



НАНОСТРУКТУРЫ

математическая физика и моделирование



НАНОСТРУКТУРЫ

математическая физика и моделирование

Nanostructures.
Mathematical Physics & Modelling

2020, volume 21(2)

Наноструктуры. Математическая физика и моделирование

Редколлегия:

**В.А. Аветисов, А.А. Белолипецкий И.В. Волович,
В.В. Гусаров, П.Н. Дьячков, Р.Г. Ефремов, Ю.Е. Лозовик,
М.А. Мазо, В.П. Маслов (главный редактор),
А.В. Махиборода (ответственный секретарь), А.Ю. Морозов,
С.А. Никитов, Г.Э. Норман, Р.А. Сурис, В.А. Тулин, Ю.А. Флёров,
А.С. Холево, А.Р. Хохлов, А.В. Чаплик,
Л.А. Чернозатонский, К.В. Шайтан**

Электронная версия журнала размещается на сайте
<http://nano-journal.ru>

Адрес редакции:

123458, Москва, ул. Таллинская, д. 34, каб. 429
+7 (495) 916-88-76
nanostructures@hse.ru

Москва

© 2020, Европейский центр по качеству
ООО Сенсор Микрон

Содержание

Дюжев Н.А.

**Мембранные технологии микроэлектроники:
возможности, ограничения, области применения и направления развития 5**

В.Ф. Дегтярев, А.П. Жилинский

**Трансформация резонансных туннельных уровней
при образовании слоистой квантово-размерной структуры 33**

Актуальные публикации прошлых лет

Г. Патти

Физическая основа кодирования и надежность в биологической эволюции 51

Информация и правила для авторов 81

Contents

N.A. Djuzhev Membrane technologies of microelectronics: possibilities, limitations, fields of application and directions of development	5
V.F. Degtyarev, A.P. Zhilinsky Transformation of resonance tunnel levels in the formation of a layered quantum-dimensional structure	33
Actual matter published in the last years	
H. Pattee The Physical Basis of Coding and Reliability in Biological Evolution	51
The information and rules for authors	81

МЕМБРАННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ: ВОЗМОЖНОСТИ, ОГРАНИЧЕНИЯ, ОБЛАСТИ ПРИМЕНЕНИЯ И НАПРАВЛЕНИЯ РАЗВИТИЯ

Н.А. Дюжев

*Национальный исследовательский университет «МИЭТ», Москва, Россия
dyuzhev@ckp-miet.ru*

Поступила 03.12.2020

Рассмотрено магистральное направление развития технологии и приборной базы микроэлектроники на ближайшие тридцать лет, называемое в международных прогнозах «Больше чем Мур». Основной и практически неограниченной областью применения этого направления является суперсистема «окружающий интеллект», а основными движителями являются: системы искусственного интеллекта, Интернета Всего и доверенные интеллектуальные сенсорные системы. Технологической основой указанного направления являются процессы объемной (3D) гетерогенной интеграции с использованием сквозных межсоединений и контактов через кремниевую пластину и промежуточной платы электрического интерфейса, называемого интерпозером. Такая технология позволяет объединять в единую вертикальную систему стек (пачку) кристаллы, изготовленные на разных подложках и на различных фабриках, но требует использования тонких (50 мкм и менее) кристаллов со сквозными отверстиями для формирования межсоединений, фактически представляющие собой мембранные структуры. Такое положение настоятельно требует оперативного проведения комплекса работ по изучению и измерению механических свойств тонких пластин, мембран и пленочных структур на мембранах для определения их прочности, а также величины и распределения внутренних механических напряжений в них. Так как указанные параметры определяют надежность и временную функциональную стабильность характеристик микросхем, микроприборов и микроэлектронных систем, как на отдельных кристаллах (подложках), так и в составе 3D структур, сформированных по технологиям гетерогенной интеграции.

Ключевые слова: магистральное направление развития микроэлектроники «Больше чем Мур», окружающий интеллект, искусственный интеллект, доверенные интеллектуальные сенсорные системы, гетерогенная объемная (3D) интеграция, мембранные технологии, механические свойства тонких пластин, мембран и пленочных структур на мембранах.

УДК 539.216.2

DOI: 10.31145/2224-8412-2020-21-2-05-32

Введение

Микроэлектроника, базирующаяся на планарной КМОП-технологии (*planar CMOS technology*) и развивающаяся, согласно закону Мура (*Moore's law*), подошла к пределу своих возможностей по масштабированию (уменьшению линейных размеров) как полевых планарных транзисторов (*Planar FET's*), так и полевых реберных транзисторов (*Fin FET's*). А также по производительности, потребляемой мощности и главное, по себестоимости передовых интегральных микросхем (ИМС) на их основе [1 – 3].

Текущее десятилетие будет последним периодом времени, когда технология микроэлектроники будет развиваться в соответствии с законом Мура. Причем из-за сложности и дороговизны такого развития, которое приведет в 2029 году к технологической норме ("технологическому узлу") (*Technology Node – Node – N*) с размером 0,8 нм, участвовать в нем смогут только три самые передовые и богатые компании: Intel (США), TSMC (Тайвань) и Samsung (Корея) [1, 4].

Для остальных компаний, фирм разработчиков и кремниевых фабрик, работающих в области микро- и наноэлектроники, международные технологические прогнозы (*ITRS* и *IRDS*) («дорожные карты») предлагают два направления развития [5, 6].

