

УДК 531.19:539.2:539.16

КОНЦЕПЦИЯ “СЛОЖНОСТИ” В РАДИАЦИОННОЙ ФИЗИКЕ

© 2022 г. Б. Л. Оксенгендлер^{a, b, d, *}, А. Ф. Зацепин^b, А. Х. Аширметов^d, Н. Н. Тураева^c,
С. Х. Сулейманов^d, Н. Н. Никифорова^a, Х. Б. Ашуров^a

^aИнститут ионно-плазменных и лазерных технологий Академии наук Республики Узбекистан,
Ташкент, 100125 Узбекистан

^bФизико-технологический институт Уральского федерального университета,
Екатеринбург, 620078 Россия

^cWebster University, USA, Ист-Локвуд-Авеню, 470 Сент-Луис,
Миссури 63119-3141 США

^dИнститут материаловедения Академии наук Республики Узбекистан, НПО “Физика-Солнце”,
Ташкент, 100084 Узбекистан

*e-mail: oksengendlerbl@yandex.ru

Поступила в редакцию 26.07.2021 г.

После доработки 22.09.2021 г.

Принята к публикации 29.09.2021 г.

Рассмотрена концепция “сложности” применительно к радиационным процессам в конденсированной среде. Показано, что комбинация таких свойств как наноразмерность, фрактальность, низкая размерность, хиральность и иерархия в сочетании с сильной неравновесностью создают условия проявления необычных, “эмерджентных” радиационных эффектов (радиационной синергетики, гигантского понижения доз пороговых эффектов радиации и других эффектов). Приведены примеры радиационных эффектов в живых и неживых системах, трактуемых в рамках концепции “сложности”. Представлен обзор как полученных ранее, так и новых результатов авторов.

Ключевые слова: сложность, нанообъекты, фракталы, низкая размерность, хиральность, иерархические структуры, синергетика, радиационные процессы, эмерджентность, единство анализа живой и неживой природы.

DOI: 10.31857/S1028096022060139

ВВЕДЕНИЕ

На нынешнем этапе развития фундаментальных и прикладных исследований в области взаимодействия заряженных частиц и волновой радиации с различными материалами и радиационных процессов все больше проявляются тенденции, присущие современной физике в целом. Так, в последней трети XX в. в различных науках о строении вещества возник интерес к объектам совершенно нового типа и к процессам необычного типа, в них протекающих. Это отразилось в появлении соответствующих ключевых терминов: “нанотехнологии”, “фрактал”, “системы с низкой размерностью”, “хиральная симметрия”, “иерархическая структура” и “самоорганизация”. Вокруг этих понятий стали формироваться обширные области новых эффектов и явлений, которые отразились в соответствующих областях материаловедения. Но уже в начале XXI в. проявились новые тенденции — все большее перекрытие перечисленных выше областей. Например, возникли представления о нанофракталах, наносинергетике и так далее. Для всех этих перекры-

вающихся областей стали очень важными нелинейность свойств, открытость систем, сильная неравновесность. Характерной особенностью всех этих областей стало появление принципиально новых свойств, которые не наблюдались в прародителях (паттернах). Это обстоятельство оказалось отнюдь не редким исключением, а регулярным эффектом и получило название “эмерджентность”. Объективно возник вопрос о необходимости совершенствования или даже создания новой парадигмы, которая была бы способна стать базой не только естественных наук (физики, химии, биологии), но и гуманитарных.

В 1972 г. была опубликована работа Ф. Андерсона [1], в которой было выдвинуто положение о том, что “на каждом иерархическом уровне объекта сумма свойств оказывается больше комбинации составляющих”. Такие системы Андерсон назвал “сложными”, а парадигму, которой еще предстояло появиться, — сложностью. Необходимо отметить, что понятие сложности выдвигали и ранее, однако в качестве показателя индивидуальных наук — математики [2] (Колмогоров, Че-

тин) и химии [3] (Бончев). Однако можно говорить, что это понятие появилось относительно давно – многие авторы из принципиальных соображений считали биологию наукой о сложных неравновесных иерархических структурах, для функционирования которых требовались некоторые особые “биотонические” представления, которые, собственно, и приводили к неизбежности сложного [4]. Важно отметить, что и в натур-философии определились два принципиально различных методологических подхода: “редукционизм”, традиционно развивавшийся с древнейших времен и означавший углубление знаний по мере дробления объекта на все более мелкие части, и “холизм”, который и стал базой для сложности [5]. Очень важны здесь результаты И. Пригожина и его школы по поиску “азбуки сложности”, характерной для всех наук холического типа [6].

Показателем того, что концепция сложности действительно имеет право на самостоятельное существование, является следующее: в ее рамках был обнаружен ряд фундаментальных эффектов, не укладывающихся в предыдущие методологические подходы, в частности, динамический хаос и сценарии его появления [7], уникальная чувствительность кинетики процессов к начальным условиям [8], а также самоорганизованная критичность, претендующая на всеобъемлющий закон природы [9, 10]. Совершенно закономерно, что такой общий подход мог бы быть весьма плодотворен и в такой области науки, как радиационная физика [11–14], причем как для живых, так и не живых объектов. Действительно, в серии работ [13, 15–19], касающихся самых разнообразных объектов, проявились закономерности, которые можно было бы отнести к сложности в радиационной физике. В этой связи представляет интерес их совместный анализ в рамках парадигмы сложности. Цель настоящей работы – продемонстрировать указанное единство.

СИНЕРГЕТИКА РАДИАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ ПРИ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОМ ИОННОМ ОБЛУЧЕНИИ

Хотя фундаментальная радиационная физика [11–14] является надежной базой многих прикладных аспектов (например, при решении проблемы радиационных отказов полупроводниковой аппаратуры [14]), в последнее время появились опытные данные, интерпретация которых в привычных схемах оказывается затруднительной. Одним из таких впечатляющих событий последнего времени стала авария космического аппарата “Фобос-Грунт” [20]. Учитывая, что наиболее подробные данные о катастрофических последствиях радиационного воздействия представлены

именно для “Фобос-Грунт”, ниже приведем оценки для этой аварии. Как известно [15], космический аппарат был выведен на орбиту со средним радиусом $R = 250$ км 9 ноября 2011 г. и, совершив 1.7 витка, не ответил более на теле- и радиокomанды Земли. Вскоре, 15 января 2012 г., он сошел с орбиты и сгорел в атмосфере. По материалам работы комиссии [20] из двух заявленных версий аварии (первая – антропогенная гибель, вторая – радиационное повреждение полупроводниковой микросхемы WS512K32V20G24M тяжелыми заряженными частицами космического происхождения) более вероятной признана вторая версия. Она была проанализирована на базе существующих представлений радиационной физики [11–14], но этого оказалось недостаточно для понимания события. С большой степенью общности можно выделить две необычные для радиационной физики особенности, проявившиеся при аварии космического аппарата: аномально быстрый по времени первый отказ радиоэлектронной аппаратуры; перемежающийся характер ее выключения и включения, завершающийся полным отказом. Для объяснения этих странностей оказалось необходимым развить совершенно новый аспект радиационной физики твердого тела – радиационную синергетику [15–19].

