

УДК 538.935

DOI: 10.15587/2313-8416.2015.53495

**НАНОЭЛЕКТРОНИКА «СНИЗУ – ВВЕРХ»: ТЕРМОДИНАМИКА ПРОВОДНИКА С ТОКОМ, ИНФОРМАЦИОННО-УПРАВЛЯЕМЫЙ АККУМУЛЯТОР И КВАНТОВАЯ ЭНТРОПИЯ**

© Ю. А. Кругляк

*В концепции «снизу – вверх» нанoeлектроники строится равновесная термодинамика проводника с током, обсуждается накопление информации в неравновесном состоянии и анализируется модель информационно-управляемого аккумулятора и связь ее с принципом Ландауэра о минимальной энергии, необходимой для стирания одного бита информации. Вводится понятие квантовой энтропии, подчеркивается актуальность интегрирования спинтроники и магнетроники в связи с предстоящим переходом к спиновой архитектуре вычислительных устройств*

**Ключевые слова:** нанoфизика, нанoeлектроника, термодинамика резистора, информационная емкость, принцип Ландауэра, квантовая энтропия

*Within the «bottom – up» approach of nanoelectronics the equilibrium thermodynamics of a conductor with a current is presented and the accumulation of information in a non-equilibrium state with an analysis of information-driven battery model is discussed in 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 the importance 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, quantum entropy

**1. Введение**

Рассмотрим потоки электронов и тепла в простейшем электронном устройстве, состоящем из проводника с контактами истоком S с электрохимическим потенциалом  $\mu_1$  при температуре  $T_1$  и стоком D с электрохимическим потенциалом  $\mu_2$  при температуре  $T_2$ . Среда, окружающая проводник, находится при температуре  $T_0$  и обменивается с проводником только теплом, например, путем эмиссии или поглощения фононов или фотонов, но не электронами (рис. 1).

**2. Литературный обзор**

Пусть  $N_1$  электронов впрыскивается в проводник контактом 1 и  $N_2$  – контактом 2. Числа электронов  $N_1$  и  $N_2$  не могут быть одного знака: инжектирование  $N_1$  электронов в канал проводимости приводит к оттоку того же количества электронов через контакт 2, так что

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

Полноты ради на рис. 1 показан также обмен теплом с окружающей средой. Если проводником

будет упругий резистор, то его обмен теплом с окружающей средой отсутствует [1].

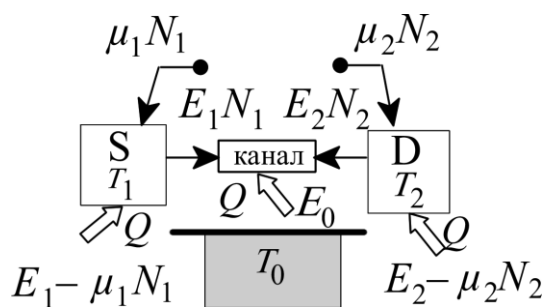


Рис. 1. Потоки электронов и тепла, показанные стрелками, в простейшем электронном устройстве

Закон сохранения энергии предполагает, что

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

Это ограничение есть первый закон термодинамики.

Есть, однако, еще одно ограничение, известное как второй закон термодинамики, а именно:

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

Первый закон термодинамики описывается равенством, а второй закон допускает неравенство. Если температура обоих контактов совпадает с температурой окружающей среды ( $T_1 = T_2 = T_0$ ), то суммарное тепло, поглощенное проводником,

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

С использованием первого закона термодинамики (2) это означает, что

$$\mu_1 N_1 + \mu_2 N_2 \geq 0. \quad (5)$$

Другими словами, полная энергия (2), которая сохраняется в этом процессе, состоит из двух частей:

- тепловой энергии со стороны окружающей среды (4), которая всегда отрицательна;
- энергии (5), поставляемой источником тока, которая всегда положительна.

Если бы мы могли теплом из окружающей среды заряжать аккумулятор, у нас не было бы никаких проблем с источником энергии. Обратим внимание на то, что это не противоречило бы первому закону термодинамики: суммарная энергия сохранилась бы и была бы прежней. Это второй закон термодинамики делает различие между энергией, накопленной в аккумуляторе, и тепловой энергией окружающей среды. Первую легко конвертировать во вторую, диссипировать в виде тепла, но не наоборот, поскольку тепловая энергия распределена по многим степеням свободы. Мы можем взять энергию, запасенную в состоянии с одной степенью свободы, и распределить ее по многим степеням свободы, но невозможно обратное – энергию, распределенную по многим степеням свободы, сконцентрировать в состоянии, имеющем одну степень свободы. Подобное интуитивное ощущение нашло свое отражение во втором законе термодинамики (3), имеющем неопровержимые экспериментальные подтверждения.

Упругий резистор не обменивается теплом с окружающей средой ( $E_0=0$ ) и второй закон термодинамики (3) для него имеет вид:

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

где, имея в виду одноуровневый резистор, энергии  $E_1 = \varepsilon N_1$  и  $E_2 = \varepsilon N_2$ , так что электрон, входящий и выходящий из резистора, имеет энергию  $\varepsilon$ . С учетом материального баланса (1) это означает, что

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

Физика упругого резистора [1] всегда удовлетворяет этому условию, поскольку ток определяется разностью фермиевских функций контактов  $f_1 - f_2$ , где

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

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

Число электронов  $N_1$  принимает положительное значение, указывая на поток электронов от истока в сторону стока, если

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

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

Аналогичным образом,  $N_1$  принимает отрицательное значение, указывая на поток электронов от стока в сторону истока, если

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

В любом случае соблюдается второй закон термодинамики для упругого резистора (7). Если же речь пойдет о диффузионном резисторе, предполагающем обмен энергией с окружающей средой, то естественно задаться вопросом каким образом гарантировать выполнение второго закона термодинамики?

### 3. Асимметрия процессов поглощения и излучения энергии

Ответ на поставленный вопрос состоит в следующем. Модель резистора должна быть такой, чтобы гарантировать, что для всех процессов, включающих обмен энергией и электронами резистора с контактом, поддерживаемым при электрохимическом потенциале  $\mu$  и температуре  $T$ , вероятность инжектирования электронов в канал проводимости  $P(+E, +N)$  должна относиться к вероятности приема электронов из канала проводимости  $P(-E, -N)$  (рис. 2) как

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

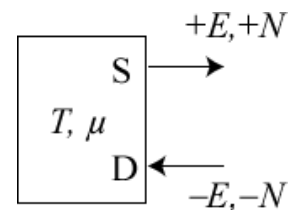


Рис. 2. Процессы поглощения проводником (инжектирование) и «излучения» им (прием контактом) энергии и электронов

Если же речь идет только об обмене энергией, но не электронами, то

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

Убедимся в том, что уравнения (13) и (14) гарантируют выполнимость второго закона термодинамики (3). Для этого рассмотрим ситуацию на рис. 1, где обмен электронами и/или энергией про-

исходит в режиме трех «терминалов». Вероятность инжектирования электронов в канал проводимости пропорциональна произведению трех вероятностей

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

а вероятность обратного процесса пропорциональна

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

Доминирование инжектирования в канал над обратным процессом (ток идет от истока 1 к стоку 2) обеспечивается отношением этих двух вероятностей большим единицы:

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

Если все эти процессы подчиняются уравнениям (13) и (14), то

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

откуда немедленно следует второй закон термодинамики (3), если вспомнить, что  $\exp(-x)$  больше единицы, если  $x$  меньше нуля.

Обратим внимание на то, что равенство во втором законе термодинамики (3) соответствует бесконечно малому превалированию инжектирования в резистор по сравнению с обратным процессом, так что суммарный ток инфинитезимально мал. Увеличение тока будет расти по мере усиления неравенства в (3).

Итак, почему мы уверены, что наша модель резистора удовлетворяет требованиям (13), (14)? Рассмотрим резистор с одним рассеивающим центром, слева от которого энергия электрона равна  $E_1$ , а справа равна  $E_2 < E_1$  (рис. 3).

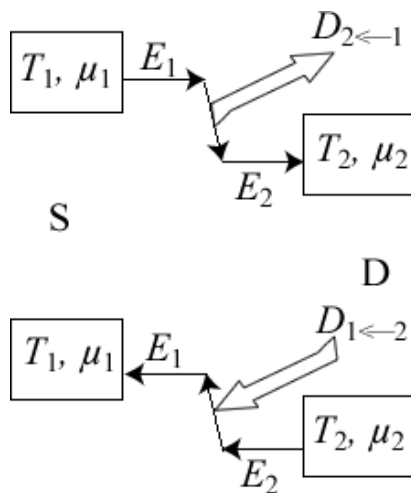


Рис. 3. Процессы выделения и поглощения энергии при переносе электронов с одного контакта на другой по проводнику с одним рассеивающим центром

Вероятность процесса переноса электронов от контакта 1 до контакта 2 с выделением энергии есть

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

тогда как вероятность обратного процесса с поглощением энергии есть

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

где  $D_{2\leftarrow 1}$  и  $D_{1\leftarrow 2}$  – скорости соответствующих процессов. Поскольку в одном процессе речь идет о выделении энергии, а в другом – о поглощении энергии, то соответствующие скорости должны подчиняться закону (14), а именно:

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

каковым мы также уже пользовались ранее (ур-е (48) в [2]). Температура  $T_0$  – это температура окружающей среды, с которой электроны обмениваются энергией.