1. Фундаментальное технологическое направление «За пределами КМОП» (*Beyond CMOS*), связанное с функциональным масштабированием, т.е. с разработкой аналогов КМОП-микросхем с помощью альтернативных инновационных технологий. Причем реализация должна быть такой, чтобы функции новой микросхемы были идентичны функциям оригинальной микросхемы, и, по крайней мере, одна из ее рабочих характеристик улучшалась, а остальные – не ухудшались [5].

Инновационные технологии, к которым относятся большинство нанотехнологий, могут быть реализованы с различной архитектурой (аналоговой, квантовой, морфологической) и разными видами представления данных (аналоговыми, квантовыми, топологическими). При этом открываются возможности применения материалов, отличных от кремния, например, соединений углерода и A_3B_5 , германия, магнитных и наноструктурированных пленок, также создания систем на одноэлектронных транзисторах (*single electron transistor – SET*), на спинтронных, квантовых, молекулярных и ферромагнитных эффектах. На практике функциональное масштабирование предполагает такое проектирование микросхемы, при котором ее последующее изготовление возможно по различным технологическим нормам [3,7].

Это направление наиболее перспективно для компаний, фирм разработчиков, фабрик, производственных участков и линеек без значительных заделов в области разработки и изготовления микросхем по КМОП-технологии, которым легко переориентироваться на другие технологии.

2. Магистральное технологическое направление «Больше чем Мур» (*More than Moore*), в основе которого лежат процессы гетерогенной трехмерной (объемной) интеграции наборов микросхем логики и памяти, микро- и наносенсоров, микро- и наноэлектромеханических систем (МЭМС и НЭМС) и других цифровых и аналоговых информационно-коммуникационных устройств, изготовленных по разным технологиям на различных фабриках и реализующих всеобъемлющую область применения под названием «окружающий интеллект» (ОИ) (*Ambient Intelligence* или сокращенно *AmI*) [6, 8]. Следует напомнить, что термин «интеллект» относится к способности обучения на основе опыта и применения полученных знаний в новых ситуациях для управления окружающей средой [9].

Окружающий интеллект (ОИ) неразрывно связан с «искусственным интеллектом» (ИИ) (*Artificial Intelligence*) (AI), можно сказать, что окружающий интеллект это, по сути, искусственный интеллект в окружающей среде. С другой стороны, искусственный интеллект обязан своим успехом феноменальному развитию информационных и коммуникационных технологий (ИКТ), основанных на законах и достижениях микроэлектронного производства [8].

Под окружающим интеллектом (ОИ) понимаются электронные среды, которые чувствительны и реагируют на присутствие людей. Термин был первоначально разработан в конце 1990-х Э. Зелха (*Eli Zelkha*) и его командой в Palo Alto Ventures [10], а затем был распространен на окружающую среду без людей: «В мире интеллектуального окружения устройства работают сообща, чтобы поддерживать людей в выполнении их повседневных действий, задач и ритуалов простым, естественным образом, используя информацию и интеллект, который скрыт в сети, соединяющей эти устройства, например, Интернет Вещей (*Internet of Things*) (*IoT*)».

Сегодня Интернет вещей продолжает расти, движимый все большим количеством онлайн-информации, коммерции, развлечений и социальных сетей, и это лишь некоторые из его направлений. Доступ к Интернету первоначально осуществлялся с помощью жестких настольных компьютеров, но внедрение беспроводной технологии (*Wi-Fi*), смартфонов в 2007 году и планшетов в 2010 году произвело революцию в том, как люди стали взаимодействовать через Интернет. Мир коммуникаций через Интернет действительно стал беспроводным, вездесущим и постоянно взаимосвязанным и расширяющимся миром, уже называемым Интернетом Всего (*Internet of Everything*) (*IoE*) [1].

Современное определение окружающего интеллекта было дано Х.К. Аугусто и П. МакКаллагом [11]: «Окружающий интеллект – это междисциплинарный подход, направленный на улучшение взаимодействия среды и людей друг с другом. Конечная цель подхода – сделать места, в которых

люди живут и работают, более удобными, выгодными и благоприятными для них. «Умные дома» являются одним из примеров таких систем, но эту идею можно распространить на все области жизни людей: на учебные заведения, объекты здравоохранения и отдыха, рабочие места на фабриках, заводах и в офисах, общественный и личный транспорт, охрану окружающей среды и безопасность и на другие среды, включая целые города».

Компании, фирмы разработчики и фабрики, проигравшие конкурентную борьбу с *Samsung*, *Intel* и *TSMC* по развитию технологии в соответствии с законом Мура, но имеющие значительные заделы по разработке и производству микросхем по КМОП-технологии остановились на экономически выгодных для них уровнях проектирования технологии и производства. Поэтому их дальнейшее технологическое развитие будет связано с магистральным направлением «Больше чем Мур» (*More than Moore*) [1, 5, 6].

