ISSN 2224-8412

22(2) 2022

НАНОСТРУКТУРЫ

математическая физика и моделирование

Nanostructures. Mathematical physics & modelling

2022, том 22, № 2

НАНОСТРУКТУРЫ

математическая физика и моделирование

Nanostructures.
Mathematical Physics & Modelling

2022, volume 22(2)

Наноструктуры. Математическая физика и моделирование

Редколлегия:

В.А. Аветисов, А.А. Белолипецкий И.В. Волович,
В.В. Гусаров, П.Н. Дьячков, Р.Г. Ефремов, 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, Ю.А. Флёров,
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

© 2022, ООО Сенсор Микрон

Содержание

М.Ю. Смирнов, В.С. Зияутдинов, М.Э. Земцова, К.А. Богоносов
Феноменологический подход к описанию фазовых переходов в твердых телах 5

Н.И. Петров, Т.Л. Антонова, М.Э. Суняева
Имитационное моделирование конденсации вещества в нанососуде с использованием парного потенциала межатомного взаимодействия 14

В.Ф. Дегтярев
Перестройка резонансных туннельных уровней в связанных квантово-размерных ячейках 23

Актуальные публикации прошлых лет

К. Корнакер
На пути к физической теории самоорганизации 37

Д. Мичи и Ч. Лонгет-Хиггинс
Игра, моделирующая биологическую репликацию 40

К. Х. Уоддингтон
Теоретическая биология и молекулярная биология 48

К. Х. Уоддингтон и Р. Левонтин
Об эволюции и количественных изменениях генетической информации 55

К. Х. Уоддингтон
Зависит ли эволюция от случайного поиска? 58

Д. Мейнард Смит
Проблема счета 67

Информация и правила для авторов 73

Contents

M.Yu. Smirnov, V.S. Ziyutdinov, M.E. Zemtsova, K.A. Bogonosov
Phenomenological approach to the description of phase transitions in solid bodies 5

N.I. Petrov, T.L. Antonova, M.I. Sunyaeva
Simulation modeling of matter condensation in a nanovessel using the paired interatomic interaction potential. 14

V.F. Degtiarev
Reconstruction of resonant tunnel levels in coupled quantum-size cells. 23

Actual matter published in the last years

K. Cornacer
Towards a physical theory of self-organization 37

D. Michi Ch. Langet-Higgins
Game modeling of biological replication 40

K.H. Waddington
Theoretical biology and molecular biology. 48

K.H. Waddington R. Levontin
Theoretical biology and molecular biology. 55

K.H. Waddington
Does evolution depend on random search 58

D. Meinard Smith
Account problem. 67

The information and rules for authors 73

ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ОПИСАНИЮ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

М.Ю. Смирнов[1], В.С. Зияутдинов[2], М.Э. Земцова[3], К.А. Богоносов[4]

[1-3]*Московский государственный университет технологии и управления имени К.Г. Разумовского (ПКУ) Липецкий казачий институт технологии и управления (филиал)*

[4]*Московский государственный университет технологии и управления имени К.Г. Разумовского (ПКУ);*
E-mail: m_u_smirnov@mail.ru

Поступила 13.10.2022

Рассмотрены общие подходы к проблеме описания конкуренции и сосуществования различных фаз конденсированного состояния материи на основе теории фазовых переходов второго рода Ландау. Показано, что многокомпонентный параметр порядка приводит к более сложной картине фазовых переходов и возникновению областей на фазовой диаграмме, в которых различные пространственно-упорядоченные состояния могут конкурировать или сосуществовать. Границы применимости рассмотренного подхода — близость к границе фазового перехода, область, в которой достаточно первых двух слагаемых в разложении свободной энергии по степеням параметра порядка.
Ключевые слова: фазовый переход второго рода, параметр порядка, феноменологический подход, конкуренция и сосуществование фаз.

УДК 537.312.62
DOI: 10/31145/2224-8412-2022-22-2-5-13

Введение

Часто при теоретическом рассмотрении поведения твердого тела требуется рассмотреть раздельное или одновременное сосуществование различных состояний (или фаз). Детальное рассмотрение на микроскопическом уровне бывает достаточно сложным, в силу отсутствия методов решения и анализа возникающих нелинейных уравнений. При экспериментальном подходе к проблеме приходится иметь дело с величинами, лишь косвенно связанными с конкретным микроскопическим механизмом и характеризу-

ющими поведение макроскопическими величинами. Поэтому чрезвычайно плодотворным оказывается феноменологический подход, развитый в 1950 году В.Л. Гинзбургом и Л.Д. Ландау, основанный на общей термодинамической теории Ландау фазовых переходов второго рода [1].

В данной статье рассмотрен феноменологический подход к проблеме рассмотрения фазовых переходов второго рода с сосуществованием и конкуренцией различных фаз.

Методы и принципы исследования

Рассмотрим основы теории фазовых переходов второго рода Ландау, которая построена на разложении свободной энергии по степеням параметра порядка вблизи точки фазового перехода, где параметр порядка мал. Область применимости теории ограничена близостью к критической температуре фазового перехода $T_C - T \ll T_C$.

Разложение плотности свободной энергии по степеням параметра порядка, в соответствии с теорией фазовых переходов второго рода, можно записать в виде [1, 2]:

$$F_1 = F_0 + \alpha|\Psi|^2 + \frac{\beta}{2}|\Psi|^4, \qquad (1)$$

где F_1 — свободная энергия тела при низких температурах в отсутствие внешнего магнитного поля, F_0 — свободная энергия тела в нормальном состоянии при $T > T_C$, α и β — некоторые феноменологические коэффициенты разложения, характеризующие материал. Эти феноменологические параметры выражаются через наблюдаемые макроскопические величины.

Определим такое значение параметра порядка, при котором свободная энергия достигает минимума:

$$\frac{dF_{s0}}{d|\Psi|^2} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad |\Psi_0|^2 = -\frac{\alpha}{\beta}.$$

Поскольку при $T = T_C$ параметр порядка должен обращаться в нуль, а при $T < T_C$ отличен от нуля, то также коэффициент $\alpha = 0$ при $T = T_C$ и $\alpha < 0$ при $T < T_C$. В первом порядке по $(T_C - T)$ можно записать $\alpha = \tilde{\alpha}(T - T_C)$, где $\tilde{\alpha}$ не зависит от близости к T_C. Коэффициент β можно считать положительным и от температуры не зависящим. Это приведет к минимуму функционала при $T < T_C$ и отличному от нуля параметру порядка Ψ. С другой стороны, при $T > T_C$ минимум будет достигнут при нулевом значении параметра порядка, что соответствует нормальному состоянию образца.

В общем случае неоднородного тела во внешнем магнитном поле необходимо исследовать разложение свободной энергии Гиббса по степеням Ψ:

$$G_{sH} = G_n + \int\left[\alpha|\Psi|^2 + \frac{\beta}{2}|\Psi|^4 + \frac{1}{4m}\left|-i\hbar\nabla\Psi - \frac{2e}{c}\mathbf{A}\Psi\right|^2 + \frac{(\mathrm{rot}\,\mathbf{A})^2}{8\pi} - \frac{\mathrm{rot}\,\mathbf{A}\cdot\mathbf{H}}{4\pi}\right]dV,$$

где интегрирование ведется по всему объему, **H** — напряженность внешнего магнитного поля, предпоследнее слагаемое определяет плотность магнитной энергии, здесь $\mathrm{rot}\,\mathbf{A}(\mathbf{r})$ задает напряженность магнитного поля в данной точке тела, слагаемое с градиентным членом представляет собой плотность кинетической энергии электронов, m — масса свободного электрона. Найдем такие уравнения относительно $\Psi(\mathbf{r})$ и $\mathbf{A}(\mathbf{r})$, которые давали бы минимальное значение свободной энергии. Для этого необходимо решить вариационные задачи: $\delta_{\Psi^*}G_{sH} = 0$, $\delta_{\Psi}G_{sH} = 0$, $\delta_{\mathbf{A}}G_{sH} = 0$.

Первая из указанных вариаций приводит к хорошо известному из теории сверхпроводимости первому уравнению Гинзбурга-Ландау и соответствующему граничному условию [2]:

$$\begin{gathered}\alpha\Psi + \beta|\Psi|^2\Psi + \frac{1}{4m}\left(-i\hbar\nabla - \frac{2e}{c}\mathbf{A}\right)^2\Psi = 0,\\ \left(i\hbar\nabla + \frac{2e}{c}\mathbf{A}\Psi\right)\mathbf{n} = 0.\end{gathered} \qquad (2)$$

Здесь **n** — единичный вектор нормали к поверхности сверхпроводника. Вариация по Ψ приводит к комплексно сопряженному уравнению. Получим уравнение относительно векторного потенциала **A**, для этого необходимо решить последнюю из указанных вариационных задач:

$$\mathbf{j}_s = -\frac{i\hbar e}{2m}\left(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*\right) - \frac{2e^2}{mc}\mathbf{A}|\Psi|^2, \qquad (3)$$

Что представляет собой второе уравнение теории Гинзбурга-Ландау [2].

Основные результаты

Приведенные в предыдущем пункте выкладки хорошо описывают переход между двумя фазами. В случае конкуренции или сосуществования большего количества фаз структура функционала (1), являющегося основой феноменологического описания, должна отличаться от рассмотренной ранее. В том числе, должен отличаться и вид самого параметра порядка. Стоит отметить, что структура параметра порядка может быть получена при исследовании микроскопической теории явления, как это сделано Л.П.Горьковым (1959) для функционала Гинзбурга-Ландау в схеме среднего поля Бардина, Купера и Шриффера при спаривающем притяжении (чему соответствует однокомпонентный комплексный параметр порядка). Метод описан в [3].

В общем случае параметр порядка может быть задан в виде:

$$\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{k}) = \sum_s \Psi_s(\mathbf{R})\, \varphi_s(\mathbf{R}, \mathbf{k}).$$

Здесь $\Psi_s(\mathbf{R})$ — коэффициенты разложения параметра порядка по полной ортонормированной системе функций $\varphi_s(\mathbf{R}, \mathbf{k})$ получаемой из микроскопического описания состояния тела. Зависимость коэффициентов разложения от $\mathbf{R}$ позволяет описывать неоднородности строения материала.

Пусть состояние твердого вещества описывается двухкомпонентным параметром порядка, как, например, это получено в [4]. Разложение плотности свободной энергии по степеням параметра порядка в таком случае представляется в виде $f = f_0 + f_g + f_m$ [5], где

$$f_0 = \sum_{ss'} A_{ss'} \Psi_s^* \Psi_{s'} + \frac{1}{2} \sum_{ss'tt'} B_{ss'tt'} \Psi_s^* \Psi_{s'}^* \Psi_t \Psi_{t'},$$

представляет собой разложение плотности свободной энергии по второй и четвертой степени параметра порядка. Здесь матрицы $A_{ss'}$ и $B_{ss'tt'}$ определяются либо из микроскопического описания, либо выражаются из макроскопических наблюдаемых величин. Элементы матрицы $A_{ss'}$, как и в случае исследования функционала (1), должны зависеть от температуры образца. Градиентный вклад:

$$f_g = \frac{\hbar^2}{4m} \sum_{ss'} \left[\widehat{D}\Psi_s\right]^{\dagger} M_{ss'} \left[\widehat{D}\Psi_{s'}\right],$$

где элементы матрицы $M_{ss'}$ также определяются микроскопической теорией или выражаются из макроскопических наблюдаемых величин. Оператор $\widehat{D} = -i\nabla - \frac{2e}{\hbar c}\mathbf{A}$. Данный вклад учитывает не только внешнее магнитное поле, но и внутреннее. И, наконец, плотность энергии магнитного поля:

$$f_m = \frac{z_0}{8\pi} (\mathrm{rot}\, \mathbf{A})^2.$$

Производя вариацию функционала получим систему двух уравнений (в случае двухкомпонентного параметра порядка) вида

$$\sum_{s'} A_{ss'} \Psi_{s'} + \sum_{s'tt'} B_{ss'tt'} \Psi_{s'}^* \Psi_t \Psi_{t'} + \sum_{s'} M_{ss'} \left(-i\nabla - \frac{2e}{\hbar c}\mathbf{A} \right)^2 \Psi_{s'} = 0$$

и граничные условия

$$\sum_{s'} M_{ss'} \left(i\nabla + \frac{2e}{\hbar c}\mathbf{A} \right)^2 \Psi_{s'} \mathbf{n} = 0.$$

Полученная система уравнений может приводить к нескольким нетривиальным решениям, которые могут отличаться, например, относительной фазой компонент параметра порядка. Эти минимумы полностью определяются соотношением между элементами матриц $A_{ss'}$, $B_{ss'tt'}$ и $M_{ss'}$, как, например, рассмотрено в [6].

С другой стороны, возникновение одного из упорядоченных состояний можно описать обычным разложением свободной энергии по четным степеням данного параметра порядка: $f = a_1\psi^2 + \frac{1}{2}b_1\psi^4$. Другое упорядоченное состояние может быть описано аналогично $f = a_2\alpha^2 + \frac{1}{2}b_2\alpha^4$. Здесь коэффициенты a_i определяют температуру перехода из основного состояния в упорядоченное, аналогично коэффициенту α в (1). Конкуренция двух упорядоченных состояний приводит к ненулевому значению градиентного вклада, что приводит к появлению дополнительного слагаемого $b_{12}\psi^2\alpha^2$. Таким образом, функционал, описывающий сосуществование и конкуренцию двух упорядоченных состояний можно описать в виде:

$$f = a_1\psi^2 + a_2\alpha^2 + \frac{1}{2}b_1\psi^4 + \frac{1}{2}b_2\alpha^4 + b_{12}\psi^2\alpha^2. \quad (3)$$

Коэффициенты a_1 и a_2 можно записать в виде:

$$a_1 = -a'\,\tau', a_2 = -a''\,\tau'', \tau' = \frac{T_1 - T}{T_1}, \tau'' = \frac{T_2 - T}{T_2}.$$

Здесь T_1 и T_2 — температуры переходов в соответствующие упорядоченные состояния, ниже которых могут быть отличны от нуля параметры порядка ψ и α.

Приведенное выше разложение имеет смысл лишь в окрестности малой области фазовой диаграммы, где линии графиков и либо пересекаются, либо проходят близко друг к другу.

В более общем случае многокомпонетного параметра порядка можно говорить о формулах, аналогичных (3), которые задают появление различных видов упорядоченного состояния и их сосуществование и конкуренцию.

Обсуждение

Рассмотрим, к чему может приводить функционал с двухкомпонентным параметром порядка, аналогичный (3). Для этого исследуем его на наличие минимумов и проследим изменение топологии изолиний свободной энергии. На рис. 1 показаны изолинии свободной энергии (3) $f(\psi, \alpha) = const$.

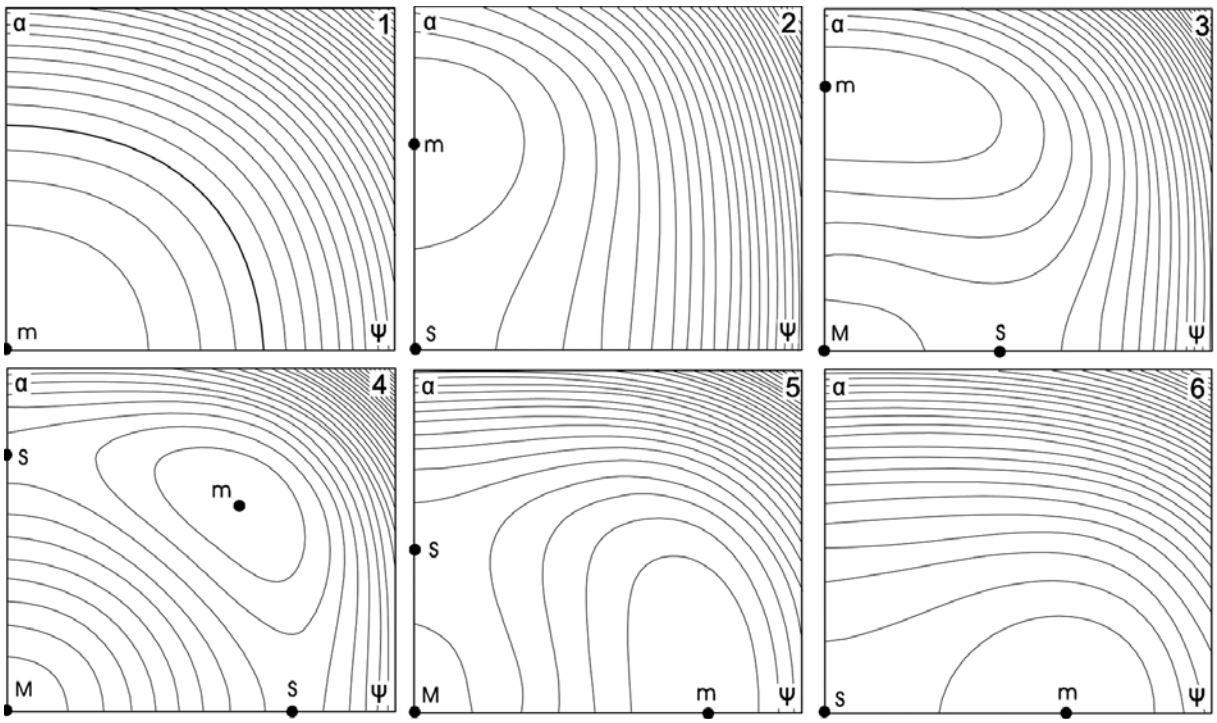


Рис. 1. Топология изолиний свободной энергии в координатах ψ (горизонтальная ось) и α (вертикальная ось) показывающие возможные состояния на фазовой диаграмме:
1 — нормальная фаза; 2 — α-фаза; 3 — α-фаза с флуктуациями -фазы;
4 — сосуществование α и ψ фаз; 5 — ψ-фаза с флуктуациями α-фазы;
6 — ψ-фаза. Жирными точками показаны
максимумы — M, минимумы — m и седла свободной энергии — S.

В нормальной фазе при $T > T_1$ и $T > T_2$, свободная энергия имеет минимум при $\psi = 0$, $\alpha = 0$ (рис. 1, вставка 1, рис. 2, область 2c1′ отмеченная символом *N*), который при переходе в область с $T < T_2$ и $T > T_1$ в -фазу смещается по оси α в точку $\psi = 0$, $\alpha = \sqrt{\left(-\frac{a_2}{b_2}\right)}$ (рис. 1 вставка 2, рис. 2 область 2c1, отмеченная цифрой 1). Этот минимум, однако, является единственной особой точкой свободной энергии не во всей области существования -фазы, а лишь в ее верхней части. При переходе через линию $T < T_1$ к минимуму, определяющему термодинамически устойчивое -состояние, добавляется седловая точка при $\psi = -a_1/b_1$, $\alpha = 0$, в которой свободная энергия имеет минимум по переменной ψ при $\alpha = 0$ (рис. 1 вставка 3, рис. 2 заштрихованная область 1c3).

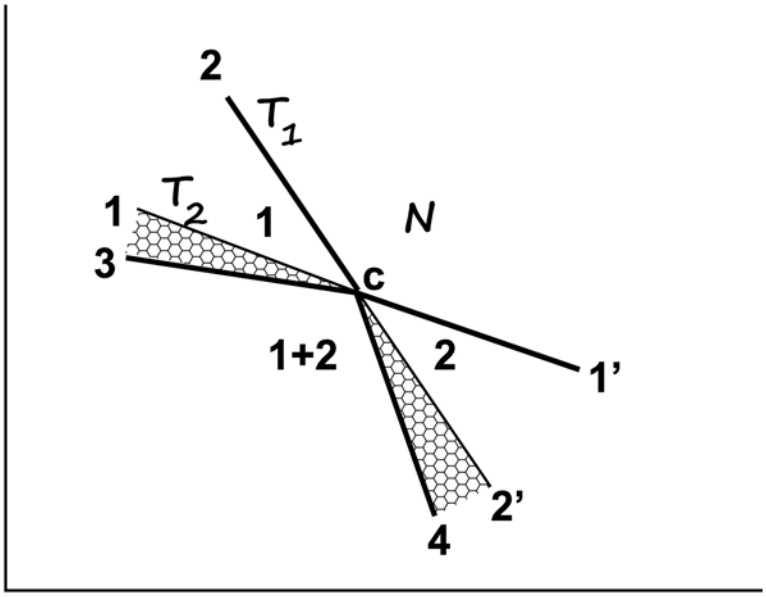


Рис. 2. Фрагмент фазовой диаграммы состояния твердого тела в окрестности линий перехода. Здесь линия $2-2'$ и $1-1'$ определяют границы возможного возникновения упорядоченного состояния, отмечены фазы: N — нормальное состояние без упорядочения, 1 – α-фаза, 2 – ψ-фаза, $1+2$ — сосуществование α и ψ фазы. Заштрихованные области соответствуют развитым флуктуациям одной фазы при наличии другой. Жирными линиями показаны линии фазовых переходов.