Структура интегральных схем и характер их радиационной модификации

Современные интегральные схемы состоят из немалого числа элементов. Несмотря на это, с большой степенью общности можно считать, что причиной изменения основных характеристик являются изменения электронного спектра в запрещенных зонах и энергетического профиля границ этих зон [14, 21]. В свою очередь, физические явления, лежащие в основе подобной модификации, сводятся лишь к трем радиационным эффектам: дефектообразованию, радиационно-стимулированной диффузии и квазихимическим реакциям между дефектами [13]. Все эти эффекты могут быть вызваны возбуждениями в атомной и электронной подсистемах. Оценки эффективности базовых процессов и концентраций рожденных электронных и атомных возбуждений на основе существующих представлений современной радиационной физики твердого тела [11–14] не дают возможности объяснить особенности аварии космического аппарата “Фобос-Грунт” [15]. Эти оценки, использующие параметры радиационных поясов Земли [22], на наш взгляд, не зачеркивают вторую – радиационную – версию о причинах аварии космического аппарата, а лишь указывают на несостоятельность общепризнанных идей радиационной физики [23] относительно ситуации, сложившейся на космическом аппарате. Все необходимые оценки, касающиеся пара-

метров космической радиации, типа и концентрации дефектов, возникающих в условиях космического аппарата “Фобос-Грунт”, а также ряд других важных параметров приведены в [16, 19].

Радиационная синергетика

На наш взгляд, при радиационном воздействии на микросхемы космического аппарата “Фобос-Грунт” соединились два условия: сильная неравновесность, характерная для протонного облучения столь высоких энергий, и индивидуальные особенности примесно-дефектного состава, сформировавшиеся благодаря технологии производства данной микросхемы (например, возможности реализации между дефектами так называемых автокаталитических квазихимических реакций). Это типичная синергетическая ситуация, и она уже проявилась в ряде взаимодействий радиации с веществом [15–19]. Речь идет о том, что в синергетических системах возникают, во-первых, аномально большие флуктуации, не описываемые распределением Пуассона, и, во-вторых, система оказывается катастрофически чувствительной к этим флуктуациям. Рассмотрим две возможные схемы реализации этой идеи в событиях с космическим аппаратом “Фобос-Грунт”.

Флуктуации концентрации неконтролируемой примеси и аномально быстрый первый отказ прибора

В наиболее общем виде критическое поведение системы возможно при возникновении в ней некой концентрации дефектов, приводящей к критическим значениям параметров прибора. Пусть система сильно неравновесна из-за радиационного воздействия и в ней идут квазихимические реакции между несовершенствами j -типов. Если в систему с X компонентами реакций добавляется (подключается радиацией) еще один компонент Y (в малой концентрации), то вся совокупность реакции будет иной:

$$\begin{cases} dX_i/dt = F_i^e + \tilde{F}_i(\{X_j\}, Y, \epsilon) & (1) \\ dY/dt = \tilde{G}(\{X_j\}, Y, \epsilon). & (2) \end{cases}$$

Здесь F_i^e описывает радиационно-стимулированные i -компоненты, $\tilde{F}_i(\{X_j\})$ описывает квазихимические реакции внутри системы, ϵ – малый параметр, такой, что при $\epsilon \rightarrow 0$ система переходит в дорадиационное состояние. Оказывается [24, 25], если линеаризовать (1) и (2), учитывая малость флуктуаций δX_i и δY , а также $\epsilon \ll 1$, то характеристическое уравнение примет вид:

$$\epsilon \omega^{n+1} + a_n(\epsilon)\omega^n + \dots + a_1(\epsilon)\omega + a_0(\epsilon) = 0. \quad (3)$$

При малых ϵ из (3) получаем дополнительное решение:

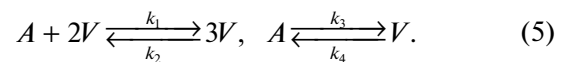
$$\omega_{n+1} \approx -a_n(\epsilon)/\epsilon. \quad (4)$$

Важно, что при $a_n(\epsilon) < 0$ и $\epsilon \rightarrow 0$ этот корень велик и положителен, что означает структурную неустойчивость системы (1) и (2) и свидетельствует об очень быстром росте во времени концентрации некоторых компонентов – дефектов. Это происходит тогда, когда новый компонент Y участвует в (1), (2) лишь с помощью автокаталитических реакций – так устроена \tilde{G}_i – некая функция со специальными свойствами [24]. Такова причина первой особенности динамики аварии космического аппарата “Фобос-Грунт”.

Отметим, что автокаталитические реакции реализуются отнюдь не всегда. Например, возможен такой вариант. Вблизи пары Френкеля, генерированной радиацией, оказывается вошедшая в образец (с помощью радиационно-стимулированной диффузии) примесь со свойствами сильного электрон-фононного взаимодействия (типа эффекта Яна–Теллера), которое включается электронными возбуждениями, также радиационного происхождения. Тогда, согласно концепции “слабой точки” [13], реализуется автокаталитическая реакция рождения вакансий (междоузлий): решетка + V + $P_p \rightarrow$ решетка + $2V$ + P_p + + междоузельный атом (вакансия).

Флуктуации параметров радиации и катастрофические дефектные процессы

В связи с тем, что при протонном облучении с $E_p \sim 10^9$ эВ рождаются изолированные и связанные пары Френкеля в области разупорядочения, а также электронные возбуждения, реальна ситуация, когда между изолированными и связанными дефектами (отметим их большую концентрацию A) имеют место электронно-стимулированные автокаталитические квазихимические реакции типа



Эти схемы соответствуют, например, такой физике: появление двух близко расположенных вакансий сильно деформирует локальную область кристалла, что делает возможным образование третьей вакансии.

Анализ этой системы в рамках синергетического мастер-уравнения [17, 18, 25, 26] приводит к стационарной вероятности генерации $P_s(X)$, где $X = V$ – число вакансий (междоузлий):

$$P_s(X) = P_s(0) \times \prod_{z=1}^X \{B[(z-1)(z-2) + P]/[z(z-1)(z-2) + Rz]\}. \quad (6)$$

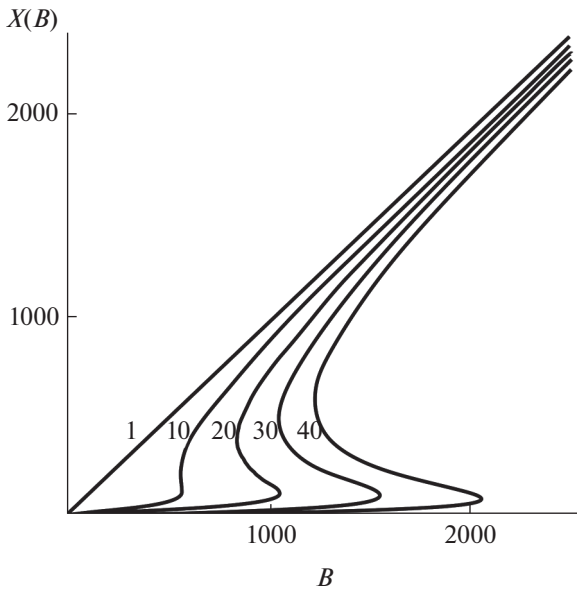


Рис. 1. Зависимость концентрации дефектов $X(B)$, экстремизирующей стационарное распределение вероятности $P_s(X)$ (6), от степени неравновесности B , определяемой радиационным воздействием. Возле каждой кривой указано отношение R/B , которое вычисляются по отношению констант скоростей реакций (5).

