

випадкових сигналів дає змогу відмовитись від застосування розкладу в ряд Тейлора, що потребує значних обчислювальних ресурсів, істотно спростити апаратне забезпечення опрацювання каналного рівня і, як наслідок, здешевити комунікаційні засоби автоматизованих систем.

Такий підхід до реалізації цифрових компонентів систем автоматизованого контролю, сигналізації чи керування потребує подальшого дослідження та вдосконалення цифрових засобів опрацювання сигналів з керованою ентропією з подальшим розробленням відповідної алгоритмічної, програмної та апаратної реалізації.

1. Скляр Б. *Цифровая связь. Теоретические основы и практическое применение*. – 2-е изд., испр.: пер с англ. – М.: Издательский дом “Вильямс”, 2003. – 1004 с. 2. Прокис Дж. *Цифровая связь / пер. с англ.; Под ред. Д.Д. Кловского*. – М.: Радио и связь, 2000. – 598 с. 3. Пат. 81017 Україна, МПК(2006) Н04В 1/69. *Спосіб передавання та приймання інформації* / Мельничук С.І., Козленко М.І. (Україна). – заявка № а 2005 08893; заявл. 19.09.2005; опубл. 26.11.2007, Бюл. № 19. 4. Пат. 92915 Україна, МПК(2006) Н04В 1/69. *Спосіб передавання та приймання інформації на основі широкосмугових сигналів, що формуються процесами зі змінними імовірнісними характеристиками* / С. І. Мельничук, М. І. Козленко (Україна). – заявка № а 2008 01274; заявл. 01.02.2008; опубл. 27.12.2010, Бюл. № 24. 5. Мельничук С.І. *Теорія ентропійних методів маніпуляції сигналів: Тези доповідей проблемно-наукової міжгалузевої конференції: Інформаційні проблеми комп’ютерних систем, юриспруденції, економіки та моделювання (ПНМК-2009)*. – Бучач: Інститут менеджменту і аудиту, 2009. – С. 6. 6. Козленко М.І., Мельничук С.І. *Дослідження завадостійкості способу передавання та приймання інформації, зокрема, способів формування та обробки широкосмугових сигналів // Електроніка та зв’язок*. – 2007. – № 2(37). 7. Жураковський Ю.П., Полторак В.П. *Теорія інформації кодування: підручник*. – К.: Вища шк., 2001. – 255 с.

УДК 681.5

Ю.В. ЧОВНЮК<sup>1,2</sup>, М.Г. ДІКТЕРУК<sup>2</sup>, К.І. ПОЧКА<sup>2</sup><sup>1</sup> Національний університет біоресурсів і природокористування України (м. Київ),<sup>2</sup> Київський національний університет будівництва і архітектури

## КОНЦЕПТУАЛЬНІ ОСНОВИ АВТОМАТИЗОВАНОГО ПРОЕКТУВАННЯ ТА ОСОБЛИВОСТІ ДИНАМІЧНОЇ ПОВЕДІНКИ МОЛЕКУЛЯРНИХ НАНОМАШИН І НАНОРОБОТОТЕХНІКИ

© Човнюк Ю.В., Діктерук М.Г., Почка К.І., 2011

*Встановлено основні особливості динамічної поведінки молекулярних наномашин і наноробототехніки, що покладені в основу їх автоматизованого проектування.*

*Key features of the dynamic behavior of the molecular nanomachines and nanorobotic science taken as a basis for their automated design were defined.*

**Постановка проблеми.** В основу функціонування молекулярних наномашин (МН) та нанороботів (НР) покладено живу матерія. Тому фізичні основи функціонування живої матерії повинні бути предметом ретельного дослідження тих учених, котрі вивчають особливості динамічної поведінки МН та НР.

До цього часу фізики, які у межах своїх можливостей вивчали живий організм як систему механічних важелів, або як енергетичний ланцюг чи як тверде тіло, – не робили різниці у підході до живого та неживого. Фізика немов би вишукувала свій предмет в існуванні живого – загальну для усіх речовин структурну основу чи прояв фізичних законів – і займалась цим предметом, користуючись своїми методами. Це давало можливість зберігати універсальність фізичних законів, але залишало за межами розгляду специфіку життя (живої матерії). Вона фіксувалась як деяка дивна річ порівняно з неживою матерією: дивна стійкість надтонких клітинних мембран, які витримують, наприклад, високий електричний потенціал.

Власне життя й не могло тривалий час бути предметом фізичного пізнання, оскільки фізика абстрагувалась від таких ознак, без яких феномен життя у принципі не може бути представлений: від цілісності систем та їх здатності до самоорганізації. Слід зазначити, що квантова механіка вже на початку ХХ ст. поставила питання про те, що не можна звести властивості цільної квантово-механічної системи до властивостей складових її елементів. До останнього десятиліття ХХ ст. квантово-механічні феномени вважались мікроскопічними і з цілісністю макроскопічних живих організмів (наприклад, бактерій) не порівнювались.

Сучасна наукова революція, нанотехнології, МН та НР зробили самоорганізацію складних систем предметом точного математичного природознавства, відкрили перед фізикою принципово нові можливості у пізнанні живої матерії. З одного боку, з'ясування фізичних основ самоорганізації як самодовільного ускладнення знищило прірву між живим, здатним до еволюції впродовж вихідної лінії, та неживим, чий незворотні зміни до сьогодні визнавались лише як розпад. З іншого боку, оскільки виявилось, що у процесі самоорганізації становлення нового цілого здійснюється шляхом встановлення узгодженого впорядкованого (когерентного) руху елементів вихідного середовища, стало теоретично можливим пояснити існування макроскопічних квантових ефектів, зокрема й у живих організмах.

Розгляд живої матерії (живого організму) як ієрархії дисипативних структур, яка виникає і самопідтримується за рахунок процесів самоорганізації, що забезпечують існування глобальної когерентності живого організму як квантово-механічної системи – такий теоретичний підхід, характерний для фізики живого, дає змогу предметом цієї науки вважати сам феномен життя у його цілісності й саморозвитку. Завдяки такому підходу можна вивчати й динамічну поведінку МН та НР. Але оскільки живе існує як ціле, то ця цілісність повинна мати не тільки прояв, але й основу у фізичному аспекті існування життя.

Врахування можливості забезпечення цілісності макроскопічного організму (бактерії, що входять до складу НР) за рахунок ефективного когерентного електромагнітного поля *мм*-діапазону (або іншого поля певної фізичної природи, наприклад, термов'язкопружного, акустичного тощо), дає змогу вирішити багато проблем, які не можуть бути вирішені на рівні короткодючих хімічних взаємодій. Отже, з'являється надія щодо створення концептуальних основ проектування НР та МН.

**Аналіз останніх досліджень і публікацій.** Перегляд звичних уявлень про фізичну природу живої матерії можливий лише з позицій найновіших досягнень сучасної фізики, таких її розділів, як нелінійна електродинаміка, нерівноважна термодинаміка, квантова теорія поля, синергетика та фізика дисипативних структур [1–12]. Насамперед слід підкреслити термодинамічно “відкритий” (нерівноважний) та нелінійний характер живих систем. (Ці ж якості та особливості притаманні МН та НР). У таких системах за рахунок нерівноважного фазового переходу можуть з'являтися якісно нові динамічно стійкі просторово-часові структури [2, 9]. Енергетичний спектр таких структур квантується [1, 3], а внаслідок просторово-часової впорядкованості (когерентності) можуть виникати ефективні далекодіючі сили [4].

У межах цього підходу кожний макро- та мікроскопічний живий об'єкт розглядається як цілісна макро- чи мікроскопічна квантова система. Розмаїття, відмінності та стійкість видів та осіб

живого забезпечується завдяки принципам дискретності та тотожності квантової механіки. Формально існує лише одна умова для застосування щодо цілісної макро-/мікроскопічної системи квантово-механічного підходу – це формування нелокального самоузгодженого потенціалу для біологічного об'єкта загалом. Створення такого потенціалу можливе із врахуванням незвичайних, короткодійних хімічних сил, і ефективних далекодійних сил (з радіусом, який одного порядку з лінійним розміром самого організму). Припускається, що забезпечити їх може когерентне, синхронне у просторі й за фазою поле певної фізичної природи (електромагнітної/акустичної тощо) у діапазоні спостережуваних характеристичних частот (*мм*-діапазону – для електромагнітного поля й гіперзвукового діапазону – для акустичного поля). Виникнення когерентності у міліметровому/гіперзвуковому діапазоні у водному середовищі (переважна складова мікроорганізмів, що входять до складу МН та НР) доволі імовірно (можливе) за рахунок високої ймовірності індукованих переходів порівняно зі спонтанними. “Інверсна заселеність” активних центрів, тобто клітин, забезпечується їх метаболізмом через механізм, який називають “ієрархією дисипативних структур”. Активними центрами можуть бути клітини, “інверсна заселеність” яких допускає здатність продукувати електромагнітне/гіперзвукове випромінювання, а також субклітинні структури, активні у міліметровому/гіперзвуковому діапазоні.

Існування самоузгодженого потенціалу цілісного мікроорганізму можна зрозуміти, використовуючи уявлення про граничні цикли – періодичні у часі та стійкі структури, які виникають у дисипативних середовищах, тобто у відкритих системах з активними клітинами – центрами [2, 9].

Як показано в [7], існуюче уявлення про одноклітинні організми як про самостійні живі системи не відповідає дійсності. Насправді фактично усі види одноклітинних у вільному стані утворюють макроскопічні колонії, які мають риси та навички цілісної живої системи (входять до складу НР та МН): пошук їжі, обхід перешкод, відновлення порушеної форми тощо. При цьому навіть були знайдені гени, що відповідають за поведінку і властивості таких квазіістот.

Такий підхід до живої матерії можна використати для пояснення динамічної поведінки МН і НТ та особливостей цієї поведінки.

**Мета роботи** – сформувати концептуальні основи автоматизованого проектування молекулярних наномашин і наноробототехніки, а також специфічної “мови” опису специфіки їх динамічної поведінки, можливих стійких станів.

### **Виклад основного матеріалу дослідження:**

#### 1. Парадигми фізики живого. Акустоелектромагнітний механізм.

Кожний мікроскопічний живий об'єкт (МН та НР) являє собою цілісну мікроскопічну квантово-механічну систему. Різноманітна диференціальна стійкість таких систем (відмінність та стійкість різновидів МН та НР) забезпечується виконанням стандартних принципів квантової механіки – тотожності та дискретності, тобто тих принципів, які забезпечують багатогранну диференціальну стійкість на інших рівнях квантової організації природи: молекулярному, атомному та ядерному. Існує загальний критерій динамічної стійкості живої і неживої природи. Саме такі принципи, з нашого погляду, забезпечує квантова механіка, нелінійна фізика, статус яких дав змогу називати фундаментальними підходи ядерної, атомної, молекулярної фізики, засоби і мову опису регулярних процесів, динамічного хаосу й турбулентності, властивих саме сучасній синергетиці (та нелінійній фізиці).

