
ФІЗИЧНІ, ХІМІЧНІ ТА ІНШІ ЯВИЩА, НА ОСНОВІ ЯКИХ МОЖУТЬ БУТИ СТВОРЕНІ СЕНСОРИ

PHYSICAL, CHEMICAL AND OTHER PHENOMENA, AS THE BASES OF SENSORS

PACS: 05.70.-a, 73.63.-b, 84.32.Ff, 85.75.-d, 89.70.Cf

УРОКИ НАНОЕЛЕКТРОНІКИ. ЕЛЕКТРИЧНИЙ СТРУМ І ДРУГИЙ ЗАКОН ТЕРМОДИНАМІКИ В КОНЦЕПЦІЇ «ЗНИЗУ – ВГОРУ»

*Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха**

Одеський державний екологічний університет
вул. Львівська, 15, Одеса, Україна

тел. (067) 725 2209, E-mail: quantumnet@yandex.ua

* Інститут фізики напівпровідників ім. В. Є. Лашкарьова НАН України
пр. Науки, 41, Київ, Україна

тел. (044) 525 6033, E-mail: maksym_strikha@hotmail.com

УРОКИ НАНОЕЛЕКТРОНІКИ. ЕЛЕКТРИЧНИЙ СТРУМ І ДРУГИЙ ЗАКОН ТЕРМОДИНАМІКИ В КОНЦЕПЦІЇ «ЗНИЗУ – ВГОРУ»

Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха

Анотація. У заключній із серії оглядово-методичних статей у рамках концепції «знизу – вгору» сучасної наноелектроніки автори розглядають потоки електронів і тепла через провідник з урахуванням навколишнього середовища і будують рівноважну термодинаміку провідника зі струмом. Аналізується роль фоківських станів і накопичення інформації в нерівноважному стані, докладно обговорюється модель інформаційно-керованого акумулятора і зв'язок її з принципом Ландауера про мінімальну енергію, необхідну для стирання одного біта інформації. Вводиться поняття квантової ентропії та обговорюються окремі аспекти її застосування, підкреслюється актуальність інтегрування спінтроніки та магнетроніки у зв'язку з майбутнім переходом до спінової архітектури обчислювальних пристроїв.

Ключові слова: нанофізика, наноелектроніка, термодинаміка резистора, інформаційна ємність, принцип Ландауера

LESSONS OF NANOELECTRONICS. THE ELECTRIC CURRENT AND THE SECOND LAW OF THERMODYNAMICS IN THE «BOTTOM – UP» APPROACH

Yu. O. Kruglyak, M. V. Strikha

Abstract. In the last from the series of tutorial review articles within the «bottom – up» approach of modern nanoelectronics authors consider electron and heat fluxes with an account of environment in order to build the equilibrium thermodynamics of a conductor with a current. The role of the Fock states is analyzed, the accumulation of information in a non-equilibrium state is discussed as well along with a detailed analysis of information-driven battery model and its connection with the Landauer principle on the minimum of energy needed to erase one bit of information. The concept of quantum entropy is introduced, and some aspects of its application as well as actuality of integration of spintronics and magnetronics in connection with the upcoming development of the spin architecture for the computing devices are discussed.

Keywords: nanophysics, nanoelectronics, resistor thermodynamics, information storage, Landauer principle

УРОКИ НАНОЭЛЕКТРОНИКИ. ЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ТОК И ВТОРОЙ ЗАКОН ТЕРМОДИНАМИКИ В КОНЦЕПЦИИ «СНИЗУ – ВВЕРХ»

Ю. А. Кругляк, М. В. Стриха

Аннотация. В заключительной из серии обзорно-методических статей в рамках концепции «снизу – вверх» современной наноэлектроники авторы рассматривают потоки электронов и тепла через проводник с учетом окружающей среды и строят равновесную термодинамику проводника с током. Анализируется роль фоковских состояний, обсуждается накопление информации в неравновесном состоянии и модель информационно-управляемого аккумулятора в ее связи с принципом Ландауэра о минимальной энергии, необходимой для стирания одного бита информации. Вводится понятие квантовой энтропии и обсуждаются отдельные аспекты ее применения, подчеркивается актуальность интегрирования спинтроники и магнетроники в связи с предстоящим переходом к спиновой архитектуре вычислительных устройств.

Ключевые слова: нанофизика, наноэлектроника, термодинамика резистора, информационная емкость, принцип Ландауэра

1. Вступ. Цією статтею автори завершують серію навчально-оглядових статей, які друкувалися в журналі «Сенсорна електроніка і мікросистемні технології», починаючи з №4 за 2012 рік. Нагадаємо, що раніше у рамках концепції «знизу – вгору» сучасної наноелектроніки ми розглядали фізичні основи виникнення струму в наносистемах (№4, 2012), термоелектричні явища (№1, 2013), основи спинтроники (№2, 2013) та застосування методу нерівноважної функції Гріна (НРФГ) до транспортних задач (№№ 3,4, 2013), класичний та квантовий ефекти Холла (№1, 2014), спіновий ефект Холла (№2, 2014), роль квантової інтерференції та

дефазування (№3, 2014), роль електростатики і контактів (№4, 2014).

У цій заключній статті ми розглянемо потоки електронів і тепла через провідник з урахуванням навколишнього середовища й побудуємо опис рівноважної термодинаміки провідника зі струмом. Буде підкреслено роль у такому описі фоковських станів, та обговорено проблему накопичення інформації в нерівноважному стані. При цьому ми докладно проаналізуємо модель інформаційно-керованого акумулятора і її зв'язок із принципом Ландауэра щодо мінімальної енергії, необхідної для стирання одного біта інформації. Буде

введено поняття квантової ентропії та обговорено окремі аспекти його застосування. Ми наголосимо також на актуальності інтегрування спінтроники та магнетроники у зв'язку з майбутнім переходом до спінової архітектури обчислювальних пристроїв.

Наша стаття зорієнтована насамперед на викладачів, аспірантів і студентів, які читають курси або навчаються на різних спеціалізаціях фізичного й інженерного профілю, й має на меті популяризацію сучасної концепції викладання фізики наносистем, автором якої є проф. Супрійо Датта (Supriyo Datta), сформульованої в рамках ініціативи Purdue University / nanoHUB-U [www.nanohub.org/u] і до певної міри альтернативної традиційній, що відштовхується від розгляду аналогічних явищ у великих об'ємних провідниках.

Розглянемо потоки електронів і тепла в найпростішому електронному пристрої, що складається з провідника з двома контактами: виток S з електрохімічним потенціалом μ_1 при температурі T_1 і сток D з електрохімічним потенціалом μ_2 при температурі T_2 . Середовище, що оточує провідник, має температуру T_0 і обмінюється з провідником тільки теплом (наприклад, шляхом емісії або поглинання фононів або фотонів), але не електронами (рис. 1).

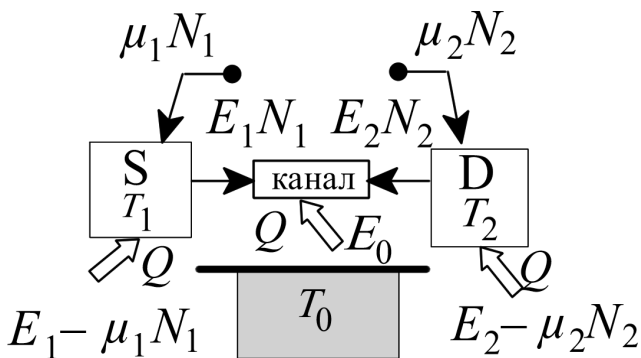


Рис. 1. Потоки електронів і тепла (показані стрілками) в найпростішому електронному пристрої.

Нехай N_1 електронів інжектуються в провідник контактом 1 і N_2 – контактом 2. Числа електронів N_1 і N_2 не можуть бути одного знаку: інжектування електронів у канал провідності призводить до впливу тієї ж кількості

електронів через контакт 2, так що

$$N_1 + N_2 = 0. \tag{1}$$

Задля повноти на рис.1 показаний також обмін теплом з навколишнім середовищем. Якщо провідником буде пружний резистор, то в нього обмін теплом з навколишнім середовищем відсутній [1].

Закон збереження енергії передбачає, що

$$E_1 + E_2 + E_0 = 0. \tag{2}$$

Це співвідношення є ще одним формулюванням першого закону термодинаміки.

Є, проте, ще одне обмеження, яке накладає другий закон термодинаміки, а саме:

$$\frac{E_1 - \mu_1 N_1}{T_1} + \frac{E_2 - \mu_2 N_2}{T_2} + \frac{E_0}{T_0} \leq 0. \tag{3}$$

Отже, перший закон термодинаміки описується рівністю, а другий – допускає нерівність. Якщо температура обох контактів збігається з температурою навколишнього середовища ($T_1 = T_2 = T_0$), то для сумарного тепла, поглинутого провідником, виконується співвідношення:

$$(E_1 - \mu_1 N_1) + (E_2 - \mu_2 N_2) + E_0 \leq 0. \tag{4}$$

З використанням першого закону термодинаміки (2) це означає, що

$$\mu_1 N_1 + \mu_2 N_2 \geq 0. \tag{5}$$

Іншими словами, повна енергія (2), яка зберігається в цьому процесі, складається з двох частин: теплової енергії, одержаної від навколишнього середовища (4), яка завжди від'ємна, і енергії (5), що постачається джерелом струму, яка завжди додатна. Це ж саме можна сформулювати по-інакшому: енергія, що постачається джерелом струму, може бути конвертована в тепло, а ось тепло, забране з навколишнього середовища, зарядити джерело струму не може.

Сформульоване твердження нікого не повинне дивувати. Якби ми могли теплом з навколишнього середовища заряджати акумулятор,

у нас не було б жодних проблем з джерелом енергії. Звернімо увагу на те, що це не суперечило б першому закону термодинаміки: сумарна енергія зберігалася б. Саме другий закон термодинаміки визначає відмінність між енергією, накопиченою в акумуляторі, і тепловою енергією навколишнього середовища. Першу легко конвертувати в другу, дисипувати як тепло, але не навпаки, оскільки тепла енергія розподілена по багатьох ступенях свободи. Ми можемо узяти енергію, запасену в стані з одним ступенем свободи, і розподілити її по багатьох ступенях свободи, але не можемо енергію, розподілену по багатьох ступенях свободи, сконцентрувати в стані, що має один ступінь свободи. Це інтуїтивне розуміння знайшло своє віддзеркалення в другому законі термодинаміки (3), що має неспростовні експериментальні підтвердження.