Здесь $B = \kappa_1 A / \kappa_2$; $P = \kappa_3 / \kappa_1$; $R = \kappa_4 / \kappa_2$. Экстремумы (6) дают связь между B и X :

$$B = X[(X-1)(X-2) + R] / [P + X(X-1)], \quad (7)$$

график которой имеет S-образный вид (рис. 1).

Очевидно, что при $R \neq P$ распределение $P_s(X)$ явно не пуассоновское и при больших B дает огромные флуктуации — это реализуется в условиях автокаталитичности и сильной радиационной неравновесности. Отметим, что по мере роста B смена режимов может быть “катастрофическая” и при небольших флуктуациях параметров радиации в окрестности бифуркации.

Переменяемость в дефектной системе и квазипериодичность отказов прибора

Наиболее загадочным явлением, сопровождающим аварию космического аппарата “Фобос-Грунт”, является квазипериодичность возвращения аппаратуры в рабочее состояние до момента окончательного прекращения теле- и радиосвязи. Это указывает на совершенно особую эволюцию дефектов в приборе, не встречавшуюся прежде. Построим простейшую модель, основываясь на синергетическом подходе. Обсудим кинетику “представительных” дефектов, вносящих рекомбинационные уровни в запрещенную зону. При использовании дискретного подхода [25] концен-

трация различных поколений этих дефектов может быть записана в виде:

$$N_{n+1} = f(N_n), \quad (8)$$

где n — номер поколения ($n = 0, 1, 2, \dots$).

Пусть процессы возникновения дефектов таковы: дефекты рождаются при воздействии радиации с интенсивностью I , и, кроме того, они генерируются при локализации двух дефектов вокруг примесей — катализатора (с концентрацией N_i). Физика последнего процесса следующая: катализатор должен быть центром притяжения основных дефектов и достаточно сильно деформировать решетку, так чтобы эта деформация “разрешала” рождение нового дефекта. Подобными свойствами обладают, например, примеси, демонстрирующие сильный эффект Яна–Теллера (например, азот в кремнии). Уничтожение же дефектов, предположим, идет через тройные столкновения, т.е. пропорционально N_n^3 , что физически может реализоваться либо через образование тройного дефекта $(N_n)_3$, либо путем рекомбинации за счет захвата трех межузельных атомов в области локализации трех дефектов N_n (если это вакансии).

Тогда уравнение (8) после приведения к безразмерному виду можно записать как:

$$X_{n+1} = \tilde{\epsilon} + X_n + uX_n^2 - gX_n^3. \quad (9)$$

Здесь $\tilde{\epsilon}$ пропорциональна I , u пропорциональна N_i , X_n — безразмерная концентрация “представительных” дефектов в n -поколении, g — некий положительный параметр [27].

Анализ выражения (9) на компьютере [27] показывает, что эволюция $\{X_n\}$ зависит от величин $\tilde{\epsilon}$, u , g . В рассматриваемой задаче все эти параметры положительны, и в этих условиях характерная диаграмма Ламерея имеет вид, представленный на рис. 2. Из этого рисунка видно, что в области $0 < X_n < X_{\max} \approx u(1 + \tilde{\epsilon}g^2/u^3)/g$ происходит монотонное накопление дефектов, тогда как в области $X_n \approx X_{\max}$ наблюдаются несколько резких скачков концентрации X_n . Это означает, что в системе дефектов возникает динамический хаос (в режиме переменяемости I -типа), в котором сосуществуют ламинарная фаза (монотонная часть) и турбулентная фаза (область скачков) (рис. 3).

Переходя к непрерывному описанию [25–28], из (9) получим:

$$dX/d\tau = \tilde{\epsilon} + uX^2 - gX^3, \quad (10)$$

что возможно при условии $(X_{n+1} - X_n)/X_n \ll 1$, τ — безразмерное время. При малых X можно пренебречь членом gX^3 , и интегрирование уравнения (10)

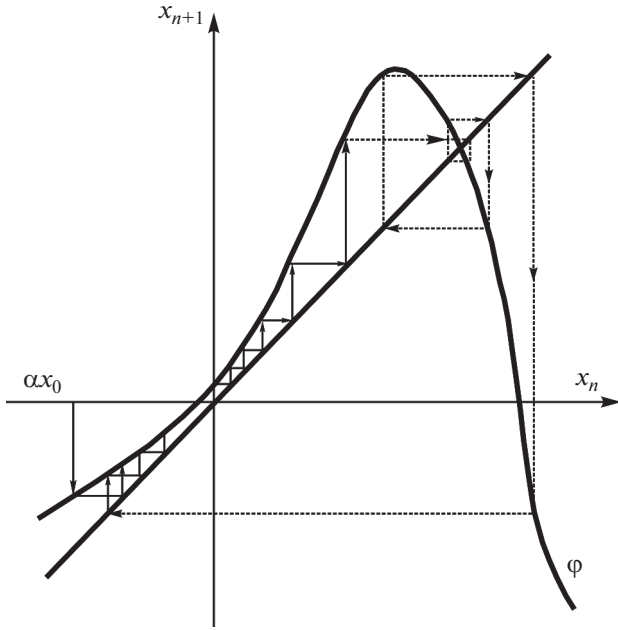


Рис. 2. Диаграмма Ламерея (9), демонстрирующая последовательное сочетание двух фаз: ламинарной (от αx_0 до области максимума перевернутой параболы) и турбулентной (область пересечения перевернутой параболы и прямой, проходящей через начало координат) [16, 17].

дает для длительности ламинарного участка выражение:

$$\tau(X_{out}, X_{in}) = 1/\sqrt{\tilde{\epsilon}u} [\arctg(X_{out}/\sqrt{\tilde{\epsilon}/u}) - \arctg(X_{in}/\sqrt{\tilde{\epsilon}/u})]. \quad (11)$$

Для средней длительности ламинарного участка из (11) имеем (в соответствии с формализмом динамического хаоса [26, 27]):

$$\langle \tau \rangle = 1/\sqrt{\tilde{\epsilon}u} \arctg(C/\sqrt{\tilde{\epsilon}/u}). \quad (12)$$

Здесь C близко к X_{max} (рис. 2). При $C/\sqrt{\tilde{\epsilon}/u} \gg 1$ получаем $\langle \tau \rangle = \pi/2\sqrt{\tilde{\epsilon}u}$.

