

М.С. Безносюк, С.А. Безносюк, Т.М. Жуковская

ИНФОРМАЦИЯ СКЛЕЕК И КОМПЬЮТЕРНАЯ НАНОТЕХНОЛОГИЯ ВЕЩЕСТВА

Предметом исследования в компьютерной нанотехнологии являются разнообразные склейки кластеров химических частиц, создающие сложные наноструктуры материалов. Эти склейки являются универсальной формой информации сетей строения вещества в нанометровом диапазоне. Ниже дан анализ физических законов и моделей, лежащих в основе компьютерных нанотехнологий и определяющих ресурсы нанотехнологий в области создания нанороботов.

Стратификация физических законов движения частиц вещества по масштабным пространственно-временным уровням находит последовательное объяснение в рамках теории квантовой топологии плотности [1]. Согласно этому формализму иерархия структур химического вещества базируется на постулатах нерелятивистской квантовой теории поля и топологических свойствах распределения систем ядер и электронов.

Химической частицей является ограниченный в пространстве рой ядер и электронов, образующих квантово-механическую систему. В областях пересечения химических частиц происходит антисимметризация волновых функций роёв и возникают обменно-корреляционные силы склеивания. Это контактные межчастичные силы, убывающие по экспоненциальному закону. Архитектура склеек химических частиц является естественным «мостом» между квантово-механическим уровнем процессов внутри химических частиц и макроуровнем движения, описываемым законами классической механики, разделенных во внешнем физическом пространстве химических частиц.

Силы склейки способны создавать сложные наноструктуры химических частиц, которые имеют запас информации. Поэтому процессы эволюции архитектуры склейки наноструктур имеют непосредственное отношение к информационной динамике в веществе. Этим объясняется то, что именно в нанометровом масштабе идут кодовые биохимические процессы, управляемые наноструктурными склейками ДНК, РНК, ферментов и т.п.

Диссипативность информации

динамики наноструктур

Для описания информационной динамики наноструктур целесообразно ввести ряд понятий и обозначений. В динамике должны определяться все типы сил, действующие в системе. В химическом веществе в соответствии с концепцией квантовой топологии плотности можно выделить три типа сил. Силы обменно-корреляционного сцепления атомов внутри химических частиц обозначим а-силами. Соответственно, обменно-корреляционные силы склейки между химическими частицами – b-силами. Оставшиеся межчастичные электродинамические силы, не имеющие обменно-корреляционной природы, – с-силами. Последние имеют степенной закон убывания.

Три типа сил задают три основных типа движений химических частиц. Это, во-первых, внутрочастичное механическое движение атомов в поле а-сил, во-вторых, межчастичное движение внутри кластерных склеек b-сил, в третьих, движение химических частиц и кластеров в поле с-сил ассоциатов.

Потенциальные а-силы определяют спектр энергий внутренних состояний химической частицы. В адиабатическом приближении этот спектр можно представить как спектр энергий колебательно-вращательных состояний ядер, двигающихся на эффективной поверхности потенциальной энергии а-сил. При этом возбужденная подсистема ядер описывается волновой функцией, не зависящей от координат электронов. Чем выше механическая энергия, тем больше узлов имеет волновая функция. Диссипацией механической энергии квантовой системы называется процесс ее спонтанного перехода из возбужденных состояний в устойчивое основное состояние. Этот переход идет с исчезновением узлов волновой функции в основном состоянии и понижением кинетической энергии.

Ассоциат химических частиц, двигающихся в поле потенциальных с-сил, является классической механической системой. Волновой функции ассоциата не существует. Диссипация механической энергии классических систем имеет другое определение. Это процесс понижения кинетической энер-

гии ассоциата в процессах столкновений частиц за счет радиации электромагнитных волн, накопления внутренней энергии частиц при их склеивании в кластеры, переходе в возбужденные квантовые состояния или слияния в сфере действия внутренних потенциальных α -сил.

Склейки кластеров проявляются в виде универсальных информационных сил трения. Они возникают в форме диссипативных наноструктур как эффект микроскопического трения и макроскопического трения в классической механике химических частиц во внешнем физическом пространстве.

Информация и энергия склейки химических частиц

Состояние эволюции кластера химических частиц задается системным графом склейки. Вершинами графа являются химические частицы, ребрами инцидентности графа – парные склейки между химическими частицами. Граф характеризуется топологическими индексами: числом вершин, числом ребер, связностью. Графы эквивалентны, если у них одинаковы топологические индексы. Эквивалентные графы могут различаться лишь инцидентностью ребер. Все эквивалентные между собой графы образуют мультиплет эквивалентности.

Количественно сложность системного графа задается информацией. Определим ее мерой Хартли [2] в битах, как двоичный логарифм мультиплетности графа. Максимальная сложность (информация) склейки достигается при равенстве числа пар связанных и несвязанных вершин графа. Напротив, наиболее прост полный граф, в котором все вершины попарно связаны между собой. Его информация равна нулю. Связанный граф с минимальным числом склеек (их на единицу меньше, чем число вершин) также имеет минимальную, но отличную от нуля информацию.

