этом сетка водородных связей, образующих водное окружение белков может работать как «упругий эфир».

Заключение

В первой части настоящей статьи [1] был сделан обзор накопленных фактов наблюдения процессов самосборки вирусных капсидов и обоснован вывод о том, что явление самосборки представляет собой специфическую форму алгоритмического поведения на молекулярном уровне. Специфика явления самосборки заключается в том, что макромолекулы участники самосборки представляют собой самодостаточный программируемый ансамбль, демонстрирующий согласованное безальтернативное поведение и не содержащий видимых средств централизованного внешнего управления. Вся необходимая управляющая информация содержится в участниках самосборки, а системная целостность и целевая завершённость процесса является следствием локальной активности элементов, осуществляющих взаимное узнавание и избирательные акты взаимодействия. В связи с этим проблема математического моделирования самосборки была сформулирована как задача построения специфической знаковой системы, поддерживающей принцип распределённого управления и не имеющей аналогов в современной компьютерной технике и теории алгоритмов.

Во второй части статьи был подведён итог накопленных фактов наблюдения явления самосборки, выбран язык и понятийный аппарат, позаимствованный из саупрамолекулярной химии, и сформулирована гипотеза кодовых замков, представляющая собой набор положений о необходимых свойствах и функциях центров связывания, дислоцированных на поверхности макромолекул участников самосборки.

Далее изложены основные положения о составе и функциях знаковой системы, поддерживающей распределённое управление и порождающей алгоритмическую динамику адекватную данным экспериментальных наблюдений явления самосборки. Суть этой знаковой системы заключается в том, что символическая запись собираемой структуры не связана с ней отношением изоморфизма (как это принято в известных алгоритмических системах), а является её сжатым компрессивным представлением. В связи с этим символические детерминанты процесса сборки оказываются настолько просты и компактны, что могут быть многократно тиражированы и встроены непосредственно во все макромолекулы участвующие в самосборке. В итоге мы получаем в рамках модельного эксперимента запрограммированный ансамбль элементов, разворачивающий согласованную алгоритмическую динамику поведения.

В заключительной части статьи рассмотрено несколько примеров моделирования характерных фрагментов вирусных капсидов, демонстрирующих основные свойства явления самосборки.

Литература

1. Махиборода, Подобин А.А., А.В. Ильичёв А.В. Проблемы моделирования феномена самосборки (ч. I) // М. Наноструктуры. Математическая физика и моделирование, 2017 т. 17, № 1 с. 5-50
2. Витвицкий А.А. Клеточные автоматы с динамической структурой для моделирования роста биологических тканей // Новосибирск, Сибирский журнал вычислительной математики, 2014. Т. 17, №4, с 315-327
3. Витвицкий А.А. Компьютерное моделирование процессов самоорганизации бактериальной системы белков // Математическая биология и биоинформатика. 2014. Т. 9. № 2, с. 435-463
4. Xiao X., Shao S., Ding Y., Huang Z., Chen X., Chou I K.-C. Using cellular automata to generate image representation for biological sequences // Amino Acids 2005/ 28 p 29-35
5. Фон Нейман Дж. Теория самовоспроизводящихся автоматов // М. Мир, 1971, 326 с.
6. Лен Ж.-М., Супрамолекулярная химия: Концепции и перспективы // Новосибирск, Наука 1998 334 стр.
7. Стив Дж. В., Этвуд Дж. Л., Супрамолекулярная химия Т. 1 // М. ИКЦ Академкнига, 2007. 490 стр.
8. Стив Дж. В., Этвуд Дж. Л., Супрамолекулярная химия Т. 2 // М. ИКЦ Академкнига, 2007. 416 стр.
9. Лима-де-Фариа А. Эволюция без отбора. Автоэволюция формы и функции, Москва, Мир 1991, 455 стр.
10. Лима-де-Фариа А. Похвала глупости хромосомы, Москва, Бинум 2015, 315 стр.
11. Зусман М. Биология развития // Москва, Мир, 1976, 301 с.
12. Борщёва Е.В. Аветисов В.А. Роль конформационной динамики белка в регуляции ферментативной активности // М. Наноструктуры. Математическая физика и моделирование 2017, т. 16. № 2 с. 5 – 24
13. Арнольд В.И. Топология и статистика формул арифметики // Успехи математических наук 2003.– Т. 58. № 4 (352) с. 3 – 28.
14. Арнольд В.И. Топология алгебры: комбинаторика операции возведения в квадрат // Функциональный анализ и его приложения. – 2003 Т. 37 – № 3 – с. 20 – 35.
15. Арнольд В.И. Сложность конечных последовательностей нулей и единиц и геометрия конечных функциональных пространств // Публичная лекция – 2006. Т. 13.
16. Махиборода А.В. Ильичёв А.В. Подобин А.А. Царёв А.В. Проблемы реализации массового динамического параллелизма II // М. Наноструктуры. Математическая физика и моделирование, 2016 т. 14, № 2 с. 25-68
17. Гейтинг А. Интуиционизм // М. Мир, 1965. 200 с.
18. Клини С. К., Весли Р.Е. Основания интуиционистской математики // М., Наука, 1978. – 272 с.
19. Драгалин А.Г., Математический интуиционизм. Введение в теорию доказательств // М., Наука, 1979. – 256 с.
20. Клуг А. От молекул к биологическим ансамблям // Успехи биологических наук, 1984, Т. 142, вып. 1 с. 3 – 30.
21. Rodionova N.P., Karpova O.V., Kozlovsky S.V., Zayakina O.V., Marina V. Arkhipenko M.V., Atabekov J.G. Linear Remodeling of Helical Virus by vement Protein Binding // J. Mol. Biol. (2003) 333, p 565–572
22. Leiman P. G. Arisaka F., van Raaij M. J., Kostyuchenko V. A., Aksyuk A. A., Kanamaru S., Rossmann M. G. Morphogenesis of the T4 tail and tail fibers // Virology journal, 2010, 7 (1), 355 pp.
23. Шайтан К.В. Конформационная подвижность белка с точки зрения физики // Соросовский образовательный журнал № 5. 1999 с 8-12
24. Шайтан К.В. Топология энергетического ландшафта макромолекул в пространстве торсионных углов и принцип минимума скорости диссипации энергии при конформационной релаксации // Биофизика, 2017, том 62, вып. 6, с. 1084-1092
25. Шайтан К.В. Вариационные принципы в механике конформационных движений макромолекул в вязкой среде // Биофизика, 2018, том 61, вып. 1, с. 5-15

PROBLEMS OF MODELING OF THE SELF-ASSEMBLING PHENOMENON (PT. II)

A.V. Makhiboroda, A.A. Podobin, A.V. Ilichev

*Department of Applied Mathematics MIEM,
National Research University «Higher School of Economics»*

makhiboroda@yandex.ru

Received May 28, 2018

In this paper, we summarize the survey of observation data of virus capsid self-assembling processes, which was presented in the first part. The main problem of mathematical modeling of self-assembling is formulated as the construction of a specific system of signs generating an algorithmic dynamics adequate to self-assembling processes, which has no analogs in the contemporary computer technology. The foundations of discrete dynamics constructed on the basis of the notion of discrete attractor are described and the possibilities and perspectives of the construction of mathematical models of self-assembling on the basis of the discrete attractor are discussed.

ИОННО-КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ И ПЛАНЕТЫ. ОПЫТ КАЧЕСТВЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Ю.М. Брук¹, А.Л. Стасенко^{2,3}

¹*Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук ФИАН)*

²*Центральный аэрогидродинамический институт им. проф. Н.Е. Жуковского (ЦАГИ)*

³*Московский физико-технический институт (Государственный университет, МФТИ)*

yubruk@gmail.com , stasenko@serpantin.ru

Поступила 05.12.2017

Обсуждается возможность моделирования планетных систем на основе кристаллических структур, построенных из почти одинаковых атомов. Цель такого моделирования – описать качественные и количественные характеристики гравитирующих шаров и выяснить их возможные корреляции с реальными планетами. В частности, объясняется почему реальные планеты с большими массами построены в основном из относительно лёгких элементов, какова максимальная высота гор на планетах и предельная глубина бурения коры (мантии) планет.

УДК 22.317; 52+53; 533(9); 539(2)

DOI: 10.31145/2224-8412-2017-17-2-49-63

Введение

Едва ли, кроме астрофизики, найдется такая другая область науки, где теснейшим и часто причудливым образом переплетены идеи и образы из атомной и ядерной физики, оптики и спектроскопии, физики низких температур и гидродинамики, теории твердого тела и физики плазмы. Обычно все эти разделы физической науки изучаются и излагаются в учеб-

никах независимо от гравитации. В астрофизике же именно гравитация определяет специфику многих газодинамических и низкотемпературных, плазменных и твердотельных эффектов и явлений. В это «созвездие наук» включается и наука о ядерных превращениях и теория фазовых переходов в плотном и сверхплотном веществе. Сверхплотным мы будем считать вещество, плотность которого превышает $(10^5 \div 10^6) \frac{\text{г}}{\text{см}^3}$. В макроскопических количествах такое вещество в земных условиях не существует. Можно сказать, правда, что на Земле существует вещество (и сама Земля в значительной степени из него состоит) с плотностью много большей, чем $10^6 \frac{\text{г}}{\text{см}^3}$, плотность атомных ядер примерно равна $3 \cdot 10^{14} \frac{\text{г}}{\text{см}^3}$. Но нас дальше будут интересовать в основном явления, происходящие в макроскопических сгустках плотного и сверхплотного вещества, в том числе и при ядерных плотностях. Примерами таких сгустков сверхплотного вещества являются белые карлики и нейтронные звезды. Сейчас можно считать окончательно установленным существование множества таких звезд. Мы расскажем о них и других звездах и планетах дальше.

Наша главная цель – продемонстрировать приемы моделирования и качественного оценивания параметров плотных и сверхплотных объектов и физических процессов с ними связанных. При этом мы будем активно пользоваться методами теории размерностей и физическими аналогиями из разных областей физики [1].

Взаимное проникновение идей из одного раздела физики в другой не является, конечно, специфическим только для астрофизики. Можно вспомнить, например, что представления о поверхностном натяжении и колебаниях жидкой капли послужили толчком к созданию капельной модели атомного ядра и позволили оценить характерные частоты колебаний ядер. Интуитивно ясно сходство процессов деления атомных ядер и дробления дождевых капель.

Очень существенно, что аналогии не только наталкивают нас на то, как надо пытаться строить новые теории, но часто помогают еще до построения таких теорий получать количественные оценки. Опыт наблюдений, экспериментов и использования аналогий убеждают нас в разумности таких оценок. Из соображений размерностей мы не можем, конечно, вычислить числовые коэффициенты в формулах, но «к счастью» для нас, эти коэффициенты во многих случаях оказываются числами порядка единицы. Разумеется, оценки не избавляют нас от необходимости более аккуратного решения физических задач в тех случаях, когда это возможно. Но нужно помнить, что возможность строгого решения не всегда имеется. Основных препятствий чаще всего два – недостаточность информации о характере взаимодействия частиц и трудности вычислительной работы. Тем более важным представляется в таких случаях качественный и полуколичественный анализ упрощенной или модельной физической ситуации. Часто даже «наивные» представления оказываются по сути своей более глубокими, чем это кажется на первый

взгляд. Системы частиц и физические процессы, о которых мы будем рассказывать, очень непросты. И, пожалуй, вполне уместно напомнить слова, принадлежащие выдающемуся советскому физико-теоретику Я.И. Френкелю [2], «Чем сложнее рассматриваемая система, - писал он, - тем по необходимости, упрощеннее должно быть ее теоретическое описание. Хорошая теория сложных систем должна представлять лишь хорошую карикатуру на эти системы, утрирующую те свойства их, которые являются наиболее типическими, и умышленно игнорирующую все остальные – несущественные свойства».

Следуя этим словам, будем стараться «рисовать хорошие карикатуры». Изучение же обсуждаемых нами вопросов на более высоком уровне строгости показывает, что наши карикатуры можно раскрашивать, но не надо перерисовывать.

Прежде, чем перейти к конкретным задачам, сделаем важное предварительное замечание. В большом и неоднородном тексте статьи мы иногда позволяли себе обозначать одинаковыми буквами разные физические величины. Мы пошли на это совершенно сознательно потому, что не хотели отступать от сложившихся традиций и соглашений, а число понятий, которые мы обсуждаем, довольно велико. В каждом разделе статьи мы подробно обсуждаем о чем идет речь. Мы надеемся, что это не приведет нигде к недоразумениям. По аналогичным причинам мы не стали делать ни в разделах, ни в статье в целом сплошную нумерацию формул. Мы считаем, что это тоже не создаст трудностей у читателей при чтении.

Что такое модуль Юнга [3]

Рассмотрим сначала модель ионного кристалла, похожего на кристалл поваренной соли $NaCl$, но отличающегося от последнего тем, что все атомы имеют примерно одинаковую массу. Массой электронов по сравнению с массой ядер мы, конечно, пренебрегаем.

Пусть плотность кристалла ρ , а атомные веса элементов, его составляющих $A_1 \approx A_2 \approx A$. Кристаллическая решетка построена из чередующихся положительных и отрицательных ионов. Заряд каждого иона будем считать равным заряду электрона ($\pm e$). Силами, действующими на каждый ион, являются обычные кулоновские силы. Попробуем оценить плотность электростатической энергии системы ионов. Сделать это несложно. Масса каждого атома примерно равна

$$m_{\text{я}} = Am_{\text{п}}, \quad m_{\text{п}} - \text{масса нуклона.}$$

Выпишем систему параметров задачи: плотность энергии E ($\frac{\text{эрг}}{\text{см}^3} = \text{г} \cdot \text{см}^{-1} \cdot \text{с}^{-2}$); плотность ρ ($\text{г} \cdot \text{см}^{-3}$); заряд электрона (иона) e ($\text{г}^{1/2} \cdot \text{см}^{3/2} \cdot \text{с}^{-1}$); масса ядра $m_{\text{я}}$ (г).

