

УДК 81+31.15.00+ 29.19.00+539.2

С.А. БЕЗНОСЮК*, М.С. ЖУКОВСКИЙ*, А.И. ПОТЕКАЕВ**,***

ТЕОРИЯ ДВИЖЕНИЯ В КОНДЕНСИРОВАННОМ СОСТОЯНИИ КВАНТОВЫХ ЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКИХ ПЛАЗМОИДНЫХ НАНОБОТОВ

Изложена теория движения в конденсированном состоянии квантовых электромеханических плазмOIDных наноботов. Механизм функционирования плазмOIDного нанобота связан с квантовым обменом спутанной парой (e^-e^+)-плазмOIDа между наночастицей и квантово-полевой электронной системой конденсированного состояния. Дана интерпретация работы (e^-e^+)-плазмOIDа как квантового аналога топливного элемента на борту нанoeлектромеханических систем (НЭМС) нанобота. Электрические и магнитные силовые поля (e^-e^+)-плазмOIDа управляют квантовым движением НЭМС нанобота. Это обуславливает отклик нанобота на внешние воздействия и позволяет построить физические инструменты для управления самодвижением НЭМС нанобота в материале. Показано существование двух механизмов релаксационного самодвижения плазмOIDного нанобота в конденсированной среде: механизма конверсии внутренней квантово-механической энергии нанобота в электрическую энергию квантового (e^-e^+)-плазмOIDа и механизма конверсии электрической энергии квантового (e^-e^+)-плазмOIDа в механическую работу по перемещению нанобота в материале. Эти механизмы задают дискретный процесс манипуляций и транспорта НЭМС нанобота в материале. Даны оценки времени, смещения, сил и мощности при транспорте НЭМС нанобота.

Ключевые слова: НЭМС, нанобот, плазмOIDный солитон, физика конденсированного состояния, квантово-механические системы, открытые квантовые системы, квантовая релаксация, моделирование.

Введение

В ряде работ нового направления нанобиодизайна рассматриваются бионические прототипы нанороботов – наноботов, которые могут найти применение в области инжиниринга новых функциональных материалов. В них отмечается, что в основу создания и контроля бионических наноботов можно положить известные в биологии механохимические процессы самосборки и самоорганизации молекулярных химических систем. Типичным является механизм конверсии электронно-колебательно-вращательных возбуждений молекул или нанокристаллов в механическую работу по перемещению бионических наноботов и формированию супрамолекулярных структур типа: «ключ – замок», «хозяин – гость». Исследователями отмечается, что наряду с достоинствами бионических наноботов, такими, как скорость и селективность их ферментативно-каталитических манипуляций, у них есть существенные недостатки: малая мощность и медленность выполнения работы. Прежде всего, недостатки касаются механохимических молекулярных моторов [1, 2].

Вместе с тем развивается электромеханическое направление в создании наноботов на базе достижений микроэлектромеханических систем (МЭМС). Создание адаптивных к внешним условиям среды кибернетических наноустройств и приборов является наиболее приоритетной целью инжиниринга следующего по миниатюризации поколения НЭМС. Особую значимость это имеет для резкого повышения эффективности производства, переработки и утилизации энергии, информации, материалов, а также создания принципиально новых наносистем с высокими ресурсами мощности и интеллекта [3, 4].

Важно подчеркнуть принципиальные различия между свойствами механохимических и электромеханических наноботов. Существует мнение, что для систем, содержащих менее тысячи атомов, свойства механохимических и электромеханических наноботов должны конвергировать, так как с точки зрения квантовой механики разницы между квантовохимическими и квантовоэлектродинамическими системами в этой области уже нет. Но это заблуждение, потому что кроме пространственных размеров существенную роль для функций наноботов играют временные рамки выполнения операций. Атомно-молекулярные системы химии по временным характеристикам процессов в области малых квантовых систем не вполне эквивалентны квантовым электродинамическим системам ядер и электронов в физике конденсированного состояния. Химическая атомно-молекулярная структура материала является устойчивой лишь для медленных воздействий на квантовую электродинамическую систему ядер и электронов в диапазоне частот химических и фотохимических превращений. Квантовая электродинамическая система конденсированного состоя-

ния устойчива также в областях сверхбыстрых воздействий, когда атомно-молекулярная (медленная, адиабатическая) сверхструктура материала уже утрачивает физический смысл. Нехимические квантовые механизмы движения НЭМС наноботов должны стать основными в развитии инжиниринга биомиметических наносистем [5]. Особенности квантовых механизмов движения электро-механических наноботов, базирующихся на быстром импульсном обмене электрон-дырочными (e^-e^+)-плазмоидами с материалом, являются предметом изучения в данной работе.

Основы теории квантовой динамики и кинетики электромеханических наноботов

Механизмы самосборки, самоорганизации и самодвижения открытых систем связаны между собой процессом квантовой релаксации [5]. Согласно теореме Фока – Крылова [6], для процесса квантовой релаксации необходимо, чтобы динамическая система (наночастица) была квантово-механической системой с конечным числом степеней свободы и дискретным спектром энергии, а диссипативная система (конденсированное состояние), напротив, должна быть квантово-полевой системой с бесконечным несчётным числом степеней свободы и непрерывным спектром энергии. Только в этом случае существуют механизмы процесса диссипации энергии, ведущие к квантовой релаксации наночастицы как основного механизма её спонтанного движения.