В задаче величину $\langle \tau \rangle$ связываем со временем ламинарного накопления дефектов и, соответственно, монотонного ухудшения свойств материала прибора. По окончании $\langle \tau \rangle$ идут скачки концентрации X так, что прибор выходит из строя. Поскольку при накоплении дозы в образец “втягивается” примесь-катализатор N_i , то u растет, $\langle \tau \rangle$ уменьшается. Это приводит к ускорению начала турбулентной фазы в системе дефектов, вследствие чего прибор окончательно выходит из строя ($\langle \tau \rangle \rightarrow 0$). Отметим, что наиболее непонятный момент – временное возвращение прибора в рабочее состояние (т.е. к малым X_n) происходит именно в результате турбулентной фазы ($X_n \rightarrow X_{in}$) (рис. 2). Следует сказать, поскольку X_{in} случайна, можно ввести плотность вероятности $P(\tau)$ реализации ламинарного периода длительностью τ [27, 28]. Тогда вероятность нормальной работы прибора в течение времени τ_0 и более будет определяться как:

$$\Omega(\tau_0) = \int_{\tau_0}^{\infty} P(\tau) d\tau. \quad (13)$$

Здесь граничная величина τ_0 определяется из условия $\tau_0 = \tau(X_{out}^0, X_{in}^0)$ (11), где X_{out}^0 – предельная концентрация дефектов, при которой прибор еще может работать. Таким образом, величина

$$W(\tau_0) = 1 - \Omega(\tau_0) \quad (14)$$

является вероятностью отказа прибора в развиваемой в настоящей работе концепции синергетических радиационных процессов, что радикально отличается от общеизвестных [29].

Подводя итог разделу, можно констатировать, что если в полупроводниковой системе-приборе, подвергнутой сильному радиационному воздействию, происходят автокаталитические реакции между возбуждениями в атомной и электронной подсистемах, то возможны режимы синергетических, аномально больших флуктуаций парамет-

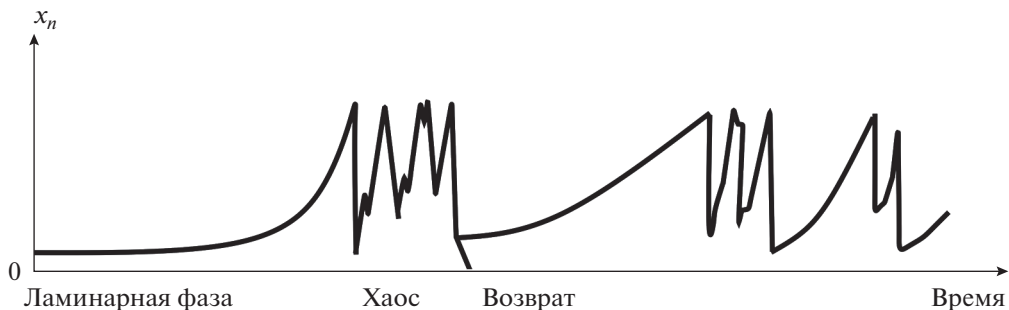


Рис. 3. Кинетика накопления дефектов в режиме перемежаемости, показывающая сосуществование ламинарных (гладких) и хаотических (зубчатых) фаз [16].

ров объектов, способные приводить к катастрофически быстрым и резким отказам, необъяснимым в терминах “среднего”. В ряде случаев отказы носят характер синергетической перемежаемости, что характерно для турбулентного режима. Все вместе взятое и могло наблюдаться в космическом аппарате “Фобос-Грунт” [15, 16].

Недавно возможность радиационно-стимулированной сегрегации, осуществляемой по сценарию перемежаемости, была предсказана в смешанном органо-неорганическом перовските (йод/бром) [30]. Вскоре новый эффект радиационной синергетики, родственной тому, что происходил в указанной выше интегральной схеме при аварии космического аппарата “Фобос-Грунт”, был экспериментально обнаружен при детальном исследовании деградации солнечных элементов на основе этого материала [31].

В принципе в настоящее время о реализации режима хаоса в виде перемежаемости в той или иной системе более или менее надежно можно судить по проявлению ряда качественных свойств, типа зависимости ряда величин от параметра. В рассматриваемом случае это среднее время τ и показатель степени в последнем члене при переменной X (9). Таким параметром могла бы быть и интенсивность облучения. В случае космического аппарата “Фобос-Грунт” это естественно требует повторяемости эксперимента, что иногда удается сделать лучше или хуже [28]. Однако именно в случае космического аппарата имеется дополнительная возможность: все общее время абсолютного выхода прибора из строя должно быть больше или равно времени вхождения (“подсасывания” радиацией) катализатора, прекращающего автокаталитические реакции между дефектами, описываемые уравнением (5). По-видимому, в натуральных экспериментах это время можно регулировать. На данном этапе имеет смысл судить о режиме перемежаемости в случае космического аппарата “Фобос-Грунт” по качественным характеристикам, которые в рамках существующих представлений [14] выглядят парадоксальными.

СЕЛЕКТИВНОЕ РАДИАЦИОННОЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ НА ПОЛИМЕРЫ И ЕГО ВОВЛЕЧЕНИЕ В ДЕГРАДАЦИЮ АКТУАЛЬНЫХ ВИРУСОВ

В радиационной физике конденсированных сред установлено, что базовым механизмом радиационной деструкции таких объектов, как молекулярные цепи, является ионизационный оже-механизм, суть которого описывается как последовательность следующих процессов: ионизация глубокой оболочки многоэлектронного атома цепи (особенно K -оболочки) \rightarrow оже-каскад с вовлечением в него валентных электронов \rightarrow образо-

вание группы многозарядных положительных ионов \rightarrow распад этой нестабильной группы (“кулоновский взрыв”), идущий в конкуренции с электронной нейтрализацией (“заливанием” соседними электронами) \rightarrow стабилизация дефектной структуры (деструкция) [13]. Сечение такой (подпороговой) деструкции определяется выражением [32]:

$$\sigma_d = \int_Z \left\{ \sum_i \sigma_i \tilde{\alpha}_i(Z) \exp(-\tau_+/\tau_e(Z)) \right\} dZ, \quad (15)$$

$$\sigma_d = \sigma_k \alpha_A \exp(-\tau_+/\tau_e).$$

Здесь σ_k – сечение ионизации K -оболочки, α_A – вероятность образования многократного оже-заряда Z , $\gamma = \exp(-\tau_+/\tau_e)$ – вероятность распада (разлета) положительных ионов в конкуренции с нейтрализацией путем электронного “заливания”. Все особенности физико-химии материала сказываются на τ_e : для металлов $\tau_e \approx 10^{-16}$ с, для полупроводников $\tau_e \approx 5 \times 10^{-15}$ с; для диэлектриков $\tau_e \approx 10^{-13}$ с; поскольку $\tau_+ \approx 5 \times 10^{-14}$ с (оно унифицировано), $\sigma_d^{\text{мет}} \ll \sigma_d^{\text{полупр}} < \sigma_d^{\text{диэл}}$ [13, 14].