Пружний резистор не обмінюється теплом з навколишнім середовищем ($E_0 = 0$) і другий закон термодинаміки (3) для нього має вигляд:

$$\frac{\varepsilon - \mu_1}{T_1} N_1 + \frac{\varepsilon - \mu_2}{T_2} N_2 \leq 0, \quad (6)$$

де для однорівневого резистора мають місце співвідношення $E_1 = \varepsilon N_1$ і $E_2 = \varepsilon N_2$, (електрон, що до резистора входить і виходить з нього, має енергію ε). З урахуванням матеріального балансу (1) це означає, що

$$\left(\frac{\varepsilon - \mu_1}{T_1} - \frac{\varepsilon - \mu_2}{T_2} \right) N_1 \leq 0. \quad (7)$$

Фізика пружного резистора [1] завжди задовольняє цій умові, оскільки струм визначається різницею фермієвських функцій контактів $f_1 - f_2$, де

$$f_1(\varepsilon) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu_1}{kT}\right) + 1}, \quad (8)$$

$$f_2(\varepsilon) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu_2}{kT}\right) + 1}. \quad (9)$$

Число електронів N_1 набуває додатного значення (це відповідає потокові електронів від витоку в бік стоку), якщо

$$f_1(\varepsilon) > f_2(\varepsilon), \quad (10)$$

$$\frac{\varepsilon - \mu_1}{T_1} < \frac{\varepsilon - \mu_2}{T_2}. \quad (11)$$

Аналогічним чином, N_1 набуває від'ємного значення (що відповідає потоку електронів від стоку у бік витоку), якщо

$$\frac{\varepsilon - \mu_1}{T_1} > \frac{\varepsilon - \mu_2}{T_2}. \quad (12)$$

У будь-якому випадку другий закон термодинаміки для пружного резистора (7) виконується. Якщо ж мова піде про дифузійний резистор, що припускає обмін енергією з навколишнім середовищем, то виконання другого закону термодинаміки не є таким очевидним.

2. Асиметрія процесів поглинання і випромінювання енергії. Щоб другий закон термодинаміки виконувався, модель резистора повинна бути такою, щоб гарантувати, що для всіх процесів, які включають обмін енергією і електронами резистора з контактом, підтримуваним при електрохімічному потенціалі μ і температурі T , ймовірність інжектування електронів у канал провідності $P(+E, +N)$ відносилася до ймовірності прийому електронів з каналу провідності $P(-E, -N)$ (рис. 2) як:

$$\frac{P(+E, +N)}{P(-E, -N)} = e^{-(E - \mu N)/kT}. \quad (13)$$

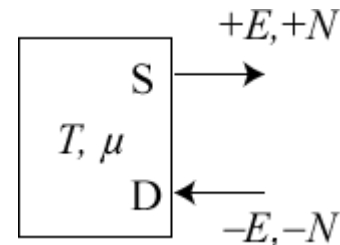


Рис. 2. Процеси поглинання провідником (інжектування) й «випромінювання» ним (прийомом контактом) енергії та електронів.

Якщо ж ідеться тільки про обмін енергією, але не електронами, то

$$\frac{P(+E)}{P(-E)} = e^{-E/kT}. \quad (14)$$

Переконаємося в тому, що співвідношення (13) і (14) гарантують виконання другого закону термодинаміки (3). Для цього розглянемо ситуацію на рис. 1, де обмін електронами та/або енергією відбувається в режимі трьох «терміналів». Ймовірність інжектування електронів у канал провідності пропорційна добутковій трьох ймовірностей:

$$P(+E_1, +N_1)P(+E_2, +N_2)P(+E_0), \quad (15)$$

а ймовірність зворотного процесу пропорційна

$$P(-E_1, -N_1)P(-E_2, -N_2)P(-E_0). \quad (16)$$

Домінування інжекції в канал над зворотним процесом (при цьому потік іде від витоку 1 до стоку 2) забезпечується значенням відношення цих двох ймовірностей, більшим від одиниці:

$$\frac{P(+E_1, +N_1)P(+E_2, +N_2)P(+E_0)}{P(-E_1, -N_1)P(-E_2, -N_2)P(-E_0)} \geq 1 \quad (17)$$

Якщо всі ці процеси описуються рівняннями (13) і (14), то

$$\exp\left(-\frac{E_1 - \mu_1 N_1}{kT_1}\right) \exp\left(-\frac{E_2 - \mu_2 N_2}{kT_2}\right) \exp\left(-\frac{E_0}{kT_0}\right) \geq 1 \quad (18)$$

звідки негайно випливає другий закон термодинаміки (3), якщо пригадати, що $\exp(-x)$ більше від одиниці, якщо x від'ємне.

Звернімо увагу на те, що рівність у другому законі термодинаміки (3) відповідає нескінченно малому превалюванню інжектування в резистор над зворотним процесом, так що сумарний струм нескінченно малий. Струм ростиме у міру посилення нерівності в (3).

Чому ми впевнені, що наша модель резистора задовольняє вимогам (13), (14)? Розглянемо резистор з одним розсіювальним центром,

ліворуч від якого енергія електрона рівна E_1 , а праворуч рівна $E_2 < E_1$ (рис. 3).

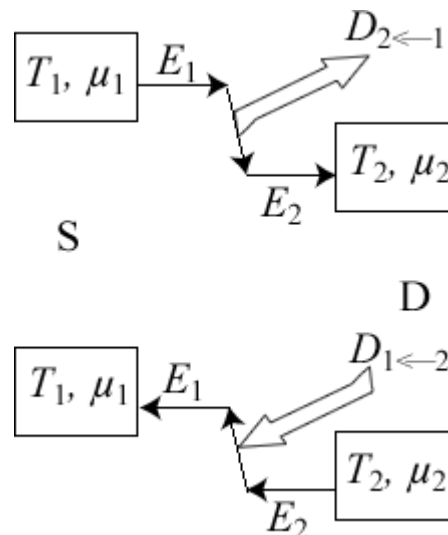


Рис. 3. Процеси виділення і поглинання енергії при перенесенні електронів з одного контакту на інший у провіднику з одним розсіювальним центром.

Ймовірність процесу перенесення електрона від контакту 1 до контакту 2 з виділенням енергії складає

$$D_{2\leftarrow 1} f_1(E_1)(1 - f_2(E_2)), \quad (19)$$

тоді як ймовірність зворотного процесу з поглинанням енергії є

$$D_{1\leftarrow 2} f_2(E_2)(1 - f_1(E_1)), \quad (20)$$

де $D_{2\leftarrow 1}$ і $D_{1\leftarrow 2}$ – швидкості відповідних процесів. Оскільки в одному процесі йдеться про виділення енергії, а в іншому – про її поглинання, то відповідні швидкості повинні відповідати закону (14), а, отже задовольняти співвідношення

$$\frac{D_{2\leftarrow 1}}{D_{1\leftarrow 2}} = e^{(E_1 - E_2)/kT_0}, \quad (21)$$

яким ми уже користувалися раніше (вираз (48) у [2]). Температура T_0 – це температура навколишнього середовища, з яким електрони обмінюються енергією.

Струм у такому непружному резисторі пропорційний до

$$I \sim D_{2 \leftarrow 1} f_1(E_1)(1 - f_2(E_2)) - D_{1 \leftarrow 2} f_2(E_2)(1 - f_1(E_1)) \quad (22)$$

і зводиться до знайомого виразу для пружного резистора

$$I \sim (f_1 - f_2) \quad (23)$$

за умови

$$D_{2 \leftarrow 1} = D_{1 \leftarrow 2}, \quad (24)$$

що відповідає пружному резистору з $E_2 = E_1$. На практиці провідники є складною сумішшю пружних і непружних «доменів», що перекриваються, і не існує простих виразів, які пов'язують струм з фермівськими функціями.

Отже, будь-яка модель каналу провідності з урахуванням обміну енергією повинна гарантувати дотримання відношення швидкостей виділення і поглинання енергії згідно до закону (21), якщо провідник перебуває в рівновазі з середовищем при температурі T_0 . Будь-яка транспортна напівкласична або квантова теорія, щоб не порушувати другий закон термодинаміки, повинна забезпечувати виконання закону (21), тобто повинна враховувати ентропійні процеси нарівні з механічними.

3. Ентропія. Асиметрія виділення і поглинання енергії настільки звична, що ми і не помічаємо її. Якщо мова йде, скажімо, про атом водню, і якщо його єдиний електрон перебуває у збудженому стані $2p$, то він негайно повернеться в основний стан $1s$ із виділенням енергії. Якщо ж електрон перебуває в стані $1s$, то він у цьому стані може залишатися нескінченно довго. Звичне пояснення полягає в тому, що електрон прагне зайняти стан з якнайменшою енергією.

Насправді в цьому поясненні немає нічого очевидного. Будь-яка класична або квантова взаємодія, переводячи електрон в основний стан, з таким же успіхом може перевести його з основного в початковий збуджений стан. Прагнення електрона зайняти стан з якнайменшою енергією, яке здається нам таким очевидним, має природу, зумовлену не класичною чи квантовою механікою, а ентропійними

законами (13) і (14), згідно з якими отримати енергію з навколишнього середовища набагато складніше, аніж випромінити її. При нульовій температурі система частинок може тільки випромінювати енергію, але не поглинати її. Так само і електрон у збудженому стані атома водню може тільки випромінювати енергію, переходячи в свій основний стан, що характеризується якнайменшою можливою енергією, але не поглинати її, переходячи в наступний, ще більш збуджений стан.