С другой стороны, в рамках теории квантово-полевой химии конденсированного состояния [7] показано, что только в квантово-полевых моделях физики конденсированного состояния определены механизмы самосборки и самоорганизации открытых компактных квантово-механических наночастиц. Эти частицы способны спонтанно трансформировать конфигурационные пространства динамических переменных x_n и алгебраические структуры статистических операторов $D_{nT}(t)$ состояний движения [8, 9]. Квантово-полевые механизмы лежат в основе как процессов самосборки и самоорганизации, так и процессов самодвижения в форме квантовой релаксации открытой наночастицы в диссипативной системе конденсированного состояния [10, 11].

Будем исходить из того, что наночастица с конечным числом степеней свободы является открытой квантовой динамической системой, находящейся в контакте с диссипативной системой конденсированного состояния. Она обменивается с диссипативной системой частицами ($\delta N_n \neq 0$) и энергией ($\delta E_n \neq 0$). К частицам относятся электроны и ядра. Не останавливаясь на анализе [12] проблемных аспектов общей квантовой теории необратимости движения конечных квантовых систем, рассмотрим основную логическую схему описания, применимую к открытой наночастице, эволюционирующей в диссипативной системе конденсированного состояния.

Система «наночастица + диссипативная система конденсированного состояния» является замкнутой и описывается статистическим оператором (матрицей плотности) чистого квантового состояния D . Они зависят от времени согласно квантовому уравнению Лиувилля

$$i\hbar\partial D(t)/\partial t = [H, D], \quad (1)$$

где H – гамильтониан, включающий кроме гамильтониана H_n наночастицы и гамильтониана диссипативной системы H_T , гамильтониан их взаимодействия – H_{nT} :

$$H = H_n + H_T + H_{nT}. \quad (2)$$

В основном приближении необратимости для системы «наночастица + диссипативная система конденсированного состояния» статистический оператор $D(t)$ представим в виде произведения статистических операторов смешанных квантовых состояний наночастицы $D_{nT}(t)$ и среды D_T [6]:

$$D(t) \sim D_{\text{зап}}(t) = D_T D_{nT}(t). \quad (3)$$

Здесь D_T – независимый от времени статистический оператор термодинамической равновесной диссипативной системы конденсированного состояния; $D_{nT}(t)$ – статистический оператор наночастицы, обменивающейся энергией и частицами с термостатом. В приближении необратимости (3) уравнение эволюции наночастицы в смешанном квантовом состоянии приобретает вид *кинетического уравнения* [6]:

$$\partial D_{nT}(t)/\partial t = L[x_n(t), D_{nT}(t), \langle y_T \rangle], \quad (4)$$

где L – кинетическая функция квантового Лиувиллиана, зависящая от операторов динамических физических величин $x_n(t)$ и статистического оператора $D_{nT}(t)$ наночастицы, а также от средних значений физических величин $\langle y_T \rangle$, диссипативной системы термостата, вычисленных в термоди-

намическом равновесном состоянии. Величины $\langle y_T \rangle$ определяют интенсивные параметры процесса релаксации наночастицы в смешанном квантовом состоянии.

Если в начальный момент времени наночастица находится в неравновесном термодинамическом состоянии, то с течением времени, подчиняясь кинетическому уравнению (4), она стремится в равновесное термодинамическое состояние. Приближение квантовой системы наночастицы к равновесному состоянию называется процессом квантовой релаксации.

Квантовая кинетика процесса диссипативной релаксации открытой наночастицы, описываемая кинетическим уравнением типа (4), сложна. Прежде всего, форма кинетической функции Лиувиллиана L в правой части кинетического уравнения (4) зависит от сложности моделей гамильтониана взаимодействия H_{nT} наночастицы с диссипативной средой конденсированного состояния [5]. С другой стороны, необходимо учитывать в ходе релаксации сложные модели процессов спонтанной трансформации внутренних кинематических параметров конфигурационного пространства динамических переменных $x_n(t)$ и алгебраической структуры статистического оператора $D_{nT}(t)$ наночастицы [8, 9]. Требуется сформулировать общий подход к решению проблем моделирования.

Рассмотрим модели квантовой релаксации наночастицы в квантово-полевой диссипативной системе конденсированного состояния детально. С этой целью подставим гамильтониан полной системы (2) и основное приближение необратимости (3) в квантовое уравнение Лиувилля (1). В результате получим следующее операторное уравнение общего вида:

$$(i\hbar\partial D_T/\partial t)D_{nT} + D_T(i\hbar\partial D_{nT}/\partial t) = H_n D_T D_{nT} - D_T D_{nT} H_n + \\ + H_T D_T D_{nT} - D_T D_{nT} H_T + H_{nT} D_T D_{nT} - D_T D_{nT} H_{nT}. \quad (5)$$

В этом уравнении используем условие кинетической стационарности квантово-полевой диссипативной системы конденсированного состояния (термостата T)

$$\partial D_T/\partial t = 0 \quad (6)$$

и условия кратковременности флуктуаций статистического оператора D_T квантово-полевой диссипативной системы в форме требования коммутации статистического оператора состояния диссипативной системы с каждой компонентой гамильтониана объединённой системы «наночастица + диссипативная квантово-полевая система конденсированного состояния»:

$$[H_n, D_T] = [H_T, D_T] = [H_{nT}, D_T] = 0. \quad (7)$$

Тогда уравнение спонтанной и необратимой релаксации квантовой наночастицы в контакте с квантово-полевой диссипативной системой примет вид редуцированного квантового уравнения Лиувилля для статистического оператора наночастицы D_{nT} :

$$i\hbar\partial D_{nT}/\partial t = [H_n, D_{nT}] + [H_T, D_{nT}] + [H_{nT}, D_{nT}]. \quad (8)$$

Рассмотрим физический смысл трёх процессов эволюции открытой наночастицы, описываемых слагаемыми в правой части квантово-полевого кинетического уравнения Лиувилля (8).

