

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

Информационная емкость конденсированных сред

М.Д. Бальмаков

Из первых принципов квантовой механики рассмотрена проблема копирования многоатомной системы. Показано, что максимально возможное количество записанной информации определяется числом минимумов адиабатического электронного терма.

PACS number: 03.67.-a, 05.90.+m

Содержание

1. Введение (1273).
 2. Точная копия (1274).
 3. Описание в рамках адиабатического приближения (1275).
 4. Оценка числа различных квазизамкнутых ансамблей (1277).
 5. Определение квазизамкнутого ансамбля (1278).
 6. Заключение (1278).
- Список литературы (1279).

1. Введение

Информационные аспекты физических процессов становятся в настоящее время предметом фундаментальных исследований [1–4]. Многие из них основаны на идеальных мысленных экспериментах с одной частицей. Это может быть частица идеального газа, броуновская частица и т.д. Разумеется, не меньший интерес представляют конденсированные системы.

Практическая сторона дела связана с насущной необходимостью создания научных основ нанотехнологии [5, 6], позволяющей, в частности, получать функциональные элементы микроэлектроники нанометрового диапазона. С принципиальной точки зрения исследование информационного аспекта механизма формирования неравновесных структур представляет собой логически неизбежное звено дальнейшего развития физики конденсированных сред.

В связи с необходимостью тиражирования наноструктур особое значение приобретает проблема копирования. Ее суть заключается в разработке процессов, в результате которых можно было бы получать системы, являющиеся точными копиями исходной [7]. Информа-

ционный аспект проблемы копирования тесно связан с задачей определения максимально большого количества информации, которое можно записать и сохранить в течение длительного промежутка времени t_{\max} в системе, содержащей M атомов. В этом нетрудно убедиться, поскольку копирование — это частный случай записи информации.

Априори можно утверждать, что если M конечно, то количество I записанной информации также конечно. Кроме того, при прочих равных условиях численное значение I возрастает линейно по M . Аналогичным образом увеличивается количество информации с ростом числа знаков в тексте [1]. Поэтому величина I заключена в интервале

$$0 \leq I \leq \frac{M\beta(t_{\max}, \mathbf{n})}{\ln 2}; \quad (1)$$

здесь $\beta(t_{\max}, \mathbf{n})$ — удельная информационная емкость; составляющие вектора \mathbf{n} — относительные концентрации n_i атомов каждого вида, образующих рассматриваемую систему, причем $\sum_i n_i = 1$; количество информации I выражено в битах, а $\beta(t_{\max}, \mathbf{n})$ — в натах [1], переход от одних единиц к другим осуществляется с помощью множителя $\ln 2$.

Под I (1) понимается количество запоминаемой информации, которую также называют *макроинформацией*. Именно ее имеют в виду в информатике, опуская обычно приставку "макро". Альтернативой является микроинформация, представляющая собой принципиально незапоминаемый системой выбор одного из возможных вариантов. Так, очевидно, идеальный газ в силу постоянного хаотического движения частиц "не запоминает" выбор одного из микросостояний.

Варьировать численные значения I из интервала (1) можно за счет использования тех или иных технических средств. Напротив, от них не зависит верхняя граница $M\beta(t_{\max}, \mathbf{n})/\ln 2$ данного интервала, поскольку функция $\beta(t_{\max}, \mathbf{n})$ определяется основополагающими уравнениями квантовой теории.

Какими именно и как? Какова точная верхняя граница

$$L^{(I)}(t_{\max}) = \sup_{\mathbf{n}} \beta(t_{\max}, \mathbf{n}) \quad (2)$$

М.Д. Бальмаков. Санкт-Петербургский государственный университет
198904 Санкт-Петербург, Университетский пр. 2,
Российская Федерация
Тел. (812) 428-40-84. Факс (812) 428-69-39
E-mail: andr@tver.usr.pu.ru

Статья поступила 23 апреля 1998 г.,
после доработки 25 марта 1999 г.

значений функции $\beta(t_{\max}, \mathbf{n})$ для конденсированных сред всевозможных химических составов \mathbf{n} ? Насколько уменьшится время t_{\max} сохранения информации при действии внешнего возмущения \hat{W} ?

В дальнейшем под \hat{W} понимается не только оператор возмущения, используемый в традиционной квантовой механике [8]. Это может быть также оператор "измерения" в обобщенном уравнении Шрёдингера, учитывающем информационную связь системы с внешним миром [1]. В общем случае оператор \hat{W} является случайным [1], что необходимо иметь в виду при рассмотрении перечисленных выше вопросов.

Запомненная системой макроиформация I (1) является макроскопическим понятием. Однако ее максимально возможное количество, пропорциональное $\beta(t_{\max}, \mathbf{n})$ (1), (2), определяется микроскопическими параметрами. Это не столь удивительно, поскольку каждому макросостоянию, как правило, соответствует достаточно много различных микросостояний. Они образуют квазизамкнутый ансамбль, математическое определение которого приведено в разделе 5.

2. Точная копия

Все элементарные частицы одного рода (например, все электроны) неразличимы в силу принципа тождественности микрочастиц [9]. То же самое можно сказать и по поводу изотопов одного вида. Не представляет особого труда получить из изотопов протия молекулы водорода, являющиеся точными копиями друг друга¹.

Ситуация коренным образом меняется по мере увеличения числа M атомов, образующих систему. Как правило, используя традиционные методы физики и химии, нельзя получить точную копию макроскопической ($M \gg 10^4$ [10]) системы. Так, стекла одного и того же химического состава, синтезированные в абсолютно идентичных режимах нагревания и неравновесного охлаждения расплава, имеют практически одинаковые макроскопические свойства, но не есть точные копии друг друга. Дело в том, что весьма трудно абсолютно точно повторить конкретное взаимное расположение структурных флуктуаций, фиксируемых при стекловании.