Ток в таком неупругом резисторе

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

и сводится к знакомому выражению для упругого резистора

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

только если

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

что соответствует упругому резистору с  $E_2 = E_1$ . На практике проводники представляют собой сложную смесь перекрывающихся упругих и неупругих «доменов» и не существует простых выражений, связывающих ток с фермиевскими функциями.

Итак, любая модель канала проводимости с учетом обмена энергией должна гарантировать соблюдение отношения скоростей выделения и поглощения энергии согласно закону (21), если окружающая среда находится в равновесии с проводником при температуре  $T_0$ . Любая транспортная теория, полуклассическая или квантовая, чтобы не нарушать второй закон термодинамики, должна обеспечивать выполнимость закона (21), должна учитывать энтропийные процессы наряду с механическими.

#### 4. Энтропия

Асимметрия выделения и поглощения энергии привычна настолько, что мы и не замечаем ее. Если речь пойдет, скажем, об атоме водорода, и его единственный электрон пусть находится в возбужденном состоянии  $2p$ , он немедленно вернется в основное состояние  $1s$  с выделением энергии. Если же электрон находится в состоянии  $1s$ , он в этом состоянии будет находиться бесконечно долго. Привычное объяснение этой ситуации заключается в том, что электрон, мол, стремится занять состояние с наименьшей энергией.

На самом деле в этом объяснении нет ничего естественного. Любое взаимодействие, классическое или квантовое, переводя электрон в основное состояние, с таким же успехом должно перевести его из

основного в исходное возбужденное состояние. Кажущееся нам естественным стремление электрона занять состояние с наименьшей энергией имеет немеханическую природу, ни классическую, ни квантовую, а энтропийную, связанную с окружающей средой и отображаемую законами (13) и (14), согласно которым получить энергию из окружающей среды намного сложнее, чем излучить энергию в окружающую среду. При нулевой температуре система частиц может только излучать энергию, но не поглощать ее. Точно так же и электрон в возбужденном состоянии атома водорода может только излучать энергию, переходя в свое основное состояние, характеризуемое наименьшей возможной энергией, но не поглощать ее, переходя в следующее, еще более возбужденное состояние.

Итак, каково происхождение предпочтительной тенденции терять энергию, а не приобретать ее из «среды»? Уравнение (14) можно понять, рассуждая следующим образом. Когда электрон теряет энергию в проводнике, контакт («среда») приобретает энергию, так что отношение скорости потери энергии к скорости приобретения энергии равно отношению плотности состояний при энергии  $E_0 + \varepsilon$  к плотности состояний при  $E_0$  (рис. 4):

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

где  $W(E)$  есть число состояний, доступных в области энергии  $E$  в контакте, которое связано с энтропией уравнением Больцмана

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

так что

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

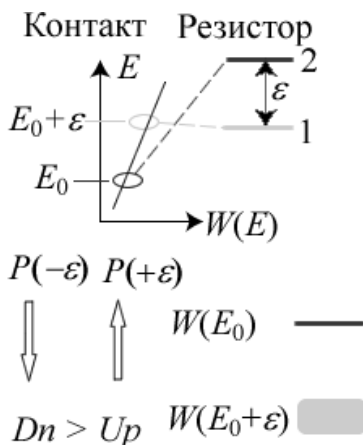


Рис. 4. Электроны предпочитают понижать свою энергию, поскольку выделяемая при этом энергия переходит в среду с большей плотностью состояний

Считая обмениваемую энергию  $\varepsilon$  величиной малой по сравнению с энергией среды  $E_0$ , можно написать

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

с температурой, определяемой выражением

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

Это, на самом деле, принципиально важный результат. Он показывает, что независимо от того как устроена окружающая среда, как только она находится в равновесии с изучаемой системой частиц, производная от энергии системы по энтропии есть температура системы. Если мы принимаем такое определение температуры, то уравнение Больцмана (26) становится основой, позволяющей рассматривать обмен энергией между системой и средой, находящихся в равновесии при температуре  $T$ :

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

что уже утверждалось ранее в уравнении (14).

Если эмиссия энергии контактом сопровождается также эмиссией им электрона (рис. 2), который покидает контакт с энергией  $\mu$ , тогда  $\varepsilon$  нужно заменить на  $\varepsilon - \mu$  в соответствии с уравнением (13).

#### 4. 1. Энтропия всегда растет

Энтропия определена. Теперь можно второй закон термодинамики (3) переписать иначе. Из рис. 1 следует, что:

–  $E_1 - \mu_1 N_1$  есть энергия, обмениваемая со средой при температуре  $T_1$ ;

–  $E_2 - \mu_2 N_2$  есть энергия, обмениваемая со средой при температуре  $T_2$ ;

–  $E_0$  есть энергия, обмениваемая со средой при температуре  $T_0$ .

Опираясь на определение температуры по (28) и (29), эти энергии можно переписать через изменения энтропии:

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

Получились те же самые выражения, за исключением знака «минус», что и слагаемые в записи второго закона термодинамики в виде неравенства (3). Подставив эти выражения в (3), получим

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

Окончательно, второй закон термодинамики в применении к рассматриваемому нами простейшему электронному устройству (рис. 1) утверждает, что при прохождении тока по проводнику суммарное изменение энтропии при транспорте электронов и

обмене энергией с окружающей средой всегда положительно.

**4. 2. Свободная энергия всегда уменьшается**

При нулевой температуре любая система частиц, достигая равновесия с окружающей средой, приходит в состояние с наименьшей возможной энергией. Как уже упоминалось, это связано с тем, что при нулевой температуре система частиц может только излучать энергию, но не поглощать ее. При ненулевой температуре оказывается возможным определить так называемую свободную энергию

$$F = E - TS \tag{33}$$

такую, что система частиц в состоянии равновесия с окружающей средой находится в состоянии с наименьшей свободной энергией. При нулевой температуре свободная энергия  $F$  совпадает с полной энергией системы  $E$ .

Убедиться в этом можно путем следующих рассуждений. Рассмотрим систему  $S$ , которая обменивается энергией с окружающей средой  $R$ , при этом полная энергия сохраняется. Выпишем первый и второй законы термодинамики для составной системы  $S + R$ :

$$(\Delta E)_S + (\Delta E)_R = 0, \tag{34}$$

$$(\Delta S)_S + (\Delta S)_R \geq 0. \tag{35}$$

Поскольку

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

то подставляя (36) в (35) и комбинируя с (34), получаем

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

Таким образом, все процессы с обменом энергии, подчиняющиеся первому и второму законам термодинамики, вынуждены понижать свободную энергию системы, а придя в равновесие с окружающей средой, система оказывается в состоянии с наименьшей возможной свободной энергией.

**5. Универсальный закон равновесия Больцмана**

Тенденция предпочтительнее терять энергию, чем приобретать ее из окружающей среды, выраженная уравнениями (13) и (14), ведет к универсальному закону, который утверждает следующее: любая равновесная система, имеющая состояния  $i$  с энергиями  $E_i$  и числом частиц  $N_i$ , находится в этих состояниях с вероятностями

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

где  $Z$  есть константа, выбранная таким образом, чтобы все вероятности, будучи суммированы, дали единицу.

Чтобы убедиться в этом, обратимся к уравнению (13). Пусть мы имеем систему с двумя состояниями, в которой происходит обмен электронами и энергией с окружающей средой (рис. 5).

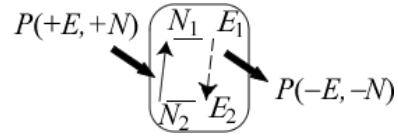


Рис. 5. Переходы в системе с двумя состояниями

В состоянии равновесия требуется, чтобы переходы между состояниями уравновешивали друг друга, а именно:

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

Обращаясь к уравнению (13), получаем

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

и убеждаемся, что вероятности (38) удовлетворяют этому требованию, и таким образом правильно описывают состояние равновесия.

Чем вызвана универсальность закона равновесия (38)? Почему он распространяется на любые системы независимо от их внутреннего устройства? Потому что, как уже упоминалось, он связан со свойствами среды, окружающей систему, а не с самой системой.

Уравнение (38) есть основной постулат равновесной статистической механики, известный как уравнение Больцмана. Ричард Фейнман назвал его «вершиной»/«summit» [3]. Мы до сих пор пользуемся распределениями Ферми (транспорт электронов) и Бозе (перенос тепла фононами [4]). Все три распределения описываются схожим образом:

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

где имеем статистику

Ферми-Дирака при  $\gamma = +1$ ,

Бозе-Эйнштейна при  $\gamma = -1$ ,

Максвелла-Больцмана при  $\gamma = 0$ .

Распределение Максвелла-Больцмана является предельным и для фермиевского и для бозевского распределений при  $E - \mu(\hbar\omega) \gg kT$ . В области энергий, сопоставимых с  $kT$ , эти оба распределения ведут себя существенно различным образом (рис. 6).

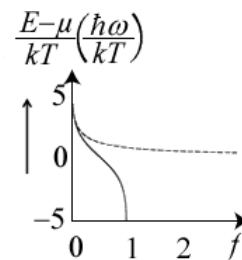


Рис. 6. Поведение функций Ферми (сплошная) и Бозе (пунктиром) в области энергий, сопоставимых с  $kT$

Фермиевская заселенность ограничена 0 и 1, что является следствием принципа запрета Паули, а бозевская заселенность ничем не ограничена кроме как числом частиц.

