

УДК 621.382.85

## О ВОЗМОЖНОМ МЕХАНИЗМЕ ДЕТЕКТИРОВАНИЯ СПЕКТРОВ В МОЛЕКУЛЯРНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ УСТРОЙСТВАХ

А. С. Михайлов, И. Ю. Потеряйко

*(кафедра физики низких температур)*

Предложен возможный механизм детектирования спектров в молекулярных вычислительных устройствах, основанный на туннелировании частиц вдоль молекулярной цепи, в которой профиль потенциала зависит от спектра падающего излучения. Выполнен расчет коэффициента туннелирования в простейшем случае потенциального профиля с конечным числом барьеров и провалов между ними.

В настоящее время нет единой концепции построения молекулярных вычислительных устройств. Предполагается, что элементарной базой для конструирования таких устройств будут макромолекулы, причем их использование в качестве блоков, обрабатывающих информацию, может быть самым разнообразным. Наряду с логическим принципом обработки информации в создаваемых вычислительных устройствах большую роль могут играть аналоговые механизмы обработки информации.

При аналоговом подходе задачи детектирования и распознавания спектров могут возникать довольно часто. Так, например, в работе [1] отмечалось, что каждой семантической структуре, представимой определенным топологическим графом, можно поставить в соответствие временной сигнал с характерным спектром. Поэтому с помощью зависящих от времени периодических сигналов может быть осуществлена передача информации на уровне семантических структур. Таким образом, блок детектирования спектра может входить существенной составной частью в устройство, осуществляющее аналоговые операции с графами (семантическими структурами).

В качестве элементов молекулярных вычислительных устройств [2] предполагается использовать цепочки макромолекул, которые можно изготавливать, например, с помощью метода Ленгмюра—Блоджет. Для обработки информации может быть использовано туннелирование вдоль таких полимерных цепей как реальных частиц (электронов), так и квазичастиц — солитонов (квантов коллективных колебаний атомов цепочки).

Предлагаемый ниже возможный механизм детектирования спектров в молекулярных вычислительных устройствах основан на использовании туннелирования частиц вдоль цепочки элементов, свойства которых зависят от спектра падающего на них излучения. Подчеркнем, что в данной заметке мы лишь обсуждаем принципиальную возможность применения данного механизма в качестве детектора спектра, не рассматривая конкретных примеров его реализации.

Представим себе совокупность полимерных цепей, находящуюся между двумя поверхностями. Частицы могут распространяться вдоль

цепи (переходы между цепями в поперечном направлении отсутствуют). Потенциал вдоль цепи представляет собой конечное число локальных максимумов и провалов между ними (рис. 1). Туннелирование частиц вдоль такой цепочки может иметь как квантовый характер (подбарьерное туннелирование), так и характер перескоков через потенциальные барьеры за счет тепловых флуктуаций. Мы отвлечемся от конкретных деталей механизма туннелирования и будем предполагать, что нам известны вероятности переходов частиц через барьеры.

Основная идея предлагаемого способа детектирования спектра молекулярными устройствами состоит в том, что если на такую систему падает излучение с определенным спектром, то оно может за счет некоторых механизмов изменять профиль потенциала вдоль цепочки и этим изменять условия туннелирования для частиц. Таким образом, спектр излучения управляет потоком частиц через систему.