Действительно, в результате стеклования, представляющего собой неравновесный переход из жидкого состояния в стеклообразное, каждый раз замораживается (запоминается системой) одна из структурных модификаций, реализующихся в жидкости. Пусть это будет i -я модификация (рис. 1). Разумеется, в следующий раз будет другая, например, k -я, но снова одна.

Эти модификации, несмотря на тождественность их макроскопических свойств (внутренней энергии, показателя преломления, плотности и т.д.), не являются точными копиями друг друга, поскольку, как видно из рис. 1,

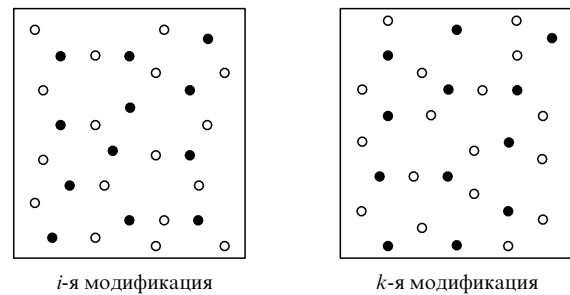


Рис. 1. Неупорядоченные атомные сетки (структурные модификации i и k), не являющиеся точными копиями друг друга. Области локализации атомных ядер разных видов отмечены соответственно как \circ и \bullet .

нельзя совместить i -ю неупорядоченную атомную сетку с k -й. Если учесть, что существует практически бесконечное число подобного рода модификаций, то каждый раз в результате стеклования с подавляющей вероятностью получаются структурные модификации, отличные от предыдущих. Следовательно, путем неравновесного охлаждения расплава нельзя получить хотя бы два макрообразца стекла, являющихся точными копиями друг друга.

Таким образом, для копирования недостаточно иметь лишь необходимые элементы таблицы Менделеева. Нужна еще и информация. Она запомнена в исходной системе и принципиально необходима при ее копировании. Подобного рода ситуации рассматриваются в связи с так называемым химико-информационным синтезом [11].

Прежде всего при решении проблемы копирования необходимо воспроизвести структуру, поскольку информация об индивидуальных особенностях многоатомной системы в конечном счете заложена во взаимном расположении ее атомных ядер. В рамках классической физики каждая структурная модификация (см. рис. 1) задается вектором

$$\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_M), \quad (3)$$

здесь \mathbf{r}_i — радиус-векторы всех атомных ядер системы. Но атомное ядро не математическая точка, положение которой однозначно определяется вектором \mathbf{r}_i . Движение микрочастиц не характеризуется траекторией $\mathbf{r}_i(t)$ [8]. Можно лишь говорить об областях их локализации. В случае конденсированных систем размеры областей локализации атомных ядер гораздо меньше межатомных расстояний и составляют десятые-сотые доли ангстрема [12]. Поэтому один из способов сокращенного [7] квантовомеханического описания структуры \mathbf{R} заключается в задании координат \mathbf{r}_i (3) центров данных областей.

Как правило, каждому запоминаемому макросостоянию (каждой структурной модификации \mathbf{R}_k ; см. рис. 1) соответствует много квантовых состояний, образующих k -й квазизамкнутый ансамбль. Спрашивается, каково число G различных квазизамкнутых ансамблей? Это полезно знать не только в связи с проблемой копирования. Величина $(\ln G)/\ln 2$ как раз и определяет точную верхнюю границу возможных значений количества информации I (1), поскольку запись информации по своей сути заключается в реализации запомненного выбора одного варианта из G возможных.

¹ Очевидно, точными копиями являются системы, волновые функции которых одинаковы. Однако одинаковость волновых функций — очень сильное требование. Даже за счет слабого взаимодействия с окружением происходят их коллапсы [1]. Поэтому целесообразно под точными копиями подразумевать системы, динамика которых, включая и коллапсы, описывается в рамках одного и того же квазизамкнутого ансамбля. Тогда будут считаться точными копиями две молекулы водорода даже в том случае, когда, например, их вращательные волновые функции [8] различны.

Чтобы найти численное значение G , прежде всего необходимо рассмотреть задачу о распределении квантовых состояний по различным квазизамкнутым ансамблям. Некоторые из них образованы микросостояниями, соответствующими одному из минимумов свободной энергии. Последнее справедливо лишь для стабильных и метастабильных систем [13]. Однако в подавляющем большинстве случаев мы имеем дело с неравновесными системами, термодинамические потенциалы которых отнюдь не экстремальны.

Так, структурные модификации стеклообразного состояния (см. рис. 1) не характеризуются минимумом энергии Гиббса. Каждая из них описывается своим квазизамкнутым ансамблем. Их макроскопические свойства неизменны, поскольку каждому ансамблю отвечает вполне определенная структурная модификация. Именно поэтому стекла представляют собой кинетически замороженные неравновесные системы, свойства которых практически не меняются в течение длительного промежутка времени t_{\max} (1). То же самое можно сказать и по поводу подавляющего большинства некристаллических веществ [14], многие из которых уже широко используются для записи информации [15].

Таким образом, класс различных квазизамкнутых ансамблей (разных макросостояний, запоминаемых системой фиксированного химического состава) чрезвычайно широк. Их число G существенно больше числа минимумов энергии Гиббса.