Тож яка природа переважання тенденції втратити енергію над тенденцією набувати її з навколишнього середовища? Рівняння (14) можна зрозуміти таким чином. Коли електрон втрачає енергію в провіднику, контакт («середовище») набуває енергію, і відношення швидкості втрати енергії до швидкості набуття енергії дорівнює відношенню густини станів при енергії $E_0 + \varepsilon$ до густини станів при E_0 (рис. 4):

$$\frac{P(-\varepsilon)}{P(+\varepsilon)} = \frac{W(E_0 + \varepsilon)}{W(E_0)}, \quad (25)$$

де $W(E)$ – число станів, доступних в області енергії E в контакті, яке пов'язане з ентропією співвідношенням Больцмана

$$S = k \ln W, \quad (26)$$

отже

$$\frac{P(-\varepsilon)}{P(+\varepsilon)} = \exp \frac{S(E_0 + \varepsilon) - S(E_0)}{k}. \quad (27)$$

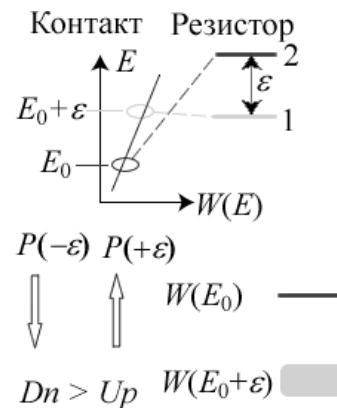


Рис. 4. Електрони вважають за краще знижувати свою енергію, оскільки енергія, що виділяється при цьому, переходить у середовище з більшою густиною станів.

Вважаючи зміну енергії ε малою порівняно з енергією середовища E_0 , можна записати:

$$S(E_0 + \varepsilon) - S(E_0) = \varepsilon \left(\frac{dS}{dE} \right)_{E=E_0} = \frac{\varepsilon}{T}, \quad (28)$$

де температура визначається виразом

$$\frac{1}{T} = \left(\frac{dS}{dE} \right)_{E=E_0}. \quad (29)$$

Це – принципово важливий результат. Він показує, що, незалежно від того, як влаштоване навколишнє середовище, коли воно перебуває в рівновазі з системою частинок, яку ми вивчаємо, похідна від енергії системи по ентропії є температура системи. Якщо ми приймаємо таке визначення температури, то рівняння Больцмана (26) стає основою, яка дозволяє розглядати обмін енергією між системою і середовищем, що знаходяться в рівновазі при температурі T :

$$\frac{P(-\varepsilon)}{P(+\varepsilon)} = e^{\varepsilon/kT}, \quad (30)$$

що вже стверджувалося раніше в виразі (14).

Якщо емісія енергії контактом супроводжується також емісією ним електрона (рис. 2), який покидає контакт з енергією μ , тоді ε потрібно замінити на $\varepsilon - \mu$ відповідно до виразу (13).

3.1. Ентропія завжди збільшується.

Поняття ентропії ми визначили. Тепер можна другий закон термодинаміки (3) переписати інакше. З рис. 1 випливає, що $E_1 - \mu_1 N_1$ – це енергія, якою система обмінюється з середовищем при температурі T_1 , $E_2 - \mu_2 N_2$ – енергія, обмінювана при температурі T_2 , E_0 – енергія, обмінювана при температурі T_0 .

Спираючись на визначення температури за (28), (29), ці енергії можна переписати через зміни ентропії:

$$\begin{aligned} (\Delta S)_1 &= \frac{-(E_1 - \mu_1 N_1)}{T_1}, & (\Delta S)_0 &= \frac{-E_0}{T_0}, & (31) \\ (\Delta S)_2 &= \frac{-(E_2 - \mu_2 N_2)}{T_2}. \end{aligned}$$

Вийшли ті ж самі вирази (за винятком знака «мінус»), що й доданки в записі другого закону термодинаміки у вигляді нерівності (3). Підставивши ці вирази в (3), отримуємо:

$$(\Delta S)_1 + (\Delta S)_2 + (\Delta S)_0 \geq 0. \quad (32)$$

Остаточно, другий закон термодинаміки у застосуванні до найпростішого електронного пристрою, який ми розглядаємо (рис. 1), стверджує, що при проходженні через провідник струму сумарна зміна ентропії при транспорті електронів і обміні енергією з навколишнім середовищем завжди додатна.

3.2. Вільна енергія завжди зменшується.

При нульовій температурі будь-яка система частинок, досягаючи рівноваги з навколишнім середовищем, переходить у стан з якнайменшою можливою енергією. Як уже згадувалося, це пов'язано з тим, що при нульовій температурі система частинок може тільки випромінювати енергію, але не поглинати її. При ненульовій температурі можна визначити так звану вільну енергію

$$F = E - TS, \quad (33)$$

таку, що система частинок у рівновазі з навколишнім середовищем перебуває в стані з якнайменшою вільною енергією. При нульовій температурі вільна енергія F збігається з повною енергією системи E .

Переконатися в цьому можна так: розгляньмо систему S , яка обмінюється енергією з навколишнім середовищем R , при цьому повна енергія зберігається. Випишемо перший і другий закони термодинаміки для складної системи $S + R$:

$$(\Delta E)_S + (\Delta E)_R = 0, \quad (34)$$

$$(\Delta S)_S + (\Delta S)_R \geq 0. \quad (35)$$

Оскільки

$$(\Delta S)_R = \frac{(\Delta E)_R}{T}, \quad (36)$$

то, підставляючи (36) у (35) і комбінуючи з

(34), одержуємо:

$$(\Delta E)_S - T(\Delta S)_S \equiv (\Delta F)_S \leq 0. \quad (37)$$

Таким чином, усі процеси з обміном енергії, що підкоряються першому і другому законам термодинаміки, знижують вільну енергію системи, а, прийшовши в рівновагу з навколишнім середовищем, система виявляється в стані з найменшою можливою вільною енергією.

4. Універсальний закон рівноваги Больцмана. Тенденція переважно втрачати енергію, а не набувати її з навколишнього середовища, описувана виразами (13) і (14), веде до універсального закону, який стверджує подальше: будь-яка рівноважна система, що має стани i з енергіями E_i та числом частинок N_i , перебуває в цих станах з імовірністю

$$p_i = \frac{1}{Z} e^{-(E_i - \mu N_i)/kT}, \quad (38a)$$

де Z – нормувальна константа, яка вводиться так, щоб сума всіх імовірностей, визначених у (38), дала одиницю:

$$\sum_i p_i = 1. \quad (38b)$$

Щоб переконатися в цьому, повернімося до рівняння (13). Нехай ми маємо систему з двома станами, в якій відбувається обмін електронами і енергією з навколишнім середовищем (рис. 5).

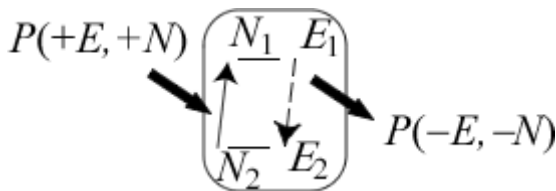


Рис. 5. Переходи в системі з двома станами.

В стані рівноваги вимагається, щоб переходи між станами врівноважували один одного, а саме:

$$p_2 \cdot P(+E, +N) = p_1 \cdot P(-E, -N). \quad (39)$$

Звертаючись до рівняння (13), одержуємо

$$\frac{p_1}{p_2} = \frac{P(+E, +N)}{P(-E, -N)} = e^{-((E_1 - \mu N_1) - (E_2 - \mu N_2))/kT}, \quad (40)$$

і переконуємося, що ймовірності (38) задовольняють цій вимозі, і, таким чином, правильно описують стан рівноваги.

Чим обумовлена універсальність закону рівноваги (38)? Чому він розповсюджується на будь-які системи, незалежно від їхнього внутрішнього устрою? Тому що, як уже згадувалося, він пов'язаний з властивостями середовища, що оточує систему, а не з самою системою.

Вираз (38) є основний постулат рівноважної статистичної механіки, відомий як закон Больцмана. Річард Фейнман назвав його «вершиною» (англ. «summit» [3]). Ми дотепер користуємося класичним розподілом Максвелла – Больцмана, та квантовими розподілами Фермі – Дірака і Бозе – Ейнштейна (пригадаймо опис перенесення тепла фононами [4]). Всі три розподіли описуються виразом:

$$f_i = \frac{1}{e^{(E_i - \mu)/kT} + \gamma}, \quad (41)$$

де для статистики Фермі – Дірака $\gamma = +1$, для статистики Бозе – Ейнштейна $\gamma = -1$, а для статистики Максвелла – Больцмана $\gamma = 0$.

Розподіл Максвелла – Больцмана є граничним переходом і для фермівського, і для бозевського розподілів при $E - \mu(\hbar\omega) \gg kT$. Однак, в області енергій порядку kT ці два розподіли поведуться істотно різним чином (рис. 6).

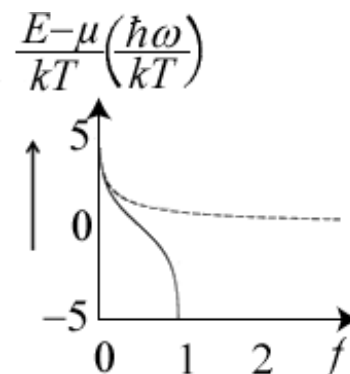


Рис. 6. Поведінка функцій Фермі (суцільна) і Бозе (пунктир) в області енергій порядку kT .

Фермівська заселеність квантового стану обмежена значеннями 0 і 1, що є наслідком дії принципу заборони Паулі, а бозевська заселеність не обмежена нічим – тут один стан може вмістити як завгодно багато частинок.

Важливо відзначити, що обидва розподіли – і фермівський і бозевський – є спеціальними випадками більш загального закону Больцмана (38). Щоб продемонструвати це твердження, потрібно звернутися до концепції простору Фока [5]. Річ у тому, що енергії станів E_p , які фігурують у законі Больцмана (38), не є енергіями одноелектронних станів, як це ми дотепер зазвичай вважали. Ці стани є станами в просторі Фока, який лежить в основі техніки вторинного квантування, що використовується в сучасних методах квантової хімії [6–9], а оператори вторинного квантування народження і знищення винятково зручні для опису електронної структури молекул, наприклад, поліенів [10, 11] і кумуленів [12].

5.1. Стани в просторі Фока: ферміони.

Ми вже фактично використовували поняття фоківських станів на рис. 5. Розгляньмо просту систему з одним рівнем енергії ε (рис. 7). У концепції одноелектронних станів електрон може зайняти або покинути цей стан. У концепції простору Фока розглядають два можливі стани цієї системи: один відповідає незайнятому електроном стану з енергією $E = 0$, а другий – зайнятому електроном стану з енергією $E = \varepsilon$. Знаходження системи у тому або іншому стані залежить від того, чи є електрон у системі, чи ні.

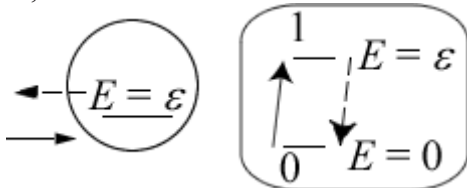


Рис. 7. Одноелектронний стан (ліворуч) і фоківські стани для системи (праворуч).