С другой стороны, при переходе из нормального состояния в область с $T > T_2$ и $T < T_1$ в -фазу, минимум смещается по оси ψ в точку $\alpha = 0$, $\psi = \sqrt{\left(-\frac{a_1}{b_1}\right)}$ (рис. 1 вставка 6, рис. 2 область , отмеченная цифрой). Этот минимум также дополняется седловой точкой с координатами $\alpha = \sqrt{\left(-\frac{a_2}{b_2}\right)}$ и $\psi = 0$ ри переходе через линию $T < T_2$ (рис. 1 вставка 5, заштрихованная область 2′c4 на рис. 2). Наконец, на фазовой диаграмме можно обнаружить область в которой будут сосуществовать α и ψ фазы (рис. 1 вставка 4, область 3c4, обозначенная $1+2$ на рис. 2).

При этом оказывается, что фазовый переход происходит не при температурах T_1 и T_2. Указанные температуры показывают границы возможного возникновения упорядоченного состояния, и в областях конкуренции фаз (рис. 1 вкладки 3 и 5) определяют области развитых флуктуаций конкуренции имевшейся фазы с появляющимся порядком. Фазовый переход в область сосуществования происходит при более низкой температуре (линии и на рис. 2) и характеризуется топологией изолиний свободной энергии как на рис. 1 вкладке 4. Стоит отметить, что в точке на рис. 2 сходятся области 4 различных фаз состояния вещества.

Заключение

Таким образом, использование теории фазовых переходов второго рода в качестве основы феноменологического рассмотрения конкурирующих и сосуществующих фаз при выборе соответствующего параметра порядка, который может быть получен из микроскопического описания состояния вещества, позволяет на качественном уровне описывать экспериментально наблюдаемые состояния материи. Феноменологический подход оказывается проще, чем микроскопическое описание, однако не позволяет определить те механизмы, которые приводят к возникновению упорядочения в системе.

Литература

1. *Ландау, Л.Д.* Теоретическая физика: учеб. пособ. для вузов: В 10 т. Т. IX Статистическая физика. Ч. 2. Теория конденсированного состояния. / Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. — 4-е изд., исправл. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002. — 496 с.

2. *Шмидт, В.В.* Введение в физику сверхпроводников: современные лекционные курсы /В.В. Шмидт. — 2-е изд., испр. и доп. В.В. Рязановым, М.В. Фейгельманом. — М.: МЦНМО, 2000. — 397 с.

3. *Минеев, В.П.* Введение в теорию необычной сверхпроводимости / В.П. Минеев, К.В. Самохин — М.: Изд-во МФТИ, 1998. — 144 с.

4. *Белявский В.И.* Сверхпроводимость отталкивающихся частиц / В.И. Белявский, Ю.В. Копаев //УФН. — 2006. — Т. 176. — С. 457-485.

5. *Белявский В.И.* Тетракритическая точка и токовые циркуляции в сверхпроводящем состоянии / В.И. Белявский, Ю.В. Копаев, М.Ю. Смирнов // ЖЭТФ. — 2005. — Т. 128, № 3. — С. 525-543.

6. *Belyavsky V.I.* Interplay of the superconducting state and orbital antiferromagnetic state of the high-temperature cuprate superconductors / V.I. Belyavsky, Yu.V. Kopaev, and M.Yu. Smirnov // Phys.Rev. B. — 2005. — Т. 72. — С. 1-4.

PHENOMENOLOGICAL APPROACH TO THE DESCRIPTION OF PHASE TRANSITIONS IN SOLID BODIES

M.Yu. Smirnov[1], V.S. Ziyautdinov[2], M.E. Zemtsova[3], K.A. Bogonosov[4]

[1-3] *Moscow State University of Technology and Management named after K.G. Razumovsky (PKU) Lipetsk Cossack Institute of Technology and Management (branch)*
[4] *Moscow State University of Technology and Management named after K.G. Razumovsky (PKU)*
E-mail: m_u_smirnov@mail.ru

Received 13.10.2022

The general approaches to the problem of describing the competition and the coexistence of various phases of the condensed state of matter based on the Landau theory of phase transitions of the second kind are considered. It is shown that the multicomponent order parameter leads to a more complex picture of phase transitions and the appearance of areas in the phase diagram in which various spatially ordered states can compete or coexist. The boundaries of the applicability of the considered approach, i.e., the proximity to the boundary of the phase transition, form an area in which it is sufficient to have the first two terms of the expansion of the free energy in powers of the order parameter.

Keywords: phase transition of the second kind, order parameter, phenomenological approach, competition and coexistence of phases.

ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНДЕНСАЦИИ ВЕЩЕСТВА В НАНОСОСУДЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПАРНОГО ПОТЕНЦИАЛА МЕЖАТОМНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Н.И. Петров, Т.Л. Антонова, М.Э. Суняева

Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева;
E-mail: nik_petrov@mail.ru, antonova.t.l@muctr.ru, mursidasunaeva@gmail.com

Поступила 15.12.2022

В статье рассмотрены особенности имитационного моделирования конденсации вещества в нанососуде с использованием парного потенциала межатомного взаимодействия. В качестве потенциалов использовались потенциалы Морзе и Леонарда-Джонса. В работе также применялся численный способ определения состояния вещества посредством отслеживания расстояний между парами фиксированных атомов.
Ключевые слова: моделирование, атомы, расстояние, нанососуд, потенциал, взаимодействие, частицы.

УДК 538.9
DOI: 10/31145/2224-8412-2022-22-2-14-22

Введение

В настоящее время теоретические исследования как термодинамических свойств, так и кинетических процессов многих тел проводятся в основном на основе статистической механики в рамках нерелятивистского приближения. В этом приближении взаимодействие между частицами задается с помощью потенциальной энергии, которая зависит от мгновенной конфигурации системы. Тогда система, состоящая из конечного числа частиц, имеет конечное число степеней свободы. Микроскопическая динамика такой системы

описывается детерминированными уравнениями классической механики, в рамках которой нет разницы между прошлым и будущим [1]. Однако такая картина в корне противоречит реальному термодинамическому поведению систем и поэтому не может служить убедительной основой для термодинамики и кинетики.

В данном контексте особого внимания заслуживает метод моделирования реакции на основе частиц. При таком подходе интересующие молекулярные виды моделируются как отдельные частицы, которые переносятся с помощью стохастической динамики (обычно броуновского движения) в непрерывном пространстве и вступают в реакции при выполнении определенных критериев [2].

На сегодняшний день метод частиц в исследованиях структуры и свойств веществ достаточно распространен и перспективен в связи со стремительным ростом вычислительной мощности современных компьютеров. Существующие программные инструменты моделируют частицы и их взаимодействия (друг с другом и окружающей средой) на разных уровнях детализации. Это позволяет их применять к различным областям физических, химических и биологических исследований.

В тоже время, моделирование поведения отдельных атомов большого макроскопического объема вещества сталкивается с определенными трудностями, особенно если взаимодействие необходимо описывать сложными функциональными зависимостями, приближенными к реальному взаимодействию [3]. Поэтому для корректного количественного описания динамики системы взаимодействующих частиц в рамках классического релятивистского подхода целесообразно проводить моделирование малых микроскопических объемов порядка микро- и нанометров, которые соответственно содержат в себе незначительное количество частиц (около тысячи), что позволит более точно описывать как их динамику, так и эволюцию поля, через которое взаимодействуют эти частицы.

Таким образом, задачи полевого теоретического описания динамики системы, состоящей из нейтральных частиц (атомов) в нанососуде вызывают определенный интерес в научно-экспертной среде, что и обуславливает выбор темы данной статьи.

Инструменты моделирования динамики частиц в непрерывном пространстве рассматривают в своих работах Воронин М.Э., Гаврилова Н.Н., Кольцова Э.М., Коринчук Д.Н., Снежкин Ю.Ф., Wang, G.; Fu, X.; Ebersohn, Frans H.; Sheehan, J.P.; Gallimore, Alec D.

Вопросы кинетического моделирования определяющих соотношений для движения частиц в потоках с малой и средней концентрацией детально изучают Мизонов В.Е., Митрофанов А.В., Панюшкин И.С., Ревизников Д.Л., Сухарев Т.Ю., Hinz, Denis F.; Kim, Tae-Yeon; Fried, Eliot.

Исследованию моментных моделей высокого порядка для ламинарных многофазных течений с точным пересечением потока частиц посвятили свои труды Акулова М.В., Огурцов В.А., Алешина А.П., Просвирнин В.И., Масюткин Е.П., Riley, M.; Pinkney, S.; Blackburn, S.; Rowson, N.A.

Однако, несмотря на имеющиеся труды и наработки, ряд вопросов, связанных с особенностями и алгоритмами использования метода кинетического моделирования, остается открытым. В частности, особого внимания заслуживает проблематика численного моделирования рассеивания частиц с использованием молекулярно — кинетической модели. Также в более глубокой проработке нуждаются методы пространственного распределения кинетической энергии среды, основанные на позитронно-эмиссионном отслеживании частиц.

Таким образом, с учетом вышеизложенного, цель статьи заключается в рассмотрении особенностей моделирования конденсации вещества в нанососуде с использованием парного потенциала межатомного взаимодействия.

Методика эксперимента. Для достижения поставленной цели формализуем задачу взаимодействия многих тел, которая может быть решена упрощенным путем (алгоритм типа Верле): в начале очередной *i*-той итерации для каждой *j*-той частицы вычисляется суммарная сила $\vec{F}_{i,j}$, которая действовала на данную частицу со всех сторон, а движение в течение следующего промежутка времени считается равноизменным (т.е. равнодействующая сила принимается в виде постоянной):

$$\vec{F}_{i,j} = \sum_{j \neq k} \vec{F}_i(\vec{r}_{i,j}, \vec{r}_{i,k}), \vec{a}_{i,j} = \frac{\vec{F}_{i,j}}{m_j}$$

$$\vec{r}_{i+1,j} = \vec{r}_{i,j} + \vec{V}_{i,j}t + \frac{\vec{a}_{i,j}t^2}{2}$$

$$\vec{V}_{i+1,j} = \vec{V}_{i,j} + \vec{a}_{i,j}t$$

где $r_{i,k} = |\vec{r}_{i,j} - \vec{r}_{i,k}|$ — расстояние между центрами *j*-того и *k*-того атомов;

V_{ij} — скалярная потенциальная функция;

t — время;

a — равновесное расстояние между центрами атомов.

Для описания динамики системы нейтральных частиц в терминах классической теории поля введем вспомогательное скалярное поле $\varphi(r;t)$, которое в статическом случае (т.е. в случае покоящихся частиц) эквивалентно центральному межатомному потенциалу $v(r)$, а в динамическом случае позволяет описать динамику системы атомов в терминах релятивистской клас-

сической теории поля. Предположим, что межатомный потенциал для частиц в состоянии покоя допускает преобразование Фурье [4]:

$$v(r) = \int \frac{dk}{(2\pi)^3} v(k) e^{-ikr}$$

Обозначим $f(x)$ как произвольную функцию одной переменной x и применим соответствующий оператор $f(\Delta)$ (Δ — оператор Лапласа) к функции $v(r)$:

$$f(\Delta)\{v(r)\} = \int \frac{dk}{(2\pi)^3} f(-k^2) v(k) e^{-ikr}$$

где $k = |k|$.

Найдем явный вид функции $f(x)$ из условия (случай точечного источника поля):

$$f(\Delta)\{v(r)\} = \delta(r)$$

Из этого следует, что:

$$f(-k^2) = \frac{1}{v(k)}$$

Это соотношение устанавливает связь между преобразованием Фурье статического потенциала $v(k)$ и дифференциальным уравнением, которое описывает соответствующее статическое поле. В частности, из преобразований Фурье потенциала Кулона $v_1(k) = \frac{4\pi}{k^2}$ и Юкавы $v_2(k) = \frac{4\pi}{k^2+\mu^2}$ следуют уравнение Пуассона и статическое уравнение Клейна-Гордона соответственно [5].

На следующем этапе необходимо формализовать континуально-подобные уравнения, вычислив эволюцию микроскопических величин, как это обычно делается в кинетической теории. Эти микроскопические величины являются моментами скорости $f(x,v,t)$. Поле средней скорости $u(x,t)$ и температура $T(x, t)$ определяются следующим образом соответственно [6]:

$$\rho u = \int_{\mathbb{R}^d} v f(x, v, t) dv$$

$$d\rho T = \int_{\mathbb{R}^d} |v - u|^2 f dv$$

Уравнение непрерывности будет иметь такой вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + div(\rho u) = 0$$

В рамках классической статистической механики можно использовать только стабильные межатомные потенциалы. В терминах преобразования Фурье это условие имеет вид следующий вид:

$$v(k) > 0$$

для всех значений k.

Рассмотрим класс центральных межатомных потенциалов $v(r)$, для которых преобразование Фурье $v(r)$ удовлетворяет выше обозначенному условию устойчивости.

Если $v(r)$ — рациональная функция от k^2, то она имеет вид [7]:

$$v(k) = \frac{Q_m(k)}{P_n(k)}, \quad (m < n)$$

где $Q_m(k)$ и $P_n(k)$ — многочлены степени $2m$ и $2n$ соответственно:

$$P_n(k) = \sum_{s=0}^{n} C_s k^{2s} \qquad Q_m(k) = \sum_{s=0}^{m} D_s k^{2s}$$

где C_s, D_s — вещественные коэффициенты.

Учитывая вышеизложенное, для проводимого исследования будем применять в качестве потенциала межатомного взаимодействия потенциалы Леонарда-Джонса и Морзе. Для более точных расчетов с небольшим количеством частиц используем потенциал Морзе, поскольку он был разработан для описания взаимодействий двух тел. Другими словами потенциал Морзе позволяет отображать растяжения и сжатия ковалентных связей, соединяющих два атома.

В то же время при оценочном моделировании с большим количеством частиц целесообразным является применение потенциала Леонарда-Джонса, ввиду его меньшей вычислительной сложности (два возведения в степень вместо вычисления двух экспонент). При этом выражение для силы межатомного взаимодействия приобретает вид следующий вид [8]:

$$f(r_{j,k}) = \frac{12N}{a}\left(\left(\frac{a}{r_{j,k}}\right)^{13} - \left(\frac{a}{r_{j,k}}\right)^{7}\right)$$

где $r_{i,k} = |\vec{r}_{i,j} - \vec{r}_{i,k}|$ — расстояние между центрами *j*-того и *k*-того атомов;

N — энергия диссоциации;

a — равновесное расстояние между центрами атомов.

Поскольку суммарная сила, действовавшая на частицу со всех сторон, сравнительно быстро спадает с увеличением расстояния, то частицы, расположенные на расстоянии большем r0=3a (радиус обрезания), считались не взаимодействующими.

Обсуждение результатов. Моделирование начиналось с определения исходных условий, то есть координат и скоростей каждой частицы в программном обеспечении eGFRD. В этой программе предусмотрено пять режимов для начальных условий (также присутствует возможность дальнейшего дополнения): по одному режиму для газовой и жидкой фазы, а также три для твердой (при отсутствии деформации; при одноосной деформации; при деформации сгиба для улучшения микроструктуры металла, а именно, уменьшения размера зерен, если выполняется условие достаточной интенсивности).

В газовой фазе координаты частиц задавались по всему объему генератором случайных чисел (с равномерным распределением), причем расстояние между каждой парой частиц выбиралось так, чтобы оно не было меньше радиуса частицы и чтобы они не накладывались, учитывая малую сжимаемость атомов. Таким образом, в исходном состоянии система уже обладала определенной (не экстремальной) потенциальной энергией. Модули скоростей частиц задавались в соответствии с распределением Максвелла для данной температуры. Полученный модуль скорости с помощью двух случайных чисел — углов сферической системы координат φ и θ — проектировался на три декартовых оси путем умножения на соответствующие направляющие косинусы. Таким образом, направление скорости избиралось в соответствии с равномерным распределением по всем трем координатам:

$$\varphi = random(0,359)^{0};\ \theta = random(-90,90)^{0};$$

$$\cos\alpha = \sin\theta\cos\varphi;\ \cos\beta = \sin\theta\sin\varphi;\ \cos\gamma = \cos\theta$$

$$Vx = V\cos\alpha;\ Vy - V\cos\beta;\ Vz = V\cos\gamma$$

где функция *random*(*a, b*) дает целое случайное число из заданного диапазона, включая границы (используется равномерное распределение).

Итак, было проведено моделирование газовой фазы для нанообласти с характерным размером около 300 Å. Для получения реально допустимых плотностей (порядка сотен кг/м^3) число атомов алюминия бралось равным 500. Шаг расчетов по времени устанавливался на Δt=10–15 с, это минимум,

который необходим для выполнения закона сохранения энергии в течение длительного периода времени, также данная величина достаточна для того, чтобы наблюдать за процессом конденсации. При больших значениях Δt быстро накапливается погрешность, связанная с тем, что при переходе на отталкивание функция взаимодействия двух атомов возрастает значительно быстрее, чем до этого происходило притяжение, и на каждом шаге результирующая сила считается постоянной (равной значению до начала шага).

В результате моделирования получены следующие результаты:

- при задании большой температуры T_0 (порядка тысяч градусов) движение атомов сохраняется в течение сколь угодно долгого промежутка времени хаотическим (рис. 1а — начальное распределение атомов);
- при уменьшении температуры T_0 появляется все больше атомов, образовавших группы, которые при взаимодействии с другими атомами могут распадаться (рис. 1б — через 10 пс);
- при достаточно малых температурах T_0 начинается конденсация атомов в большие комплексы, которые можно назвать позже твердеющими капельками (рис. 1в — через 1 нс, стойкая картина без изменений).

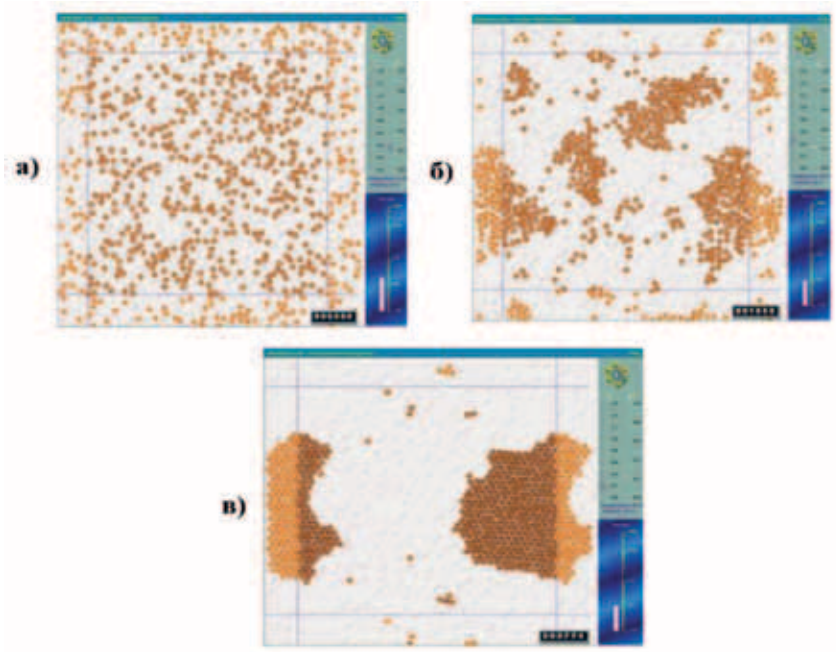


Рис. 1 Конденсация и кристаллизация газовой фазы (500 частиц) при низкой наружной температуре (100 К)

Сначала в капельках существует ближний порядок, атомы некоторое время граничат друг с другом как соседи, затем могут меняться местами с другими атомами (что, согласно модели, происходит плавным образом). В зависимости от температуры капли могут оставаться устойчивыми, а могут

распадаться на части (меньшие капли), которые спустя некоторое время снова сливаются.