Операторные условия замкнутости наночастицы, при нулевом обмене частицами ($\delta N_n = 0$) и энергией ($\delta E_n = 0$) с квантово-полевой диссипативной системой, имеют вид

$$[H_T, D_{nT}] = [H_{nT}, D_{nT}] = 0. \quad (9)$$

В пределе замкнутой наночастицы уравнение (8) сводится к уравнению эволюции вида

$$i\hbar\partial D_{nT}/\partial t = [H_n, D_{nT}]. \quad (10)$$

При условии консервативности изолированной наночастицы, т.е. явной независимости её гамильтониана H_n от времени, уравнение (9) интегрируется. В рамках квантовой теории представлений показывается, что оператор-коммутатор $[H_n, D_{nT}]$ является инфинитезимальным генератором группы операторов сдвига во времени вида $U_n(t) = \exp(-itH_n/\hbar)$.

Оператор $U_n(t) = \exp(-itH_n/\hbar)$ – это оператор унитарно-эквивалентного преобразования статистического оператора, так как он преобразует при сдвиге времени начальное гильбертово пространство $H_{nT}(0)$ состояний наночастицы в эквивалентное ему гильбертово пространство $H_{nT}(t)$ в момент времени t [7].

При кратковременных в течение времени Δt флуктуациях диссипативной системы конденсированного состояния погружённая в неё наночастица становится открытой. Это определяется дей-

ствием двух других операторов: $L_T(\Delta t) = \exp(-i\Delta t H_T/\hbar)$ и $\Lambda_{nT}(t) = \exp(-i\Delta t H_{nT}/\hbar)$. Их инфинитезимальными генераторами являются операторы $[H_T, D_{nT}]$ и $[H_{nT}, D_{nT}]$ соответственно. Необратимый сдвиг статистического оператора открытой наночастицы за время Δt генерируется его коммутатором с собственным гамильтонианом H_T квантового поля диссипативной системы конденсированного состояния и с гамильтонианом H_{nT} взаимодействия наночастицы с квантовым полем диссипативной системы конденсированного состояния.

Пара операторов $L_T(\Delta t)$ и $\Lambda_{nT}(\Delta t)$ сдвига времени математически описывает квантовую эволюцию любой открытой релаксирующей наночастицы. Вместе с тем в каждом случае необходимо строить физическую модель механизма реализации квантово-полевого процесса релаксационного движения конкретного типа наночастиц. В частности, этот квантово-полевой подход применим к описанию физических механизмов необратимой квантовой релаксации открытых компактных *наоэлектромеханических систем наноботов*.

На рис. 1 показано, как открытая плазмодная наночастица создается оператором $L_T(\Delta t)$ унитарно-неэквивалентным преобразованием одного листа гильбертова пространства H^N закрытой N -электронной наночастицы (рис. 1, а) в триплет сопряжённых гильбертовых подпространств $\{H^{N-1}; H^N; H^{N+1}\}$ пространства Фока (рис. 1, б) открытого нанобота с переменным числом электронов $\{N-1, N, N+1\}$. Для описания нанобота как системы «ядра + электроны + плазмод (e^-e^+)» требуется использовать три смежных листа фоковского пространства $N-1, N, N+1$ -электронных состояний. Зарядово-сопряжённые квантовые состояния $|N-1\rangle$ «катиона» нанобота (с e^+ -дыркой плазмоида) и квантовые состояния $|N+1\rangle$ «аниона» нанобота (с e^- -электроном плазмоида) *спутаны плазмодной электронной парой конденсированного состояния* согласно формуле

$$|N-1, N+1\rangle = [|N-1\rangle + |N+1\rangle]/\sqrt{2}. \quad (11)$$

Вектор чистого квантового состояния электронов плазмодного нанобота имеет вид

$$|N-1, N, N+1\rangle = C_N|N\rangle + C_{N\pm 1}[|N-1\rangle + |N+1\rangle]/\sqrt{2}, \quad (12)$$

