

## МОДЕЛЮВАННЯ МОЛЕКУЛЯРНИХ ДВИГУНІВ РУХОМИМИ КЛІТИННИМИ АВТОМАТАМИ

Жихаревич В.В.

*Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича,  
м. Чернівці*

Останнє десятиліття характеризується інтенсивними дослідженнями в області молекулярних та наноструктур [1]. Зокрема, лауреатами нобелівської премії з хімії за 2016 рік стали дослідники молекулярних двигунів, які не лише моделювали, а й синтезували їх.

В даній роботі пропонується досить проста модель молекулярного двигуна із використанням інструментарію рухомих клітинних автоматів. Обертання здійснюється за рахунок теплової енергії коливань атомів. Таким чином, структуру можна називати вічним двигуном другого роду. Як показано на рисунках *a)*, *б)* і *в)*, які зображені нижче, при умові неоднакової кількості ворсинок зовнішньої структури двигуна та зубців внутрішньої, існує імовірність переходу однієї з ворсинок, що дотична до вершини зубця, від одного сегменту до іншого за годинниковою стрілкою. Імовірність зворотного переходу менша.

Правила взаємодій рухомих клітинних автоматів наступні. Всі автомати як елементарні моделі атомів здійснюють теплові коливання. При цьому, випадковим чином генерується кут та відстань зміщення. Автомати зовнішньої структури, паралельно із тепловими коливаннями, прагнуть вирівнятися вздовж однієї лінії та відштовхнути автомати внутрішньої структури. Автомати зовнішньої структури, що мають три сусіда, прагнуть вирівняти положення одного із сусідів відносно інших двох. Автомати внутрішньої структури, паралельно із тепловими коливаннями, прагнуть відштовхнути автомати зовнішньої структури.

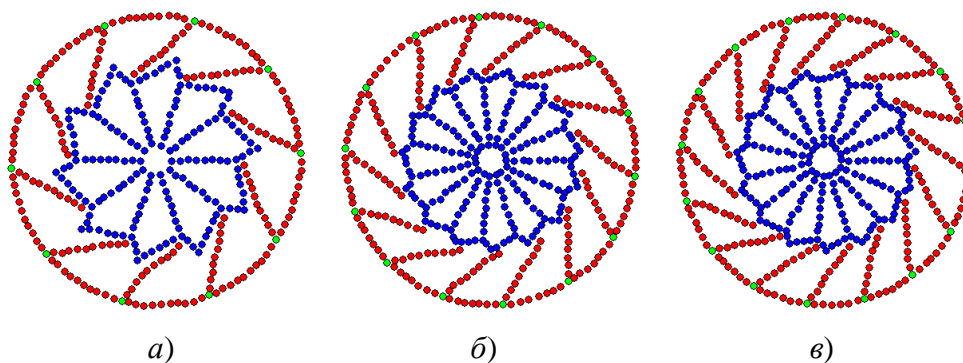


Рис. Приклади конфігурацій молекулярних двигунів: *a)* кількість зовнішніх ворсинок та внутрішніх зубців співпадає – обертання немає; *б)* ворсинок на одну менше кількості зубців – є обертання; *в)* ворсинок на одну більше зубців – є обертання.

### Література:

1. Peplow, M. The Tiniest Lego: A Tale of Nanoscale Motors, Switches and Pumps. Nature. – 2015. – 525. – P. 18-21.