Для оценки величины G не обойтись без квантовомеханических методов. Дело в том, что компоненты r_i вектора \mathbf{R} (3) могут меняться непрерывно, т.е. существует континуум различных структур (различных векторов \mathbf{R}_k), которые даже нельзя перенумеровать с помощью индекса k , если тот принимает лишь целочисленные значения. Это затрудняет нахождение числа G различных структурных модификаций. При квантовомеханическом описании [8] структуры излишняя детализация вообще бесполезна, поскольку согласно квантовой механике система обычно локализована не в одной точке \mathbf{R}_k , а в некотором объеме (ячейке Ω_k). Множество всех ячеек Ω_k счетно. Именно данное обстоятельство и позволяет говорить о числе G различных структурных модификаций конденсированной системы фиксированного ($M = \text{const}$, $\mathbf{n} = \text{const}$ (1)) химического состава.

Все атомные конфигурации \mathbf{R}_k (3) идеального одноатомного газа равновероятны. Для конденсированных систем — как раз наоборот. Поэтому неудивительно, что некоторые их структурные модификации (см. рис. 1) можно "заморозить" (запомнить) в течение длительного промежутка времени t_{\max} (1). Проиллюстрируем сказанное в рамках адиабатического приближения.

3. Описание в рамках адиабатического приближения

Адиабатическое приближение [16] основано на значительном различии масс электронов и атомных ядер, что позволяет по отдельности достаточно хорошо описывать их движение. Электроны как легкие частицы "успевают" подстраиваться под мгновенную конфигурацию \mathbf{R} (3) атомных ядер, которые в свою очередь "замечают" лишь усредненное расположение электронов.

В нулевом приближении считается, что атомные ядра покоятся ($\mathbf{R} = \text{const}$ (3)). Тогда волновая функция

$\Phi_j(\mathbf{R}, \mathbf{X})$ j -го стационарного квантового состояния электронной подсистемы удовлетворяет уравнению [17]

$$\hat{H}\Phi_j(\mathbf{R}, \mathbf{X}) = U_M^{(j)}(\mathbf{R}) \Phi_j(\mathbf{R}, \mathbf{X}); \quad (4)$$

здесь \hat{H} — гамильтониан электронов при фиксированных ядрах, представляющий собой сумму полной кулоновской энергии взаимодействия атомных ядер и электронов, оператора спин-орбитального взаимодействия электронов и оператора кинетической энергии электронов; \mathbf{X} — совокупность пространственных и спиновых переменных всех электронов рассматриваемой системы; $U_M^{(j)}(\mathbf{R})$ — адиабатический электронный терм, который в случае многоатомной системы ($M \gg 1$) имеет обычно большое число различных физически неэквивалентных минимумов \mathbf{R}_k [7, 18]. Гамильтониан \hat{H} не содержит оператора кинетической энергии атомных ядер и, следовательно, представляет собой оператор энергии рассматриваемой системы для фиксированной атомной конфигурации \mathbf{R} .

Когда движение атомных ядер не индуцирует переходов между различными электронными состояниями, функция $U_M^{(j)}(\mathbf{R})$ (4) может быть истолкована как потенциальная энергия ядер, соответствующая j -му электронному состоянию. В этом случае их движение происходит в потенциальном поле $U_M^{(j)}(\mathbf{R})$. Поэтому ядерная волновая функция $\chi_j(\mathbf{R}, E)$ удовлетворяет уравнению Шрёдингера [17]

$$(\hat{T} + U_M^{(j)}(\mathbf{R})) \chi_j(\mathbf{R}, E) = E \chi_j(\mathbf{R}, E), \quad (5)$$

в котором, в отличие от (4), нет переменной \mathbf{X} , отвечающей электронной подсистеме. Здесь \hat{T} — оператор кинетической энергии атомных ядер; E — энергия стационарного квантового состояния.

Химический состав однозначно определяет явный вид уравнений (4) и (5). Их разные решения описывают всевозможные модификации вещества фиксированного состава. Это может служить основой классификации данных решений. Так, в случае селена одни решения можно соотнести жидкому состоянию, другие — тем или иным кристаллическим модификациям, третьи — аморфным модификациям, четвертые — стеклообразному состоянию, пятые — пленкам и т.д. Однако более целесообразно в основу обсуждаемой классификации решений уравнений (4) и (5) положить структуру \mathbf{R} (3), поскольку, как уже отмечалось, информация об индивидуальных особенностях многоатомной системы в конечном счете заложена во взаимном расположении ее атомных ядер. Любая структурная модификация (например, k -я; см. рис. 1), сохраняющаяся по крайней мере в течение промежутка времени t_{\max} (1), описывается волновыми функциями $\Phi_j(\mathbf{R}, \mathbf{X})$ (4) и $\chi_j(\mathbf{R}, E)$ (5), локализованными вблизи точки \mathbf{R}_k . Многообразие последних фактически и определяет все состояния, принадлежащие k -му квазизамкнутому ансамблю.

Точкам \mathbf{R}_k , вблизи которых с подавляющей вероятностью происходит движение атомных ядер той или иной структурной модификации, обычно соответствует один или ряд минимумов потенциала $U_M^{(j)}(\mathbf{R})$. Для оценки числа таких точек (числа G различных квазизамкнутых ансамблей), как правило, достаточно учитывать лишь минимумы адиабатического электронного терма $U_M^{(j)}(\mathbf{R})$

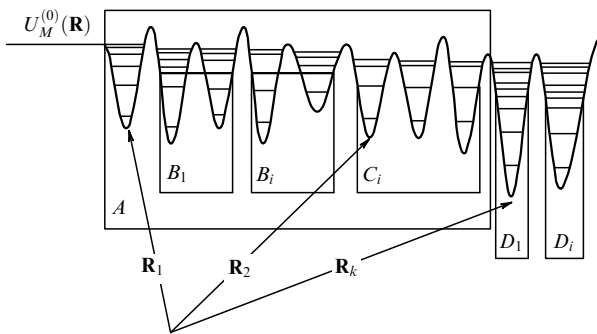


Рис. 2. Адиабатический электронный терм $U_M^{(0)}(\mathbf{R})$. Прямоугольниками A , B_i , C_i , D_i выделены потенциальные ямы, отвечающие структурам \mathbf{R}_k (квазизамкнутым ансамблям) жидкости, стекла, аморфного вещества, кристалла. Отрезки горизонтальных прямых задают величины энергий квантовых состояний. Рисунок достаточно условен, поскольку для многоатомных систем ($M \gg 1$) функция $U_M^{(0)}(\mathbf{R})$ согласно (3) задана в пространстве большого числа измерений.