Также следует отметить, что в капельках существует распределение атомов по скоростям и потому некоторые из них вылетают наружу, покидая капли (в одиночку). В каплях и в твердом состоянии также существует устойчивое распределение, близкое к Максвелловскому — рис. 2.

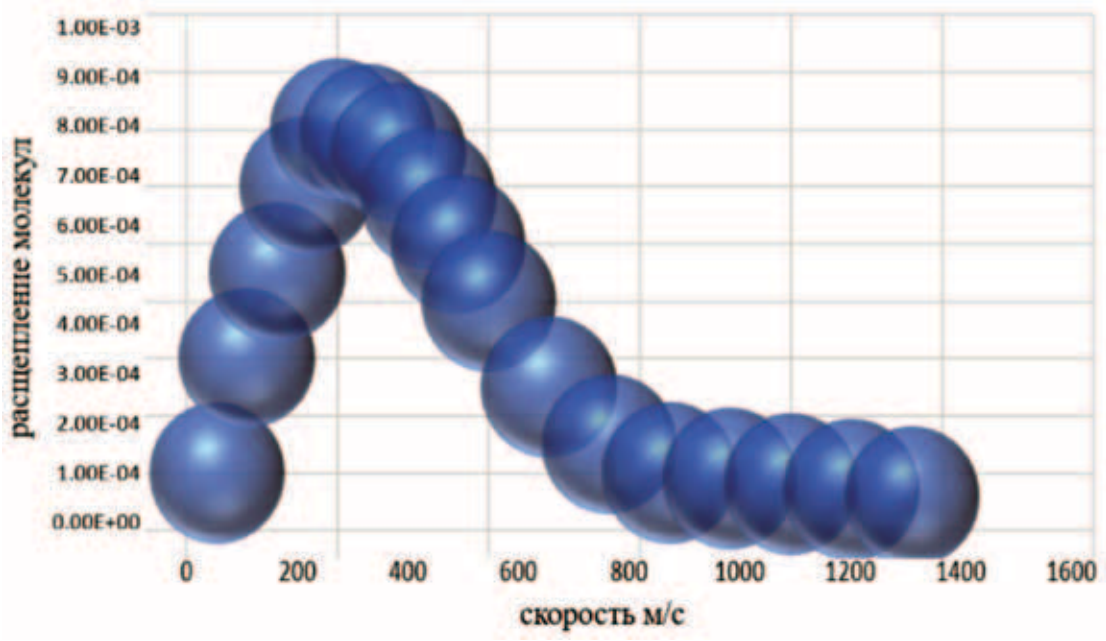


Рис. 2 Характер распределения атомов по мгновенным скоростям в твердой фазе, усредненный по времени (1 нс)

При дальнейшем уменьшении температуры можно было наблюдать кристаллизацию вещества, вследствие чего образуются комплексы с дальним порядком, которые свободно перемещаются по объему сосуда — нанокристаллы.

Заключение. В рамках исследования с использованием программного обеспечения eGFRD проведено имитационное моделирование процесса взаимодействия частиц алюминия на основе двухчастных потенциалов Морзе и Леонарда-Джонса. Этот эксперимент позволил проследить фазовые переходы вещества при изменении температуры.

По результатам исследования было установлено, что при низких температурах происходит кристаллизация частиц в твердую фазу, при средних — конденсация в жидкую фазу, а при высоких вещество находится в газообразном состоянии. Полученные результаты полностью соответствуют реальным физическим процессам.

Литература:

1. *Товбин Ю.К.* Кинетические уравнения физико-химических процессов с учетом влияния многочастичных эффектов в модели решеточного газа // Журнал физической химии. 2022. Т. 96. № 2. С. 189-204.
2. Hoque, Mohammad Mainul Numerical estimation of critical local energy dissipation rate for particle detachment from a bubble-particle aggregate captured within a confined vortex // Minerals engineering. 2022. Volume 180; pp 34-41.
3. Shi, Rongpei Towards understanding particle rigid-body motion during solid-state sintering // Journal of the European Ceramic Society. 2021. Volume 41: Number 16; pp 211-231.
4. Space charge physics for particle accelerators / Ingo Hofmann. Cham, Switzerland: Springer, 2017. 187 p.
5. Ebersohn, Frans H. Kinetic simulation technique for plasma flow in strong external magnetic field // Journal of computational physics. 2017. Volume 351; pp 358-375.
6. Filimonova O.N., Vikulin A.S., Enyutina M.V., Ivanov A.V. Inlet temperature influence on isothermal gas cleaning from mono-impurities by fixed layer of adsorbent // ChemChemTech. 2020. Т. 63. № 9. С. 88-92.
7. Forgues, François Higher-order moment models for laminar multiphase flows with accurate particle-stream crossing // International journal of multiphase flow. 2019. Volume 114; pp 28-38.
8. Active particles. Advances in theory, models, and applications / Nicola Bellomo, Pierre Degond, Eitan Tadmor. Cham: Birkhäuser, 2019. 287 p.

SIMULATION MODELING OF MATTER CONDENSATION IN A NANOVESSEL USING THE PAIRED INTERATOMIC INTERACTION POTENTIAL

N.I. Petrov, T.L. Antonova, M.I. Sunyaeva

D.I. Mendeleev Russian university of chemical technology,
Moscow, Russian Federation
E-mail: nik_petrov@mail.ru, antonova.t.l@muctr.ru, mursidasunaeva@gmail.com

Received 15.12.2022

The paper considers the peculiarities of simulation of condensation of matter in a nanos vessel using the paired potential of interatomic interaction. Morse and Leonard-Jones potentials were used as potentials. The method of determining the state of matter numerically by tracking the distances between pairs of fixed atoms was used.
Keywords: simulation, atoms, distance, nanoship, potential, interaction, particles.

ПЕРЕСТРОЙКА РЕЗОНАНСНЫХ ТУННЕЛЬНЫХ УРОВНЕЙ В СВЯЗАННЫХ КВАНТОВО-РАЗМЕРНЫХ ЯЧЕЙКАХ

В.Ф. Дегтярев

Московский технический университет связи и информатики, Москва, Россия
E-mail: vfsteel2008@gmail.com

Поступила 22.12.2022

Исследован процесс перестройки резонансных туннельных уровней в связанных квантово-размерных ячейках. Установлено, что взаимодействие между соседними ячейками существенным образом изменяет спектр прозрачности структуры Для частиц с энергией, равной энергии уровней, прозрачность структуры равна единице. Рассмотрены два механизма взаимодействия ячеек. В первом случае связь изменяется за счет изменения толщины барьера между ячейками. Во втором — за счет изменения ширины потенциальной ямы, возникающей при раздвигании звеньев. В этом случае коэффициент связи между ячейками имеет резонансный характер. Предложены схемы и рассмотрен механизм перестройки уровней. Изучена зависимость параметров уровней от коэффициента связи между барьерами.
Ключевые слова: квантовая механика, квантовый барьер, волновая функция, прозрачность, наноэлектроника, резонансное туннелирование.

УДК 537.9
DOI: 10/31145/2224-8412-2022-22-2-23-36

Введение

Резонансное туннелирование в квантово-размерных структурах представляет собой новое быстро развивающееся направление исследований в наноэлектронике. Особенно ярко эти эффекты проявляются в сверхрешетках, содержащих большое число элементарных ячеек. Описанию свойств сверхрешеток посвящен ряд обзоров, например [1-3]. В этих работах достаточно подробно рассмотрена их энергетическая структура, оптические и электрические свойства.

В современных наноэлектронных приборах (резонансных туннельных диодах и транзисторах и др.) активная область имеет размеры порядка нескольких нанометров. Эта величина сравнима с длиной волны электрона и межатомным расстоянием типичных полупроводников, что приводит к существенному влиянию квантово-размерных эффектов на их работу. Среди этих эффектов значительную роль играют резонансные явления при туннелировании. Полупроводниковые квантово-размерные структуры, в частности гетероструктуры с квантовыми ямами (КЯ) и барьерами (КБ), занимают лидирующие позиции в качестве материалов для опто- и наноэлектроники [1].

Размерное квантование приводит к значительной перестройке энергетического спектра наноструктур [4,5]. При этом в квантово-размерных цепочках возникают новые резонансные уровни, приводящие к существенному изменению их электрических и оптических свойств. Все вышеперечисленные свойства относятся к длинным цепочкам, содержащим десятки и сотни ячеек. К сожалению, начальный этап образования сверхрешетки, когда образуются первые звенья решетки исследован недостаточно.

В данной работе изучено взаимодействие двух связанных между собой ячеек и обусловленная этим перестройка спектров прозрачности и волновых функций. Изменение коэффициента связи происходит либо за счет изменения толщины барьера между ячейками, либо за счет изменения ширины потенциальной ямы между ними.

Модели структур, изучаемые в работе, и методика моделирования.

В настоящей работе нахождение волновых функций и коэффициентов прозрачности системы барьеров проводилось путем непосредственного решения уравнения Шредингера для заданного потенциала с соответствующими граничными условиями в системе компьютерной алгебры MAPLE. Системы компьютерной алгебры помимо численного решения поставленной задачи во многих случаях позволяют получить и аналитическое решение, что делает расчеты более наглядными, и позволяет не только построить теоретическую модель физического процесса, но и визуализировать полученные результаты. В работе рассмотрена система из двух связанных ячеек, для которых изучена зависимость спектров прозрачности и волновых функций от характера взаимодействия между ними. Высота барьеров принималась равной 2 эВ, ширина потенциальных ям — 1нм, ширина барьеров варьировалась в пределах от 0 до 10 нм. Амплитуда падающей волны принималась равной единице ($\Psi_{in}(x) = 1 \cdot e^{ikx}$). Энергия налетающих электронов при компьютерном моделировании изменялась в пределах от 0 до 5 эВ.

Параметры резонансных туннельных уровней (РТУ) в одиночном звене

В рассматриваемой структуре в качестве элементарного звена принималась двухбарьерная квантовая структура (**ДБКС**), показанная на рис. 1. Рассмотрен случай, когда энергия частицы меньше высоты барьера. Резонансные уровни и волновые функции для этого случая показаны на рисунке. Основные результаты компьютерного моделирования перечислены ниже.

В элементарном звене, также как и в потенциальной яме конечной глубины (толщина стенок которой считается бесконечно большой) при $E < U$ образуется система резонансно-туннельных уровней (**РТУ**) [7]. Прозрачность структуры для частиц с такой энергией равна единице.

В рассматриваемой структуре число таких уровней равно трем (рис. 1). Как показывают расчеты, их энергетическое положение следующее: $E_{01} = 0.228949$ эВ, $E_{02} = 0.887202$ эВ и $E_{03} = 1.818140$ эВ. Энергия этих пиков соответствует положению энергетических уровней в яме такой же ширины и глубины, что неудивительно при малой прозрачности барьеров, разделяющих ячейки. Это легко понять, если учесть, что оба типа пиков соответствуют условию, что на ширине ямы умещается одинаковое число полуволн.

Рис. 1. Схема элементарного звена и волновые функции в случае, когда на ширине ямы укладывается 1- одна полуволна, 2 — две полуволны, 3 — три полуволны

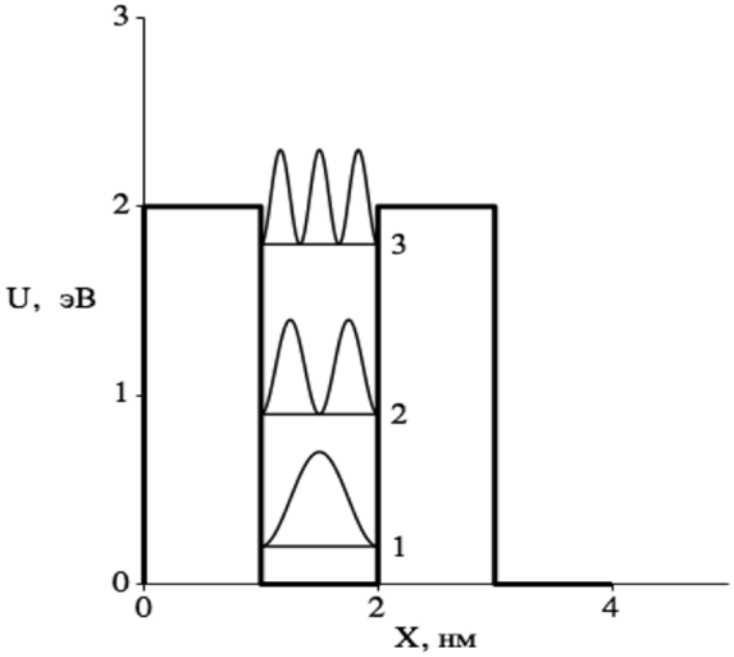


Рис. 1. Схема элементарного звена и волновые функции в случае, когда на ширине ямы укладывается
1 — одна полуволна, 2 — две полуволны, 3 — три полуволны

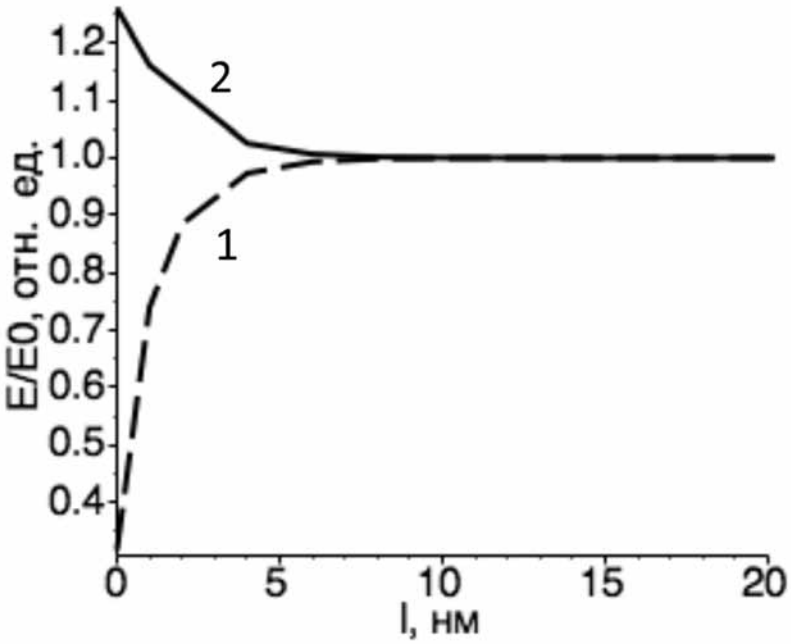


Рис. 2. Зависимость расщепления исходного уровня с энергией 0.228949 эВ от ширины барьера между ячейками.
1 — четная конфигурация волновой функции; 2 — нечетная конфигурация.

Спектр прозрачности двух связанных ячеек

Прозрачность системы из двух ячеек существенным образом зависит от степени связи между звеньями. Регулировать связь ячеек можно, изменяя толщину потенциального барьера между ними. В данной работе толщина барьера изменялась в пределах от 0 до 20 нм. Зависимость прозрачности от толщины барьера между ячейками для различных конфигураций волновой функции приведена на рис. 2. Из рисунка видно, что при толщине барьера > 10 нм ячейки практически не взаимодействуют между собой (уровень 0.228949 эВ оказывается двукратно вырожденным). При уменьшении толщины барьера, разделяющего ячейки, наблюдается расщепление этого уровня на два подуровня. По мере сближения ячеек энергия нижнего уровня уменьшается, а энергия большего — возрастает. Относительная энергия нижнего уровня уменьшается сильнее и при l=0 нм составляет ~0.25 от исходного значения. Увеличение энергии верхнего уровня составляет ~1.25 раза.

Понять влияние взаимодействия ячеек на волновые функции и расщепления уровней можно, используя подход, развитый в [6]. Согласно развитым в [6] представлениям, низший уровень в изолированной ячейке соответствует одной полуволне, укладывающейся на ширине ямы. Аналогичная ситуация и со второй ячейкой. При наличии взаимодействия волновые функции в различных ячейках образуют либо симметричную (когда фазы

колебаний в ячейках одинаковы) или антисимметричную (фазы колебаний противоположны) конфигурацию (рис.3). При слабом взаимодействии разницы между значениями энергии уровней практически нет, что следует из сравнения рисунков 3(А-1 и Б-1) . Это вытекает из равенства средней кинетической ($\sim\left|\frac{d\Psi}{dx}\right|^2$) энергии. При сближении ячеек волновая функция меняет форму. Волновая функция, соответствующая симметричной конфигурации будет давать меньшее значение полной энергии, поскольку для нее среднее значение потенциальной ($\sim U(x)|\Psi|^2$) энергии меньше, чем для нечетной (нет точек смены фаза колебаний).

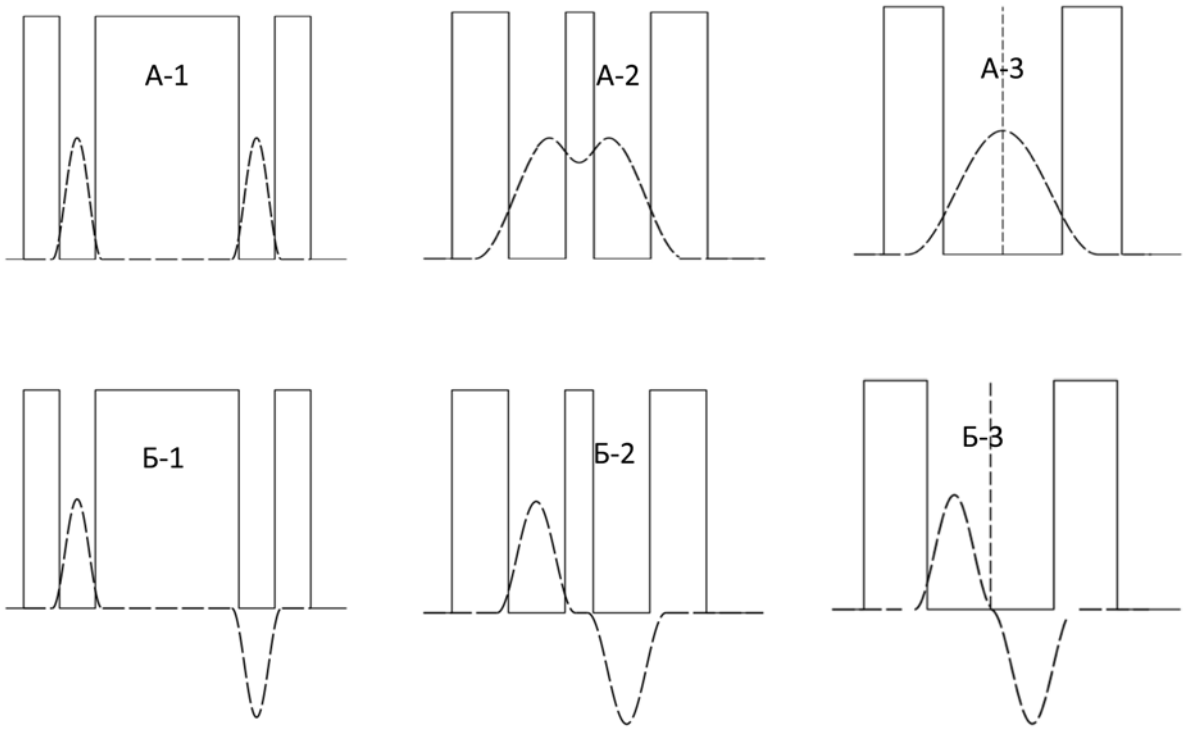


Рис.3. Схема трансформации волновых функций при изменении ширины барьера, разделяющего ячейки.
А — симметричная конфигурация; Б — антисимметричная конфигурация.

