

УДК 541.1

Аттосекундные нанотехнологии: электронные механизмы формирования неравновесных квантовых супра-атомных наноструктур материалов

С.А. Безносюк, М.С. Жуковский, О.А. Маслова

Алтайский государственный университет (Барнаул, Россия)

Attosecond Nanotechnology: Electronic Mechanisms of Quantum Supra-Atomic Nanostructures Formation in Materials

S.A. Beznosyuk, M.S. Zhukovsky, O.A. Maslova

Altai State University (Barnaul, Russia)

В фундаментальной концепции термополевой динамики конденсированного состояния развита теория неравновесных одно- и двухэлектронных процессов, идущих на пространственно-временных уровнях квантовых супра-атомных наноструктур в материалах, формирующихся вследствие применения аттосекундных импульсов жесткого ультрафиолета и мягкого рентгена. Показано, что в случае применения аттосекундных импульсных воздействий развертка во времени неравновесных процессов формирования в материале супра-атомного уровня начинается с локального зарождения когерентно-спутанных статическими χ -модами калибровочного электромагнитного поля двухэлектронных флуктуаций. Энергия таких двухэлектронных флуктуаций накапливается в форме квантовой электромеханической энергии статических χ -мод калибровочного электромагнитного поля. В результате в материале спонтанно возникают статические электронные лоджии с размерами от 0,1 до 10 нанометров, включающие в себя электронные пары и χ -моды калибровочного электромагнитного поля. Границы таких статических лоджий имеют кинковые топологические особенности χ -мод в физическом пространстве. Финитные электронные лоджии когерентно-спутанных пар электронов, заключая в своих границах ферми-газ электронов и ядра, задают в материале топологическую матрицу квантовых электромеханических интерфейсов. Квантовая топология пространственных носителей лоджий является покрытием квантовой топологии атомов и ферми-газовой электронной компоненты конденсированного состояния.

Ключевые слова: физика конденсированного состояния, квантовая термополевая динамика, электронная структура, квантовая наноэлектромеханическая система, аттофизика, фемтохимия, аттосекундная нанотехнология.

A theory of one- and two-electron nonequilibrium phenomena on time-spatial levels of quantum supra-atomic nanostructures in materials caused by deep-UV and soft X-ray attosecond pulses is well developed within the fundamental concept of thermal field dynamics. It is shown that time-base sweep of nonequilibrium processes of supra-atomic level formation caused by attosecond pulses starts with the local birth of coherent-entangled static χ -gauge modes of two-electron fluctuation electromagnetic fields. The two-electron fluctuation energy accumulates as a quantum electromechanical energy of static χ -gauge modes. It results in spontaneous appearance of static electromagnetic loggie 0.1–10 nm in size that include electron pairs and χ -gauge modes. Boundaries of the static electromagnetic loggie have kink topological singularities of χ -gauge modes in physical space. Finite loggie of coherent-entangled electron pairs enclose Fermi gas of electrons and nuclei and set a topological matrix of quantum electromechanical interfaces in a material. The quantum topology of loggie spatial carriers is a cover of a quantum topology of atoms and single-electron Fermi gas of condensed state.

Key words: condensed matter physics, thermo field dynamics, electronic structure, quantum nanoelectromechanical system, attophysics, femtochemistry, attosecond nanotechnology.

DOI 10.14258/izvasu(2017)1-01

Введение. Известна фундаментальная роль двух квантовых одноэлектронных масштабных уровней физико-химических процессов в любом материале: субатомного и атомного. Субатомный масштаб зада-

ет приведенная длина Комптона $\lambda_e = \frac{\hbar}{m_0 c}$ электрона.

Он является базовым в аттофизике — аттосекундной электронике внутриатомных квантовых процессов [1–4]. Атомный масштаб задается Боровским радиу-

сом $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_0 e^2}$. Он является базовым в фемтосекунд-

ной физике атомно-молекулярных процессов, простирающихся от размера атомов до микрометров. На атомном масштабном уровне в материале генерируются фемтосекундные одноэлектронные возбуждения, колебательно-вращательно-поступательные моды возбуждения систем ядер, химические реакции. Они составляют предмет изучения фемтохимии [5].

Аттосекундные процессы субатомного масштаба и фемтосекундные процессы атомного масштаба имеют пограничную область совместного протекания на нижнем пределе пространственного нанометрового масштаба материалов от десятых долей нанометров (размеров атомов) до нескольких нанометров. Эта пространственная область материала по аналогии с атомной и субатомной может быть названа супра-атомной. На существование супра-атомного масштаба наноструктур указывают недавние результаты экспериментальных исследований управления двухэлектронными возбуждениями в веществе с помощью аттосекундных импульсов ультрафиолетового излучения [6–8].

В данной работе рассмотрены физическая модель и математический формализм, описывающие совместное протекание неравновесных аттосекундных двухэлектронных и фемтосекундных одноэлектронных процессов на супра-атомном масштабе. Физика специфических электронных механизмов, действующих на этом масштабном уровне, в работе связана с эффектами неравновесности и нелинейности открытых квантовых электронных систем материалов в конденсированном состоянии [9]. Описание проведено с использованием физического моделирования и применением математического аппарата теории квантово-полевых химических систем [10–13].

