

М.С. Жуковский, С.А. Безносюк

**Фемтосекундный «процессинг» наносистем:
теория и компьютерное моделирование
квантовых диссипативных наноструктур**

M.S. Zhukovsky, S.A. Beznosyuk

**Femtosecond Processing of Nanosystems:
Theory and Computer Simulation
of Quantum Dissipative Nanostructures**

Рассмотрена роль эффектов множественного рождения и взаимопревращений составных, сопряженных по заряду и спину электронных пар в неравновесной самоорганизации квантовых диссипативных наноструктур материалов. Предложены новые теоретические представления квантовой диссипативной нанодинамики, подходы и методы компьютерного моделирования процессов субфемтосекундной диссипации энергии в неравновесных наносистемах.

Ключевые слова: квантовые наносистемы, диссипативные структуры, фемтосекундный «процессинг», теория, компьютерное моделирование.

The paper considers the role of effects of plural pair creation and transmutations of components conjugated on charge and spin in non-equilibrium self-organizing of quantum dissipative nanostructures of materials. New theoretical representations of quantum nanodynamics, approaches and methods of computer modeling of femtosecond dissipation energy processes in non-equilibrium nanosystems are offered.

Key words: quantum nanosystems, dissipative structures, femtosecond processing, theory, computer simulation.

Введение

Нанотехнологии следующего поколения имеют два отличия от существующих. Первое – это применение субфемтосекундного импульсного «процессинга» наносистем. В связи с этим в настоящее время развивается физика фемтосекундных и аттосекундных процессов, протекающих в наносистемах конденсированного состояния с предельно малыми размерами неравновесных наночастиц – от 0.3 до 10.0 нм. Эти процессы генерируются в веществе как результат лазерных сверхкоротких импульсов в области экстремального ультрафиолета и синхротронного мягкого рентгеновского излучения с энергией квантов от 4 до 300 эВ [1, с. 831]. Второе – это использование самоорганизации нелинейных каналов диссипации энергии активированных наночастиц для формирования адаптивных квантовых диссипативных наноструктур материалов.

Фемтосекундная эволюция неравновесных наносистем имеет временной ритм диссипации энергии возбуждений на один-два порядка меньше периода колебания атомов в решетке и элементарных актов химических реакций. Сотни фемтосекунд – типичное время диссипации энергии электронов в тепловые колебания ионов решетки и в энергию элементарных химических реакций в твердом теле. Действие фемтосекундного лазера

на внешние электронные оболочки атомов происходит практически при неподвижной решетке. В результате электроны частично вылетают наружу, образуя над поверхностью образца электронную плазму, остальные возбужденные электроны принимают участие в субфемтосекундной активации наночастиц в материале. Это связано с тем, что возбужденные электроны создают субфемтосекундную поляризацию вакуума составных квантовых электронных квазичастиц – электрон-дырочных пар экситонов $|e^+e^->$ внутри наночастиц малого размера. «Виртуальные экситоны» поглощают часть энергии возбуждения и экранируют возбужденные электроны. Такие виртуальные «экситонные пары» могут за субфемтосекундное время жизни удержать электроны и накопить энергию поглощенных лазерных квантов на наночастицах, формируя квантовые диссипативные наноструктуры материалов активных энергонасыщенных наночастиц с размерами до 10 нм.

Процессы фемтосекундного обмена энергией, энтропией и информацией с участием виртуальных квантовых частиц, сопровождающиеся изменением их числа в наносистеме, могут быть описаны только в рамках квантово-полевых релятивистских подходов термополевой динамики и квантово-полевой химии конденсированного состояния [2, с. 23; 3; 4, с. 125; 5, с. 19].

Нелинейные квантовые диссипативные наноструктуры накапливают энергию на внутренних степенях свободы составных двухчастичных электронных возбуждений, предотвращая как тепловой разогрев решетки, так и выброс электронов из материала. Квантовые диссипативные наноструктуры придают материалам необычные адаптивные физико-химические и биомиметические свойства. В работе рассмотрены теоретические, компьютерные имитационные подходы к описанию фемтосекундного «процессинга» квантовой диссипативной наносистемы при активации степеней свободы виртуальных пар электронов.