Важно отметить, что оба распределения – фермиевское и бозевское – являются специальными случаями более общего закона Больцмана (38). Чтобы продемонстрировать это утверждение, нужно обратиться к концепции пространства Фока [5]. Дело в том, что энергии состояний  $E_i$ , фигурирующие в уравнении Больцмана (38), не являются энергиями одно-электронных состояний, как это обычно нами до сих пор предполагалось. Эти состояния являются состояниями в пространстве Фока, которые мы сейчас и рассмотрим, а затем получим фермиевское и бозевское распределения. Заметим лишь, что фоковское пространство лежит в основе техники вторичного квантования, используемой в современных методах квантовой химии [6–9], а операторы вторичного квантования рождения и уничтожения исключительно удобны для описания электронной структуры молекул, например, полиенов [10, 11] и кумуленов [12].

**6. Состояния в пространстве Фока: фермионы**

Мы уже фактически использовали фоковские состояния на рис. 5. Рассмотрим простую систему с одним уровнем энергии  $\varepsilon$  (рис. 7).

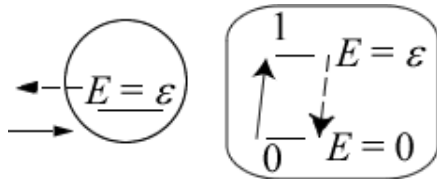


Рис. 7. Одноэлектронное состояние (слева) и фоковское состояние для электрона (справа)

В концепции одноэлектронных состояний электроны занимают или покидают это состояние. В концепции пространства Фока рассматриваются два возможных состояния этой системы: одно соответствует незанятому электроном состоянию с энергией  $E = 0$ , а другое – занятому электроном состоянию с энергией  $E = \varepsilon$ . Нахождение системы в том или ином состоянии зависит от того, имеется ли электрон в системе или он покинул ее.

Применив закон Больцмана (38) к рассматриваемой системе в пространстве Фока, для вероятностей получаем:

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

где

$$x \equiv (\varepsilon - \mu) / kT.$$

Поскольку сумма вероятностей нормируется к единице, то

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

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

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

где правое равенство в (45) имеет место согласно (41). Вероятность  $p_1$  того, что система занята электроном, есть просто функция Ферми, а вероятность  $p_0$  того, что электрон покинул систему, равна единице минус функцию Ферми.

**6.1. Состояния в пространстве Фока: бозоны**

Распределение Бозе также следует из закона Больцмана (38). Теперь его нужно применить к системе, в которой число частиц (например, фотонов или фононов) может быть любым (рис. 8).

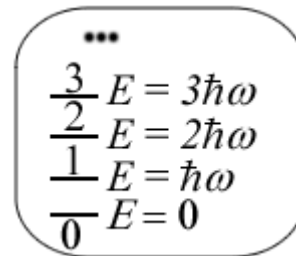


Рис. 8. Фоковские состояния для фононов и фотонов

Согласно закону Больцмана, вероятность того, что система заполнена  $N$  бозонами

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

где  $x \equiv \hbar\omega / kT$ . Из нормировки суммы всех вероятностей к единице имеем:

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

так что среднее число бозонов

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

а с учетом того, что сумма справа

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

окончательно получаем функцию Бозе (41)

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

Причина, по которой энергия  $E - \mu$  фигурирует в фермиевской функции для электронов, а в случае фононов и фотонов фигурирует лишь  $\hbar\omega$ , а не  $\hbar\omega - \mu$ , связано со следующим. Когда электрон покидает проводник и входит в контакт с энергией  $E$ , он релаксирует до энергии  $\mu$ , характерной для этого контакта, а разница  $E - \mu$  диссипирует. В случае же фононов и фотонов с энергией  $\hbar\omega$ , излученной или поглощенной, диссипирует вся их энергия  $\hbar\omega$ .

**6. 2. Взаимодействующие электроны**

Закон равновесия Больцмана (38), в принципе, позволяет также описывать равновесное состояние сложной системы взаимодействующих частиц, если, конечно, удастся вычислить энергии соответствующих фоковских состояний. Рассмотрим систему из двух взаимодействующих одноэлектронных состояний (рис. 9).

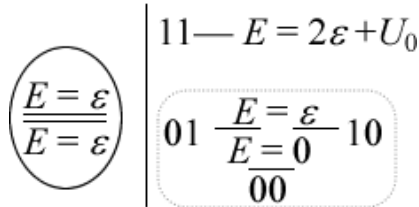


Рис. 9. Два взаимодействующих одноэлектронных состояния и соответствующие им четыре фоковских состояний

Им соответствует четыре фоковских состояния 00, 01, 10 и 11. В последнем состоянии оба электрона взаимодействуют друг с другом с энергией  $U_0$ . Какова будет заселенность электронами системы, если она находится в равновесии с электрохимическим потенциалом  $\mu$ ?

Пусть опять  $x \equiv (\varepsilon - \mu) / kT$ . Согласно закону Больцмана (38) имеем:

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

Среднее число электронов в системе

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

Эту задачу полезно рассмотреть для заданного значения энергии взаимодействия электронов, и мы здесь ограничимся лишь предельными случаями. Прежде всего для случая невзаимодействующих электронов с  $U_0 \rightarrow 0$  имеем:

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

так что

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

есть просто удвоенное значение фермиевской функции, что и следовало ожидать, поскольку речь идет о двух невзаимодействующих состояниях.

Другой предельный случай – это сильно взаимодействующие электроны с  $U_0 \rightarrow \infty$ . В этом случае, согласно (51),  $p_{11} = 0$ , так что

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

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

результат, который не представляется очевидным и следующим из распределения Ферми. Вместе с тем, можно показать, что в случае  $g$  одноэлектронных состояний

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

результат, известный в физике полупроводников для подсчета числа локализованных состояний.

Закон равновесия Больцмана (38) и энтропия (26) формулируются в пространстве Фока. Мы показали, как закон Больцмана можно переформулировать через одноэлектронные состояния для невзаимодействующих электронов. Сейчас мы покажем как сделать то же самое для энтропии.

**7. Альтернативное выражение для энтропии**

Рассмотрим систему невзаимодействующих локализованных спинов, например, магнитных примесей в канале проводимости. В состоянии равновесия половина спинов случайным образом ориентирована вверх, а другая половина – вниз (рис. 10).

$$S = Nk \ln 2$$



Рис. 10. Энтропия равновесной системы  $N$  локализованных спинов

Выражение (26) определяет энтропию как  $S = k \ln W$ , где  $W$  есть полное число фоковских состояний, доступных рассматриваемой системе. В нашем случае каждому спину доступны два состояния – «вверх» и «вниз», так что  $N$  спином доступны  $2^N$  состояний:  $W = 2^N$  и энтропия

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

Все правильно, но есть еще альтернативное выражение для энтропии, которым можно пользоваться всегда, когда мы рассматриваем систему, состоящую из большого числа одинаковых невзаимодействующих подсистем, например, тех же  $N$  локализованных спинов, а именно:

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

где  $\tilde{p}_i$  есть вероятность найти отдельную подсистему в  $i$ -ом состоянии. В нашем примере отдельный спин характеризуется вероятностью  $\frac{1}{2}$  быть обнаруженным в состоянии «вверх» и «вниз», так что уравнение (59) дает

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

в точности тот же результат, что и ранее уравнение (58).

Формула (59) более гибкая по сравнению с (26) в том смысле, что вероятности  $\tilde{p}_i$  могут принимать произвольные значения для каждой из подсистем в  $i$ -ом состоянии. Не говоря уже о том, что она поразительно похожа на выражение для шенноновской энтропии, ассоциируемой с количеством информации в строке из  $N$  символов, каждый из которых может принимать различные значения  $i$  с вероятностью  $\tilde{p}_i$ . Мы ниже вернемся к шенноновской энтропии и рассмотрим ее подробно применительно к электронике.

А сейчас покажем как формула (59) следует из формулы (26) [13]. Рассмотрим очень большое число  $N$  идентичных подсистем, каждая с набором состояний  $\{E_i\}$ , заселенных с вероятностями  $\{\tilde{p}_i\}$  такими, что число этих подсистем в состоянии  $i$  дается выражением

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

Полное число возможностей получить набор подсистем  $\{N_i\}$  будет

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

Используя формулу Стирлинга

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

получаем

$$\begin{aligned} \ln W &= \ln N! - \ln N_1! - \ln N_2! - \ln N_3! - \dots \cong \\ &\cong N \ln N - N \tilde{p}_1 \ln N \tilde{p}_1 - N \tilde{p}_2 \ln N \tilde{p}_2 - N \tilde{p}_3 \ln N \tilde{p}_3 - \dots \end{aligned} \quad (64)$$

Учитывая нормировку всех вероятностей  $\{\tilde{p}_i\}$  к единице, получаем

$$\begin{aligned} \ln W &= -N (\tilde{p}_1 \ln \tilde{p}_1 + \tilde{p}_2 \ln \tilde{p}_2 + \tilde{p}_3 \ln \tilde{p}_3 + \dots) = \\ &= -N \sum_i \tilde{p}_i \ln \tilde{p}_i. \end{aligned} \quad (65)$$

что и устанавливает соответствие между формулами для энтропии (59) и (26).

### 7. 1. Равновесное распределение из минимума свободной энергии

В общем случае система может находиться в произвольном состоянии (не обязательно равновесном), в котором каждый уровень энергии  $E_i$  заселен с вероятностью  $\tilde{p}_i$ . Для равновесного же состояния, согласно уравнению Больцмана (38),

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

Мы также уже знаем, что равновесное состояние характеризуется минимумом свободной энергии (33). Покажем, что из всех возможных выборов вероятностей  $\{\tilde{p}_i\}$  только равновесные распределения  $\{p_i\}$  минимизируют свободную энергию.