По суті МН та НР (сам факт їх існування!) є макроскопічними квантовими системами, хоча й не унікальним явищем (з причини існування ефекту Джозефсона, Казіміра). Ця обставина вимагає вагомого обґрунтування, оскільки у цьому випадку йдеться не просто про застосування до макроскопічних об'єктів окремих характеристик, властивих мікроскопічному світу – хвильової функції, її фази тощо, а й про можливість використання (обґрунтованого) формалізму квантової

механіки. Цей формалізм включає у себе формування самоузгодженого потенціалу, його заповнення енергетичними рівнями, виникнення правил відбору для міжрівневих переходів та метастабільних станів, існування операторів і власних значень величин, які вимірюються, тривалості життя цих рівнів (у часі), формування смуг різної природи, неперервних та дискретних спектрів, модифікацію комутаційних співвідношень, масштабованість сталої М. Планка ( $h$  або  $\frac{h}{2\pi}$ ) у специфічних умовах тощо. Аналіз показує, що насправді формально існує лише одна умова для того, щоб застосовувати щодо цілісної макроскопічної системи (МН, НР) квантово-механічний підхід, і ще одна умова – для можливості формування її універсального паспорта – власних характеристик частот (геометричних резонансів власних форм). Перша умова – це формування нелокального самоузгодженого потенціалу для усього об'єкта (МН, НР) загалом. Друга – наявність правил відбору, які перетворюють квазісуцільний спектр переходів між одночастинковими рівнями, що заповнюють потенціальну яму відповідно до рівняння Е. Шредінгера, у дискретний спектр, властивий тільки цьому об'єкту (НР, МН).

Створення єдиного макроскопічного потенціалу, у якому можуть розіграватись процеси, передбачені квантовою механікою, можливе тільки при існуванні деяких далекодіючих сил. Таких сил у звичайному стані конденсованої речовини немає. Але вони виникають як деяка ефективна далекодія у разі просторово-фазової когерентності, типу лазерної (мазерної) [4]. Тому, щоб не порушувати логічний ланцюг реалізації ідей квантової макроскопічної цілісності живого, ми повинні припустити існування когерентного гіперзвукового діапазону акустичного поля живого організму у діапазоні, який відповідає області власних характеристичних частот (40...70 ГГц) цього організму, що еквівалентно “міліметровому діапазону” (електромагнітних хвиль) і гіперзвуковому діапазону частот (акустичних хвиль).

З першого погляду, таке припущення здається надто сміливим, особливо, якщо врахувати реальні характеристики середовища, у якому припускається розповсюдження коливань. Однак детальніший аналіз показує, що виникнення когерентності у мм-/гіперзвуковому діапазоні (у водному середовищі для  $h \cdot n \gg k \cdot T$ , де  $h$  – стала Планка,  $n$  – лінійна частота хвиль,  $k$  – стала Больцмана,  $T$  – абсолютна температура організму) справді істотно полегшене порівняно зі стандартним для лазерів/мазерів оптичному (гіперзвуковому) діапазоні, за умови, що інверсна залежність активних центрів забезпечується механізмом накачки, який асоціюється у випадку живого, у кінцевому випадку, з метаболізмом через ланцюг “вкладених” одна на одну структур, що називається “ієрархією дисипативних систем” [8]. Тому, якщо як активні центри на рівні організму розглядаються клітини, для яких фізичний термін “інверсна заселеність” означає здатність бути джерелом електромагнітного (або акустичного) випромінювання у загальному випадку складного амплітудно-частотно-фазового складу, то нижчі рівні ієрархії повинні у кінці забезпечити переклад на мову електромагнітних/акустичних (гіперзвукових) коливань все розмаїття і багатство, наприклад, спадкової інформації, зосередженої у ДНК.

Оцінки, аналіз та розрахунки, зроблені нижче для різноманітних структур живої матерії (окремо узятій клітини), у сполученні з величезним експериментальним та теоретичним матеріалом, накопиченим фахівцями, які вивчають традиційні об'єкти живої й “передживої” природи (нуклеотиди, ДНК, амінокислоти, клітини, клітинні мембрани, білки, одноклітинні організми, рослини), дають змогу стверджувати, що уявлення фізики живого [1] справді адекватні до реального світу, у якому живе, є таким після молекулярного рівня квантової організації матерії.

Спільний аналіз стандартних аналітичних співвідношень квантової фізики і теорії випромінювання показує, що відношення імовірності індукованого до спонтанного випромінювання у системі “речовина за температури  $T$  з інверсно заселеними дворівневими центрами – поле з резонансною частотою  $E_2 - E_1 = h \cdot n$ ” має вигляд:

$$\frac{P_{\text{інд}}}{P_{\text{спон}}} = \frac{1}{\exp\left(\frac{h \cdot n}{k \cdot T} - 1\right)}, \quad (1)$$

де  $P_{\text{інд}}$ ,  $P_{\text{спон}}$  – імовірність індукованого та спонтанного випромінювання відповідно. Для звичайного для лазерів оптичного діапазону за  $h \cdot n \gg k \cdot T$  призводить до відомих технічних труднощів забезпечення умови проходження нерівноважного фазового переходу для досягнення режиму генерування когерентних електромагнітних хвиль.

У міліметровому/гіперзвуковому діапазоні за кімнатної температури ( $T = 300^{\circ}K$ )  $\frac{h \cdot n}{k \cdot T} \approx 0,01$  й відповідно:

$$\frac{P_{\text{інд}}}{P_{\text{спон}}} \approx \frac{k \cdot T}{h \cdot n} \approx 100. \quad (2)$$

Отже, при забезпеченні режиму інверсної заселеності за рахунок метаболічної накачки на усіх рівнях в ієрархічному ланцюгу дисипативних структур живого організму умови переходу у режим когерентності значно полегшені за рахунок “теплової лазні”. Тому, незважаючи на значне поглинання мм-випромінювання (гіперзвуку) у водному середовищі живого організму, останній у змозі зберігати мазерний режим функціонування як єдиного цілого.

Нижче, у табл. 1 наведено резонансні частоти деяких структур живої клітини/мікроорганізмів (що мають нанорозміри). Саме такі структури можуть ефективно взаємодіяти з електромагнітними полями надзвичайно високої частоти (НВЧ)/крайньо високочастотними полями (КВЧ) або ж з полями акустичної природи (гіперзвукового діапазону). “Робочі органи” МН та НР повинні бути схожими на генератори полів вказаного частотного діапазону або принаймні бути одного порядку (за своїми лінійними розмірами) з подібними структурами, щоб ефективно з ними взаємодіяти. Крім того, у робочих режимах (функціонування) МН та НР повинні бути присутні різновиди руху, які не порушують їх стійкого стану, а саме: обертання НР (МН) як цілого, їх коливання, “згини-розгини”, скрутка.

1. Фізичний механізм, відповідальний за взаємодію (резонанс) електромагнітних полів НВЧ/КВЧ – діапазонів з акустичними полями гіперзвукового діапазону у живій матерії.

Відомо [15], що залежність частоти  $\omega$  (кутової) від хвильового числа  $k$  для будь-якої квазівпорядкованої (квазікристалічної) структури (квазіґратки) має кілька гілок: 1) гілки, які називаються акустичними (їх три – одна ( $L$ ) – для поздовжньої акустичної хвилі; дві інші ( $S_1$ ,  $S_2$ ) – для двох типів поперечних хвиль); 2) гілки, які називаються оптичними (оскільки частоти коливань одного порядку, що й частоти електромагнітних хвиль інфрачервоного діапазону). Збудження таких акустичних коливань призводить до поглинання світла (електромагнітних хвиль).

Загалом, якщо елементарна структура (квазікристала) складається з  $N$  елементів (молекул/атомів), тоді існує  $3 \cdot N$  гілок коливань цієї структури (за кількістю ступенів вільності руху цих елементів). (До речі, такою структурою може бути кластер (сукупність, множина) молекул (100...200 одиниць). Якщо цей кластер складається з молекул  $H_2O$ , тоді його розміри  $\sim 10_{\text{нм}} = 10^{-8} \text{ м}$ . Подібні розміри можуть мати й міжклітинні щілини живої матерії, поздовжні коливання яких теж мають частотний діапазон, що належить КВЧ-діапазону

$$\left( \omega = \frac{3 \cdot 10^3 \text{ м/с}}{10^{-8} \text{ м}} = 3 \cdot 10^{11} \frac{1}{\text{с}} \rightarrow f = 47,75 \text{ ПГц} \right).$$

**Резонансні частоти деяких структур живої клітини**

Структура	$(d)$ Розміри, $\text{Å}$ ( $1 \text{Å} = 10^{-10} \text{ м}$ )			Електромагнітна частота, $f$ , Гц	Звукова (гіперзвукова) частота, $f$ , Гц
Соматична клітина ссавців (людини)	Діаметр $2 \cdot 10^5$	Діаметр $2 \cdot 10^5$	$6,28 \cdot 10^5$	$2,39 \cdot 10^{12}$	$1,20 \cdot 10^7$
Ядро соматичної клітини (середній розмір)	Діаметр $1,5 \cdot 10^4$	Діаметр $1,5 \cdot 10^4$	$1,57 \cdot 10^5$	$9,55 \cdot 10^{12}$	$4,78 \cdot 10^7$
Мітохондрія з клітини печінки (середній розмір)	Діаметр $1,5 \cdot 10^4$	Діаметр $1,5 \cdot 10^4$	$4,71 \cdot 10^4$	$3,18 \cdot 10^{13}$	$1,59 \cdot 10^8$
Геном клітини людини (суперструктурований)	$1,5 \cdot 10^4$	$1,5 \cdot 10^4$	$6 \cdot 10^4$	$2,5 \cdot 10^{13}$	$1,25 \cdot 10^8$
Хромосома інтерфазна (максимум генної активації)	$1 \cdot 10^6$	500	$2 \cdot 10^6$	$7,5 \cdot 10^{11}$	$3,75 \cdot 10^6$
Хромосома метафазна (мінімум генної активації)	$5 \cdot 10^4$	100	$1 \cdot 10^5$	$1,5 \cdot 10^{13}$	$7,5 \cdot 10^7$
ДНК хромосоми (розтягнута нитка)	$5 \cdot 10^8$	20	–	$3 \cdot 10^9$	$1,5 \cdot 10^4$
Петля хромосоми (кілька генів)	$4 \cdot 10^3$	3000	$1,4 \cdot 10^4$	$1,07 \cdot 10^{14}$	$5,35 \cdot 10^8$
Ген, який кодує білок з молекулярною вагою 50000 (6 нуклеосом)	660	110	1540	$9,7 \cdot 10^{14}$	$4,85 \cdot 10^9$
Нуклеосома (“бусинка” на хромосомі)	110	57	334	$4,5 \cdot 10^{15}$	$2,25 \cdot 10^{10}$
Лінкерна ділянка хромосоми (розділяє нуклеосоми)	204	20	448	$3,35 \cdot 10^{15}$	$1,68 \cdot 10^{10}$
Рибосома ( <i>E. coli</i> )	Діаметр $\approx 180$	Діаметр $\approx 180$	565,2	$2,65 \cdot 10^{15}$	$1,33 \cdot 10^{10}$
Нм – ДНК (ДНК мембранний комплекс)	1000	85	2170	$6,9 \cdot 10^{14}$	$3,45 \cdot 10^9$
Капіляри (ссавців, людини, зерна, насіння культурних рослин)	Діаметр 30	Діаметр 30	94,2	$1,59 \cdot 10^{16}$	$7,95 \cdot 10^{10}$
	40	40	125,7	$1,19 \cdot 10^{16}$	$5,95 \cdot 10^{10}$
	50	50	157	$9,55 \cdot 10^{15}$	$4,78 \cdot 10^{10}$
	100	100	314	$4,78 \cdot 10^{15}$	$2,39 \cdot 10^{10}$
	1000	1000	3140	$4,78 \cdot 10^{14}$	$2,39 \cdot 10^9$

$3 \cdot N$ -гілок коливань складаються з 3 гілок акустичних (одна поздовжня й дві поперечні) та  $3 \cdot (N - 1)$ -оптичних. Іншими словами, повний набір коливань (квазікристалічної ґратки, кластера молекул, міжклітинних щільних контактів) можна розглядати як набір  $3 \cdot N$ -пружних хвиль, які характеризуються відповідними дисперсійними законами (рис. 1).