при выполнении условия нормировки для коэффициентов квантовой суперпозиции

$$|C_N|^2 + |C_{N\pm 1}|^2 = 1. \quad (13)$$

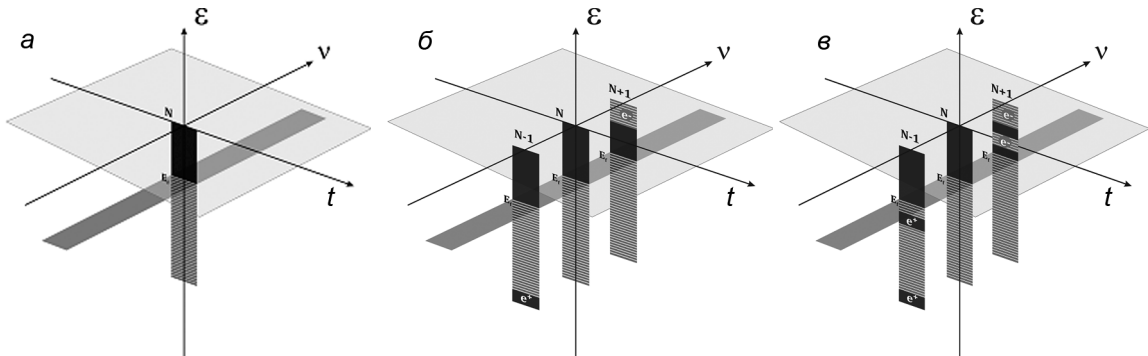


Рис. 1. Унитарно-эквивалентное Гильбертово пространство H^N закрытой наночастицы ($N-e^-$) (а); унитарно-неэквивалентный триплет $\{H^{N-1}; H^N; H^{N+1}\}$ пространства Фока открытого нанобота ($N-e^- + (e^-e^+)$ -плазмод) (б); неунитарно-неэквивалентный триплет $\{H^{N-1}; H^N; H^{N+1}\}$ пространства Фока открытого нанобота ($N-e^- + (e^-e^+)$ -плазмод + (e^-e^+) -плазмод) (в); ϵ – энергии одноэлектронных состояний с уровнем Ферми E_F ; v – координата числа электронов в пространстве Фока

Оператор $\Lambda_{nT}(\Delta t)$ описывает нарушение унитарности эволюции нанобота на интервале Δt за счёт того, что гамильтониан взаимодействия H_{nT} нанобота рождает в конденсированном состоянии дополнительные квантовые флуктуации (e^-e^+) -плазмодов вблизи уровня Ферми (рис. 1, в).

Генерация (e^-e^+) -плазмоида формирует в пространстве материала солитонную кинематическую волну зарядовой поляризации плотности электронов нанобота (рис. 2, в). При этом солитон плазмоида имеет характерное распределение плотности избыточного положительного заряда e^+ -дырочной компоненты в окрестности ядер внутри объёма (рис. 2, б) и отрицательного избыточного заряда e^- -электронной компоненты в межъядерных областях плазмоида (рис. 2, а). Кинематическая волна зарядовой поляризации плотности (e^-e^+) -плазмоида экранирует локализованную на её

носителе наночастицу от остальной матрицы материала (рис. 2, ε), формируя вместе с ней автономную энергонасыщенную нанозлектромеханическую систему плазмодного нанобота.

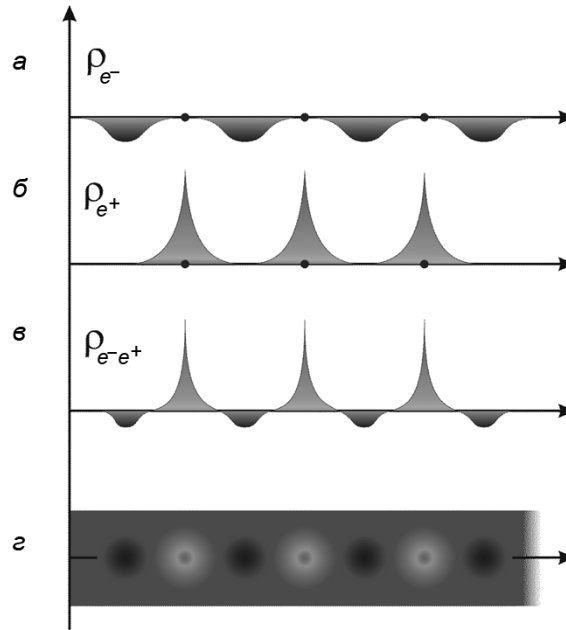


Рис. 2. Распределение плотности заряда: a – электрона; b – дырки; c – кинематической волны заряда электрон-дырочного плазмоида; ε – карта распределения плотности заряда (e^-e^+) -плазмоида

Квантовая механика плазмодных наноботов в адиабатическом приближении

Плазмодный нанобот возникает из наночастицы в результате её захвата (e^-e^+) -плазмодом – 2-электронной флуктуации квантового поля электронной системы конденсированного состояния. Матрица плотности $D_{nT}(t)$ n -нанобота в чистом квантово-механическом состоянии имеет вид

$$D_{nT}(t) = \Psi_n^*(r, R|t)\Psi_n(r, R|t), \quad (14)$$

где совокупность координат всех электронов нанобота и приданной ему (e^-e^+) -плазмодной пары обозначена буквой r , а совокупность координат ядер нанобота – буквой R .

Гамильтониан, определяющий состояние нанобота как объединённой системы «наночастица + (e^-e^+) -плазмод», можно записать формально в общем виде

$$H = T_R + T_r + V(r, R), \quad (15)$$

где

$$T_R = -(\hbar^2/2) \sum_p (1/M_p) \partial^2 / \partial R_p^2 \quad (16)$$

– оператор кинетической энергии B ядер с номерами $\{p = 1, \dots, B\}$, массами $\{M_p\}$ и координатами $\{R_p\}$;

$$T_r = -(\hbar^2/2) \sum_i (1/m) \partial^2 / \partial r_i^2 \quad (17)$$

– оператор кинетической энергии N электронов с номерами $\{i = 1, \dots, N-1, N, N+1\}$, массами m и координатами $\{r_i\}$; $V(r, R)$ – оператор потенциальной кулоновской энергии взаимодействия между ядрами и электронами.

