

01;05

Микроскопические основы записи информации в конденсированных средах

© М.Д. Бальмаков, Л.Н. Блинов, И.В. Мурин, Н.С. Почепцова

С.-Петербургский государственный технический университет

Поступило в Редакцию 21 января 1998 г.

В окончательной редакции 12 апреля 1999 г.

Показано, что максимальная информационная емкость конденсированной системы определяется числом ее равновесных конфигураций. Получено аналитическое выражение для верхней границы интервала возможных значений информационной емкости. Обсуждается проблема сохранения записанной информации.

Информационные аспекты микроскопических процессов становятся в настоящее время предметом интенсивных исследований [1–3]. Это обусловлено не только их практической важностью, но и внутренней логикой развития физики. Практическая сторона дела связана с созданием научных основ нанотехнологии, позволяющей, в частности, получать функциональные элементы микроэлектроники нанометрового диапазона. С принципиальной точки зрения исследование микроскопического механизма формирования наноструктур представляет собой логически неизбежное звено дальнейшего развития физики конденсированных сред.

Процесс формирования в конденсированных средах наноструктур зависит от многих факторов. При их вариации получаются различные наноструктуры. За счет этого можно на микроскопическом уровне осуществлять запись информации. Ее количество I характеризует информационный аспект [1] микроскопического механизма формирования структур различных фрагментов конденсированной системы. Вполне естественно возникает вопрос, какое количество информации I можно записать и сохранить в течение достаточно большого промежутка времени t_{\max} в системе, состоящей из M атомов?

Априори ясно, что если M конечно, то величина I также конечна. Кроме того, ее значение возрастает при прочих равных условиях линейно по M . Аналогичным образом увеличивается количество информации

с ростом числа знаков в тексте [1]. Поэтому искомая величина I заключена в интервале

$$0 \leq I \leq MB^{(l)}/\ln 2, \quad (1)$$

здесь $B^{(l)}$ — постоянная; количество информации I выражено в битах, а $B^{(l)}$ — в натах [1], переход от одних единиц к другим осуществляется с помощью множителя $\ln 2$. Величина I является функцией оператора $\hat{W}^{(r)}$, описывающего внешнее воздействие, в результате которого осуществляется запись информации. Иначе говоря, численное значение величины I из интервала (1) определяется выбором тех или иных технических средств, используемых для записи информации. Напротив, численное значение постоянной $B^{(l)}$ от такого выбора не зависит и определяется лишь основополагающими уравнениями квантовой теории.

Записанную информацию обычно требуется сохранить с вероятностью $P(t)$

$$P(t) > 1 - \varepsilon, \quad \text{при } 0 \leq t \leq t_{\max}, \quad o < \varepsilon \ll 1, \quad (2)$$

близкой к единице, в течение достаточно большого промежутка времени t_{\max} . Далее предполагается, что величина t_{\max} значительно превосходит время релаксации фоновой подсистемы. Выполнение неравенства (2) должно быть обеспечено даже при наличии неблагоприятного внешнего возмущения \hat{W} , длительное действие которого на рассматриваемую систему приводит, вообще говоря, к стиранию информации.

Оценим численное значение постоянной $B^{(l)}$. Пусть запись информации осуществляется за счет структурных превращений [4]. Если для записи, хранения и считывания информации могут быть использованы все равновесные конфигурации \mathbf{R}_i , которым отвечают минимумы адиабатического электронного терма $U_M(\mathbf{R})$ конденсированной системы (рис. 1), то ее можно рассматривать как запоминающее устройство с информационной емкостью [1]

$$I^{(s)} = \frac{\ln J}{\ln 2}, \quad (3)$$

где J — число физически неэквивалентных минимумов функции $U_M(\mathbf{R})$.

Обычно в силу технических трудностей для записи информации пригодно гораздо меньшее число \tilde{J} равновесных конфигураций

$$\tilde{J} < J. \quad (4)$$

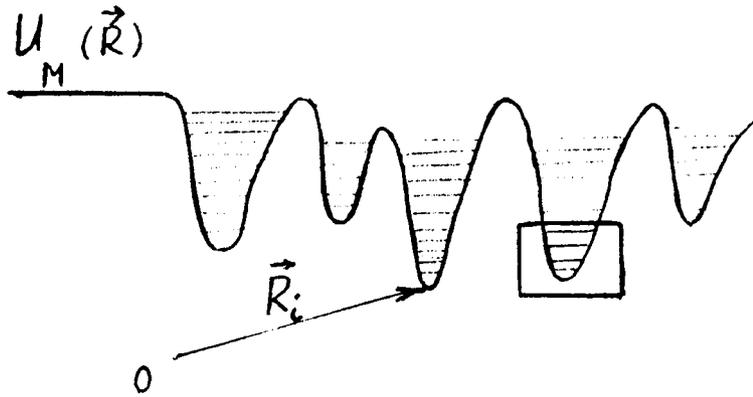


Рис. 1. Адиабатический электронный терм $U_M(\mathbf{R})$ для основного состояния электронной подсистемы. Рисунок условен, поскольку для многоатомных систем ($M \gg 1$) функция $U_M(\mathbf{R})$ зависит от большого числа аргументов $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_M)$, определяющих координаты \mathbf{r}_k атомных ядер.