Нелинейные каналы квантово-полевой диссипации энергии наносистем

Самоорганизация нелинейных каналов диссипации энергии наночастиц под воздействием инициирующих в фемтосекундном импульсном режиме лазеров возникает благодаря фундаментальным кинематическим условиям реализации квантово-полевой динамики. Согласно им критичным является сближение длин волн электронных квазичастичных возбуждений конденсированного состояния с линейным размером его наночастиц, потому что в этом случае возникает неустойчивость зонного спектра энергии элементарных квазиэлектронных возбуждений. В результате этого возникает локальная система энергетических уровней наночастицы, имеющая энергетическую «щель» ϵ_g на уровне Ферми. Ширина щели нелинейно зависит от линейного размера наночастицы. При наличии щели в наносистеме появляются дополнительные виртуальные скрытые степени свободы составных квантовых квазичастиц экситонов $|e^+e^- \rangle$. Они описывают нелинейные флуктуации спин-зарядовой поляризации физического вакуума экситонов внутри активированной наночастицы.

Для этих квантово-полевых степеней свободы фемтосекундный «процессинг» активирует фемтосекундные нелинейные каналы диссипации в наносистемах при выполнении кинематического условия: $\epsilon < \epsilon_g$, где ϵ – энергия экситонной виртуальной пары, ϵ_g – ширина энергетической щели в электронном спектре квантово-размерной наночастицы на уровне Ферми диссипативной среды.

В квантовой теории поля электрон имеет внутренние релятивистские степени свободы. К ним относятся состояния с массой покоя $|m_e \rangle$, два зарядовых состояния: негатона $|e^- \rangle$ и позитона $|e^+ \rangle$ и два спиновых состояния: спин «вверх» $|\alpha \rangle$ и спин «вниз» $|\beta \rangle$. Квантовые составные двухэлектронные частицы могут быть определены с помощью спин-зарядового сопряжения по внутренним квантовым степеням свободы электронов. Например, составная квантово-полевая частица позитроний (экситон) описывается двухэлектронным когерентным квантовым состоянием негатон-позитонной пары $|e^-e^+ \rangle$. Также можно ввести составную квантовую частицу двухэлектронной

негатон-негатонной пары $|e^-e^- \rangle$ и позитон-позитонной пары $|e^+e^+ \rangle$. Использование спинового сопряжения позволяет дополнительно различать состояния составных двухэлектронных частиц. Для экситона состояние $|e^-_a e^+_b \rangle$ описывает пару электронного негатона со спином «вверх» и электронного позитона со спином «вниз». Состояние $|e^-_a e^-_b \rangle$ описывает бирадикальную пару электронных негатонов со спином «вверх» и «вниз» соответственно.

Когерентность движения квантовых двухэлектронных квазичастиц задается первичной квантовой запутанностью их состояний требованием фермионной антисимметрии вектора состояния по перестановкам в паре электронов.

Для квантово-запутанного состояния экситона электронов с порядковыми номерами $\{1; 2\}$ вектор гильбертового пространства имеет вид

$$|e^-_a e^+_b \rangle = (1/2)^{-1/2} \{ |e^-_a(1) \rangle |e^+_b(2) \rangle - |e^+_b(1) \rangle |e^-_a(2) \rangle \}. \quad (1)$$

Соответственно для бирадикального состояния негатонов имеем:

$$|e^-_a e^-_b \rangle = (1/2)^{-1/2} \{ |e^-_a(1) \rangle |e^-_b(2) \rangle - |e^-_b(1) \rangle |e^-_a(2) \rangle \}. \quad (2)$$

При квантовой суперпозиции негатон-негатонного $|e^-e^- \rangle$ и негатон-позитонного $|e^-e^+ \rangle$ состояний возникает дважды нефакторизуемое квантово-запутанное состояние электронной пары:

$$|e^-_a e^-_b e^-_c e^+_d \rangle = (1/2)^{-1/2} \{ |e^-_a e^-_b \rangle + |e^-_c e^+_d \rangle \}. \quad (3)$$

Такое состояние описывает бизарядовое $\{-2e; 0e\}$ и бирадикальное $\{\alpha; \beta\}$ неравновесное состояние электронной пары с симметричной флуктуацией ее эффективного заряда относительно значения заряда электрона: $q_{2e} = (-e \pm e)$ и **распределенной двухэлектронной пары спиновых состояний** $|\alpha \rangle$ и $|\beta \rangle$.