Застосувавши закон Больцмана (38) до такої системи в просторі Фока, для ймовірності відсутності електрона в системі, та його присутності там одержуємо:

$$p_0 = 1/Z; \quad p_1 = e^{-x}/Z, \quad (42)$$

де $x \equiv (\varepsilon - \mu)/kT$. Оскільки сума ймовірностей нормується до одиниці (38а), то

$$Z = 1 + e^{-x}, \quad (43)$$

$$p_0 = \frac{1}{e^{-x} + 1} = 1 - f_0(\varepsilon), \quad (44)$$

$$p_1 = \frac{e^{-x}}{e^{-x} + 1} = \frac{1}{e^x + 1} = f_0(\varepsilon), \quad (45)$$

де праву рівність у (45) ми записали з урахуванням (41). Отже, ймовірність p_1 того, що система зайнята електронем, це просто функція Фермі, а ймовірність p_0 того, що електрон покинув систему, дорівнює одиниці мінус функція Фермі.

5.2. Стани в просторі Фока: бозони.

Розподіл Бозе також впливає із закону Больцмана (38). Тепер його потрібно застосувати до системи, в якій число частинок (наприклад, фотонів або фононів) може бути будь-яким, а одній частинці відповідає енергія $\hbar\omega$ (рис. 8).

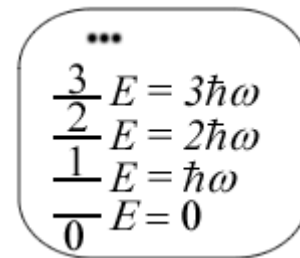


Рис. 8. Фоківські стани для фононів і фотонів.

Згідно до закону Больцмана, ймовірність того, що система заповнена N бозонами, дорівнює:

$$p_N = \frac{e^{-Nx}}{Z}, \quad (46)$$

де $x \equiv \hbar\omega/kT$. З нормування суми всіх ймовірностей до одиниці маємо:

$$Z = \sum_{N=0}^{\infty} e^{-Nx} = \frac{1}{1 - e^{-x}}, \quad (47)$$

Отже, середнє число бозонів у системі є

$$n = \sum_{N=0}^{\infty} N p_N = \frac{1}{Z} \sum_{N=0}^{\infty} N e^{-Nx}. \quad (48)$$

З урахуванням того, що сума праворуч дорівнює

$$\sum_{N=0}^{\infty} N e^{-Nx} = -\frac{d}{dx} \sum_{N=0}^{\infty} e^{-Nx} = -\frac{d}{dx} Z, \quad (49)$$

остаточно одержуємо функцію Бозе (41)

$$n = \frac{1}{e^x - 1}. \quad (50)$$

Причину, через яку у фермівській функції для електронів фігурує енергія $E - \mu$, а у разі фононів і фотонів – лише $\hbar\omega$, а не $\hbar\omega - \mu$, можна наочно пояснити так: коли електрон покидає провідник і входить у контакт з енергією E , він релаксує до енергії μ , характерної для цього контакту, а різниця $E - \mu$ дисипує. У випадку ж фононів і фотонів з енергією $\hbar\omega$, випромінених або поглинутих, дисипує вся їх енергія $\hbar\omega$. Друге, традиційне пояснення (застосовне до макросистем) полягає в тому, що для системи N ферміонів (вважаємо, що це число для системи задане і незмінне) хімпотенціал μ можна ввести зі співвідношення:

$$N = \sum_i f_i,$$

де f_i – фермівська функція (41), а сума береться за всіма можливими квантовими станами системи. А для бозонів, число яких у системі змінне (фонони, наприклад, народжуються і гинуть зі зміною температури), це співвідношення уже незастосовне, і саме поняття хімпотенціалу втрачає сенс. Однак для транспортних задач у мезосистемах більш фізичним є саме перше пояснення.

5.3. Взаємодіючі електрони.

Закон рівноваги Больцмана (38), у принципі, дозволяє також описувати рівноважний

стан складної системи взаємодіючих частинок, якщо, звісно, вдасться обчислити енергії відповідних фоківських станів. Розгляньмо систему з двох взаємодіючих одноелектронних станів (рис. 9). Їм відповідають чотири фоківські стани 00, 01, 10 і 11. В останньому стані є два електрони, і вони взаємодіють один з одним з енергією U_0 .

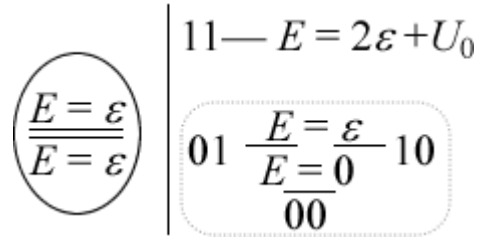


Рис. 9. Два взаємодіючі одноелектронні стани і чотири фоківські стани, які їм відповідають.

Яка буде заселеність системи електронами, якщо ця система перебуває в рівновазі з електростатичним потенціалом μ ?

Знову введемо позначення $x \equiv (\varepsilon - \mu) / kT$. Тоді, згідно до закону Больцмана (38), маємо:

$$p_{00} = \frac{1}{Z}; \quad p_{01} = p_{10} = \frac{e^{-x}}{Z}; \quad p_{11} = \frac{e^{-2x}}{Z} e^{-U_0/kT}. \quad (51)$$

Середнє число електронів у системі є

$$n = 0 \cdot p_{00} + 1 \cdot p_{01} + 1 \cdot p_{10} + 2 \cdot p_{11} = \frac{2}{Z} (e^{-x} + e^{-2x} e^{-U_0/kT}). \quad (52)$$

Цю задачу корисно розглянути для заданого значення енергії взаємодії електронів, але ми тут обмежимося лише граничними випадками. Перш за все для випадку невзаємодіючих електронів ($U_0 \rightarrow 0$) одержуємо:

$$Z = 1 + 2e^{-x} + e^{-2x} = (1 + e^{-x})^2. \quad (53)$$

Отже, середнє число електронів

$$n = 2 \frac{1}{e^{(\varepsilon - \mu)/kT} + 1} \quad (U_0 \rightarrow 0) \quad (54)$$

– це просто подвоєне значення фермівської функції, чого й слід було чекати, оскільки йдеться про два невзаємодіючі стани.

Другий граничний випадок – це сильно взаємодіючі електрони з $U_0 \rightarrow \infty$. У цьому випадку, згідно з (51) і з урахуванням того, що енергія взаємодії додатна, $p_{II} = 0$, й тому одержуємо:

$$Z = 1 + 2e^{-x}, \quad (55)$$

$$n = \frac{1}{\frac{1}{2}e^{(\varepsilon-\mu)/kT} + 1}. \quad (U_0 \rightarrow \infty) \quad (56)$$

Цей результат уже не видається очевидним і таким, що впливає з розподілу Фермі. Так само можна показати, що у разі g одноелектронних станів

$$n = \frac{1}{\frac{1}{g}e^{(\varepsilon-\mu)/kT} + 1}. \quad (U_0 \rightarrow \infty) \quad (57)$$

Цей результат добре відомий у фізиці напівпровідників для числа локалізованих станів електронів на домішкових центрах.

Таким чином, ми показали, як закон Больцмана (38) можна переформулювати через одноелектронні стани для невзаємодіючих електронів. Надалі ми покажемо, як зробити те ж саме для ентропії (26).

6. Альтернативний вираз для ентропії. Розгляньмо систему невзаємодіючих локалізованих спінів, наприклад, магнітних домішок у каналі провідності. В стані рівноваги половина спінів випадковим чином орієнтована вгору, а інша половина – вниз (рис. 10).

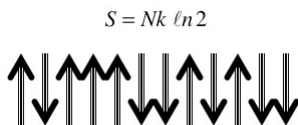


Рис. 10. Ентропія рівноважної системи N локалізованих спінів.

Вираз (26) визначає ентропію як $S = k \ln W$, де W є повне число фоківських станів, доступних даній системі. В нашому випадку кожному спіну доступні два стани – «вгору» і «вниз», тому N спінам доступні 2^N і ен-

тропія дорівнює:

$$S = k \ln W = Nk \ln 2. \quad (58)$$

Але існує ще й альтернативний вираз для ентропії, яким можна користуватися завжди, коли ми розглядаємо систему, що складається з великого числа однакових невзаємодіючих підсистем, наприклад, тих же N локалізованих спінів, а саме:

$$S = -Nk \sum_i \tilde{p}_i \ln \tilde{p}_i, \quad (59)$$

де \tilde{p}_i є ймовірність знайти окрему підсистему в i -ому стані. В нашому прикладі окремий спін характеризується ймовірністю бути виявленим у стані «вгору» або «вниз», і тому вираз (59) дає

$$S = -Nk \left(\frac{1}{2} \ln \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \ln \frac{1}{2} \right) = Nk \ln 2. \quad (60)$$

Це – точнісінько той самий результат, що ми отримали раніше (58) на основі традиційного визначення ентропії (26).

Однак формула (59) гнучкіша в порівнянні з (26) в тому сенсі, що ймовірності \tilde{p}_i можуть набувати довільних значень для кожної з підсистем в i -ому стані. До того ж, вона дивовижно схожа на вираз для шеннонівської ентропії, асоційованої з кількістю інформації в рядку з N символів, кожний з яких може набувати i різних значень з ймовірністю \tilde{p}_i . Нижче ми ще повернемося до шеннонівської ентропії і розглянемо її детально стосовно електроніки.

А тепер покажемо, як формула (59) впливає з формули (26) [13]. Розглянемо дуже велике число N ідентичних підсистем, кожна з набором станів $\{E_i\}$, заселених з ймовірностями $\{\tilde{p}_i\}$ такими, що число цих підсистем у стані i визначається виразом

$$N_i = N \tilde{p}_i. \quad (61)$$

Повне число можливостей отримати набір підсистем $\{N_i\}$ згідно з відомим виразом комбінаторики дорівнюватиме:

$$W = \frac{N!}{N_1!N_2!N_3!\dots} \quad (62)$$

Використовуючи формулу Стірлінга для великих n

$$\ln n! \cong n \ln n - n, \quad (63)$$

одержуємо:

$$\ln W = \ln N! - \ln N_1! - \ln N_2! - \ln N_3! - \dots \cong$$

$$\cong N \ln N - N\tilde{p}_1 \ln N\tilde{p}_1 - N\tilde{p}_2 \ln N\tilde{p}_2 - N\tilde{p}_3 \ln N\tilde{p}_3 - \dots \quad (64)$$

Враховуючи нормування всіх імовірностей $\{\tilde{p}_i\}$ до одиниці, одержуємо

$$\ln W = -N(\tilde{p}_1 \ln \tilde{p}_1 + \tilde{p}_2 \ln \tilde{p}_2 + \tilde{p}_3 \ln \tilde{p}_3 + \dots) = -N \sum_i \tilde{p}_i \ln \tilde{p}_i, \quad (65)$$

що і встановлює відповідність між формулами для ентропії (59) і (26).