Они образуют так называемый ансамбль с пониженной конфигурационной энтропией [5]. Поэтому фактическая информационная емкость $\ln \tilde{J} / \ln 2$ конденсированной системы меньше максимально возможной $I^{(s)}$ (3). Для расчета последней удобно использовать соотношение [4]

$$J = \exp(\alpha_n M + o(M)); \quad (5)$$

здесь α_n — положительный параметр, который зависит только от химического состава \mathbf{n} (составляющие вектора \mathbf{n} — относительные концентрации n_l атомов каждого вида, образующих рассматриваемую конденсированную систему, причем $\sum_l n_l = 1$); функция $o(M)$ удовлетворяет условию $\lim_{M \rightarrow \infty} o(M)/M = 0$. В рамках сделанных допущений из (1), (3)–(5) получаем $B^{(l)} \approx B$, где

$$B \equiv \sup_{\mathbf{n}} \alpha_n. \quad (6)$$

Как показано в [6], $B \approx 3$. В результате имеем следующую оценку

$$B^{(l)} \approx 3. \quad (7)$$

Конечно, при расчете $B^{(l)}$ (1) следует учитывать не только минимумы адиабатического электронного терма $U_M(\mathbf{R})$ (рис. 1), отвечающего основному состоянию электронной подсистемы. Определенный вклад в величину $B^{(l)}$ вносят и возбужденные состояния. Их роль в ряде случаев принципиальна, например когда для записи информации используется ферромагнетик. Однако в подавляющем большинстве случаев времена жизни τ_l возбужденных состояний электронной подсистемы сравнительно малы ($\tau_l \ll t_{\max}$). Такого рода состояния непригодны для хранения информации в течение достаточно большого промежутка времени t_{\max} . Соответствующие им адиабатические электронные термы можно не учитывать. Поэтому вклад в величину $B^{(l)}$ возбужденных состояний электронной подсистемы не столь велик, чтобы кардинально изменить оценку (7), согласно которой постоянная $B^{(l)}$ (1) порядка единицы.

Фактически основой оценки (7) является соотношение (5), устанавливающее, что число J различных физически неэквивалентных минимумов потенциала $U_M(\mathbf{R})$ (рис. 1) возрастает экспоненциально быстро с увеличением числа M атомов, образующих систему фиксированного ($\mathbf{n} = \text{const}$) химического состава. Данный факт не столь удивителен, так как величина J (5) учитывает все потенциально возможные структуры \mathbf{R}_i конденсированной системы. Это и структуры жидкости, стекла, идеального кристалла, кристаллов с различной концентрацией тех или иных дефектов, поликристаллов, аморфных веществ, аморфных и стеклообразных пленок, ситаллов в многое, многое другое, включая структуры микронеоднородных материалов с записанной в них информацией в фрагментах нанометрового диапазона. Многообразие минимумов адиабатического электронного терма $U_M(\mathbf{R})$ позволяет также объяснить возможность варьирования свойств материала одного и того же химического состава за счет получения различных его модификаций.

Использование адиабатического приближения не столь существенно для развиваемого подхода. Вне рамок данного приближения микроскопический механизм записи информации может быть истолкован как переход, вообще говоря, неравновесный, из одного ансамбля квантовых состояний [4] в другой, а информационная емкость $I^{(s)}$ вместо (3) будет определяться соотношением

$$I^{(s)} = \frac{\ln G}{\ln 2}, \quad (8)$$

здесь G — число различных квазизамкнутых ансамблей квантовых состояний конденсированной системы.

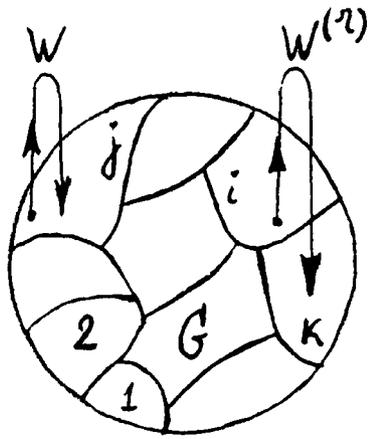


Рис. 2. Различные квазизамкнутые ансамбли.

Квазизамкнутый ансамбль, в частности, может быть образован низкоэнергетическими состояниями, локализованными только в одной потенциальной яме. Энергии соответствующих квантовых состояний изображены на рис. 1 отрезками горизонтальных прямых, принадлежащих прямоугольнику. В данном случае под действием внешнего возмущения \hat{W} происходят лишь переходы между состояниями рассматриваемого квазизамкнутого ансамбля, а переходами между различными потенциальными ямами можно пренебречь. Другими словами, по отношению к возмущению \hat{W} рассматриваемый ансамбль является замкнутым. Напротив, он открыт по отношению к записываемому оператору $\hat{W}^{(r)}$.

