

УДК 539.6

**Стовбун С.В., Михайлов А. И., Скоблин А. А.**

*Институт химической физики имени Н.Н. Семенова РАН (г. Москва)*

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОНЯТИЯ НАНОРАЗМЕРНОСТИ ЧЕРЕЗ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР ОБЪЕКТОВ

**S. Stovbun, A. Mikhailov, A. Skoblin**

*N.N. Semenov Institute of Chemical Physics of RAS (Moscow)*

**DEFINITION OF NANOPARTICLES THROUGH THE ENERGY SPECTRUM OF OBJECTS**  
*Аннотация.* Предложено физически корректное определение нанобъекта как объекта, у которого расстояние между соседними энергетическими уровнями, определяющие его физико-химические свойства, имеют порядок фактически существующей на поверхности Земли температуры. Размер такого объекта оказывается равным нескольким нанометрам, что обосновывает интуитивистское метрическое определение нанобъекта, опирающееся на размер атомов и молекул. Рассмотрена связь спектрального определения нанобъектов и антропного принципа.

*Ключевые слова:* нанобъект, наноразмерность, энергетический уровень, предбиологические структуры, потенциальная яма

*Abstract.* The article offers physically correct definition of nanostructure as an object for which the distance between adjacent energy levels that determine its physical and chemical properties has the same order of temperature that exists on the Earth surface. The size of such an object is equal to several nanometers, which justifies the definition of nanostructure, based on the size of atoms and molecules. The relationship between nanoobjects and the anisotropic principle based on spectral determination is considered.

*Key words:* nanoobject, nanosized, energy level, prebiological structure, potential well

Традиционное определение наночастиц, нанотехнологии и комплекса связанных с ними понятий, обозначаемых термином наноразмерность, восходит к размеру атома, составляющему несколько десятых долей нанометра. Соответственно, объекты, состоящие из актуально конечного количества атомов или молекул, имеют размер от одного до нескольких десятков нанометров. Эти соображения приводят к метрическому определению наноразмерности [5]:

$$L \sim 1 - 100 \text{ нм} = 10^{-9} - 10^{-7} \text{ м.} \quad (1)$$

С нанобъектами связываются большие надежды: овладение манипуляциями с ними должно обеспечить принципиально новые возможности для человечества [7].

Рассмотренное выше «метрическое» определение наноразмерности является интуити-

© Стовбун С.В., Михайлов А.И., Скоблин А.А.

Статья выполнена в рамках работы по Государственному контракту № 14.740.11.90629 от 05 октября 2010 г.

вистским, так как не опирается на физические значимые основания, объясняющие уникальность свойств нанообъектов. Поставим задачу сформулировать физически обоснованное определение понятия нанообъекта. Для этого прежде всего заметим, что основной частицей, с поведением которой связаны химические, электрические, механические и другие свойства реальных физических тел, является электрон. Любые изменения, происходящие в физических телах, сопровождаются переходами электронов из одного энергетического состояния в другое и связаны с изменением энергии, обыкновенно соответствующей разности энергий соседних электронных уровней. Поэтому определение физических свойств тела естественно связать с указанными спектральными понятиями, соответствующими реальным физическим изменениям объектов.

Далее отметим, что существует естественная энергетическая единица, опирающаяся на среднюю температуру, имеющуюся на поверхности Земли:

$$T \sim 300 \text{ K}, \quad kT \sim (1/2) 10^{-20} \text{ Дж}, \quad (2)$$

где  $k$  – постоянная Больцмана.

Физические объекты естественно считать:

– существенно квантовыми, если разница  $\Delta E$  между уровнями энергии соседних состояний объекта существенно больше температуры, выраженной в энергетических единицах:

$$\Delta E \gg kT, \quad (3)$$

так что соседние квантовые состояния объекта термически не перемешиваются и хорошо различимы;

– макроскопическими в противоположной ситуации, то есть когда расстояния между энергетическими уровнями малы в сравнении с температурой:

$$\Delta E \ll kT, \quad (4)$$

так что целые группы соседних состояний объекта практически неразличимы, что обеспечивает равновесное поведение макроскопического тела в виде термически активированного блуждания отвечающей ему фазовой точки по энергетической поверхности в фазовом пространстве и позволяет построить термодинамику макроскопических объектов [2];

– промежуточными, когда две рассматриваемые величины оказываются одного порядка:

$$\Delta E \sim kT. \quad (5)$$

Свойства таких объектов должны значительно отличаться как от свойств существенно квантовых объектов (атомов и молекул), так и от свойств макроскопических тел.