6.1. Рівноважний розподіл як наслідок вимоги мінімуму вільної енергії.

В загальному випадку система може перебувати в довільному стані (не обов'язково рівноважному), в якому кожний рівень енергії E_i заселений з імовірністю \tilde{p}_i . Для рівноважного ж стану, згідно до закону Больцмана (38),

$$[\tilde{p}_i]_{eq} = \frac{1}{Z} e^{-E_i/kT} \equiv p_i. \quad (66)$$

Ми також уже знаємо, що рівноважний стан характеризується мінімумом вільної енергії (33). Покажемо, що зі всіх можливих виборів імовірності $\{\tilde{p}_i\}$ тільки рівноважні розподіли $\{p_i\}$ мінімізують вільну енергію.

Енергія системи дорівнює:

$$E = \sum_i E_i \tilde{p}_i. \quad (67)$$

Скористаємося виразом для питомої ентропії S/N з визначення ентропії згідно з (59) і випишемо вільну енергію у вигляді

$$F = \sum_i \tilde{p}_i (E_i + kT \ln \tilde{p}_i). \quad (68)$$

Такий вираз дозволяє мінімізувати вільну енергію за змінними, що входять до $\{\tilde{p}_i\}$:

$$dF = \sum_i d\tilde{p}_i (E_i + kT \ln \tilde{p}_i) = 0. \quad (69)$$

При цьому слід урахувати, що

$$\sum_i d\tilde{p}_i = 0, \quad (70)$$

оскільки сума всіх імовірностей нормована на одиницю.

Гарантувати ж рівність dF нулю при довільному виборі $d\tilde{p}_i$ можна, лише поклавши

$$E_i + kT \ln \tilde{p}_i = 0, \quad (71)$$

що й веде нас до рівноважної ймовірності (66).

Якщо ж система не перебуває в рівновазі, то можна скористатися виразом (68) для розрахунку вільної енергії в нерівноважному стані (якщо нам тільки відомі ймовірності \tilde{p}_i), і ми отримаємо більше значення вільної енергії, в порівнянні з її рівноважним значенням.

В роботі [14] стверджується, що можна побудувати такий пристрій, який надлишок вільної енергії в нерівноважному стані системи

$$\Delta F = F - F_{eq} \quad (72)$$

перетворить на корисну роботу. Цей надлишок складається з двох частин:

$$\Delta F = \Delta E - T\Delta S, \quad (73)$$

де ΔE – надлишок реальної енергії, а ось другий доданок містить зміну ентропії, яку можна пов'язати з інформацією, що дозволяє конвертувати енергію з навколишнього середовища в корисну роботу. Далі ми викладемо цю «вибухову концепцію» детальніше.

7. Глобальна цінність інформації. Система в рівноважному стані не містить інформації, оскільки стан рівноваги не залежить від передісторії системи, що опинилася в своєму рівноважному стані. Зазвичай інформація міститься в системі, яка «застрягла» в якомусь своєму нерівноважному стані. У [14] стверджується, що, маючи таку нерівноважну систему, можна побудувати пристрій, який може

екстрагувати енергію, обмежену згори значенням

$$E_{avail} = F - F_{eq}, \quad (74)$$

де F – вільна енергія нерівноважної системи, F_{eq} – вільна енергія системи, що прийшла в стан рівноваги. Наведемо міркування на користь такого твердження.

Повернімося до рис. 1. Нехай температура обох контактів однакова і рівна T , а середовище перебуває в метастабільному стані, й тому електрони в провіднику взаємодіють з нерівноважним середовищем. У цьому випадку про якусь визначену температуру середовища говорити не випадає.

Наприклад, у системі невзаємодіючих спінів у рівноважному стані при будь-якій температурі половина спінів перебуває у стані «вгору», а друга половина – в стані «вниз» (рис. 11).

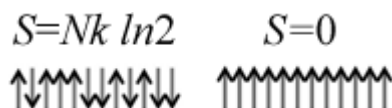


Рис. 11. Рівноважна (ліворуч) і нерівноважна (праворуч) системи локалізованих спінів.

Якщо ж систему перевести в нерівноважний стан зі всіма спінами «вгору», то неможливо говорити про температуру такої системи, а ентропію за (59) обчислити можна, і вона виявиться в цьому випадку рівною нулеві.

Повернімося до нашого прикладу з середовищем у нерівноважному стані. Замінюючи $\frac{E_0}{T_0}$ на $-\Delta S$, другий закон термодинаміки (3) перепишемо у вигляді

$$\frac{E_1 - \mu_1 N_1}{T_1} + \frac{E_2 - \mu_2 N_2}{T_2} - \Delta S \leq 0, \quad (75)$$

а закон збереження енергії (2) вимагає виконання рівності

$$E_1 + E_2 = -E_0 \equiv \Delta E, \quad (76)$$

де ΔE – зміна енергії навколишнього середовища.

При рівності температур контактів ($T_1 = T_2 \equiv T$) і очевидній рівновазі струмів (1)

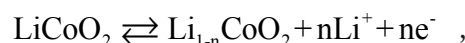
з урахуванням (76) з другого закону термодинаміки для середовища в нерівноважному стані (75) одержуємо:

$$(\mu_1 - \mu_2) N_1 \geq \Delta E - T \Delta S = \Delta F. \quad (77)$$

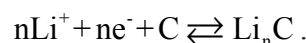
Звичайно, зміна вільної енергії ΔF може бути тільки додатною, оскільки система в рівноважному стані при виході з рівноваги може тільки збільшити вільну енергію. Тоді (77) вимагає, щоб число електронів N_1 , інжектване лівим контактом 1 у провідник (рис. 1), було одного знаку з різницею електрохімічних потенціалів $\mu_1 - \mu_2$, прикладених до провідника: отже, електрони рухаються від контакту з вищим хімпотенціалом до контакту з нижчим, як це і повинно бути.

В нашому ж випадку ситуація незвичайна: система перебуває в нерівноважному стані і прагне перейти в рівноважний стан, так що $\Delta F < 0$ і N_1 може мати знак, протилежний до знаку різниці $\mu_1 - \mu_2$, не порушуючи при цьому умови (77). Електрони можуть переходити від контакту з нижчим електрохімічним потенціалом до контакту з вищим, як це відбувається при зарядці акумулятора.

Основний висновок такий: метастабільний нерівноважний стан системи, в принципі, може бути використаний для конструювання акумулятора. Візьмімо, наприклад, літій-іонний акумулятор. Заряджений акумулятор перебуває в метастабільному стані з надміром іонів Li^+ , інтеркальованих у графітний анод. Коли акумулятор розряджається, постачаючи електрони в зовнішнє електричне коло, іони Li^+ дифундують на катод, що містить, наприклад, LiCoO_2 . При зарядці акумулятора йдуть обернені процеси. Наведемо як приклад окислювально-відновні реакції на позитивному електроді



і на негативному електроді



Розрядившись, акумулятор переходить у рівноважний стан з якнайменшим значенням вільної енергії. Максимальна енергія, яка може

бути отримана при роботі акумулятора, це зміна його вільної енергії.

Звичайно, зміна вільної енергії (77) завдячує зміні в реальній енергії E . Якщо нерівноважна система характеризується енергією E , а з переходом у рівноважний стан її енергія зменшується до E_{eq} , то при вдалому інженерному вирішенні пристрою різницю $E - E_{eq}$ можна перетворити на корисну роботу.

Разом з тим не видно причини, чому зміну в ентропії при переході з нерівноважного стану в рівноважний не можна було б використовувати для здійснення корисної роботи. Візьмімо для прикладу систему локалізованих невзаємодіючих спінів у нерівноважному стані, коли всі спіни орієнтовані «вгору» (рис. 11). В цьому стані ентропія системи дорівнює нулеві. Коли ми переведемо систему в рівноважний стан, у якому спіни розподілені порівну за проекціями «вгору» і «вниз», енергія залишається колишньою, але ентропія збільшується:

$$\Delta E = 0, \quad \Delta S = Nk \ln 2, \quad \Delta F = \Delta E - T\Delta S = -NkT \ln 2. \quad (78)$$

Згідно до (77), повинна існувати принципова можливість побудувати такий пристрій, який виробить енергію $NkT \ln 2$. (Слід розуміти: з практичної точки зору $NkT \ln 2$ дає ~ 2.5 кДж/моль, що на 2 – 3 порядки менше за теплотворну здатність вугілля і нафти, яка забезпечується, перш за все, величиною ΔE). У роботі [14] пропонується такий пристрій реалізувати як спіновий клапан з антипаралельною орієнтацією намагніченості контактів [15]. Далі ми розглянемо цей пристрій докладніше.

Концептуально ситуація в такому випадку незвичайна. Отриманий виграв в енергії пов'язаний не з системою спінів, енергія яких не змінилася, а з навколишнім середовищем. Отже, енергія отримана з навколишнього середовища. Стандартно другий закон термодинаміки забороняє отримання енергії з навколишнього середовища для виконання корисної роботи. Проте, інформація, що міститься в нерівноважному стані системи у вигляді «негативної ентропії», дозволяє одержувати енергію з навколишнього середовища, не порушуючи при цьому другий закон термодинаміки.

Скористаємося визначенням вільної енергії $F = E - TS$ і перепишемо праву частину рівняння (74) як:

$$E_{avail} = (E - E_{eq}) + T(S_{eq} - S), \quad (79)$$

виокремивши при цьому реальну енергію $(E - E_{eq})$ та «інформаційну енергію» $T(S_{eq} - S)$, яку можна видобути з навколишнього середовища внаслідок використання інформації, доступної нам у формі дефіциту ентропії S щодо її рівноважного значення S_{eq} . В наведеному прикладі з системою локалізованих спінів доступна для перетворення в корисну роботу енергія вся повністю є інформаційною енергією, оскільки зміна реальної енергії дорівнює нулеві.