Энергия системы

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

Воспользуемся выражением для удельной энтропии  $S/N$  из определения энтропии по (59) и напишем свободную энергию в виде

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

позволяющем минимизировать ее по изменениям в  $\{\tilde{p}_i\}$ , а именно:

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

если учесть, что

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

поскольку сумма всех вероятностей фиксирована (нормирована на единицу).

Гарантировать же равенство  $dF$  нулю при произвольном выборе  $d\tilde{p}_i$  можно лишь положив

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

что и ведет нас к равновесным вероятностям (66).

Если же система не находится в равновесии, то можно воспользоваться выражением (68) для расчета свободной энергии в неравновесном состоянии, если нам только известны вероятности  $\tilde{p}_i$ , и получим большее значение свободной энергии по сравнению с ее равновесным значением.

В работе [14] утверждается, что можно построить такое устройство, которое избыток свободной энергии в неравновесном состоянии системы

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

преобразует в полезную работу. Этот избыток состоит из двух частей:

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

где  $\Delta E$  есть избыток реальной энергии, а вот второе слагаемое содержит изменение энтропии, которое можно связать с информацией, позволяющей конвертировать энергию из окружающей среды в полезную работу. Далее мы изложим эту «взрывную» концепцию более подробно.

### 8. Глобальная ценность информации

Система в равновесном состоянии не содержит информации, поскольку состояние равновесия не зависит от предистории системы, оказавшейся в своем равновесном состоянии. Обычно информация содержится в системе, которая «застыла» в каком-то своем неравновесном состоянии. Утверждается, что имея такую неравновесную систему, можно построить такое устройство, которое может экстрагировать энергию, меньшую или равную

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



где  $F$  есть свободная энергия неравновесной системы,  $F_{eq}$  есть свободная энергия системы, пришедшей в состояние равновесия. Приведем соображения в пользу такого утверждения.

Вернемся к рис. 1. Пусть температура обоих контактов одинакова и равна  $T$ , а среда находится в метастабильном состоянии, так что электроны в проводнике взаимодействуют с неравновесной средой. В этом случае о температуре среды говорить не приходится.

Например, в системе невзаимодействующих спинов в равновесном состоянии при любой температуре половина спинов находится в состоянии «вверх», а другая половина – в состоянии «вниз» (рис. 11).

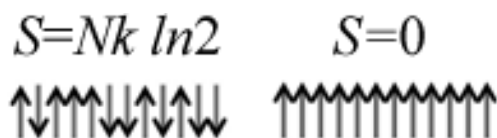


Рис. 11. Равновесная (слева) и неравновесная (справа) системы локализованных спинов

Если же систему перевести в неравновесное состояние со всеми спинами «вверх», то невозможно говорить о температуре такой системы, а энтропию по (59) вычислить можно и она окажется в этом случае равной нулю.

Вернемся к нашему примеру со средой в неравновесном состоянии. Заменяя  $E_0/T_0$  на  $-\Delta S$ , второй закон термодинамики (3) перепишем в виде

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

а закон сохранения энергии (2) требует

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

где  $\Delta E$  есть изменение энергии окружающей среды.

При равенстве температур контактов

$$(T_1 = T_2 \equiv T)$$

и очевидном равновесии токов (1) с учетом (76) из второго закона термодинамики для среды в неравновесном состоянии (75) получаем

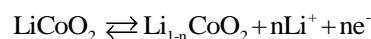
$$(\mu_1 - \mu_2)N_1 \geq \Delta E - T\Delta S = \Delta F. \quad (77)$$

Обычно изменение свободной энергии  $\Delta F$  может быть только положительным, поскольку система в равновесном состоянии при выходе из равновесия может только увеличить свободную энергию. Тогда (77) требует, чтобы число электронов  $N_1$ , инжектируемое левым контактом 1 в проводник (рис. 1) было одного знака с разностью электрохимических потенциалов  $\mu_1 - \mu_2$ , подаваемых на проводник: электроны движутся от контакта с большим химпотенциалом к контакту с меньшим, как это и должно быть.

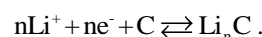
В нашем же случае ситуация необычная: система находится в неравновесном состоянии и стремится перейти в равновесное состояние, так что

$\Delta F < 0$  и  $N_1$  может иметь знак, противоположный разности  $\mu_1 - \mu_2$ , не нарушая при этом условие (77). Электроны могут переходить от контакта с меньшим электрохимическим потенциалом к контакту с большим потенциалом, как это происходит при зарядке аккумулятора.

Основной вывод следующий: метастабильное неравновесное состояние системы, в принципе, может быть использовано для конструирования аккумулятора. Как, например, это имеет место в реальных аккумуляторах. Возьмем, например, литий-ионный аккумулятор. Заряженный аккумулятор находится в метастабильном состоянии с избытком ионов  $\text{Li}^+$ , интеркалированных в графитовый анод. Когда аккумулятор разряжается, поставляя электроны во внешнюю цепь, ионы  $\text{Li}^+$  диффундируют на катод, содержащий, например,  $\text{LiCoO}_2$ . При зарядке аккумулятора идут обратные процессы. В качестве примера приведем окислительно-восстановительные реакции на положительном электроде



и на отрицательном электроде



Разрядившись, аккумулятор переходит в равновесное состояние с наименьшим значением свободной энергии. Максимальная энергия, которая может быть получена при работе аккумулятора, есть изменение его свободной энергии.

Обычно изменение свободной энергии (77) обязано изменению в реальной энергии  $E$ . Это как бы естественно. Если неравновесная система характеризуется энергией  $E$ , а по мере перехода в равновесное состояние ее энергия уменьшается до  $E_{eq}$ , то при удачном инженерном решении устройства разницу  $E - E_{eq}$  можно превратить в полезную работу.

Вместе с тем не видно причин почему бы изменение в энтропии при переходе из неравновесного состояния в равновесное нельзя использовать для совершения полезной работы. Возьмите для примера систему локализованных невзаимодействующих спинов в неравновесном состоянии, когда все спины ориентированы «вверх» (рис. 11). В этом состоянии энтропия системы равна нулю. Перейдя в равновесное состояние, в котором спины поровну «вверх» и «вниз», энергия остается прежней, а энтропия увеличивается:

$$\begin{aligned} \Delta E &= 0, \quad \Delta S = Nk \ln 2, \\ \Delta F &= \Delta E - T\Delta S = -NkT \ln 2. \end{aligned} \quad (78)$$

В согласии с (77) должна быть принципиальная возможность построить такое устройство, которое выработает энергию, равную, например,  $NkT \ln 2$ . В работе [14] предлагается такое устройство реализовать в виде спинового вентиля с антипараллельной ориентацией намагниченности контактов [15]. Мы далее подробно рассмотрим такое возможное устройство.

С практической точки зрения  $NkT \ln 2$  дает  $\sim 2.5$  кДж/моль, что на 2–3 порядка меньше тепло-

творной способности угля и нефти, которая обеспечивается, прежде всего, величиной  $\Delta E$ .

С концептуальной точки зрения ситуация в рассматриваемом примере не обычная. Полученный выигрыш в энергии связан не с системой спинов, энергия которых не изменилась, а с окружающей средой. Энергия получена из окружающей среды. Стандартно второй закон термодинамики запрещает получение энергии из окружающей среды для выполнения полезной работы. Однако, информация, содержащаяся в неравновесном состоянии системы в виде «отрицательной энтропии» позволяет получать энергию из окружающей среды, не нарушая при этом второй закон термодинамики.

Воспользуемся определением свободной энергии  $F = E - TS$  и расщепим правую часть уравнения (74), а именно:

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

на действительную энергию  $(E - E_{eq})$  и на информационную энергию  $T(S_{eq} - S)$ , которая может быть извлечена из окружающей среды в результате использования информации, доступной нам в форме дефицита энтропии  $S$  относительно ее равновесного значения  $S_{eq}$ . В приведенном примере с системой локализованных спинов доступная для превращения в полезную работу энергия вся полностью является информационной энергией, поскольку изменение реальной энергии равно нулю.

**9. Информационно-управляемый аккумулятор**

Рассмотрим подробнее устройство для извлечения информационной энергии из системы локализованных спинов. Оно может представлять собой спиновый вентиль с антипараллельной ориентацией намагниченности контактов, в котором ферромагнитный исток может инжектировать в проводник и экстрагировать из проводника только электроны со спином «вверх», а ферромагнитный сток – только электроны со спином «вниз» (рис. 12).

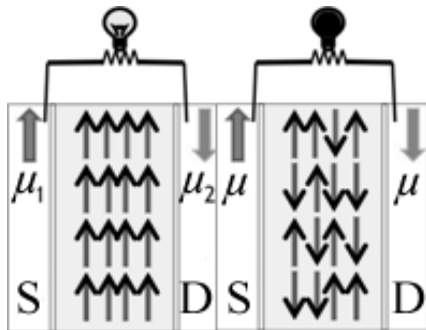


Рис. 12. Информационно-управляемый аккумулятор для получения избытка свободной энергии из системы многих локализованных спинов: в заряженном неравновесном состоянии все спины «вверх» (слева); аккумулятор «садится» после рандомизации всех спинов и перехода системы в равновесное состояние (справа)

Канальные электроны в проводнике обменно взаимодействуют с локализованными спинами:

$$u + D \Leftrightarrow U + d, \quad (80)$$

где  $u$  и  $d$  – странствующие в проводнике электроны, а  $U$  и  $D$  – локализованные спины.