1. Системы окружающего интеллекта

Область окружающего интеллекта (ОИ) очень тесно связана с повсеместными и распределенными вычислениями, а также с пониманием контекста и ориентированным на человека дизайном взаимодействия с компьютером. Среди наиболее важных свойств систем ОИ следует отметить [8]:

- **встроенность**: системы интегрированы в среду, и они «невидимы» человеком;
- **учет контекста**: системы не только распознают пользователя, но также его текущее состояние и ситуационный контекст;
- **доверенность**: системы защищены от воздействия внешних факторов на обрабатываемую информацию;
- **персонализированность**: системы адаптированы к потребностям пользователя;
- **адаптивность**: системы меняют свою производительность в ответ на изменения физического или психического состояния пользователя;
- **упреждение**: системы могут предвидеть желания пользователя без сознательного посредничества;
- **ненавязчивость**: предоставление системами только необходимой информации о пользователе и только требуемым устройствам и людям;
- **неинвазивность**: системы не требуют никаких действий от пользователя, они действуют самостоятельно.

Таким образом, по прогнозам и дорожным картам суперсистемы окружающего интеллекта и входящие в их состав системы искусственного интеллекта (ИИ), Интернета Вещей и Интернета Всего, доверенные интеллектуальные сенсорные системы (ДИСС) ближайшие тридцать лет будут основными движителями (*drivers*) развития микроэлектроники, последовательно заменив настольные компьютеры, планшеты и смартфоны [1, 11].

Как уже отмечалось, успех разработки и внедрения систем окружающего интеллекта (ОИ) напрямую зависит от качества, количества и номенклатуры производимых подсистем и микросхем искусственного интеллекта (ИИ). В настоящее время созданы библиотеки для разработки ИИ, которые в основном требуют контролируемого обучения. Тем не менее, такие технологические гиганты, как Microsoft, Facebook и Google, работают над созданием программ, которые будут работать поверх существующих библиотек разработки ИИ, чтобы дать им кроссплатформенность и поддержку самообучения. Для разработки подсистем и микросхем самообучающегося ИИ будут использоваться «большие данные» (*big data*), квантовые вычисления, распределенные вычисления и связь 5G [12].

Большие данные – это обозначение структурированных и неструктурированных данных огромных объёмов и значительного многообразия, эффективно обрабатываемых горизонтально масштабируемыми программными инструментами, появившимися в конце первого десятилетия 21 века и альтернативных традиционным системам управления базами данных [13].

Современные сотовые телефоны в соответствии со спецификациями глобальной системы мобильной связи (*Global System for Mobile Communications*) (*GSM*) работают в формате 4G на частотах в диапазоне (2,5 – 2,7) ГГц. В настоящее время принято решение о внедрении более мощной коммуникационной инфраструктуры под названием 5G с использованием частот в диапазоне от (3,0 – 28) ГГц и выше [1].

Как известно, человеческое мышление базируется на взаимодействии нейронов мозга, связи которых изменяются под влиянием жизненного опыта. Аналогично, алгоритмы систем и микросхем ИИ были разработаны на основе нейронных сетей, которые позволяют компьютерам или микропроцессорам обретать новые навыки, как это делают люди.

Существует несколько основных, базовых направлений в разработке систем и микросхем ИИ, но в настоящее время наиболее эффективными являются алгоритмы на основе [12]:

– **сверточной нейронной сети** (*convolutional neural network*) (*CNN*) прямой связи, представляющей собой однонаправленную (без обратных связей) многослойную сеть, которая отлично подходит для работы с такими данными, как изображения и видео, где данные размещены в виде сетки пикселей;

– **рекуррентной нейронной сети** (*recurrent neural network*) (*RNN*) обратной связи, в которой связи между элементами образуют направленную последовательность, что позволяет хорошо справляться с последовательными данными, такими как текст и аудио.

Реализация функций слуха, возможности говорить, зрения и прогнозирующей интуиции базируются на использовании обеих сетей *CNN* и *RNN*, а также технологии обработки естественного языка (*natural language processing*) (*NLP*), которые дополняют друг друга. Подобные технологии используются практически во всех интеллектуальных голосовых помощниках.

На рис. 1 показано, как визуально может выглядеть нейронная сеть, запрограммированная в микросхеме ИИ для определения и анализа цифр на видеоизображении [12]. А на рис. 2 наглядно приведены технологии глубокого обучения систем и микросхем для реализации искусственного интеллекта на основе обучающих алгоритмов [14].

В настоящее время существуют десятки программных платформ – **фреймворков** (от английского слова (*framework*)), определяющих структуру программной системы (программное обеспечения), и облегчающее разработку и объединение разных компонентов большого программного проекта [15].