На рис. 1 суцільні криві – це акустичні гілки коливань структури живої матерії ( $L$  – поздовжня хвиля;  $S_1, S_2$  – два типи поперечних хвиль), пунктирна крива – оптична гілка коливань структури.

За взаємодії електромагнітних хвиль з квазіструктурами живої матерії (кластерами молекул тощо) виникають так звані крос-резонанси (рис. 2).

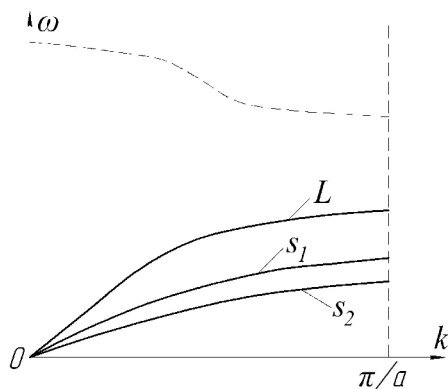


Рис. 1. Залежність частоти  $\omega$  від хвильового числа  $k$  для тривимірної квазіструктури живої матерії:  $a$  – просторовий період квазіструктури

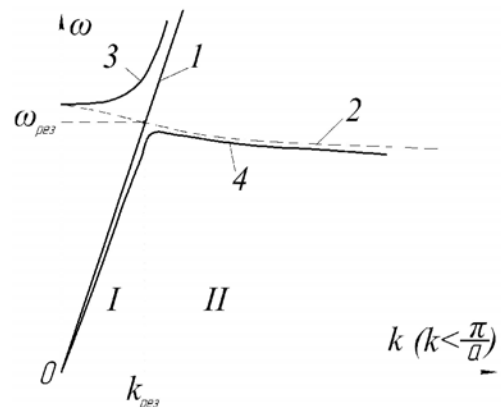


Рис. 2. Крос-резонанси взаємодії електромагнітних хвиль (1) з оптичною гілкою (2) акустичних коливань

У результаті такої взаємодії виникають дві нові форми коливань (3 та 4, рис. 2). При цьому крива 4 має характерний максимум біля точки  $(\omega_{рез}; k_{рез})$  дисперсійної кривої, де групова швидкість хвиль  $\frac{d\omega}{dk} \approx 0$ .

Крива 4 відповідає своєрідному коливанню квазіструктур живої матерії, які беруть участь у взаємодії з електромагнітною хвилею (пряма 1 на рис. 2): в області I –  $0 < k < k_{рез}$ . Вона фактично збігається з електромагнітним (поперечним) коливанням, а за  $k > k_{рез}$  – стає поздовжнім акустичним коливанням (його оптичною гілкою, що лежить у гіперзвуковому діапазоні частот акустичних коливань квазіструктури).

Якщо у I області групова швидкість хвиль, які відповідають гілці 4  $V_g = \frac{d\omega}{dk} > 0$ , то у II області  $V_g < 0$ , крім того, змінюється поляризація такої хвилі з поперечної на поздовжню (тобто у точці  $(\omega_{рез}; k_{рез})$  для хвиль електромагнітно-акустичної (акустоелектромагнітної) природи виникає біфуркація).

У цьому випадку відбувається швидка зміна поляризації хвилі з поперечної на поздовжню, а також змінює знак  $V_g$  хвиль. (Слід зазначити, що  $V_g$  хвиль відповідальна за перенесення енергії будь-якої природи).

Біфуркаційні явища/феномени, які відбуваються на четвертій гілці дисперсійної кривої взаємодіючих електромагнітної та акустичної (оптична гілка) хвиль, призводять до інтенсивного поглинання квазіструктурами живої матерії (кластерами молекул, МН тощо) енергії випромінювання (світла), яке ззовні надходить на вказані структури. Цей процес стає основним, який у подальшому збуджує акустичні (гіперзвукового діапазону) коливання у квазіструктурах й

інтенсифікує у останніх різноманітні, властиві їм рухи. Отже, використовуючи такі резонанси, можна ефективно управляти рухами МН та НР.

Зазначимо, що кластери молекул  $H_2O$  мають шість оптичних гілок акустичних коливань (і три акустичні гілки). У точці крос-резонансу ( $\omega = \omega_{рез}; k = k_{рез}$ )  $V_g \rightarrow 0$  й акустичні коливання інтенсивно відбирають енергію у електромагнітних хвиль, з якими взаємодіють. При цьому в околі вказаної точки дисперсійної кривої (рис. 2) сила взаємодії таких хвиль і коливань  $\sim \left(\frac{C_{ем}}{C_{зв}}\right)^{-2}$ , де  $C_{ем} \ll C_{зв}$  ( $C_{зв}$  – швидкість звуку,  $C_{ем} = V_0 \approx 0$  – швидкість електромагнітних хвиль у точці крос-резонансу).

### 3. Аналіз коливань молекул, які входять до складу МН та НР.

Якщо ми маємо справу з системою (кластером) частинок, які взаємодіють одна з одною, але не знаходяться у зовнішньому полі, тоді не усі її ступені вільності мають коливний характер. Типовим прикладом таких систем є молекули [13]. Крім рухів, які являють собою коливання атомів навколо їх положення рівноваги всередині молекули, молекула як ціле може здійснювати поступальний та обертальний рухи.

Поступальному переміщенню відповідають три ступені вільності руху. Стільки ж існує у загальному випадку обертальних ступенів вільності, тому з  $3 \cdot n$ -ступенів вільності  $n$ -атомної молекули усього  $(3 \cdot n - 6)$  – відповідають коливному руху. Виняток становлять молекули, у яких усі атоми розміщені вздовж однієї прямої. Оскільки говорити про обертання навколо цієї прямої немає сенсу, то обертальних ступенів вільності у цьому випадку усього дві, тому коливних буде  $(3 \cdot n - 5)$ .

Розв'язуючи механічну задачу про коливання молекули, доцільно з самого початку вилучити з розгляду поступальні та обертальні ступені вільності руху.

Щоб вилучити поступальний рух, слід вважати рівним нулю повний імпульс молекули. Оскільки ця умова означає нерухомість центра інерції молекули, то її можна виразити у вигляді постійності трьох координат вказаного вище центра. Поклавши  $\mathbf{r}_a = \mathbf{r}_{a_0} + \mathbf{u}_a$  (де  $\mathbf{r}_{a_0}$  – радіус-вектор нерухомого положення рівноваги  $a$ -го атома, а  $\mathbf{u}_a$  – його відхилення від цього положення), подамо умову

$$\sum m_a \cdot \dot{\mathbf{r}}_a = const \equiv \sum m_a \cdot \dot{\mathbf{r}}_a \quad (3)$$

у вигляді

$$\sum m_a \cdot \dot{\mathbf{u}}_a = 0. \quad (4)$$

Щоб вилучити обертання молекули, слід покласти рівним нулю її повний момент імпульсу. Оскільки момент не є повною похідною по часу від якоїсь функції координат, то умова його зникнення не може бути виражена у вигляді рівності нулю такої функції. Однак випадок малих коливань як раз становить виняток. Справді, знову поклавши  $\mathbf{r}_a = \mathbf{r}_{a_0} + \mathbf{u}_a$  й нехтуючи малими величинами другого порядку по переміщеннях  $\mathbf{u}_a$ , подамо момент імпульсу молекули у вигляді:

$$\mathbf{M} = \sum m_a \cdot [\mathbf{r}_a \times \dot{\mathbf{r}}_a] \equiv \sum m_a \cdot [\mathbf{r}_{a_0} \times \dot{\mathbf{u}}_a] = \frac{d}{dt} \sum m_a \cdot [\mathbf{r}_{a_0} \times \mathbf{u}_{a_0}]. \quad (5)$$

Умову його зникнення у цьому наближенні можна відповідно подати у вигляді:

$$\sum m_a \cdot [\mathbf{r}_{a_0} \times \dot{\mathbf{u}}_a] = 0, \quad (6)$$

початок координат може бути при цьому обраний в довільний спосіб.



Нормальні коливання молекули можуть бути класифіковані за характером руху атомів у них на основі міркувань, пов'язаних з симетрією розміщення атомів (у положеннях рівноваги) у молекулі. Для цієї мети існує загальний метод, що ґрунтується на використанні теорії груп. Нижче розглянуто деякі елементарні приклади.

Якщо усі  $n$  атомів молекули лежать в одній площині, тоді можна розрізнити нормальні коливання, які залишають атоми у цій площині, і нормальні коливання, за яких атоми виводяться з площини. Легко визначити кількість тих й інших. Оскільки усього для плоского руху існує  $2 \cdot n$  ступенів вільності руху, з яких два поступальні і один обертальний, тоді кількість нормальних коливань, які не виводять атоми з площини, дорівнює  $(2 \cdot n - 3)$ . Інші ж  $(3 \cdot n - 6) - (2 \cdot n - 3) = n - 3$  коливні ступені вільності руху відповідають коливанням, які виводять атоми з площини.

У разі лінійної молекули можна розрізнити поздовжні коливання, які зберігають її прямолінійну форму, і коливання, які виводять атоми з прямої. Оскільки усього руху  $n$  часточок вздовж прямої відповідає  $n$  ступеням вільності, з яких один поступальний, тоді кількість коливань, які не виводять атоми з прямої, дорівнює  $(n - 1)$ .

Оскільки ж повна кількість коливних ступенів вільності руху лінійної молекули є  $(3 \cdot n - 5)$ , то існує  $(2 \cdot n - 4)$  коливань, які виводять атоми з прямої. Цим коливанням, однак, відповідають усього  $(n - 2)$  різних частот, оскільки кожне з таких коливань може здійснюватись двома незалежними способами – у двох взаємно перпендикулярних площинах, які проходять через вісь молекули; з міркувань симетрії зрозуміло, що кожна така пара нормальних коливань має однакові частоти.