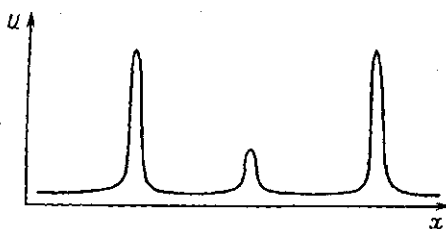


Рис. 1. Профиль потенциала вдоль цепи

Для того чтобы показать принципиальную возможность такого механизма детектирования, рассмотрим простой случай, когда провалы между барьерами лежат на одном уровне энергии. Предположим теперь, что величиной каждого барьера управляет некоторый молекулярный блок, который может находиться в двух устойчивых состояниях 1 и 2, причем переход из состояния 1 в состояние 2 может индуцироваться излучением частоты  $\omega$  с достаточной интенсивностью. Такой блок можно назвать «рецептором», настроенным на частоту  $\omega$ . Каждому из двух состояний рецептора отвечают определенные величины  $U_1$  и  $U_2$  потенциальных барьеров. Роль устойчивых состояний в рецепторе могут играть как различные пространственные молекулярные конфигурации, так и стационарные состояния квантовой молекулярной системы с разностью энергий  $\Delta E = \hbar\omega$ .

Если, к примеру, некоторые барьеры в отсутствие излучения подняты, то включение излучения, содержащего частоты, на которые настроены рецепторы, приведет к опусканию барьеров и резкому увеличению потока частиц через канал. Предположим также, что концентрация частиц внутри среды 1 достаточно велика и ее изменением за счет ухода частиц в канал туннелирования можно пренебречь и, с другой стороны, концентрация частиц в среде 2 достаточно мала, так что можно будет пренебречь обратным потоком частиц из среды 2.

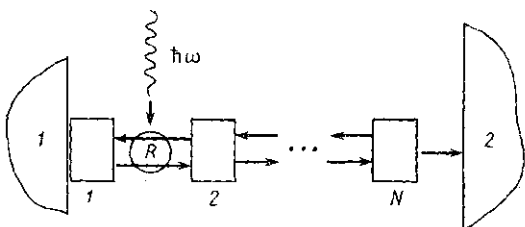


Рис. 2. Блок-схема детектора ( $R$  — рецептор между резервуарами)

Итак, канал туннелирования можно представить цепочкой «резервуаров», накапливающих частицы и обменивающихся ими (рис. 2), причем мы будем пренебрегать взаимодействием частиц друг с другом и считать, что величина потока частиц через барьер зависит только от величины этого барьера. Если ввести относительные вероят-

ности переходов между соседними резервуарами  $W_{i \rightarrow i+1}$  и  $W_{i+1 \rightarrow i}$ , то для числа частиц  $n_i$  в  $i$ -м резервуаре можно написать следующую систему кинетических уравнений:

$$\begin{aligned} dn_i/dt &= n_{i-1}W_{i-1 \rightarrow i} + n_{i+1}W_{i+1 \rightarrow i} - \\ &- n_i(W_{i \rightarrow i-1} + W_{i \rightarrow i+1}) \quad \text{для } i=2, \dots, N-1, \\ dn_N/dt &= n_{N-1}W_{N-1 \rightarrow N} - n_N(W_{N \rightarrow N-1} + W_{N \rightarrow \text{out}}), \end{aligned}$$

где  $W_{N \rightarrow \text{out}}$  — условная вероятность перехода частицы из  $N$ -го резервуара в объем среды 2. Как было упомянуто выше, число частиц в первом резервуаре поддерживается постоянным (за счет их притока из среды 1) и равным  $n_1=n$ . Если дополнить эту систему начальными условиями, то решение ее даст нам информацию о зависимости  $n_i$  от времени. Однако такое детальное описание нам не требуется, поскольку за характерное время  $\tau$  порядка  $1/W$ , где  $W = \max W_{i \rightarrow j}$ , число частиц в каждом из резервуаров достигнет своего стационарного значения и процесс туннелирования станет установившимся. Он будет характеризоваться общим потоком частиц  $J$  через систему, не зависящим от времени.