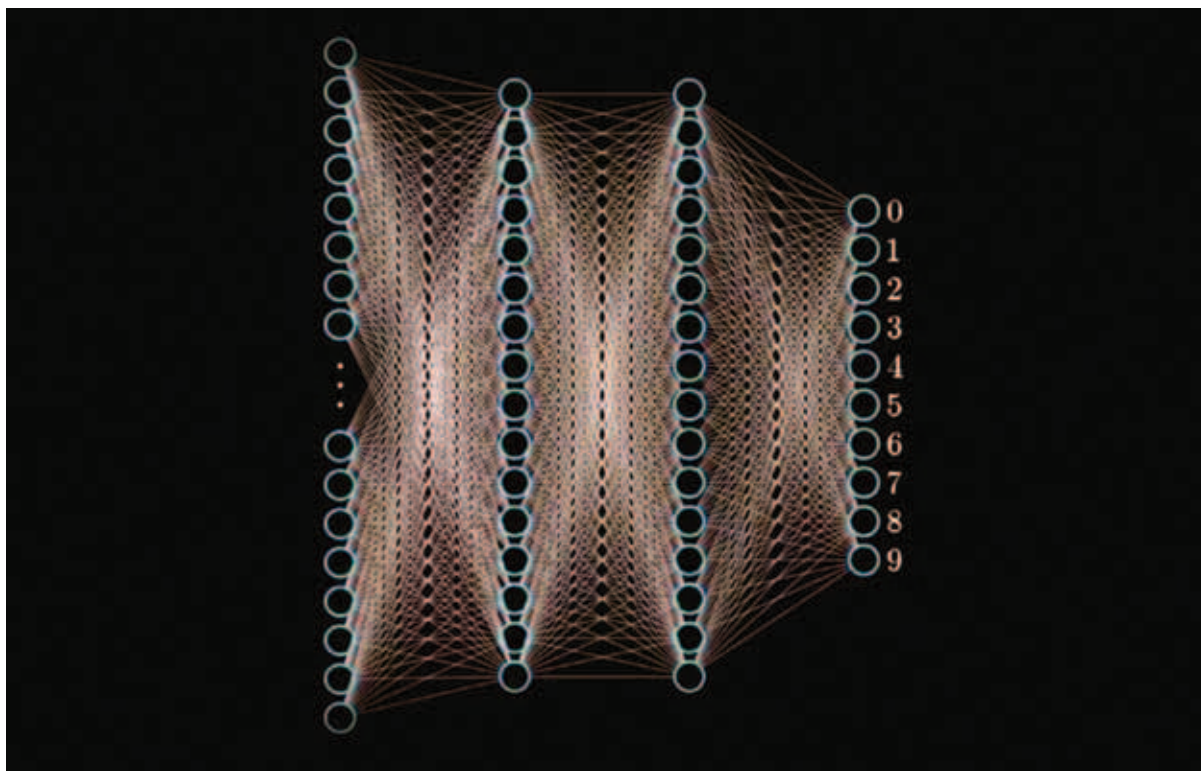


Рис. 1. Возможный визуальный вид нейронной сети, реализуемой в микросхеме искусственного интеллекта (ИИ) для определения и анализа цифр на видеоизображении [12].

К самым продвинутым программным платформам относятся: *KERAS*, *TENSORFLOW*, *SONNET*, *CNTK* (*Microsoft Cognitive Toolkit*), *PYTORCH* и *DL4J* (*Deeplearning4j*) [12].

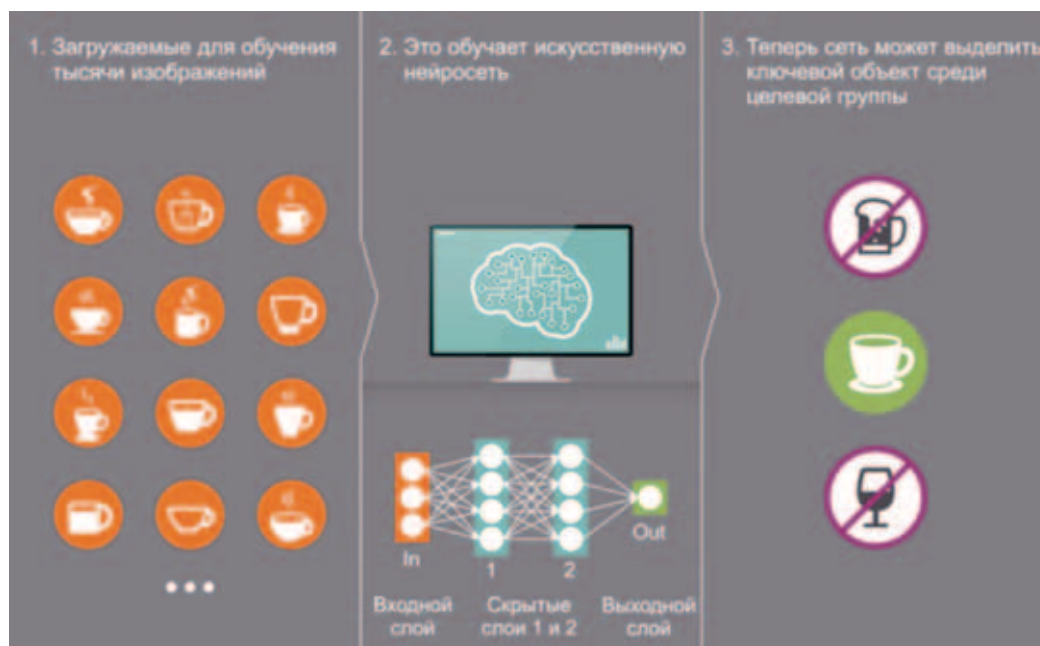


Рис. 2. Технологии глубокого обучения систем и микросхем для реализации искусственного интеллекта на основе обучающих алгоритмов [14].

Как уже отмечалось выше, системы и микросхемы искусственного интеллекта (ИИ) имеют неограниченный рынок использования в суперсистемах окружающего интеллекта (ОИ). В настоящее время среди наиболее продвинутых применений можно отметить: системы голосовых помощников, системы управления беспилотными средствами передвижения, системы распознавания лиц и поиска людей, системы балансировки нагрузки на транспортные магистрали и коммуникационные линии, системы языковых переводчиков, системы проверки плагиата и игровые системы.

Например, игровые шахматные системы ИИ в процессе обучения в течение нескольких недель анализируют миллионы сыгранных партий, и в настоящее время их не в состоянии обыграть в шахматы, ни один гроссмейстер в мире [12].