Волновая функция стационарного состояния наночастицы с фиксированным числом $\{N-1, N, N+1\}$ электронов и с энергией E имеет вид

$$\Psi(r, R|t) = \Psi(r, R) \exp(-iEt/\hbar), \quad (18)$$

где пространственная часть $\Psi(r, R)$ – решение стационарного уравнения Шредингера на собственные функции гамильтонианов $H = \{H^{N-1}; H^N; H^{N+1}\}$:

$$(H - E)\Psi(r, R) = 0. \quad (19)$$

В адиабатическом приближении оператор кинетической энергии ядер T_R можно рассматривать как оператор малого возмущения и представить гамильтониан H в виде невозмущённого гамильтониана $H_0 = T_r + V(r, R)$ и возмущения

$$H = T_R + H_0. \quad (20)$$

Тогда в нулевом адиабатическом приближении волновую функцию нанобота можно представить в виде произведения волновой функции ядер $\chi_0(R)$ и волновой функции электронов $\Phi_0(r|R)$

$$\Psi_0(r, R) = \chi_0(R)\Phi_0(r|R). \quad (21)$$

С учётом вида векторов (11) – (13) для электронной функции $\Phi_0(r|R)$ плазмодного нанобота имеем

$$\Phi_0(r|R) = C_N \Phi_0^N(r|R) + C_{N\pm 1} \Phi_0^{N\pm 1}(r|R), \quad (22)$$

где волновая функция спутанного ($2e^-$) электронной парой плазмоида (e^-e^+) имеет вид симметричной суперпозиции волновых функций катионного $\Phi_0^{N-1}(r|R)$ и анионного $\Phi_0^{N+1}(r|R)$ состояний наночастицы:

$$\Phi_0^{N\pm 1}(r|R) = (1/\sqrt{2})[\Phi_0^{N-1}(r|R) + \Phi_0^{N+1}(r|R)] \quad (23)$$

при условии нормировки когерентной суперпозиции двух базисных волновых функций нанобота:

$$|C_N|^2 + |C_{N\pm 1}|^2 = 1. \quad (24)$$

Волновые функции базисных стационарных состояний с числом электронов N и $N\pm 1$ находятся как решения электронных стационарных уравнений Шрёдингера вида (19) при фиксированной конфигурации ядер R и числе электронов $\{N-1, N, N+1\}$ в наночастице соответственно:

$$[H_0^N - \varepsilon_0^N(R)]\Phi_0^N(r|R) = 0; \quad (25)$$

$$[H_0^{N\pm 1} - \varepsilon_0^{N\pm 1}(R)]\Phi_0^{N\pm 1}(r|R) = 0. \quad (26)$$

В (26) два листа $\varepsilon_0^{N\pm 1}(R)$ адиабатической энергетической поверхности в конфигурационном пространстве ядер R запишем через отклонения от основного листа N -электронной наночастицы $\varepsilon_0^N(R)$:

$$\varepsilon_0^{N\pm 1}(R) = \varepsilon_0^N(R) + \delta\varepsilon_0^{N\pm 1}(R). \quad (27)$$

Для каждой конфигурации ядер R отклонения $\delta\varepsilon_0^{N\pm 1}(R)$ – это энергия сродства $A_0(R) = \delta\varepsilon_0^{N+1}(R)$ к электрону и энергия электронной ионизации $I_0(R) = \delta\varepsilon_0^{N-1}(R)$ нанобота в состоянии $\Phi_0^N(r|R)$ соответственно. Поэтому (27) можно переписать в виде

$$\varepsilon_0^{N+1}(R) = \varepsilon_0^N(R) + A_0(R); \quad (28)$$

$$\varepsilon_0^{N-1}(R) = \varepsilon_0^N(R) + I_0(R). \quad (29)$$

В силу соотношений (22) – (29) средняя потенциальная энергия ядерной подсистемы нанобота в адиабатическом состоянии (21) с волновой функцией $\chi_0(R)\Phi_0(r|R)$ при фиксированной конфигурации ядер R имеет вид

$$\varepsilon_0(R) = \varepsilon_0^N(R) + \delta\varepsilon_0^{N, N\pm 1}(R), \quad (30)$$

где дополнительный запас энергии нанобота $\delta\varepsilon_0^{N, N\pm 1}(R)$ связан с захватом им спутанной ($2e^-$) пары (e^-e^+)-плазмоида в электронной среде конденсированного состояния материала:

$$\delta\varepsilon_0^{N, N\pm 1}(R) = |C_{N\pm 1}|^2[A_0(R) + I_0(R)]/2. \quad (31)$$

Полученные соотношения (21) – (31) позволяют дать интерпретацию устройству плазмодного нанобота как компактной квантовой наноэлектромеханической системы, имеющей на «борту» квантовый «топливный элемент» в виде разделённой в пространстве (e^-e^+)-плазмодной пары с запасом энергии – $\delta\varepsilon_0^{N, N\pm 1}(R)$. Солитонное распределение заряда (e^-e^+)-плазмодной пары формирует в пространстве нанобота квантовые аналоги «электродов топливного элемента»: в основной области ядер (e^+) – «анод» и (e^-) – «катод» во внешних для остовов межъядерных областях нано-

бота. Волновая функция нанобота в чистом квантовом состоянии (e^-e^+)-плазмодного топливного элемента в нулевом адиабатическом приближении имеет вид (23).

Квантово-кинетический процесс релаксационного движения плазмодного нанобота в конденсированном состоянии

Выход за рамки нулевого адиабатического приближения состоит в том, чтобы искать решение Ψ уравнений (19) в виде суперпозиции двух ортогональных волновых функций вида

$$\Psi = \chi_0\Phi_0 + \chi_1\Phi_1, \quad (32)$$

где в соответствии с рис. 1, Φ имеем волновую функцию спутанных флуктуацией (e^-e^+)-плазмоида состояния катиона и аниона нанобота Φ_1 , ортогональную как к $\Phi_0^{N\pm 1}(r|R)$, так и к $\Phi_0^N(r|R)$:

$$\Phi_1(r|R) = \Phi_1^{N\pm 1}(r|R) = (1/\sqrt{2})[\Phi_1^{N-1}(r|R) + \Phi_1^{N+1}(r|R)]. \quad (33)$$

При этом коэффициенты разложения по базису электронных волновых функций Φ_0 и Φ_1 являются волновыми функциями $\chi_0(R)$ и $\chi_1(R)$ ядерной подсистемы нанобота.