(рис. 2), отвечающего основному ($j = 0$) состоянию электронной подсистемы².

Дело в том, что времена жизни τ_e большинства возбужденных состояний электронной подсистемы сравнительно малы ($\tau_e \ll t_{\max}$). Поэтому только из данных состояний нельзя образовать квазизамкнутый ансамбль, в рамках которого можно описать в течение длительного промежутка времени t_{\max} k -ю структурную модификацию (см. рис. 1). Ее сохранению способствуют потенциальные барьеры, окружающие минимум \mathbf{R}_k адиабатического электронного терма $U_M^{(0)}(\mathbf{R})$ (рис. 2). Если они достаточно высоки, то даже низкоэнергетические квазистационарные [8] состояния, локализованные в рассматриваемой потенциальной яме \mathbf{R}_k , будут иметь большие по сравнению с t_{\max} (1) времена жизни τ_l , удовлетворяющие неравенствам

$$\tau_r \ll t_{\max} \ll \tau_l. \quad (6)$$

Здесь τ_r — время релаксации фононной подсистемы, которое обычно значительно меньше требуемого времени сохранения t_{\max} информации.

Следовательно, квазизамкнутые ансамбли могут быть образованы стационарными и квазистационарными [8] состояниями с большими временами жизни τ_l (6). Обычно это низкоэнергетические состояния, описывающие колебательное движение атомных ядер вблизи

² Каждый минимум функции $U_M^{(0)}(\mathbf{R})$ задает одну из равновесных конфигураций \mathbf{R}_k . Наиболее глубоким минимумам (потенциальным ямам) отвечают кристаллы. Большинство минимумов соответствует различным некристаллическим структурам. Переход из одной потенциальной ямы в другую ($\mathbf{R}_i \rightarrow \mathbf{R}_k$) означает в общем случае перегруппировку всех M атомных ядер системы, поскольку компонентами вектора $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_M)$ являются радиус-векторы \mathbf{r}_j данных ядер (3). Каждая точка на рис. 2 задает внутреннюю энергию E системы и координаты всех ее атомных ядер. В рамках классической физики перемещением этой точки можно охарактеризовать всевозможные процессы, происходящие в системе. Адиабатический электронный терм $U_M^{(0)}(\mathbf{R})$ не зависит ни от температуры, ни от термической предыстории и т.д. Согласно (4) он однозначно определяется только химическим составом. Всевозможные сценарии поведения системы заключаются в той или иной последовательности прохождения потенциальных ям (минимумов функции $U_M^{(0)}(\mathbf{R})$).

одного из минимумов адиабатического электронного терма $U_M^{(0)}(\mathbf{R})$ (см. рис. 2). Переходы между данными состояниями не сопровождаются существенным изменением структуры \mathbf{R}_k . Пока происходят только такие переходы, k -я структурная модификация (см. рис. 1) сохраняется.

То же самое можно сказать и по поводу макроинформации $I(1)$, представляющей собой запомненный системой выбор какого-либо одного квазизамкнутого ансамбля. Эта информация сохраняется, пока все изменения, происходящие самопроизвольно или благодаря действию внешнего возмущения \hat{W} , описываются в рамках одного и того же квазизамкнутого ансамбля. Последнее означает, что с вероятностью $P(t)$, близкой к единице:

$$P(t) > 1 - \varepsilon \quad \text{при} \quad 0 \leq t \leq t_{\max} \quad \text{и} \quad 0 < \varepsilon \ll 1, \quad (7)$$

система "находится" в данном квазизамкнутом ансамбле в течение длительного промежутка времени t_{\max} , и, следовательно, можно пренебречь переходами из рассматриваемого ансамбля в другие. Соотношения (7) полностью согласуются с приведенным ниже определением квазизамкнутого ансамбля.

Один и тот же ансамбль квантовых состояний может быть квазизамкнутым по отношению к одному вполне определенному оператору \hat{W} или группе операторов и, вообще говоря, не быть квазизамкнутым по отношению к другим операторам. К числу последних относится записывающий оператор $\hat{W}^{(m_k)}$, осуществляющий переход в заранее заданный k -й квазизамкнутый ансамбль. Поэтому обычно рассматриваемые ансамбли "замкнуты" лишь при хранении и считывании информации. Именно данное обстоятельство обуславливает выбор термина *квазизамкнутый*.

При считывании информации происходит измерение. Как известно [1], любое измерение представляет собой необратимый процесс, фиксирующий одно из возможных состояний. Сам процесс измерения, допускающий в принципе предельно малый обмен энергии между системой и прибором, тем не менее оказывает существенное влияние на динамику квантовой системы. Исходное состояние системы "разрушается, т.е. превращается в нечто такое, что либо не может быть чистым состоянием, либо переводится в другое чистое состояние, но явно отличающееся от исходного" [1, с. 472]. Для сохранения записанной ранее информации требуется, чтобы при считывании это нечто не выходило за рамки первоначального k -го квазизамкнутого ансамбля. Выполнение данного условия обеспечивается во многих случаях.