Обычно такая обменная реакция должна идти в обе стороны с одинаковой скоростью. Пусть мы начинаем с заряженного неравновесного состояния с  $U \gg D$  и током, идущим по внешней цепи. Превалировать будет обменная реакция (80), идущая справа налево: избыток канальных электронов  $u$  извлекается из проводника левым контактом, а недостаток электронов  $d$  компенсируется правым контактом. По истечении некоторого времени устанавливается равновесие с одинаковым числом локализованных спинов  $U = D$ , обменная реакция пойдет с одинаковой скоростью в обоих направлениях, выделение энергии прекратится и аккумулятор разрядится.

Какое количество энергии может быть получено по мере перехода  $(U \gg D) \Rightarrow (U = D)$ ? Ответ уже был дан:  $NkT \ln 2$ . Получим ли мы тот же результат в ходе стандартного анализа такого аккумулятора? В предположении малости взаимодействия в обменной реакции (80) можно ожидать, что электроны  $u$  находятся в равновесии с контактом 1, а электроны  $d$  – в равновесии с контактом 2 так что

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

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

В предположении малой скорости реакции (80) настолько, что она почти сбалансирована, можно предположить, что

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

или для вероятностей имеем:

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

где  $\Delta\mu \equiv \mu_1 - \mu_2$ . Задав химпотенциалами на контактах, получили отношение распределений локализованных спинов  $U$  и  $D$ . Иначе говоря, разность химпотенциалов порождается различием в распределении спинов  $U$  и  $D$ :

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

Первоначально различие в химпотенциалах велико в результате существенного превалирования спинов  $U$  над спинами  $D$ , однако, со временем распределения спинов уравниваются, что ведет к уравниванию химпотенциалов на контактах и к прекращению тока.

Обменная реакция (80) сводится к тому, что каждый раз, когда спин  $D$  обращается в спин  $U$ , электрон  $u$  обращается в  $d$ , который выводится из проводника через сток. И наоборот, когда  $U$  обращается в  $D$ , электрон  $d$  обращается в  $u$ , который выводится из проводника через исток. Полное число электронов, переносимых от истока  $S$  к стоку  $D$ , равно недостатку спинов  $U$  по сравнению со спинами  $D$ :

$$n_{S \rightarrow D} = -\Delta N_U. \tag{86}$$

Извлекаемая энергия как произведение разности химпотенциалов на число перенесенных электронов из исходного неравновесного состояния в конечное равновесное

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

Подстановка (85) дает

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

Поскольку  $dP_U + dP_D = 0$  и учитывая, согласно (59), что

$$S = -Nk (P_U \ln P_U + P_D \ln P_D), \tag{89}$$

подынтегральное выражение в (88) можно переписать как

$$\begin{aligned} (\ln P_U - \ln P_D) dP_U &= \\ &= d(P_U \ln P_U + P_D \ln P_D) = -dS / Nk, \end{aligned} \tag{90}$$

так что

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

что и является основным результатом, который и ожидался, а именно: метастабильное состояние со всеми спинами «вверх» может быть в принципе использовано для конструирования аккумулятора с выходом по энергии во внешнюю цепь до

$$T \Delta S = NkT \ln 2. \tag{92}$$

**9. 1. Важная роль детальной информации**

До сих пор утверждалось, что система со всеми спинами «вверх» имеет большую свободную энергию по сравнению с рандомизированной системой спинов в равновесном состоянии и эту разницу в свободной энергии в принципе можно извлечь и превратить в полезную работу с помощью подходящего устройства. А что делает рандомизированную систему так сильно отличающейся от упорядоченной системы? Как заметил Ричард Фейнман, кажется необычным встретить на дороге автомашину с номером 9999 по сравнению с неким безликим номером, например, 7048. Аналогично, если спины расположены пусть случайным, но точно известным нам образом, то энтропия такой системы может быть приня-

той равной нулю как и в случае, когда точно известно, что все спины «вверх». Возможность получить энергию проистекает не от того, что в исходном состоянии все спины «вверх», а от точного знания в каком именно состоянии находится каждый спин. Рассмотрите, например, систему на рис. 13.

Система спинов не совсем рандомизирована, но все же ... половина спинов «вверх», а другая половина «вниз». При стандартном включении односекционного вентиля (рис. 12) получить ток в незамкнутой цепи невозможно: одна половина спинов компенсирует другую половину спинов. Но можно в двух разных секциях аккумулятора намагниченность контактов переключить таким образом, чтобы ток пошел. Этим примером иллюстрируется то обстоятельство, что априорное знание исходной конфигурации спинов может открыть возможность такого подключения контактов, которое позволит получить полезную работу. Детальное владение информацией о неравновесном состоянии системы может в принципе быть основой для построения источника полезной энергии.

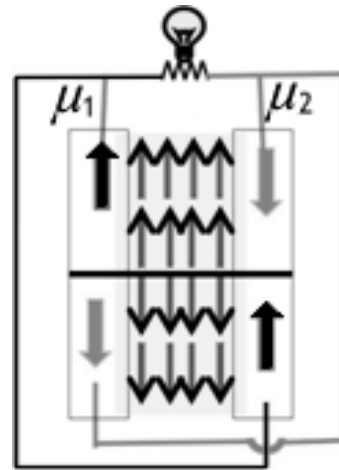


Рис. 13. Информационно-управляемый двухсекционный аккумулятор с переключением намагниченностей контактов

Шеннон [16] ввел понятие информационной энтропии

$$H = - \sum_i p_i \ln p_i, \tag{93}$$

как меры информации, содержащейся в строке символов  $i$ , выпадающей с вероятностью  $p_i$ . Шенноновская энтропия выглядит как термодинамическая энтропия (59), исключая константу Больцмана  $k$ . Обе энтропии тесно связаны друг с другом [17]. Утверждается, что если мы имеем систему с состояниями  $i$  и равновесными вероятностями  $p_i$ , тогда  $k \cdot H$  есть энтропия равновесной системы, не содержащей никакой информации. Если система зафиксирована в одном из своих возможных равновесных состояниях, то энтропия понижается на величину  $Nk \cdot H$ , увеличивая свободную энергию системы на  $NkT \cdot H$ . Этот избыток свободной энергии в принципе может быть превращен в полезную работу.

**10. Принцип Ландауэра**

Идея о том, что обладание полными сведениями о метастабильном состоянии системы позволяет создать аккумулятор на ее основе, переключается с принципом Ландауэра о том, какой минимум энергии необходим, чтобы стереть один бит информации [18, 19].

В рассматриваемом нами контексте стирание эквивалентно переводу системы спинов из равновесного состояния с  $F_{eq} = -NkT \ln 2$  в стандартное неравновесное состояние с известной структурой спинов с  $F = 0$  (рис. 14).

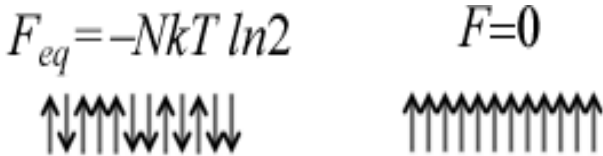


Рис. 14. Стирание информации путем перевода системы спинов из равновесного состояния с  $S = NkT \ln 2$  в неравновесное с  $S = 0$

Какой минимум энергии нужен для достижения сформулированной цели? Выше было показано, что как только структура спинов стандартна (все спины «вверх»), оказывается возможным построить аккумулятор и извлечь энергию в количестве  $F - F_{eq}$ . В циклическом процессе на пути от равновесного состояния системы со свободной энергией  $F_{eq}$  к неравновесному с энергией  $F$  тратится энергия на стирание  $E_{err}$ , затем в результате работы аккумулятора извлекается энергия  $F - F_{eq}$ , так что полная энергия, затрачиваемая на стирание, есть  $E_{err} - (F - F_{eq})$  и она должна быть больше нуля, ибо в противном случае получится вечный двигатель,

$$E_{err} \geq (F - F_{eq}), \tag{94}$$

что и дает нам принцип Ландауэра

$$E_{err} \geq NkT \ln 2. \tag{95}$$

Принцип Ландауэра, устанавливающий связь термодинамики с информацией, недавно был, наконец, успешно экспериментально подтвержден [20].

Представляется правдоподобным, что стирание не обязательно должно заканчиваться приведением всех спинов в положение «вверх», как в рассматриваемой нами задаче, а может заключаться в приведении системы в состояние с известной структурой спинов. Кроме того, минимальная энергия стирания не обязательно должна диссипировать. Стирание заканчивается именно диссипацией только лишь потому, что сегодня еще нет технической возможности запустить информационно-управляемый аккумулятор.

50 лет тому назад Рольф Ландауэр задумался над глубокими вопросами, время ответа на которые тогда еще не пришло. Сегодня в результате удивительно быстрого развития наноэлектроники некото-

рые вопросы уже сняты, а постановка других вопросов стала намного яснее. Изучение ряда проблем перенесено уже на квантовый уровень и сейчас активно обсуждается.

**11. Демон Максвелла**

Информационно-управляемый аккумулятор имеет прямое отношение к демону Максвелла [21, 22], который вовремя открывая и закрывая щель между двумя резервуарами «горячие» частицы пропускает только в правый резервуар, а «холодные» – только в левый (рис. 15).