В релятивистском случае время процесса является динамической переменной. Для него выполняется точное соотношение неопределенностей Гейзенберга, как и для трех других пространственных координат. Откуда время жизни δt релятивистской виртуальной пары электронов имеет ограничение сверху при заданной флуктуации энергии $\delta \epsilon$ точным соотношением неопределенностей Гейзенберга вида $\delta t \delta \epsilon \leq \hbar/2$. Тогда среднее время жизни виртуальной пары в когерентном состоянии составит половину максимально допустимого времени жизни: $\langle \delta t \rangle = [\hbar/(2\delta \epsilon)]/2 = \hbar/(4\delta \epsilon)$. Скорость распространения релятивистских корреляций совпадает со скоростью светового сигнала c , поэтому средняя длина квантовой когерентности состояния виртуальной пары электронов будет $\langle \delta \lambda \rangle = c \langle \delta t \rangle = \hbar c/(4\delta \epsilon)$. Когда возникают множественные процессы рождения виртуальных экситонных пар в пространстве и во времени эволюции, материал наделяется матрицей когерентных флуктуаций энергии экситонов.

Оценки средних времен жизни и размера когерентного состояния виртуальных экситонов, поглотивших и локализуемых в наночастице материала энергию квантовой флуктуации $\delta \epsilon$, дают для энергии кванта

$\delta\varepsilon \sim 5.0$ эВ, среднее время жизни $\langle\delta\tau\rangle \sim 0.03$ фс = $= 30$ ас и длину квантовой когерентности виртуальной пары $\langle\delta\lambda\rangle \sim 9.0$ нм. Этот средний размер области когерентности близок к известному критическому размеру наночастиц, ниже которого физические и химические свойства отклика неравновесных наносистем кардинально изменяются. Таким образом, в ходе «процессинга» наноматериала субфемтосекундными импульсами лазерного излучения в нем возникают пространственно-временные ячейки квантовых структур когерентных виртуальных двух-электронных флуктуаций экситонов, экранирующих возбужденные электроны. В них появляются сильно-коррелированные когерентные квантовые состояния составных наночастиц, включающих электронно-ядерную подсистему и подсистему когерентных экситонов. При этом когерентность фотонов лазерного излучения обеспечивает взаимную когерентность пар виртуальных экситонов. И так как они являются бозонами, то сами образуют когерентную матрицу квантовых поляризации вакуума экситонов внутри наночастиц.

Моделирование диссипативной квантовой динамики наночастиц в поле виртуальных когерентных электронных пар экситонов

Квантово-полевая динамика сильно-коррелированных когерентных состояний неравновесной наночастицы в диссипативной среде конденсированного состояния имеет квантование времени эволюции актами потери и восстановления когерентности движения, иными словами, актами диссипации энергии в среду. Рассмотрим квантовую кинетику этого процесса диссипации. Для простоты все диаграммы мы приводим для одного кванта излучения, одного возбужденного электрона и одной экранирующей пары экситона.

В процессе поглощения кванта лазерного импульса $|\gamma_0\rangle^*$ его энергия трансформируется в энергию электронного возбуждения наночастицы и экранирующих его виртуальных экситонов. При этом ядерно-электронное квантовое состояние $|ne^-_{N-1}_0\rangle$ наночастицы переходит в активированное квантовое состояние $|ne^-_{N-1}_0\rangle^*$ в силовом поле виртуальной когерентной экситонной пары $|e^-e^+\rangle_1^*$ по диаграмме процесса активации:

$$|ne^-_{N-1}_0\rangle|e^-e^+\rangle_0|\gamma_0\rangle^* \Rightarrow |ne^-_{N-1}_1\rangle^*|e^-e^+\rangle_1^*|e^-e^+\rangle_0. \quad (4)$$