В приближении малости неадиабатического возмущения нанобота $\langle \chi_0 | \chi_0 \rangle = 1 - \langle \chi_1 | \chi_1 \rangle \approx 1$ и ортогональности ядерных компонент волновых функций $\langle \chi_0 | \chi_1 \rangle = 0$ решение уравнений (19) для волновой функции вида (32) можно найти из системы двух связанных уравнений вида

$$(T_R + \varepsilon_0(R) - E)\chi_0 = \Lambda_{00}\chi_0 + \Lambda_{01}\chi_1; \quad (34)$$

$$(T_R + \varepsilon_0(R) + \delta\varepsilon_1(R) - E)\chi_1 = \Lambda_{10}\chi_0 + \Lambda_{11}\chi_1. \quad (34')$$

В уравнениях в правой части стоят операторы неадиабатичности, в которые входят операторы дифференцирования по координатам ядер Λ . Их стандартный вид хорошо известен [6]. Кроме того, в левой части уравнения (34) для малой добавки ядерной волновой функции χ_1 введено отклонение $\delta\varepsilon_1(R)$ для энергии флуктуаций заряда в состоянии Φ_1 :

$$\varepsilon_1(R) = \varepsilon_0(R) + \delta\varepsilon_1(R). \quad (35)$$

Электронная «жесткость» $\delta\varepsilon_1(R)$ нанобота равна половине энергии $\delta\varepsilon_{|e+e^-}(R)$ возбуждения конденсированным состоянием дополнительной флуктуации (e^-e^+) плазмоида в наноботе:

$$\delta\varepsilon_1(R) = \delta\varepsilon_{|e+e^-}(R)/2 = [\delta\varepsilon_1^+(R) + \delta\varepsilon_1^-(R)]/2 \equiv [A_1(R) + I_1(R)]/2. \quad (36)$$

Проанализируем решение системы уравнений (34), (34') в случае зануления правых частей уравнений. Для этого требуется однородность в конфигурационном пространстве ядер малой добавки $\chi_1\Phi_1$. Это условие выполняется, когда для каждой ядерной переменной R_p справедливо

$$\partial/\partial R_p \chi_1(R) \approx 0; \quad (37)$$

$$\partial/\partial R_p \Phi_1(R) \approx 0. \quad (38)$$

Складывая левые и правые части уравнений (34), (34'), умножая слева на комплексно-сопряженную функцию $\chi^* = (\chi_0 + \chi_1)^*$ и интегрируя по конфигурационному пространству ядер R , получим уравнение для полной средней энергии нанобота с течением времени неадиабатического процесса движения:

$$\langle \chi(t) | T_R | \chi(t) \rangle + \langle \chi(t) | \varepsilon_0(R) | \chi(t) \rangle + \langle \chi(t) | \delta\varepsilon_1(R) | \chi(t) \rangle = E(t). \quad (39)$$

В приближении квазистационарности в течение малых интервалов времени τ когерентного неадиабатического состояния движения с волновой функцией (32) получаем условие для полной энергии $E(t)$ в начале ($t = 0$) и в конце времени жизни ($t = \tau$) этого состояния:

$$E(\tau) \approx E(0). \quad (40)$$

Однородность неадиабатического движения ядер нанобота обеспечивается условиями однородности ядерной волновой функции $\chi_1(t)$ в конфигурационном пространстве ядер (37) и малостью времени τ эволюции по сравнению с характерным временем изменения $\chi_0(t)$ (период одного колебания ядер). В результате этого, волновая функция $\chi_0(t)$ адиабатического движения ядер нанобота не успевает существенно измениться за время τ , а средняя кинетическая энергия ядер в течение времени τ в неадиабатическом состоянии (32) эволюции нанобота сохраняется:

$$\langle \chi(\tau) | T_R | \chi(\tau) \rangle \approx \langle \chi(0) | T_R | \chi(0) \rangle. \quad (41)$$

С учётом формул (35) – (41) получаем главное для дальнейших выводов соотношение:

$$\delta\varepsilon_{|e^+e^-} \approx - [\langle \chi(\tau) | \varepsilon_0(R) | \chi(\tau) \rangle - \langle \chi_0(0) | \varepsilon_0(R) | \chi_0(0) \rangle] \equiv -\delta\varepsilon_0(\tau). \quad (42)$$

На стадии когерентной неадиабатической релаксации в состоянии $\Psi = \chi_0\Phi_0 + \chi_1\Phi_1$ уравнение (42) – это уравнение конверсии квантово-механической внутренней энергии нанобота $\delta\varepsilon_0(\tau)$ в энергию $\delta\varepsilon_{|e^+e^-}$ подзарядки спутанного с ним (e^-e^+) -плазмоида из электронной среды конденсированного состояния материала. Когерентно движущиеся ядра нанобота не успевают изменить свою кинетическую энергию (31) за малое время τ неадиабатической релаксации нанобота. В результате этого изменение квантово-механической энергии $\delta\varepsilon_0(\tau)$ нанобота идёт только на «накачку» энергией $\delta\varepsilon_{|e^+e^-}$ связанного с наноботом (e^-e^+) -плазмоида.