Для вычисления величины потока можно использовать простое условие: в установившемся процессе через любое сечение, перпендикулярное направлению туннелирования, протекает постоянный поток  $J$ . Выбирая сечения, проходящие между резервуарами, можно получить систему из  $N$  уравнений:

$$\begin{aligned} J &= n_N W_{N \rightarrow \text{out}}, \\ J &= n_{N-1} W_{N-1 \rightarrow N} - n_N W_{N \rightarrow N-1}, \\ J &= n_1 W_{1 \rightarrow 2} - n_2 W_{2 \rightarrow 1}. \end{aligned}$$

Последовательно выражая в уравнениях  $n_k$  через  $n_{k+1}$  и  $J$ , получаем, что

$$J = \chi n,$$

где величина  $\chi$  задается выражением

$$\chi = \left[ \sum_{i=1}^N \frac{1}{W_{i \rightarrow i+1}} \prod_{k=1}^{i-1} \frac{W_{k \rightarrow k+1}}{W_{k+1 \rightarrow k}} \right]^{-1} \quad (1)$$

(для удобства индекс «out» обозначен как « $N+1$ »). Этот коэффициент будем называть коэффициентом туннелирования. Он характеризует пропускную способность канала и зависит от его потенциального профиля.

Зададим конкретный вид зависимостей  $W_{i \rightarrow i+1}$  и  $W_{i+1 \rightarrow i}$  от высоты потенциальных барьеров:

$$W_{i \rightarrow i+1} = W_{i+1 \rightarrow i} = \omega \exp \{ -U^{(i)} / \Theta \}, \quad (2)$$

где  $U^{(i)}$  — высота барьера между резервуарами с номерами  $i$  и  $i+1$ ,  $\Theta$  — температура системы. Величины  $U^{(i)}$  могут принимать значение либо  $U_1$ , либо  $U_2$ , ( $U_2 > U_1$ ).

Выберем набор из  $N$  частот ( $\omega_j$ ), считая, что каждый рецептор настроен на соответствующую частоту. Пусть  $\omega_j$  равномерно распределены в том интервале частот, в котором находится детектируемый спектр. Поставим в соответствие каждому спектру набор из  $N$  дво-

ичных цифр по следующему правилу: если в спектре присутствует гармоника частоты  $\omega_j$  и ее амплитуда больше амплитуды, при которой срабатывает  $j$ -й рецептор, то в  $j$ -ю позицию запишем «1», в противном случае — «0». Итак, каждый спектр может быть закодирован набором чисел  $\{S_{ij}\}$ , каждое из которых принимает значение 0 или 1. Настройка детектора на определенный спектр, закодированный последовательностью  $\{S_j^0\}$ , заключается в том, что в отсутствие излучения высота  $j$ -го потенциального барьера определяется формулой

$$U^{(j)} = U_1 + S_j^0 \Delta U,$$

где  $\Delta U = U_2 - U_1$ .

Если в подаваемом на систему излучении присутствует частота  $\omega_j$ , которой соответствует амплитуда, достаточная для срабатывания рецептора, то  $j$ -й рецептор поднимет или опустит потенциальный барьер в зависимости от того, в каком состоянии он находился в отсутствие излучения. Таким образом, если падающий спектр закодирован последовательностью  $\{S_j\}$ , то после некоторого времени, требуемого для установления, потенциальный профиль будет описываться формулой

$$U^{(j)} = U_1 + |S_j - S_j^0| \Delta U. \quad (3)$$

Тогда коэффициент туннелирования для спектра  $\{S_j\}$  найдем, подставив (3) и (2) в (1):

$$\chi = \frac{\omega \exp\{-U_1/\Theta\}}{\sum_j \exp\{|S_j - S_j^0| \Delta U/\Theta\}}. \quad (4)$$

Из формулы (4) видно, что если  $\Delta U \gg \Theta$ , то знаменатель имеет минимум при  $S_j = S_j^0$  (т. е. при полном совпадении кодов подаваемого и записанного спектров) и резко возрастает, если хотя бы одна из цифр у сравниваемых спектров не совпадает. Именно такое резонансное воздействие на коэффициент туннелирования цепи можно использовать для детектирования спектров.

#### ЛИТЕРАТУРА

[1] Michailov A. S. // J. Phys. A. 1988. 21. P. L487. [2] Carter F. L. // Physica. 1984. D 10. P. 175.

Поступила в редакцию  
15.12.89