Первая часть формулы (15) представляет собой наиболее общее выражение для сечения оже-деструкции, учитывающее следующие факторы: сечение ионизации σ_i отражает внешнее экранирование валентными электронами, что дает возможность провести картирование начальной позиции ионизации фосфора на ДНК- и РНК-вирусе; величина $\tilde{\alpha}(Z)$ учитывает эффект встряски, увеличивающий конечный оже-заряд; зависимость $\gamma(Z)$ позволяет весьма тонко учесть различие в эффекте конкретного распада нестабильного состояния в зависимости от величины Z . Каждый из этих эффектов реализуется при выраженной нелинейности процессов, так что общий эффект весьма показателен для концепции сложности.

Роль деформации биополимеров

Вопросы деформации полимеров рассматривали в [33, 34], где была специфицирована роль σ - и π -электронов (для проблемы τ_e). Однако именно в случае биополимеров возникают новые аспекты – для этих объектов в особых условиях (в клетках, в клеточных органеллах) необходимо учесть деформированные конформации и гетероатомность мономеров биополимеров [35, 36]. Обсудим эти аспекты в рамках теории радиационной физики конденсированных сред (т.е. изменения σ_d), дополнив тем самым стандартную феноменологию радиобиологии (“принцип попадания и мишени” Краутера, Тимофеева–Резовского и других [37]).

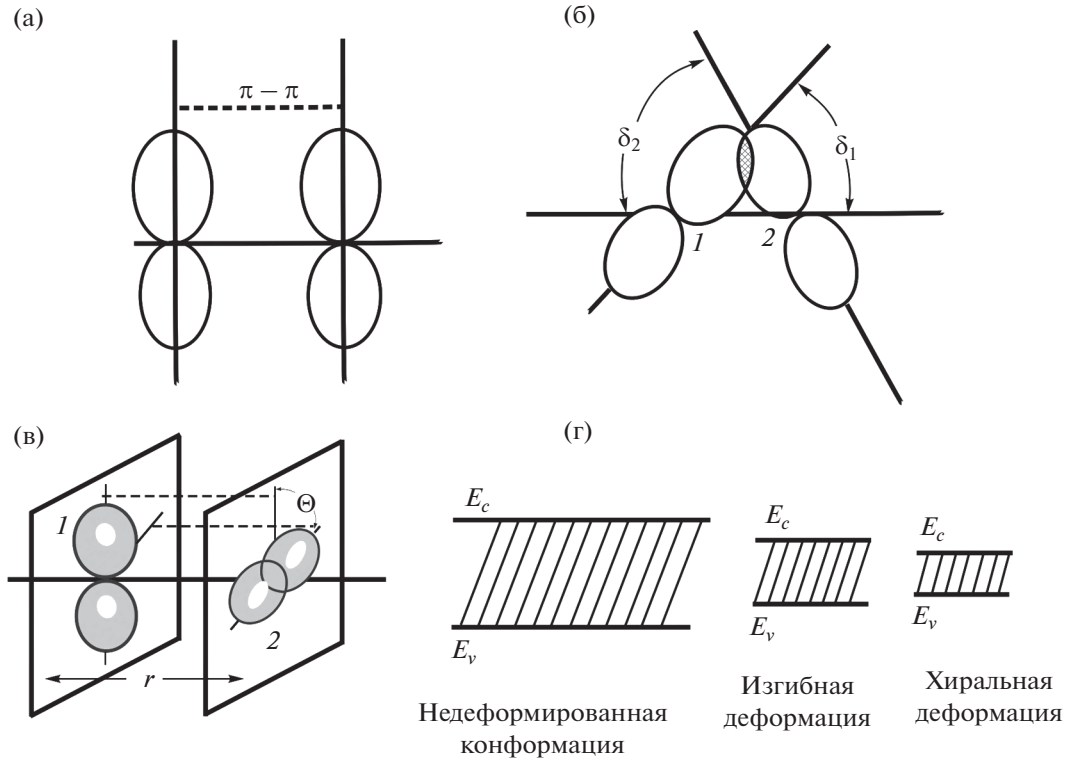


Рис. 4. Схема мономеров: а – недеформированная конформация; б – изгибная деформация; в – хиральная деформация; г – схематическая деформация разрешенной зоны (E_c – дно зоны проводимости, E_v – потолок валентной зоны). Обозначены связи $\pi-\pi$. В плоскостях 1 и 2 находятся соседние атомы мономера, δ_1 и δ_2 – углы наклона осей соседних орбиталей (1 и 2) к оси локального участка цепи, θ – угол хирального закручивания (спиральности).

В самом общем виде локальная деформация (изгиб и скручивание), описываемая углами δ и θ соответственно (рис. 4), приводит к измененным интегралам перекрытия S' :

$$S' = S_{\sigma-\sigma} (\cos\delta)^2 + S_{\pi-\pi} (\sin\delta)^2 \cos\theta. \quad (16)$$

Измененная величина S' ведет к изменению интегралов переноса (β'):

$$\beta'/\beta = [S'/(1+S')]/[S/(1+S)] \approx S'/S. \quad (17)$$

Соответственно, после внесения многократного положительного заряда в валентную зону его время “оседлой” жизни τ'_e также меняется:

$$\tau'_e/\tau_e = (\hbar/\Delta E'_v)/(\hbar/\Delta E_v) \approx S'/S. \quad (18)$$

С учетом (15) и (17) получим отношение сечений деструкции для деформированных и недеформированных вариантов:

$$\gamma(\delta, \theta) = \left[\sigma'_d/\sigma_d \right] \approx \left\{ \exp[-\tau_+/ \tau_e] \right\}^{S'/S}. \quad (19)$$

Уравнение (19) имеет очень важные частные случаи:

$\delta = 0$; $\theta \neq 0$, что дает $d\sigma_d/d\theta > 0$ (хиральная конформация),

$\delta \neq 0$; $\theta = 0$, что дает $d\sigma_d/d\theta \leq 0$ (изгибная конформация, знак этой величины зависит от исходного типа связи: $\sigma-\sigma$ или $\pi-\pi$).

Роль гетерогенных мономеров

Исследования Ф. Андерсона [35, 36] показали, что присутствие мономеров различных типов в полимере приводит к частичной (или полной) локализации электронов при их движении вдоль цепи, что можно моделировать набором “электронных озерц” (или “эллипсоидальных капель”) вдоль цепи, а также изменять спектр электронных состояний, сочетая зонные состояния с их глубокими хвостами в электронных щелях. Это ведет к трем следствиям: изменяется расположение по энергии высшей занятой и не связывающей молекулярных орбиталей; изменяется вероятность оже-переходов α_A , которая неодинакова для зонных и локализованных состояний; резко изменяется величина τ_e – время “оседлой” жизни дырок, чувствительное к степени их локализации.