Пусть $E \sim e^x m_{\text{я}}^y \rho^z$, сравнивая размерности левой и правой частей этого равенства, найдём $x = 2$; $y = -\frac{4}{3}$; $z = \frac{4}{3}$. Итак,

$$E \sim e^2 m_{\text{я}}^{-4/3} \rho^{4/3} \sim \left(\frac{\rho}{m_{\text{я}}}\right) \cdot \frac{e^2}{(m_{\text{я}}/\rho)^{1/3}}$$

Совсем понятно, что $\left(\frac{\rho}{m_{\text{я}}}\right)$ – это просто число ионов в 1 см^3 , а $\left(\frac{m_{\text{я}}}{\rho}\right)^{1/3}$ – среднее расстояние между ионами. Упругие свойства вещества определяются межатомными взаимодействиями. Значит и величина E есть та самая характерная плотность энергии, которую мы называем по-другому упругим модулем G . Численное значение этой энергии по порядку величины мы сейчас вычислим. Пусть, например, $\rho=5 \text{ г/см}^3$, $A=50$. Тогда

$$\begin{aligned}\frac{\rho}{m_{\text{я}}} &\sim 5 \cdot 10^{22} \text{ атомов/см}^3 \\ \left(\frac{m_{\text{я}}}{\rho}\right)^{1/3} &\sim 2 \cdot 10^{-8} \text{ см} \\ E &\sim 2 \cdot 10^{11} \frac{\text{эрг}}{\text{см}^3}\end{aligned}$$

Примерно такое же значение для G вы легко найдёте в таблицах упругих постоянных кристаллов.

В теории ионных кристаллов энергию электростатического взаимодействия часто записывают в виде равенства $E = -\frac{1}{2} \alpha n \frac{e^2}{a}$ [4]. Для нашего примера $n = \frac{\rho}{m_{\text{я}}}$; $a = \left(\frac{m_{\text{я}}}{\rho}\right)^{1/3}$.

Отрицательный знак энергии означает, что написана энергия связи (сравните со знаком энергии электрона на атомной орбите). Постоянная α носит название постоянной Маделунга. Вычисления для реальных кристаллических решеток – трудная задача, но мы можем считать, что, по крайней мере для нашей простой модели, α не сильно отличается от единицы.

Для других твердых тел (неионных кристаллов) рассчитать упругие модули оказывается существенно сложнее, так как в них важны и другие типы межатомных сил. Здесь нужно сделать ещё одно очень важное замечание. Кроме кулоновских сил притяжения противоположно заряженных ионов, существуют ещё и силы отталкивания, очень сильно возрастающие при сжатии решётки. И именно из-за того, что в решетке существуют как силы притяжения, так и силы отталкивания, кристалл устойчив. Равновесные расстояния между ионами определяются из условия минимальности полной энергии взаимодействия ионов. Другими словами, это означает равенство сил притяжения и отталкивания в кристаллах. Из соображений размерности мы выше получили только кулоновский вклад ионов в потенциальную энергию. Пока расстояние между ионами больше размеров атомов, мы можем считать, что по порядку величины кулоновская энергия ионов и полная энергия связи совпадают. На меньших расстояниях это, конечно, не так. Поэтому, когда мы считаем энергию связи ионного кристалла порядка кулоновской энергии, мы должны помнить, что это так, лишь пока существует ионный кристалл, атомы в котором не слишком близки друг к другу.

Полезно обратить внимание на то, что плотность $n \sim \frac{\rho}{m_{\text{я}}} \sim a^{-3}$, поэтому $E \sim \frac{e^2}{a} \cdot n \sim \frac{e^2}{a^4}$. Отсюда следует, что величина E ограниченная. Расстояние a между ио-

нами во всяком случае не может быть меньше боровского радиуса a_0 . Значение E ограничено сверху величиной e^2/a_0^4 , $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$, m_e – масса электрона. Параметр e^2/a_0^4 вовсе не содержит в себе информацию о том, упругий модуль какой решетки он ограничивает (он образован из универсальных постоянных). Естественно поэтому, что этот же параметр ограничивает в действительности сверху упругие модули и других кристаллических решеток.

Совсем просто оценить теперь и скорость звука s в кристаллической решетке. Учтём, что $s^2 \sim \frac{G}{\rho}$, $\rho \sim n m_{\text{я}}$, $G \sim n \frac{e^2}{a}$, т.е. $m_{\text{я}} s^2 \sim \frac{e^2}{a}$ или $s^2 \sim \frac{e^2}{m_{\text{п}} a A}$ [5]. Расстояние между атомами a можно для грубых оценок считать величиной, хотя и большей боровского радиуса, но не очень сильно отличающейся от него:

$$a \sim a_0 \sim \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$$

Тогда оценка для скорости звука будет:

$$s^2 \sim \frac{m_e}{m_{\text{п}}} \cdot \frac{e^4}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{A}$$

Разделим обе части этого соотношения на квадрат скорости света c^2 :

$$\frac{s^2}{c^2} \sim \left(\frac{m_e}{m_{\text{я}}}\right) \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \sim \frac{m_e}{m_{\text{п}}} \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \frac{1}{A}$$

Величина $\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right) \approx \frac{1}{137}$. Эта величина называется в физике постоянной тонкой структуры. А теперь вспомним, что $\left(\frac{e^2}{\hbar}\right)$ – величина порядка орбитальной скорости электронов в атоме v . Отсюда следует, что $s^2 \sim \frac{m_e}{m_{\text{я}}} v^2$. Скорость звука определяется, как мы видим, отношением массы электрона к массе ядра. Кулоновская же энергия $\frac{e^2}{a}$ оказывается порядка $m_{\text{я}} s^2$.

Обсудим еще, что было бы, если бы мы сумели «накачать» в 1 см^3 кристалла энергию намного большую, чем (e^2/a^4) . Что случилось бы тогда с кристаллической решеткой? Можно сказать, что она сломается, а кристалл превратится в жидкость. Давайте рассуждать так. Ограничение $E < \frac{e^2}{a_0^4}$ следует из того, что пока существует наша решетка, расстояние между ионами $a > a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$. Если же решетку сдавливать («накачивать» в кристалл энергию), то при $a \rightarrow a_0$, одновременно со сближением атомов (ионов) начнется и «обдиранье» их электронных оболочек. Это становится понятным, если вспомнить, что характерные атомные энергии как раз порядка $\frac{m_e e^4}{\hbar^2} = \frac{e^2}{a_0}$. Значит, сдавливая решетку все сильнее и сильнее, мы в конце концов «обдерем» все атомы, расстояния между ядрами будут совсем малыми, а все электроны обобществятся, то есть ни про какой электрон нельзя будет сказать, что он принадлежит какому-то атому. У нас появится теперь «электронная жидкость», в которой будут «растворены» атомные ядра. Если бы мы сжимали рассматри-

ваемый нами объем со всех сторон равномерно, то могло бы, в принципе, случиться и так, что решетку будут образовывать отдельные «голые» ядра, а между ними будут «гулять» электроны. Ионный кристалл, о котором мы говорили раньше, перестанет существовать. Вместе с тем потеряет смысл и понятие модуля Юнга для него. Взамен $G \sim E$ придется рассматривать кулоновскую энергию взаимодействия ядер (независимо от того, образуют ли они кристаллическую ядерную решетку или не образуют) и соответствующую энергию «электронной жидкости».

Теперь понятно, что достаточно сильное сжатие даже неметаллических кристаллов обязательно приводит к их металлизации. Характер взаимодействия ионов в простейшей ионной решетке по мере сжатия её должен изменяться. Так как сильное сжатие сопровождается дальнейшей ионизацией атомов, должны изменяться и силы взаимодействия между ионами [6], [7]. А «отодранные» от атомов электроны образуют теперь электронный газ, давление которого также противодействует сжатию. Неудивительно, что и силы притяжения сменяются силами отталкивания. Заметьте, что «голые» ядра заряжены положительно и должны отталкиваться, хотя исходные ионы были разноименными и притягивались друг к другу.

Полученная нами выше формула $E \sim e^2 m_{\text{я}}^{-4/3} \rho^{4/3}$ имеет и ещё одну забавную особенность – она устанавливает зависимость упругого модуля от безразмерного параметра, который может быть большим по сравнению с единицей. В самом деле, перепишем эту формулу в виде

$$E \sim e^2 A^{-4/3} m_{\text{р}}^{-4/3} \rho^{4/3}$$

Атомный вес (его называют также массовым числом) – A и есть большой безразмерный параметр:

$$A \sim \frac{m_{\text{я}}}{m_{\text{р}}} \gg 1.$$

Все это говорит о том, как важно выбирать разумные параметры в каждой задаче. Ясно ведь, что масса нуклона имеет отношение к кулоновской энергии кристаллической решетки лишь постольку, поскольку из нуклонов состоят ядра. «Работающим» же параметром в рассматриваемом примере является, конечно, масса ядра. При разумном выборе параметров безразмерные комбинации функционально связанных величин оказываются обычно числом порядка единицы.

Связаны ли массы планет с массой атомных ядер?

В этом разделе мы попытаемся порассуждать о характеристиках ионно-кристаллической планеты и связи модуля Юнга G и давления в центре планеты. Последнее легко

находится из соображений размерностей и имеет вид $\rho \sim \gamma \left(\frac{M}{R^2}\right)^2$. Здесь γ – гравитационная постоянная, M – масса, R – радиус гравитирующего шара (планеты) [8].

Все, что мы скажем ниже, безусловно, носит только качественный характер. Любые реальные планеты всё-таки гораздо сложнее, чем та модель, которую мы собираемся обсуждать. Но мы сумеем «ухватить» очень существенные закономерности, одну из которых даже оказывается возможно совсем просто «проверить» на примере нашей Солнечной системы. Мы уже научились выше «вычислять» модуль Юнга для ионной кристаллической решетки, построенной из почти одинаковых атомов. Теперь представим себе гипотетическую планету, построенную целиком из такого ионного кристалла.

Запишем опять соотношение для модуля Юнга:

$$G \sim E \sim e^2 m_{\text{я}}^{4/3} \rho^{4/3}$$

Прежде всего отсюда следует, что G зависит от плотности. Другими словами, в глубине планеты, сжатой гравитацией, величина G больше, чем у поверхности.

Последнее верно, разумеется, не только для ионных кристаллов. Для такой планеты, как Земля, плотность меняется от центра к поверхности не очень уж сильно (примерно в 3 раза), соответственно и модуль Юнга меняется не более, чем в несколько раз. Если бы Земля была ионным кристаллом, то из формулы для G мы нашли бы, что в центре модуль увеличился бы примерно в $3^{4/3} \sim 5$ раз.

«Истинное» давление в центре Земли ~ 4 Мбар.

Модуль Юнга вещества у поверхности Земли ~ 1 Мбар.

Мы можем задуматься: обязательно ли у Земли $G < 4$ Мбар в центре? Если это так, то кристаллическая решетка должна была бы «сломаться» где-то вблизи центра. И у планеты появилось бы жидкое ядро. Если же давление в центре не превосходит модуля G (вычисленного там же в центре), то планета может остаться кристаллической и до самого центра [9].

Существует и еще одно очень важное условие справедливости высказанных только что утверждений. Планета должна быть холодной, точнее температура в центре не должна быть очень близкой к температуре плавления. В противном случае жидкое ядро все равно будет – кристалл просто расплавится.

Все это верно и для нашей гипотетической планеты. Условия существования холодной планеты без жидкого ядра есть

$$G_0 \gtrsim \gamma \left(\frac{M}{R^2}\right)^2 ; T_{\text{центр}} < T_{\text{плавл}}$$

Здесь G_0 – модуль Юнга, характерный для кристалла в центре планеты,

$T_{\text{центр}}$ – температура вблизи центра,

$T_{\text{плавл}}$ – соответствующая температура плавления.

Будем считать, что температурное неравенство выполнено.

Неравенство $G_0 > \gamma \left(\frac{M}{R^2}\right)^2$ «работает» с той же точностью, с какой мы вычисляем входящие в него величины. Эта оценка, вообще говоря, довольно грубая, Как обычно, мы не будем выписывать никаких численных безразмерных множителей, имея ввиду ограничиться в основном качественной оценкой. Для нашей гипотетической планеты, состоящей из грандиозного ионного кристалла с массой атомов $\approx m_{\text{я}}$, условие отсутствия жидкого ядра можно записать так:

$$G_0 \sim e^2 m_{\text{я}}^{-4/3} \rho_0^{4/3} \geq \gamma \frac{M^2}{R^4}$$

Об уточнении неравенства мы скажем ниже.

Мы написали слева среднюю плотность $\rho_0 \sim \frac{M}{R^3}$, которую по порядку величины считаем равной плотности в центре. Неравенство можно переписать так:

$$m_{\text{я}} \lesssim e^{3/2} \gamma^{-3/4} M^{-1/2}$$

Учтем еще, что $m_{\text{я}} = Am_{\text{п}}$ (A – число нуклонов в атомном ядре, $m_{\text{п}}$ – масса нуклона) и получаем

$$A \lesssim \left(\frac{e^2}{\gamma m_{\text{п}} M}\right)^{3/4} \left(\frac{M}{m_{\text{п}}}\right)^{1/4}$$

Предположения о том, что планета целиком кристаллическая, а плотность её в центре порядка средней плотности, привели нас к выводу, что при заданной массе планеты M не из всяких атомов её можно построить.

Могло бы показаться, что неравенство $G_0 \gtrsim \gamma \frac{M^2}{R^4}$ писать было бы нельзя, потому что гравитационное давление могло бы превзойти G_0 и ионный кристалл разрушился бы. На самом деле это не так. В действительности мы должны вспомнить, что кроме модуля Юнга G_0 (можно, кстати, называть его и модулем всестороннего сжатия) существует понятие предела прочности кристалла $G_{\text{пр}}$. Для наших целей можно было бы называть его модулем сдвига или разрушения.

Используя аналогию с теорией упругости нужно считать $G_{\text{пр}}$ по крайней мере на порядок (или два) меньше G_0 . Поэтому правильно было бы писать обсуждавшееся выше неравенство в таком виде

$$G_0 > G_{\text{пр}} \sim \gamma \frac{M^2}{R^4} \text{ и наши предыдущие рассуждения и выводы из них справедливы.}$$

Понятно, что если все же окажется $\gamma \frac{M^2}{R^4}$ больше, чем G_0 , то полностью ионного кристалла уже не будет, у кристаллической планеты будет жидкое ядро.

Параметр A оказался ограниченным сверху. Но это ещё не всё.

Можно утверждать, что число A ограничено и снизу. Чтобы понять это, вспомним, что модуль G не могут быть больше характерной величины $(\frac{e^2}{a_0^4})$, e – заряд электрона, $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$ – боровский радиус, m_e – масса электрона.