Таким образом, микроскопический механизм записи информации заключается в переходе под действием внешнего возмущения $\hat{W}^{(r)}$ в заранее заданный k -й квазизамкнутый ансамбль квантовых состояний (рис. 2). Впрочем, и многие другие процессы могут быть истолкованы как переход из одного квазизамкнутого ансамбля в другой. К ним, в частности, относятся плавление, кристаллизация, стеклование [4], а также составляющий основу современной нанотехнологии химико-информационный синтез [7].

Последний, как правило, представляет собой неравновесный процесс, для которого не выполняются условия локального термодинами-

ческого равновесия [8]. Это обуславливает необходимость разработки нетрадиционных методов описания подобного рода процессов. Вот почему представляется целесообразным дать более строгое определение понятия квазизамкнутый ансамбль.

Как известно [9], любое состояние системы описывается соответствующим статистическим оператором (матрицей плотности) $\hat{\rho}(t)$ в гильбертовом пространстве Γ . Под квазизамкнутым ансамблем понимается непустое множество состояний системы, удовлетворяющее следующим двум условиям.

1. Можно установить взаимно однозначное соответствие между элементами этого множества и всевозможными статистическими операторами $\hat{\rho}^{(N)}$ некоторого подпространства N гильбертова пространства Γ . Каждое состояние квазизамкнутого ансамбля задается единственным оператором $\hat{\rho}^{(N)}$, и обратно, каждый оператор $\hat{\rho}^{(N)}$ подпространства N задает единственное состояние из данного ансамбля.

2. Любое состояние $\hat{\rho}(t)$ системы, первоначально ($t = 0$), принадлежащее квазизамкнутому ансамблю ($\hat{\rho}(0) = \hat{\rho}^{(N)}$), затем ($0 \leq t \leq t_{\max}$) даже при наличии внешнего возмущения \hat{W} описывается в ε -приближении в подпространстве N . Последнее означает выполнение при $0 \leq t \leq t_{\max}$ неравенств

$$|\text{Sp}(\hat{\rho}(t)\hat{f}_l) - \text{Sp}_N(\hat{\rho}(t)\hat{f}_l)| < C_l\varepsilon, \quad l = 1, 2, \dots \quad (9)$$

Здесь \hat{f}_l — операторы физических величин; $\text{Sp}_N(\hat{\rho}(t)\hat{f}_l)$ представляет собой сумму диагональных матричных элементов оператора $\hat{\rho}(t) \cdot \hat{f}_l$ в произвольном ортонормированном базисе подпространства N ; $\text{Sp}(\hat{\rho}(t)\hat{f}_l)$ — аналогичная сумма для гильбертова пространства Γ ; C_l — постоянные.

Вероятность $P(t)$ нахождения системы в одном из квазизамкнутых ансамблей, число которых равно G (8), удовлетворяет неравенству (2). Это непосредственно следует из (9), если положить $\hat{f}_l = C_l = 1$, а также учесть, что $\text{Sp}(\hat{\rho}(t)) = 1$ и $P(t) = \text{Sp}_N(\hat{\rho}(t))$. Иначе говоря, информация сохраняется в одном из квазизамкнутых ансамблей (рис. 2) в течение промежутка времени t_{\max} .

Величину t_{\max} можно неограниченно увеличивать за счет совершенствования методов записи и хранения информации. Этого нельзя сказать по поводу приходящегося на один атом количества I/M записанной информации. Согласно (1), отношение I/M не превосходит $B^{(l)}\ln 2$. Степень близости величины I/M к постоянной $B^{(l)}\ln 2$ (7) является одним из критериев эффективности различных методов записи информации.

Для повышения эффективности необходимо использовать фрагменты нанометрового диапазона, поскольку максимально большое количество информации может быть записано за счет получения (синтеза) вполне определенных информационных структур на молекулярном уровне. По своей сути это главная проблема современной нанотехнологии. Информационный аспект данной проблемы еще не изучен должным образом, хотя его важность очевидна [7]. Поэтому можно надеяться, что результаты настоящей работы будут также полезны при разработке теоретических основ нанотехнологии.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 98–03–32114а) и Госкомвуза России (грант № 97–92–66).

Список литературы

- [1] *Кадоццев Б.Б.* // УФН. 1994. Т. 164. № 5. С. 449–530.
- [2] *Экоинформатика: Теория. Практика. Методы и системы* / Под ред. В.Е. Соколова. СПб., 1992. 520 с.
- [3] *Кадоццев Б.Б.* // УФН. 1995. Т. 165. № 8. С. 967–973.
- [4] *Бальмаков М.Д.* Стеклообразное состояние вещества. СПб.: Изд. СПбГУ. 1996. 184 с.
- [5] *Блинов Л.Н., Бальмаков М.Д., Почепцова Н.С.* // Письма в ЖТФ. 1996. Т. 22. В. 21. С. 69–73.
- [6] *Val'takov M.D.* // Glass Phys. and Chem. 1996. V. 22. N 4. P. 344–355.
- [7] *Алексовский В.Б.* Химия надмолекулярных соединений. СПб.: Изд. СПбГУ, 1996. 256 с.
- [8] *Гленсдорф П., Пригожин И.* Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций. М.: Мир, 1973. 280 с.
- [9] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика. М.: Наука, 1964. 568 с.