Здесь следует выделить наиболее общие результаты. Чем ниже расположена высшая занятая молекулярная орбиталь, тем больше вероятность

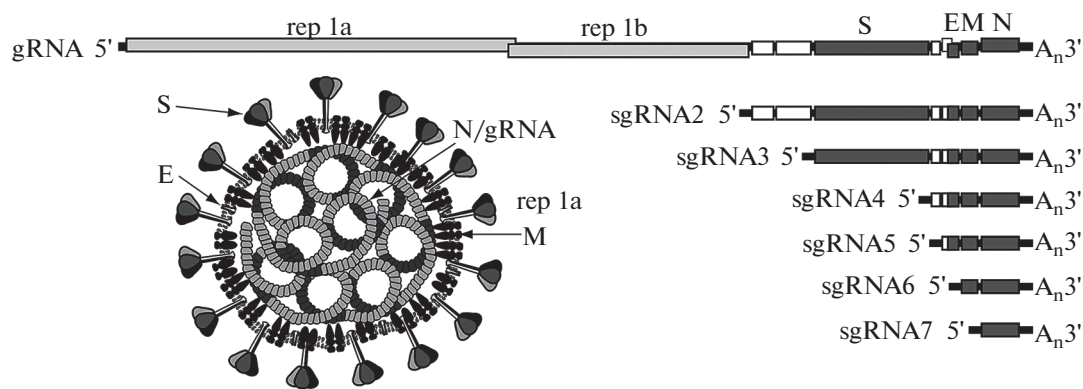


Рис. 5. Схема поперечного сечения вируса SARS coronavirus (вызывающего COVID-19): выраженная деформация РНК, покрытая *N*-протеином, должна обеспечивать повышенную эффективность оже-деструкции макромолекулы наследственности. Справа приведены элементы генома SARS-CoV-2.

оже-переходов (α_A возрастает). Моделируя локализованные состояния электронными каплями (например, по теории Ми [38]), можно оценить τ_e как $1/\omega_{pl}$, где pl означает плазмон, и это близко к случаю металлов. Таким образом, эти области обладают большей радиационной стойкостью. Надо иметь в виду, что локусы молекул ДНК, РНК, несущие большую информацию, соответствуют локализованным состояниям. Последние два результата позволяют уточнить объект ионизационной атаки (чем больше информативность локуса, тем больше τ_e , тем больше эффективность его деструкции).

Проблема селективного разрушения локусов ДНК и РНК

В радиационной генной инженерии, а также микробиологии желателно осуществлять направленное локальное разрушение локусов молекул наследственности методом оже-деструкции. Рассмотрим этот вопрос на примере борьбы с вирусом SARS-CoV-2 (рис. 5).

Применение к любым объектам прежде всего связано с необходимостью выделить слабое, но основное звено взаимодействия вируса со здоровой клеткой (наподобие того, как механизм ключ–замок на ВИЧ) и определить тот локус молекулы наследственности вируса, который ответствен за указанную функцию взаимодействия (как локус *spv* для ВИЧ). Уже имеется определенная информация и для COVID-19 [39–41]: из всех 30000 нуклеотидных оснований, кодирующих 10 белков вирусов SARS, особенно важно знать локус, кодирующий белок *SP*, который взаимодействует с белком *CD 147*, фильтрующим проникающим в клетку человека. Зная размер требуемого локуса РНК (мишени), можно на основе радиологического подхода Кроутера, Циммера, Тимофеева–Ресовского [37] (попадание–ми-

шень) полностью описать зависимость эффект–доза.

Радиационно-биологический анализ деградации вирусов

Полученная с помощью микроскопического подхода величина σ_d позволяет перевести классический подход – метод “попадания и мишени” [37] – на совершенно новый уровень. Обсудим такой алгоритм применительно к модельному вирусу. Интересуясь повреждениями (с помощью ионизации *K*-оболочки *P*) только отдельного локуса, ответственного, например, за механизм ключ–замок, положим, что в этом локусе достаточно ионизировать $\tilde{n}_p = n_p^0 L$ – число ионов P^- (здесь n_p^0 – погонная плотность ионов фосфора вдоль РНК (ДНК), L – длина РНК (ДНК) в локусе).

Тогда в результате смешивания исходных вирусов (число N_0) доля (теоретическая) инактивированных вирусов (т.е. с разрушенным локусом) будет:

$$\gamma_T = 1 - N/N_0 = 1 - \exp(-\sigma_d D) \sum_{k=0}^{\tilde{n}_p-1} \frac{1}{k!} (\sigma_d D)^k. \quad (20)$$

Здесь N – число неповрежденных вирусов, D – доза облучения. Дозовая зависимость оставшихся необезвреженных вирусов показана на рис. 6. Сравнимая зависимость $1 - \gamma_T(D)$ с экспериментом, легко найти минимальное число актов ионизации *K*-оболочки, повреждающих нужный локус. Отметим, что без предварительного знания σ_d сравнение γ_T с $\gamma_{\text{экс}}$ дает неоднозначную двухпараметрическую задачу нахождения σ_d и \tilde{n}_p .

Обсудим теперь случай коронавируса SARS-CoV-2. В настоящий момент детально известен его геном [39–41]. Как показано выше, значи-

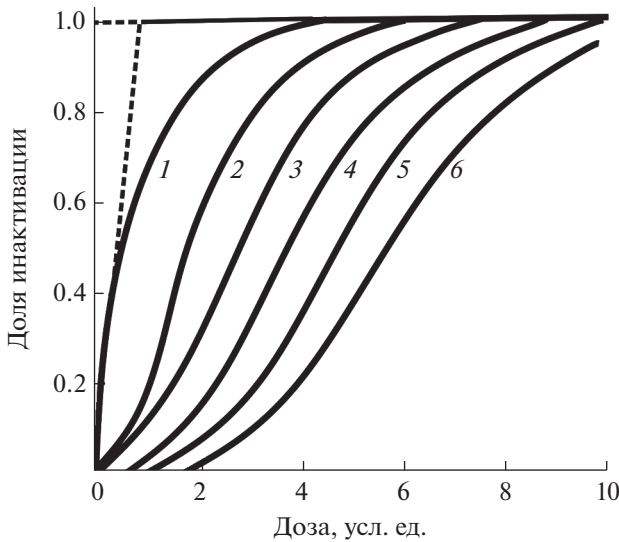


Рис. 6. Теоретические кривые выживаемости объектов, инактивируемых в результате нескольких попаданий. Номера кривых соответствуют числу попаданий, необходимых для инактивации объекта.