Рассмотрим предельный случай, когда ширина барьера равна нулю, т.е. ямы только что соприкоснулись. Ψ-функция симметричного состояния есть не что иное, как волновая функция основного состояния для квантовой ямы шириной 2l (рис. 3(А-3)) . Энергия антисимметричного состояния соответствует второму состоянию в яме шириной 2l (рис. 3(Б-3)). Поскольку в квантовой яме $E\sim\frac{n^2}{l^2}$ (l-ширина рассматриваемой ямы) энергия антисимметричного состояния изменяется слабо, то энергия симметричной волновой функции оказывается примерно в 4 раза меньше энергии антисимметричного состояния, что соответствует рис. 2. Результаты компьютерного моделиро-

вания показывают, что энергии нижнего и верхнего состояний действительно соответствуют первому и второму состояниям в яме удвоенной ширины (0.072483 эВ и 0.288560 эВ) соответственно [4]. При увеличении длины цепочки третье звено взаимодействует с предыдущими аналогичным образом. В результате этого число пиков прозрачности соответствует числу звеньев в цепи. Отметим также, что расщепление уровней во взаимодействующих квантовых ячейках аналогично расщеплению резонансных частот в связанных резонансных контурах [7,8].

Допустим, что определяющим является движение частицы в потенциальной яме внутри ячейки. Тогда внутри ячейки можно считать U=0 и уравнение Шредингера примет вид $\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\Psi = 0$.

Две связанные ячейки можно рассматривать как два осциллятора, связанные емкостной связью. Роль «конденсатора связи» играет барьер, разделяющий ячейки. Тогда получим

$$\begin{cases} \frac{d^2\Psi_1}{dx^2} + k_1^2\Psi_1 - \alpha k_2^2\Psi_2 = 0 \\ \frac{d^2\Psi_2}{dx^2} + k_2^2\Psi_2 - \alpha k_1^2\Psi_1 = 0 \end{cases} \quad (1)$$

Здесь Ψ_1 и Ψ_2, k_1 и k_2 — волновые функции и волновые числа в 1 и 2 ячейках соответственно. α — коэффициент связи ($0 < \alpha < 1$). Такая система будет совершать нормальные колебания с собственными значениями волнового числа $\varkappa$, которые определяются из уравнения

$$(k_1^2 - \varkappa^2)(k_2^2 - \varkappa^2) - \alpha^2 k_1^2 k_2^2 = 0 \quad (2)$$

Если ячейки одинаковы, то $k_1 = k_2 = k_0$ и $\varkappa = k_0\sqrt{1 \pm \alpha}$ (3)

Пусть на первую ячейку падает плоская волна, координатная часть которой имеет вид Fe^{ipx}, где p-волновое число падающей волны, F — амплитуда. Тогда система уравнений приобретает вид

$$\begin{cases} \frac{d^2\Psi_1}{dx^2} + k_1^2\Psi_1 - \alpha k_2^2\Psi_2 = Fe^{ipx} \\ \frac{d^2\Psi_2}{dx^2} + k_2^2\Psi_2 - \alpha k_1^2\Psi_1 = 0 \end{cases} \quad (4)$$

Решение системы (4) следует искать в виде

$$\Psi_1 = \Psi_{10}e^{ipx} \text{ и } \Psi_2 = \Psi_{20}e^{ipx}. \quad (5)$$

Подставляя эти выражения в (4) и сокращая на общие множители, получим

$$\Psi_{10} = \frac{k_2^2 - p^2}{(k_1^2 - p^2)(k_2^2 - p^2) - \alpha^2 k_1^2 k_2^2} F \quad (6)$$

$$\Psi_{20} = \frac{\alpha k_1^2}{(k_1^2 - p^2)(k_2^2 - p^2) - \alpha^2 k_1^2 k_2^2} F \quad (7)$$

Для одинаковых ячеек, что имеет место в рассматриваемом случае, выражения (6) и (7) существенно упрощаются

$$\Psi_{10} = \frac{k_0^2 - p^2}{(k_0^2 - p^2)^2 - \alpha^2 k_0^4} F. \quad (8)$$

$$\Psi_{20} = \frac{\alpha k_0^2}{(k_0^2 - p^2)^2 - \alpha^2 k_0^4} F. \quad (9)$$

Рассматривая выражения для Ψ_{10} и Ψ_{20}, можно отметить, что данные выражения в точках $p^2 = k_0^2(1-\alpha)$ и $p^2 = k_0^2(1+\alpha)$ имеют максимумы, соответствующие резонансным частотам (рис. 4). Из рисунка 4 видно, что в точке $p = k_0$ волновая функция Ψ_{10} обращается в ноль, а Ψ_{20} в знаменателе имеет максимум, что в итоге дает минимальное значение прозрачности системы. Приведенные рассуждения подтверждаются результатами моделирования, где изображены спектры прозрачности (рис.5) и волновые функции в первой и во второй ячейках (рис. 6). Из рис. 5 видно, что при достаточно сильной связи между ячейками в точке $p = k_0$ прозрачность системы действительно имеет минимум.

Рассмотрим отношение $q = \frac{\Psi_1}{\Psi_2} = \frac{k_0^2 - p^2}{\alpha k_0^2}$. (10)

Отсюда видно, что при $p < k_0$ величина $q > 0$ и, следовательно, колебания в первой и второй ячейках происходят синфазно. Волновые функции Ψ_1 и Ψ_2 образуют симметричную конфигурацию. При $p > k_0$ величина $q < 0$ и, следовательно, колебания в первой и второй ячейках происходят в противоположных фазах. Волновые функции Ψ_1 и Ψ_2 образуют при этом антисимметричную конфигурацию (рис. 4). В результате при уменьшении ширины промежуточного барьера энергия первого уровня уменьшается (т.к. колебания в ячейках происходят синфазно), а второго — растет.

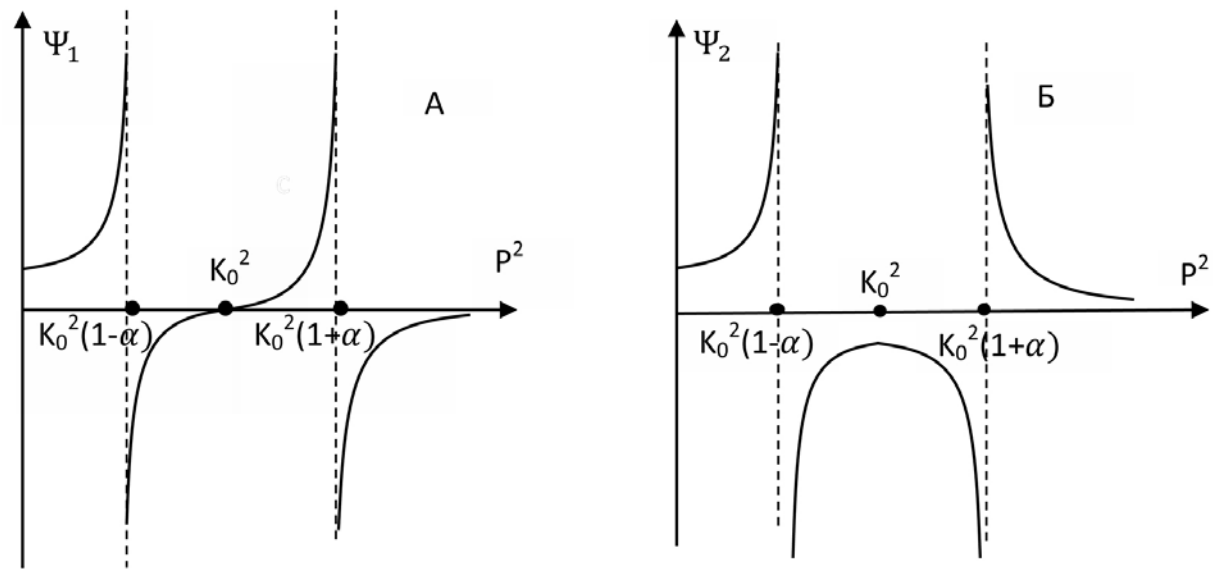


Рис. 4. Схема конфигурации волновой функции в первом (А) и втором (Б) звене. При $p^2 < k_0^2$– симметричная конфигурация; при $p^2 > k_0^2$ — антисимметричная конфигурация. В точках $p^2 = k_0^2(1-\alpha)$ и $p^2 = k_0^2(1+\alpha)$ наблюдается резонанс.

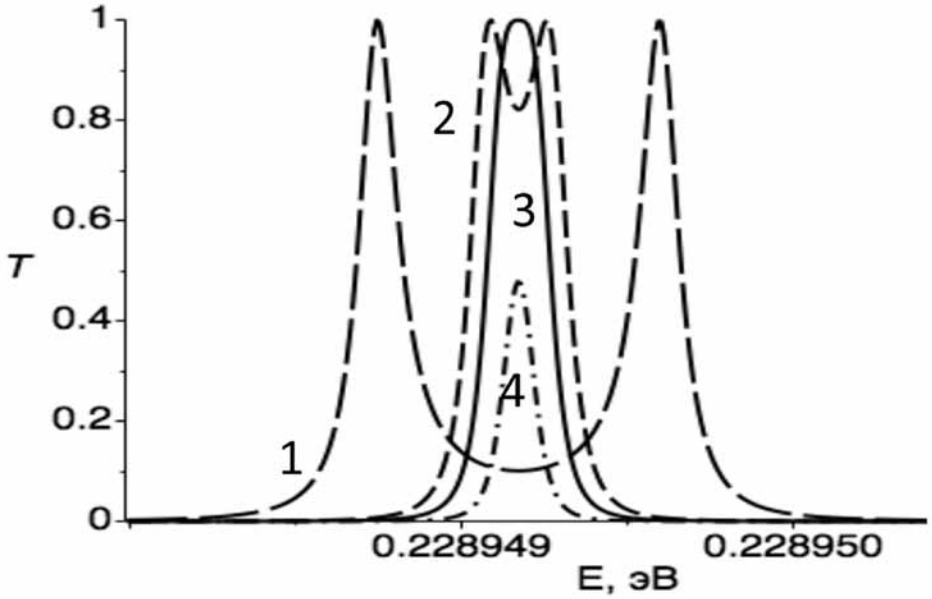


Рис. 5. Зависимость прозрачности системы двух ячеек от толщины барьера между ними 1 — 18 нм, 2 — 20 нм, 3 — 21 нм, 4 — 22 нм.

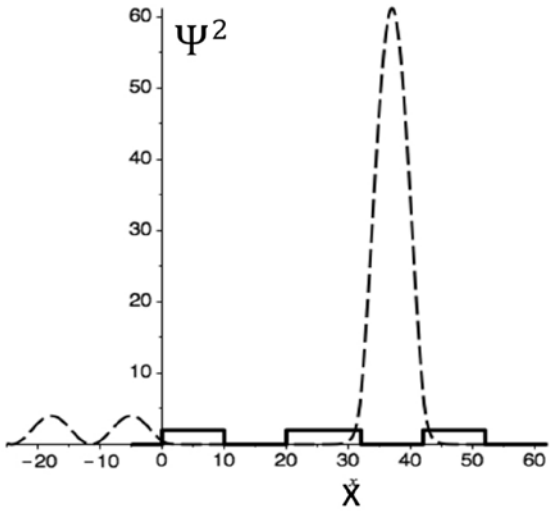


Рис. 6. Волновая функция двух связанных ячеек в случае, когда $p^2 = k_0^2$.

Зависимость расщепления резонансных туннельных уровней связанных ячеек от расстояния между ними.

В предыдущих разделах рассматривалось влияние толщины барьера между ячейками на эффективность связи между ними. Представляет также интерес рассмотреть характер расщепления уровней в зависимости от ширины ямы, возникающей при раздвигании звеньев. Параметры ячеек принимались такими же, как описано выше и показано на рис. 1. В этом случае между звеньями образуется дополнительная яма, ширина которой и определяет коэффициент связи между ячейками. Зависимость расщепления уровней от ширины промежуточной ямы показана на рис. 7.

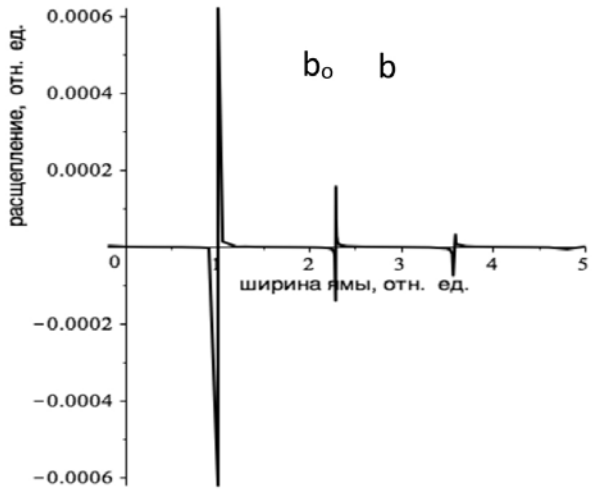


Рис. 7. Зависимость расщепления $(E-E_0) / E_0$ уровней от относительного расстояния b / b_0 между ячейками. b_o — ширина потенциальной ямы в элементарной ячейке (b_o=1 нм). b — ширина ямы между ячейками.

Отметим следующие особенности.

1. Зависимость расщепления от относительного $\frac{b}{b_0}$ расстояния носит резонансный характер. Значительное расщепление наблюдается только при определенной ширине промежуточной ямы.

2. Положение первого резонансного пика расщепления соответствует значению $\frac{b}{b_0} = 1$. Положение последующих пиков определяется соотношением $\frac{b}{b_0} \simeq 1.15 \cdot n$, где $n = 2, 3, 4, \ldots$ Заметим, что при n ≥ 4 взаимодействие между ячейками настолько мало, что при расчетах расщепление уровней не обнаруживается.

Понять отмеченные особенности можно, если учесть, что плоская волна может распространяться в структуре если, ее длина во всех ячейках одна и та же, и при этом в каждой ячейке укладывается целое число полуволн.

В случае $\frac{b}{b_0} = 1$ структура представляет собой систему трех идентичных элементарных ячеек. Взаимодействие между ними наиболее сильное. Поэтому и расщепление уровней оказывается наибольшим.

При увеличении расстояния между ячейками (величина b на рис.7) эта идентичность нарушается. Коэффициент связи между ячейками падает, и величина расщепления уровней уменьшается. При $b = n \cdot b_0$, где n = 2,3,4,.. в средней ячейке уже не умещается целое число полуволн, в результате чего прозрачность системы резко уменьшается. Для того, чтобы условие максимального расщепления было выполнено, необходимо увеличить ширину промежуточной ячейки на длину интервала перекрытия полуволн.

Следующий пик прозрачности наблюдается, если на расстоянии между ячейками размещается три полуволны (четыре полуволны и т.д.). Но, так как внутри промежуточной ямы отдельные полуволны не могут перекрываться, ширина этого промежутка оказывается больше, чем $n \cdot b_0$, n-число полуволн.

Заключение

В работе рассмотрены некоторые особенности взаимодействия квантовых ячеек между собой.

1. Показано, что при образовании квантово-размерной структуры элементарные ячейки, взаимодействуя между собой, образуют систему квантовых туннельных подуровней.
2. Установлено, что с уменьшением толщины барьера между ячейками коэффициент связи увеличивается и возрастает величина расщепления между подуровнями. При этом энергия подуровня с симметричной конфигурацией волновой функции уменьшается, а с антисимметричной — возрастает.

3. Рассмотрена модель взаимодействия квантовых ячеек между собой. Установлено, что характер взаимодействия аналогичен классическому взаимодействию резонансных контуров. На основании рассмотренной модели рассчитаны спектры прозрачности и волновые функции связанных ячеек.
4. Установлено, что, если раздвигать звенья цепочки с образованием промежуточной потенциальной ямы между ними, то коэффициент связи носит резонансный характер. При этом, если на ширине промежуточной ямы укладывается целое число полуволн, расщепление будет максимальным. При других значениях ширины промежуточной ямы прозрачность системы и расщепление подуровней пренебрежимо мало.

В заключение автор считает своим приятным долгом выразить искреннюю благодарность профессору А.П. Жилинскому за постоянный интерес к работе и полезные замечания.

Литература:

1. *Демиховский В. Я, Вугальтер Г. А.* Физика квантовых низкоразмерных структур.// М.: Логос, 2000. 248 с.
2. *Херман М.* Полупроводниковые сверхрешетки.// М., Мир, 1989. , 240 с.
3. *Силин А.П.* Полупроводниковые сверхрешетки.// УФН, т. 47, вып. 3, с. 7, 485-516.
4. *Драгунов В. П., Неизвестный И. Г., Гридчин В. А.* Наноэлектроника, часть 1.//М., «Юрайт», 2019, 285 с.
5. *Аладышкин А. Ю.* Туннельные явления в нанофизике.// Н. Новгород: Нижегород. гос. ун-т., 2011. 32 с.
6. *Лафлин Р.* Квантовая двумерная холловская проводимость. //Квантовый эффект Холла, М., Мир, 1986, 160 с.
7. *Стрелков С.П.* Введение в теорию колебаний.// СПб: Лань, 2005. 440 с.
8. *Демирчян К. С. , Нейман Л. Р, Коровкин Н. В. ,. Чечурин В. Л.* Теоретические основы электротехники, т. 1// СПб, Питер, 2003, 463 с.

RECONSTRUCTION OF RESONANT TUNNEL LEVELS IN COUPLED QUANTUM-SIZE CELLS

V.F. Degtiarev

Moscow Technical University of Communications and Informatics, Moscow, Russia
E-mail:vfsteel2008 @gmail.com

Received 22.12.2022

The process of rearrangement of resonant tunneling levels in coupled quantum-well cells is studied. It is found that the interaction between neighboring cells significantly changes the transparency spectrum of the structure. For particles with an energy equal to the energy of the levels, the transparency of the structure is equal to unity. Two mechanisms of cell interaction are considered. In the first case, the bond is changed by changing the thickness of the barrier between the cells. In the second — due to a change in the width of the potential well that occurs when the links are pulled apart. In this case, the coupling coefficient between cells has a resonant character. Schemes are proposed and the mechanism of level restructuring is considered. The dependence of the level parameters on the coupling coefficient between the barriers has been studied.

Keywords: quantum mechanics, quantum barrier, wave function, transparency, nanoelectronics, resonant tunneling.

АКТУАЛЬНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПРОШЛЫХ ЛЕТ

Продолжение. Начало в предыдущих номерах.

НА ПУТИ К ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ БИОЛОГИИ. I. ПРОЛЕГОМЕНЫ.

Перевод с английского
С.Г. Васецкого

Под редакцией и с предисловием
акад. Б.Л. Астаурова

Издательство «Мир» Москва, 1970.

Предисловие к английскому изданию

Теоретическая физика представляет собой вполне сложившуюся самостоятельную науку, и во многих университетах ею занимаются специальные лаборатории и кафедры. Более того, наши теории о природе окружающего нас материального мира, безусловно, оказывают глубокое влияние на общефилософские концепции. Что же касается теоретической биологии, то едва ли можно сказать, что такая наука уже существует. Трудно сказать, чем она должна заниматься и по каким путям ей следует развиваться; к тому же очень редко случается, что

философы ощущают связь таких биологических проблем, как теория эволюции или восприятие раздражения, с традиционными проблемами философии.

Международный союз биологических наук (МСБН) счел своим долгом, как организация, объединяющая биологов из разных стран, стимулировать создание некоего костяка понятий и методов, на котором могла бы формироваться теоретическая биология. Это совсем не простая задача; поэтому было решено провести три симпозиума на эту тему с годичными интервалами. Эти симпозиумы предполагалось посвятить не обсуждению теоретических основ каких-либо частных биологических процессов, например проницаемости мембран, наследственности, нервной деятельности и т. д., а попыткам выявить и сформулировать основные концепции и логические связи, характеризующие живые системы в отличие от неживых, и рассмотрению вытекающих из них общефилософских представлений.