Значит, пока существует ионный кристалл, существует и неравенство

$$G_0 \sim e^2 m_{\text{я}}^{-4/3} \rho_0^{4/3} < \frac{e^2}{a_0^4}$$

Снова подставляя $\rho_0 \sim \frac{M}{R^3}$, получаем отсюда:

$$A > \left(\frac{M}{m_p}\right) \left(\frac{a_0}{R}\right)^3$$

Подведем итог: если планета целиком построена из ионного кристалла с $A_1 \approx A_2 \approx A$, то

$$\frac{M}{m_p} \left(\frac{a_0}{R}\right)^3 < A < \left(\frac{e^2}{\gamma m_p M}\right)^{3/4} \left(\frac{M}{m_p}\right)^{1/4} \quad [9]$$

Подобного типа неравенства должны существовать, очевидно, и в тех случаях, когда кристалл сложнее, чем рассматриваемый нами.

Теперь мы просто должны попробовать получить и количественную оценку A . Пусть параметры M и R нашей гипотетической планеты будут такие же как у Земли:

$$M \approx 6 \cdot 10^{27} \text{ г}, R \approx 6 \cdot 10^8 \text{ см.}$$

Вычисления приводят нас к оценке

$$(2 \div 3) < A < (\sim 20). \text{ Не так уж плохо!}$$

Было бы конечно неправильным делать вывод о том, что ионно-кристаллическую планету нельзя вообще строить из атомов с A большим, чем

$$A_{\text{макс}} \sim \left(\frac{e^2}{\gamma m_p M}\right)^{3/4} \left(\frac{M}{m_p}\right)^{1/4}$$

Теперь нам ясно, что такие планеты из атомов с $A > A_{\text{макс}}$ существовать могут, но они обязаны иметь жидкое ядро.

Ограничения на массы атомов, из которых могут быть построены полностью кристаллические планеты, определяются, как мы убедились, параметрами самих планет.

В частности, для ионно-кристаллических планет без жидкого ядра $A_{\text{макс}}$ пропорционально $M^{-1/2}$.

Любопытно в связи с этим сравнить разные планеты нашей Солнечной системы. Они, конечно, не являются ионно-кристаллическими планетами. И мы не будем сейчас обсуждать вопрос о возможности или невозможности существования в реальных планетах жидких ядер. Но мы отметим, что в планетах существуют кристаллические системы.

Планеты земной группы (Меркурий, Венера, Марс) не превосходят по массе Землю M_3 , а характерным элементом для них является железо ($A \sim 60$). Планеты Уран и Нептун имеют массы соответственно в 15 и 17 раз больше Земли, а состоят они из льда, твердых метана (CH_4) и аммиака (NH_3) в металлической фазе. Наконец, планеты-гиганты Юпитер (масса $317 M_3$) и Сатурн (масса $95 M_3$) состоят в основном из металлических водорода и гелия. Совершенно отчетливо видна тенденция: чем больше масса планеты, тем меньше средние атомные веса элементов, из которых она состоит.

Сравните это с отмеченной выше корреляцией $A_{\text{макс}}$ и масс для ионных планет. Более того, есть основания считать, что подобного типа закономерности могут быть и для популяций экзопланет (так называются планетные системы вблизи других звезд). Открытие их – одно из важных достижений науки XX века.

О металлических планетах и белых карликах мы ещё поговорим позже.

А пока вернемся ещё раз к ионно-кристаллической планете. Модуль G в нашей модели ограничен с обеих сторон. Естественно, максимально допустимое значение $\max G \sim \frac{e^2}{a_0^4}$ должно быть (в такой модели!) больше гравитационного давления $\sim \gamma \frac{M^2}{R^4}$.

Напишем неравенство

$$\frac{e^2}{a_0^4} > \gamma \frac{M^2}{R^4}$$

Оно выражает соотношение между максимально возможной плотностью кулоновской энергии в ионной решетке и характерной плотностью гравитационной энергии, при которой может существовать описываемая нами ионная планета. Ясно, что полученный нами критерий носит достаточно общий характер и не зависит от конкретного типа кристаллической решетки.

Перепишем этот критерий в виде

$$\left(\frac{R}{a_0} \right)^4 > \frac{\gamma M^2}{e^2} [9]$$

Отсюда видно, каким должен был бы быть радиус нашей ионно-кристаллической планеты с массой M , не имеющей жидкого ядра.

Такое рассуждение будет, однако, несправедливым для планеты, если в ней появится жидкое ядро и произойдет ионизация. В таком случае появившийся электронный газ создает своё давление, которое может быть больше взаимодействия ионов. Тогда придется

сравнивать давление вырожденных электронов с гравитационным давлением (плотностью гравитационной энергии).

Неравенства для возможных скоростей звука в центре ионно-кристаллической планеты.

Будем считать, как и выше, что жидкого ядра у планеты нет.

Нам остается записать очевидные теперь соотношения:

$$s^2 \sim \frac{G_0}{\rho_0} < \frac{e^2}{a_0^4 \rho_0} \sim \frac{e^2}{a_0} \cdot \frac{1}{\rho_0 a_0^3}; \quad [5]$$

$$\rho_0 \sim \frac{M}{R^3}; \quad s^2 < \frac{e^2}{a_0} \frac{1}{M} \left(\frac{R}{a_0}\right)^3 \quad [10]$$

Чтобы сделать эту формулу безразмерной, поделим обе части на квадрат скорости света c^2 и подставим $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$

$$\frac{s^2}{c^2} < \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \left(\frac{m_e}{M}\right) \left(\frac{R}{a_0}\right)^3$$

Ограничение снизу получается также просто:

$$s^2 \sim \frac{G_0}{\rho_0} > \frac{1}{\rho_0} \gamma \frac{M^2}{R^4}, \quad \text{т.е. } s^2 > \gamma \frac{M}{R}$$

Снова поделим на c^2 , тогда $\frac{s^2}{c^2} > \frac{\gamma M}{R_g c^2} \left(\frac{R_g}{R}\right)$,

R_g – гравитационный радиус.

Так как $R_g = 2\gamma M c^{-2}$, мы видим, что нижний предел скорости звука пропорционален величине $\left(\frac{1}{2} \frac{R_g}{R}\right)^{1/2} \cdot c$.

Обратите внимание, что скорость звука, которую мы получали раньше $s^2 > \gamma \frac{M}{R}$ оказывается для нашей модели минимальной скоростью звука вблизи центра планеты.

Выпишем окончательную систему неравенств:

$$\frac{R_g}{2R} = \gamma \frac{M}{R c^2} < \frac{s^2}{c^2} < \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \left(\frac{m_e}{M}\right) \left(\frac{R}{a_0}\right)^3$$

Численные оценки для планет, имеющих параметры, похожие на параметры реально существующих планет, читатели легко проделают сами.

Очень интересно, что сами формулы указывают нам границы справедливости наших утверждений и предположений.

Замечание о текучести в глубоких шахтах.

Замечания о разрушении кристаллической решетки и высоте гор.

Мы опять ограничимся рассмотрением ионной кристаллической решетки. Для такой решетки (впрочем, и для металлов тоже) температура плавления $T_{\text{плавл}}$ определяется приближенным равенством:

$kT_{\text{плавл}} \approx 0,01 \frac{e^2}{a}$, $k = 1,38 \cdot 10^{-16}$ эрг/град – постоянная Больцмана, а $\frac{e^2}{a}$ кулоновская энергия в кристаллической решетке.

Можно было бы привести некоторые «серьезные» аргументы в пользу написанной формулы, но мы будем рассматривать ее как экспериментальное соотношение. В действительности множитель 0,01 есть, грубо говоря, отношение модуля сдвига к модулю сжатия в кристаллической решетке. Эта же величина характеризует изменение удельного объема при плавлении – для большого числа веществ $\frac{V_{\text{ж}} - V_{\text{к}}}{V_{\text{ж}}} \sim 10^{-2}$, $V_{\text{ж}}$, $V_{\text{к}}$ – здесь удельные объемы жидкой и кристаллической фаз, $V_{\text{ж}} \sim V_{\text{к}} \sim a^3$. Физический смысл формулы довольно ясен. Величина $\sim kT$ всегда характеризует энергию «тепловых» колебаний атомов. Если эти колебания становятся достаточно «сильными» (другими словами, если их амплитуда становится достаточно большой) – решетка разрушается. Критерием «силы» колебаний как раз и является написанное соотношение. Заметим теперь, что, рассуждая о разрушении кристаллических решеток во всех предыдущих примерах, мы всегда говорили о модуле Юнга $G \sim \frac{e^2}{a^4}$. Именно этот модуль характеризует «прочность» решетки при всесторонней деформации. В то же время читатели наверняка знают, что деформацией сдвига решетку разрушить обычно легче, чем деформацией сжатия или растяжения. Довольно понятно, что предельное напряжение сдвига (мы называем так максимальное напряжение, при котором решетка еще не разрушается) по порядку величины не должно быть больше $\frac{kT_{\text{плавл}}}{a^3}$. Если же соответствующее сдвиговое напряжение (напомним размерность напряжения $\frac{\text{дин}}{\text{см}^2} = \frac{\text{эрг}}{\text{см}^3}$) достигнет величины $\sim \left(\frac{kT_{\text{плавл}}}{a^3}\right)$, решетка начнет плавиться, при этом температура ее может быть и много меньшей, чем «обычная» температура плавления. В этом нет ничего удивительного, ведь величина $\frac{kT_{\text{плавл}}}{a^3} \approx 0,01 \frac{e^2}{a^4}$ есть просто характерная энергия, при которой атомы смещаются так сильно из положения равновесия, что могут уже в них и не вернуться. Все то, что мы говорили раньше, остается, конечно, и теперь справедливым. Не нужно, например, «подправлять» оценки в предыдущем разделе – там речь шла о всестороннем сжатии и «работал» именно параметр G .

Подумаем теперь, в каких случаях становятся существенными сдвиговые деформации. Мы знаем, например, что при деформировании стержня в продольном направлении меняются и его поперечные размеры. Пока продольные деформации стержня малы, малы и изменения его поперечного сечения, а стало быть, и расстояния между атомами

стержня во всех направлениях меняются незначительно. Поэтому при малых продольных деформациях можно считать малыми и поперечные (сдвиговые) напряжения. Если продольное (растягивающее или сжимающее) напряжение увеличить, то увеличится не только продольная, но и поперечная деформация. Может случиться так, что при некотором продольном напряжении, меньшем чем $G \sim \left(\frac{e^2}{a^4}\right)$, поперечное (сдвиговое) напряжение уже достигнет величины $\sim \frac{kT_{\text{плавл}}}{a^3} \sim 0,01 \frac{e^2}{a^4}$. В этом случае стержень должен «потечь» в поперечном направлении. Наше рассуждение уточняет таким образом приведенные раньше оценки максимально достижимых в лабораторных условиях давлений. Текучесть материалов является одним из самых серьезных препятствий при получении высоких давлений при односторонней (или, как говорят, одноосной) деформации.

Обсудим теперь вопрос о максимально возможной высоте гор на поверхности нашей гипотетической ионно-кристаллической планеты [11]. Сжимающее напряжение в горе равно, очевидно, ρgh , ρ – плотность вещества, $g = \gamma \frac{M}{R^2}$, а h – высота горы. Мы предполагаем, что $h \ll R$ – радиуса планеты, тогда g можно считать не меняющимся на высотах $\lesssim h$. Предположим еще, что плотность вещества горы порядка средней плотности вещества планеты. Для того, чтобы гора не разрушалась, все напряжения должны быть меньше $\sim 0,01G$. Предельный случай достигается, когда сжимающее напряжение становится порядка $0,01 G$. Ясно, что если бы при $\rho gh \sim 0,01 G$ вещество у подножия горы стало «жидким», сдвиговые напряжения тоже стали бы $\sim 0,01 G$ (сравните это с законом Паскаля для жидкостей – давление во всех направлениях должно быть одинаковым в данной точке внутри жидкости).

Итак, оценка максимальной высоты горы $h_{\text{макс}}$ следует из равенства:

$$\rho gh_{\text{макс}} \sim 0,01G \sim 0,01 \frac{e^2}{a^4} \sim 0,01 e^2 m_{\text{я}}^{-4/3} \rho_0^{4/3}$$

Подставляя теперь $\rho \sim \frac{M}{R^3}$ и $g = \gamma \frac{M}{R^2}$, мы получим формулу

$$\frac{h_{\text{макс}}}{R} \sim \frac{0,01 e^2}{\gamma m_{\text{я}}^{4/3} M^{2/3}}$$

Можно записать оценку для $h_{\text{макс}}$ и по-другому. Учтем, что $\left(\frac{kT_{\text{плавл}}}{a^3}\right) \sim 0,01G$, тогда $\rho gh \sim \frac{kT_{\text{плавл}}}{a^3}$.

Отсюда сразу видно, что $h_{\text{макс}} \sim \frac{kT_{\text{плавл}}}{m_{\text{я}}g}$ (так как $a^{-3} = n$, а $\rho = nm_{\text{я}}$).

Физический смысл этой последней формулы совершенно очевиден. Она показывает, что разрушение гор начинается как раз тогда, когда потенциальная энергия атома на вершине горы $m_{\text{я}}gh_{\text{макс}}$ становится порядка теплоты плавления $kT_{\text{плавл}}$ (в расчете на один атом). Если для оценки взять $T_{\text{плавл}} \sim 10^3 \text{ }^\circ\text{K}$ и $m_{\text{я}} \sim 50m_{\text{p}} \sim 10^{-22} \text{ г}$, мы получим

$h_{\text{макс}} \sim 16$ км. Заметьте, что эту оценку мы получаем, вовсе «не зная» массы и радиуса планеты!

Подводя итог приведенным выше рассуждениям, мы приходим теперь к выводу о том, что факт отличия деформаций сжатия (или растяжения) от деформаций сдвиговых означает и существование различных характерных модулей. Модуль сжатия отличается от модуля сдвига.

В соответствии с этим для твердых тел должно быть уточнено и понятие о звуковых волнах. Существуют, как мы знаем, волны продольные и поперечные. Частицы в продольной волне (волне сжатий и разрежений) колеблются в направлении распространения волны, в поперечной волне – направление колебаний частиц перпендикулярно к направлению распространения волны. Скорость продольного звука обычно несколько больше скорости поперечного. Но эти заключения справедливы только для твердых тел. В жидкостях и газах поперечные волны не могут распространяться. Это обстоятельство играет важную роль в сейсмологии. Изучая закономерности распространения продольных и поперечных сейсмических волн в Земле, геофизики строят модели строения тех или иных слоев внутри Земли. Заметим еще, что предположение о существовании в Земле жидкого ядра, по существу, основано именно на том, что поперечные волны через ядро не проходят.