Розглянемо далі конкретні приклади розрахунку частот коливань триатомних молекул.

**Приклад 1.** Визначимо частоти коливань лінійної триатомної симетричної молекули  $ABA$  (рис. 3). Вважаємо, що потенціальна енергія молекули залежить тільки від відстаней  $A - B$  та  $B - A$  й кута  $ABA$ .

Поздовжні переміщення атомів  $x_1, x_2, x_3$  зв'язані у (4) завдяки співвідношенням:

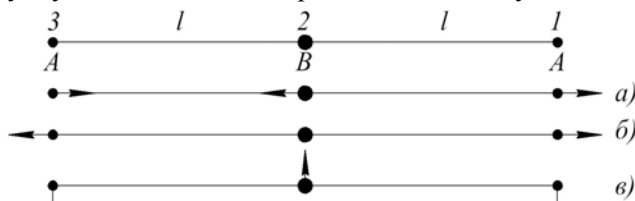


Рис. 3. Коливання лінійних триатомних симетричних молекул (типи можливих коливних рухів)

$$m_A \cdot (x_1 + x_3) + m_B \cdot x_2 = 0. \quad (7)$$

За допомогою (7) виключаємо  $x_2$  з функції Лагранжа ( $L$ ) поздовжнього руху молекули:

$$L = \frac{m_A}{2} \cdot (\dot{x}_1^2 + \dot{x}_3^2) + \frac{m_B}{2} \cdot \dot{x}_2^2 - \frac{k_1}{2} \cdot [(x_1 - x_2)^2 + (x_3 - x_2)^2], \quad (8)$$

після чого введемо нові координати:

$$Q_a = x_1 + x_3, \quad Q_s = x_1 - x_3. \quad (9)$$

У результаті отримаємо:

$$L = \frac{m_A \cdot m}{4 \cdot m_B} \cdot \dot{Q}_a^2 + \frac{m_A}{4} \cdot \dot{Q}_s^2 - \frac{k_1 \cdot m^2}{4 \cdot m_B^2} \cdot \dot{Q}_a^2 - \frac{k_1}{4} \cdot \dot{Q}_s^2, \quad (10)$$

де  $m = 2 \cdot m_A + m_B$  – маса молекули;  $k_1$  – коефіцієнт жорсткості “зв’язків” молекули (ця жорсткість проявляє себе при взаємодіях атомів  $A$  з атомом  $B$ ). Звідси бачимо, що  $Q_a$  й  $Q_s$  є (з точністю до нормування) нормальними координатами. Координата  $Q_a$  відповідає антисиметричному стосовно середини молекули коливанню ( $x_1 = x_3$ ; рис. 3, а) з частотою:

$$w_a = \sqrt{\frac{k_1 \cdot m}{m_A \cdot m_B}}. \quad (11)$$

Координата  $Q_s$  відповідає симетричному ( $x_1 = -x_3$ ; рис. 3, б) коливанню з частотою:

$$w_{s1} = \sqrt{\frac{k_1}{m_A}}. \quad (12)$$

При цьому  $w_{s1} > w_a$ .

Поперечні зміщення атомів  $y_1, y_2, y_3$  у (4), (6) зв'язані співвідношеннями:

$$m_A \cdot (y_1 + y_3) + m_B \cdot y_2 = 0, \quad y_1 = y_3 \quad (13)$$

(симетричне коливання згину; рис. 3, в). Потенціальну енергію згину молекули запишемо у вигляді  $k_2 \cdot l^2 \cdot d^2 / 2$ , де  $d$  – відхилення кута  $ABA$  від значення  $p$ ; воно виражається через зміщення згідно з:

$$d = \frac{1}{l} [(y_1 - y_2) + (y_3 - y_2)]. \quad (14)$$

Виражаючи усі переміщення  $y_1, y_2, y_3$  через  $d$ , отримаємо функцію Лагранжа поперечного коливання у вигляді:

$$L = \frac{m_A}{2} \cdot (\dot{x}_1^2 + \dot{x}_3^2) + \frac{m_B}{2} \cdot \dot{x}_2^2 - \frac{k_2 \cdot l^2}{2} \cdot d^2 = \frac{m_A \cdot m_B}{4 \cdot m} \cdot l^2 \cdot \dot{d}^2 - \frac{k_2 \cdot l^2}{2} \cdot d^2, \quad (15)$$

де  $k_2$  – жорсткість, яка виникає всередині молекули, за коливань її атомів вказаного типу, звідки частота:

$$w_{s2} = \sqrt{\frac{2 \cdot k_2 \cdot m}{m_A \cdot m_B}}. \quad (16)$$

**Приклад 2.** Визначимо частоти коливань молекули  $ABA$  трикутної форми (рис. 4).

Враховуючи (4), (6), складові переміщень  $\vec{u}$  атомів вздовж напрямків  $X$  та  $Y$  (рис. 4) можна пов'язати співвідношеннями:

$$\begin{cases} m_A \cdot (x_1 + x_3) + m_B \cdot x_2 = 0, \\ m_A \cdot (y_1 + y_3) + m_B \cdot y_2 = 0, \\ \sin a \cdot (y_1 - y_3) - \cos a \cdot (x_1 + x_3) = 0. \end{cases} \quad (17)$$

Зміни  $d \cdot l_1$  та  $d \cdot l_2$  відстаней  $A-B$  та  $B-A$  можна знайти шляхом проектування векторів  $\vec{u}_1 - \vec{u}_2$  та  $\vec{u}_3 - \vec{u}_2$  на напрямки ліній  $AB$  та  $BA$ :

$$\begin{cases} d \cdot l_1 = (x_1 - x_2) \cdot \sin a + (y_1 - y_2) \cdot \cos a, \\ d \cdot l_2 = -(x_3 - x_2) \cdot \sin a + (y_3 - y_2) \cdot \cos a. \end{cases} \quad (18)$$

Зміна кута  $ABA$  може бути визначена шляхом проектування тих самих векторів на напрямок, перпендикулярний до відрізків  $AB$  та  $BA$ :

$$d = \frac{1}{l} [(x_1 - x_2) \cdot \cos a - (y_1 - y_2) \cdot \sin a] + \frac{1}{l} [-(x_3 - x_2) \cdot \cos a - (y_3 - y_2) \cdot \sin a]. \quad (19)$$

Функція Лагранжа молекули:

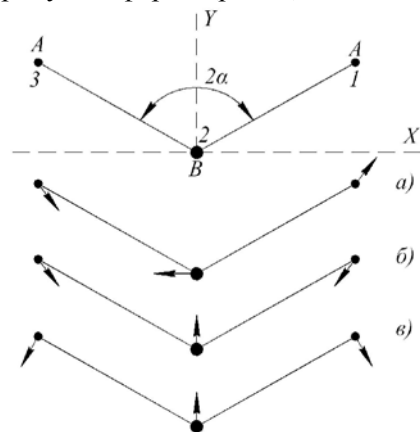


Рис. 4. Молекула  $ABA$  трикутної форми та її види коливань (а, б, в)

$$L = \frac{m_A}{2} \cdot (\dot{x}_1^2 + \dot{x}_3^2) + \frac{m_B}{2} \cdot \dot{x}_2^2 - \frac{k_1}{2} \cdot (d \cdot l_1^2 + d \cdot l_2^2) - \frac{k_2 \cdot l^2}{2} \cdot d^2. \quad (20)$$

Введемо нові координати:

$$Q_a = x_1 + x_3; \quad q_{s1} = x_1 - x_3; \quad q_{s2} = y_1 + y_3. \quad (21)$$

Компоненти векторів  $\dot{u}$  виражаються через них згідно з:

$$\begin{cases} x_1 = \frac{1}{2}(Q_a + q_{s1}); x_3 = \frac{1}{2}(Q_a - q_{s1}); x_2 = -\frac{m_A}{m_B} \cdot Q_a \\ y_1 = \frac{1}{2}(q_{s2} + Q_a \cdot \operatorname{ctg} a); y_3 = \frac{1}{2}(q_{s2} - Q_a \cdot \operatorname{ctg} a); y_2 = -\frac{m_A}{m_B} \cdot q_{s2}, \end{cases} \quad (22)$$

а для функції Лагранжа після обчислення отримаємо:

$$\begin{aligned} L = & \frac{m_A}{4} \cdot \left( \frac{2 \cdot m_A}{m_B} + \frac{1}{\sin^2 a} \right) \cdot \dot{Q}_a^2 + \frac{m_A}{4} \cdot \dot{q}_{s1}^2 + \frac{m_A \cdot m}{4 \cdot m_B} \cdot \dot{q}_{s2}^2 - \\ & - Q_a^2 \cdot \frac{k_1}{4} \cdot \left( \frac{2 \cdot m_A}{m_B} + \frac{1}{\sin^2 a} \right) \cdot \left( 1 + \frac{2 \cdot m_A}{m_B} \cdot \sin^2 a \right) - \\ & - \frac{q_{s1}^2}{4} \cdot (k_1 \cdot \sin^2 a + 2 \cdot k_2 \cdot \cos^2 a) - q_{s2}^2 \cdot \frac{m^2}{4 \cdot m_B^2} \cdot (k_1 \cdot \cos^2 a + 2 \cdot k_2 \cdot \sin^2 a) + \\ & + q_{s1} \cdot q_{s2} \cdot \frac{m}{2 \cdot m_B} \cdot (2 \cdot k_2 - k_1) \cdot \sin a \cdot \cos a. \end{aligned} \quad (23)$$

Звідси бачимо, що координата  $Q_a$  відповідає нормальному коливанню з частотою:

$$w_a^2 = \frac{k_1}{m_A} \cdot \left( 1 + \frac{2 \cdot m_A}{m_B} \cdot \sin^2 a \right), \quad (24)$$

антисиметричною стосовно осі  $Y$  ( $x_1 = x_3$ ,  $y_1 = -y_3$ ; рис. 4, а).

Координати  $q_{s1}$ ,  $q_{s2}$  відповідають двом коливанням (симетричним стосовно осі  $Y$ :  $x_1 = -x_3$ ,  $y_1 = y_3$ ; рис. 4, б і в), частоти яких  $w_{s1}$ ,  $w_{s2}$  визначаються як корені квадратні (по  $w^2$ ) характеристичного рівняння:

$$w^4 - w^2 \cdot \left[ \frac{k_1}{m_A} \cdot \left( 1 + \frac{2 \cdot m_A}{m_B} \cdot \cos^2 a \right) + \frac{2 \cdot k_2}{m_A} \cdot \left( 1 + \frac{2 \cdot m_A}{m_B} \cdot \sin^2 a \right) \right] + \frac{2 \cdot m \cdot k_1 \cdot k_2}{m_B \cdot m_A^2} = 0. \quad (25)$$

За  $2 \cdot a = \pi$  усі ці частоти збігаються з отриманими у прикладі 1.