Сбой когерентности процесса переноса дополнительного заряда на «электроды квантовых топливных элементов» (e^-e^+) -плазмоида нанобота из квантово-полевой электронной среды конденсированного состояния вызывается тепловыми флуктуациями термополевой динамики конденсированного состояния материала [7]. В результате этого сбоя в течение ультракороткого интервала времени $\delta\tau$ происходит редукция волновой функции плазмодного нанобота из неадиабатического состояния $\Psi(\tau) = \chi_0(\tau)\Phi_0(\tau) + \chi_1(\tau)\Phi_1(\tau)$ в адиабатическое состояние $\Psi_0(\tau) = \chi_0(\tau)\Phi_0(\tau)$:

$$\Psi(\tau) = \chi_0(\tau)\Phi_0(\tau) + \chi_1(\tau)\Phi_1(\tau) \Rightarrow \Psi_0(\tau) = \chi_0(\tau)\Phi_0(\tau). \quad (43)$$

Время редукции $\delta\tau$ задаётся ультракоротким временем жизни неспутанной с наноботом свободной (e^-e^+) -плазмодной флуктуации в квантово-полевой электронной среде конденсированного состояния. Время жизни можно оценить из соотношения неопределённостей для времени жизни свободной квантово-полевой флуктуации с энергией $\delta\varepsilon_{|e^+e^-} = \delta\varepsilon_{\text{exc}} \approx -\delta\varepsilon_0(\tau)$ по формуле

$$\delta\tau \approx \hbar / (2\delta\varepsilon_{\text{exc}}). \quad (44)$$

На ультракороткой по времени $\delta\tau$ адиабатической стадии релаксации из законов сохранения энергии и импульса следуют два уравнения квантовой физики движения плазмодного нанобота:

$$\delta E \approx \delta\varepsilon_0(\tau) = -\delta\varepsilon_{\text{exc}}; \quad (45)$$

$$\delta P = -\delta P_{\text{exc}}. \quad (46)$$

Уравнения (45) и (46) показывают, как изменяется энергия δE и импульс δP плазмодного нанобота при «выбросе» в электронную среду конденсированного состояния материала свободной флуктуации (e^-e^+) -плазмоида. Из уравнения (45) видно, что на шаге релаксации за время $\delta\tau$ энергия плазмодного нанобота понижается на величину унесённой освобождённой флуктуации (e^-e^+) -плазмоида энергии. Из уравнения (46) следует, что за время $\delta\tau$ импульс нанобота как целого изменяется на величину «отдачи» конденсированного состояния при испускании в него свободной флуктуации (e^-e^+) -плазмоида. Исходя из формулы для импульса силы, можно оценить среднюю величину модуля F силы «отдачи», приложенной за время $\delta\tau$ к наноботу со стороны среды:

$$F = \delta P / \delta\tau. \quad (47)$$

Принимая массу испущенного свободного (e^-e^+) -плазмоида равной, приблизительно, массе $2m_e$ пары свободных электронов, можно дать оценку для силы F . Приравняв кинетическую энергию пары свободных электронов к энергии $\delta\varepsilon_{\text{exc}}$, получаем искомую формулу:

$$F = (2(2m_e)\delta\varepsilon_{\text{exc}})^{1/2} / \delta\tau. \quad (48)$$

Учитывая, что масса нанобота M – это масса его ядер, в приближении равноускоренного движения без трения с нулевой начальной скоростью можно дать оценку для максимального смещения δS -центра масс автономного нанобота за время $\delta\tau$ действия импульса силы «отдачи»:

$$\delta S = (F/M)\delta\tau^2/2 = \delta P\delta\tau/2M. \quad (49)$$

Дадим с помощью формул (44) – (49) оценки физических величин мощного движения нанобота. Рассмотрим типичный пример. Пусть унесённая (e^-e^+) -плазмодом энергия составит $\delta\varepsilon_{\text{exc}} \sim 2,7$ эВ. Прежде всего, из формулы (44) можно оценить длительность времени редукции $\delta\tau \approx 0,1$ фс. Это – субфемтосекундный процесс. Подставляя численные значения величин в (48), най-

дём оценку силы: $F \approx 10$ нН. В предположении, что атом водорода с массой $M \approx 2000 m_e$ находится в состоянии плазмодного электромеханического нанобота, по формуле (49) имеем оценку его импульсного смещения в гипотетической конденсированной среде без трения: $\delta S \approx 0,3$ нм. Это величина порядка среднего межатомного расстояния в типичных конденсированных фазах материалов. Можно дать оценку величины мощности. При 100 % КПД работа равна всей энергии $\delta \epsilon_{\text{exc}}$ испущенного наноботом (e^-e^+) -плазмоида. Мощность такого плазмодного наноэлектромеханического мотора: $N = \delta \epsilon_{\text{exc}} / \delta t$. В данном примере развиваемая мощность составляет около 4 мВт.

Для точного расчёта итогового за время δt транспортного смещения нанобота и величины мощности мотора при совершении им работы необходимо точно учесть особенности трансграничных сил взаимодействия с окружающей его матрицей материала [4, 5].

Заключение

Электромеханический плазмодный нанобот может существовать и двигаться только в электронной среде конденсированного состояния материала. Механизм функционирования плазмодного нанобота связан с квантовым обменом спутанной парой электронов между наноботом и квантовополевой электронной системой конденсированного состояния. Такой механизм формирования квантовых НЭМС наноботов не имеет аналога среди молекулярных механохимических наноботов.