Действительно, пусть ядерная волновая функция $\chi_0(\mathbf{R}, E_1)$ (5) исходного состояния описывает низкоэнергетическое колебательное движение атомных ядер в потенциальной яме \mathbf{R}_k (см. рис. 2). Считывание (измерение) осуществляет коллапс $\chi_0(\mathbf{R}, E_1) \rightarrow \chi_0(\mathbf{R}, E_2)$. Если изменение энергии $|E_1 - E_2|$ гораздо меньше величин большинства потенциальных барьеров, отделяющих минимум \mathbf{R}_k от других минимумов потенциала $U_M^{(0)}(\mathbf{R})$, то волновая функция $\chi_0(\mathbf{R}, E_2)$ конечного состояния с подавляющей вероятностью будет локализована в исходной потенциальной яме \mathbf{R}_k . В этом легко убедиться, поскольку в данном случае при использовании теории возмущений [8, 9] достаточно учитывать лишь матричные элементы $\langle \chi_0(\mathbf{R}, E_1) | \hat{W}^{(r)} | \chi_0(\mathbf{R}, E_s) \rangle$ оператора

считывания³ $\widehat{W}^{(r)}$ для волновых функций $\chi_0(\mathbf{R}, E_s)$, локализованных в той же самой потенциальной яме⁴ \mathbf{R}_k .

Таким образом, для сохранения многоатомной системы, ее точной копии, а также записанной информации достаточно, чтобы все происходящие в системе изменения не выходили за рамки одного и того же квазизамкнутого ансамбля. Именно он характеризует свойства системы, проявляющиеся при информационном взаимодействии. Фактически поведение квантовой системы можно с точностью до принадлежности к тому или иному квазизамкнутому ансамблю трактовать классически. Именно поэтому $I(1)$ является макроинформацией.

Количество информации $I^{(s)}$ о том, что состояние системы принадлежит данному квазизамкнутому ансамблю, равно

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

здесь G — число различных квазизамкнутых ансамблей. Разумеется, величина $G(t_{\max}, \varepsilon, \widehat{W}, \mathbf{n}, M)$ является функцией многих аргументов. Ее явный вид неизвестен, что затрудняет непосредственное использование равенства (8) для расчета численного значения $I^{(s)}$.

Оценить величину $G(t_{\max}, \varepsilon, \widehat{W}, \mathbf{n}, M)$ можно, исходя из числа $J(\mathbf{n}, M)$ различных минимумов потенциала $U_M^{(0)}(\mathbf{R})$. Такой подход позволяет сравнительно просто получить численные оценки, поскольку функция $J(\mathbf{n}, M)$ зависит всего лишь от двух аргументов, и, кроме того, ее определение фактически основано на уравнении (4), когда $j = 0$. Это однозначное математическое определение полезно при рассмотрении широкого круга вопросов [7], а не только при решении проблем копирования и записи информации.

4. Оценка числа различных квазизамкнутых ансамблей

Для числа $J(\mathbf{n}, M)$ различных физически неэквивалентных локальных минимумов адиабатического электронного терма $U_M^{(0)}(\mathbf{R})$, отвечающего основному электронному состоянию электронейтральной системы, состоящей из M атомов, справедлива при $M \rightarrow \infty$ асимптотическая формула [7]

$$\frac{1}{M} \ln J(\mathbf{n}, M) \sim \alpha_{\mathbf{n}}; \quad (9)$$

здесь $\alpha_{\mathbf{n}}$ — положительный параметр, который зависит только от химического состава \mathbf{n} (1). Из (9) имеем

$$J(\mathbf{n}, M) = \exp(\alpha_{\mathbf{n}} M + o(M)), \quad (10)$$

причем функция $o(M)$ удовлетворяет условию $\lim_{M \rightarrow \infty} o(M)/M = 0$. Иначе говоря, число $J(\mathbf{n}, M)$

различных физически неэквивалентных минимумов потенциала $U_M^{(0)}(\mathbf{R})$ 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 $J(\mathbf{n}, M)$ (10) учитывает все потенциально возможные структурные модификации \mathbf{R}_k (3) многоатомной системы. Это и структуры жидкости, стекла, идеального кристалла, кристаллов с различной концентрацией тех или иных дефектов, поликристаллов, аморфных веществ, аморфных и стеклообразных пленок, ситаллов и многое другое, включая структуры микронеоднородных материалов с записанной в них информацией. Многообразие минимумов функции $U_M^{(0)}(\mathbf{R})$ позволяет также объяснить возможность варьирования свойств материала одного и того же химического состава за счет получения различных его модификаций, описываемых разными квазизамкнутыми ансамблями. Так, стеклу соответствует не один, а много физически неэквивалентных квазизамкнутых ансамблей $B_1, B_2, \dots, B_i, \dots$ (см. рис. 2). Поэтому свойства стекол меняются в зависимости от скорости охлаждения стеклообразующего расплава [7].

На практике в силу технических трудностей, как правило, можно использовать лишь некоторую часть квазизамкнутых ансамблей. Поэтому количество записанной информации $I(1)$ обычно меньше максимально возможного значения $I^{(s)}$ (8):

$$I \leq \frac{\ln G(t_{\max}, \varepsilon, \widehat{W}, \mathbf{n}, M)}{\ln 2}. \quad (11)$$

Правая часть неравенства (11) оценивается просто, если учитывать лишь квазизамкнутые ансамбли, отвечающие основному состоянию электронной подсистемы. Действительно, для их числа $G^{(0)}$ выполняются соотношения

$$\begin{aligned} \ln G^{(0)}(t_{\max}, \varepsilon, \widehat{W}, \mathbf{n}, M) &\leq \ln J(\mathbf{n}, M) = \\ &= (\alpha_{\mathbf{n}} M + o(M)) \leq (B M + o(M)), \end{aligned} \quad (12)$$