8. Інформаційно-керований акумулятор.

Розглянемо докладніше пристрій для видобування «інформаційної енергії» з системи локалізованих спінів. Він може являти собою спіновий клапан з антипаралельною орієнтацією намагніченості контактів, в якому феромагнітний витік може інжектувати в провідник і екстрагувати з провідника тільки електрони зі спіном «вгору», а феромагнітний стік – тільки електрони зі спіном «вниз» (рис. 12).

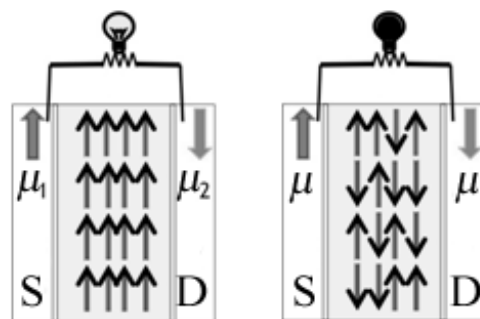
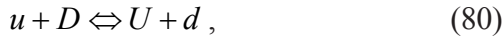


Рис. 12. Інформаційно-керований акумулятор для отримання надлишку вільної енергії з системи багатьох локалізованих спінів: в зарядженому нерівноважному стані всі спіни перебувають у стані «вгору» (ліворуч); акумулятор «сідає» після рандомізації всіх спінів і переходу системи в рівноважний стан з рівним числом спінів «вгору» і «вниз» (праворуч).

Канальні електрони в провіднику вступають у обмінну реакцію з локалізованими спінами:



де u і d – вільні електрони в провіднику зі спіном «вгору» і «вниз», а U і D – локалізовані спіни з такою самою проекцією.

Звичайно, така обмінна реакція повинна йти в обидві сторони з однаковою швидкістю. Нехай ми починаємо із зарядженого нерівноважного стану з $U \gg D$, і в зовнішньому колі йде струм. Превалюватиме при цьому обмінна реакція (80), що йтиме справа наліво: надлишок каналних електронів u витягується з провідника лівим контактом, а недостача електронів d компенсується правим контактом. По деякому часі встановлюється рівновага з однаковим числом локалізованих спинів $U = D$, обмінна реакція піде з однаковою швидкістю в обох напрямках, виділення енергії припиниться і акумулятор розрядиться.

Яка кількість енергії може бути отримана під час переходу ($U \gg D$) \Rightarrow ($U = D$)? Відповідь ми вже наводили: $NkT \ln 2$. Чи отримаємо ми той самий результат в ході стандартного аналізу такого акумулятора? В припущенні малої взаємодії в обмінній реакції (80) можна чекати, що електрони u перебувають у рівновазі з контактом 1, а електрони d – у рівновазі з контактом 2, отже

$$f_u(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu_1}{kT}\right) + 1}, \quad (81)$$

$$f_d(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu_2}{kT}\right) + 1}. \quad (82)$$

У припущенні малої швидкості реакції (80), коли система майже збалансована, можна вважати, що

$$P_D f_u (1 - f_d) = P_U f_d (1 - f_u), \quad (83)$$

і тоді для ймовірностей знаходження локалізованого спіна у стані «вгору» або «вниз» маємо:

$$\frac{P_U}{P_D} = \frac{f_u}{1 - f_u} \frac{1 - f_d}{f_d} = e^{\Delta\mu/kT}, \quad (84)$$

де $\Delta\mu \equiv \mu_1 - \mu_2$. Отже, знаючи хімпотенціали на контактах, ми отримали відношення числа локалізованих спинів з проекціями U і D . Інакше кажучи, різниця хімпотенціалів породжується відхиленням від рівноваги між станами локалізованих спинів U і D :

$$\Delta\mu = kT \ln \frac{P_U}{P_D}. \quad (85)$$

Спочатку різниця хімпотенціалів велика через істотне переважання числа спинів U над спінами D , проте, з часом розподіл спинів вирівнюється, і це призводить до вирівнювання хімпотенціалів на контактах і до припинення струму.

Обмінна реакція (80) зводиться до того, що кожного разу, коли спін D перетворюється на спін U , електрон зі спіном u перетворюється на d , який виводиться з провідника через стік. І навпаки, коли U перетворюється на D , електрон зі спіном d перетворюється на u , який виводиться з провідника через витік. Повне число електронів, які переносяться від витоку S до стоку D, дорівнює недостачі спинів U у порівнянні зі спінами D :

$$n_{S \rightarrow D} = -\Delta N_U. \quad (86)$$

Отримувана енергія як добуток різниці хімпотенціалів на число електронів, перенесених з початкового нерівноважного стану в кінцевий рівноважний, дорівнює:

$$E = - \int_{Ini}^{Fin} \Delta\mu dN_U. \quad (87)$$

Підстановка (85) до (87) дає:

$$E = -NkT \int_{Ini}^{Fin} (\ln P_U - \ln P_D) dP_U. \quad (88)$$

Оскільки $dP_U + dP_D = 0$ і враховуючи, згідно з (59), те, що

$$S = -Nk (P_U \ln P_U + P_D \ln P_D), \quad (89)$$

підінтегральний вираз у (88) можна переписати як:

$$(\ln P_U - \ln P_D) dP_U = d(P_U \ln P_U + P_D \ln P_D) = -dS / Nk. \quad (90)$$

Звідси ми отримуємо:

$$E = T \int_{Ini}^{Fin} dS = T \Delta S, \quad (91)$$

що і є основним очікуваним результатом, а саме: метастабільний стан зі всіма спінами «вгору» може бути в принципі використаний для конструювання акумулятора, який подає в зовнішнє коло енергію:

$$T \Delta S = NkT \ln 2. \quad (92)$$

8.1. Важливо знати детальну інформацію.

Дотепер ми стверджували, що система зі всіма спінами «вгору» має більшу вільну енергію в порівнянні з рандомізованою системою спінів у рівноважному стані, і що цю різницю у вільній енергії в принципі можна екстрагувати й перетворити на корисну роботу за допомогою відповідного пристрою. А що робить рандомізовану систему настільки відмінною від впорядкованої системи? Як колись зауважив Річард Фейнман, здається незвичайним зустріти на дорозі автомашину з номером 9999, в порівнянні з якимсь безликим номером, наприклад, 7048. Проте по суті ці індивідуальні номери нічим не відрізняються один від одного. Аналогічно, якщо спіни розташовані нехай у випадковому, але точно відомому нам порядку, то ентропія такої системи теж може бути прийнята рівною нулеві, як і в разі, коли точно відомо, що всі спіни направлені «вгору». Можливість отримати енергію виникає не від того, що в початковому стані всі спіни направлені «вгору», а від точного знання, в якому саме стані перебуває кожний спіл. Погляньмо, наприклад, на систему на рис. 13.

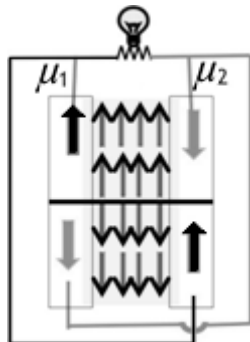


Рис. 13. Інформаційно-керований двосекційний акумулятор з перемиканням намагніченостей контактів.

Тут система спінів не зовсім рандомізована, але загалом половина спінів направлена «вгору», а друга половина – «вниз». При стандартному ввімкненні односекційного вентиля (рис. 12) отримати струм у незамкненому колі неможливо: одна половина спінів компенсує іншу половину спінів. Але можна в двох різних секціях акумулятора намагніченість контактів перемкнути так, щоб струм пішов. Цим прикладом ілюструємо ту обставину, що апріорне знання початкової конфігурації спінів може відкрити можливість такого підключення контактів, яке дозволить отримати корисну роботу. Детальне володіння інформацією про нерівноважний стан системи може в принципі бути основою для створення джерела корисної енергії.

Шеннон [16] ввів поняття інформаційної ентропії

$$H = - \sum_i p_i \ln p_i \quad (93)$$

як міри інформації, що міститься в рядку символів i , який випадає з імовірністю p_i . Шеннівська ентропія виглядає майже як термодинамічна ентропія (59), за винятком множника – константи Больцмана k . Виявляється, що обидві ентропії тісно пов'язані одна з одною [17]. Якщо ми маємо систему зі станами i та рівноважними ймовірностями реалізації цих станів p_i , тоді $k \cdot H$ є ентропія рівноважної системи, що не містить ніякої інформації. Якщо система була зафіксована в одному зі своїх можливих рівноважних станів, то ентропія знижується на величину $Nk \cdot H$, збільшуючи вільну енергію системи на $NkT \cdot H$. Цей надлишок вільної енергії в принципі може бути перетворений на корисну роботу.

9. Принцип Ландауера. Ідея про те, що володіння повною інформацією про метастабільний стан системи дозволяє створити на її основі акумулятор, перегукується з принципом Ландауера щодо того, який мінімум енергії необхідний, щоб стерти один біт інформації [18, 19].

В розглянутому нами контексті стирання еквівалентне переходу системи спінів з рівно-

важного стану з $F_{eq} = -NkT \ln 2$ у стандартний нерівноважний стан з відомою структурою спінів з $F = 0$ (рис. 14).

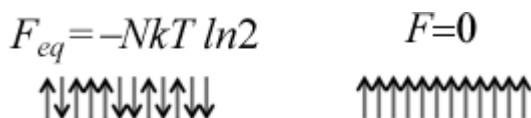


Рис. 14. Стирання інформації шляхом переходу системи спінів з рівноважного стану з $S = NkT \ln 2$ в нерівноважний з $S = 0$.

Який мінімум енергії потрібен для досягнення сформульованої мети? Вище показано, що як тільки структура спінів робиться стандартна (всі спіни скеровані «вгору»), стає можливим побудувати акумулятор і видобути енергію в кількості $F - F_{eq}$. У циклічному процесі на шляху від рівноважного стану системи з вільною енергією F_{eq} до нерівноважного з енергією F спершу витрачається енергія на стирання E_{err} , а потім у результаті роботи акумулятора видобувається енергія $F - F_{eq}$, й тому повна енергія, затрачувана на стирання, є $E_{err} - (F - F_{eq})$. Вона повинна бути більшою від нуля, бо в протилежному випадку вийде вічний двигун:

$$E_{err} \geq (F - F_{eq}). \quad (94)$$

Ця нерівність і дає нам принцип Ландауера:

$$E_{err} \geq NkT \ln 2. \quad (95)$$

Принцип Ландауера, що встановлює зв'язок термодинаміки з інформацією, нещодавно був успішно експериментально підтверджений [20].