Литература

1. Брук Ю.М., Стасенко А.Л. Метод размерностей и качественные оценки физических величин // М. Nanostructure. Математическая физика и моделирование, 2017, том 16 № 1, с. 5-40.
2. Френкель Я.И. Кинетическая теория жидкостей // М. Наука, 1975, 592 стр.
3. Петров Ю.В. Основы физики конденсированного состояния // М. Интеллект, 2013, 216 стр.
4. Борн М., Хуань Кунь Динамическая теория кристаллических решёток // М., Иностранная литература, 1958, 488 стр.
5. Стрэтт Дж. В. (Лорд Релей) Теории звука // Т1, М. ГТТИ, 1955, 503 стр.
6. Иванов Б.Н. Законы физики // М. Едиториал УРСС, 2016, 368 стр.
7. Джалмухамбетов А.У. Фисенко М.А. Задачи, оценки и модели физических систем // М. Кнорус, 2016, 110 стр.
8. Засов А.В. Постнов К.А. Общая астрофизика // М. Век-2, 2015, 576 стр.
9. Дибай Э.А. Каплан С.А. Размерности и подобие астрофизических величин // М. Наука, 1976, 400 стр.
10. Брук Ю.М. Стасенко А.Л. Как физики делают оценки – метод размерностей и порядок физических величин // М., Знание 1975, в сб. «О современной физике», с. 54-131.
11. Вайскопф В. Современная физика в элементарном изложении // М., Наука, Успехи физических наук, 1971, том 103, вып 1, с. 155-179.

ION-CRYSTAL STRUCTURES AND PLANETS. AN EXPERIENCE OF QUALITATIVE MODELING

Yu.M. Bruk¹, A.L. Stasenko^{2,3}

¹P.N.Lebedev Physical Institute Russian Academy of Science

²Central Aerohydrodynamic Institute

³Moscow Institute of Physics and Technology (State University)

yubruk@gmail.com , stasenko@serpantin.ru

Received 05.12.2017

A possibility of the planetary systems modeling is discussed on the basis of crystalline structures built with the almost identical atoms. The aim of such approach is to describe qualitative and quantitative characteristics of gravitating balls and to reveal their possible correlation with real planets. In particular, it is explained why the real planets (which have the larger masses) are built with relatively lights elements, what is the maximal height of mountains on those planets and also the limiting depth of drilling the planet crust (mantle).

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОТРАНСПОРТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК НАНОКОНТАКТА «AU – 1,8-nonadiyne – AU»

Д.М. Сергеев

*Актюбинский региональный государственный университет им. К.Жубанова, Актюбе
Военный институт Сил воздушной обороны им. Т.Бегельдинова, Актюбе*

serdau@rambler.ru, serdau@mail.ru

Поступила 12.07.2018

В работе представлены результаты компьютерного моделирования электротранспортных характеристик (спектр пропускания, плотность состояний, вольтамперная характеристика, дифференциальная проводимость) симметричного и асимметричного наноконтактов «Au – 1,8-nonadiyne – Au» в рамках теории функционала электронной плотности в приближении локальной плотности. Моделирование транспортных характеристик реализовано в программе Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab. Выявлено, что симметричный нанокontakt обладает слабым вентиляльным свойством, пропуская ток преимущественно в одну сторону, а в асимметричном контакте это свойство ухудшается. Показано возникновение существенного отрицательного дифференциального сопротивления при положительном знаке приложенного напряжения. Полученные результаты модельного исследования наноконтакта могут быть полезными для расчетов новых перспективных электронных приборов наноэлектроники.

УДК 539.23; 539.216.1

DOI: 10.31145/2224-8412-2017-17-2-64-73

Введение

Известно, что одним из главных задач электроники является миниатюризация электронных компонентов. Современная полупроводниковая электроника на основе кремния и арсенида галлия уже подошло к своему физическому пределу, обусловленному фундаментальными характеристиками данных материалов. Поэтому в настоящее время для создания новых типов электронных приборов микро- и наноэлектроники все более

актуальным становится освоение новых материалов с контролируемыми электрофизическими свойствами. В этой связи, развиваются новые направления нанoeлектроники на базе новых экзотических материалов, отличающихся принципиально новыми электрофизическими свойствами от традиционных полупроводниковых. К таким направлениям нанoeлектроники можно отнести сверхпроводниковую, органическую, молекулярную, одноэлектронику, где рабочими объектами являются наноразмерные структуры. Низкая размерность используемых элементов требует учета квантовой природы атомов и электронов. В последнее время интенсивно исследуются электронные свойства наноконтактов [1-3], обусловленные квантово-размерными эффектами. Применение квантовых свойств квазичастиц может привести к существенному улучшению основных параметров электронных приборов.

Недавно в работе [4] показано, что одна молекула 1,8-nonadiyne на кремниевой подложке работает как диод, т.е. обладает вентильными свойствами. Известно, что вентильные свойства диода, выражаются тем сильнее, чем меньше обратный ток при заданном обратном напряжении, и чем меньше прямое напряжение при заданном прямом токе. Проверка работы диода на 1,8-nonadiyne осуществлялась с применением метода «мерцающее тестирование» («blinking test»). Поверхность кремния с закрепленными на ней молекулами 1,8-nonadiyne исследовали с помощью сканирующего туннельного микроскопа. Периодически изменяя полярность напряжения, авторы работы подтвердили одностороннюю проводимость молекулы 1,8-nonadiyne [4]. Однако, до практического применения молекулы 1,8-nonadiyne в качестве диода в электронных схемах требуется дальнейшие исследования их электрофизических свойств для увеличения термостабильности, стабильности по току и т.п.

В данной работе предпринята попытка с помощью компьютерного моделирования с применением программы Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab определить основные транспортные характеристики диодной структуры из молекулы 1,8-nonadiyne в виде наноконтакта «золото – 1,8-nonadiyne – золото» («Au – 1,8-nonadiyne – Au»).

1. Описание объекта

Структура 1,8-nonadiyne, состоящая из 9 атомов углерода и 12 атомов водорода (C₉H₁₂) и относящаяся к классу терминальных диенов – молекул, содержащих две тройные связи углерод-углерод, которые расположены на противоположных концах углеродной цепи, приведена на рис. 1 а, б. Для идентификации структуры 1,8-nonadiyne определен ИК-спектр моделируемого объекта (рис. 1 в), и сопоставлены с результатами [5] (рис. 1 г).

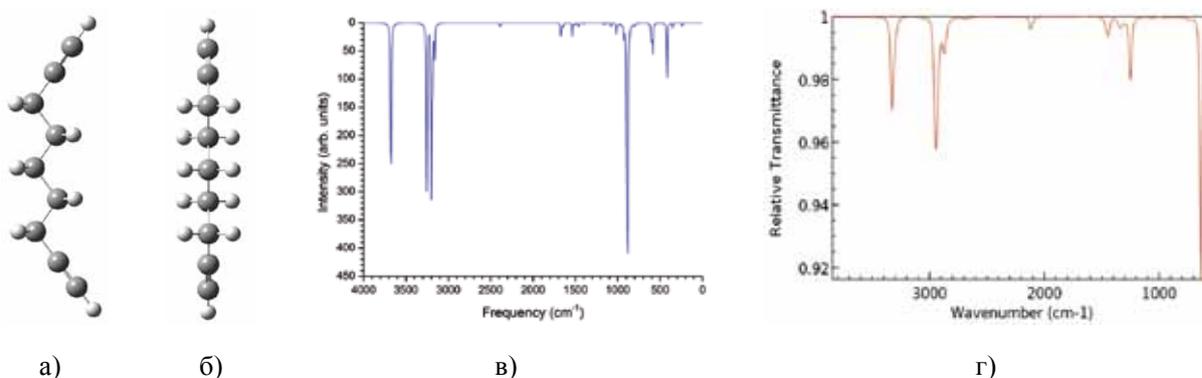


Рис. 1. Структура 1,8-nonadiyne (а, б) и ее ИК-спектр (моделирование (в), результат работы [5] (г))

Геометрия исследуемого наноконтакта «золото – 1,8-nonadiyne – золото» приведена на рис. 2 а-в. Наноконтакт «Au – 1,8-nonadiyne – Au» имеет трех областей с общей длиной $\sim 31,4$ Å: центральной области, левой и правой областей электродов. Длина центральной области составляет $\sim 31,4$ Å и в ней расположено «ядро» наноустройства из молекулы 1,8-nonadiyne, где происходит рассеяния квазичастиц. Размер молекулы 1,8-nonadiyne составляет $\sim 13,1$ Å. Электроды получены путем расширения центральной области по оси С на $\sim 4,078$ Å.

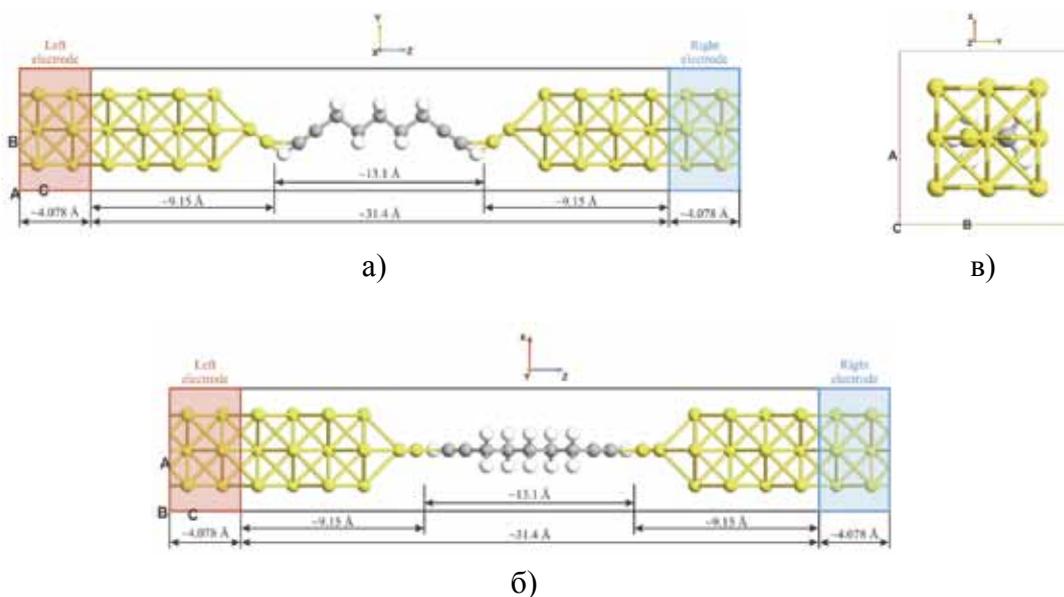


Рис. 2. Геометрия симметричного наноконтакта «Au – 1,8-nonadiyne – Au»: а) Z-Y plane; б) Z-X plane; в) X-Y plane

На рис. 3 а, б представлена форма асимметричного наноконтакта в виде смещения молекулы 1,8-nonadiyne из центральной части в правую сторону с уменьшением атомов золота вблизи правого электрода и с увеличением возле левого электрода.

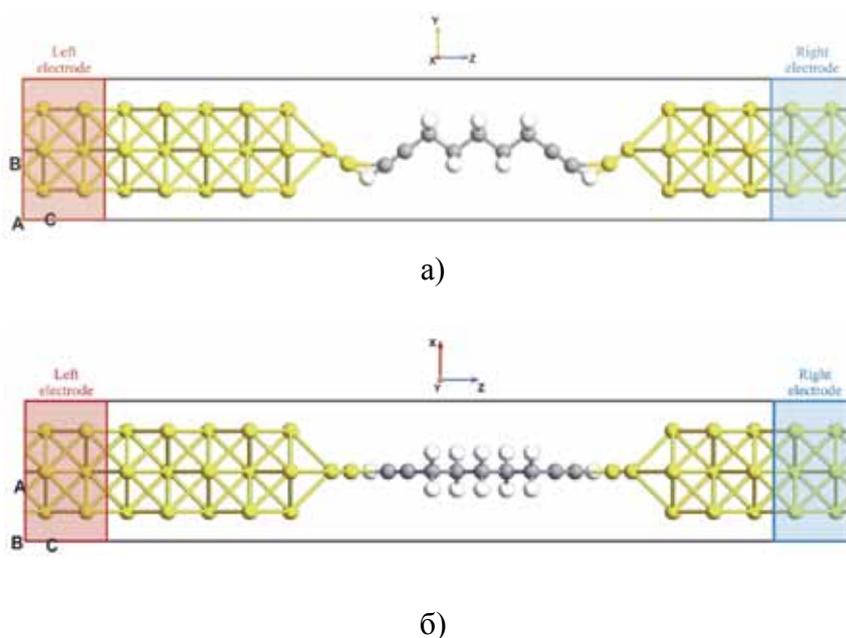


Рис. 3. Геометрия асимметричного наноконтакта «Au – 1,8-nonadiyne – Au»: а) Z-Y plane; б) Z-X plane

2. Основные уравнения

Компьютерное моделирование транспортных характеристик наноконтакта «Au – 1,8-nonadiyne – Au» производилось в рамках теории функционала электронной плотности (DFT – Density Functional Theory) с применением метода неравновесных гриновских функций (NEGF – Non-Equilibrium Green's Functions) в приближении локальной плотности (LDA – local-density approximation) [6,7].

Для расчета характеристик рассматриваемых наноконтактов составляется матрица плотности состояний левого и правого электродов:

$$D = D^L + D^R, \quad (1)$$

где D^L, D^R – матрицы плотности левого и правого электродов, соответственно, причем:

$$D^L = \int \rho^L(\varepsilon) f\left(\frac{\varepsilon - \mu_L}{k_B T_L}\right) d\varepsilon, \quad (2)$$

где ε – энергия, $\rho^L(\varepsilon)$ – спектральная матрица, $f(\varepsilon)$ – фермиевская функция распределения квазичастиц по энергиям, k_B – постоянная Больцмана, μ_L – электрохимический потенциал, T_L – текущая температура левого электрода. Матрица плотности для правого электрода D^R находится аналогичным выражением. Спектральная матрица определяется с помощью гриновской функции:

$$\rho^L(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi} G(\varepsilon) \Gamma^L(\varepsilon) G^\dagger(\varepsilon), \quad (3)$$

где $\Gamma^L(\varepsilon)$ – матрица уширения (функция уширения), $G(\varepsilon), G^\dagger(\varepsilon)$ – запаздывающая и опережающая функции Грина. Матрица уширения левого электрода описывается следующим выражением:

$$\Gamma^L(\varepsilon) = \frac{1}{i} \left(\sum^L - (\sum^L)^\dagger \right), \quad (4)$$

где i – мнимая единица, \sum^L – собственная энергия левого электрода. Аналогичное уравнение существует для матрицы плотности правого электрода. Запаздывающая функция Грина представлена в виде

$$G(\varepsilon) = \left[(\varepsilon + i\delta_+) S - H - \sum^L(\varepsilon) - \sum^R(\varepsilon) \right]^{-1}, \quad (5)$$

где δ_+ – бесконечно малое положительное число, S – матрица интегралов перекрытия, H – гамильтонова матрица.