За время $\langle\delta\tau\rangle \ll 1$ фс, не превышающее время жизни виртуальной когерентной экситонной пары $|e^-e^+\rangle^*$, посредством квантового запутывания формируется когерентное состояние $|ne^-_{N-1}(e^-e^+e^-e^+)\rangle_1^*$ активированной наночастицы и виртуальной когерентной экситонной пары типа (3):

$$|ne^-_{N-1}_1\rangle^*|e^-e^+\rangle_1^*|e^-e^+\rangle_0 \Rightarrow |ne^-_{N-1}(e^-e^+e^-e^+)\rangle_1^*|e^-e^+\rangle_0. \quad (5)$$

После этого начинается процесс квантовой диссипации энергии комплекса в среду термостата за счет временной последовательности релаксационных актов потери и восстановления его квантовой

когерентности. При релаксации изображающей точки в конфигурационном пространстве ядер, понижая накопленную потенциальную энергию, активированная наночастица совершает работу по увеличению кинетической энергии экситонных флуктуаций. Это влечет за собой снижение когерентности квантового состояния комплекса «активированная наночастица + экситоны» в целом и рост его энтропии. В тепловом равновесии с диссипативной релаксационной средой-термостатом предельное декогерирование соответствует накоплению в комплексе на каждой степени свободы конфигурационной точки N ядер тепловой кинетической энергии виртуальных экситонов $kT/2$ [6, с. 18]. Откуда следует, что предельно допустимой степени декогерирования комплекса соответствует накопление на виртуальных экситонах кинетической энергии флуктуаций $\delta T_{|e^-e^+\rangle} = 3/2NkT$, где N – число ядер наночастицы, T – температура диссипативной среды. В результате квантовой редукции экситонного состояния тепловая кинетическая энергия с внутренних скрытых степеней свободы экситонных пар сбрасывается в термостат и восстанавливается внутренняя когерентность активированного комплекса. Акты «декогерирования-когерирования» комплекса наночастицы с экситонными парами с диссипацией «квантов» $\delta T_{|e^-e^+\rangle}$ имеют вид цепочки:

$$\begin{aligned} &|ne^-_{N-1}(e^-e^+e^-e^+)\rangle_1^*|e^-e^+\rangle_0 \Rightarrow \\ \Rightarrow &\dots |ne^-_{N-1}(e^-e^+e^-e^+)\rangle_1^*|e^-e^+\rangle_0 + \delta T_{|e^-e^+\rangle}(\delta\tau_i) \Rightarrow \dots (5) \end{aligned}$$

Последовательность диссипативных актов нелинейной квантовой дезактивации наносистемы образует временной ряд $\{\delta\tau_i, (i = 1, 2, \dots)\}$ неравновесной квантовой релаксации к одному из стационарных аттракторов активированной неравновесной наносистемы. Квантовая стохастичность диссипации задает марковость неравновесного процесса. Следует обратить внимание на то, что ритм $\{\delta\tau_i\}$ актов диссипации зависит как от температуры диссипативной релаксационной среды-термостата T , так и от нуклеарности N наночастиц.