**Приклад 3.** Знайдемо частоти коливань лінійної несиметричної молекули  $ABC$  (рис. 5).

Поздовжні ( $x$ ) та поперечні ( $y$ ) переміщення атомів пов'язані співвідношенням:



Рис. 5. Лінійна несиметрична молекула  $ABC$

$$\begin{cases} m_A \cdot x_1 + m_B \cdot x_2 + m_C \cdot x_3 = 0; \\ m_A \cdot y_1 + m_B \cdot y_2 + m_C \cdot y_3 = 0; \\ m_A \cdot l_1 \cdot y_1 = m_C \cdot l_2 \cdot y_3. \end{cases} \quad (26)$$

Потенціальну енергію розтягу та згину запишемо у вигляді

$$\frac{k_1}{2} \cdot (d \cdot l_1)^2 + \frac{k_1'}{2} \cdot (d \cdot l_2)^2 + \frac{k_2 \cdot l^2}{2} \cdot d^2, \quad (27)$$

де  $2 \cdot l = (l_1 + l_2)$ , а  $k'_1, k_2$  – жорсткості, які виникають при коливаннях молекули відповідного типу.

Обчислення аналогічні тим, що наведені у прикладі 1, приводять до значень:

$$w_t^2 = \frac{k_2 \cdot l^2}{l_1^2 \cdot l_2^2} \cdot \left( \frac{l_1^2}{m_C} + \frac{l_2^2}{m_A} + \frac{4 \cdot l^2}{m_B} \right). \quad (28)$$

для частоти поперечного коливання й до квадратичного (по  $w^2$ ) рівняння:

$$w^4 - w^2 \cdot \left[ k_1 \cdot \left( \frac{1}{m_A} + \frac{1}{m_B} \right) + k'_1 \cdot \left( \frac{1}{m_B} + \frac{1}{m_C} \right) \right] + \frac{m \cdot k_1 \cdot k'_1}{m_A \cdot m_B \cdot m_C} = 0 \quad (29)$$

для частот  $w_{11}, w_{12}$  двох поздовжніх коливань.

Відповідно у НР (наноманіпулятори, які складаються з двох ланцюгів, з'єднаних між собою масами на кінцях ланок і підтримуючих поздовжні/поперечні (кутові-згинні) коливання, подібні до наведених у прикладах 1–3 коливань (частот)).

#### 4. Граничний цикл та самоузгоджений потенціал, придатні для квантово-механічного опису руху МН та НР

Слід зупинитись на механізмі формування самоузгодженого (електромагнітного/ акустичного) потенціалу МН чи НР. За межею нерівноважного фазового переходу з найрізноманітніших форм, що виникають, та таких, що розпадаються, паттернах когерентних хвиль системи (МН/НР) нас цікавитимуть лише незатухаючі, періодичні у часі хвильові структури, так звані граничні цикли Пуанкаре.

Необхідно показати, що існування стійких граничних циклів забезпечує потенціальний профіль простору, у якому виникають умови для квантово-механічного опису макроскопічної системи (МН/НР).

Виникнення синергетики як сучасної науки про самоорганізацію переважно пов'язують з іменем Г. Хакена, у той час, як фізичну базу для неї заклав І. Пригожин, який вказав на принципову роль відкритості системи та нелінійності її динаміки для відходу від рівноважної термодинамічної гілки.

Згідно з роботою Г. Хакена [9] покажемо, як взаємно пов'язані граничний цикл і самоузгоджений потенціал придатні для квантовомеханічного опису живої матерії, зокрема МН та НР.

У найзагальнішому випадку рівняння коливного руху у системі, яка характеризується параметром  $q$ , задається рівнянням

$$m \cdot \ddot{q} + g \cdot \dot{q} + k \cdot q = 0; \quad \dot{q} = \frac{dq}{dt}; \quad \ddot{q} = \frac{d^2q}{dt^2}, \quad (30)$$

де другий і третій члени у лівій частині визначають відповідно гальмівну ( $-g \cdot \dot{q}$ ) й рушійну ( $-k \cdot q$ ) сили осцилятора;  $m$  – маса;  $g$  – коефіцієнт демпфування;  $k$  – жорсткість останнього. (Під осцилятором у подальшому розумітимемо МН/НР).

У “задемпфованому” стані, коли сильною є величина зв'язку з оточенням, що блокує існування реальних коливних процесів, першим членом у рівнянні (30) можна знехтувати, і тоді воно зводиться до вигляду:

$$g \cdot \dot{q} + k \cdot q = 0, \quad (31)$$

або у загальному вигляді за зміни масштабу вздовж часової осі  $t = g \cdot t'$  матимемо:

$$g \cdot \dot{q} = g \cdot \frac{dq}{dt} = \frac{dq}{d\left(\frac{t}{g}\right)} = \frac{dq}{dt'}; \quad q_t = \frac{dq}{dt'}; \quad q_t = F(q). \quad (32)$$

Тут для наочності Г. Хакен вводить потенціал  $V(q)$ , який переважно пов'язаний з силою співвідношенням:

$$F(q) = -\frac{dV}{dq}. \quad (33)$$

Справді, якщо як силу взяти силу гармонічного осцилятора  $F(q) = -k \cdot q$ , тоді з точністю до сталої складової отримаємо:

$$V(q) = \frac{k \cdot q^2}{2}. \quad (34)$$

Графік цієї функції, зображений на рис. 6, дає змогу інтерпретувати потенціальну криву (34) як схил пагорба деякого тіла, що знаходиться на цьому схилі. У точці  $q = 0$  сила, що діє на тіло (МН/НР), зникає і рівняння (32) дає  $\ddot{q} = 0$ , тобто за будь-якого відхилення від точки  $q_0$  тіло повертається у стан стійкої рівноваги  $q_0 = 0$ . Ще наочніше це представляють у двовимірній задачі, коли фігура (рис. 6) повертається на  $360^\circ$  навколо осі  $y$ . При цьому утворюється посудина типу дещо розширеної до верху пляшки/пробірки, й стійке положення рівноваги у центрі дна для крапель, які стікають зі стінок, є зрозумілим і очевидним.

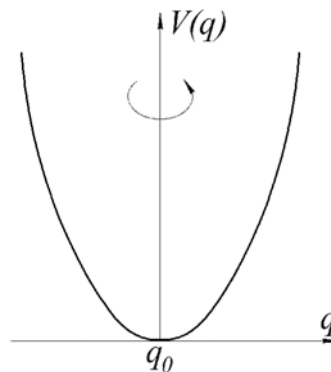


Рис. 6. Наочне подання стійкого розв'язку рівняння  $q_t' = -k \cdot q$

(точка  $q_0 = 0$ ) введенням потенціальної енергії  $V(q) = \frac{k \cdot q^2}{2}$  й інтерпретація розв'язку як руху механічного об'єкта (МН/НР) вздовж схилу пагорба

Поведінка краплі води, яка змочує скло і стікає вздовж стінки пробірки, адекватніше моделює процеси, які описують рівняння (31) та (32), ніж тверда кулька, що скочується з пагорба, оскільки в останньому випадку не можна повністю знехтувати першим членом у рівнянні (30), і рух кульки матиме вигляд затухаючого коливання навколо точки  $q_0$ . При цьому маємо таке рівняння коливань осцилятора:

$$\frac{1}{g^2} \cdot \frac{d^2 q}{dt^2} + \frac{dq}{m \cdot dt} + \Omega^2 \cdot q = 0$$

$$\Omega^2 = \frac{k}{m}; \quad g \cdot t = t. \quad (35)$$

Якщо виконується нерівність

$$\frac{1}{g^2} \cdot \frac{d^2 q}{dt^2} \ll \frac{dq}{m \cdot dt}, \quad (36)$$

тоді (35) переходить у рівняння (32).

Якщо ввести заміну  $t = \Omega^{-1} \cdot t^*$ , тоді (35) можна подати у вигляді:

$$q_{t^*t^*} + \frac{g}{m \cdot \Omega} \cdot q_{t^*} + q = 0, \quad (37)$$

а нерівність (36) перейде у наступну:

$$q_{t^*t^*} \ll \frac{g}{m \cdot \Omega} \cdot q_{t^*}. \quad (38)$$

Процеси самоорганізації зумовлені нелінійністю середовища, що, зрозуміло, повинно знайти своє відображення у нелінійності рівнянь, які описують динаміку поведінки цього середовища. Найпростішою нелінійною добавкою до рушійної сили гармонічного осцилятора, за якої зберігається інваріантність рівняння (32) за  $q \rightarrow -q$  та аксіальна симетрія потенціалу, є кубічний член, тобто

$$F(q) = -k \cdot q - k_1 \cdot q^3; \quad (39)$$

$$V(q) = \frac{k \cdot q^2}{2} + \frac{k_1 \cdot q^4}{4}. \quad (40)$$

Відповідно

$$\Phi = -k \cdot q - k_1 \cdot q^3. \quad (41)$$

Для загальнішого випадку (30) матимемо

$$m \cdot \ddot{\Phi} + g \cdot \dot{\Phi} + k \cdot q + k_1 \cdot q^3 = 0. \quad (42)$$

Якщо врахувати ту обставину, що  $k$  та  $k_1$  можуть мати знаки ( $\pm$ ), можна подати (42) так:

$$m \cdot \ddot{\Phi} + g \cdot \dot{\Phi} + |k| \cdot \text{sign} k \cdot q + |k_1| \cdot \text{sign} k_1 \cdot q^3 = 0. \quad (43)$$

При цьому  $g > 0$ .

Введемо заміну змінної  $t \rightarrow t$ , де  $t = \Omega^{-1} \cdot t^*$ . Тоді

$$m \cdot \Omega^2 \cdot q_{tt} + g \cdot \Omega \cdot q_t + |k| \cdot \text{sign} k \cdot q + |k_1| \cdot \text{sign} k_1 \cdot q^3 = 0; \quad (44)$$

$$\Omega^2 \cdot q_{tt} + \frac{g \cdot \Omega}{m} \cdot q_t + \Omega^2 \cdot \text{sign} k \cdot q + \frac{|k_1|}{m} \cdot \text{sign} k_1 \cdot q^3 = 0; \quad (45)$$

$$q_{tt} + \frac{g}{m \cdot \Omega} \cdot q_t + \text{sign} k \cdot q + \frac{|k_1|}{m \cdot \Omega^2} \cdot \text{sign} k_1 \cdot q^3 = 0. \quad (46)$$

Якщо ввести  $\bar{q} = \frac{q}{A}$ , де  $A$  – амплітуда коливань системи, тоді отримаємо найзагальніший вигляд рівняння у безрозмірних величинах:

$$\bar{q}_{tt} + \frac{g}{m \cdot \Omega} \cdot \bar{q}_t + \text{sign} k \cdot \bar{q} + \frac{|k_1| \cdot \text{sign} k_1 \cdot A^2}{m \cdot \Omega^2} \cdot \bar{q}^3 = 0. \quad (47)$$