На меня была возложена обязанность пригласить докладчиков и организовать заседания.

Первый симпозиум проходил с 28 августа по 3 сентября 1966 г. на вилле Сербеллони в Беладжо (озеро Комо). Чтобы создать известную базу для дискуссии и сосредоточить внимание на некоторых проблемах, я разослал участникам симпозиума свои лекции, прочитанные за год до этого в университете Северного Уэльса и нарочито переработанные с тем, чтобы придать им несколько полемический характер. Одновременно были разосланы некоторые комментарии Рене Тома к этим лекциям, а также статья Эрнста Майра.

Заседания на вилле Сербеллони, носившие весьма непринужденный характер и оказавшиеся очень плодотворными, не стенографировались.

В процессе обсуждения внимание было сосредоточено главным образом на проблемах биологической теории, а не на более общих проблемах. Хотя в результате работы симпозиума стали вырисовываться пусть еще не очень четкие, но уже определенные контуры теоретической биологии, было совершенно ясно, что необходимо продолжить обсуждение и обмен мнениями между приверженцами различных точек зрения, прежде чем удастся разработать некое подобие схемы стройной и самостоятельной науки. Поэтому предлагаемая вниманию читателя книга состоит из отдельных статей, написанных после симпозиума в духе проводившегося на нем обсуждения. Они еще не связаны друг с другом в некое единое целое. Именно сознание того, что такого единого целого не существует, что его создание представляет собой длительную и нелегкую задачу, и заставило принять решение провести три симпозиума. Мы надеемся, что на втором симпозиуме будут сделаны дальнейшие шаги на пути к синтезу различных точек зрения. Поэтому этот первый том и получил подзаголовок «Пролегомены».

К. Уоддингтон

НА ПУТИ К ФИЗИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ САМООРГАНИЗАЦИИ

К. КОРНАКЕР
(Массачусетский технологический институт)

Организация, которую мы сейчас представляем себе в виде некоторого ряда структурно-функциональных связей, есть главное свойство всех биологических систем и проявляется на всех уровнях — от молекулярного до социального. Основные вопросы, касающиеся организации— что она собой представляет и как она возникает, — столь же трудны, как и аналогичные вопросы в отношении жизни.

Мой подход к этим вопросам был связан с поисками физического языка, отличного от чисто математического или чисто метафорического языка и пригодного для того, чтобы описывать и объяснять появление организации на *любом уровне*. Этот подход можно, пожалуй, наиболее наглядно продемонстрировать на примере анализа отношений между демоном Максвелла, термодинамическим взаимодействием, «использованием информации» и биологической организацией.

Демон Максвелла представляет собой воображаемое устройство, которое, как полагали, показывает, что второй закон термодинамики неприменим, если известно микроскопическое состояние системы. Демон, который может «видеть» молекулы, способен создавать градиенты концентрации через мембрану с помощью «заслонки», пропускающей молекулы лишь в одном направлении. Если пренебречь увеличением энтропии в демоне, то падение энтропии в окружающей демона среде, по-видимому, будет противоречить второму закону термодинамики. Если же принимать во внимание увеличение энтропии демона, то он просто превращается в модель одного из возможных механизмов термодинамического взаимодействия (компенсирующего изменения энергии в различных частях изолированой системы).

Демон Максвелла «использует информацию», потому что он выполняет задачу, которую он не мог бы выполнить, не имея «сведений» о локальном движении молекул. Поэтому в данном случае можно сказать, что *сила термодинамического взаимодействия определяет меру использования информации*. Поскольку мы хотим использовать сходное определение для описания всех уровней организации, важно показать, что изложенные выше соображения относятся не только к молекулярным явлениям.

Интересующие нас общие явления представляют собой закономерности, «возникающие» в сложных системах. Например, избирательная чувствительность одиночной клетки зрительного нерва к определенной совокупности зрительных раздражителей обусловлена взаимодействием тысяч синаптических потенциалов, генерируемых в дендритах клетки. В свою очередь возникновение зрительной реакции организма определяется взаимодействием миллионов волокон зрительного нерва.

Использовать понятие термодинамического взаимодействия при анализе проявляющихся при этом закономерностей довольно просто, если только статистическая термодинамика вообще приложима к системам с действительно известным микроскопическим состоянием. Упомянутый выше демон Максвелла имеет непосредственное отношение к этой проблеме; приводимое ниже краткое обсуждение превращения кинетической энергии в тепло показывает, как это сделать.

Кинетическая энергия E частицы, подвергающейся действию внешней силы F и движущейся со скоростью v, изменяется в соответствии с уравнением

$$dE / dt — F \cdot v.$$

Если усреднить это выражение (по времени, или по различным частицам, или по повторным экспериментам с различными начальными условиями), мы получим (угловыми скобками обозначено усреднение)

$$< dE / dt > = < F \cdot v > = < F > \cdot < v > + < (F - < F >) \cdot (v - < v >) >.$$

Допуская, что при макроскопическом измерении подобное усреднение необходимо для снижения уровня помех, мы можем сказать, что по отношению к таким измерениям скорость выполнения макроскопической работы составляет $< F > \cdot < v >$. При этом, согласно первому закону термодинамики, другой член уравнения $< (F - < F >) \cdot (v - < v >) >$, выражающий степень корреляции между колебаниями F и v, определяет скорость превращения кинетической энергии в тепло.

Вернемся теперь к нервной клетке. Характер разряда клетки определяется некой (нелинейной) пространственной и временной средней множества синаптических потенциалов, генерируемых в дендритах, так что реакция клетки включает в себя пространственные и временные корре-

ляции активности дендритов. По-видимому, язык статистической термодинамики приемлем для изучения этих коррелятивных явлений и может даже оказаться эффективным при анализе явления распознавания образов.

Переходя теперь к определениям понятия организации, мы можем сказать, что *функциональная организация на данном уровне соответствует термодинамическому взаимодействию (использованию информации) на том же уровне.* Структуру, по-видимому, *можно назвать организованной, если ее существование либо необходимо для поддержания некой функциональной организации, либо, напротив, зависит от деятельности некой такой организации.* На мой взгляд, сколько-нибудь полезное определение структурной организации невозможно без упоминания о функциональной организации.

В заключение я хотел бы сказать, что в ходе анализа кинетики термодинамического взаимодействия в нестационарных необратимых процессах, по-видимому, можно будет получить ответ и на вопрос о происхождении организации.

ИГРА, МОДЕЛИРУЮЩАЯ БИОЛОГИЧЕСКУЮ РЕПЛИКАЦИЮ

Д. Мичи и Ч. Лонгет-Хиггинс
(Эдинбургский университет)

Сравнение информационных систем живой клетки с цифровыми вычислительными машинами стало столь обычным, что попытка детально разработать по крайней мере одно такое сравнение, по-видимому, не лишена смысла. Мы попытались разработать простую модель вегетативного размножения одноклеточного организма, например бактерии *Escherichia coli*. Наша задача заключается в том, чтобы определить необходимую для этого минимальную переработку информации, подобно тому как это сделал бы специалист, анализирующий работу вычислительной машины. Мы не имеем в виду ничего сложного; напротив, основное условие — это простота и ясность. Описываемая настольная игра представляет собой удовлетворительный и в то же время развлекательный способ получения минимальных инструкций.

1-й этап. Приготовьте форму, как на фиг. 1. Передайте ее одному из участников игры. Лучше, наверное, иметь еще один или два экземпляра этой формы на случай, если первый опыт окажется неудачным. Приготовьте запасы бумаги и чернил. Затем через некоторое время соберите все находящиеся у участников игры листы для просмотра. Что вы обнаружите?

Мы предоставим пока читателю самому сообразить, что же он найдет, поскольку опыт показывает, что усилия, приложенные к решению этой проблемы, помогают подготовиться к следующему этапу игры.

2-й этап. Возвратите участникам игры взятые у них листы, сделав их опись. Через некоторое время передайте им один или несколько экземпляров формы меньшего размера (фиг. 2). И затем через некоторое время вновь соберите все листы. Что вы обнаружите на этот раз?

Очевидно, что в течение 1-го этапа формы (*E. coli*) будут размножаться по логарифмическому закону среди гостей (ниши питания), если допустить, что они грамотны и хотят участвовать в игре (подходящие физические и химические условия). Размножение прекратится, когда либо у всех гостей будет много форм, либо иссякнут запасы бумаги или чернил (специфические питательные вещества). Допустим, что прежде чем будет достигнуто это стационарное состояние, мы начнем 2-й этап, имитирующий заражение колонии *E. coli* одной или несколькими фаговыми частицами. Что при этом произойдет?

I. Переведите и выполните инструкции,
записанные в изображенном ниже квадрате

1. Rcmplir la plume, s'il faut.
2. S'il y cn a, prendre un grand morceau de papier, dessiner aupres de la tete une boite a vingt-trois lignes vides, et au-dessus de cette boite imprimer comme suit:
«I. Переведите и выполните инструкции, записанные в изображенном ниже квадрате».
Au-dessous de la boite imprimer comme suit:
«II. Если у вас есть новая форма, перепишите текст из изображенного выше квадрата в пустой квадрат новой формы. Пли, если в нижней части старой формы есть пустое место, перепишите в него столько строк этого текста, сколько поместится, а затем перейдите к выполнению инструкции I. Или, если нет ни того ни другого, не делайте ничего.
III. Передайте старую и новую формы другим участникам игры».

II. Если у вас есть новая форма, перепишите текст из изображенного выше квадрата в пустой квадрат новой формы. Или, если в нижней части старой формы есть пустое место, перепишите в него столько строк этого текста, сколько поместится, а затем перейдите к выполнению иструкции I. Или, если нет ни того ни другого, не делайте ничего.
III. Передайте старую и новую формы другим участникам игры.

Фиг. 1. Форма, которую надо распространить среди участников игры, основав, таким образом, логарифмически растущую колонию бумажных организмов.

Квадрат содержит генетическую программу для построения целого нового организма. Эта программа должна быть переведена и выполнена соматическим аппаратом клетки, который представлен здесь русским текстом, находящимся за пределами квадрата. Отметьте, что надежная репликация этого аппарата достигается в результате выполнения инструкции, а не процесса копирования. Но генетическая программа (ДНК) копируется. Чтобы было возможным заражение вирусом (фиг. 2). мы должны представить себе, что в нижней части фермы имеется достаточно пустого пространства для размещения ста или более копий второй формы.

Можно легко установить, что маленькие формы начнут размножаться внутри больших форм, приводя в конечном счете к разрыву границ и разрушению больших форм. Такова «бумажная модель» размножения бактерий *E. coli* и их заражения частицами бактериофага, которые размножаются, используя механизмы обмена веществ хозяина. Почему работает эта модель и каково соответствие между элементами игры и макромолекулярными структурами?

Если вы получите большую форму с нарисованным на ней квадратом, вырежьте расположенный под этим текстом прямоугольник и приклейте его к верхней части квадрата на большой форме. Затем прочитайте текст, содержащийся в большой форме.

a) S'il y a assez despace au pied de cette page, imprimer їй tin petit avis, qui indut une boite a dix lignes vides; au-dessus de cette boite imprimer comme suit:

«Если вы получите большую форму с нарисованным на ней квадратом, вырежьте расположенный под этим текстом прямоугольник и приклейте его к верхней части квадрата па большой форме. Затем прочитайте текст, содержащийся в большой форме»;

S'il n'y a pas assez d'espace, separer tous les petits avis au pied de la page, distribuer les a vos amis et detruire le residu mutile;

b) Ne pas lire le texte qui suit dans cette boite.

Фиг. 2. Вторая форма, которую следует распространить, когда колония, основанная первыми формами, достаточно хорошо укоренилась.

Начнем со второго из этих вопросов. Квадрат в большой форме представляет собой генетический аппарат клетки E. coll. Содержащийся в нем французский текст соответствует генетической информации, записанной в ДНК бактериальной хромосомы. Этот текст должен быть переведен хотя бы на некоторое время на русский язык, прежде чем «можно будет выполнить содержащиеся в нем инструкции — процесс, соответствующий транскрипции ДНК в соответствующую информационную РНК. Русский текст — это сома-

тический аппарат клетки, занятый выполнением генетических инструкций (инструкция I), репликацией хромосомной ДНК (инструкция II) и регуляцией клеточного деления (инструкция III). Для выполнения этих операций необходимо, разумеется, активное содействие со стороны участников игры. Слабое место аналогии заключается в том, что участники игры выступают в роли пассивных питательных ниш для наших бумажных организмов, но, разумеется, настаивать на точном соответствии в каждой детали означало бы требовать от нашей модели слишком многого. Однако формальное соответствие может быть соблюдено, если мы допустим, что участники игры— это неразумные существа, непреложно выполняющие любую инструкцию, которую им случилось прочитать. При этих условиях они выступают в роли простого субстрата, а «генетический квадрат» клетки содержит полные и эффективные инструкции, достаточные при наличии соответствующих условий для образования целой новой клетки.

Второй этап, как уже отмечалось, предназначен для моделирования заражения бактерии частицами вирулентного фага и нарушения ее метаболизма. Чтобы уяснить себе биологический смысл нашей формальной схемы, достаточно отметить, что и на этот раз генетическая информация записана на французском языке; русский текст, находящийся вне «генетического квадрата», вновь соответствует соматическому аппарату: это та белковая оболочка, которую фаговая частица сбрасывает, внедряясь в бактериальную клетку, и которая позже вновь синтезируется рибосомами бактерий в соответствии с инструкциями, содержащимися в фаговой ДНК.

Отметим теперь одно или два следствия нашей логической модели, имеющие познавательный интерес. Предположим прежде всего, что участок фаговой ДНК, где записано: «б) не читайте текст, который идет дальше», был случайно поврежден или разрушен. В результате фаговая частица после внедрения в «генетический квадрат» хозяина не будет иметь возможности к неограниченной репликации, а будет реплицироваться упорядоченно при каждом делении бактериальной клетки как часть бактериальной хромосомы. Эта дедукция хороша тем, что именно так ведут себя умеренные фаги. Хотя это точное соответствие может быть случайным и, следовательно, может привести нас к неверным выводам, все же не упомянуть о нем нельзя. Точно так же мы не можем удержаться от того, чтобы не попытаться представить себе, каковы будут последствия недостатка чернил «pour remplir la plume». При условии, что чернила соответствуют азотному субстрату, возникающую при этом ситуацию можно сравнить с подавлением синтеза белков: результатом было бы прекращение репликации ДНК.

В целом можно сказать, что логические связи рассматриваемой биологической системы смоделированы нами с достаточно хорошим приближением. Если бы дело этим и ограничивалось, то мы просто получили бы новую

игру, которую можно использовать для обучения студентов. Однако, как мы полагаем, наша игра позволит объяснить некоторые вопросы. Чтобы обосновать подобное мнение, мы проведем другие аналогии, но на этот раз не с живой клеткой, а с вычислительными машинами.

Теперь французский текст соответствует программе электронно вычислительной машины, составленной потребителем на одном из программирующих языков, например на ФОРТРАНе. Перевод этого текста на английский язык представляет собой промежуточную ступень — ту же самую программу, написанную на машинном языке, — и должен быть сделан самой вычислительной машиной, прежде чем она приступит к реализации этой программы. Напечатанный за пределами поля, выделенного для программы, русский текст соответствует управляющей программе машины. Для больших вычислительных машин, например типа «Атлас», управляющая программа весьма сложна и решает вопросы поиска и управления периферийными устройствами, управляет вводом и хранением новых программ и устанавливает для них приоритеты исполнения, а также следит за выполнением этих программ после того, как они переведены с помощью соответствующего транслятора на машинный язык. Так, в нашем примере управляющая программа обеспечивает перевод каждой программы с ФОРТРАНа на машинный язык и дает команду о начале выполнения этой программы (команда I), составляет копию этой программы (команда II — например, машина IBM 7090 при работе с программами на языке ФОРТРАН выпечатывает для потребителя исполнявшуюся программу) и, наконец (в гипотетическом мире, в котором программы и другое математическое обеспечение могут вегетативно распространяться через периферийные устройства взаимосвязанной системы внутренне согласованных между собой вычислительных машин), сбрасывает всю выходную информацию в незанятую машину той же марки (команда III).

Мы не будет особенно стараться придумывать какуюто ситуацию, которая служила бы аналогией зараженной фагом бактериальной клетки в мире вычислительных машин. Это может сделать любой опытный программист, достаточно хорошо знающий управляющее устройство и пренебрегающий правилами эксплуатации, которые запрещают намеренно «перегружать систему». Поскольку эти правила в известной мере вложены в саму систему, намерение легкомысленного программиста разрушить программу должно быть подкреплено дополнительными знаниями и изобретательностью. Мы хотим здесь подчеркнуть то обстоятельство — в сущности именно к этому и были направлены все наши рассуждения, — что это разделение программы заказчика и программного обеспечения машины было обусловлено правилами эксплуатации и экономическими причинами и что сходное разделение зародышевой плазмы (инструкции ДНК) и сомы (клеточные механизмы

выполнения этих инструкций), впервые отмеченное Вейсманом, возникло в ходе эволюции. Если мы просто хотим получить программу, способную обеспечить, помимо прочих действий, воспроизведение самой себя, то почему мы не используем простые команды, например следующие:

1. Сделать то-то и то-то.
2. Скопировать все написанное на чистом листе бумаги и передать обе формы другим участникам игры.

Мы считаем, что подобные программы вызывают одинаковые возражения как в случае биологических систем, так и в случае вычислительных машин. Специалисты по вычислительным машинам обычно не советуют заказчикам составлять программы, которые: а) воздействовали бы сами на себя или б) изменяли бы управляющее устройство в ходе выполнения программы, так как при этом могут возникнуть трудности для этих же или других заказчиков, использующих ту же программу или другие программы с использованием того же управляющего устройства. Недостаток относительно постоянного соматического аппарата состоит в том, что он может быть разрушен факторами, способными использовать эту неизменную структуру. Однако, несмотря на этот недостаток, в обоих случаях было отдано предпочтение такой неизменной структуре, и это, возможно, нельзя считать простым совпадением. Наблюдаемая здесь аналогия столь удивительна, что, несомненно, заслуживает дальнейшего изучения.

КОММЕНТАРИИ Г. ПАТТИ

Основное положение авторов сводится к признанию практической необходимости разделения программного обеспечения и аппаратных средств вычислительной машины или, если использовать биологические термины, необходимости разделения генотипа и фенотипа. Следует отметить, что логика этой необходимости обсуждалась фон Нейманом в его теории самовоспроизводящихся автоматов [1]. Задавая в сущности тот же вопрос — почему нужно копировать описание машины, а не саму машину? — фон Нейман дает на него и сходный ответ: описание представляет собой пассивную структуру, которую можно «исследовать» или измерить, не нарушая деятельности описываемой системы, тогда как непосредственное измерение с целью определения состояний, производимое на действующей системе, привело бы к нежелательным изменениям в ее поведении. Он указывает далее, что составление описания по самой машине приводит к логической антиномии Ришара. Это предположение основано на одной из теорем Гёделя, согласно которой нельзя дать полное эпистемологическое описание достаточно богатого языка, пользуясь одним только этим языком. Оно лежит в основе теорем о неразрешимости [2]. Поэтому трудно представить себе становление функций генотипа и фенотипа в процессе эволюции, поскольку сам процесс эволюции невозможен без такого разделения. Таким образом, спонтанное появление процесса «физическое описание — трансляция», по-видимому, представляет собой самый первый пример парадокса курицы и яйца.