Аналогия между информационно-управляемым аккумулятором и демоном Максвелла видна из следующего сопоставления:

Горячие частицы  $\Leftrightarrow$  Электроны со спином «вверх»

Холодные частицы  $\Leftrightarrow$  Электроны со спином «вниз»

Демон Максвелла  $\Leftrightarrow$  Система локализованных спинов с двумя состояниями Резервуары  $\Leftrightarrow$  Контакты.

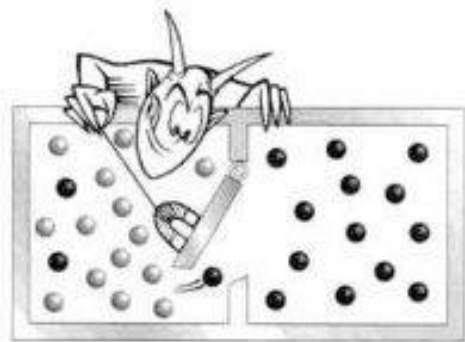


Рис. 15. Демон Максвелла создает разность температур, сортируя частицы на горячие (черные кружки) и холодные (белые кружки)

Аккумулятор работает за счет обменной реакции (80), в которой роль демона играют локализованные спины. Демон использует информацию, а не энергию создавая разность температур так же, как и аккумулятор, демон использует низкоэнтропийное состояние локализованных спинов для создания разности химпотенциалов. Как и локализованные спины, демон также дрейфует к высокоэнтропийному состоянию, которое не позволяет ему дискриминировать горячие и холодные частицы. Как и аккумулятор, демон в конце концов прекращает функционировать, когда энтропия достигает своего максимального значения и теряется вся исходная информация.

Транспортные процессы всегда сочетают в себе механические и энтропийные процессы [23], поэтому нередко говорят о механических и энтропийных силах и факторах, которые и управляют большинством окружающих нас событий.

Полностью поляризованная система спинов с  $S = 0$  самопроизвольно переходит в неполяризованное состояние с  $S = Nk \ln 2$ . Такой направленный процесс возникает потому, что полностью поляризованное состояние является по сути одним состояни-

ем, а неполяризованное состояние допускает множество различных состояний локализованных спинов емкостью  $2^N$ . Именно такая громадная емкость управляет примесями при их релаксации из состояния с низкой энтропией в состояние с высокой энтропией, но никак не наоборот. Многие окружающие нас явления управляются энтропийными силами, которые принципиально отличаются от механических сил, способных лишь перевести систему из одного состояния в какое-то другое, но опять одно. Транспортные явления потому так сложны, что их описание требует одновременного привлечения как механических представлений, так и термодинамических. Модель упругого резистора [1] хороша тем, что в ней действие энтропийных сил ограничено лишь контактами, а в самом резисторе действуют законы механики.

**12. Квантовая энтропия**

Продолжим обсуждение квантовой природы классики, начатое в [23, 24]. Вернемся к полностью поляризованной системе спинов и к ее равносному состоянию (рис. 16) и к выражению для энтропии (96).



Рис. 16. Неравновесная система спинов (А) и ее равновесное состояние (Б)

$$\frac{S}{k} = -\sum_i p_i \ln p_i. \tag{96}$$

Волновая функция отдельного спина в системе А

$$\psi = \begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \end{Bmatrix} \text{ дает } \psi\psi^+ = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \tag{97}$$

а диагональные элементы плотности можно интерпретировать как значения  $p_i$  в (96). Плотность же  $\psi\psi^+$  для спина в системе Б требует суммирования двух равноправных возможностей:

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

что дает с такой плотностью уже известный ответ (60).

Для системы же В, в которой спины ориентированы вдоль оси  $x$ , а не  $z$ , как в системе А (рис. 17),

волновая функция  $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \end{Bmatrix}$  дает

$$\psi\psi^+ = \begin{bmatrix} 0.5 & 0.5 \\ 0.5 & 0.5 \end{bmatrix}. \tag{99}$$

Если мы опять посчитаем энтропию по диагональным элементам (99), то получим, что энтропия системы В такая же, как и системы Б, что явно неверно. Она должна быть такая же как и системы А.

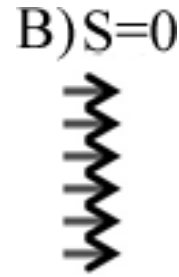


Рис. 17. Система В это система А, переориентированная вдоль оси  $x$

Правильный ответ получится, если мы сначала диагонализуем плотность  $\psi\psi^+$ , а потом полученные диагональные элементы как собственные значения плотности используем как вероятности  $p_i$  в (96). Это достигается путем обобщения (96) следующим образом:

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

где матрица плотности  $\rho = \psi\psi^+$ .

**12. 1. Количество информации, переносимое одним электроном**

Воспользуемся для передачи информации устройством (рис. 18), в котором намагниченность регистрирующего контакта может меняться в пределах  $\pi/2$  относительно намагниченности инжектирующего контакта с мелким шагом, скажем  $10^\circ$ .

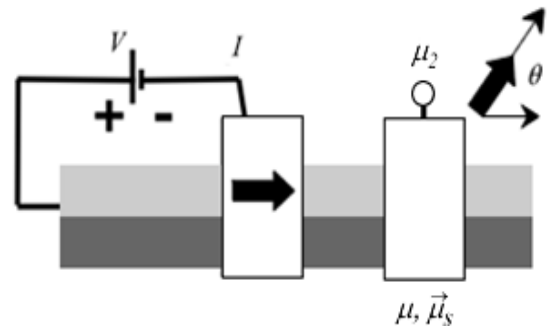


Рис. 18. Регистрирующий контакт 2 в роли анализатора спинового тока [25]

На первый взгляд кажется, что инжектируя один электрон таким образом можно передать большой объем информации, поскольку есть много возможностей зарегистрировать ориентацию спина электрона детектором. При шаге в  $10^\circ$  объем переданной информации вроде бы был бы равен  $S/k = \ln 10$  вместо  $\ln 2$ . Ведь ранее мы всегда считали, что одному электрону всегда соответствует  $S/k = \ln 2$ . Эти два ответа на самом деле не противоречат друг другу. Ведь для измерения спинового тока, зависящего от угла  $\theta$  [25], к детектору нужно подвести очень много электронов с тем, чтобы должным образом усреднить результаты измерений. При установке регистрирующего детектора на определенный угол  $\theta$  подошедший к детектору

электрон может либо передать информацию, если его поляризация соответствует поляризации детектора, либо нет. Передать действительно можно информацию объемом  $\ln 10$ , но для этого нужно пропустить через детектор множество должным образом подготовленных электронов с тем, чтобы детектор выдал правдоподобный результат.

А можно ли клонировать электрон в определенном состоянии в виде множества идентичных электронов с одинаковыми волновыми функциями? Теоремы, запрещающей клонирование, нет. Просто нужно инжектировать много электронов, приготовленных одинаковым образом, а затем грамотно произвести обработку результатов измерений.

Все эти вопросы являются предметом рассмотрения быстро развивающейся квантовой информатики. Но уже сейчас стало очевидным, что спин электрона по сравнению с его зарядом открывает качественно новые перспективы в обработке информации.

**12. 2. Взаимодействие частиц увеличивает энтропию**

Вернемся к информационно-управляемому аккумулятору, по ходу работы которого энтропия растет. А как именно это происходит?

Взаимодействие электронов и локализованных спинов описывалось обменной реакцией (80). С точки зрения квантовой механики обменное взаимодействие порождает суперпозицию волновых функций (рис. 19).

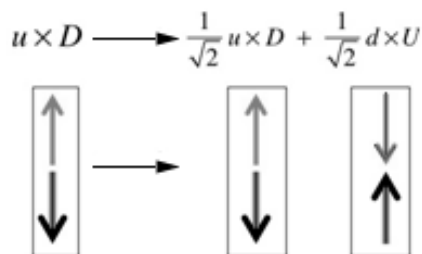


Рис. 19. Обменное взаимодействие в реакции (80) порождает суперпозиционное состояние

Суперпозиционное состояние может быть не таким простым, как на рис. 19, но в любом случае сумма квадратов комплексных коэффициентов должна быть равна единице.

Важно то, что суперпозиционное состояние

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

имеет нулевую энтропию как и исходное состояние  $u \times D$ . Действительно, можно прибегнуть к технике псевдоспина [23, 24], выбрав его компонентами «вверх» и «вниз» состояния  $u \times D$  и  $d \times U$ . Обменное взаимодействие фактически только вращает псевдоспин с направления вдоль оси  $z$  на направление вдоль оси  $x$ , а выше уже было показано, что вращение системы спинов (псевдо-спинов) не производит энтропию.

Как же все-таки происходит увеличение энтропии? Канальные электроны в проводнике рано или поздно покидают проводник. В момент ухода суперпозиционное состояние разрушается («коллапс волновой функции») и становится либо состоянием  $u \times D$ , либо  $d \times U$ , в зависимости от того, канальный электрон уходит через исток со спином «вверх», либо через сток со спином «вниз». Локализованный спин остается с равной вероятностью 50 % либо в состоянии «вниз», либо «вверх». Это тот момент, когда энтропия увеличивается на  $k \ln 2$ .