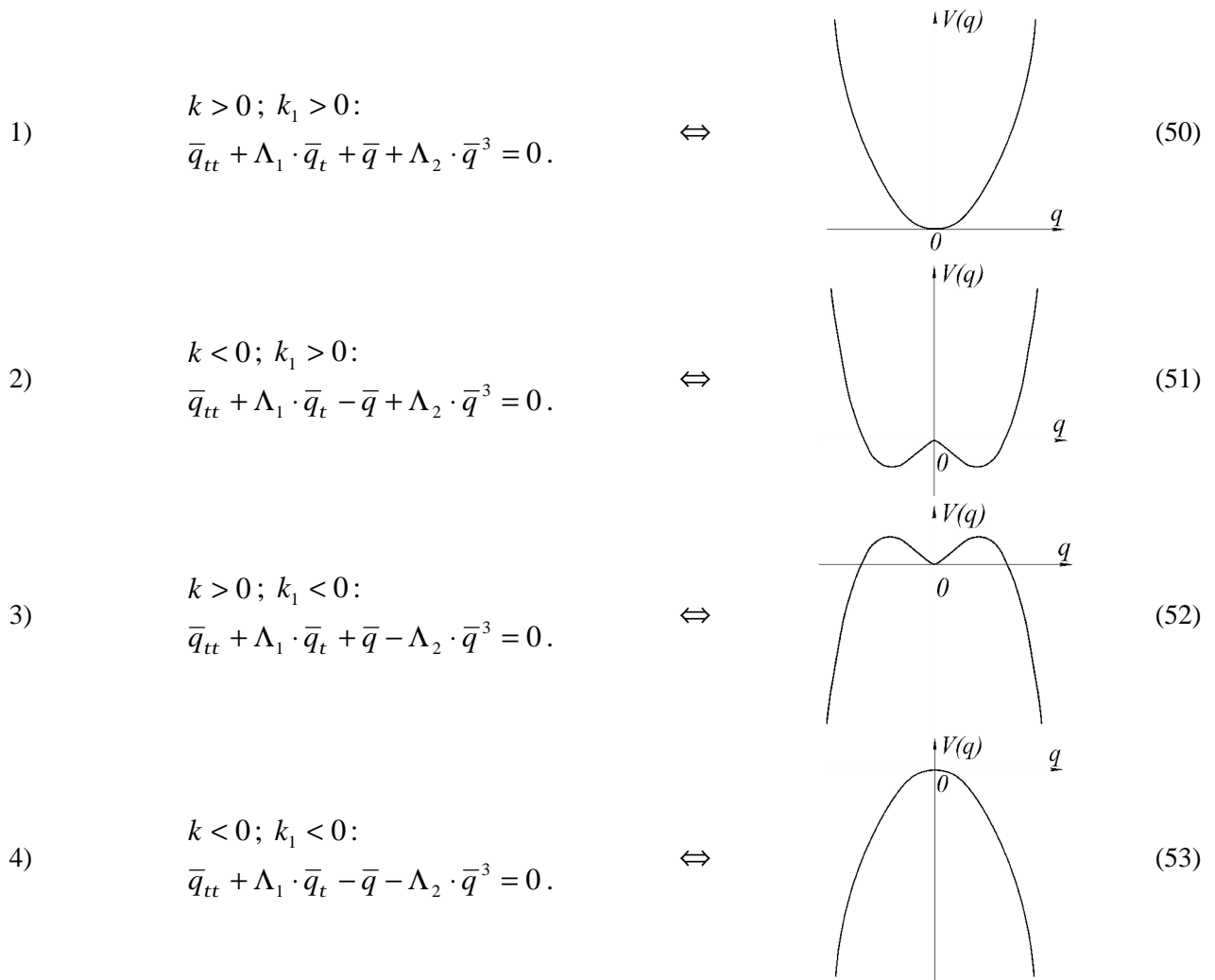
Введемо позначення:

$$\frac{g}{m \cdot \Omega} = \Lambda_1; \quad \frac{|k_1| \cdot A^2}{m \cdot \Omega^2} = \Lambda_2 = \frac{|k_1| \cdot A^2}{|k|}. \quad (48)$$

Тоді (47) можна подати у вигляді:

$$\bar{q}_{tt} + \Lambda_1 \cdot \bar{q}_t + \text{sign} k \cdot \bar{q} + \Lambda_2 \cdot \text{sign} k_1 \cdot \bar{q}^3 = 0. \quad (49)$$

Залежно від комбінації знаків  $k$  та  $k_1$  (за умови, що  $(k; k_1)$  – ненульові параметри) матимемо такі чотири ситуації:



Біля кожного з рівнянь (50)–(53) зображена залежність потенціалу  $V$  від  $q$ . У випадках (50) та (53) існує стійке положення рівноваги у точці  $q = 0$ , а у випадках (51) та (52) це положення рівноваги ( $q = 0$ ) є нестійке. Випадку (51) відповідає потенціал Ландау-Хакена, виникнення якого у самоорганізованій системі супроводжує розв'язок нелінійного диференціального рівняння (51) у вигляді граничного циклу Пуанкаре.

Взаємна відповідність форми потенціалу й характеру поведінки системи (МН/НР) у нелінійному середовищі (граничний цикл), введена Хакеном лише для ілюстрації процесу самоорганізації у звичайних для фізиків/механіків механічних термінів, насправді має глибокий, принципово важливий зміст.

Річ у тому, що у дисипативній системі з активними центрами, які є джерелами електромагнітоакустичних хвиль ідентичного спектрального складу, за порогом нерівноважного фазового переходу, тобто під час виникнення когерентності (а з нею й ефективних далекодіючих сил) у середовищі (МН/НР) може виникнути множина типів хвиль колективної природи. Теорія нелінійних диференціальних рівнянь дає змогу класифікувати виникаючі при цьому структури залежно від параметрів середовища. Більшість розв'язків, які при цьому отримують, характеризують структури, вигляд яких у фазовій площині або змінюється залежно від часу, або нестійкий по відношенню до малих збурень. До них належать розв'язки, які отримали у зв'язку з наявністю у них характерних особливостей поведінки траєкторій навколо особливої точки на фазовій поверхні спеціальні назви: фокус, вузол, центр, сідло тощо.

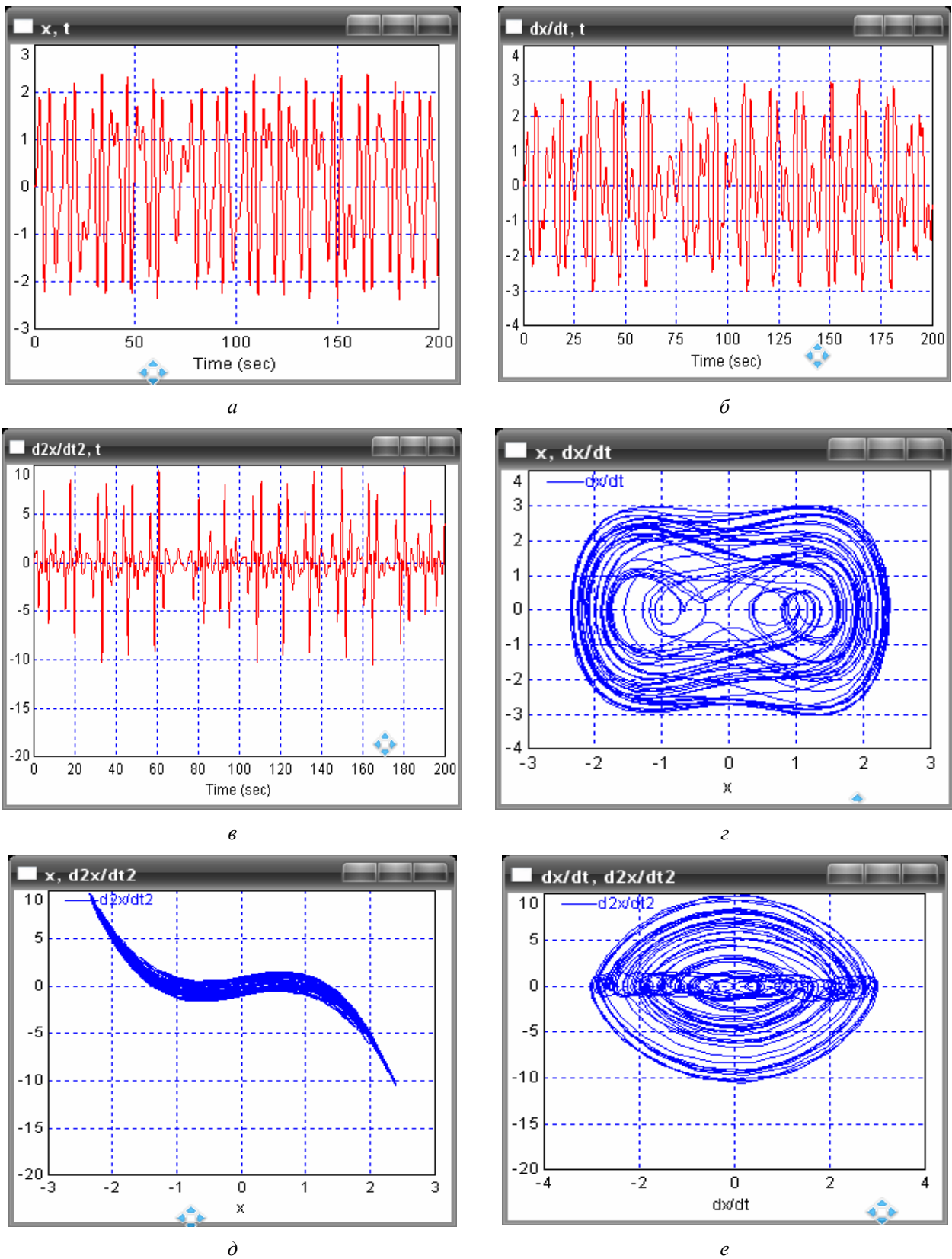
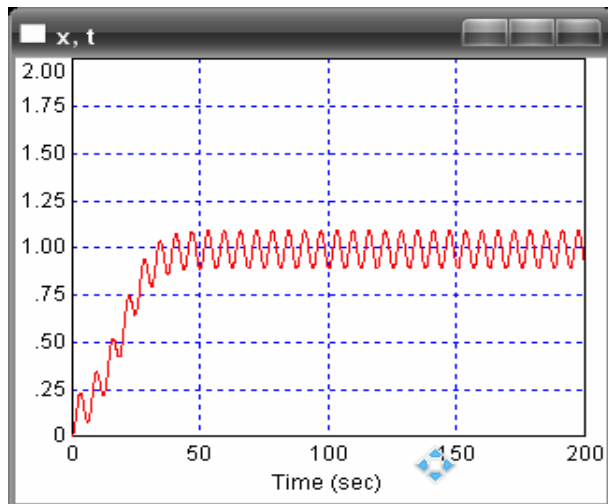
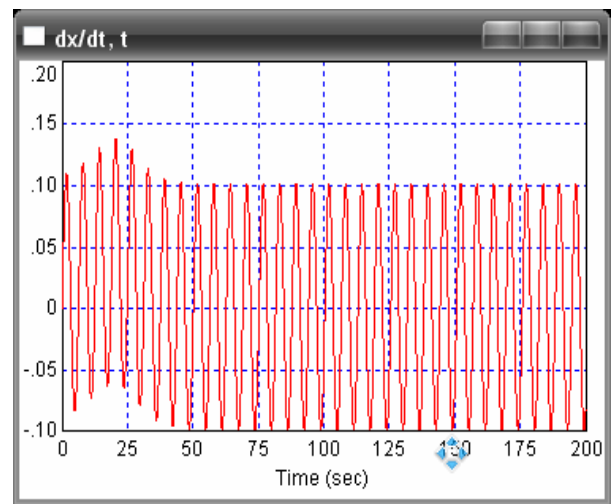