Видається правдоподібним, що стирання не конче повинне закінчуватися приведенням усіх спінів у стан «угору», як ми вважали раніше, а може полягати просто в приведенні системи в стан із відомою структурою спінів. Крім того, мінімальна енергія стирання не конче повинна дисипувати. Стирання закінчується саме дисипацією тільки тому, що сьогодні ще немає технічної можливості запустити інформаційно-керований акумулятор.

Півстоліття тому назад Рольф Ландауер задумався над глибокими питаннями, час від-

повіді на які тоді ще не прийшов. Сьогодні внаслідок дивовижно швидкого розвитку наелектроніки деякі з цих питань уже зняті, а постановка інших – стала набагато ясніша. Вивчення ряду проблем перенесене вже на квантовий рівень і зараз активно обговорюється.

10. Демон Максвелла. Інформаційно-керований акумулятор має прямий стосунок до демона Максвелла [21, 22], який, відкриваючи і закриваючи засув між двома резервуарами, «гарячі частинки» пропускає тільки в правий резервуар, а «холодні» – тільки в лівий (рис. 15).

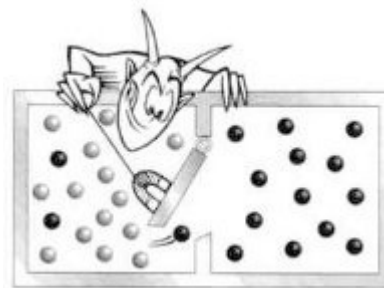


Рис. 15. Демон Максвелла створює різницю температур, сортує частинки на гарячі (чорні кулі) і холодні (білі кулі).

Аналогія між інформаційно-керованим акумулятором і демоном Максвелла видна з подальшого зіставлення:

Гарячі частинки \Leftrightarrow Електрони зі спіном «вгору»; Холодні частинки \Leftrightarrow Електрони зі спіном «вниз»; Демон Максвелла \Leftrightarrow Система локалізованих спінів з двома станами; Резервуари \Leftrightarrow Контакти

Акумулятор працює за рахунок обмінної реакції (80), у якій роль демона грають локалізовані спіни. Демон використовує інформацію, а не енергію, створюючи різницю температур, так само, як акумулятор використовує низькоентропійний стан локалізованих спінів для створення різниці хімпотенціалів. Як і локалізовані спіни, демон також дрейфує до високоентропійного стану, який не дозволяє йому дискримінувати гарячі і холодні частинки. Як і акумулятор, демон врешті-решт при-

пиняє функціонувати, коли ентропія досягає свого максимального значення і втрачається вся початкова інформація.

Транспортні процеси завжди поєднують у собі механічні та ентропійні процеси [23], тому нерідко говорять про механічні та ентропійні сили та чинники, які керують більшістю навколишніх процесів та подій.

Система цілком поляризованих спінів з $S = 0$ мимовільно переходить у неполяризований стан з $S = Nk \ln 2$. Такий скерований процес виникає тому, що цілком поляризований стан є по суті одним станом, а неполяризований стан допускає безліч різних станів локалізованих спінів місткістю 2^N . Саме така величезна місткість керує домішками при їх релаксації зі стану з низькою ентропією в стан з високою ентропією, але ніяк не навпаки. Багато навколишніх явищ зумовлюють ентропійні сили, які принципово відрізняються від механічних сил, здатних лише перевести систему з одного стану в якийсь інший, але знов-таки лише один. Транспортні явища такі складні тому, що їх опис вимагає одночасного залучення як механічних уявлень, так і термодинамічних. Модель пружного резистора [1] добра тим, що в ній дія ентропійних сил обмежена лише контактами, а в самому резисторі діють лише закони механіки.

11. Квантова ентропія. Продовжимо обговорення квантової природи класики, розпочате в [24]. Повернімося до цілком поляризованої системи спінів і до її рівноважного стану (рис. 16):



Рис. 16. Нерівноважна система спінів (А) і її рівноважний стан (Б).

Запишемо для неї вираз для ентропії:

$$\frac{S}{k} = -\sum_i p_i \ln p_i. \quad (96)$$

Хвильова функція окремого спіна в системі А

$$\psi = \begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \end{Bmatrix} \text{ дає } \psi\psi^+ = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (97)$$

а діагональні елементи матриці густини можна інтерпретувати як значення p_i в (96). Густина ж $\psi\psi^+$ для спіна в системі Б вимагає підсумовування двох рівноправних можливостей:

$$\psi\psi^+ = 0.5 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + 0.5 \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.5 & 0 \\ 0 & 0.5 \end{bmatrix}, \quad (98)$$

що дає з такою густиною вже відому відповідь (60).

Для системи ж В, в якій спіни орієнтовані уздовж виділеної осі x , а не z , як у системі А (рис. 17), хвильова функція записується як:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \end{Bmatrix} \text{ дає } \psi\psi^+ = \begin{bmatrix} 0.5 & 0.5 \\ 0.5 & 0.5 \end{bmatrix}. \quad (99)$$

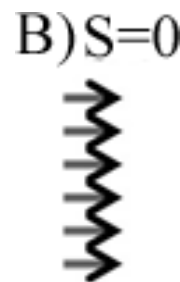


Рис. 17. Система В – це система А, переорієнтована уздовж осі x .

Якщо ми знову порахуємо ентропію з діагональних елементів (99), то отримаємо, що ентропія системи В така ж, як і в системі Б, що очевидно неправильно. Вона повинна бути така ж, як і для системи А.

Правильна відповідь вийде, якщо ми спочатку діагоналізуємо густину $\psi\psi^+$, а потім отримані діагональні елементи як власні значення густини використаємо як ймовірності p_i в (96). Це досягається шляхом узагальнення (96) таким чином:

$$\frac{S}{k} = -Tr[\rho \ln \rho], \quad (100)$$

де матриця густини $\rho = \psi\psi^+$.

11.1. Скільки інформації переносить один електрон?

Скористаємося для передачі інформації пристроєм (рис. 18), у якому намагніченість реєструючого контакту може мінятися в межах $\pi/2$ щодо намагніченості інжектуючого контакту з дрібним кроком, скажімо, в 10° .

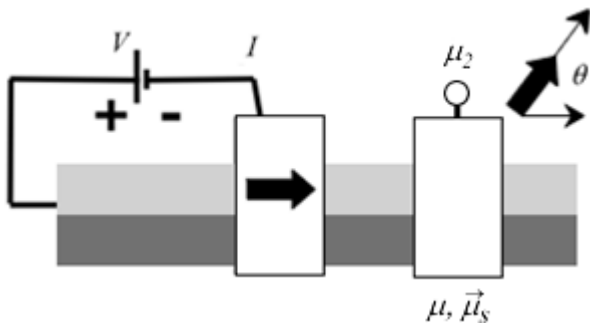


Рис. 18. Реєструючий контакт 2 у ролі аналізатора спінового струму [25].

На перший погляд здається, що, інжектуючи один електрон, можна передати великий об'єм інформації, оскільки є багато можливостей зареєструвати різну орієнтацію спіну електрона детектором. При кроці в 10° об'єм переданої інформації нібито мав би бути рівний $S/k = \ln 10$ замість $\ln 2$. Адже раніше ми завжди вважали, що одному електрону завжди відповідає $S/k = \ln 2$. Ці дві відповіді насправді не суперечать одна одній. Адже для вимірювання спінового струму, залежного від кута θ [25], до детектора потрібно підвести дуже багато електронів з тим, щоб належним чином усереднити результати вимірювань. При установці реєструючого детектора на певний кут θ електрон, що підійшов до детектора, може або передати інформацію, якщо його поляризація відповідає поляризації детектора, або ж ні. Передати справді можна інформацію об'ємом $\ln 10$, але для цього потрібно пропустити через детектор безліч належним чином підготовлених електронів з тим, щоб детектор видав правдоподібний результат.

А чи можна клонувати електрон у певному стані у вигляді безлічі ідентичних електронів з однаковими хвильовими функціями? Теорема, що забороняє клонування, немає. Просто потрібно інжектувати багато електронів, підго-

товлених однаковим чином, а потім грамотно провести обробку результатів вимірювань.

Всі ці питання є предметом розгляду квантової інформатики, що швидко розвивається. Але вже зараз стало очевидним, що спін електрона, в порівнянні з його зарядом, відкриває якісно нові перспективи в обробці інформації.

11.2. Чи збільшує ентропію взаємодія частинок?

Повернімося до інформаційно-керованого акумулятора, протягом роботи якого ентропія зростає. Але як саме це відбувається?

Взаємодія електронів і локалізованих спінів описувалася згідно з обмінною реакцією (80). З погляду квантової механіки, обмінна взаємодія породжує суперпозицію хвильових функцій (рис. 19).

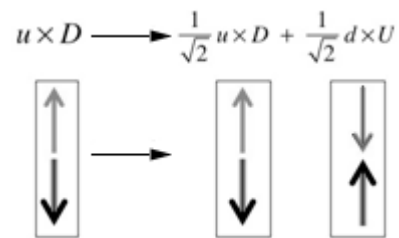


Рис. 19. Обмінна взаємодія в реакції (80) породжує суперпозиційний стан.

Суперпозиційний стан може виявитися не таким простим, як на рис. 19, але у будь-якому випадку сума квадратів комплексних коефіцієнтів повинна дорівнювати одиниці.

Важливо те, що суперпозиційний стан

$$\frac{1}{\sqrt{2}}u \times D + \frac{1}{\sqrt{2}}d \times U$$

має нульову ентропію, як і початковий стан $u \times D$. Справді, можна вдатися до техніки псевдоспіну [24], вибравши його компонентами «вгору» і «вниз» стани $u \times D$ та $d \times U$. Обмінна взаємодія фактично тільки повертає псевдоспін від напрямку уздовж осі z до напрямку уздовж осі x , а вище вже було показано, що повертання системи спінів (псевдоспінів) не збільшує ентропію.