Для расчета вольтамперной характеристики (ВАХ) и дифференциальной проводимости сначала в рамках DFT определяется функция пропускания наноцепочек. По амплитуде пропускания t_k определяется доля состояния рассеяния k , распространяющегося через структуру, тогда коэффициент пропускания при энергии ε определяется суммированием амплитуды пропускания t_k из всех состояний при этой энергии:

$$T(\varepsilon) = \sum_k t_k^\dagger t_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k), \quad (6)$$

где ε – энергия, t_k – амплитуда пропускания, $\delta(\varepsilon)$ – дельта функция. Применяя формулы (4)-(6) спектр пропускания можно вычислить на основе выражения:

$$T(\varepsilon) = \text{tr} [\Gamma^L G \Gamma^R G^\dagger] = \text{tr} [\Gamma^R G \Gamma^L G^\dagger]. \quad (7)$$

ВАХ наноструктуры рассчитывается на основе известного уравнения Ландауэра, указывающего фундаментальную связь электрического тока со спектром пропускания:

$$I(V_L, V_R, T_L, T_R) = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} T(\varepsilon) \left[f\left(\frac{\varepsilon - \mu_R}{k_B T_R}\right) - f\left(\frac{\varepsilon - \mu_L}{k_B T_L}\right) \right] d\varepsilon, \quad (8)$$

где e – заряд электрона, h – постоянная Планка, T_R, T_L – текущие температуры и μ_R, μ_L – химические потенциалы правого и левого электрода.

Дифференциальная проводимость наноструктуры определяется с помощью выражения:

$$\sigma(V_{bias}, T_L, T_R) = \frac{I(V_{bias}^1, T_L, T_R) - I(V_{bias}^2, T_L, T_R)}{V_{bias}^1 - V_{bias}^2}. \quad (9)$$

Для определения плотности состояния наноперемы сначала вычислим ее локальную плотность состояний (local density of states (LDOS)):

$$D(\varepsilon, r) = \sum_{ij} \rho_{ij}(\varepsilon) \phi_i(r) \phi_j(r), \quad (10)$$

где $\rho(\varepsilon) = \rho^L(\varepsilon) + \rho^R(\varepsilon)$, $\phi(r)$ – базисные орбитали. Плотность состояний наноперемы получается путем интегрирования LDOS по всему пространству:

$$D(\varepsilon) = \int dr D(\varepsilon, r) = \sum_{ij} \rho_{ij}(\varepsilon) S_{ij}, \quad (11)$$

где $S_{ij} = \int \phi_i(r) \phi_j(r) dr$ – матрица перекрытия (the overlap matrix).

3. Результаты и обсуждение

На рис. 4 представлены результаты моделирования вольтамперных характеристик, дифференциальной проводимости и плотности состояний симметричного наноконтакта «Au – 1,8-nanopyne – Au» в отсутствие приложенного напряжения при температурах 4К, 100К и 300К. Как видно, при температурах 4К и 100К ток, протекающий через наноперему, в интервале напряжений $0 \div 0,25$ В резко увеличивается до величины $\sim 0,8$ μA и $\sim 0,85$ μA , соответственно. В интервале напряжений от 0,25 В до 0,55 В величина тока падает от $\sim 0,8$ μA до $\sim 0,6$ μA , формируя область отрицательного дифференциального сопротивления. Далее наблюдается при 4К повышение тока до ~ 1 μA при напряжении 1,2 В, а при 100К – до 1,2 μA при напряжении 1,6 В.

С увеличением температуры до 300К форма ВАХ существенно меняется: от 0 до 0,25 В наблюдается резкое возрастание тока до $\sim 0,28$ μA , далее в интервале напряжений $0,25 \div 1,3$ В увеличение тока происходит по экспоненциальному закону, и достигнув значения $\sim 1,7$ μA , ток начинает убывать (рис. 4 а).

Особенности ВАХ наноструктуры отчетливо проявляются и в дифференциальной проводимости (рис. 4 б). При температуре 4К и 100К максимальные значения дифференциальной проводимости наноперемы совпадают и составляют ~ 7 μS при околонулевом значении напряжения смещения, а при 300К – ~ 3 μS при напряжении 0,95 В.

Эволюция плотности состояния DOS наноперемы с увеличением температуры приведена на рис. 4 в-д. Расчет DOS производился на основе уравнений (10), (11). Как видно, DOS растет с увеличением температуры: при 4К максимумы ~ 65 eV^{-1} появля-

ются при энергии 4,6 eV и -4,4 eV, при 10K максимумы 80 eV^{-1} наблюдаются при -2,7 eV и -3,9 eV, при 300K DOS значительно увеличивается, максимум 585 eV^{-1} наблюдается при -1,9 eV.

На рисунке 5 а, б представлены результаты вычисления ВАХ и спектра пропускания симметричного наноконтакта «Au – 1,8-nonadiyne – Au» при приложении напряжения 1 В. Из эволюции спектра пропускания с увеличением напряжения смещения от -3В до 3В видно, что в интервалах отрицательных энергий $\sim -6 \div -3,2 \text{ eV}$ и положительных энергий $\sim 4 \div 6 \text{ eV}$ на спектре проявляются отчетливые максимумы и минимумы, напоминающие спектр резонансных туннельных структур (см. например [8]). Это объясняется низкой размерностью центральной области наноконтакта. В интервале энергии $-3,2 \div 4 \text{ eV}$ спектр пропускания остается постоянной, его особенности проявляются лишь при нулевой энергии и напряжении -3В, а также при энергии $\sim -0,5 \text{ eV}$ и напряжении 2,1 В.

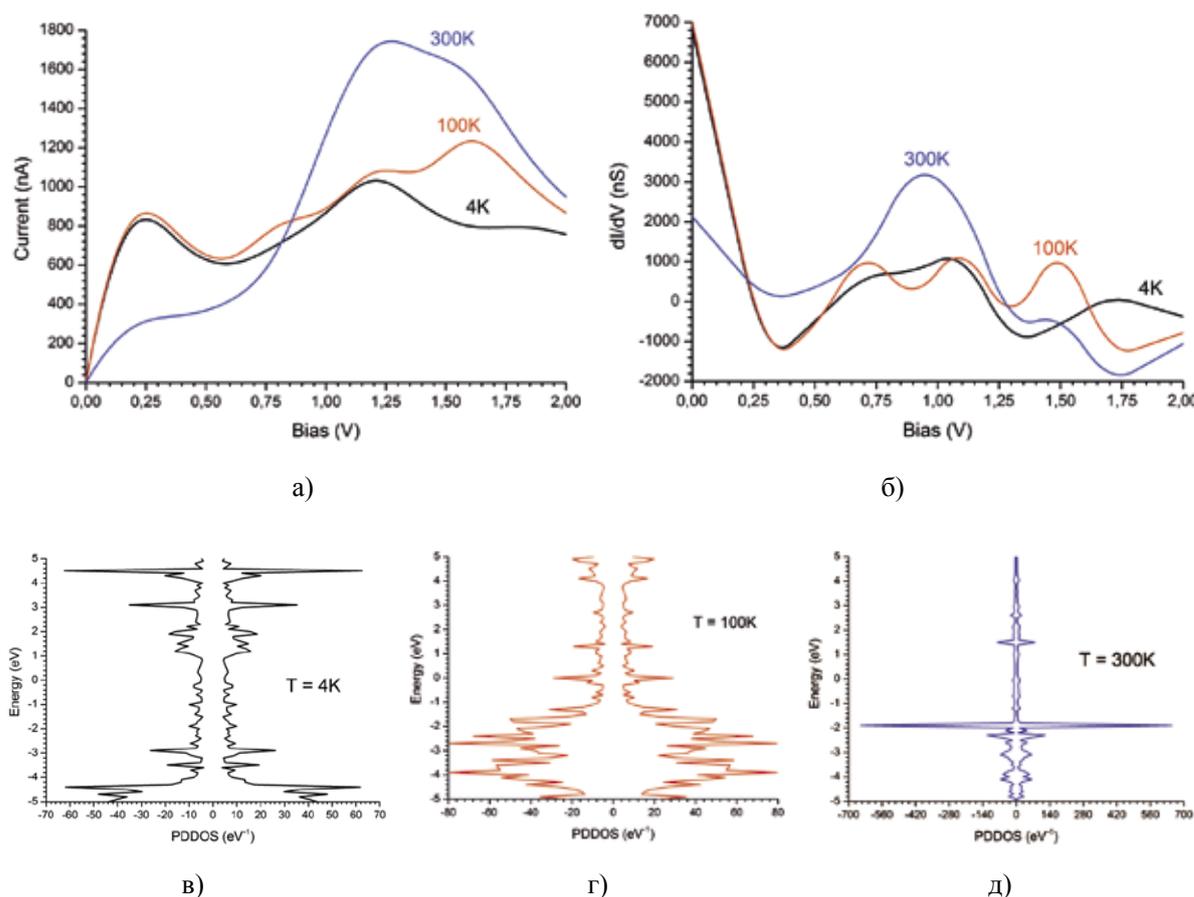


Рис. 4. Транспортные характеристики наноконтакта «Au – 1,8-nonadiyne – Au» в отсутствии приложенного напряжения: а) ВАХ; б) дифференциальная проводимость; в), д), е) DDOS при температуре 4K, 100K и 300K, соответственно

Рассматриваемый наноконтакт обладает слабым вентиляющим свойством, пропускающая ток преимущественно в одну сторону. При прямом включении величина тока, протекающего через наноконтакт, достигает до 2,7 мкА (при напряжении 2,1 В), а при обратном включении максимальное значение тока достигает до -1 мкА (при напряжении -2 В и -3 В). На ВАХ наноструктуры в интервалах напряжении $1,2 \div 1,6 \text{ В}$ и $2,1 \div 2,5 \text{ В}$ наблюдается падение тока от $\sim 0,9 \text{ мкА}$ до $0,5 \text{ мкА}$ и от $2,7 \text{ мкА}$ до $0,4 \text{ мкА}$,

соответственно, формируя при этом участки отрицательного дифференциального сопротивления.

Минимальное значение дифференциальной проводимости симметричного наноконтакта $-8,5$ мкСм проявляется при напряжении $2,3$ В, а локальные минимумы наблюдаются при напряжениях $-2,3$ В, $-1,3$ В, $-0,7$ В, $0,7$ В, $1,5$ В. Максимальное значение дифференциальной проводимости 8 мкСм возникает при $1,9$ В.

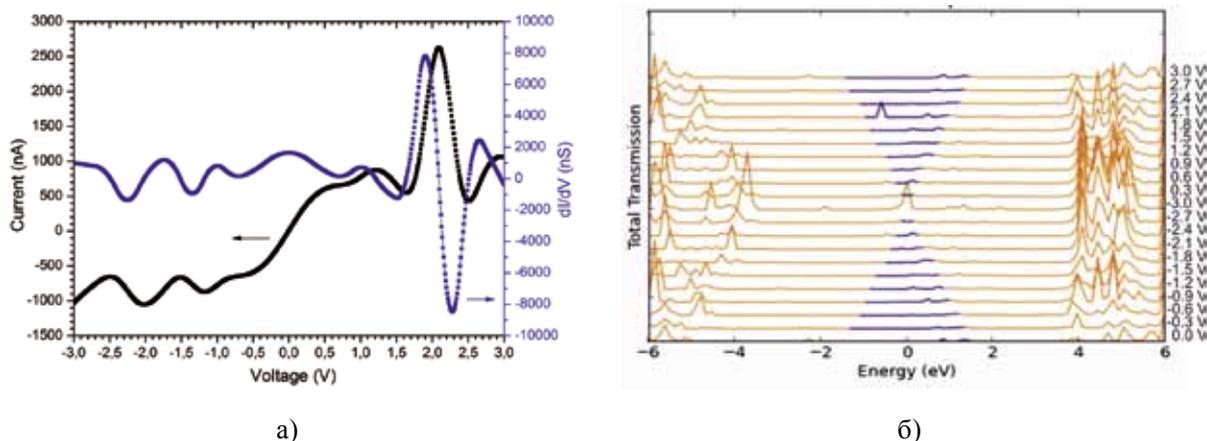


Рис. 5. Транспортные характеристики симметричного наноконтакта «Au – 1,8-nonadiyne – Au» при приложении напряжения 1 В:

а) ВАХ и дифференциальная проводимость; б) спектр пропускания

На рисунке 6 а, б представлены результаты вычисления ВАХ и спектра пропускания асимметричного наноконтакта «Au – 1,8-nonadiyne – Au» при приложении напряжения 1 В. В асимметричном наноконтакте исчезают особенности спектра пропускания, появляющиеся при напряжении $2,1$ В в симметричном наноконтакте (рис. 6 б).

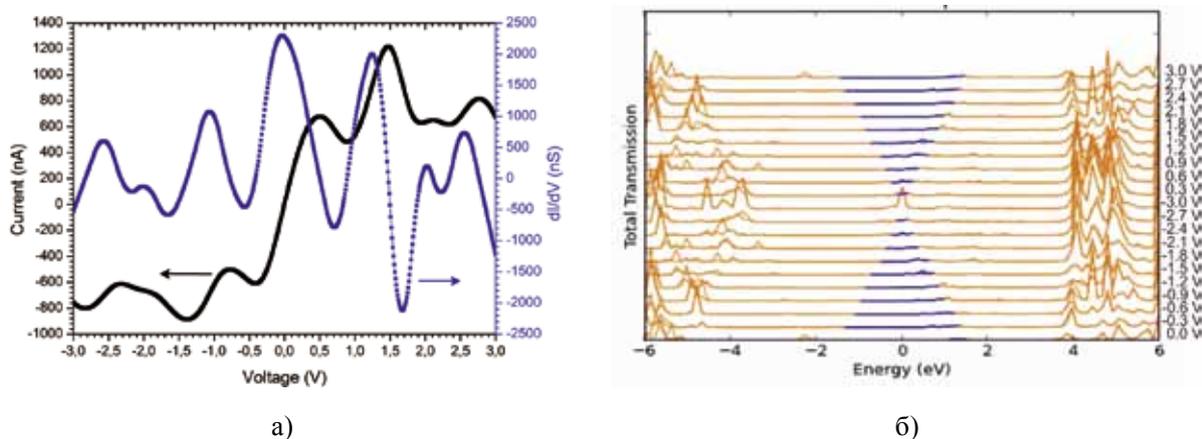


Рис. 6. Транспортные характеристики асимметричного наноконтакта «Au – 1,8-nonadiyne – Au» при приложении напряжения 1 В:

а) ВАХ и дифференциальная проводимость; б) спектр пропускания.