Рис. 7. Графіки залежності  $(x, t)$  – а;  $(\dot{x}, t)$  – б;  $(\ddot{x}, t)$  – в та фазові портрети  $(x, \dot{x})$  – г;  $v - (x, \ddot{x})$  – д;  $(\dot{x}, \ddot{x})$  – е – для параметрів  $F = 1$ ;  $n = 1$ ;  $\Lambda_1 = 0,1$ ;  $\Lambda_2 = 1$

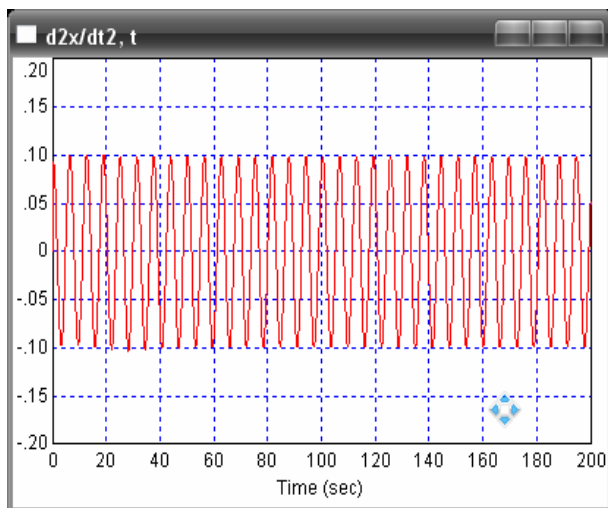




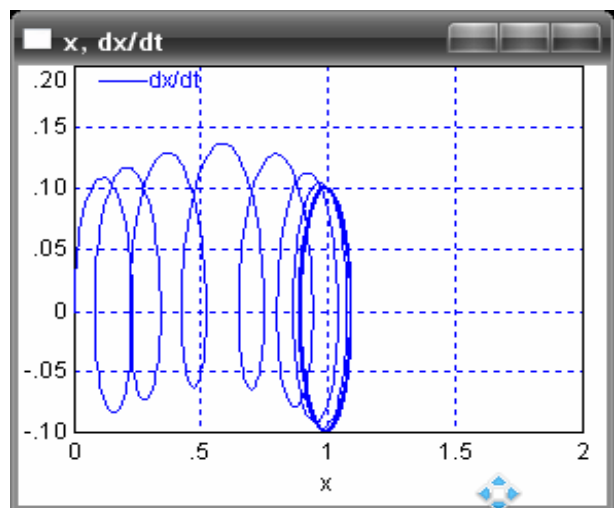
a



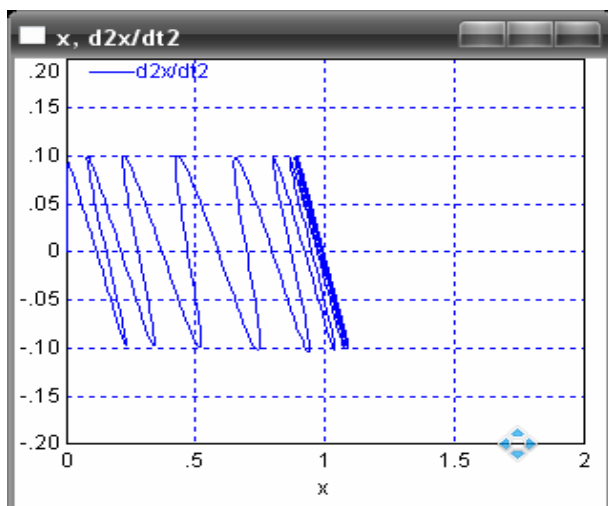
б



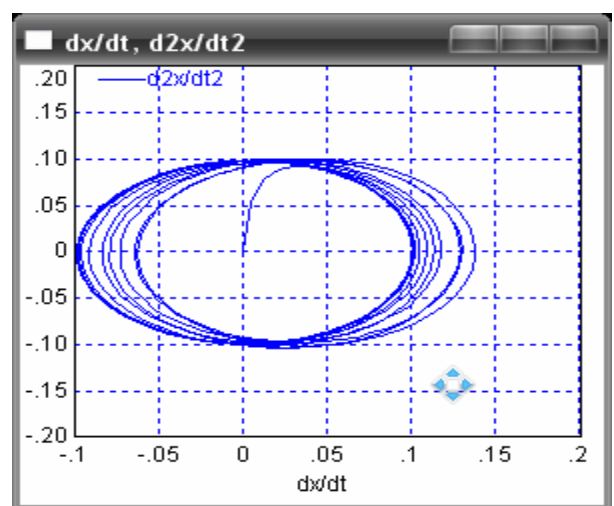
в



з

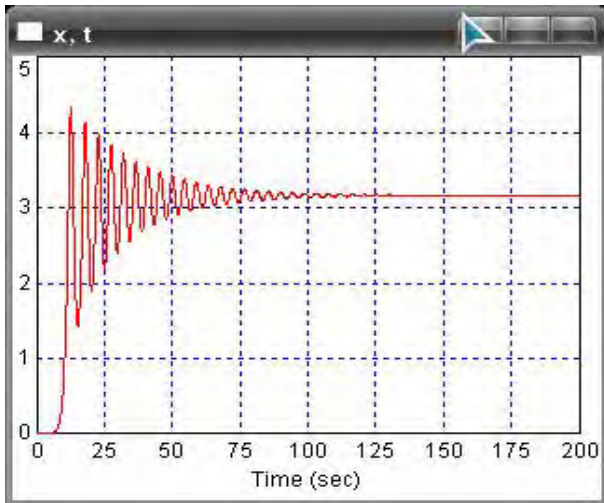


д

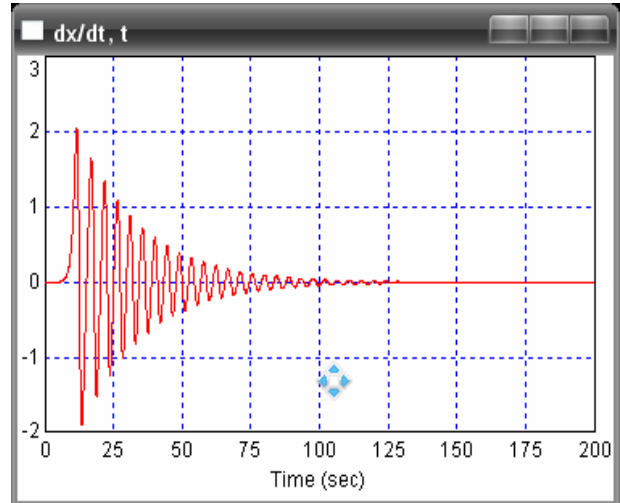


е

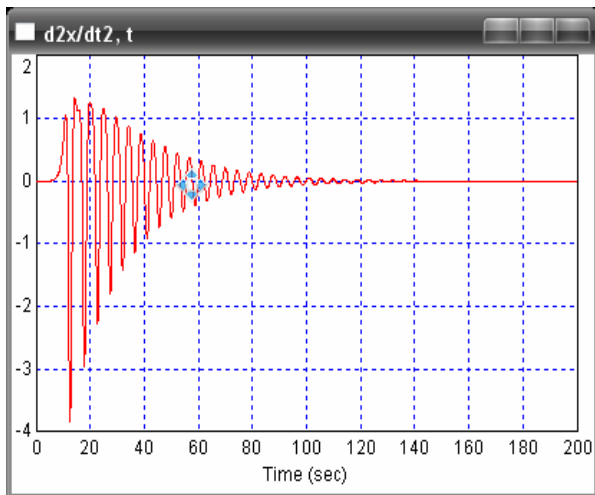
Рис. 8. Графіки залежності  $(x, t)$  – а;  $(\dot{x}, t)$  – б;  $(\ddot{x}, t)$  – в – та фазові портрети  $(x, \dot{x})$  – з;  $(x, \ddot{x})$  – д;  $(\dot{x}, \ddot{x})$  – е – для параметрів  $F = 1$ ;  $n = 1$ ;  $\Lambda_1 = 10$ ;  $\Lambda_2 = 1$