где постоянная B определяется тождеством

$$B \equiv \sup_{\mathbf{n}} \alpha_{\mathbf{n}}. \quad (13)$$

Докажем справедливость преобразований (12). При низких температурах движение атомных ядер конденсированной системы происходит вблизи одного или ряда минимумов (потенциальных ям) адиабатического электронного терма $U_M^{(0)}(\mathbf{R})$ (см. рис. 2). Если все низкоэнергетические состояния $\Phi_0(\mathbf{R}, \mathbf{X}) \chi_0(\mathbf{R}, E_s)$, локализованные в каждой потенциальной яме, являются стационарными или квазистационарными с большими временами жизни τ_i , удовлетворяющими неравенству (6), то такие состояния, очевидно, и образуют один из квазизамкнутых ансамблей. Их число $G^{(0)}$ в данном случае равно числу $J(\mathbf{n}, M)$ (10) потенциальных ям. В остальных случаях, когда часть квазизамкнутых ансамблей описывает движение атомных ядер вблизи ряда минимумов потенциала $U_M^{(0)}(\mathbf{R})$, выполняется строгое неравенство $G^{(0)} < J(\mathbf{n}, M)$. Тем самым доказано неравенство $G^{(0)} \leq J(\mathbf{n}, M)$, из которого с учетом (10) и (13) непосредственно следуют соотношения (12), позволяющие оценить сверху величину $G^{(0)}$, исходя из численных значений $\alpha_{\mathbf{n}}$ или B .

Найти точное значение постоянной B (13) не представляло бы особого труда, если бы были известны для систем всевозможных химических составов решения

³ Строго говоря, редукция (коллапс) не описывается уравнением Шрёдингера [4]. Тем не менее известны подходы, позволяющие с большой степенью точности трактовать измерение как квантовомеханическое взаимодействие системы с прибором (окружением) [19]. Это позволяет ввести оператор взаимодействия двух подсистем $\widehat{W}^{(r)}$ и затем использовать уравнение Шрёдингера.

⁴ Поскольку волновые функции, локализованные в разных потенциальных ямах, практически не перекрываются, остальными матричными элементами можно пренебречь.

уравнения (4) при $j = 0$. Поскольку это не так, то приходится использовать модельные подходы [7]. В их рамках удается рассчитать для конкретных систем численные значения параметра α_n (9), (13). Результаты данных расчетов [7, 18] свидетельствуют в пользу следующей оценки:

$$B \approx 3. \quad (14)$$

Постоянная B полезна также при оценке верхней границы удельной информационной емкости $\beta(t_{\max}, \mathbf{n})$ (1), (2):

$$0 \leq \beta(t_{\max}, \mathbf{n}) \leq \sup_{\tau_r \ll t_{\max}} L^{(l)}(t_{\max}) \equiv B^{(l)} \approx B. \quad (15)$$

Действительно, в отличие от B (13), при расчете $B^{(l)}$ (15) надо учитывать не только минимумы адиабатического электронного терма $U_M^{(0)}(\mathbf{R})$, отвечающего основному состоянию электронной подсистемы, но и, вообще говоря, минимумы остальных потенциалов $U_M^{(j)}(\mathbf{R})$ (4). Однако, как уже отмечалось, времена жизни τ_e большинства возбужденных состояний электронной подсистемы сравнительно малы ($\tau_e \ll t_{\max}$). Такого рода состояния непригодны для хранения информации. Соответствующие им потенциалы можно не учитывать. Тогда из (10)–(13) непосредственно получается оценка (15).

До сих пор не было дано строгого определения понятия "квазизамкнутый ансамбль". Считалось, что каждой структурной модификации (см. рис. 1) системы фиксированного химического состава соответствует свой набор микросостояний, которые и образуют один из квазизамкнутых ансамблей. Это наглядная, но несколько упрощенная трактовка. Возможно более строгое рассмотрение, основанное на определении квазизамкнутого ансамбля вне рамок адиабатического приближения. При таком подходе приходится учитывать многие важные нюансы, которые здесь не обсуждались. Поэтому представляется целесообразным привести определение квазизамкнутого ансамбля.

5. Определение квазизамкнутого ансамбля

Любое состояние системы описывается соответствующим статистическим оператором (матрицей плотности [8]) $\hat{\rho}(t)$ в гильбертовом пространстве \mathbb{H} . 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 $\hat{\rho}^{(\mathbb{N})}$ некоторого подпространства \mathbb{N} гильбертова пространства \mathbb{H} . Каждое состояние квазизамкнутого ансамбля задается единственным оператором $\hat{\rho}^{(\mathbb{N})}$ и, наоборот, каждый оператор $\hat{\rho}^{(\mathbb{N})}$ подпространства \mathbb{N} задает единственное состояние из данного ансамбля.

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

$$\left| \text{Sp}(\hat{\rho}(t)\hat{f}_l) - \text{Sp}_{(\mathbb{N})}(\hat{\rho}(t)\hat{f}_l) \right| < C_l \varepsilon, \quad l = 1, 2, \dots \quad (16)$$

Здесь \hat{f}_l — операторы физических величин; $\text{Sp}_{(\mathbb{N})}(\hat{\rho}(t)\hat{f}_l)$ представляет собой сумму диагональных матричных элементов оператора $\hat{\rho}(t)\hat{f}_l$ в произвольном ортонормированном базисе подпространства \mathbb{N} ; $\text{Sp}(\hat{\rho}(t)\hat{f}_l)$ — аналогичная сумма для гильбертова пространства \mathbb{H} ; C_l — постоянные. Кроме того, считается, что при $t > t_{\max}$ хотя бы одно из неравенств (16) не выполняется.