Яким чином тоді відбувається збільшення ентропії? Канальні електрони в провіднику рано чи пізно покидають провідник. У момент

їхнього виходу суперпозиційний стан руйнується («колапс хвильової функції») і стає або станом $u \times D$, або ж $d \times U$, залежно від того, чи йде каналний електрон через витік зі спіном «угору», або через стік зі спіном «униз». Локалізований спін залишається з рівною ймовірністю 50% або в стані «вниз», або «вгору». Це – той момент, коли ентропія збільшується на $k \ln 2$.

11.3. *Спіни та магніти.*

Спін з моменту свого експериментального виявлення відразу став особливою характеристикою частинок. Вже навчилися за допомогою твердотільних пристроїв керувати й маніпулювати не тільки окремими спінами, але й такими дивними квантовими об'єктами, як переплутані спіни [26]. Ми також уже знаємо [24], що багато квантових об'єктів допускають псевдоспінове трактування як двокомпонентні спіни. Проте, зовсім не обов'язково обмежуватися двокомпонентними об'єктами. При розгляді транспорту спінів у чотирикомпонентному форматі [24] діагональні блоки (2×2) грінівської матриці G^n містили чотири дійсні числа (N, \bar{S}) . Можна піти далі й розглядати блоки, скажімо, (12×12) , що відповідають багатоатомним молекулярним орбіталям, які зберігають фазову когерентність протягом відносно довгого часу, як гігантські квазіспінові об'єкти. Нам будуть потрібні 144 дійсні компоненти, щоб відобразити всю інформацію, що міститься в ермітовій матриці 12×12 , а потім скористатися методом НРФГ [23] і вивчити дифузію таких гігантських квазіспінових об'єктів так, як це ми вже робили в [25] для спінів.

Чи можемо ми використовувати ці гігантські квазіспіни для кодування і передачі інформації? Ймовірно, що так, але є одна дотепер невирішена проблема – інтеграція спінтроники й магнетроники. Усвідомили цю проблему всього років 10 тому. Спінтроніка займалася маніпулюванням і керуванням індивідуальними спінами і мотивувалася фізикою наднизьких температур. Магнетроніка носила більш прикладний характер і займалася класичними магнітами, магнетизм яких є результатом

взаємодії і впорядкування величезного числа елементарних магнітних моментів, при кімнатних температурах.

Першим кроком на шляху інтеграції цих двох фундаментальних напрямів досліджень стало використання магнітних контактів для інжектування спінів, що призвело до створення спінових вентилів і магнітних тунельних переходів, які лежать в основі сучасних технологій зчитування інформації з магнітних носіїв. Другим кроком стала демонстрація транспорту магнітного моменту, що дозволило обертати намагніченість зразка, якщо тільки його товщина не перевищувала декількох атомних шарів. Цей ефект можна було б використовувати для запису інформації на наномагніти. Пристрої пам'яті, що використовують спін як для зчитування, так і для запису інформації, зараз інтенсивно розвиваються.

Для керування інформацією та її передачі потрібні не тільки спінові пристрої, але й магнітні. В нинішній зарядній архітектурі комп'ютерів для зберігання інформації використовуються конденсатори. В майбутній спіновій архітектурі потрібні магніти для створення спінових конденсаторів і пристроїв для передачі інформації від магніту до магніту. Останні 10 років досліджень вселяють надію на створення комп'ютерів зі спіновою структурою зберігання і передачі інформації. Надії пов'язують з молекулярними магнітами [27].

Напрошується також ідея вийти за межі звичайних спінів і використати різноманітні екзотичні псевдоспіни і навіть багатокомпонентні квазіспіни, які зберігають когерентність протягом достатньо довгого часу. Ключовим тут буде питання про наявність квазімагнітів для генерації і детектування квазіспінів.

На завершення наголосимо: робота є наслідком прослуховування одним з нас (ЮОК) курсів лекцій «Fundamentals Nanoelectronics, Part I: Basic Concepts і «Fundamentals Nanoelectronics», Part II: Quantum Models», прочитаних он-лайн в січні – квітні 2012 року проф. С.Датта (Supriyo Datta) в рамках ініціативи Purdue University / nanoHUB-U [www.nanohub.org/u]. В ній також використано напра-

цювання авторського курсу «Фізика конденсованого середовища», який інший автор (МВС) упродовж останніх років читає для магістрів радіофізичного факультету Київського національного університету імені Т.Г.Шевченка.

Авторі щиро вдячні Н.Ю.Кругляк за допомогу в роботі над статтею і в підготовці її до друку.

Список використаної літератури

1. Кругляк Ю.О., Кругляк Н.Ю., Стріха М.В. Уроки наноелектроніки. Виникнення струму, формулювання закону Ома і моди провідності в концепції «знизу – вгору» // *Sensor Electronics Microsys. Tech.* – 2012. – V. 9, N 4. – P. 5 – 30.
2. Кругляк Ю.О., Стріха М.В. Уроки наноелектроніки. Роль електростатики і контактів в концепції «знизу – вгору» // *Sensor Electronics Microsys. Tech.* – 2014. – V. 11, N 4. – P. 27 – 42.
3. Feynman R.P. *Statistical Mechanics.* – San Francisco: Benjamin/Cummings. – 1972.
4. Кругляк Ю.О., Кругляк Н.Ю., Стріха М.В. Уроки наноелектроніки: термоелектричні явища в концепції «знизу – вгору» // *Sensor Electronics Microsys. Tech.* – 2013. – V. 10, N 1. – P. 6 – 21.
5. Fock V. Konfigurationsraum und zweite Quantelung // *Z. Phys.* – 1932. – V. 75. – P. 622 – 647.
6. Моздор Е.В., Кругляк Ю.А., Купрієвич В.А. Матричные элементы операторов физических величин на одноконфигурационных функциях радикалов // *Теор. exper. химия.* – 1969. – Т. 5, № 6. – С. 723 – 730.
7. Kuprievich V.A., Kruglyak Yuri A., Mozdor E.V. Full configuration interaction for the benzyl radical // *Intern.J.Quantum Chem.* – 1970. – V. 4, N 1. – P. 73 – 87.
8. Yu. A. Kruglyak, Configuration Interaction in the Second Quantization Representation: Basics with Applications up to Full CI, *ScienceRise*, vol. 4: N 2(4), 98 – 115, 2014.
9. Kruglyak Yu.A., Mozdor E.V., Kuprievich V.A. Study of the Electronic Structure of Radicals by the CI Method. 1. Matrix Elements of the Physical Value Operators // *Croat.Chem. Acta.* – 1971. – V. 43. – P. 15 – 23.
10. Kruglyak Yuri A., Ukrainsky I.I. Study of the electronic structure of alternant radicals by the DODS method // *Intern. J. Quantum Chem.* – 1970. – V. 4, N 1. – P. 57 – 72.
11. Yu. A. Kruglyak, *The Generalized Hartree – Fock Method and Its Versions: From Atoms and Molecules to Polymers*, *ScienceRise*, vol. 5: N 5(3), 6 – 21, 2014.
12. Kruglyak Yuri A., Dyadyusha G.G. Torsion Barriers of End-Groups in Cumulenes. I. General Consideration // *Theor. Chim.Acta.* – 1968. – V. 10. – P. 23 – 32.
13. Dill Ken A., Bromberg Sarina. *Molecular Driving Forces: Statistical Thermodynamics in Biology, Chemistry, Physics, and Nanoscience*, 2nd Edition. – New York: Garland Science. – 2010.
14. Salahuddin Sayeef, Datta S. An All Electrical Spin Detector // *Sixth IEEE Conference on Nanotechnology.* – 2006. – V. 2. – P. 834 – 837.
15. Кругляк Ю.О., Кругляк Н.Ю., Стріха М.В. Уроки наноелектроніки: Спінтроніка в концепції «знизу – вгору» // *Sensor Electronics Microsys. Tech.* – 2013. – V. 10, N 2. – P. 5 – 37.
16. Шеннон К. Работы по теории информации и кибернетике. — Москва: Изд-во ИЛ. – 2002.
17. Волькенштейн М.В. Энтропия и информация. – Москва: Изд-во «Наука». – 2006.
18. Landauer Rolf. Irreversibility and heat generation in the computing process // *IBM J. Res. Dev.* – 1961. – V. 5. – P. 183 – 191.
19. Bennett Charles H. Notes on Landauer's principle. Reversible Computation and Maxwell's Demon // *History and Philosophy of Modern Physics.* – 2003. – V. 34. – P. 501 – 510.
20. Bérut Antoine, Arakelyan Artak, Petrosyan Artyom, Ciliberto Sergio, Dillenschneider Raoul, Lutz Eric. Experimental verification of Landauer's principle linking information and thermodynamics // *Nature.* – 2012. – V. 483. – P. 187 – 189.
21. Leff H.S., Rex A.F.(eds.) *Maxwell's Demon 2 Entropy, Classical and Quantum Information, Computing.* – Bristol: Institute of Physics Publishing. – 2003. – pp. 502.
22. Datta S. *Nanodevices and Maxwell's De-*

mon // Lecture Notes in Nanoscale Science and Technology, Vol. 2, Nanoscale Phenomena: Basic Science to Device Applications, Eds. Z.K. Tang and P.Sheng, – Berlin: Springer.– 2008.

23. Кругляк Ю.О., Стріха М.В. Уроки наноелектроніки: Метод нерівноважних функцій Гріна в матричному зображенні. Теорія // Sensor Electronics Microsys. Tech. – 2013. – V. 10, N 3. – P. 22 – 35.

24. Кругляк Ю.О., Стріха М.В. Уроки наноелектроніки: Квантова інтерференція і дефазіровка в методі нерівноважних функцій Гріна // Sensor Electronics Microsys. Tech. –

2014. – V. 11, N 3. – P. 5 – 18.

25. Кругляк Ю.О., Стріха М.В. Уроки наноелектроніки: Транспорт спінів в моделі НРФГ і квантовий спіновий ефект Хола в концепції «знизу – вгору» // Sensor Electronics Microsys. Tech. – 2014. – V. 11, N 2. – P. 5 – 22.

26. Horodecki R., Horodecki P., Horodecki M., Horodecki K. Quantum entanglement // Rev. Mod. Phys. – 2007. – V. 81, N 2. – P. 865 – 942.

27. Friedman Jonathan R., Sarachik Myriam P. Single-Molecule Nanomagnets // Ann. Rev. Cond. Matter Phys. – 2010. – V.1. – P. 109 – 128.

Стаття надійшла до редакції 08. 01. 2015 р.