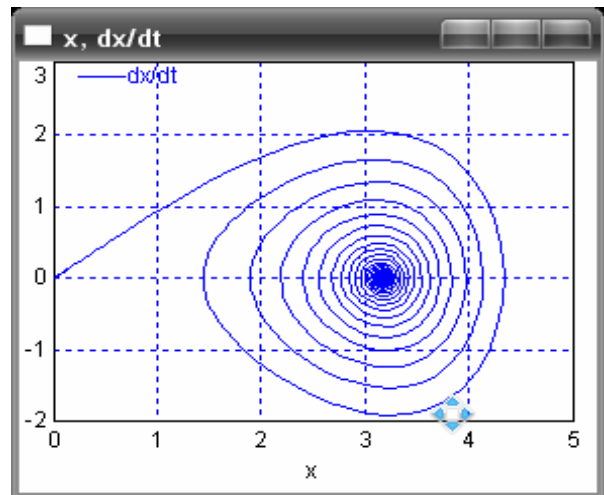
а



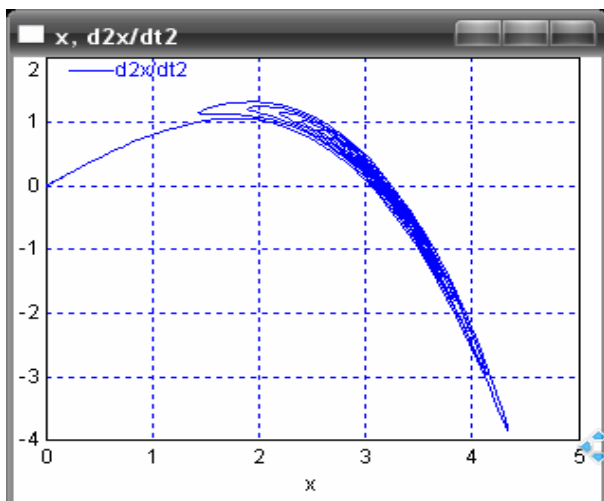
б



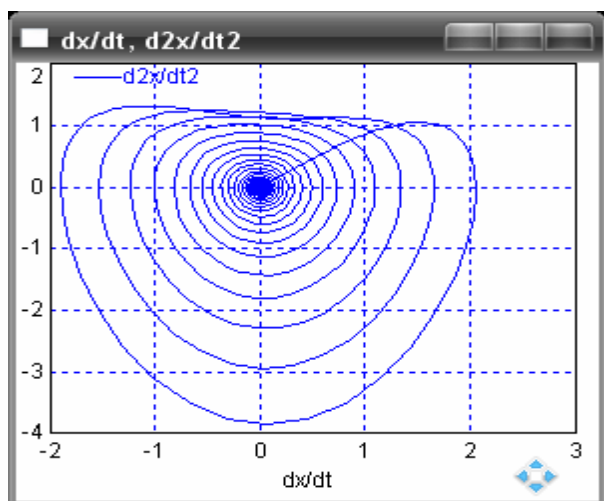
в



г

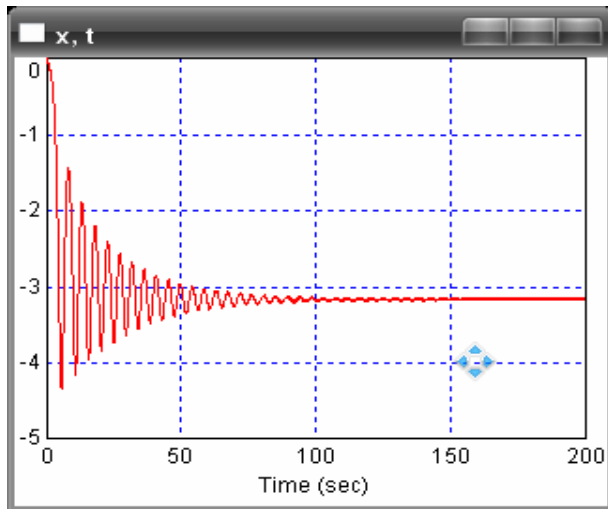


д

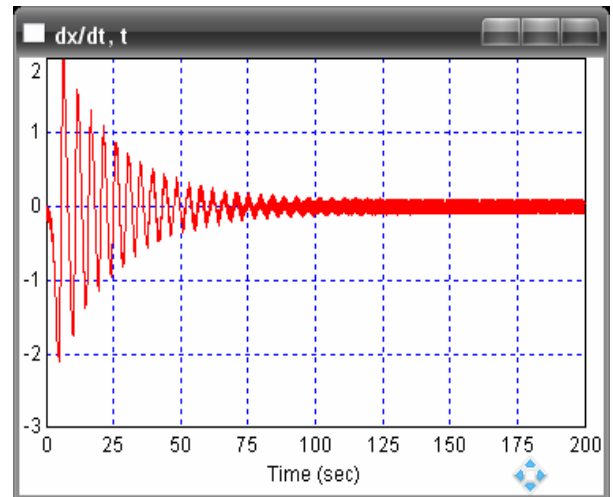


е

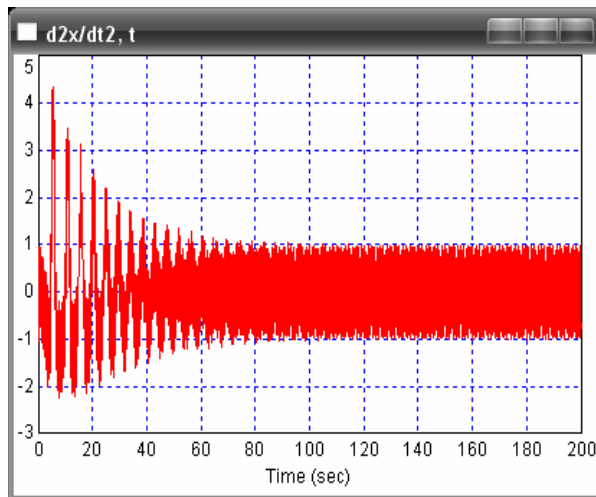
Рис. 9. Графіки залежності  $(x, t)$  – а;  $(\dot{x}, t)$  – б;  $(\ddot{x}, t)$  – в – та фазові портрети  $(x, \dot{x})$  – г;  $(x, \ddot{x})$  – д;  $(\dot{x}, \ddot{x})$  – е – для параметрів  $F = 1$ ;  $n = 0,0001$ ;  $\Lambda_1 = 0,1$ ;  $\Lambda_2 = 0,1$



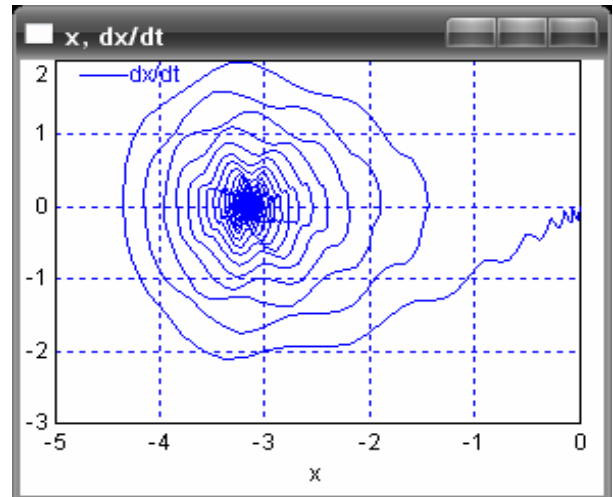
a



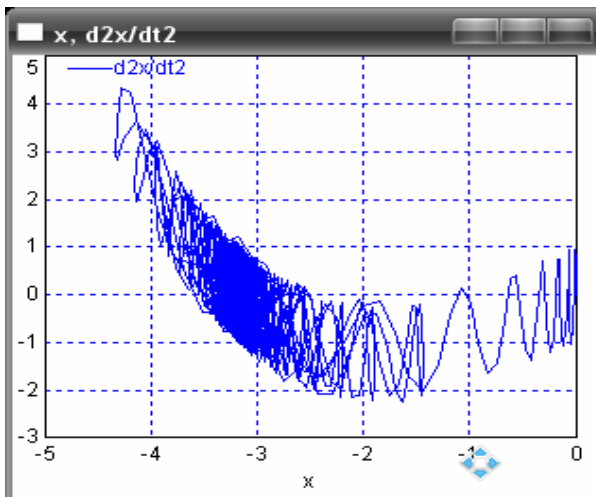
б



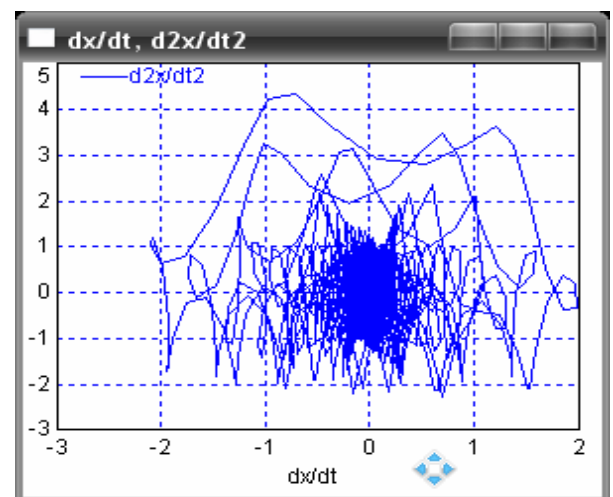
в



г



д



е

Рис. 10. Графіки залежності  $(x, t)$  – а;  $(\dot{x}, t)$  – б;  $(\ddot{x}, t)$  – в – та фазові портрети  $(x, \dot{x})$  – г;  $(x, \ddot{x})$  – д;  $(\dot{x}, \ddot{x})$  – е – для параметрів  $F = 1$ ;  $n = 10000$ ;  $\Lambda_1 = 0,1$ ;  $\Lambda_2 = 0,1$



3. Проведений аналіз спектра (частот) можливих коливань молекул, які входять до складу МН/НР (переважно – це кутові/обертальні рухи складових молекули  $H_2O$ ).

4. З'ясовані умови та причини виникнення граничного циклу Пуанкаре та самоузгодженого потенціалу Ландау-Хакена, які приводять (для МН/НР) до утворення стійких динамічних структур.

5. Отримані у роботі результати можуть бути у подальшому використані для вдосконалення й уточнення існуючих методів аналізу/розрахунку режимів (керованих) руху молекулярних наномашин та нанороботів, які, по суті, є конструкціями живої матерії наномасштабних габаритів і вимагають специфічних (польових) впливів для своїх, керованих ззовні, рухів.

1. Sit'ko S.P. *Towards a Quantum Physics of the Living State.* / S.P. Sit'ko, V.V. Gizhko // *Journal of Biological Physics.* – 1991. – Vol. 18, № 1. – P. 1–10. 2. Хакен Г. *Информация и самоорганизация. Макроскопический подход к сложным системам*/ Г. Хакен. – М.: Мир, 1991. – 200 с. 3. Пригожин И. *От существующего к возникающему* / И. Пригожин. – М.: Наука, 1985. – 327 с. 4. Fröhlich H. *Theoretical Physics and Biology // Biological Coherence and Response to External Stimuli* / Ed. by Fröhlich H. – New York: Springer-Verlag, 1988. – 420 p. 5. Webb S.I. *Inhibition of Bacterial Cell Growth by microwaves.* / S.I. Webb, D.D. Dodds // *Nature.* – 1968. – Vol. 218. – P. 374. 6. Девятков Н.Д. и др. *Влияние электромагнитного излучения миллиметрового диапазона длин волн на биологические объекты.* / Н.Д. Девятков и др. // *Успехи физических наук* – 1973. – Т. 110, № 3. – С. 452–469. 7. Шапиро Д.А. *Бактерии как многоклеточные организмы* / Д.А. Шапиро // *В мире науки.* – 1988. – № 8. – С. 46–54. 8. Sit'ko S.P. *The Whole at a result of self-organization* / S.P. Sit'ko, Ye.A. Andreev, I.S. Dobro-nravova. // *I. Biol. Phys.* – 1988. – Vol. 16. – P. 71. 9. Haken H. *Synergetics, an Introduction* / H. Haken. – Berlin; Heidelberg; New York: Springer-Verlag, 1978. – 200 p. 10. Gizhko V.V. *Coherent microwave electromagnetic fields as a physical model of macroscopic quantum states of the multicellular organism* / V.V. Gizhko, S.P. Sit'ko. // *J. Physics of the Alive.* – 1993. – Vol. 1. – № 1. – P. 103–109. 11. Grundler W. *Intensity-and frequency-dependent effects of microwaves on cell growth rates* / W. Grundler. // *Bioelectrochemistry and Bioenergetics.* – 1992. – Vol. 27. – P. 361–365. 12. Giudice E. *Del. Spontaneous symmetry breaking and electromagnetic interaction in biological systems* / E.Del. Giudice, S. Doglia, M. Milani, Y. Vitiello. // *Physica Scripta.* – 1988. – Vol. 38. – P. 505. 13. Ландау Л.Д. *Механика. Т.1.* / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Наука, 1965. – 204 с. 14. Заславский Г.М. *Введение в нелинейную физику: От маятника до турбулентности и хаоса* / Г.М. Заславский, Р.З. Сагдеев. – М.: Наука, 1988. – 368 с. 15. *Ультразвук. Маленькая энциклопедия* / гл. ред. И.П. Голямина. – М.: Советская энциклопедия, 1979. – 400 с.