Физическая модель и математический аппарат квантово-полевой химии. В постановке задач квантовой химии рассматривается изолированная система фиксированного количества ядер и электронов в неограниченном физическом пространстве R^3 . Гильбертово пространство H^N квантовых состояний системы N электронов представляется как антисимметризованное прямое произведение пространств H^1 отдельных электронов:

$$H^N = \text{Asym}(H_1^1 \otimes H_2^1 \otimes \dots \otimes H_N^1). \quad (1)$$

В квантовой теории открытых систем ядерная подсистема конденсированного состояния погружается в квантовое электронное поле, способное породить и уничтожить электроны в одноэлектронных спин-орбитальных состояниях — 1-состояниях. По принципу запрета Паули поле может породить или уничтожить в 1-состоянии только один электрон. Гильбертово пространство H^e открытой системы, состоящей из одиночных электронов, строится в виде прямой суммы гильбертовых пространств $\{H^{N_e}\}$ состояний с переменным числом электронов $N_e = 0, 1, 2, \dots, \infty$. Оно называется пространством Фока.

$$H^a = H^{0a} \oplus H^{1a} \oplus \dots \oplus H^{\infty a}. \quad (2)$$

В квантово-полевой химии конденсированного состояния электронное поле наделяется дополнительным свойством синхронно рожать и уничтожать пары электронов в когерентно-спутанном состоянии с антисимметризованными двухэлектронными спин-геминальными волновыми функциями составного бозона $\phi(rs, r's' | t)$, где t — параметр времени, r и r' — координаты электронов, s и s' — квантовые числа проекций их спинов. Спин двухэлектронного бозона может быть $S = 0$ или $S = 1$. Тогда для электронного поля имеется еще один вариант квантования числа электронов — двойками: $N_e = 0, 2, 4, \dots, \infty$. По аналогии с пространством Фока гильбертово пространство подсистемы пар электронов есть прямая сумма гильбертовых пространств с различным числом пар:

$$H^{2e} = H^{0(2e)} \oplus H^{1(2e)} \oplus \dots \oplus H^{\infty(2e)}. \quad (3)$$

Обобщенное пространство состояний одноэлектронных и двухэлектронных подсистем в рамках квантово-полевой химии строится прямым произведением пространств одноэлектронного ферми-газа и двухэлектронного бозе-газа:

$$H_{QFC} = H^e \otimes H^{2e}. \quad (4)$$

Топологическая структура супра-атомного масштабного уровня. В физической модели когерентно-спутанной пары электронов необходимо учесть, что для протяженной в физическом пространстве системы двух электронов взаимодействие не является мгновенным из-за наличия конечности скорости с распространения калибровочного электромагнитного поля в физическом пространстве. Волновая функция $\phi(rs, r's' | t)$ может представлять зависящее от времени t синхронизированное состояние движения пары только при наличии квантового механизма когериро-

вания движения обоих электронов. Механизм состоит в том, что внутри пары устанавливается упорядоченность движения в результате спонтанного конденсирования голдстоуновских бозонов калибровочного электромагнитного поля в статические когерентные χ -моды по формуле $\chi_0(x) \rightarrow \chi_0(x) + \chi$ [9, 10]. В результате в физическом пространстве спонтанно возникает статическая электронная лоджия, включающая в себя электронную пару и статическую когерентную χ -моду калибровочного электромагнитного поля. Граница такой статической лоджии имеет кинковую топологическую особенность в физическом пространстве.

Основная идея описания топологической структуры материала на супра-атомном масштабном уровне состоит в следующем. Финитные электронные лоджии двухэлектронного бозе-газа, заключающие в своих границах ферми-газ электронов и ядра, задают в пространстве топологическую матрицу квантовых электромеханических интерфейсов конденсированного состояния. Квантовая топология пространственных носителей лоджий является покрытием квантовой топологии атомов и ферми-газовой электронной среды конденсированного состояния.

Покажем, что захват двухэлектронными лоджиями ферми-газа электронов и ядер наделяет материал различными топологическими структурами квантовых электромеханических систем супра-атомного уровня.

При возникновении когерирующей движение пары статической χ -моды калибровочного электромагнитного поля допустимые отклонения математического времени t эволюции пары в картине Шрёдингера от времен t_r релятивистской динамики электронов в паре подчиняются соотношению неопределенностей Гейзенберга для девиаций времени и энергии: $\Delta E \Delta t \leq \hbar/2$. В неравенстве $\Delta t = |t - t_r|$ и $\Delta E = |E - E_r|$ — это среднеквадратичные виртуальные отклонения динамических значений энергии и времени в системе квантовых частиц от соответствующих усредненных величин для пары — квантово-механической энергии E и времени квантово-механической эволюции t . Неравенство задает количественный критерий корректности нерелятивистского квантово-механического описания когерентно-спутанной пары электронов в рамках представления Шрёдингера. С другой стороны, Δt — это время жизни флуктуаций статической χ -моды калибровочного электромагнитного поля. Оно должно быть таким, чтобы электронная пара адекватно описывалась волновой функцией $\phi(rs, r's' | t)$ на длине когерентности пары ΔL — в лоджии пространственного носителя с заданной протяженностью ΔL . Откуда следует оценка времени жизни статической χ -моды: $\Delta t = \Delta L/c$. Учитывая