На ВАХ асимметричного наноконтакта в интервале напряжения $0,5 \div 0,9$ В и $1,5 \div 1,9$ В наблюдаются заметное падение транспортного тока от $0,7$ мкА до $0,48$ мкА и от $1,24$ мкА до $0,62$ мкА, соответственно. В интервале напряжения $-3 \div -1$ В в симметричном контакте наблюдается осциляция тока затухающего характера, а асимметричном контакте данный процесс нарушается появлением максимума $-0,6$ мкА при напряжении

-2,4 В и минимума -0,88 мкА при напряжении -1,4 В. Слабое вентиляющее свойство, наблюдающееся в симметричном аналоге контакта, ухудшается.

Минимальное значение дифференциальной проводимости асимметричного контакта -2,1 мкСм наблюдается при 1,7 В, а локальные минимумы -0,25 мкСм, -0,5 мкСм, -0,4 мкСм, -0,8 мкСм, -0,2 мкСм возникают при -2,1 В, -1,7 В, -0,6 В, 0,7 В, 2,3 В, соответственно. Максимальная дифференциальная проводимость 2,3 мкСм проявляется при -0,1 В, а ее локальные максимумы 0,6 мкСм, 0,1 мкСм, 1 мкСм, 2 мкСм, 0,25 мкСм, 0,75 мкСм наблюдаются при напряжениях смещения -2,6 В, -2 В, -1,1 В, 1,3 В, 2 В, 2,6 В, соответственно.

В работе [9] на ВАХ наноструктуры ТЕМРО (2,2,6,6-tetramethyl-1-piperidinyloxy) экспериментально наблюдается отрицательное дифференциальное сопротивление, где его возникновение объясняется наличием полупроводникового пограничного слоя, который может привести к появлению резонансного туннелирования квазичастиц [8, 10]. Поэтому появление участков отрицательных дифференциальных сопротивлений на ВАХ рассматриваемых наноконтактов можно объяснить резонансным туннелированием квазичастиц. Как видно, электрический ток, проходящий сквозь наноструктуру, резко возрастает, достигая максимума при $V = 2 \Delta / e$ (здесь Δ – разность между разрешенными в квантово-размерной области энергетическими уровнями). При превышении напряжением указанной величины, туннельный ток, протекающий сквозь наноструктуру, уменьшается. В работах [10, 11] было показано, что отрицательное дифференциальное сопротивление возникает лишь при одном знаке приложенного напряжения, а при другом знаке напряжения этот эффект отсутствует. В рассматриваемых наноконтактах существенное отрицательное дифференциальное сопротивление появляется при положительном знаке приложенного напряжения, в симметричном наноконтакте в интервале 2,1÷2,5 В (рис. 5 а), а в асимметричном случае – 1,5÷1,9 В, что хорошо описывается подходом, развитым в работе [10].

Выводы

Таким образом, в данной работе в рамках теории функционала плотности модельно исследованы основные электрические характеристики (ВАХ, спектр пропускания, дифференциальная проводимость, плотность состояний) симметричного и асимметричного наноконтактов «Au – 1,8-nonadiyne – Au». Выявлено, что такие наноконтакты обладают вентиляющим свойством, пропуская ток преимущественно в одном направлении, и их ВАХ имеет особенность резкого возрастания туннельного тока при определенных значениях напряжения, обусловленную резонансным туннелированием квазичастиц. Показано возникновение отрицательного дифференциального сопротивления при положительном знаке приложенного напряжения: 2,1÷2,5 В – в симметричном, 1,5÷1,9 В – в асимметричных наноконтактах. Подобные наноразмерные контакты могут быть применены для создания молекулярных электронных устройств наноэлектроники.

Работа частично поддержана грантом Министерства образования и науки Республики Казахстан (проект №4903/ГФ4).

Литература

1. Клавсюк А.Л., Салецкий А.М. Формирование и свойства металлических атомных контактов // УФН, 2015, 185, 1009-1030. [Klavsyuk A.L., Saletsky A.M. Formation and properties of metallic atomic contacts // Phys. Usp., 58, 2015, 933-951 pp.]

2. Paul W., Oliver D., Grutter P. Indentation-formed nanocontacts: an atomic-scale perspective // *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2014, 16, 8201-8222 pp.
3. Сергеев Д.М. Моделирование транспортных свойств SNS контактов в пределе сильного электрон-фононного взаимодействия // *Известия вузов. Физика*, 2016, 59 (3), 122-130. [Sergeyev D.M. Modeling of the Transport Properties of SNS Contacts for Strong Electron-Phonon Interactions // *Russian Physics Journal*, 2016, 59 (3), 456-465 pp.]
4. Aragoes A.C., Darwish N., Ciampi S., Sanz F., Gooding J.J., Diez-Perez I. Single-molecule electrical contacts on silicon electrodes under ambient conditions // *Nature Communications*, 2017, 8, 15056, 1-8 pp.
5. Взято из сайта National Institute of Standards and Technology, U.S. Department of Commerce (NIST Chemistry WebBook) <http://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C2396658&Mask=80>.
6. Brandbyge M., Mozos J.-L., Ordejon P., Taylor J., Stokbro K. Density-functional method for nonequilibrium electron transport // *Phys. Rev. B*, 2002, 65, 165401 pp.
7. Сергеев Д.М., Шункеев К.Ш. Исследование транспортных характеристик наноструктур на основе графена // *Известия вузов. Физика*, 2017, 60 (11), 80-87. [Sergeyev D., Shunkeyev K. Investigation of transport parameters of graphene-based nanostructures // *Russian Physics Journal*, 2018, 60 (11), 1938-1945 pp.]
8. Datta S. *Quantum Transport: Atom to Transistor* // Cambridge University Press, 2005, 404 pp.
9. Guisinger N.P., Greene M.E., Basu R., Baluch A.S., Hersam M.C. Room Temperature Negative Differential Resistance through Individual Organic Molecules on Silicon Surfaces // *Nano Lett.*, 2003, 4 (1), 55-59 pp.
10. Rakshit T., Liang G., Ghosh A.W., Datta S. Silicon-based Molecular Electronics // *Nano Lett.*, 2004, 4 (10), 1803-1807 pp.
11. Datta S. Electrical resistance: an atomistic view // *Nanotechnology*, 2004, 15, S433– S451 pp.

PECULIARITIES OF ELECTRIC TRANSPORT CHARACTERISTICS OF NANOCONTACT «AU-1,8-nonadiyne-AU»

D.M. Sergeyev

*Zhubanov Aktobe Regional State University, Aktobe
Begeldinov Military Institute of Air Defence Forces, Aktobe
serdau@rambler.ru, serdau@mail.ru*

Received 12.07.2018

The results of computer simulation of electrical characteristics (transmission spectrum, density of states, current-voltage characteristic, differential conductivity) of symmetric and asymmetric nanocontacts «Au – 1.8-nonadiyne – Au» are presented in the framework of the theory of the electron density functional in the local density approximation. Modeling features implemented in the Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab. It is revealed that a symmetric nanocontact has a weak gate property, passing the current mainly in one direction, and this property deteriorates in asymmetric contact. The appearance of a significant negative differential resistance at a positive sign of the applied voltage is shown. The results may be useful for the simulation of electrical properties of nanocontacts and the elements of nanoelectronics.

UDC 539.23; 539.216.1

О ПРОЦЕССЕ ОХЛАЖДЕНИЯ ЛАЗЕРНОЙ МИШЕНИ С ОБРАЗОВАНИЕМ В НЕЙ КРИОГЕННОГО ТОПЛИВНОГО СЛОЯ

Семенов К.О.

Вычислительный центр им. А.А. Дородницына ФИЦ ИУ РАН

kostya_24@mail.ru

Поступила 28.07.2018

В работе рассматривается процесс охлаждения лазерной мишени с образованием в ней криогенного топливного слоя. В целях определения времени формирования твердого топливного слоя разрабатывается математическая модель процесса десублимации газообразного топлива и предлагается численное решение поставленной задачи. Эта задача актуальна с учетом проблематик, связанных с процессами производства без подвесных сферических лазерных мишеней, разработанными в лаборатории термоядерных мишеней ФИРАН им. П.Н. Лебедева.

УДК 519.62, 519.853.6, 51-72

DOI: 10.31145/2224-8412-2017-17-2-74-84

Введение

В экспериментах по проблематике управляемого термоядерного синтеза используются *лазерные мишени* [1]. Лазерная мишень представляет собой тонкостенную сферическую стеклянную (или полимерную) оболочку, симметрично заполненную криогенным слоем (смесь дейтерия (D_2), и трития (T_2), находящихся в твердом состоянии).

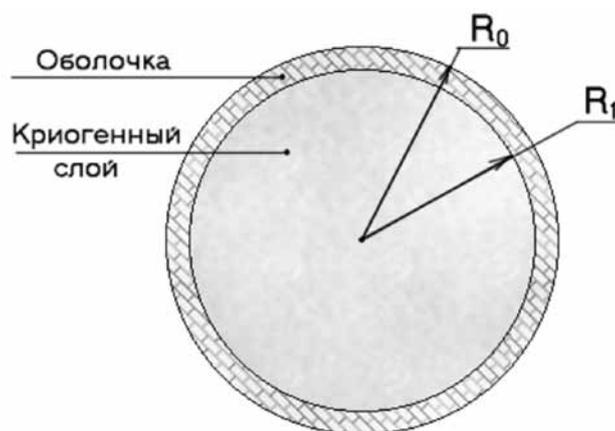
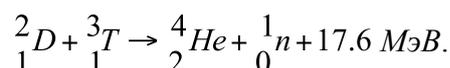


Рисунок 1. Лазерная мишень

При выстреле мощного импульсного лазера возникающей ударной волной по лазерной мишени, мишень сжимается (из-за высокой симметричности мишени), ядра атомов дейтерия и трития сближаются (в международной практике данный процесс называется – nuclear fusion process), и достигается очень высокая температура ($> 10^7 K$). Такое явление приводит к возникновению различных реакций термоядерного синтеза с выделением энергии.

Примером такой реакции может служить ниже следующая реакция синтеза



Ниже мы рассмотрим процесс охлаждения лазерной мишени с образованием в ней криогенного топливного слоя, необходимого для обеспечения, требуемых для создания условий запуска термоядерной реакции, физических характеристик лазерной мишени. Процесс охлаждения можно разбить на следующие два этапа

1. Охлаждение до начала образования твердого топливного слоя.
2. Формирование твердого топливного слоя.

1. Допущения и характеристики лазерной мишени, применяемые при моделировании

Далее, при построении математической модели и расчетах в отношении параметров лазерной мишени и условий процессов, протекающих в ней, будем считать справедливыми следующие предположения. Мы пренебрегаем линейным температурным расширением материалов. Полагаем радиус мишени $R_0 = 0.0005$ м. Здесь и далее все данные приведены в Международной Системе Единиц (СИ). Толщина оболочки лазерной мишени задается соотношением $(R_0 - R_1) = 0.000025$ м, будем считать её постоянной. Исключаем из рассмотрения процессы переноса масс внутри газообразного топлива. В качестве температуры внешней среды определим температуру $T_0 = 4.2 K$ – температура жидкого гелия (He). В качестве анализируемого газа будем рассматривать водород (H_2), для которого температура тройной точки [2] $T_{tr} = 13.81 K$. Удельная теплота дсу-

десублимации определяется соотношением $\mu = 509920 \frac{\text{Джс}}{\text{кг}}$. Плотность твердого водорода принимает значение $\rho_s = 86 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$. Коэффициенты удельной теплоемкости и теплопроводности, являясь функциями температуры аппроксимируются линейными соотношениями, для удельной теплоемкости $c_s(T) = \bar{c}_s(T + \theta_{cs})$, где $\bar{c}_s = 120 \frac{\text{Джс}}{\text{кг} \cdot \text{К}^2}$, $\theta_{cs} = 13.55 \text{К}$, для коэффициента теплопроводности справедливо равенство $k_s = 0.7 \frac{\text{Вт}}{\text{м} \cdot \text{К}}$. В случае газообразного водорода, полагаем начальную температуру $T_1 = 300 \text{К}$, удельную теплоемкость $c_g(T) = \bar{c}_g(T + \theta_{cg})$, где $\bar{c}_g = 12.3 \frac{\text{Джс}}{\text{кг} \cdot \text{К}^2}$, $\theta_{cg} = 338.2 \text{К}$ и коэффициент теплопроводности $k_g = \bar{k}_g(T + \theta_{kg})$, где $\bar{k}_g = 0.0722 \frac{\text{Вт}}{\text{м} \cdot \text{К}^2}$, $\theta_{kg} = 7.7 \text{К}$. Материал оболочки лазерной мишени — стекло «пирекс» (сорт боросиликатного стекла с очень низким температурным коэффициентом линейного расширения и устойчивостью к широкому диапазону температур), параметры такой оболочки принимают следующие значения: плотность $\rho_{sh} = 2500 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$, удельная теплоемкость $c_{sh}(T) = \bar{c}_{sh} \cdot T$, где $\bar{c}_{sh} = 2.57 \frac{\text{Джс}}{\text{кг} \cdot \text{К}^2}$, коэффициент теплопроводности $k_{sh} = \bar{k}_{sh}(T + \theta_{ksh})$, где $\bar{k}_{sh} = 0.0056 \frac{\text{Вт}}{\text{м} \cdot \text{К}^2}$, $\theta_{ksh} = 18.2 \text{К}$.