Определения, как известно, не доказываются. Приведем ряд доводов в пользу сформулированного выше определения квазизамкнутого ансамбля. Целесообразность задания данного ансамбля в соответствующем подпространстве \mathbb{N} гильбертова пространства \mathbb{H} следует из принципа суперпозиции [8]. В полном согласии с ним все решения уравнения Шрёдингера со временем образуют линейное многообразие [8]. Если нас интересует лишь часть данных решений, то опять-таки, имея в виду принцип суперпозиции, удобно, чтобы эта часть представляла собой замкнутое линейное многообразие. Последнее называется *подпространством* [20].

Выполнение неравенств (16) означает, что для расчета со сколь угодно малой погрешностью $C_l \varepsilon$ средних значений

$$\bar{f}_l(t) = \text{Sp}(\hat{\rho}(t)\hat{f}_l), \quad l = 1, 2, \dots, \quad (17)$$

интересующих нас физических величин \hat{f}_l достаточно знать соответствующие матричные элементы лишь для подпространства \mathbb{N} . Это неудивительно, поскольку вероятность $P(t)$ нахождения системы в каком-либо состоянии квазизамкнутого ансамбля близка к единице, точнее,

$$P(t) > 1 - \varepsilon \quad \text{при} \quad 0 \leq t \leq t_{\max}. \quad (18)$$

Неравенство (18) непосредственно следует из соотношений (16) и (17), если положить в последних $\hat{f}_l = C_l = 1$, а также учесть, что $P(t) = \text{Sp}_{(\mathbb{N})}(\hat{\rho}(t))$. Соотношения (18) фактически совпадают с неравенствами (7), которые использовались при обосновании целесообразности введения понятия "квазизамкнутый ансамбль".

6. Заключение

Конечно, мы находимся только на начальном этапе изучения информационного аспекта поведения конденсированных систем. Развитие микроскопической теории копирования и записи информации сдерживается многими факторами. Прежде всего это ряд нерешенных проблем естествознания. Перечислим некоторые из них. До сих пор обсуждается "вопрос о взаимоотношении между квантовым и классическим описаниями физических процессов" [19, с. 1018]. Нет единой точки зрения по поводу таких основополагающих понятий, как волновая функция, редукция (коллапс) и т.д. [21]. Наконец, является предметом дискуссий "вопрос о необратимости на границе между классическими и квантовыми системами, в частности при измерении квантовых систем" [2, с. 973]. Последнее обстоятельство имеет принципиальное значение для таких диссипативных и необратимых во времени процессов, как запись и считывание информации.

Не решив перечисленных проблем, вряд ли можно дать исчерпывающие ответы на все вопросы, сформули-

рованные в данной работе. Наибольшее внимание в ней было уделено оценке числа G различных квазизамкнутых ансамблей (различных структурных модификаций (см. рис. 1), сохраняющихся в течение длительного промежутка времени t_{\max} (1)). Пока их динамика, включая и коллапсы, описывается разными квазизамкнутыми ансамблями, данные модификации не переходят друг в друга даже при действии неблагоприятного внешнего возмущения W . Поэтому имеется потенциальная возможность их использования для записи и хранения информации.

Действительно, нет каких-либо принципиальных ограничений в плане практической реализации любого состояния, описываемого основополагающими уравнениями квантовой механики⁵. То же самое можно утверждать и по поводу всевозможных структурных модификаций (см. рис. 1) системы фиксированного химического состава⁶. С помощью макроскопического прибора их можно различать⁷. Конечно, при измерении (считывании) информации обязательно меняется исходное состояние системы, а структурная модификация (квазизамкнутый ансамбль), вообще говоря, нет. Последнее обстоятельство важно для сохранения при считывании записанной ранее информации, поскольку она представляет собой запомненный системой выбор одного из всевозможных квазизамкнутых ансамблей.

Для развития микроскопической теории копирования и записи информации необходимы различные модельные системы. В этом плане может оказаться полезным идеальное стекло [7]. Оно уже использовалось в качестве модели при анализе особенностей функционирования нейронных сетей [23] и при описании космических объектов — черных дыр [24].

Разумеется, по сравнению с идеальным газом идеальное стекло еще не нашло широкого применения в теоретических исследованиях. Главная причина в том, что теория неупорядоченных систем, к которым относятся стекла, далека от своего завершения [14]. Прогресс в этой области, видимо, невозможен без принципиально новых подходов, в частности использующих методы теории информации [1–4, 25].

Действительно, при стекловании происходит внутреннее измерение (самоизмерение) [3, 4] и осуществляется запомненный системой выбор одной структурной модификации (см. рис. 1) из G возможных. Но именно это, как уже отмечалось, и имеют в виду, когда говорят о макроинформации $I(1)$. Существенно, что для реализации запомненного выбора нельзя использовать идеальный газ или жидкость в силу их лабильности. Кроме того, стеклование — неравновесный процесс, а

информация "играет большую роль в физических неравновесных процессах" [1, с. 451].

Представляется, что в дальнейшем на основе идеологии стеклообразного состояния будут разработаны разнообразные модели для исследования информационного аспекта поведения многоатомных систем. Жидкость — это "стохастизированная система с нулевой информацией и максимальной энтропией, т.е. система типа C " [1, с. 474]. Стекло — как раз наоборот. В каждом макрообразце стекла запомнена информация, принципиально необходимая для его копирования, а энтропия стекла существенно меньше энтропии жидкости [26, 27]. Жидкость не используется для записи информации. Напротив, стекла, как, впрочем, и многие другие неупорядоченные системы, пригодны для этого [15].