тельные деформации (изгибы, кручение) резко увеличивают σ_d , делая позиции вдоль нуклеиновой кислоты “горячей точкой”, особо подверженными оже-деструкции по сравнению со “средним значением” $\langle \sigma_d \rangle$, т.е. $\sigma_d \gg \langle \sigma_d \rangle$. Двигаясь вдоль РНК, можно совершить картирование всех “горячих точек”, через них выделить все группы ионов P^- , наиболее эффективно действующих в результате ионизации K -оболочки, разрушая свойства коронавируса. Если нас интересует радиационное выключение всего набора вредоносных воздействий коронавируса, то (с учетом

иерархической структуры вируса) дозовая зависимость доли поражения всех m -мишеней будет иметь вид [37]:

$$N^+ / N_0 = \prod_{i=1}^m (1 - B_i), \tag{21}$$

$$B_i = \exp(-\sigma_d^i D) \sum_{k=0}^{\tilde{n}_p - 1} \frac{1}{k!} (\sigma_d^i D)^k.$$

При этом каждая мишень — это свой локус, в каждом локусе имеется n_i активных ионов P^- (в результате ионизации K -оболочки). Из формулы (21) видно, насколько сложным будет выражение для общей дозы повреждения всей РНК и насколько важно знание предварительной теоретической оценки всех $\{\sigma_d^i\}$.

Теперь отметим, что именно радиационный метод деградации вирусов (в частности, и особенно COVID-19) занимает свою, ничем иным не реализуемую нишу в современной медицине. Как известно, дополнительное заражение онкологических больных COVID-19 резко ухудшает их состояние и затрудняет лечение. Между тем, в принципе, возможен такой подход: если параметры облучения, требуемого регламентом при воздействии на метастазы, согласуются с параметрами радиационной деградации вируса COVID-19 с помощью рентгеновского излучения, то вполне можно рассчитывать на пользу параллельного действия излучения на таких онкологических больных за счет одновременной гибели как метастазов, так и вирусов.

Подводя итог, выделим следующие наиболее важные позиции. Комбинирование локальной деформации биополимера (рис. 7) с особенностями

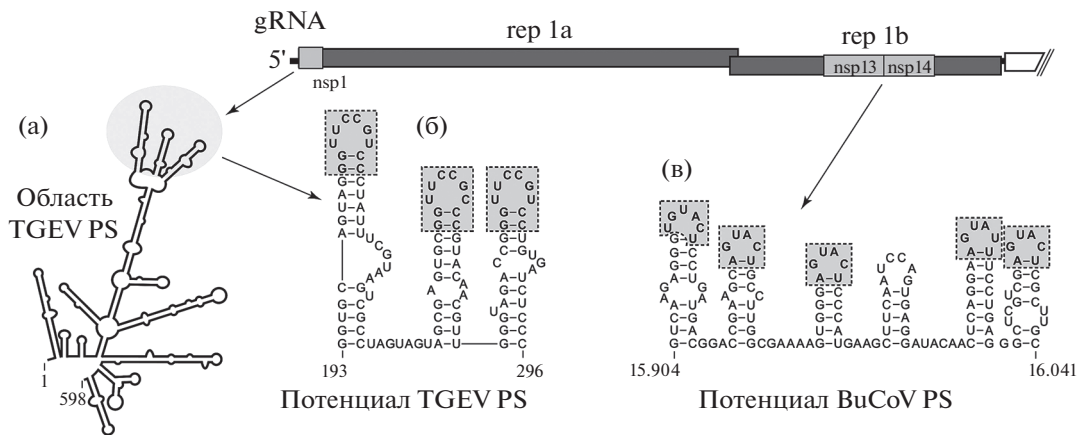


Рис. 7. Различные чувствительные позиции коронавируса. Показана модульная архитектура (а) и соответствующие модулям макромолекулярные конфигурации (б) и (в), включающие шпильки и петли (сверху справа — схема генома коронавируса, типичная для вируса МНУ). Всем этим конфигурациям соответствуют конформационные единицы, сложность которых радикальным образом увеличивает сечение деструкции биополимера — РНК-носителя наследственности.

ми его элементного состава сильно усиливает его оже-деструкцию, увеличивая ее вероятность в 1000 раз [42, 43]. Именно гетероструктура полимера позволяет осуществить селективный отбор места локальной оже-деструкции [44]. Можно выполнить картирование последовательности деформированных участков РНК-вируса. В совокупности с вышесказанным методы медицинской нанотехнологии [45] позволяют снизить общий радиационный стресс на “здоровое окружение организма” (в частности, понижая дозы рентгеновского облучения для инактивации вируса SARS в 1000 раз [42]). Механизм гигантского понижения дозы (до долей грея), предсказанный для действия рентгеновских лучей [42–44], по-видимому, лежит в основе различных стадий подавления ковид-пневмонии рентгеновскими лучами, экспериментально обнаруженного во многих странах Запада [46]. Эта прямая инактивация вируса, возможно, дополнит каналы борьбы с пневмониями, предложенные еще в доковидный период [47].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Описанные выше основные положения концепции сложности и приведенные примеры (как и многие другие) позволяют перечислить главные условия реализации этой парадигмы: фрактальный порядок, иерархичность системы, особая роль пониженных размеров и размерностей, хиральные свойства – все это в условиях сильной неравновесности усиливает нелинейные эффекты самоорганизующихся систем. Такая унификация причин большого числа эффектов позволит выделить группы этих эффектов в новые подразделы науки о веществе: радиационную физику, химию и биологию, в частности радиационную синергетику, нанофизику, физику фракталов и другие науки. Следует, однако, отметить, специфическую новизну такого разделения – в один класс естественно попадают радиационные эффекты в живой и неживой природе. Это вселяет новые надежды на то, что именно в сложности есть возможный путь ко второму великому объединению законов живой и неживой природы, причем посредством участия радиации различных видов, которой всегда отводилась особая роль.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 21-12-00392). В связи с тем, что область науки, которой посвящена статья, новая и комбинированная, в ее разработке участвовали многие сотрудники, которым авторы выражают особую благодарность: д. ф. м. н. С.Е. Максимуму, к. ф. м. н. Ю. Кузнецовой, к. ф. м. н. А. Кирякову, Ф. Искандаровой, Н.А. Кулагиной.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Anderson P.W.* // Science. 1977. V. 177. P. 393.
2. *Kolmogorov A.N.* // Problems in Information Transmission. 1965. V. 1. P. 1.
3. *Bonchev D.* // Theochem. 1989. V. 185. P. 155.
4. *Волькенштейн М.В.* Молекулярная биофизика. М.: Наука, 1975. 616 с.
5. *Bonchev D., Seitz W.A.* // Concepts in Chemistry: Contemporary Challenge. / Ed. Rouvray D.H. Taunton: Research Studies Press, 1996. P. 353.
6. *Николис Г., Пригожин И.* Познание сложного. М.: УРСС, 2008. 352 с.
7. *Шустер Г.* Детерминированный хаос. М.: Мир, 1988. 240 с.
8. *Чернавский Д.С.* Синергетика и информация. М.: УРСС, 2017. 204 с.
9. *Бак П.* Как работает природа. М.: УРСС, 2013. 276 с.
10. *Малинецкий Г.Г.* // Как работает природа. М.: УРСС, 2013. С. 15.
11. *Itoh N., Stoneham A.M.* Materials Modification by Electronic Excitation. Cambridge: Univ. Pres., 2001. 520 p.
12. *Parilis E., Kishinevskiy L., Turaev N.* Atomic Collisions on Solid Surfaces. Amsterdam–London–N.Y.–Tokyo: Elsevier, 1993. 664 p.
13. *Оксенгендлер Б.Л., Тураева Н.Н.* Радиационная физика конденсированных сред. Т. 1. Концепции. Ташкент: Фан, 2006. 136 с.
14. *Коршунов Ф.П., Гатальский Г.В., Иванов Г.М.* Радиационные эффекты в полупроводниковых приборах. Минск: Наука и техника, 1978. 232 с.
15. *Oksengendler B.L., Maksimov S.E., Turaeva N.N., Djurabekova F.G.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2014. V. 326. P. 45.
16. *Максимов С.Е., Оксенгендлер Б.Л., Тураев Н.Ю.* // Докл. акад. наук Республики Узбекистан. 2011. № 6. P. 24.
17. *Максимов С.Е., Оксенгендлер Б.Л., Тураев Н.Ю.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2013. № 4. P. 4.
18. *Оксенгендлер Б.Л., Максимов С.Е., Тураева Н.Н., Тураев Н.Ю.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2013. № 6. P. 60.
19. *Оксенгендлер Б.Л., Максимов С.Е., Тураев Н.Ю.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2015. № 3. P. 101.
20. <http://ru.wikipedia.org/>
21. *Майнер Р., Кеймикс Т.* // Элементы интегральных схем. М.: Мир, 1989. 630 с.
22. *Физический энциклопедический словарь* // М.: Советская энциклопедия, 1984. С. 944.
23. *Винецкий В.Л., Холодарь Г.А.* Радиационная физика полупроводников. Киев: Наукова думка, 1979. 336 с.
24. *Prigogine I., Nicolis C., Babloyantz A.* // Phys. Today. 1972. V. 25. № 12. P. 38.
25. *Haken H.* Advanced Synergetics. Berlin–Heidelberg–N.Y.–Tokyo: Springer–Verlag, 1983. 356 p.
26. *Matheson I., Wallis D., Gardine C.* // J. Stat. Phys. 1975. V. 12. P. 21.