Квантовая механика движения плазмодного нанобота возмущается эффектами термодинамики флуктуаций электронной системы конденсированного состояния. Эти эффекты возмущения движения квантового плазмодного нанобота можно отнести к форме квантового неразрушающего контроля его движения со стороны внешней подсистемы электронов конденсированного состояния. Это же предопределяет специфический квантово-кинетический процесс релаксационного движения плазмодного нанобота в материале.

При классическом «измерении» квантового плазмодного нанобота произойдёт редукция его волновой функции. В результате этого в материале на месте квантового плазмодного нанобота будут обнаружены с вероятностью $|C_M|^2$ незаряженная наночастица, или, с равными вероятностями $(1/2)|C_{M\pm 1}|^2$, катион или анион этой наночастицы. Это, косвенно, будет свидетельствовать о том, что плазмодный нанобот существовал в квантовом состоянии до его измерения.

Адиабатическое приближение квантовой механики не является приемлемым для описания движения плазмодного нанобота в конденсированном состоянии. Требуется учёт эффектов неадиабатичности движения ядер нанобота и флуктуационного характера термодинамики электронной системы конденсированного состояния материала. В работе показано, что наличие этих эффектов проявляется в существовании двух механизмов релаксационного самодвижения плазмодного нанобота в конденсированной среде. Эти квантовые электромеханические механизмы функционирования нанобота взаимно дополняют друг друга. Первый механизм – это короткая неадиабатическая конверсия внутренней квантово-механической энергии нанобота в электрическую энергию квантового (e^-e^+) -плазмодного топливного элемента. Второй механизм – это ультракороткая адиабатическая конверсия части электрической энергии «бортового» квантового (e^-e^+) -плазмодного топливного элемента в механическую работу по перемещению нанобота внутри конденсированной фазы материала.

Двухстадийные последовательные конверсии внутренней квантово-механической энергии в электрическую энергию (e^-e^+) -плазмоида и конверсии электрической энергии (e^-e^+) -плазмоида в квантово-механическую энергию перемещения центра масс нанобота формируют двухтактный дискретный процесс последовательных манипуляций и транспорта НЭМС нанобота в материале. Сравнивая между собой длительности τ и δt двух последовательных стадий квантового движения нанобота, отметим, что в масштабе фемтосекундных [5] актов внутренней плазмодной конверсии субфемтосекундные акты плазмодной диссипации энергии практически мгновенны. Это указывает на бифуркационный характер прерываний когерентности фемтосекундных процессов внутренней конверсии энергии плазмодного нанобота и на сложный прерывистый характер его самодвижения. Эстафетный режим трансформаций ядерной и электронной структуры нанобота определяет его высокую изменчивость и информационный ресурс в ходе движения в конденсированном состоянии материала. Электрические и магнитные силовые поля «бортового» квантового (e^-e^+) -плазмодного топливного элемента управляют квантовым движением наноэлектромеханической системы нанобота, что обуславливает проявление высокой адаптивности отклика нанобота

на внешние воздействия в процессе его движения в материале. В принципе, это позволяет построить физические инструменты для управления самодвижением НЭМС нанобота.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hess H. // *Science*. – 2006. – V. 312. – P. 779.
2. Lund K., Manzo A. J., Dabby N., et al. // *Nature*. – 2010. – V. 465. – P. 206.
3. Desai T., Bhatia S. *BioMEMS and Biomedical Nanotechnology* BioMEMS and Biomedical Nanotechnology. III: Therapeutic Micro/Nanotechnology. — Springer, 2007. — 1856 p.
4. Жуковский М.С., Безносюк С.А. // *Нанотехника*. – 2013. – Т. 1(33). – С. 41.
5. Жуковский М.С., Безносюк С.А., Потекаев А.И., Старостенков М.Д. Теоретические основы компьютерного нанонинжиниринга биомиметических наносистем. – Томск: Изд-во НТЛ, 2011. – 236 с.
6. Давыдов А.С. *Квантовая механика: учеб. пособие*. – 3 изд., стереотип. – СПб.: БХВ-Петербург, 2011. – 704 с.
7. Beznosyuk S.A., Minaev V.F., and Muldakhmetov Z.M. // *Comput. Theor. Chem.* – 1991. – V. 227. – P. 125.
8. Фомин А.С., Жуковский М.С., Безносюк С.А. // *Изв. вузов. Физика*. – 2006. – Т. 49. – № 7. – С. 66.
9. Жуковский М.С., Безносюк С.А. // *Ползуновский вестник*. – 2009. – № 3. – С. 19.
10. Beznosyuk S.A. // *Mater. Sci. Eng. C*. – 2002. – V. 19/1-2. – P. 369.
11. Beznosyuk S.A., Kolesnikov A.V., Mezentsev D.A., et al. // *Mater. Sci. Eng. C*. – 2002. – V. 19/1-2. – P. 91.
12. Tarasov V.E. *Quantum Mechanics of Non-Hamiltonian and Dissipative Systems*. – Amsterdam; Boston; London; New York: Elsevier Science, 2008. – 530 p.

*Алтайский государственный университет, г. Барнаул, Россия

Поступила в редакцию 21.03.13.

**Сибирский физико-технический институт им. В.Д. Кузнецова

Национального исследовательского Томского государственного университета,

г. Томск, Россия

***Национальный исследовательский Томский государственный университет,

г. Томск, Россия

E-mail: bsa1953@mail.ru

Безносюк Сергей Александрович, д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой;

Жуковский Марк Сергеевич, к.ф.-м.н., доцент;

Потекаев Александр Иванович, д.ф.-м.н., профессор, директор СФТИ, профессор каф. общей и экспериментальной физики НИ ТГУ.