**12. 3. Спины и магниты**

Спины с момента своего экспериментального обнаружения сразу стали незаурядным свойством частиц. Уже научились с помощью твердотельных устройств управлять и манипулировать не только отдельными спинами, но и такими странными квантовыми объектами как перепутанные спины [26]. Мы также уже знаем [24], что многие квантовые объекты допускают псевдо-спиновую трактовку как двухкомпонентных спинов. Однако совсем не обязательно ограничиваться двухкомпонентными объектами. При рассмотрении транспорта спинов в четырехкомпонентном формате [24] диагональные блоки  $(2 \times 2)$  гриновской матрицы  $G^n$  содержали четыре действительных числа  $(N, \bar{S})$ . Можно пойти дальше и рассматривать блоки, скажем,  $(12 \times 12)$ , соответствующие многоатомным молекулярным орбиталям, сохраняющим фазовую когерентность в течение относительно длительного времени, как гигантские квази-спиновые объекты. Нам потребуется 144 действительных компонент, чтобы отразить всю информацию, содержащуюся в эрмитовой матрице  $12 \times 12$ , а затем воспользоваться методом НРФГ [23] и изучить диффузию таких гигантских квази-спиновых объектов так, как это уже проводилось в [25] для спинов.

Можем ли мы использовать эти гигантские квази-спины для кодирования и передачи информации? Вероятно, да, но есть одна до сих пор нерешенная проблема – интеграция спинтроники и магнетроники. Осознали эту проблему всего лет 10 назад. Спинтроника занималась манипулированием и управлением индивидуальными спинами и мотивировалась физикой сверхнизких температур. Магнетроника носила более прикладной характер и занималась классическими магнитами при комнатных температурах, магнетизм которых был результатом взаимодействия и упорядочения громадного числа элементарных магнитных моментов.

Первым шагом на пути интеграции этих двух фундаментальных направлений исследований явилось использование магнитных контактов для инжектирования спинов, что привело к спиновым вентилям и магнитным туннельным переходам, лежащим в основе современных технологий считывания информации с магнитных носителей. Вторым шагом стала демонстрация транспорта магнитного момента, что позволило обращать намагниченность образца, если только

его толщина не превышала нескольких атомных слоев. Этот эффект можно было бы использовать для записи информации на наномагниты. Устройства памяти, использующие спин как для чтения, так и для записи информации сейчас интенсивно разрабатываются.

Для передачи и управления информацией нужны не только спиновые устройства, но и магнитные. В нынешней зарядовой архитектуре компьютеров для хранения информации используются конденсаторы. В предстоящей спиновой архитектуре нужны магниты для создания спиновых конденсаторов и устройства для передачи информации от магнита к магниту. Последние 10 лет научных и технологических исследований вселяют надежду на создание компьютеров со спиновой структурой хранения и передачи информации. Надежды связывают с молекулярными магнитами [27, 28].

Напрашивается также идея выйти за пределы обычных спинов и использовать разнообразные экзотические псевдо-спины и даже многокомпонентные квази-спины, сохраняющие когерентность в течение достаточно длительного времени. Ключевым здесь будет вопрос о наличии квази-магнитов для генерирования и детектирования квази-спинов.

### 13. Выводы

Построена равновесная термодинамика проводника с током, подчеркнута роль фоковских состояний, обращено внимание на накопление информации в неравновесном состоянии и подробно проанализирована модель информационно-управляемого аккумулятора и связь ее с принципом Ландауэра о минимальной энергии, необходимой для стирания одного бита информации. Введено понятие о квантовой энтропии и обсуждены отдельные аспекты ее применения, подчеркнута актуальность интегрирования спинтроники и магнетроники в связи с предстоящим переходом к спиновой архитектуре вычислительных устройств.

### Благодарности

Я благодарен профессору С. Датта (Supriyo Datta) за возможность прослушать его курсы лекций «Fundamentals of Nanoelectronics, Part I: Basic Concepts» и «Fundamentals of Nanoelectronics, Part II: Quantum Models», прочитанных он-лайн в январе – апреле 2012 года и в марте – мае, октябре – декабре 2015 года в рамках инициативы Purdue University/nanoHUB-U (2012 [29]; 2015 [30]) и частично положенных в основу настоящего обзора.

Я также благодарен моей жене Н. Е. Кругляк за подготовку рисунков к публикации и помощь в оформлении рукописи.

### Литература

1. Кругляк, Ю. А. Нанозлектроника «снизу – вверх»: Возникновение тока, обобщенный закон Ома, упругий резистор, моды проводимости, термоэлектричество [Текст] / Ю. А. Кругляк // ScienceRise. – 2015. – Т. 7, № 2 (12). – С. 76–100. doi: 10.15587/2313-8416.2015.45700

2. Кругляк, Ю. О. Уроки наноэлектроники. Роль электростатики і контактів в концепції «знизу – вгору» [Текст] / Ю. О. Кругляк, М. В. Стриха // Sensor Electronics Microsys. Tech. – 2014. – Vol. 11, Issue 4. – P. 27–42.

3. Feynman, R. P. Statistical Mechanics [Text] / R. P. Feynman. – Benjamin, New York, 1972.

4. Кругляк, Ю. А. Перенос тепла фононами в транспортной модели Ландауэра-Датты-Лундстрорма [Текст] / Ю. А. Кругляк // ScienceRise. – 2015. – Т. 2, № 2 (7). – С. 81–93. doi: 10.15587/2313-8416.2015.36332

5. Fock, V. Konfigurationsraum und zweite Quantelung [Text] / V. Fock // Zeitschrift for Physik. – 1932. – Vol. 75, Issue 9–10. – P. 622–647. doi: 10.1007/bf01344458

6. Kruglyak, Yu. A. Configuration interaction in the second quantization representation: basics with application up to full CI [Text] / Yu. A. Kruglyak // ScienceRise. – 2014. – Vol. 4, Issue 2 (4). – P. 98–115. doi: 10.15587/2313-8416.2014.28948

7. Kuprievich, V. A. Full configuration interaction for the benzyl radical [Text] / V. A. Kuprievich, Y. A. Kruglyak, E. V. Mozdor // International Journal of Quantum Chemistry. – 1970. – Vol. 4, Issue 1. – P. 73–87. doi: 10.1002/qua.560040107

8. Kuprievich, V. A. The Configuration Interaction Method in the Second Quantization Representation [Text] / V. A. Kuprievich, Yu. A. Kruglyak, E. V. Mozdor // Croat. Chem. Acta. – 1971. – Vol. 43. – P. 1–13.

9. Kruglyak, Yu. A. Study of the Electronic Structure of Radicals by the CI Method. 1. Matrix Elements of the Physical Value Operators [Text] / Yu. A. Kruglyak, E. V. Mozdor, V. A. Kuprievich // Croat. Chem. Acta. – 1971. – Vol. 43. – P. 15–23.

10. Kruglyak, Y. A. Study of the electronic structure of alternant radicals by the DODS method [Text] / Y. A. Kruglyak, I. I. Ukrainsky // International Journal of Quantum Chemistry. – 1970. – Vol. 4, Issue 1. – P. 57–72. doi: 10.1002/qua.560040106

11. Kruglyak, Yu. A. Quantum-chemical studies of quasi-one-dimensional electron systems. 1. Polyenes [Text] / Yu. A. Kruglyak // ScienceRise. – 2015. – Vol. 5, Issue 2 (10). – P. 69–105. doi: 10.15587/2313-8416.2015.42643

12. Kruglyak, Yu. A. Quantum-chemical studies of quasi-one-dimensional electron systems. Part 2. Cumulenes and origin of the forbidden zone [Text] / Yu. A. Kruglyak // ScienceRise. – 2015. – Vol. 6, Issue 2 (11). – P. 122–148. doi: 10.15587/2313-8416.2015.44540

13. Dill, K. A. Molecular Driving Forces: Statistical Thermodynamics in Biology, Chemistry, Physics, and Nanoscience [Text] / K. A. Dill, S. Bromberg. – 2nd Edition. – New York: Garland Science, 2010. – 778 p.

14. Salahuddin, S. An All Electrical Spin Detector [Text]: Sixth IEEE Conference on Nanotechnology / S. Salahuddin, S. Datta // School of Electrical and Computer Engineering, Purdue University, West Lafayette. – 2006. – Vol. 2. – P. 834–837. doi: 10.1109/nano.2006.247788

15. Кругляк, Ю. А. Нанозлектроника «снизу – вверх»: Начало спинтроники и магнетроники [Текст] / Ю. А. Кругляк // ScienceRise. – 2015. – Т. 8, № 2 (13). – С. 51–68. doi: 10.15587/2313-8416.2015.47792

16. Шеннон, К. Работы по теории информации и кибернетике [Текст] / К. Шеннон. – М: Изд-во ИЛ, 1963. – 824 с. – Режим доступа: <http://www.novsu.ru/file/1086154>

17. Волькенштейн, М. В. Энтропия и информация [Текст] / М. В. Волькенштейн. – Москва: Изд-во "Наука", 1986. – 192 с.