Внутренняя энергия, запасенная в областях склейки, пропорциональна числу ребер инцидентности системного графа. Сложную картину информационной динамики наноструктур создает сочетание монотонной зависимости внутренней энергии с немонотонной экстремальной зависимостью информации от числа склеек.

Управление микро- и макродинамикой химических частиц β -силами трения

Движущийся внутри химической частицы ядерно-электронный рой имеет единую волновую функцию в чистом квантовом состоянии или единый статистический опера-

тор в смешанном квантовом состоянии. В силу этого внутри химической частицы атомы имеют между собой максимально возможное число нелокальных связей за счет α -сил. Таким образом, системный граф связи атомов внутри химической частицы является полным и имеет невырожденный простой мультиплет с нулевой информацией. В случае классической механики ассоциата частиц электродинамические ϵ -силы имеют неограниченный радиус действия и также задают полный системный граф смежности ассоциата. Поэтому ассоциат имеет также нулевой запас информации.

Классическая и квантовая механика – это строго детерминистические концепции. Сложность движения в этих подходах задают силы трения, вязкости. Обычно все эти усложнения трактуются как влияние статистического хаоса неточностей задания начально-граничных условий. Следствием этого является термодинамический вывод об энтропийной диссипации механической энергии. Специфичность сил трения и их роль в особенностях эволюционных сценариев диссипации механической энергии стали предметом исследования в новой научной парадигме – синергетике [3]. В этом подходе силы трения – это главные упорядочивающие силы. В синергетике основную роль в появлении упорядочивающих сил трения отводят энтропийным факторам, связанным с хаосом движения частиц. В квантовой топологии открыты управляющие силы трения, которые не создают порядок или хаос, а задают сложность движения вещества.

Таким образом, масштабная иерархия процессов в химическом веществе включает особый уровень клеевых наноструктур кластеров, на котором происходит динамика информационных процессов. Макроскопические процессы на уровне ассоциатов химических частиц и микроскопические процессы внутри химических частиц сами по себе не имеют сложной динамики, однако они управляются информационными процессами, идущими на мезоскопическом уровне склеек химических частиц. При этом управляющей силой выступает диссипативная β -сила трения.

Самоуправляющие склейки кластерных наноструктур существуют не только в генных биологических системах, но и в химии коллоидных растворов, в криохимии атомарно-диспергированных растворов, в реологии неньютоновских жидкостей и межзеренных границ, в катализе химических реакций и т.д.

Методы управления информационной динамикой наноструктур

Особенностью указанных систем является сложность их поведения в результате отклика на внешние воздействия электрических, электромагнитных полей и управляемого извне инструментария точечного действия. В математической формулировке причины сложного поведения склеек химических частиц могут быть разделены на три группы:

1. В ходе эволюционного отклика сложной системы происходит спонтанное нарушение динамической симметрии эволюционного оператора при смене системного графа склейки. При этом скачком меняется и информация склейки.

2. Диссипативная наноструктура склейки химических частиц имеет обратную связь с микро- и макродинамикой химических частиц. Эта связь осуществляется встречными потоками диссипирующей энергии и потоками химического вещества, идущими через наноструктуру между стратами микро- и макроуровней. Обратная связь нелинейна и приводит к моделям с многочисленными бифуркациями эволюционного движения.

3. В информационных сетях склеек химических частиц возможны специфические для информационной динамики эффекты памяти. Сетевые образы памяти формы склеек встраиваются в эволюционный оператор, что позволяет прошедшим этапам

эволюции управлять их будущим в нейронной сети мозга или нейрокомпьютера.

Заключение

Регулирование информационной динамики наноструктур химических частиц с помощью роботизированного управляемого инструментария: электронных, ионных и фотонных «скальпелей» и «клеящих» автоматов – это основной конструктивный метод в компьютерной нанотехнологии. Применение нейрокомпьютеров в нанотехнологии связано именно с информативностью операций на нанометровых расстояниях. Атомно-силовая микроскопия (АСМ) построена на существовании сил «ближнего поля», которые есть не что иное, как обменно-корреляционные силы склейки между иглой микроскопа и химическими частицами поверхности материала. В приборах третьего поколения АСМ измеряются не только геометрия склеек, но и их вклад в вязкость, магнетизм. Существуют различные режимы изменения сложности в зависимости от возрастания или убывания энергии информационных наноструктур склеек. Для больших по числу химических частиц кластеров возрастание удельного веса энергии на информационных степенях свободы увеличивает запас информации. Однако в общем случае кластерных ассоциатов химических частиц производная от энергии информации по информации может быть знакопеременной.

ЛИТЕРАТУРА

1. Beznosyuk S.A., Minaev B.F., Daynov R.D., Muldakhmetov Z.M. // Quant. Chem. 1990. Vol. 38. №6.
2. Weiner N. Cybernetics. New York, 1948.
3. Лоскутов А.Ю., Михайлов А.С. Введение в синергетику. М., 1990.