Компьютерное моделирование квантовых диссипативных наноструктур

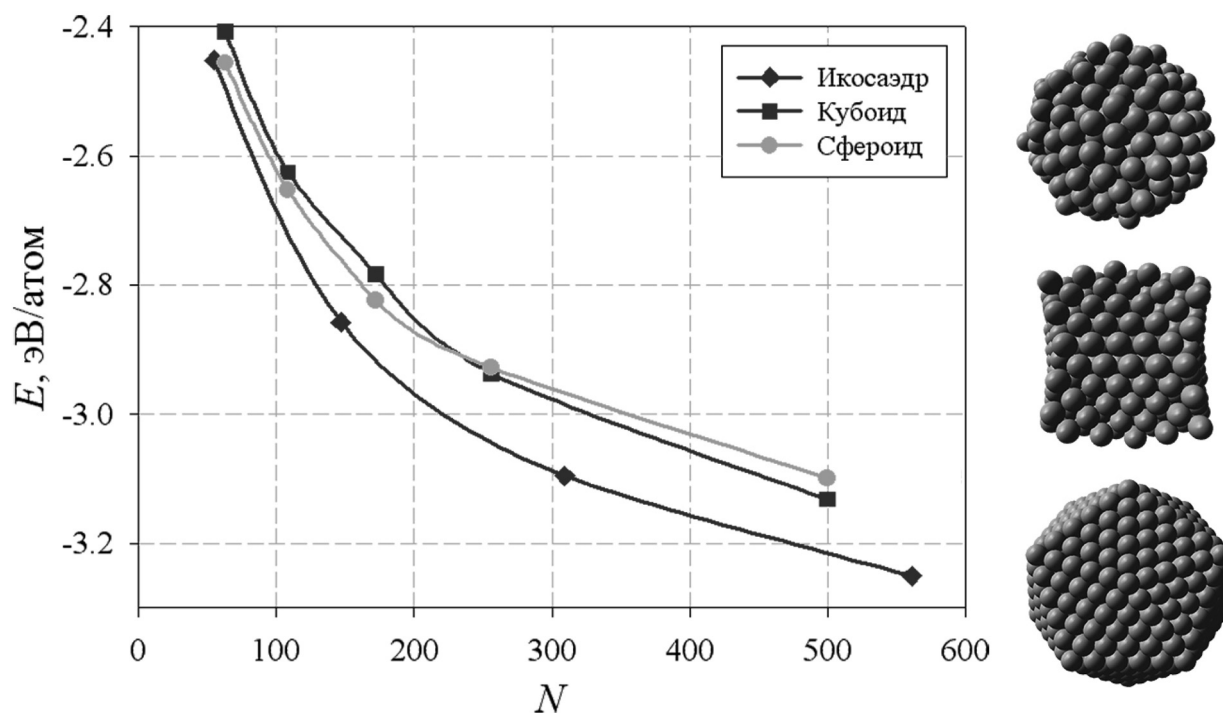
Временной ритм $\{\delta\tau_i\}$ диссипации энергии зависит синергетически от многих внешних факторов, таких как температура, давление, химический состав, структура и морфология неравновесных наночастиц, а также от скрытых нелинейных факторов когерентной квантовой запутанности наночастиц и экситонного поля. Ранее был рассмотрен метод компьютерного моделирования процесса диссипирования энергии активированной наночастицы [7, с. 143].

Ритм времени диссипации задает специфику механизмов выхода квантовых диссипативных составных наносистем на долгоживущие неравновесные стационарные состояния (аттракторы). Однако не только временной ритм нелинейных актов диссипации влияет на картину стационарных неравновесных аттракторов.

Выход на аттракторы определяется также и особенностями поверхности потенциальной энергии в конфигурационном пространстве ядер релаксирующей энергонасыщенной наночастицы.

В случае формирования виртуальных экситонных пар электронов в атомных кластерах переходных металлов возникает режим диссипативной эволюции этих неравновесных наночастиц в материале. Компьютерные эксперименты ранее показали, что в режиме фемтосекундной диссипативной нанодинамики с течением времени происходят множественные бифуркации морфологии и структуры неравновесных наносистем. Нами были обнаружены два основных морфологических типа аттракторов квантовых диссипативных наноструктур неравновесных наночастиц никеля, содержащих от десятков до нескольких сотен ядер атомов. Их формы «кубоида» и «сфероида» показаны на рисунке. Эти аттракторы находятся в метастабильных ловушках по-

тенциальной поверхности активированных наночастиц, как это видно из сравнения с равновесными конфигурациями типа икосаэдров, обладающих плотнейшей (111)-упаковкой атомов всех граней нанокластера. Данные двух верхних графиков на рисунке получены путем оптимизации геометрии изначально кубических наночастиц никеля различной нуклеарности. Нижняя кривая получена оптимизацией энергии наночастиц никеля икосаэдрической формы ($N = 55; 147; 309; 561$). При этом видна конкуренция двух форм неравновесных аттракторов, ведущая к проявлению свойства мультистабильности активированных наночастиц никеля. В области 250 атомов эти формы энергетически вырождены. Область большей устойчивости нормальных гранецентрированных кубических структур, для которых процесс формирования специфических изгибов граней, ведущих к кубоидному аттрактору, невыгоден или кинетически заторможен, лежит выше по значению



Энергии равновесных структур икосаэдров и метастабильных неравновесных структур кубоидного и сфероидного аттракторов для наночастиц Ni различной нуклеарности и $T = 0,1\text{K}$

ям нуклеарности. Область повышенной устойчивости сферических и икосаэдрических форм располагается при нуклеарности ниже 250 атомов.