В традиционных микропроцессорах центральные процессорные устройства (ЦПУ) разрабатываются достаточно гибкими, чтобы поддерживать множество различных программ. Однако обучение системы искусственного интеллекта подразумевает многократное исполнение рутинных задач, требующих очень высокого потребления энергии. В то время как человеческий мозг в процессе обучения потребляет энергию мощностью (20 – 30) Вт, обучаемые системы искусственного интеллекта (ИИ) на традиционных микропроцессорах потребляют столько энергии, сколько было бы достаточно для обеспечения небольшого городка [14].

Для снижения уровня потребляемой мощности в системах ИИ используют графические процессорные устройства (ГПУ), которые разрабатывались для эффективного исполнения сложных математических функций. Чтобы

увеличить вычислительную мощность эти ГПУ можно использовать параллельно. Обработка информации современными ГПУ происходит существенно быстрее, чем традиционными ЦПУ, при практически той же потребляемой мощности.

На раннем этапе развития систем искусственного интеллекта на рынке доминировала компания *NVIDIA* (США). Ее суперкомпьютер *DX1* на базе графических процессоров включал в себя 8 ГПУ *Tesla P100*, каждый из которых обладал вычислительной мощностью 21,2 ТФлопс и требовал для работы 3200 Вт мощности. Следует напомнить, что 1 ТФлопс – 1 ТераФлопс – 1 TeraFLOPS – 1 Tera(Floating-point Operations Per Second) = 10^{12} Флопс – единица, используемая для измерения производительности микропроцессоров и компьютеров, показывающая, сколько операций с плавающей запятой в секунду выполняет данная вычислительная система [16].

Суперкомпьютеры *DX1* при параллельной работе образуют эффективную нейронную сеть. На смену ГПУ пришли **нейронные процессоры** – микросхемы специального применения (*ASIC – application specific IC*), которые разрабатывались для систем искусственного интеллекта. **Нейронный процессор** (*Neural Processing Unit*) (*NPU*) или **ИИ-ускоритель** (*AI accelerator*) – это специализированный класс микропроцессоров и сопроцессоров, используемый для аппаратного ускорения работы алгоритмов искусственных нейронных сетей, компьютерного зрения, распознавания по голосу, машинного обучения и других методов искусственного интеллекта

В настоящее время к классу **нейронных процессоров** относятся разные по устройству и специализации типы микросхем, включающие: **нейроморфные процессоры**, **тензорные процессоры** и **процессоры машинного зрения**, которые позволяют повысить производительность компьютеров без значительного увеличения мощности [17].

Способность воспринимать является основной в процессе обучения систем ИИ. Подсоединенные к центральному серверу искусственного интеллекта маломощные датчики являются «глазами», «ушами», «носами», «языками» и «руками» нейросети. Специалисты оценивают, что количество подключенных к сети датчиков к концу 2020 году превысит 50 млрд. шт. [14].

В настоящее время разработками и изготовлением систем и микросхем ИИ и нейротехнологий занимаются более 50-ти компаний в мире, среди которых такие гиганты, как Google, Apple, Amazon, IBM, Intel, Facebook и Microsoft. Если учитывать мировой рынок искусственного интеллекта и нейротехнологий в целом – с учетом внутренних разработок компаний, – то в 2018 г. составил 396 млрд \$, а к 2024 г. он увеличится до 890 млрд \$. Аналогичным образом, размер мирового рынка нейротехнологий в целом в 2018 г. составил 7 млрд \$, к 2024 г. увеличится до 35 млрд \$ [18].

Интерес к системам искусственного интеллекта и нейротехнологий повышает спрос на специализированные микросхемы (*ASIC*). Те компании, которые не способны разрабатывать такие продукты самостоятельно, обращаются к контрактным специалистам. Например, *Global Unichip*, *A1chip* и *Faraday Technology* так загружены заказами, что даже вынуждены отказывать новым клиентам, пока не будет увеличен штат разработчиков под новые объёмы спроса. Заказы на разработку *ASIC* ИИ поступают от зарубежных клиентов и тайваньской компании *MediaTek*, которая широкой публике известна преимущественно своими процессорами для мобильных устройств [19].

Микросхемы *NDP100* компании *Syantiant*, изготавливаемые с использованием уровня технологии (УТ) 40 нм, подключаются напрямую к цифровым микрофонам или другим датчикам, активируя бездействующую систему, просыпающуюся после прослушивания таких слов, как «*Alexa*», «*Google*» или других голосовых команд. Микросхемы можно запрограммировать на непрерывное прослушивание 64 пробуждающих слов или специфических звуков, таких как разбитие стекла или плач ребенка. Как только система просыпается, микросхемы предупреждают ее о том, что было захвачено микрофоном. В случае если система не пробуждается немедленно, микросхемы, маленькие как нос Авраама Линкольна на одноцентовой монете (рис. 3), записывают в своей 112-килобайтной памяти три секунды звука [20].