Энергетические уровни реальных физических объектов определяются, как правило, энергиями электронных состояний при заданном положении атомных ядер [3]. Поэтому для оценки энергии объектов воспользуемся простой одноэлектронной моделью. Именно, рассмотрим электрон в бесконечно глубокой сферической потенциальной яме диаметра  $D$ . Такая яма моделирует систему из достаточно большого количества атомов, внутри которой электрон связан усредненным потенциалом притяжения к атомам. Рассматривая сферически симметричные решения, получим спектр разрешенных энергий [3]:

$$E_n = (2 \pi^2 \hbar^2 / m \cdot D^2) n^2 \quad (n = 1, 2, 3 \dots), \quad (6)$$

где  $\hbar$  – постоянная Планка,  $m$  – масса электрона. Характерное расстояние между уровнями составит:

$$\Delta E \sim 2 \pi^2 \hbar^2 / m \cdot D^2. \quad (7)$$

Подставляя (7) в (5), получим значение характерного размера потенциальной ямы, отвечающей объекту, промежуточному между макроскопическим и существенно квантовым:

$$D \sim (2 p^2 h^2 / m \cdot k \cdot T)^{1/2} \sim 7 \cdot 10^{-9} \text{ м} = 7 \text{ нм.} \quad (8)$$

Теперь рассмотрим случай, когда яма диаметра  $D$  имеет характерную глубину  $U$ , и потенциал не постоянен внутри ямы. Прежде всего отметим, что если яма является достаточно мелкой, а именно, если характерное значение потенциала  $U$  удовлетворяет неравенству:

$$U \ll h^2 / m \cdot D^2, \quad (9)$$

то, в соответствии с классическим результатом Пайерлса, такая яма вообще не имеет связанных состояний [3].

Пусть теперь яма является умеренно глубокой, а именно, выполняется соотношение:

$$U \sim h^2 / m \cdot D^2. \quad (10)$$

Электрон в такой яме имеет импульс, все три компоненты которого, в соответствии с соотношением неопределенности, имеют следующий порядок:

$$P_x \sim P_y \sim P_z \sim h / m \cdot D. \quad (11)$$

Соответственно, кинетическая энергия электрона  $T^*$  имеет порядок:

$$T^* \sim (P_x^2 + P_y^2 + P_z^2) / 2m \sim 3 h^2 / 2m \cdot D^2. \quad (12)$$

Будем полагать, что движение электрона в яме является квазиклассическим и периодическим во времени (что соответствует связанному состоянию). Тогда средняя за период потенциальная  $\langle U^* \rangle$  и кинетическая  $\langle T^* \rangle$  энергии электрона совпадают [4]:

$$\langle U^* \rangle \sim \langle T^* \rangle \sim 3 h^2 / 2m \cdot D^2, \quad (13)$$

а потому средняя за период полная энергия  $\langle E^* \rangle$  электрона составляет:

$$\langle E^* \rangle \sim 3 h^2 / m \cdot D^2. \quad (14)$$

Расстояния между соседними энергетическими уровнями должны иметь тот же порядок величины, что и значения энергии:

$$\Delta E \sim 3 h^2 / m \cdot D^2. \quad (15)$$

Для того, чтобы объект был промежуточным между существенно квантовыми и классическими объектами, необходимо выполнение соотношения (5). С его учетом получаем из (15) оценку на размер объекта:

$$D \sim (3 h^2 / m \cdot k \cdot T)^{1/2} \sim 2 \cdot 10^{-9} \text{ м} = 2 \text{ нм.} \quad (16)$$

Таким образом, во всех рассмотренных случаях оказывается, что объект, промежуточный между существенно квантовым и макроскопическим в смысле его энергетического спектра, оказывается нанообъектом в метрическом смысле. Полученный результат позволяет придать понятиям «нано-размерность» и «нанообъект» конкретный физический смысл: *нанообъект* — это объект, у которого расстояния между соседними энергетическими уровнями сопоставимы с фактически имеющейся на поверхности Земли температурой. Полученный результат можно сформулировать иначе: для объектов размером в несколько диаметров молекул расстояние между энергетическими уровнями имеет порядок характерной температуры на Земле. Дадим интерпретацию этому факту.

Отметим, что существование нанообъектов – необходимая предпосылка возникновения предбиологических структур. Если температура в какой-либо области много больше разницы между уровнями энергии наносистем, то в этой области наносистемы быстро термически разрушаются. Если где-либо температура много меньше разницы между уровнями энергии наносистем, то

наносистемы там «замерзают», то есть стабилизируются в конкретном состоянии наподобие кристалла. В обоих случаях оказывается невозможным устойчивое движение достаточно стабильных наносистем, то есть существование предбиологических структур с развитой молекулярной динамикой, а с ними и жизнь. Это позволяет сформулировать вывод в духе антропного принципа [1]: *совпадение расстояний между соседними энергетическими уровнями объектов размером в несколько молекулярных диаметров и характерной температуры на поверхности Земли связано с тем, что только при наличии такого совпадения на Земле может су-*

*ществовать жизнь.*

#### ЛИТЕРАТУРА:

1. Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: Наука, 1966. 544 с.
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Статистическая физика. Т. V. Ч. 1. Изд. 3. М.: Наука, 1976. 584 с.
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Квантовая механика. Т. III, нерелятивистская теория. Изд. 3. М.: Наука, 1974. 752 с.
4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Механика. Т. I. Изд. 3. М.: Наука, 1973. 208 с.
5. Baraton M.I. Synthesis, Functionalization and Surface Treatment of Nanoparticles. L.A.: Am. Sci., . 2002. 323 p.
6. Barrow J.D., Tipler F.J. The Anthropic Cosmological Principle. Oxford: Oxford University Press, 1986. 706 p.
7. Drexler K.E. Engines of Creation. The Coming Era of Nanotechnology. N.Y.: Anchor Books, 1986. 646 p.