18. Landauer, R. Irreversibility and heat generation in the computing process [Text] / R. Landauer // IBM Journal of

Research and Development. – 1961. – Vol. 5, Issue 3. – P. 183–191. doi: 10.1147/rd.53.0183

19. Bennett, C. H. Notes on Landauer's principle. Reversible Computation and Maxwell's Demon [Text] / C. H. Bennett // Studies in History and Philosophy of Science Part B: Studies in History and Philosophy of Modern Physics. – 2003. – Vol. 34, Issue 3. – P. 501–510. doi: 10.1016/s1355-2198(03)00039-x

20. Bérut, A. Experimental verification of Landauer's principle linking information and thermodynamics [Text] / A. Bérut, A. Arakelyan, A. Petrosyan, S. Ciliberto, R. Dillenschneider, E. Lutz // Nature. – 2012. – Vol. 483, Issue 7388. – P. 187–189. doi: 10.1038/nature10872

21. Maxwell's Demon 2 Entropy, Classical and Quantum Information, Computing [Text] / H. S. Leff, A. F. Rex (Eds.). – Bristol: Institute of Physics Publishing, 2002. – 502 p. doi: 10.1201/9781420033991

22. Datta, S. Nanodevices and Maxwell's Demon [Text] / S. Datta. – Purdue University, West Lafayette, USA, 2007. – 18 p. – Available at: <http://arxiv.org/ftp/arxiv/papers/0704/0704.1623.pdf>

23. Кругляк, Ю. А. Нанoeлектроника «снизу – вверх»: Метод неравновесных функций Грина, модельные транспортные задачи и квантовая интерференция [Текст] / Ю. А. Кругляк // ScienceRise. – 2015. – Т. 9, № 2 (14). – С. 41–72. doi: 10.15587/2313-8416.2015.48827

24. Кругляк, Ю. О. Уроки нанoeлектроніки: Квантова інтерференція і дефазіровка в методі нерівноважних функцій Гріна [Текст] / Ю. О. Кругляк, М. В. Стріха // Sensor Electronics Microsys. Tech. – 2014. – Т. 11, № 3. – С. 5.

25. Кругляк, Ю. А. Нанoeлектроника «снизу – вверх»: Эффекты Холла, измерение электрохимических потенциалов и транспорт спинов в модели НРФГ [Текст] / Ю. А. Кругляк // ScienceRise. – 2015. – Т. 10, № 2(15). – С. 35–67. doi: 10.15587/2313-8416.2015.51353

26. Horodecki, R. Quantum entanglement [Text] / R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki, K. Horodecki // Reviews of Modern Physics. – 2009. – Vol. 81, Issue 2. – P. 865–942. doi: 10.1103/revmodphys.81.865

27. Friedman J. R. Single-Molecule Nanomagnets [Text] / J. R. Friedman, M. P. Sarachik // Annual Review of Condensed Matter Physics. – 2010. – Vol. 1, Issue 1. – P. 109–128. doi: 10.1146/annurev-conmatphys-070909-104053

28. Molecular Magnetism Web [Electronic resource]. – A gate to molecular magnetism. – Available at: <http://www.molmag.de/>

29. Fundamentals of Nanoelectronics, Part 2: Quantum Models [Electronic resource]. – nanoHUB-U. – Available at: <http://nanohub.org/courses/FoN2>

30. PurdueX [Electronic resource]. – Free online courses from Purdue University. – Available at: <https://www.edx.org/school/purdue>

## References

1. Kruglyak, Yu. A. (2015). Nanoelectronics «bottom – up»: current generation, generalized Ohm's law, elastic resistors, conductivity modes, thermoelectricity. ScienceRise, 7/2 (12), 76. doi: 10.15587/2313-8416.2015.45700

2. Krugljak, Ju. O., Striha, M. V. (2014). Uroky nanoelektroniky. Rol' elektrostatyki i kontaktiv v koncepcii' «znyzu – vgoru». Sensor Electronics Microsys, 11 (4), 27–42.

3. Feynman, R. P. (1972). Statistical Mechanics. Benjamin, New York.

4. Kruglyak, Yu. A. (2015). Transfer of heat by phonons in Landauer-Datta-Lundstrom transport model. ScienceRise, 2/2 (7), 81–93. doi: 10.15587/2313-8416.2015.36332

5. Fock, V. (1932). Konfigurationsraum und zweite Quantelung. Zeitschrift for Physik, 75 (9-10), 622–647. doi: 10.1007/bf01344458

6. Kruglyak, Yu. A. (2014). Configuration interaction in the second quantization representation: basics with application up to full CI. ScienceRise, 4/2 (4), 98–115. doi: 10.15587/2313-8416.2014.28948

7. Kuprievich, V. A., Kruglyak, Y. A., Mozdor, E. V. (1970). Full configuration interaction for the benzyl radical. International Journal of Quantum Chemistry, 4 (1), 73–87. doi: 10.1002/qua.560040107

8. Kuprievich, V. A., Kruglyak, Yu. A., Mozdor, E. V. (1971). The Configuration Interaction Method in the Second Quantization Representation. Croat. Chem. Acta., 43, 1–13.

9. Kruglyak, Yu. A., Mozdor, E. V., Kuprievich, V. A. (1971). Study of the Electronic Structure of Radicals by the CI Method. 1. Matrix Elements of the Physical Value Operators. Croat. Chem. Acta., 43, 15–23.

10. Kruglyak, Y. A., Ukrainsky, I. I. (1970). Study of the electronic structure of alternant radicals by the DODS method. International Journal of Quantum Chemistry, 4 (1), 57–72. doi: 10.1002/qua.560040106

11. Kruglyak, Y. (2015). Quantum-chemical studies of quasi-one-dimensional electron systems. 1. Polyenes. ScienceRise, 5/2 (10), 69–105. doi: 10.15587/2313-8416.2015.42643

12. Kruglyak, Yu. A. (2015). Quantum-chemical studies of quasi-one-dimensional electron systems. Part 2. Cumulenes and origin of the forbidden zone. ScienceRise, 6/2 (11), 122–148. doi: 10.15587/2313-8416.2015.44540

13. Dill, K. A., Bromberg, S. (2010). Molecular Driving Forces: Statistical Thermodynamics in Biology, Chemistry, Physics, and Nanoscience. New York: Garland Science, 778.

14. Salahuddin, S., Datta, S. (2006). An All Electrical Spin Detector: Sixth IEEE Conference on Nanotechnology. School of Electrical and Computer Engineering, Purdue University, West Lafayette, 2, 834–837. doi: 10.1109/nano.2006.247788

15. Kruglyak, Yu. A. (2015). The «bottom – up» nanoelectronics: elements of spintronics and magnetronics. ScienceRise, 8/2 (13), 51–68. doi: 10.15587/2313-8416.2015.47792

16. Shannon, K. (1963). Raboty po teorii informacii i kibernetike. Moscow: Izd-vo IL, 824. Available at: <http://www.novsu.ru/file/1086154>

17. Vol'kenshtejn, M. V. (1986). Jentropija i informacija. Moscow: Izdatelstvo "Nauka", 192.

18. Landauer, R. (1961). Irreversibility and Heat Generation in the Computing Process. IBM Journal of Research and Development, 5 (3), 183–191. doi: 10.1147/rd.53.0183

19. Bennett, C. H. (2003). Notes on Landauer's principle. Reversible Computation and Maxwell's Demon. Studies in History and Philosophy of Science Part B: Studies in History and Philosophy of Modern Physics, 34 (3), 501–510. doi: 10.1016/s1355-2198(03)00039-x

20. Bérut, A., Arakelyan, A., Petrosyan, A., Ciliberto, S., Dillenschneider, R., Lutz, E. (2012). Experimental verification of Landauer's principle linking information and thermodynamics. Nature, 483 (7388), 187–189. doi: 10.1038/nature10872

21. Leff, H. S., Rex, A. F. (Eds.) (2002). Maxwell's Demon 2 Entropy, Classical and Quantum Information, Computing. Bristol: Institute of Physics Publishing, 502. doi: 10.1201/9781420033991

22. Datta, S. (2007). Nanodevices and Maxwell's Demon. Purdue University, West Lafayette, USA, 18. Available at: <http://arxiv.org/ftp/arxiv/papers/0704/0704.1623.pdf>

23. Kruglyak, Yu. A. (2015). Nanoelectronics «bottom – up»: non-equilibrium green's functions method, model



transport problems and quantum interference. ScienceRise, 9/2 (14), 41–72. doi: 10.15587/2313-8416.2015.48827

24. Kruglyak, Ju. O., Striha, M. V. (2014). Uroky nanoelektroniky: Kvantova interferencija i defazirovka v metodi nerivnovazhnyh funkcij Grina. Sensor Electronics Microsys. Tech., 11 (3), 5.

25. Kruglyak, Yu. A. (2015). «Bottom – up» nanoelectronics: the hall effects, measurement of electrochemical potentials and spin transport in the NEGF model. ScienceRise, 10/2 (15), 35–67. doi: 10.15587/2313-8416.2015.51353

26. Horodecki, R., Horodecki, P., Horodecki, M., Horodecki, K. (2009). Quantum entanglement. Reviews

of Modern Physics, 81 (2), 865–942. doi: 10.1103/revmodphys.81.865

27. Friedman, J. R., Sarachik, M. P. (2010). Single-Molecule Nanomagnets. Annual Review of Condensed Matter Physics, 1 (1), 109–128. doi: 10.1146/annurev-conmatphys-070909-104053

28. Molecular Magnetism Web. A gate to molecular magnetism. Available at: <http://www.molmag.de/>

29. Fundamentals of Nanoelectronics, Part 2: Quantum Models. nanoHUB-U. Available at: <http://nanohub.org/courses/FoN2>

30. PurdueX. Free online courses from Purdue University. Available at: <https://www.edx.org/school/purdue>

*Рекомендовано до публікації д-р фіз.-мат. наук Глушков О. В.*

*Дата надходження рукопису 20.10.2015*

**Кругляк Юрий Алексеевич**, доктор химических наук, профессор, кафедра информационных технологий, Одесский государственный экологический университет, ул. Львовская, 15, г. Одесса, Украина, 65016  
E-mail: quantumnet@yandex.ua