Я хотел бы добавить, что при обсуждении всех этих проблем мы исходим из допущения одинаковой физической природы описания и самой системы, т. е. считаем, что описание и система представляют собой классические или термодинамические агрегаты. Но как я уже указывал, живая материя, или, как ее называет фон Нейман, «естественные автоматы», резко отличается от искусственных автоматов именно в этом отношении, т. е. живые системы, по-видимому, используют квантовомеханические описания, которые каким-то образом переводятся в классические или термодинамические системы, или фенотипы. Я полагаю, что в силу этого любая модель биологической системы, основанная лишь на макроскопических искусственных автоматах, окажется неудовлетворительной не только вследствие иной физической ситуации, но и по причине логики процесса трансляции. В случае искусственных макроскопических автоматов процесс трансляции можно описать статистически с помощью неравновесных нелинейных термодинамических корреляций. Следователь-

но, надежность трансляции будет возрастать с увеличением размеров и уменьшаться с повышением скорости логических элементов. Ошибки в таких системах можно объяснить с помощью нормальных статистических или термодинамических теорий шумов. С другой стороны, если описание автомата дано целиком на уровне квантовой механики, тогда как сама система представляет собой классическую машину, то процесс трансляции должен представлять собой квантовомеханическое измерение. Описание шумов или надежности в этой ситуации остается весьма трудной логической и формальной проблемой, однако этого не может избежать ни одна общая теория биологии.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Neumann J.* von, in: Theory of self-reproducing automata, A. W. Burks, ed., University of Illinois Press, Urbana, pp. 121—126, 1966.
2. *Neumann J.* von, Ibid, pp. 47—56.

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ БИОЛОГИЯ И МОЛЕКУЛЯРНАЯ БИОЛОГИЯ

К. Х. Уоддингтон
(Эдинбургский университет)

Все дальновидные биологи признают, что мы являемся свидетелями исключительно быстрого прогресса в понимании наиболее существенных биологических процессов — процессов, связанных с наследственностью и развитием. Можно задать вопрос, нужна ли еще какая-нибудь «теоретическая биология» кроме той, что содержится или, как можно надеяться, будет вскоре содержаться во все расширяющихся рамках молекулярной биологии[1]. Если мы проникнем в сущность элементарных процессов, то не даст ли это нам права считать, что мы понимаем в принципе все разнообразие биологических явлений? Вопрос можно заострить, обратившись к физике. На первый взгляд кажется, что теоретическая физика занята лишь самыми общими или самыми частными проблемами: прежде моделью атома Бора — Резерфорда, немного позже — изучением квантовых явлений, сейчас — внутриядерными частицами. Ее усилия, по-видимому, всегда сосредоточены на углублении наших знаний о первичных элементах физического мира, а изучение связи между этими элементами и сложными физическими системами, например в области макромолекулярной химии, физики твердого тела и др., предоставляется специалистам, с мнением которых можно почти не считаться, третируя их как «простых инженеров».

Не может ли и теоретическая биология сконцентрировать внимание на элементарных процессах, изучаемых молекулярной биологией, а все прочее предоставить эволюционистам, экологам, физиологам, биохимикам, изучающим метаболизм, и прочим специалистам? Некоторые молекулярные био-

[1] Чтобы избежать недоразумений, я хотел бы подчеркнуть, что речь идет не о старом споре между виталистами и механицистами, который идет по правилам «кэтча» и который теперь в Америке называют конфликтом между сторонниками точки зрения о сводимости биологических процессов к физикохимическим явлениям и ее противниками. Я допускаю, что все наблюдаемые извне биологические явления — категория, исключающая осознанную осведомленность, — можно в конечном счете объяснить в рамках понятий, сливающихся с соответствующими понятиями, используемыми в физических науках, помня при этом, что сами физические науки далеки от завершения, так что даже самый правоверный сторонник сводимости не сможет сказать биологам, к чему они должны свести свои живые системы. Обсуждаемый вопрос можно перефразировать следующим образом: должны ли мы безучастно ждать, когда можно будет одним махом свести ее к молекулярной биологии, или же тем временем следует заняться чем-нибудь полезным?

логи, по-видимому, испытывают искушение ответить на этот вопрос утвердительно; еще больше таких молекулярных биологов, которые отказываются принимать какие бы то ни было положения или интерпретации, если они не сформулированы в терминах химии. Из этого следует, что настоящим вопросом можно также считать лишь вопрос, сформулированный аналогичным образом. К сожалению, эта точка зрения не представлена в статьях, вошедших в эту книгу. Но даже в отсутствие развернутой аргументации в пользу этой точки зрения, по-видимому, небесполезно привести некоторые доводы, противоречащие ей.

Прежде всего следует указать, что, проводя аналогию между теоретической биологией и теоретической физикой, мы вынуждены сравнивать две дисциплины, находящиеся на совершенно различных этапах исторического развития. Теория физического мира уже содержит очень хорошо разработанные представления о связи между весьма сложными искусственными системами (например, ракетными двигателями или транзисторными радиоприемниками) или такими естественными явлениями, как термическая упругость, реакции химических радикалов и т. п., с одной стороны, и элементарными единицами, составляющими эти системы, — с другой. Таким образом, любое уточнение наших знаний об этих элементах в большинстве случаев легко укладывается в вполне сложившуюся теорию, которая рассматривает более сложные явления физического мира. В отличие от этого общие теории, связывающие сложные биологические явления с элементарными единицами, нельзя считать вполне удовлетворительными. Наиболее важные из этих общих теорий — теория эволюции и эпигенез. В течение последних нескольких десятилетий, когда самыми элементарными из известных биологам единиц были гены,эти теории не получили такого развития, как, например, химические теории за все то время, когда элементарными единицами в химии считали атомы, которые обладают валентностями. Когда оказалось, что атом химиков представляет собой квантованную волновую функцию, физики-теоретики могли быть уверены в том, что химики располагают разумной теорией, в которую укладываются новые идеи. Но когда «старомодный ген» превратился в ряд оснований ДНК, способный к репликации и регулирующий последовательность ДНК — РНК — белок, у теоретиков биологии не было никакой уверенности в том, что существуют какие-то разумные теории эволюции и развития, которые эти новые представления могли бы обогатить, а не опровергнуть.

В сущности биология еще только создает свои теории, объясняющие переход «от простых элементов к сложным системам», одновременно делая большие успехи в анализе этих элементов. Но один лишь анализ принесет мало пользы, пока нс будет лучше разработана теория перехода от простого к сложному.

Молекулярных биологов, как и большинство людей, не очень удивляет критика в их адрес. Их реакцию на высказанные выше положения можно выразить следующим образом: «Разумеется, мы знаем, что общая теория биологии находится в жалком состоянии; ей придется подождать, пока мы не снабдим ее правильными положениями — а ими будут молекулярные представления».

Однако последнее заявление на деле совсем не столь смелое, как оно звучит и каким его часто представляют его авторы. Разумеется, ответы на все проблемы биологии должны быть в конечном счете сформулированы в молекулярных терминах. Из чего, кроме молекул, могли бы состоять биологические системы? Но суть дела не в том, будут ли эти ответы сформулированы в молекулярных терминах или нет; главное — чтобы они действительно были ответами на важные вопросы. Только в связи с общей теоретической биологией можно определить, какие из многих стоящих перед молекулярной биологией проблем представляют стратегический, а не просто тактический интерес.

Рассмотрим несколько примеров. Еще около 30 лет назад было впервые замечено, что генетический материал представляет собой линейную последовательность низкомолекулярных компонентов — вопрос, несомненно, представляющий стратегический интерес. А какое значение для теоретической биологии, которая, возможно, окажется применимой и на Марсе, имеет тот факт, что эти компоненты оказались нуклеотидами, а не аминокислотными остатками, как полагало сначала большинство биологов? Другой пример. Согласно теории, любая система, которая может эволюционировать под действием естественного отбора, должна обладать, с одной стороны, довольно устойчивым и, следовательно, нереактивным хранилищем памяти, а с другой — фенотипом, более способным взаимодействовать со средой, причем такими способами, которые делали бы возможным процесс естественного отбора. Если выбор ДНК для первой роли и белков — для второй с особым промежуточным звеном в виде РНК между ними произошел случайно, то какую роль сыграло изменение дезоксирибозы в рибозу?

Если допустить существование систем, в которых хранилище памяти химически отличается от реагирующей структуры, то из этого следует наличие между ними кодовой связи. И вновь встает вопрос о том, возник ли этот код чисто случайно или же он полностью или частично обусловлен какой-то внутренней логикой. Ответ на этот вопрос, который, по-видимому, скоро будет получен, несомненно, явится важным вкладом в общую теорию биологии. Столь же важным в теоретическом плане было предположение, вскоре подтвердившееся, что наследственный материал имеет вид двойной цепи, состоящей из двух комплементарных линейных последовательностей. Даже если бы это предположение оставалось в течение некоторого времени

чисто спекулятивным[1] т. е. если бы биологи не были в состоянии определить химическую природу комплементарных цепей, оно все равно значительно углубило бы наши представления о процессе генетической репликации. Разумеется, значение этого предположения еще больше возросло, когда было экспериментально показано, что речь идет о двойной спирали ДНК. Однако без предварительной разработки возможной логической структуры процессов репликации и действия гена никто не знал бы, куда следует направить поиски и как истолковать обнаруженные факты.

Все понимают, что одна из важных биологических проблем, стоящих перед молекулярной биологией, это проблема клеточной дифференцировки у высших организмов. Возможно, что решение этой проблемы пойдет по пути применения разработанной Жакобом и Моно схемы регуляции синтеза ферментов у бактерий. Однако необходимо тщательно разобраться — и это должна сделать теоретическая биология — в вопросе о том, в какой мере индуцированный синтез ферментов у бактерий сопоставим с дифференцировкой у высших организмов.

С одной стороны, требующие объяснения факты могут оказаться значительно более сложными, чем простое включение и выключение генов (даже с количественным контролем), происходящее у бактерий. В наиболее хорошо проанализированных случаях клеточной дифференцировки, по-видимому, можно выделить три фазы, причем возможно, что все они в равной степени необходимы. Первая фаза — появление *компетенции*, или готовности к переходу в следующую фазу,— переходное состояние, о котором нельзя определенно сказать, что оно наследуется клеткой. Затем идет *детерминация*, или переключение на определенный путь дифференцировки,— состояние, наследуемое на протяжении многих клеточных поколений и нарушаемое лишь случайными *трансдетерминациями*, переключающими дифференцировку на какой-либо другой путь; неизвестно, однако, определяется ли детерминация каким-либо хромосомным механизмом. Наконец, наступает третья фаза — *активация*, приводящая к синтезу специфических для данной клетки белков [1].

Если подойти к этой проблеме с другой стороны, то можно допустить существование многих других типов процесса регуляции, а не только одного, который определяет, когда данный участок ДНК будет синтезировать информационную РНК. Разумеется, все признают возможность регуляции на уровне трансляции и транскрипции — это предполагали еще до того, как

[1] Следует отметить, что в такой спекулятивной, но весьма ясной и разработанной форме эта гипотеза была отчетливо высказана уже в 1927 г. нашим соотечественником Н. К. Кольцовым, о чем обычно забывают (или не знают). См. Б. Л. Астауров, Две вехи в развитии генетических представлений, Бюлл. МОИП, 70, № 4, 25—32 (1965).— *Прим. ред.*

схема ДНК—РНК—белок стала общепринятой [2]. Однако это отнюдь не исчерпывает списка возможных типов регуляции. Рассмотрим в качестве примера предварительный и на первый взгляд безобидный шаг — репликацию ДНК. Общая скорость репликации всего генома, несомненно, поддается регуляции, как это показывают, например, проводимые Гердоном [3] пересадки ядер мозговых клеток в только что оплодотворенные яйца амфибий или эксперименты по заражению клеток слюнных желез двукрылых микроспоридиями [4], и нужно быть смелым человеком, чтобы сказать, что в этих двух случаях действует один и тот же механизм регуляции. Накапливаются также данные о том, что различные ДНК—РНК-полимеразы действуют с различной скоростью и, по-видимому, специфичностью на разные участки ДНК; ДНК—ДНК-репликазы также могут действовать сходным образом. Метилирование ДНК может изменить ее сродство к данной полимеразе. Кроме того, можно представить себе регуляцию совсем иного рода, связанную с избыточным копированием (amplification) отдельных участков ДНК. Мы знаем, что участок ядрышкового организатора в хромосомах *Xenopus* и *Drosophila* содержит много экстракопий цистронов, кодирующих рибосомную РНК [5J. Это — избыточное копирование в том смысле, что оно передается всем клеткам организма, а геномы родственных видов характеризуются различным числом экстракопий. Однако оно может быть и «эпигенетическим»; при этом в некоторых клетках образуются дополнительные копии отдельных участков ДНК. Это, несомненно, относится к ядрышковой ДНК в ооцитах амфибий, где образуются весьма многочисленные ядрышки, содержащие «сердцевину» из ДНК и отделяющиеся от хромосомы [6]; этот процесс, как было показано, регулируется другими компонентами клетки по типу обратной связи (Бернстил и Перковская, личное сообщение). Подобный тип регуляции до сих пор продемонстрирован лишь в случае ядрышковых цистронов, однако нет никаких причин считать, что такого рода регуляция не может осуществляться в процессе дифференцировки в гораздо более широких масштабах. В частности, детерминация может быть связана с избыточным копированием некоторых участков ДНК, которые начинают синтезировать информационную РНК лишь после «активации», происходящей, возможно, спустя много генераций клеток.

Это всего лишь несколько примеров, иллюстрирующих разнообразие систем, регулирующих активность ДНК; вероятно, можно найти и другие примеры. ДНК представляет собой лишь один, причем довольно инертный, компонент всего клеточного механизма дифференцировки. В этом механизме участвуют как минимум ДНК, хромосомные белки, информационная РНК, рибосомы, активирующие ферменты, аминокислотные фонды, транспортные РНК и различные репликазы, полимеразы, деградирующие ферменты, ферменты, катализирующие соединение и разъединение информационной

РНК и ДНК или информационной РНК и рибосом, и т. д. Перед экспериментальной молекулярной биологией стоит задача выявить примеры регуляции дифференцировки путем воздействия на какой-либо из этих компонентов. Но даже если будут описаны один или два хороших примера такой регуляции, например если мы установим, что именно происходит при «активации» образования пуффов на хромосомах экдизоном [7] или изменением ионного равновесия [8],нам это поможет лишь тогда, когда эти факты будут укладываться в некую детально разработанную теоретическую схему. Быть может, большее значение — в силу большей неожиданности — имело бы отсутствие какого-то допустимого типа регуляции; так, мы смеем надеяться, что удастся показать универсальность кодовой связи между ДЫК и белком для всех живых существ.

Мне представляется, что нам прежде всего нужна логически исчерпывающая классификация всех допустимых типов регуляции. Такой классификации пока не существует, и ее создание может оказаться весьма трудным делом. За отправной пункт можно было бы принять представление о том, что каждый компонент (ДНК, информационная РНК и т. д.) должен: 1) синтезироваться из фонда специфических субъединиц, 2) с помощью специфического агента (фермента), 3) в определенном количестве, 4) иметь определенную продолжительность периода полусуществования; кроме того, этот компонент должен: 5) взаимодействовать с более «ранним» компонентом данной последовательности (например, информационная РНК с рибосомами) и 6) продуцировать один из более «поздних» компонентов (например, в результате взаимодействия информационной РНК с рибосомами образуются белки). Таким образом, с каждым из восьми или девяти классов компонентов, упомянутых в предыдущем параграфе, связано по крайней мере шесть регулируемых факторов. Возможно, что не все типы регуляции могли бы даже в теории действовать на все компоненты, но и при этом число возможных регуляторных механизмов составляет по меньшей мере 50—60, а если учесть все возможные разновидности специфичности, то их может оказаться значительно больше.

Следующим этапом теоретического исследования должна быть попытка установить, какая из этих многочисленных возможностей может иметь общее значение. Полезные регуляторные механизмы должны быть надежными, воспроизводимыми, зачастую наследуемыми, должны обычно контролировать группы генов, а не отдельные гены и, как правило, приводить к образованию четко различающихся клеточных типов; можно было бы представить себе и другие необходимые свойства таких механизмов. Все эти рассуждения помогут найти наиболее перспективное направление исследований. Однако мы пока не располагаем такой разработанной теорией. Когда я впервые попытался подойти к дифференцировке с позиций молекулярных

регуляторных механизмов, я отдал предпочтение механизму, казавшемуся наиболее важным в докриковскую эру, а именно регуляции посредством изменений в фондах аминокислот или нуклеотидных предшественников [9]; я потратил изрядное количество времени, экспериментируя с синтетическими аминокислотами, пуринами и пиримидинами. Сейчас мы уже достаточно много знаем, чтобы понять, что этот тип регуляции, хотя он, возможно, и действует в ряде случаев, вряд ли служит одной из главных систем, от которых зависит клеточная дифференцировка. Одна из задач теоретической биологии в этой области заключается в том, чтобы сформулировать и систематизировать такого рода соображения. Возможно, что будут выявлены два или три основных регуляторных механизма, более сложных, чем те, которые допускаются ортодоксальной «передовой» молекулярной биологией сегодняшнего дня. В конце концов у эволюции было достаточно времени, чтобы придумать действительно толковые штуки! Если просто слепо идти вперед, считая, что все дело в активации генов, и во всем полагаясь на гистоны, то можно получить интригующие, но сомнительные результаты, имеющие лишь временную ценность, а, на мой взгляд, такой путь не может привести к успеху.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Waddington C. H.*, Principles of Development and Differentiation, Macmillan. New York, 1966; Proc. Roy. Soc., B. **164**, 219 (1966).
2. *Waddington C. H.*, in: Recent development in ceil physiology, Kitching ed,, Butterworth, p. 105, 1954.
3. *GurdonJ. B.*, Endeavour, **25**, 95 (1966).
4. *Pavan C., Basile R.*, Science, **134**, 1956 (1966).
5. *Ritossa F. M., Spiegelman S.*, Proc. Nat. Acad. Set., **53**, 737 (1963); B i r n stiel M. L. et al., Nat. Cancer Inst. Monog., **23**, 431 (1966).
6. *Callan H. G.,* J. Cell Sci., **1**, 85 (1966).
7. *Clever U.*, Chromosoma, **17**, 309 (1965).
8. *Kroeger H., L e z z i M.*, Ann. Rev. Entomol., **11**, 1 (1966).
9. *Waddington C. H.*, Symp. Soc. Exp. Biol., **2**, 143 (1948).

ОБ ЭВОЛЮЦИИ И КОЛИЧЕСТВЕННЫХ ИЗМЕНЕНИЯХ ГЕНЕТИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ

К. Х. Уоддингтон
(Эдинбургский университет)

и

Р. Левонтин
(Чикагский университет)

Об эволюционном прогрессе часто говорят как о приобретении новой генетической информации. В настоящее время количество генетической информации, содержащейся в том или ином геноме, можно оценить числом пар нуклеотидов, т. е. на основе общего количества ДНК. Однако в действительности между этим показателем и эволюционным прогрессом нет четкой зависимости. Известно, что многоклеточные животные в общем содержат значительно больше ДНК, чем бактерии. Однако среди многоклеточных животных количество ДНК на одну клетку варьирует от вида к виду независимо от филогенетического положения этих видов. Самое большое количество ДНК на геном обнаружено не у наиболее высоко развитых организмов; например, среди позвоночных наибольшим содержанием ДНК на клетку отличаются некоторые амфибии. Есть основания полагать, что эти различия обусловлены в основном «избыточным копированием» (amplification), т. е. образованием в геноме многих копий одного локуса—явлением, о котором еще очень мало известно.

Во время неофициального обсуждения на вилле Сербеллони Уоддингтон выдвинул положение, которое затем в более строгой форме было сформулировано Левоптином (его можно было бы назвать «теоремой Сербеллони»).

Согласно этому положению, любая тенденция к увеличению количества информации в геноме в процессе эволюции находится под контролем, поскольку уровень прогресса под влиянием естественного отбора обратно пропорционален количеству единиц информации.

Это положение первоначально было выдвинуто на чисто умозрительных основаниях такого, например, типа: всегда легче достигнуть определенной цели, если для этого нужно управиться с небольшим количеством вещей, чем если таких вещей много. Более формальное рассуждение выглядит следующим образом.