Заключение

Сейчас достаточно хорошо известно, что «процессинг» квантово-размерных биологических наносистем в живой природе происходит на основе синергетических нелокальных корпоративных механизмов самосборки и самоорганизации. Такие наносистемы

лежат в основе сложных элементов биологических объектов. Это, например, наномембраны, наноскопические ферменты, «топливные элементы» биоклеток, биологические ассемблеры на базе ДНК и РНК. Технологические барьеры для «процессинга» малых биомиметических наносистем возникают при приближении к характерным для них критическим размерам $L \leq 10$ нм и фемтосекундным временам жизни. Эти квантово-размерные биомиметические наноэлементы

конденсированного состояния по своим физическим, химическим и информационным свойствам оказались «равноудаленными» как от локальных атомных квантовых систем: атомов, молекул и их кластеров, так и от локальных классических систем, например микроскопических дефектов: вакансий, дислокаций, границ и т.п.

Вторая важнейшая область «отказа» от современных нанотехнологий – «процессинг» наноэлементной базы компьютерных нанотехнологий. Это связано с тем, что такие нанотехнологии основываются на применении наносистемных нелокальных биомиметических квантово-запутанных наноинструментов и устройств – нанороботов. Третья «неудача» нанотехнологий – «процессинг» наноэлементов водородной энергетики, требующих фемтосекундного контроля позиционирования сверхподвижного активного водорода. Важная фундаментальная научная проблема, на решение которой направлена данная статья, – это разработка принципов нанотехнологий новых поколений адаптивных биомиметических материалов и компьютерных наноустройств измерения, контроля и «процессинга» наносистем.

Главным отличием нанопроцессинга биомиметических материалов нового поколения является

то, что его результат зависит не только от внешних термодинамических параметров (T, P, σ, μ, E, H) среды-термостата, но и от самоорганизации наночастиц за счет активизации нелинейно-диссипативных внутренних степеней свободы. Скрытые внутренние степени свободы задаются кинематическими переменными: степенью квантовой когерентности η ($0 \leq \eta \leq 1$) составных квантовых квазичастиц, временем жизни τ , длиной когерентности λ кинематических волн зарядовой и спиновой плотностей квантовой поляризации физических вакуумов различных типов составных квантовых экситонов и бирадикалов.

В результате спонтанных флуктуационных процессов подстройки скрытых кинематических квантовых переменных активных наночастиц под изменение внешних параметров диссипативной среды функциональные биомиметические наноматериалы смогут проявлять свойства фемтосекундной адаптивности и «интеллектуальности». Развитие субфемтосекундного «процессинга» нелинейных квантовых диссипативных наноструктур решит ряд фундаментальных задач разработки нанотехнологий биомиметических, компьютерных, водородных материалов и систем.

Библиографический список

1. Keller U. Recent developments in compact ultrafast lasers // Nature. – 2003. – Vol. 424.
2. Умэдзава Х. Квантовая теория поля. – М., 1958.
3. Умэдзава Х., Мацумото Х., Татики М. Термодинамическая динамика и конденсированные состояния. – М., 1985.
4. Beznosjuk S.A., Minaev B.F., Muldakhmetov Z.M. Informative energetic structure and electronic multistability of condensed state // J. Mol. Struct. (Theochem). – 1991. – Vol. 227.
5. Жуковский М.С., Безносюк С.А. Би-ионные и бирадикальные релятивистские субфемтосекундные квантовые флуктуации неравновесных наносистем // Ползуновский Вестник. – 2009. – №3.
6. Лавенда Б. Статистическая физика. Вероятностный подход. – М., 1999.
7. Важенин С.В., Жуковский М.С., Безносюк С.А. Эффекты бифуркации и мультистабильности в квантовой химии металлических кластеров // Известия АлтГУ. – 2010. – №3/1.