2. Модель охлаждения газа до температуры тройной точки при конвективном перемешивании газа

Для оценки времени охлаждения газа до начала процесса десублимации необходимо сформировать модель, описывающую процесс охлаждения топлива. Из-за высокого градиента температур внутри лазерной мишени происходит «мгновенное» конвективное перемешивание газа, поэтому при моделировании полагаем температуру газа (T_g) и его давление (P), не зависящими от расстояния до центра мишени (r), т.е. однородными по пространству. Распределение температуры в оболочке мишени (T_{sh}) описывается квазилинейным уравнением теплопроводности

$$c_{sh}(T_{sh}) \rho_{sh}(T_{sh}) \frac{\partial T_{sh}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial r} \left(k_{sh}(T_{sh}) \frac{\partial T_{sh}}{\partial r} \right) \quad (1.1)$$

Отметим, что соотношение записано не в сферических, а в декартовых координатах. Такая запись целесообразна ввиду того, что радиус лазерной мишени существенно превышает толщину её оболочки $R_1 \gg (R_0 - R_1)$. Поток тепла на границе раздела газ/оболочка задается уравнением теплового баланса

$$c_g(T_g) \rho_g V_g \frac{dT_g}{dt} = S k_{sh}(T) \frac{\partial T_{sh}}{\partial r} \Big|_{r=R_1}, \quad (1.2)$$

здесь $\rho_g = \text{const}$ — плотность газа в лазерной мишени, $V_g = \frac{4}{3} \pi R_1^3$ — объем газа, $S = 4 \pi R_1^2$ — площадь пятна контакта внутренней стенки лазерной мишени с газом. Граничные и начальные условия определяются следующими соотношениями $T_{sh}|_{r=R_1} = T_g(t)$ и $T_{sh}|_{r=R_0} = T_0$ — что означает равенство температур с внутренней и внешней стороны оболочки температурам газа и внешней среды соответственно. В начальный момент времени первоначальное распределение температуры в оболочке имеет вид $T_{sh}(r, 0) = \frac{r-R_0}{R_0-R_1} T_0 + \frac{R_0-r}{R_0-R_1} T_1$.

Построим разностную схему [3] для уравнения

$$c_i \rho_i \frac{(y_i - \hat{y}_i)}{\tau} = \frac{1}{h} \left[k_{i+1/2} \frac{(y_{i+1} - y_i)}{h} - k_{i-1/2} \frac{(y_i - y_{i-1})}{h} \right], \quad (1.3)$$

здесь τ – размер временного шага, $h = \frac{R - R_0}{N - 1}$ – шаг сетки (N – количество узлов сетки), $r_i = R_1 + ih \in [R_1, R_0]$ – текущая радиус-координата в i -ом узле, $c_i, \rho_i, k_i, k_{i+1/2} = \frac{(k_{i+1} + k_i)}{2}, k_{i-1/2} = \frac{(k_i + k_{i-1})}{2}$ –

коэффициенты для оболочки в i -ом узле (их значения можно брать на предыдущей итерации), y_i – значения температур в узлах сетки, \hat{y}_i – уже известные, полученные на предыдущем шаге значения температур в узлах сетки.

Для решения задачи нахождения температуры и времени охлаждения с применением такой разностной схемы возможно провести методом прогонки [4], [5]

$$h^2 c_i \rho_i \frac{(y_i - \hat{y}_i)}{\tau} = \left[k_{i+1/2} (y_{i+1} - y_i) - k_{i-1/2} (y_i - y_{i-1}) \right] \Rightarrow$$

$$\frac{h^2 c_i \rho_i}{\tau} y_i - \frac{h^2 c_i \rho_i}{\tau} \hat{y}_i = \frac{k_{i+1} + k_i}{2} y_{i+1} - \frac{k_{i+1} + k_i}{2} y_i - \frac{k_i + k_{i-1}}{2} y_i + \frac{k_i + k_{i-1}}{2} y_{i-1} \Rightarrow$$

$$\left(\frac{k_{i+1} + k_i}{2} \right) y_{i+1} + \left(-\frac{h^2 c_i \rho_i}{\tau} - \frac{k_{i+1} + 2k_i + k_{i-1}}{2} \right) y_i + \left(\frac{k_i + k_{i-1}}{2} \right) y_{i-1} = \left(-\frac{h^2 c_i \rho_i}{\tau} \hat{y}_i \right). \quad (1.4)$$

На каждом временном шаге оценивается градиент температур на внутренней стенке оболочки лазерной мишени $-\left(\frac{\partial T_{sh}}{\partial r} \Big|_{r=R_1+0} \approx \frac{(y_1 - y_0)}{h} \right)$. А с учетом этого изменения определяется температура газа

$$\frac{dT_g}{dt} = \frac{3k_s T_{sh} \Big|_{r=R_1} = T_g}{c_g(T_g) \rho_g R_1} \frac{\partial T_{sh}}{\partial r} \Big|_{r=R_1+0} \quad (1.5)$$

$$T_g(t + \tau) = T_g(t) - \tau \frac{3k_s (T_g(t))}{c_g(T_g(t)) \rho_g R_1} \frac{(y_0 - y_1)}{h}. \quad (1.6)$$

Результаты расчетов с применением описанной схемы приведены в таблице ниже.

Таблица 1.

$\rho_g, \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$	20	20	25	30	35	40	45
$t_{\text{ост}}, 10^{-3} \text{с}$	5.0	5.7	6.9	8.1	9.3	10.5	11.7

Сходимость обеспечивается за счет изменения количества узлов разностной схемы и временного шага, что подтверждается тем фактом, что при увеличении этих параметров в несколько раз, результаты вычислений менялись незначительно.

3. Упрощенная модель формирования криогенного топливного слоя

Рассмотрим одномерную задачу Стефана о промерзании с одним фазовым фронтом. Ввиду того, что характерная величина температуропроводности оболочки значительно превышает температуропроводность водорода, присутствием оболочки можно пренебречь.



Рисунок 2. Формирование криогенного топливного слоя с плоской границей фазового раздела.

Распределение температуры в газе ($0 \leq x \leq \xi(t)$) описывается параболическим уравнением

$$c_g \rho_g \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k_g \frac{\partial T}{\partial x} \right), \quad (2.1)$$

где c_g , ρ_g и k_g удельная теплоемкость, плотность и коэффициент теплопроводности газа соответственно. Будем считать эти коэффициенты не зависящими от времени (t) и температуры (T). Для твердого слоя это уравнение будет выглядеть аналогично $c_s \rho_s \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k_s \frac{\partial T}{\partial x} \right)$, где c_s , ρ_s и k_s – удельная теплоемкость, плотность и коэффициент теплопроводности твердого слоя соответственно. Далее приведем описание граничных условий. На границе твердый слой/внешняя среда условие будет описываться равенством температур: $T|_{x=R_1} = T_0$. На левом краю ($x=0$), а это центр мишени, где поток тепла равен нулю $k_g \frac{\partial T}{\partial x}|_{x=0} = 0$. На границе раздела двух фаз ($x=\xi(t)$) соблюдается равенство температур, а разность тепловых потоков равна произведению энтальпии фазового перехода на скорость движения границы раздела фаз $T|_{x=\xi(t)-0} = T|_{x=\xi(t)+0}$,

$$k_s \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=\xi(t)+0} - k_g \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=\xi(t)-0} = \rho_s \frac{d\xi(t)}{dt}, \quad (2.2)$$

Начальные условия описывают следующие соотношения. В момент времени ($t=0$) твердой фазы нет, что означает $\xi(t=0) = R_1$, а температуру газа будем считать равной температуре тройной точки водорода $T|_{0 \leq x \leq R_1, t=0} = T_{tp}$. При такой постановке задача имеет аналитическое решение [6], при вычислении которого время процесса десублимации определяется следующим образом

$$t_{sub} = \frac{1}{9} R_1^2 \left(\frac{\rho_g}{\rho_s} \right)^2 / \alpha^2. \quad (2.3)$$

Параметр α — корень трансцендентного уравнения

$$\mu \cdot \rho_s \frac{\sqrt{\pi}}{2} \alpha = \frac{k_s(T_{tp} - T_0) \exp\left(-\frac{\alpha^2}{4a_s^2}\right)}{a_s \Phi\left(\frac{\alpha}{2a_s}\right)}, \quad (2.4)$$

где $a_s = \sqrt{\frac{k_s}{c_s \rho_s}}$ – коэффициент температуропроводности.

Функция $\Phi(y) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^y \exp(-z^2) dz$ – интеграл ошибок. Формулы (2.3)–(2.4) получены при решении задачи о вымерзании заданной массы газа на плоской холодной поверхности без учета теплофизических свойств самой поверхности, т.е. оболочки.

Результаты вычислений по полученным соотношениям приведены в таблице 2.

Таблица 2.

Начальная плотность газа: $\rho_g, \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$	15	20	30	35	40	45
Полученное время охлаждения: $t_{\text{sub}}, 10^{-3} \text{с}$	2.53	4.51	10.1	13.8	18.0	22.8

4. Основная модель формирования криогенного слоя

Газовая смесь в лазерной мишени охлаждена до температуры T_f близкой к температуре тройной точки водорода T_{tp} , в этот момент времени криогенный топливный слой отсутствует. В процессе дальнейшего охлаждения будет происходить десублимация газа – газ начнет осаждаться на внутренней поверхности оболочки лазерной мишени, как это показано на рисунке 3.

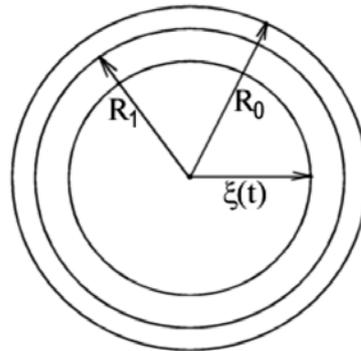


Рисунок 3. Схема десублимация газа. $R_0, R_1, \xi(t)$ – внешний, внутренний радиусы мишени и функция расстояния от центра мишени до внутренней границы твердого топливного слоя

Такая модель может быть описана следующей системой уравнений теплопроводности в сферической системе координат по каждому из слоев

$$\begin{cases} c_g(T) \rho_g(\xi(t)) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 k_g(T) \frac{\partial T}{\partial r} \right], 0 < r < \xi(t), \\ c_s(T) \rho_s \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 k_s(T) \frac{\partial T}{\partial r} \right], \xi(t) < r < R_1, \\ c_{sh}(T) \rho_{sh} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 k_{sh}(T) \frac{\partial T}{\partial r} \right], R_1 < r < R_0, \end{cases} \quad (3.1)$$

$$\begin{cases} T(t, \xi(t)) = T_{tp} = \text{const} > 0, t \geq 0, \\ \mu \rho_s \frac{d\xi(t)}{dt} = k_s(T = T_{tp}) \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=\xi(t)-0} - k_g(T = T_{tp}) \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=\xi(t)+0} \end{cases} \quad (3.2)$$

В описанной выше системе уравнений (3.1)–(3.2), плотность газа зависит от времени

$$\rho_g(\xi(t)) = \rho_g|_{t=0} \left(\frac{R_1}{\xi(t)} \right)^3 + \rho_s \left(\frac{\xi(t) - R_1}{\xi(t)} \right)^3, \quad (3.3)$$

при нарастании твердого слоя, плотность которого (ρ_s) больше, чем первоначальная плотность газа $\rho_g|_{t=0}$, масса вещества внутри оболочки остается постоянной, поэтому плотность газа уменьшается в соответствии с вышеописанной зависимостью.

Зададим граничные условия

$$T|_{r=R_0} = T_0, \quad (3.4)$$

на внешней стороне мишени температура постоянно равна температуре внешней среды,

$$k_g(T) \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0, \quad (3.5)$$

в центре мишени нулевой тепловой поток.

Начальные условия примут вид

$$T(r, t=0) = \begin{cases} T_f - \frac{r(T_f - T_{tp})}{R_1}, \text{ при } 0 \leq r \leq R_1, \\ T_{tp} - \frac{(r - R_1)(T_{tp} - T_0)}{(R_0 - R_1)}, \text{ при } R_1 \leq r \leq R_0, \end{cases} \quad (3.6)$$

т. е. температура изменяется соответственно в газе – линейно от температуры T_f в центре мишени до температуры T_{tp} на внутренней поверхности оболочки, а в оболочке – линейно до температуры T_f на внешней поверхности оболочки. При $r < R_1$ введем удельное теплосодержание

$$H(T) = \int_0^T (c(u)\rho(u) + \mu\rho_s \delta(u - T_{tp})) du, \quad (3.7)$$

$$\text{где } c(u)\rho(u) = \begin{cases} c_s(u)\rho_s, \text{ при } 0 \leq u \leq T_{tp}, & r < R_1, \\ c_g(u)\rho_g, \text{ при } T_{tp} < u, & \\ c_{sh}(u)\rho_{sh}, & r > R_1, \end{cases} \text{ и } \delta(x) \text{ – дельта-функция Дирака.}$$

Условия (3.2) на фазовом фронте будут выполнены, если соотношение (3.1) заменить соотношением

$$\frac{\partial H(T)}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 k(u) \frac{\partial T}{\partial r} \right), \quad (3.8)$$

$$\text{где } k(u) = \begin{cases} k_s(u), & \text{при } 0 \leq u \leq T_{tp}, \\ k_g(u), & \text{при } T_{tp} < u, \\ k_{sh}(u), & r > R_1. \end{cases} \quad r < R_1,$$

Подставляя в уравнение энергии (3.7) выражение (3.6), получаем:

$$(c(T)\rho(T) + \mu\rho_s\delta(T-T_{tp}))\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2k(u)\frac{\partial T}{\partial r}\right). \quad (3.9)$$

Как видно $c(T)$ и $\rho_s\delta(T-T_{tp})$ входят в уравнение одинаковым образом. $\rho_s\delta(T-T_{tp})$ представляет собой сосредоточенную теплоемкость (на поверхности $T = T_{tp}$). Для перехода к разностной схеме заменим дельта-функцию приближенно дельтаобразной, или «размазанной», дельта-функцией $\delta(T-T_{tp},\Delta) \geq 0$, где Δ – величина полуинтервала, на котором отлична от нуля $\delta(T-T_{tp},\Delta)$.

Итак, при $r > R_1$, введем эффективную сглаженную теплоемкость $\tilde{C}(T) = c(T)\rho(T) + \mu\rho_s\delta(T-T_{tp},\Delta)$ из условий

$$\tilde{C}(T) = c_s(T)\rho_s \text{ при } T < T_{tp} - \Delta, \quad \tilde{C}(T) = c_g(T)\rho_g \text{ при } T > T_{tp} + \Delta.$$

Изменение энтальпии на интервале $(T_{tp} - \Delta, T_{tp} + \Delta)$ сохраняется, т.е.

$$\int_{T_{tp}-\Delta}^{T_{tp}+\Delta} \tilde{C}(u)du = \mu\rho_s + \int_{T_{tp}-\Delta}^{T_{tp}} c_s(u)\rho_s du + \int_{T_{tp}}^{T_{tp}+\Delta} c_g(u)\rho_g du, \quad (3.10)$$

при $r > R_1$, полагаем $\tilde{C}(T) = c_{sh}(T)\rho_{sh}$.