соотношение неопределенностей Гейзенберга, для линейного размера статической лоджии электронной пары получаем ограничение «сверху»:

$$\Delta L \leq \hbar c / 2\Delta E. \quad (5)$$

При возбуждении аттосекундными импульсами жесткого ультрафиолетового а и мягкого рентгеновского электромагнитного излучения когерентно-спутанных электронных пар, накопленная ими на когерирующей статической χ -моды калибровочного электромагнитного поля энергия составит $\Delta E \sim 10 - 10^3$ эВ. Из формулы (5) следует, что область существования неравновесных статических электронных лоджий когерентно-спутанных пар электронов $\Delta L \sim 0.1 - 10$ нм. Это линейные размеры генерируемых аттосекундными импульсами квантовых электромеханических систем супра-атомного уровня наноструктур материалов.

Заключение. В случае применения аттосекундных импульсных воздействий развертка во времени неравновесных процессов формирования в материале квантовых нанoeлектромеханических интерфейсов супра-атомного уровня начинается с локального зарождения когерентно-спутанных статическими χ -модами калибровочного электромагнитного поля двухэлектронных флуктуаций. Согласно рассмотренному выше двухэлектронному механизму энергия когерентно запутанных двухэлектронных флуктуаций накапливается в них в особой форме квантовой электромеханической энергии статических χ -мод калибровочного электромагнитного поля.

В термополевой динамике [9] показано, что только имеющие топологические особенности бозонные статические χ -моды могут давать вклад в наблюдаемые эффекты электродинамики материала. Если нет топологической особенности, то наличие калибровочного поля χ не приводит ни к каким наблюдаемым эффектам. Это следствие калибровочной инвариантности электродинамики. Поэтому сдвиг поля χ_m должен описывать статический объект, который имеет топологическую особенность. Таким объектом является когерентно спутанная электронная пара. В свою очередь, они формируют супра-атомный уровень параллельно протекающих разномасштабных во времени аттосекундных двухэлектронных и фемтосекундных одноэлектронных процессов.

Финитные электронные лоджии когерентно-спутанных пар электронов, заключая в своих границах ферми-газ электронов и ядра, задают в материале топологическую матрицу квантовых электромеханических интерфейсов супра-атомного масштабного уровня.

Библиографический список

1. Levesque J. and Corkum P.B. Attosecond science and technology // *Can. J. Phys.* — 2006. — Vol. 84. — № 1.
2. Corkum P.B. and Krausz F. Attosecond science // *Nature Physics.* — 2007. — № 3.
3. Krausz F. and Ivanov M. Attosecond physics // *Rev. Mod. Phys.* — 2009. — Vol. 81, № 1.
4. Gallmann L., Cirelli C., and Keller U. Attosecond Science: Recent Highlights and Future Trends // *Annual Review of Physical Chemistry.* — 2012. — Vol. 63, № 1.
5. Zewail A.H. Femtochemistry. Atomic-scale dynamics of the chemical bond using ultrafast lasers / Nobel Lecture, December 8, 1999.
6. Morishita T., Watanabe S. and Lin C.D. Attosecond light pulses for probing two-electron dynamics of helium in the time domain. *Phys. Rev. Lett.* — 2007. — Vol. 98, № 8.
7. Ott C., Kaldun A., Argenti L., Raith P., Mayer K., Laux M., et al. Reconstruction and control of a time-dependent two-electron wave packet // *Nature.* — 2014. — Vol. 516, № 7531.
8. Ranitovic P., Hogle C.W., Riviere P., Palacios A., Tong X.M., Toshima N., et al. Attosecond VUV coherent control of molecular dynamics *Proceedings of the National Academy of Sciences.* — 2014. — Vol. 111, № 3.
9. Umezawa H. Matsumoto H. Tachiki M. Thermo field dynamics and condensed states. North-Holland Pub. Co. — 1982.
10. Beznosjuk S.A., Minaev B.F., Dajanov R.D., Muldachmetov Z.M. Approximating quasiparticle density functional calculations of small active clusters: Strong electron correlation effects // *Int. J. Quant. Chem.* — 1990. — Vol. 38, № 6.
11. Beznosyuk S.A., Minaev B.F., Muldachmetov Z.M. Informative energetic structure and electronic multistability of condensed state // *J. Mol. Struct.-Theochem.* — 1991. — Vol. 227.
12. Beznosyuk S.A., Zhukovskii M.S., Potekaev A.I. The theory of motion of quantum electromechanical plasmoid nanobots in a condensed-state medium // *Russ. Phys. J.* — 2013. — Vol. 56, №5.
13. Beznosyuk S.A., Zhukovsky M.S., Zhukovsky T.M. Theory and computer simulation of quantum NEMS energy storage in materials // *Int. J. Nanosci.* — 2015; Vol. 14, № 1&2. — 1460023 DOI: 10.1142/S0219581X14600230.