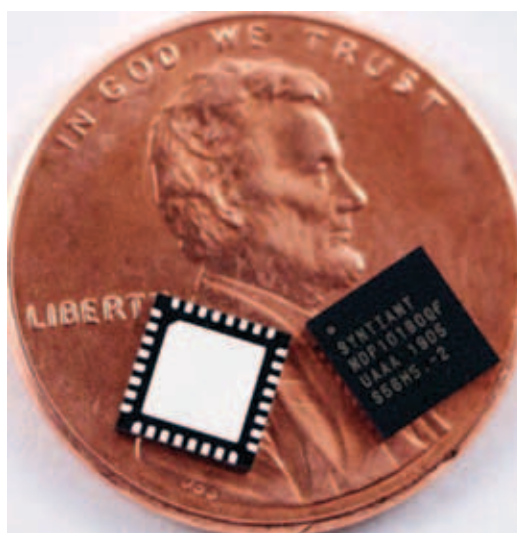


Рис. 3. Специализированная микросхема искусственного интеллекта *NDP100* компании *Syantiant* по сравнению с одноцентовой монетой [20].

Российский рынок ИИ в целом в 2018 г. составил 189 млрд руб., к 2024 г. он увеличится до 907 млрд руб. Данный показатель включает в себя выручку компаний в сфере искусственного интеллекта, выручку прочих ИТ-компаний, которые разрабатывают продукты благодаря ИИ, и прирост вы-

ручки компаний из различных отраслей экономики, который был получен благодаря искусственному интеллекту). Аналогичным образом, российский рынок нейротехнологий в целом в 2018 г. составил 45 млрд руб., в 2024 г. он вырастет до 65 млрд руб. [18].

В табл. 1 приведены уровни востребованности ряда технологий искусственного интеллекта по секторам, сферам и направлениям развития мировой экономики на 2019 год [18].

Уровни востребованности ряда технологий искусственного интеллекта (ИИ) по секторам, сферам и направлениям развития мировой экономики на 2019 год.

Таблица 1

Наименование технологии искусственного интеллекта (ИИ)	Рыночные сектора	Инфраструктурные сектора	Социальная сфера	Госуправление и безопасность
Компьютерное зрение	Высокий	Высокий	Средний	Средний
Обработка естественного языка	Высокий	Средний	Средний	Средний
Распознавание и синтез речи	Высокий	Средний	Средний	Средний
Рекомендательные и интеллектуальные системы поддержки и принятия решений	Высокий	Высокий	Высокий	Высокий
Перспективные методы развития технологий ИИ	Средний	Низкий	Низкий	Низкий
Нейростимуляция и нейросенсинг	Средний	Низкий	Высокий	Низкий
Нейропротезирование и нейроинтерфейсы	Высокий	Низкий	Высокий	Средний

На рис. 4 приведено количество образованных компаний (*startup company*) по разработке и изготовлению систем и микросхем искусственного интеллекта (ИИ) за последние шесть лет с первоначальным капиталом более 1 млрд \$ [21].

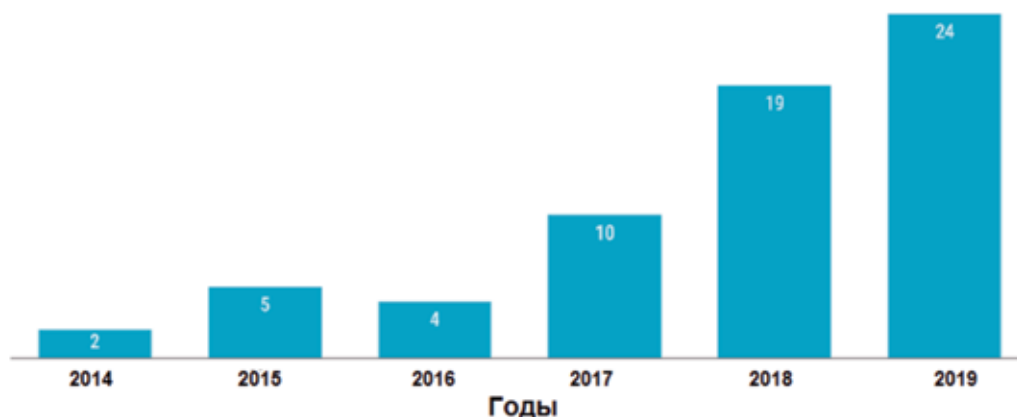
Количество образованных компаний по разработке и изготовлению систем и микросхем искусственного интеллекта с первоначальным капиталом более 1 млрд \$

Рис. 4. Количество образованных компаний по разработке систем и микросхем искусственного интеллекта с первоначальным капиталом более 1 млрд \$ [21].

В 2019 году среди отраслей инвестиций в образованные компании лидирует здравоохранение, в которое вложено 4 млрд \$, далее следуют финансы (2,2 млрд \$) и розничная торговля (1,5 млрд \$) \$ [21].

В конце декабря 2019 года Стэнфордский университет обнародовал результаты исследования, проведенного совместно с *McKinsey&Company*, *Google*, *PwC*, *OpenAI*, *Genpact* и *AI21Labs*, согласно которому вычислительная мощность систем искусственного интеллекта (ИИ) уже более семи лет опережает закон Мура (*Moore's Law*). Отчет группы исследователей показал, что вычислительная мощность систем ИИ растет быстрее, чем мощность традиционных процессоров. Переломным моментом, когда скорость развития искусственного интеллекта стала опережать закон Мура, оказался 2012 год.

Исследователи изучали, как алгоритмы ИИ улучшались с течением времени, отслеживая прогресс программы идентификации изображений *ImageNet*. Учитывая, что методы классификации изображений в значительной степени основаны на контролируемых методах машинного обучения (*Machine Learning*), авторы отчета рассмотрели, сколько времени требуется для обучения модели ИИ и связанные с этим затраты.