Можно задать функцию $\tilde{C}(T)$ на интервале $T_{tp} - \Delta, T_{tp} + \Delta$ следующим образом

$$\tilde{C}(T) = \begin{cases} c_s(T)\rho_s + \delta(T-T_{tp},\Delta), & \text{при } T < T_{tp}, \\ c_g(T)\rho_g + \delta(T-T_{tp},\Delta), & \text{при } T > T_{tp}. \end{cases} \quad (3.11)$$

$$\text{где } \delta(T-T_{tp},\Delta) = \frac{3\mu\rho_s(T-T_{tp}+\Delta)(T_{tp}+\Delta-T)}{4\Delta^3}.$$

Несложно убедиться, что

$$\int_{T_{tp}-\Delta}^{T_{tp}+\Delta} \delta(T-T_{tp},\Delta)dT = \frac{3\mu\rho_s}{4\Delta^3} \int_{T_{tp}-\Delta}^{T_{tp}+\Delta} (\Delta^2 - (T-T_{tp})^2)dT = \mu\rho_s. \quad (3.12)$$

На этом же интервале $(T_{tp} - \Delta, T_{tp} + \Delta)$ проводится сглаживание и для коэффициента теплопроводности, вводится эффективный сглаженный коэффициент $\tilde{k}(T)$, совпадающий с $k_s(T)$ при $T < T_{tp} - \Delta$, и с $k_g(T)$ при $T > T_{tp} + \Delta$, а при $r > R_1$: $\tilde{k}(T) = k_{sh}(T)$.

В результате мы получаем задачу для уравнения теплопроводности со сглаженными коэффициентами

$$\tilde{C}(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \tilde{k}(u) \frac{\partial T}{\partial r} \right), \quad (3.13)$$

при указанных ранее граничных (3.4), (3.5) и начальных (3.6) условиях. Перейдем к построению разностной схемы для полученной задачи.

$$r^2 \tilde{C}(T, r) \frac{\partial T}{\partial t} = 2r \tilde{k}(T, r) \frac{\partial T}{\partial r} + r^2 \frac{\partial}{\partial r} \left(\tilde{k}(T, r) \frac{\partial T}{\partial r} \right). \quad (3.14)$$

Чисто неявная разностная схема имеет следующий вид

$$r_i \tilde{c}_i \rho_i \frac{(y_i - \hat{y}_i)}{\tau} = 2\tilde{k}_i \frac{(y_{i+1} - y_{i-1})}{2h} + r_i \frac{1}{h} \left[\tilde{k}_{i+1/2} \frac{(y_{i+1} - y_i)}{h} - \tilde{k}_{i-1/2} \frac{(y_i - y_{i-1})}{h} \right], \quad (3.15)$$

Перед началом каждого временного шага разностного метода вычисляется положение границы раздела фаз, линейной интерполяцией между соседними узлами

$$\xi(t) = r_{i-1} + \frac{T_p - \hat{y}_i}{\hat{y}_{i-1} - \hat{y}_i} h, \quad \text{где} \quad \hat{y}_{i-1} \leq T_p \leq \hat{y}_i. \quad (3.16)$$

С учетом соотношения (3.3) находится величина плотности газа $\rho_g(t)$.

Процесс вычисления заканчивается, когда плотность газа приближается к нулевому значению.

Результаты вычислений по полученным соотношениям приведены ниже в таблице 4.

Таблица 4.

$\rho_g, \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$	15	20	25	30	35	40	45
$t_{\text{sub}}, 10^{-3} \text{с}$	5.4	8.8	13.1	18.5	25.1	32.8	41.9

Данная таблица получена для следующих параметров описанного метода расчета.

Количество узлов разностной схемы $N = 500$. Величина временного шага: $\tau = 10^{-5} \text{с}$, $\Delta = 0.03 \text{К}$ и $T_f = 14 \text{К}$.

При сравнении данных результатов с результатами, полученными для соответствующей упрощенной задачи (Таблица 3), мы видим, что они имеют тот же порядок.

Замечания.

1. Интервал Δ следует выбирать таким образом, чтобы он охватывал несколько узловых точек. Так как при слишком малых Δ , возникает немонотонность в сглаживании, а при слишком больших – сильное расхождение с исходной задачей.
2. Не стоит также выбирать слишком большие значения параметра N , так как при решении соответствующей системы линейных уравнений с трехдиагональной матрицей методом прогонки, может возникнуть значительное накопление погрешности вычисления.

Заключение

Полученные значения времен охлаждения составляют десятки миллисекунд. Внешние в модели предположения не могут значительно (на порядки) изменить реальное время охлаждения.

Использование приведенных численных методов в исследуемых моделях вполне пригодно для практических задач. Результаты показали хорошую согласованность с теоретическими результатами [7]-[8].

Предложенные вычислительные схемы вполне пригодны также для метода охлаждения, основанного на квантовом излучении нагретого тела. Для такого метода необходимо заменить граничные условия на внешней поверхности мишени в соответствии с законом Стефана-Больцмана – вместо постоянной температуры подставить тепловой поток [9].

Литература

1. *Александрова И.В., Белолипецкий А.А., Корешева Е.Р. и др.* Криогенные мишени для реактора // Часть I Диффузионное заполнение топливом сферических оболочек, М., Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, 2012, с.1-134.
2. *Сивухин Д.В.* Общий курс физики. Термодинамика и молекулярная физика // Наука, М., 1979.
3. *Самарский А.А.* Теория разностных схем // Наука, М., 1989.
4. *Самарский А.А., Моисеенко Б.Д.* Экономичная схема сквозного счета для многомерной задачи Стефана // Журнал Вычислительной математики и Математической физики. Т5, №5, 1965.
5. *Будак Б.М., Соловьева Е.Н., Успенский А.Б.* Разностный метод со сглаживанием коэффициентов для решения задач Стефана // Журнал Вычислительной Математики и Математической Физики, Т5, №5, 1965.
6. *Тихонов А.Н., Самарский А.А.* Уравнения математической физики // МГУ, М., 1999.
7. *Белолипецкий А.А.* Математическая модель остывания тонкостенной оболочки при быстром конвективном перемешивании газа внутри нее // Вестник МГУ им. М.В. Ломоносова, серия 15, вычисл. матем. и кибернетика, №1, 2001.
8. *Белолипецкий А.А.* Математическое моделирование процесса десублимации изотопов водорода в лазерной мишени// М.: Труды МФТИ, 2009, т.1, № 4, с. 7-22.
9. *Белолипецкий А.А., Малинина Е.А., Семенов К.О.* Математическая модель деградации топливного слоя при нагревании лазерной мишени тепловым излучением в рабочей камере реактора // Труды факультета ВМК МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, 2009.

**ON THE PROCESS OF COOLING OF A LASER
TARGET WITH FORMATION
OF A CRYOGENIC FUEL LAYER IN IT.**

Semenov K.O.

Dorodnitsyn Computing Center of the Russian Academy of Sciences

Received 28.07.2018

The process of cooling of a laser target with a cryogenic fuel layer formed in it is considered. To determine the time of formation of a solid fuel layer, a mathematical model of the process of gaseous fuel desublimation is developed and a numerical solution of this problem is proposed. The problem is actual with regard to the range of problems related to processes of manufacturing of unsuspended spherical laser targets, which were developed in the laboratory of thermonuclear targets at the Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences.

Информация и правила для авторов

Общие положения

Журнал «Наноструктуры. Математическая физика и моделирование» (сокращенно: НМФМ) публикуется с 2009 года и является периодическим научным изданием. Электронная версия журнала размещается на сайте <http://www.nano-journal.ru>. Основная цель издания: представление новых теоретических и вычислительных методов моделирования наноструктур и мягкой материи, общих подходов в исследовании мезосистем, а также ключевых экспериментальных результатов в данной области и связанных с этим проблем математической физики.

Журнал НМФМ имеет междисциплинарный характер и в силу этого несет определенную образовательную направленность, а не только узко научную. Работы, представляемые в журнал, должны содержать вводные сведения, которые обеспечат понимание постановок задач и восприятие результатов не только прямыми специалистами. Определения понятий, объяснение обозначений и терминов, оценки характерных параметров, теоретические предпосылки и идеи, используемые методы, и т.п., должны быть кратко объяснены в тексте статьи, имея в виду читателей, специализирующихся в иных направлениях. Должны быть описаны базовые математические модели и уравнения. Во Введении и в последующих разделах очерчивается стратегия и основные трудности, это увязывается с используемыми моделями. Структура статьи ориентируется на прояснение общей логики и методики исследования, содержит резюмирующие выводы. В тексте должны быть рассмотрены характерные примеры (хотя бы, методические), ясно иллюстрирующие предлагаемые алгоритмы.

Журнал публикует научные обзоры, исследовательские статьи и краткие научные сообщения, а также избранные аналитические и информационно-образовательные материалы, тексты докладов и циклов лекций, прочитанных в университетах, научных центрах, на школах-семинарах, конференциях, нигде ранее не публиковавшиеся и не принятые к публикации в других изданиях. Язык публикации в журнале НМФМ, как правило, русский. Работы, представляемые в журнал, не могут иметь научно-популярный или компилятивный характер. Все статьи рецензируются и могут быть отклонены редколлегией журнала. В случае принятия работы к печати ее авторы передают издательству журнала НМФМ право на разовую безвозмездную публикацию текста и его размещение в электронной версии на сайте журнала. Перевод опубликованных в журнале статей на другие языки может осуществляться только с разрешения и при участии авторов.

Порядок представления статей

- В редакцию изначально представляются:
 - файл статьи, файлы с иллюстрациями;
 - сопроводительное письмо, можно в электронной форме, содержащее сведения об объеме статьи и обо всех авторах (фамилии, имена, отчества, полные названия мест работы, почтовый адрес с индексом, номер контактного телефона с кодом города, электронный адрес автора, ответственного за переписку с редакцией); предпочтительно, чтобы это письмо было выполнено на бланке учреждения, в котором работает кто-то из авторов, было заверено печатью и содержало утверждение о возможности открытого опубликования статьи;
 - файл с переводом на английский язык названия статьи, фамилий и инициалов авторов, аннотации, ключевых слов.
- Авторские файлы могут быть присланы на электронный адрес: papers@nano-journal.ru; (резервный адрес в случаях затруднений с пересылкой: nano@miem.edu.ru) или переданы в редакцию на любом электронном носителе. Авторы получают из редакции подтверждение о получении их материалов.
- Телефон (факс) редакции: +7 (495) 916-8876. Адрес редакции: Москва 109028, Б. Трехсвятительский пер., 3/12, Московский институт электроники и математики (МИЭМ), комн. 449.

Общие требования к представляемым файлам

- Допускается использование текстовых редакторов WORD и LATEX. К рабочим файлам должна быть приложена их pdf-копия. В названии файлов используется латинский алфавит, пробелы заменяются знаком `_`. Шапка статьи содержит название, инициалы и фамилии авторов, место работы, электронный адрес, краткую аннотацию, ключевые слова. В аннотации не следует использовать формулы и ссылки на текст работы или список литературы; в конце она должна содержать индекс УДК (к английской версии аннотации можно добавить индексы зарубежных рубрикаторов).
- Объем кратких сообщений 4-8 страниц, исследовательских статей, как правило, до 20 страниц, а обзоров – более 20 страниц. Верхняя граница согласуется с редколлегией. При подсчете объема нужно ориентироваться на страницы формата А4, шрифт 12, знаков в строке 80, интервалов между строками 1.
- Авторы не должны злоупотреблять сокращениями, составленными из заглавных начальных букв терминов. Предпочтительней каждый раз использовать полное наименование объекта. Возможно использование только устоявшихся аббревиатур.

Требования к файлам Word

- Рекомендуемый шрифт – Times New Roman.
- Строки в пределах абзаца не должны разделяться символом возврата каретки (Enter).
- Нельзя использовать автоматическое создание сносок, автоматический перенос или автоматический запрет переносов, создание списков, автоматический отступ и т.п.
- Ссылки на список литературы даются цифрами в квадратных скобках: [1], [5,6,7], [1-9].
- Все без исключения формулы и обозначения размерности, даже состоящие из одной латинской буквы, и в тексте и вынесенные в отдельную строку, всегда набираются в формульном редакторе и никогда – в обычном текстовом редакторе.

- При создании таблицы рекомендуется использовать возможности Word или MS Excel. Таблицы, набранные вручную (с помощью большого числа пробелов), не принимаются.

Требования к иллюстрациям

- Иллюстрации представляются в отдельных файлах, черно-белыми. Они должны иметь разрешение не менее 600 dpi.
- Форматы файлов – TIFF, EPS, PSD, JPEG.

Требования к списку литературы

- Ф.И.О. авторов или редакторов выделяются курсивом.
- Для статей приводится название. Названия отделяются от выходных данных знаком //. Расположение выходных данных указано на образце ниже. Номер тома выделяется жирным шрифтом, номер выпуска дается в скобках. Указываются номера первой и последней страниц статьи, либо уникальный номер статьи и ее объем. Для книг желательно указывать их объем. Если известна ссылка на электронный архив или сайт, то ее желательно указать.

Фамилия И.О. Название статьи // Назв. журн., 2000, **1** (1), 1-6.

Family F.M. and Family F. Title of the paper // Name of the Journal, 2006, **73**, 165313, 9 pp.

Фамилия И.О., Фамилия И.О. Название книги // Наука, С.-П., 1999, 176 стр.

Family F.M. Title of the paper // In book: Family F.M. (et al. eds), Title of the collection, Publisher, Boston, 2005, 9-24.

Family F.M. (ed.), Title of the collection // Publisher, N.Y., 2005, 324 pp.

Фамилия И.О. Название доклада // Доклад на конференции «Название конференции (место и дата проведения)»; ссылка на электронный ресурс.

Наноструктуры. Математическая физика и моделирование

Журнал зарегистрирован

в Министерстве РФ по делам печати,
телерадиовещания и средств массовых коммуникаций.

Свидетельство о регистрации

ПИ № ФС77-34934 от 29 декабря 2008 г.

Учредители

Московский институт электроники и математики (МИЭМ),

Европейский центр по качеству

Издатель

Европейский центр по качеству

Подписано к печати

15.08.2018 г.

ПОДПИСКА НА ЖУРНАЛ НМФМ

На второе полугодие 2017 г. подписаться на журнал можно в любом отделении связи по каталогу
Агентства Роспечать «Журналы России»,

рубрика «Физико-математические науки», подписной индекс 70017.

Редакция предлагает подписчикам возможность безвозмездно получить подборку прошлых
выпусков журнала. Пришлите на электронный адрес nanostructures@hse.ru (или на почтовый адрес:
123458, Москва, ул. Таллинская, д. 34, каб. 429, редакция журнала НМФМ)
копию подписной квитанции, а также адрес для отсылки выпусков.