27. *Шустер Г.* Детерминированный хаос. М.: Мир, 1988. 237 с.
28. *Берже П., Помо И., Видаль К.* Порядок в хаосе. М.: Мир, 1991. 368 с.
29. *Вавилов В.С., Горин Б.М., Данилин Б.М.* Радиационные методы в твердотельной электронике. М.: Радио и связь, 1990. 184 с.
30. *Oksengendler B.L., Turaeva N.N.* // Appl. Sol. En. 2018. V. 5. P. 318. <https://doi.org/10.3103/S0003701X1805019>
31. *Bischak C.G., Wong A.B.* // J. Phys. Chem. Lett. 2018. V. 9. P. 3998.
32. *Юнусов М.С., Абдурахманова С.Н., Оксенгендлер Б.Л. и др.* Физические свойства облученного кремния. Ташкент: Фан, 1987. 148 с.
33. *Yunusov M.S., Zaikovskaya M.A., Oksengendler B.L.* // Phys. Stat. Sol. A. 1976. V. 35. P. K145.
34. *Turaeva N.N., Oksengendler B.L., Ruban I.N.* // Dokl. Chem. 2002. V. 387. № 1–3. P. 302.
35. *Anderson Ph.* // Phys. Rev. 1958. V. 109. P. 1492.
36. *Займан Дж.* Модели беспорядка. М.: Мир, 1982. 592 с.
37. *Кудряшов Ю.Б.* Радиационная биофизика (ионизирующие излучения) / Ред. Мазурик В.К., Ломанов М.Ф. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. 448 с.
38. *Mie G.* // Ann.Phys. 1908. V. 25. P. 377.
39. *Paul S.* // Virology. 2019. V. 537. P. 198. <https://doi.org/10.1016/j.virol.2019.08.031>
40. *Zhang T., Zhang Q., Tian J.-H., Xing J.-F.* // MRS Commun. 2020. V. 8. № 2. P. 303. <https://doi.org/10.1557/mrc.2018.49>
41. *Lan J., Ge J., Yu J. et al.* // Nature. 2020. V. 581. P. 215. <https://doi.org/10.1038/s41586-020-2180-5>
42. *Оксенгендлер Б.Л., Тураев Н.Ю., Тураева Н.Н., Сулейманов С.Х., Аширметов А.Х., Искандарова Ф.* // Докл. акад. наук Узбекистана. 2020. № 3. С. 43.
43. *Оксенгендлер Б.Л., Сулейманов С.Х., Аширметов А.Х., Тураева Н.Н., Зацепин А.Ф.* Селективное радиационное воздействие на полимеры и его применение к деградации актуальных вирусов // Тр. XXX Международн. конф. “Радиационная физика твердого тела”, Севастополь. 2020. С. 457.
44. *Оксенгендлер Б.Л., Тураева Н.Н., Никифорова Н.Н., Искандарова Ф.* // Актуальные вопросы биологической физики химии. 2020. Т. 5. № 4. С. 571.
45. *Letfullin R.R., George T.F.* Computational Nanomedicine and Nanotechnology: Lectures with Computer Practicum. Springer, 2016. 697 p.
46. *Metcalfe P.E.* // Phys. Engin. Sci. Med. 2020. V. 43. P. 761. <https://doi.org/10.1007/s13246-020-00915-x>
47. *Calabrese E.J., Dhawan G.* // Yale J. Biol. Med. 2013. V. 86. № 4. P. 555.

The Concept of “Complexity” in Radiation Physics

B. L. Oksengendler^{1, 2, 4, *}, A. F. Zatsepin², A. Kh. Ashirmetov⁴, N. N. Turaeva³, S. Kh. Suleimanov⁴, N. N. Nikiforova¹, Kh. B. Ashurov¹

¹*Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, Tashkent, 100125 Uzbekistan*

²*Physics and Technology Institute of the Ural Federal University, Yekaterinburg, 620078 Russia*

³*Webster University, USA, East Lockwood Avenue, 470. St. Louis, MO 63119-3141 USA*

⁴*Institute of Materials Science, Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, Tashkent, 100084 Uzbekistan*

*e-mail: oksengendlerbl@yandex.ru

The concept of “complexity” is considered in relation to radiation processes in a condensed matter. It is shown that a combination of such properties as nanoscale, fractality, low dimension, chirality, and hierarchy in combination with strong nonequilibrium create conditions for the manifestation of unusual “emergent” radiation effects (radiation synergetics, gigantic dose reduction of threshold radiation effects, etc.). Examples of radiation effects in living and inanimate systems, interpreted within the framework of the concept of “complexity”, are presented. An overview of both previously obtained and new results of the authors is presented.

Keywords: complexity, nanoobjects, fractals, low dimension, chirality, hierarchical structures, synergetics, radiation processes, emergence, unity of analysis of living and inanimate nature.