Исследование показало, что за 18 месяцев время, необходимое для обучения сети на облачной инфраструктуре, сократилось с трех часов в октябре 2017 года до 88 секунд в июле 2019 года. Авторы отчета использовали модель *ResNet*, чтобы оценить, сколько времени требуется алгоритмам классификации изображений для достижения высокого уровня точности. В октябре 2017 года для достижения точности выше 93% требовалось 13 дней обучения, что обходилось разработчикам в \$2323. Последний эталонный тест, доступный на платформе *Stanford DAWN Bench* в сентябре 2018 года с

точностью классификации изображений чуть выше 93%, стоил чуть более \$12 [21].

3. Доверенные интеллектуальные сенсорные системы.

Как отмечалось в разделе 2 доверенные интеллектуальные сенсорные системы (ДИСС) (*trusted smart sensor systems*), являются одними из основных систем суперсистемы окружающего интеллекта, т.к. они осуществляют сбор данных об окружающей среде, без которого невозможно построение суперсистемы окружающего интеллекта. Для создания систем сбора данных об окружающей среде необходимо интегрировать микропроцессоры и датчики в повседневные бытовые устройства, чтобы сделать их интеллектуальными. Тогда устройства смогут собирать информацию об окружающей среде, обмениваться данными друг с другом и взаимодействовать с человеком [22]. На рис. 5 приведен состав и структура доверенной интеллектуальной сенсорной системы.

Доверенность, т.е. защита принимаемой, обрабатываемой и передаваемой информации от внешних воздействий и угроз осуществляется устройствами специальной кодировки и декодировки принимаемых и передаваемых сигналов в подсистеме связи.



Рис. 5. Состав и структура доверенной интеллектуальной сенсорной системы: сенсорная подсистема (набор датчиков одинаковых или различных физических величин); подсистема управления на основе специализированной микросхемы с опцией искусственного интеллекта (возможности обучения); исполнительная подсистема на основе МЭМС-механизмов; подсистема защищенной беспроводной связи; подсистема источников питания.

Интеллектуальность обеспечивается использованием в подсистеме управления специализированной микросхемы – микропроцессора с опцией искусственного интеллекта, т.е. с возможностью обучения в процессе работы.

Сенсорные и исполнительные подсистемы в ДИСС обычно реализуются с помощью устройств на основе микроэлектромеханических и микрооптоэлектромеханических систем (МЭМС и МОЭМС). В качестве источников питания используются аккумуляторные батареи большой емкости с опцией как обычной, так и дистанционной перезарядки.

В доверенных интеллектуальных сенсорных системах уже нашли применение семь инструментов с искусственным интеллектом (ИИ). Это системы на основе [22]:

- баз знаний (свода правил, набора ситуаций);
- нечеткой логики;
- технологии автоматического сбора знаний;
- нейронных сетей;
- генетических алгоритмов;
- отработанных ситуаций;
- технология внешнего интеллекта.

Доверенные интеллектуальные сенсорные системы с указанными инструментами ИИ используются, в первую очередь, в таких областях, где требуется сбор и обработка показаний датчиков, например: на сборочных линиях; в биодатчиках; при моделировании строительных объектов; в системах машинного зрения; при управлении режущими инструментами; при моделировании условий окружающей среды; при измерении силы; при мониторинге здоровья; при взаимодействии человека и машины; при использовании Интернета; при лазерном измельчении; обслуживании и инспекции оборудования; в системах-помощниках; в робототехнике; в сетях датчиков; в системах дистанционного управления.

ДИСС на основе баз знаний или экспертные системы, являются компьютерными программами, содержащими знания, которые требуются для выполнения поставленной задачи. Экспертная система обычно состоит из двух элементов: базы знаний и механизма принятия решений. Механизм принятия решений вырабатывает алгоритм выполнения поставленной задачи на основе имеющихся знаний. Среди методов манипуляции с данными – использование наследований и ограничений (в пакетно– и объектно-ориентированных экспертных системах), применение правил принятия решений (в системах на основе свода правил) в соответствии с процедурами управления (последовательная прямая или обратная передача) и стратегии поиска (выбор очередности – по глубине или ширине). К этому же классу доверенных интеллектуальных сенсорных систем относятся **ДИСС на основе отработанных ситуаций**, реализующая выделение и адаптацию исследуемых ситуаций.

Недостатком экспертных систем на основе свода правил и ситуаций является то, что они не могут справляться с абсолютно новыми ситуациями, не

похожими на ситуации, имеющиеся в базе. При встрече с неизвестной проблемой они ломаются, а не теряют быстродействие, как эксперты-люди. В таких случаях используются **ДИСС на основе нечеткой логики (нечеткие экспертные системы)**, базирующихся на математической теории нечетких массивов и имитирующих человеческое мышление. Люди легко принимают решения в сомнительных ситуациях, в то время как для машин это очень сложно. Нечеткие экспертные системы применяются, когда нельзя строго описать правила. Эти системы не имеют способности обучаться. Значения параметров предустановлены и не могут быть изменены. Нечеткие системы с успехом используются в мобильных и взаимодействующих роботах, системах предсказания детектируемых датчиком свойств, системах управления цепью поставок, при сварке.