Микроскопический механизм копирования и записи информации определяется элементарными процессами, происходящими во фрагментах малых размеров. Это могут быть элементарные структурные превращения, элементарные химические превращения и т.д. При их описании прежде всего необходимо учитывать потенциальные барьеры, окружающие каждый минимум адиабатического электронного терма $U_M^{(0)}(\mathbf{R})$ (см. рис. 2), точнее, коэффициенты прохождения через данные барьеры [28].

Большинство элементарных процессов происходит во фрагментах нанометрового диапазона, содержащих десятки-сотни атомов [29]. Поэтому данные процессы, в частности, ответственны за формирование в конденсированных средах наноструктур, многообразие которых фактически и определяет величину удельной информационной емкости $\beta(t_{\max}, \mathbf{n})$ (1), (15).

Задача целенаправленного синтеза тех или иных наноструктур [11] диктует необходимость разработки микроскопической теории копирования и записи информации. Решение этой частной задачи невозможно без такой фундаментальной характеристики любого материального объекта, как информация, без которой в свою очередь невозможно получить его точную копию. В данной области прикладные исследования опережают фундаментальные и стимулируют их развитие. Нечто подобное уже было в середине нашего века, когда зарождалась теория информации [30].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 98-03-32114а), Госкомвуза России (грант 97-0-9.2-66) и программы "Интеграция" (грант А0146).

Список литературы

1. Кадомцев Б Б *УФН* **164** 449 (1994)
2. Кадомцев Б Б *УФН* **165** 967 (1995)
3. Кадомцев Б Б *Динамика и информация* (М.: Редакция журнала "Успехи физических наук", 1997)
4. Кадомцев Б Б, Кадомцев М Б *УФН* **166** 651 (1996)
5. Yoffe A D *Adv. Phys.* **42** 173 (1993)
6. 2-я Межд. конф. "Химия высокоорганизованных веществ и научные основы нанотехнологии". Автореф. докл. (С.Пб.: Изд-во УНЦХ С.-Петерб. ун-та, 1998)
7. Бальмаков М Д *Стеклообразное состояние вещества* (С.Пб.: Изд-во С.-Петерб. ун-та, 1996)
8. Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Квантовая механика. Нерелятивистская теория* (М.: Физматгиз, 1963)
9. Блохинцев Д И *Основы квантовой механики* (М.: Высшая школа, 1961)
10. Киттель Ч *Статистическая термодинамика* (М.: Наука, 1977)

⁵ Квантовая механика [8] допускает даже возможность реализации когерентной суперпозиции любых двух состояний. Разумеется, это справедливо и для любых двух структурных модификаций (см. рис.1). Однако за счет всегда имеющегося слабого взаимодействия с окружением их суперпозиция быстро превращается в одну из устойчивых структурных модификаций. Такого рода состояния называются *некогерентными* [19].

⁶ В практическом плане задача получения наперед заданной структурной модификации рассматривается в рамках так называемого химико-информационного синтеза [11].

⁷ В пользу этого также свидетельствует впечатляющий прогресс, например, в развитии за последние 70 лет дифракционных методов исследования неупорядоченных структур [22].

11. Алесковский В Б *Химия надмолекулярных соединений* (С.Пб.: Изд-во С.-Петербур. ун-та, 1996)
12. Вайнштейн Б К *Структурная электронография* (М.: Изд-во АН СССР, 1956)
13. Базаров И П *Термодинамика* (М.: Высшая школа, 1983)
14. Mott N F , Davis E A *Electron Processes in Non-crystalline Materials* (Oxford: Clarendon Press, 1979)
15. Андриеш А М и др. *Стеклообразные полупроводники в фото-электрических системах записи оптической информации* (Киев: Штиинца, 1988)
16. Born M, Oppenheimer J R *Ann. Phys. (Leipzig)* **84** 457 (1927)
17. Никитин Е Е *Теория элементарных атомно-молекулярных процессов в газах* (М.: Химия, 1970)
18. Bal'makov M D *J. Non-Cryst. Solid.* **90** 69 (1987)
19. Менский М Б *УФН* **168** 1017 (1998)
20. Колмогоров А Н, Фомин С В *Элементы теории функций и функционального анализа* (М.: Наука, 1981)
21. Клышко Д Н *УФН* **168** 975 (1998)
22. Wright A C *Glass Phys. and Chem.* **24** 148 (1998)
23. Немилов С В *ДАИ* **359** 554 (1998)
24. Nieuwenhuizen Th M *Phys. Rev. Lett.* **81** 2201 (1998)
25. Стратонович Р Л *Теория информации* (М.: Сов. радио, 1975)
26. Bal'makov M D *Glass Phys. and Chem.* **22** 344 (1996)
27. Bal'makov M D, Blinov L N, Pocheptsova N S *Tech. Phys. Lett.* **24** 86 (1998)
28. Tveryanovich A, Bal'makov M D, Tveryanovich Yu S, in *Extended abstracts of 11th International Symposium non-oxide and new optical glasses* (Sheffield, UK., 6–10 september 1998) p. 334
29. Bal'makov M D, Tver'yanovich Yu S, Tver'yanovich A S *Glass Phys. and Chem.* **20** 381 (1994)
30. Шеннон К *Работы по теории информации и кибернетике* (М.: ИЛ, 1963)

Information capacity of condensed systems

M.D. Bal'makov

*St. Petersburg State University,
Universitetskii pr. 2, St. Petersburg, 198904, Russian Federation
Tel. (7-812) 428-40 84. Fax (7-812) 428-69 39
E-mail: andr@tver.usr.pu.ru*

The problem of copying a polyatomic system is analyzed from first principles quantum mechanically to show the number of minima of the adiabatic electron term to be the factor determining the storage capacity.

PACS number: **05.90. + m**

Bibliography — 30 references

Received 23 April 1998, revised 25 March 1999