Допустим, что диапазон изменчивости данного признака укладывается в ряд от 0 до 2*A*, и предположим далее, что существует *n* идентичных локусов, определяющих этот признак. Для простоты допустим также аддитивность действия генов из разных локусов и аллелей каждого локуса. Тогда каждый локус характеризуется эффектами 0, *a* и 2*a* соответственно для гомозиготы *bb*, гетерозиготы *Bb* и гомозиготы *BB*. При таком обозначении аддитивная генетическая дисперсия в каждом локусе составит $\sigma^2_{Gi} = a^2 p_i q_i$.

Но согласно гипотезе $a = \frac{A}{n}$,

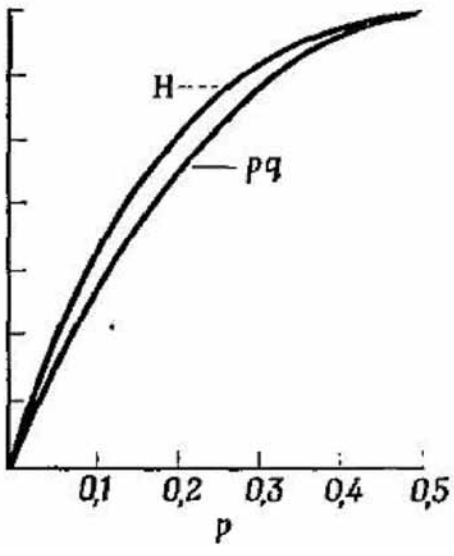
так что $\sigma^2_{Gi} = \frac{A^2}{n^2} p_i q_i$

и общая аддитивная генетическая дисперсия для всех локусов составит

$$\sigma_G = \sum_i \frac{A^2}{n^2} p_i q_i = \frac{1}{n} A^2 \left(\overline{p}\,\overline{q} - \sigma_p^2 \right).$$

Итак, мы видим, что для данного полного фенотипического ряда *A* аддитивная генетическая дисперсия обратно пропорциональна числу локусов, определяющих данный признак. Она уменьшается также для некоторой фиксированной средней частоты генов, если существует значительная дисперсия по частоте генов от локуса в соответствии с основной теоремой Фишера о естественном отборе уровень прогресса при отборе соответствует аддитивной дисперсии, наше интуитивное положение оказывается правильным.

К этому вопросу можно подойти и с другой стороны: любое промежуточное значение признака может быть получено и без аддитивной дисперсии, путем накопления некоторого числа локусов, гомозиготных по *B*, и некоторого числа локусов, гомозиготных по *b*, в нужном отношении. Если *p* локусов фиксированы по *b* и *q* локусов — по *B*, то $\sigma_p^2 = \overline{p}\,\overline{q}$ и, по-видимому, не существует генетической дисперсии, которая создавала бы основу для действия естественного отбора.



Фиг. 1

Когда мы обращаемся к вопросу о количестве информации, содержащейся в геноме, то сталкиваемся с трудностями определения. Если рассматривать геном как предложение, в котором

буквы представляют собой аллели каждого гена, то можно использовать данное Шенноном определение информации

$$H_i = -\left[p_i \ln p_i + q_i \ln q_i\right],$$

где p_i и q_i, как и прежде,— частоты альтернативных аллелей в i-м локусе. Но произведение $p_i q_i$, использованное в формуле дисперсии, очень близко к H по форме.

На фиг. 1 нанесены произведение pq и H с таким масштабом, что их значения совпадают при $p = 0{,}5$. Таким образом, формула генетической дисперсии может быть представлена в следующем виде:

$$\sigma^2_{Gi} = \frac{kA^2}{n^2} H_i,$$

где k — произвольная постоянная. В результате общая генетическая записана как

$$\sigma^2_G = \frac{kA^2}{n^2} \bar{H},$$

так что если среднее количество информации в одном гене фиксировано, то скорость изменения популяции под влиянием естественного отбора уменьшается по мере того, как информация распространяется на все большее число генов.

ЗАВИСИТ ЛИ ЭВОЛЮЦИЯ ОТ СЛУЧАЙНОГО ПОИСКА?

к. Х. Уоддингтон
(Эдинбургский университет)

Большинство исследователей, занимающихся в настоящее время разработкой теоретической биологии, по-видимому, твердо убеждены в том, что процесс эволюции по существу зависит от случайного поиска. Возьмем хотя бы такой пример: один из разделов статьи Патти [1] «Физические теории, автоматы и происхождение жизни» озаглавлен: «Является ли эволюционная теория удовлетворительной моделью?» Он пишет: «Эволюционная теория базируется на универсальной фразе: «Случайный поиск и естественный отбор в мутирующих самовоспроизводящихся популяциях; эту фразу используют для объяснения развития почти любых молекулярных сложностей без непосредственного привлечения физических законов, которым подчиняются связанные с этим элементарные явления. Следует иметь в виду, что единственное прямое экспериментальное доказательство существования такого эволюционного процесса целиком относится к высшим организмам, возникшим сравнительно недавно и обитающим примерно там же, где жили их предки».

Как следует из подзаголовка к статье Патти, многим физикам бывает трудно признать случайный поиск адекватным механизмом эволюции. Об этих трудностях во весь голос говорили на симпозиуме, состоявшемся в апреле 1966 г. [2]. Например, Иден (см. [2]) ссылался на ничтожную вероятность того, что ребенок, случайно переставляющий буквы, расположит их так, что получатся первые 20 строк «Энеиды» Вергилия. Он привел даже некоторые количественные оценки чисел и вероятностей, которые, как он считает, имеют отношение к проблеме эволюции: «Рассмотрим сначала, какое пространство займут полипептидные цепи, составленные из 250 или менее единиц. Мы можем представить себе слова длиной в 250 букв, написанные с помощью алфавита из 20 различных букв. Существует около 20^{250}, или 10^{325}, таких слов». Иден высчитал затем, что общее количество когда-либо существовавших белковых молекул составляет около 10^{52}. Этого достаточно, чтобы уловить основное направление его рассуждений. Шютценбергер (см. [2]) также пишет: «Согласно данным молекулярной биологии, мы имеем пространство объектов (генотипов), характеризующееся лишь типографической топологией. Эти объекты соответствуют (по индивидуальному

развитию) элементам второго пространства, обладающего иной топологией (топологией конкретных физико-химических систем в реальном мире). В соответствии с концепцией неодарвинизма можно представить себе без каких-либо иных допущений, что отбор, основанный на структуре второго пространства, приводит к статистически адаптированному дрейфу, когда в первом пространстве происходят случайныс изменения в соответствии с его собственной структурой. Мы полагаем, что этого представить себе нельзя».

Прежде чем обсуждать доводы за и против приемлемости случайного поиска в качестве механизма эволюции, следует выяснить, действительно ли современная биология неизбежно приходит к выводу о том, что направления эволюционных изменений определяются случайным поиском, контролируемым естественным отбором.

Один из доводов, приводимых в пользу такого заключения, носит теоретический характер. Изменения, улавливаемые естественным отбором, обусловлены в конечном счете изменениями генетического материала. Эти последние могут состоять в изменениях последовательности нуклеотидов в ДНК, в добавлении или исключении нуклеотидов и т. п. Для целей, преследуемых в настоящей статье, нам достаточно общепринятого представления об этих первичных генетических изменениях как о случайных мутациях. Следует ли из этого, что изменения, па которые действует естественный отбор, также случайны? Форма гравия на дне реки определяется случайными процессами, т. е. возникает в результате случайного поиска. Однако из этого не следует, что случайный поиск играет сколько-нибудь существенную роль в строительстве моста из бетона, для приготовления которого был использован этот гравий. Факторы, учитываемые при сооружении моста, относятся, так сказать, к иному порядку сложности, чем те, которые определяют образование компонентов бетона. Надо спросить, не обусловлена ли приписываемая эволюции зависимость от случайного поиска сходным смешением различных порядков сложности — ошибкой, в логическом отношении очень близкой к хорошо известной «ошибке смещенной конкретности» Уайтхеда. Этот вопрос лучше всего рассмотреть на двух уровнях: во-первых, эволюции высших организмов, скажем, на примере родословного древа лошадей и близких им видов, столь хорошо изученного для четвертичного периода, а во-вторых, эволюции на молекулярном уровне, изученной на примере гемоглобина, инсулина и др. и, невидимому, имевшей место в ходе возникновения жизни.

У высших организмов представляется довольно ясным, что изменения, оказавшиеся выгодными в эволюционном плане, зависят вообще не от случайных мутаций единичных генов. Преобладающее большинство случайных генных мутаций, имеющих достаточно выраженный эффект, чтобы их можно было заметить по отдельности, оказываются вредными и элиминиру-

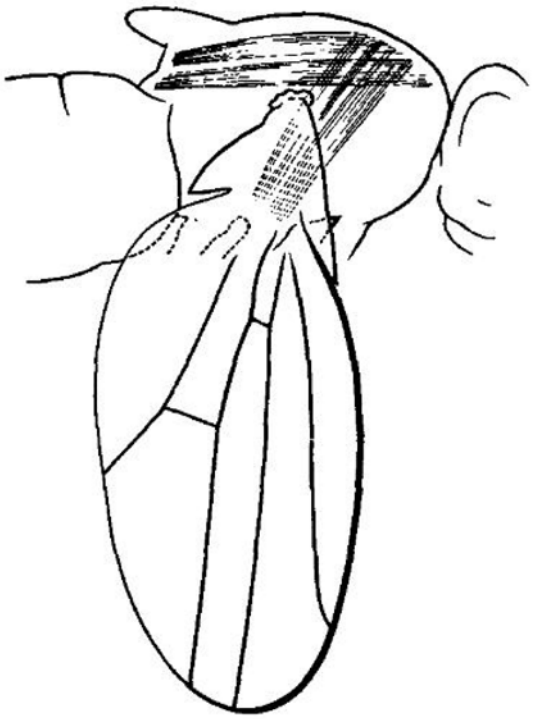
ются естественным отбором. Существуют, разумеется, и некоторые исключения, например меланизм у бабочек в промышленных районах; но даже в этих случаях включение мутантной формы какого-либо из главных генов в эволюционную последовательность влечет за собой одновременный отбор большой связанной с ним группы «генов-модификаторов». Однако в общем эволюция высших организмов зависит от отбора признаков, на которые более или менее одинаково интенсивно влияет большое число генов. Такие признаки можно сравнить скорее с бетонными блоками, а не с отдельными камешками гравия в бетоне. Подлинная задача развивающейся популяции состоит в том, чтобы тем или иным путем создать себе некий фенотип, успешно конкурирующий с другими фенотипами в гетерогенных условиях окружающей среды, т. е. оставляющий по сравнению с ними больше потомства. Для эволюционного успеха такой популяции не играет роли, принимали или нет факторы окружающей среды, действовавшие на ранних стадиях онтогенеза, существенное участие в формировании фенотипа.

На практике почти все высшие организмы выработали довольно эффективные механизмы для успешного приспособления их фенотипов к условиям окружающей среды («обучение» в широком смысле слова). Таким образом, физиологические адаптации и адаптации в ходе развития обычно играют существенную роль в формировании фенотипа.

В образовании фенотипического признака, эффективно выполняющего какую-либо важную для естественного отбора задачу, например для лошадей — быстро бегать, чтобы убегать от врагов, или питаться жесткой или низкорослой травой, — принимает участие очень много генов. Возвращаясь к аналогии с бетонным блоком, можно сказать, что роль случайных процессов заключается в том, чтобы «создать» гравий; затем мы можем из этого гравия приготовить бетон, а этому бетону придать форму какого-либо объекта, приспособленного к окружающей среде. Эта форма не будет воспроизводить объект во всех деталях, если гравий был слишком крупный; если же гравий, напротив, был слишком мелкий, то форма будет недостаточно прочной. Самое главное— это чтобы смесь имела оптимальный состав. В образовании гравия участвуют лишь случайные процессы, но от этого еще очень далеко до вывода, что формы, образующиеся в соответствии с тем или иным объектом, т. е. фенотипы в разных условиях среды, также возникают путем случайного поиска.

Быть может, стоит пояснить это положение на каком-нибудь конкретном примере, я приведу пример из своей собственной экспериментальной работы, где я имел дело по крайней мере с несколькими генами, которые могли бы участвовать в эволюционных изменениях. Предположим, что какое-то изменение во внешней среде оказывает посредством естественного отбора на популяцию дрозофилы давление, направленное на увеличение скорости

полета. В сильно упрощенном виде полет мухи обеспечивается быстрыми периодическими сокращениями ряда мышц, расположенных между верхней и нижней поверхностями грудного отдела (фиг. 1).



Фиг. 1. Упрощенная схема летательного аппарата дрозофилы.

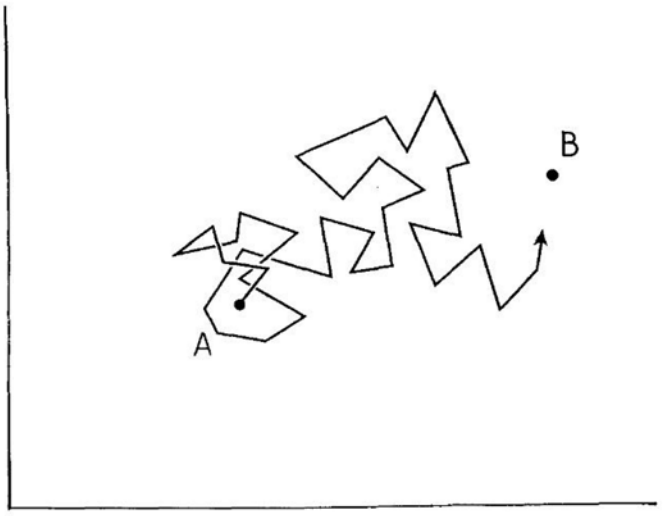
Они вызывают упругую деформацию стенки тела, к которой крыло прикреплено посредством сложной трехчленной структуры, построенной таким образом, что при изменении конфигурации грудного отдела крыло движется вверх и вниз. Поступательное перемещение насекомого в воздухе зависит как от траектории вершины крыла при взмахе, обычно имеющей форму, близкую к восьмерке, так и от точных аэродинамических свойств плоскости крыла. Ускорения полета можно достигнуть путем изменения различных частей этого механизма. Существуют мутантные гены, которые обладают достаточно сильным морфогенетическим эффектом, чтобы их можно было использовать в лаборатории, и действуют на некоторые из этих частей. Наши современные знания в области популяционной генетики позволяют предполагать, что другие более слабо действующие аллели этих генов почти наверняка присутствуют в любой дикой популяции и поэтому могут быть использованы естественным отбором.

Например, изменение амплитуды взмаха крыла или траектории движения вершины крыла может быть достигнуто путем изменения механических или геометрических свойств поверхности груди. В этом могут прини-

мать участие такие гены, как *dumpy, humpy, thick, thickoid, dachs, dachsous* и др. Могут также измениться свойства мышц или запасы ферментов или субстратов, обеспечивающих энергетические ресурсы. О генах, воздействующих на эти компоненты системы, известно немного, но такие гены, несомненно, должны существовать. Мало известно нам и о генах, определяющих структуру сочленения крыла. Зато мы знаем большое число генов, воздействующих на размеры, форму и аэродинамические свойства крыла. Общие размеры крыла, например, могут изменяться под влиянием генетических систем, определяющих число клеток в крыле, или же других генетических систем, воздействующих на конечные размеры этих клеток. Нам известны как единичные гены, обладающие сильным эффектом (например, *miniature* и *dusky*, уменьшающие размеры клеток крыла), так и сложные полигенные системы, воздействующие на размеры и число клеток, как, например, системы, изучавшиеся Ф. Робертсоном. Есть также гены, изменяющие контуры крыла, причем они делают это по меньшей мере двумя различными путями: одни, например гены *broad* и *narrow*, воздействуют на скорость клеточных делений, ориентированных по длинной или короткой оси крыла; другие, такие, как *dumpy* и *lanceolate*, влияют на характер развития крыла, закладывающегося в виде мешка. Такие изменения формы крыла, несомненно, оказывают влияние на его аэродинамические свойства. На эти свойства может повлиять также изменение гибкости отдельных участков крыла. Костальный край крыла укреплен толстой жилкой; кроме того, четыре другие жилки идут от основания крыла к его кончику, причем их пересекают две поперечные жилки, однако задний край крыла остается очень гибким. Нам известна целая группа генов, различным образом воздействующих на характер жилкования и, таким образом, на общую гибкость крыловой пластинки. Например, геи *veinlet* вызывает исчезновение дистальных участков всех продольных жилок, а *radius incompletus* — одной лишь второй продольной жилки; *cupitus interruptis* вызывает разрывы в четвертой и пятой жилках; *cross-veinless* — исчезновение задней поперечной жилки и т. д. Существует, наконец, еще одна группа генов, в которую входят гены *curly*, *curved* и многие другие, вызывающие развитие блюдцевидных крыльев, выгнутых вверх или вниз. Все эти гены могут воздействовать на аэродинамические свойства крыла и, таким образом, на эффективность летательного аппарата.

Из этого-то широкого ряда возможностей естественный отбор должен выбрать ту, которая приведет к увеличению скорости полета насекомого. Эта задача весьма отличается от той, которую называют «случайным поиском», обычно подразумевая при этом, что популяция должна ждать, пока не появится новый ген, обладающий более или менее специфическим действием, нужным естественному отбору. Наверное, такой вывод неизбежен, если рас-

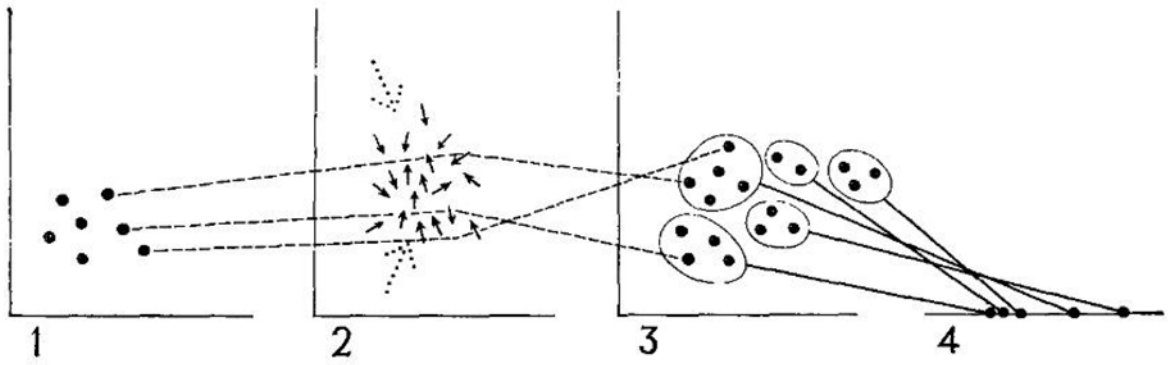
сматривать математические построения Фишера и Холдейна как существенный вклад в понимание основ эволюции, а не как схематически упрощенные первые шаги на пути математического выражения наших теорий, которые на самом деле значительно более сложны и изящны. Знакомство с работами другого великого пионера математического обоснования эволюционной теории, С. Райта, заставило бы неискушенного физика быть немного более осторожным в выводах.



Фиг. 2. Схема процесса случайного поиска, в котором система должна перемещаться из пункта *A* в пункт *B* в результате случайных изменений в отдельных субъединицах.

Двумерная схема модели случайного поиска, обсуждаемой Иденом, может быть представлена так, как это изображено на фиг. 2 (в действительности эти случайные блуждания происходят, конечно, в многомерном пространстве). Система, которая действует на самом деле, гораздо больше похожа на систему, изображенную на фиг. 3 в виде многомерного пространства генотипов, которое отображается через многомерное пространство эпигенетических операторов в другое многомерное пространство фенотипов, а это последнее переходит в свою очередь в «пространство приспособленности». Пространство приспособленности представляет собой по существу одномерное пространство, будучи образовано лишь количественными колебаниями одного только коэффициента приспособленности или параметра Мальтуса. Однако отображение пространства фенотипов в пространство приспособленности представляет собой «толерантное отображение» в том смысле, как его понимает Зиман. Иными словами, естественный отбор не делает различий между фенотипами, очень близкими по своей приспособленности (более детальное обсуждение этого вопроса см. [2]).

Если мы обратимся к эволюции на молекулярном уровне, то доводы против случайного поиска будут более слабыми, однако ими никак нельзя пренебречь. Разумеется, это будет совсем иной случай. Мы столкнемся здесь с ситуацией «один ген — один белок», и здесь уже никак нельзя заявить, что в результате случайных мутаций образуется лишь сообщество генов, связанное с продуктом эволюции, подобно тому как галька в бетоне связана с мостом. Нам предстоит выяснить, посредством каких процессов эволюция приходит к образованию белка, обладающего ферментативной активностью. Вообще говоря, биохимическая эффективность белка не зависит непосредственно от его первичной структуры, т. е. от последовательности аминокислотных остатков. Она зависит от конфигурации и свойств третичной структуры или даже структуры более высокого порядка, которую может образовать спиральная аминокислотная цепь. Эта конфигурация в значительной мере определяется первичной структурой, однако все более распространяющееся представление о том, что белки могут проявлять аллостерические свойства по отношению к другим молекулам из своего окружения, показывает, что одна лишь первичная структура еще не определяет полностью биохимические свойства белка. Таким образом, даже одиночная молекула обладает «фенотипом», который частично определяется средой.



Фиг.3. Схема естественного отбора у высших организмов. Процесс начинается с популяции генотипов в многомерном *пространстве генотипов* (1). Они отображаются через многомерное пространство *эпигенетических операторов* (2) (операторы, возникающие в окружающей среде, обозначены пунктирными стрелками) в также многомерное *пространство фенотипов* (3). Затем это пространство отображается посредством сложной функции в одномерное *пространство приспособленности* (4), в котором единственная переменная представляет собой коэффициент приспособленности или параметр Мальтуса, т.е. число оставленных потомков. Естественный отбор действует именно в пространстве приспособленности, однако значения приспособленности, толерантные друг другу, практически неотличимы.

Эффективность белка (т. е. его селективная ценность) зависит главным образом от одного или нескольких активных центров на поверхности третичной структуры белка. Эти центры составляют лишь небольшую часть всей аминокислотной цепи. Остальную ее часть можно рассматривать как упаковку или подмостки, и она имеет не большее отношение к активности белка, чем подмостки, на которых лежал на спине Боттичелли, расписывая потолок Сикстинской капеллы,— к его росписи.

Последовательность аминокислот в белке можно изменить, не только заменяя пару нуклеотидов в ДНК, что происходит, по-видимому, чисто случайно. Существуют также возможности перестройки, дупликации или инверсии всей последовательности аминокислот, состоящей из значительного числа единиц, посредством таких процессов, как внутрицистронная рекомбинация (ср. представления Смитиза о детерминации антител). Эти процессы также можно считать «случайными», но в совершенно ином смысле, нежели тот, который мы подразумеваем, имея в виду только «случайное блуждание» в пространстве возможных последовательностей аминокислотной цепи данной длины. Более того, как показал Фрезер (см. [2]), как только организмы достигают такого эволюционного уровня, на котором у них имеются диплоидные геномы, возможности рекомбинации в огромной степени увеличивают эффективность случайных процессов в выборе возможных вариантов. Используя это явление, он составил программы для вычислительных машин и пришел к выводу, что «генетический механизм представляет собой великолепное обучающееся устройство», в отличие от менее сведущих в биологии вычислителей, например М. Идена (см. [2]), пришедшего к заключению, что «все попытки создать возможность для обучения «вычислительной машины» посредством введения в какой-либо аспект программы случайной изменчивости и отбора оказались явно безуспешными».

Мне кажется, что основные проблемы молекулярной эволюции состоят в следующем:

1. На первом этапе эволюции каким-то образом возник белок, который, скручиваясь, образовал третичную структуру с активным центром, в какой-то степени «приспособленным» к определенному субстрату и поэтому способным оказывать на него ферментативное действие. На свойства такого центра может влиять не только первичная последовательность аминокислот, но и другие молекулы, имеющиеся вокруг, среди которых сами молекулы субстрата могут играть важную роль.

2. На следующих этапах эволюции происходит совершенствование и стабилизация эффективных характеристик этих центров.

На этих следующих этапах эволюция могла пойти по одному из двух путей, открытых для эволюции высших и более сложно организованных существ: либо по пути улучшения приспособляемости молекул, т. е. увеличения легкости изменения свойств активного центра под действием самого субстрата, с тем чтобы сделать этот центр более эффективным; либо по пути канализации, т. е. такого усовершенствования остальной части аминокислотной цепи, которое бы обеспечивало стабилизацию какого-либо активного центра, не зависящего от наличия молекул субстрата. Эти задачи выполняются посредством процессов, случайных на двух уровнях: во-первых, случайные изменения одиночных нуклеотидов и, во-вторых, перестройки последовательности нуклеотидов.

Те же два типа мутационных процессов действуют и на первом этапе эволюции, в ходе которого образуется белковая молекула, обладающая некоторой полезной биохимической активностью; однако мне представляется, что первый из этих процессов должен иметь большее значение.

До тех пор пока мы не будем знать больше о природе активных центров ферментов — о том, насколько детальна должна быть их спецификация и в какой мере они могут проявлять приспособление к молекулам субстрата,— по-видимому, нельзя будет сказать, могут ли эти случайные процессы привести, во-первых, к образованию эффективных белковых молекул, а во-вторых, к их стабилизации и совершенствованию до уровня современных белковых молекул. Однако адекватность. случайного поиска как основного эволюционного механизма представляется проблематичной только в этой области. Как говорилось в первом разделе этих заметок, мы, разумеется, не должны считать, что глаз позвоночного животного, нога лошади или шея жирафа представляют собой в сколько-нибудь серьезном смысле результат случайного поиска.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Pattec H. H.*, in: Natural automata and useful simulations, Spartan books, Wash.; Macmillan, London, p. 76.
2. Mathematical challenges to the neo-Darwinian interpretation of evolution, Wistar Inst. Syrup. Monogr., No. 5 (1967).

ПРОБЛЕМА СЧЕТА

Д. Мейнард Смит
(Сассекский университет)

Развитие, по-видимому, происходит поэтапно, причем необходимым условием наступления каждого следующего этапа является завершение предыдущего. Каждый отдельный этап может быть сравнительно простым, даже если конечный результат длинной цепи таких этапов будет исключительно сложным. Один из возможных теоретических подходов может заключаться в определении характерных этапов (их может быть сравнительно немного) и разработке их возможных механизмов. Автор этой статьи, так же как и Вольперт, пошел именно по этому пути.

Рассматриваемый здесь этап развития — это образование постоянного числа сходных частей. Например, каким образом у большинства людей развивается по 5 пальцев на каждой руке и 29 позвонков (если не считать хвостового отдела)? Эта проблема, которую я называю проблемой счета, напоминает проблему трехцветного флага Вольперта тем, что она в простой форме иллюстрирует многие черты морфогенеза. Прежде всего мы рассмотрим возможные типы «считающих машин», а уже затем решим, к какому из них относятся зародыши.

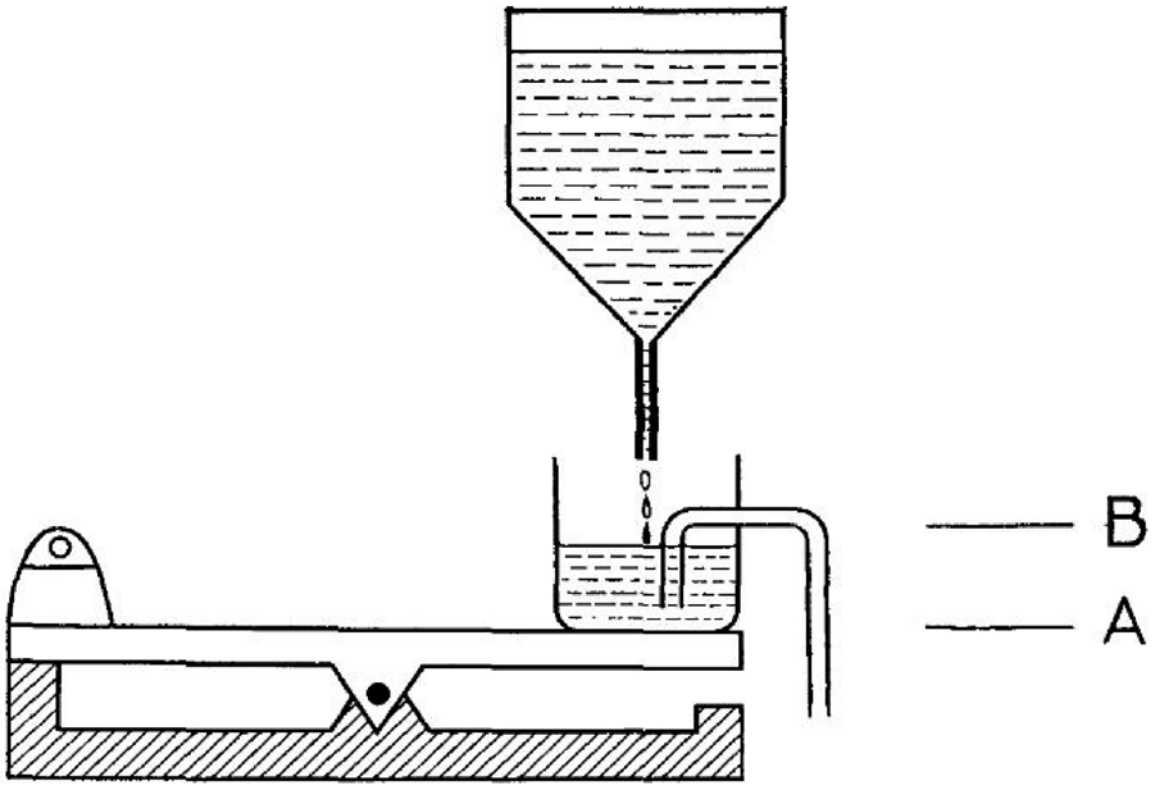
«Считающей машиной» я называю устройство, которое может совершить либо N одинаковых операций по получении одного стимула, либо одну операцию после получения N стимулов. Обратимая машина, умеющая производить одну из этих операций, может осуществлять и другую, и даже необратимые машины этих двух типов, по-видимому, обладают известным структурным сходством. Зародыши принадлежат к устройствам первого рода: строго говоря, в организме, развивающемся из одного яйца, лишь однажды образуются пять пальцев на правой руке, но в каждом из организмов, развивающихся из множества одинаковых яиц, образуется по пяти пальцев, что равнозначно образованию пяти пальцев одним яйцом после каждого последующего оплодотворения. Животные, имеющие нервную систему, могут принадлежать как к одному, так и к другому типу, т. е. они могут реагировать один раз на определенное число воздействий или же реагировать определенное число раз на одно воздействие.

Строго говоря, такие устройства следует назвать «машинами, генерирующими числа» (number generating machines), а термин «считающие машины» оставить для тех устройств, которые могут совершать одну опера-

цию варьирующее число раз (это число можно предсказать в зависимости от получаемого стимула) или реагируют качественно различным образом в зависимости от числа полученных стимулов.

Существует, по-видимому, два основных вида считающих машин, которые я называю *счетчиками отношений* и *счетчиками чисел*. Схема простого счетчика отношений представлена на фиг. 1.

Предположим, что для заполнения верхнего сосуда требуется в n. раз больше воды, чем для заполнения нижнего сосуда от *A* до *B*, и что когда нижний сосуд почти наполнен, он перетягивает коромысло. Тогда, если *n* лежит между 5 и 6, качели качнутся пять раз при условии, что верхний сосуд наполнен до краев. Относительно этого устройства необходимо сделать два замечания, которые, по-видимому, касаются общих свойств счетчиков отношений. Во-первых, должен существовать какой-то «квантующий механизм» (в данном случае — сифон, из которого вода вытекает быстрее, чем из верхнего сосуда), разбивающий непрерывный процесс на ряд дискретных операций. Во-вторых, получаемое число *n* зависит от соотношения между двумя непрерывными переменными; если *n* должно быть постоянным, то вариабельность этих переменных должна быть ограниченной.



Фиг. 1.

При счете чисел машина также должна уметь генерировать дискретные события, но их число регулируется взаимно однозначным спариванием каждого из них с элементами, заложенными в самой машине. Все эти элементы могут быть сходны друг с другом. Например, при игре в крикет один игрок бросает подряд шесть мячей, а затем его сменяет другой игрок. Судья часто считает эти мячи, перекладывая после каждого броска по одному камешку из левого кармана в правый. Когда он перекладывает последний, шестой камешек, он говорит: «Все!», и тогда на поле выходит другой игрок.

В других случаях указанные элементы могут быть неодинаковыми и образуют некую последовательность в соответствии с какими-то правилами. Так, судья, который хочет положить себе в карман шесть камешков, может брать их по одному из кучки и класть в карман, произнося при этом: «Один—два — три — четыре—пять — шесть». Для этого необходимо, чтобы у него в мозгу уже было представление о шести качественно различных числах, а также правила счета («после четырех надо сказать пять и т. д.», «после шести надо сказать «*все*»). Этот механизм легко можно изменить (варьируя последнее правило), с тем чтобы он генерировал разные числа в ответ на различные стимулы, т. е. это скорее настоящая считающая машина, чем просто устройство, генерирующее числа.

Отметим, что при цифровом счете механизм счета отделен от квантующего механизма; так, в первом случае судья с его камешками представляет собой считающую машину, но не несет ответственности за то, что игроки бросают мячи один за другим, а не все сразу.

На первый взгляд может показаться, что объяснить, как считают зародыши, не вызовет трудностей. Например, для образования в организме полипептида из 163 фенилаланиновых остатков необходимо, чтобы соответствующая нить ДНК состояла из 489 адениновых оснований. Но трудность заключается не в этом. Представим себе, например, животное. у которого постоянное число сегментов равно 163 (насколько мне известно, таких животных пет). Трудность заключается в том, чтобы объяснить, как способность к образованию полипептида из 163 остатков реализуется в ходе развития в образование 163 сегментов. В этом плане проблема счета — типичная морфогенетическая проблема; таким образом молекулярная биология может объяснить форму макромолекул или же сможет сделать это, когда будет понято, как последовательность аминокислот определяет третичную структуру. Однако маловероятно, чтобы *форма* клеток или высших организмов определялась формой составляющих их молекул подобно тому, как форма мозаичной картинки-головоломки опре-

деляется формой ее частей или форма вирусной частицы — формой составляющих ее молекул.

Нетрудно представить себе механизмы счета отношений в зародышах. Один из возможных механизмов предложил Тьюринг [1]. Обычно, когда несколько реагирующих химических веществ свободно диффундируют по какой-либо области, или «морфогенетическому полю», они достигают устойчивого равновесного распределения, так что их концентрации одинаковы по всему полю. Тьюринг показал, что для некоторых значений скоростей реакции и диффузии это однородное равновесие неустойчиво и любое незначительное нарушение приведет к образованию стоячей волны концентраций с «химической длиной волны» λ, разделяющей пики концентраций. Если какое-либо из этих веществ индуцирует дифференцировку клеток в определенном направлении, например к образованию щетинки, то такой процесс может объяснить упорядоченное распределение структур по поверхности. Этот механизм становится более правдоподобным, если учесть последние данные о регуляции белкового синтеза [21.

Образование химической волны дает квантующий механизм. Если волна образуется в пределах поля данных размеров, то имеется и считающий механизм. Таким образом, в одномерном случае, если в поле с длиной *s* образуются волны с химической длиной волны λ, то, поскольку должно образоваться целое число волн, получаемое в действительности число обычно представляет собой ближайшее к s/λ целое число. Если в силу каких-то причин изменяются размеры морфогенетического поля, то должно измениться и число образующихся структур. Это часто случается; например, Крегер описал, как можно изменить число жилок в крыле у *Ephestia*, изменяя размеры поля. Тем не менее при попытке объяснить количественное постоянство повторяющихся частей путем счета отношений возникают трудности. Например, если требуется получить число 30 с ошибкой не более 5% (а позвоночные, кольчатые черви и членистоногие именно с такой точностью определяют число сегментов), то коэффициент изменчивости отношений s/λ не должен превышать 1%. Изучение коэффициентов изменчивости некоторых макроскопических линейных размеров у животных [3] показывает, что даже 5%—это невысокое значение. Таким образом, число сегментов определяется с парадоксальной точностью. Ссылки на то, что на молекулярном уровне размеры могут определяться весьма точно, ничему не помогут, поскольку в этом случае остается проблема трансляции.

Одним из возможных решений является процесс умножения. Предположим, что, вместо того чтобы разделиться сразу на 30 частей, тело сна-

чала делится на 5 частей, а затем каждая из них делится на 6 частей; при этом можно получить ровно 30 частей без какой-либо исключительной точности на каждом этапе. Есть простой способ обнаружить этот процесс, если он действительно происходит. Отклонения от нормы, если они будут иметь место, будут отличаться от нормы не на единицу, а всегда на большее число. В связи с этим интересно, что отклонения в числе сегментов у многоножек всегда кратны 2. Однако у меня очень мало других данных о существовании процессов умножения. Быть может, самая яркая черта модели «умножения» состоит в том, что она выявляет главную, на мой взгляд, причину возникновения ступенчатости и иерархии развития: существует предел сложности структур, которые могут быть созданы с достаточной надежностью за один этап.

Вероятно, все числа, обнаруживающие большое постоянство как в эволюции, так и в развитии, связаны со счетом чисел. Некоторые примеры цифрового счета весьма тривиальны. Например, число спинномозговых нервов определяется числом сомитов при помощи такого счета. Но это не представляет большого интереса, поскольку остается неясным, как микроскопическая информация переводится в макроскопическую, т. е. каким образом строение макромолекул определяет крупномасштабную структуру. Более перспективен счет чисел с использованием качественно различных элементов. В процессе эмбриональной индукции ткань типа *A* стимулирует другую ткань, с которой она приходит в контакт, к дифференцировке в ткань типа *B*. Это вполне сравнимо с «правилом счета», при котором каждое число определяет последующее. Эксперименты, позволяющие предполагать наличие механизма цифрового счета, были проведены Моументом [4] па черве *Clymenella*, обладающем постоянным числом сегментов 22. Если удалить по нескольку сегментов одновременно с переднего и заднего концов тела червя, то он способен регенерировать их, восстанавливая исходное число сегментов, т. е. 22. Еще более интересно, что удаленный участок сохраняет свое положение в ряду; так, например, если удалить четыре сегмента с переднего конца тела и два с заднего, то на каждом конце тела восстанавливается как раз такое число сегментов.

Эти результаты невозможно объяснить, если считать, что между сегментами пет никаких различий. Интересно, однако, что *Clymenella* может считать как вперед, так и назад. Простейшим правилом такого счета было бы: «Если *C* находится в контакте с *B*, то следующим сегментом будет *D*». Если же *C* находится в контакте с *D*, то следующим сегментом будет *B*. Это сближает нашу проблему с проблемой трехцветного флага Вольперта.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Turing A. M.*, Phil. Trans. Roy. Soc., B, 237, 37 (1952).
2. *Smith J. M.*, in: Mathematics and computer science in biology and medicine, HMSO, 1965.
3. *Smith J. M.*, Proc. Roy. Soc., B, 152, 397 (I960).
4. *Moment B. G.*. J. Exp. Zool., 117, 1 (1961).

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 издателю 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 заверенное 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 редактров 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 Jornal, 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
ООО Сенсор Микрон
Журнал входит в перечень ВАК РФ
Статьи рецензируются

ПОДПИСКА НА ЖУРНАЛ НМФМ

Подписной индекс журнала в каталоге агентства «Урал-Пресс» 70017.
Электронный подписной каталог и контакты всех представительств «Урал-Пресс»
на сайте www.ural-press.ru.
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.