Получение знаний для записи в базу может быть непростой процедурой и занимать много времени. Это создает препятствия при создании экспертной системы. Для решения данной проблемы созданы алгоритмы автоматического сбора знаний, которые применяются в **ДИСС на основе технологии автоматического сбора знаний**. Требование представления набора примеров в жестко заданном формате с известными атрибутами известных классов совпадает с требованиями сенсорных систем и сетей, поэтому автоматическое обучение широко используется в системах датчиков. Наиболее яркими примерами реализации ДИСС на основе технологии автоматического сбора знаний являются лазерная резка, обнаружение мин, робототехника.

ДИСС на основе нейронных сетей имеют высокую способность обобщения по сравнению с нечеткими экспертными системами. Нейронные сети – это численная модель мозга. Они предполагают, что вычисления распределены на нескольких простых узлах, называемых нейронами, которые взаимосвязаны и работают совместно. Нейронные сети иногда называют параллельно-распределенными или коннекционными. Точные знания заносятся в нейронную сеть путем тренировки. Среди недавно появившихся областей применения ДИСС на основе нейронных сетей следует отметить распознавание черт людских лиц, теплообменники, инспекцию паяных соединений, оптимизацию параметров точечной сварки, питание, сенсорные дисплеи, сенсорные транспортные системы [22, 23].

ДИСС на основе генетических алгоритмов позволяет найти глобальный оптимум в сложной среде с большим количеством параметров без использования специфических знаний о проблеме, которую предстоит решить. Генетический алгоритм – это вероятностная процедура оптимизации, созданная на основе эволюции в природе. Генетические алгоритмы нашли применение в ДИСС, таких как сборка, настройка линии сборки, диагностика ошибок, мониторинг здоровья, управление питанием.

ДИСС на основе внешнего интеллекта призвана облегчить работу человека в цифровой среде, в которой электронные устройства предсказывают его поведение и реагируют на его присутствие. Данная концепция обеспечивает адаптированное взаимодействие человека и сенсорной системы. Использование внешнего интеллекта пока ограничено, что связано с постоянно продолжающимися разработками новых, более интеллектуальных и более развитых интерактивных систем [22].

В современных условиях особое значение приобретают не только чисто технические характеристики ДИСС, такие как уровень реальной производительности решения конкретных прикладных задач, обеспечение информационной безопасности, энергопотребление и другие. Но и их эксплуатационно-экономические параметры – стоимость изготовления и эксплуатации, владение технологией изготовления, возможности «эволюционной» модернизации, масштабирование и т.д.

Достижение технико-экономической эффективности использования ДИСС требует перехода на технологическое направление «Больше чем Мур» (*More than Moore*), в основе которого лежат процессы гетерогенной трехмерной (объемной) интеграции наборов микросхем логики и памяти, микро– и наносенсоров, микро– и наноэлектромеханических систем (МЭМС и НЭМС) и других цифровых и аналоговых информационно-коммуникационных устройств, изготовленных по разным технологиям на различных фабриках [23].

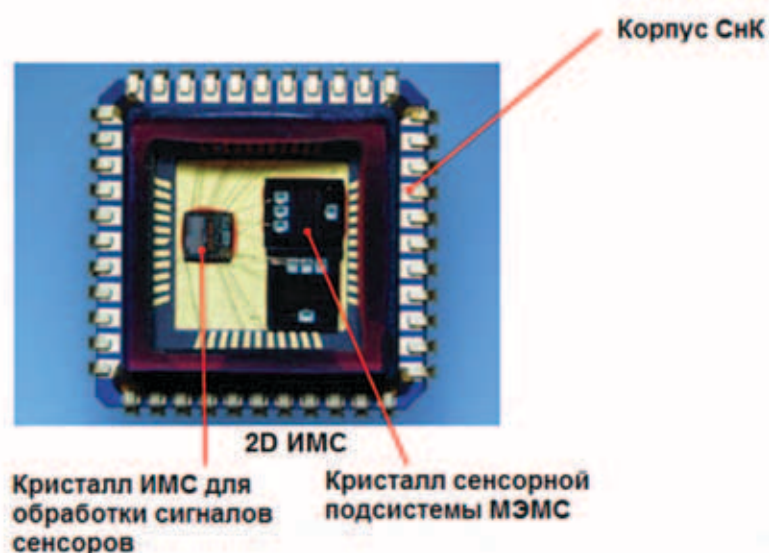
Роль **доверенных интеллектуальных сенсорных систем** непрерывно возрастает, и их создание превратилось в **новое направление технического развития человеческого общества**, которое называется «**сенсоризация**». Оно составляет содержание третьей промышленной революции, и на основе результатов двух первых – механизации и информатизации, по прогнозам многих ученых должна завершиться полной **автоматизацией и роботизацией человеческого общества** [24].

4. Гетерогенная интеграция микросхем и микроэлектронных систем.

Необходимость производства специализированных функционально законченных систем для мобильных продуктов микроэлектроники, таких как смартфоны, планшеты и носимые устройства, привело к появлению многокристальных модулей (МКМ) (*multichip module – MCM*) или интегральных микросхем (ИМС) типа «система на кристалле» (СнК) (*system-on-chip – SoC*). СнК интегрирует кристаллы микросхем с различными функциями в единый чип, установленный в одном корпусе, для реализации специализированной функционально законченной системы или подсистемы, например микропроцессора, устройства памяти или сенсорной микроэлектромеханической

системы (МЭМС) (*microelectromechanical system – MEMS*), как показано на рис. 6 [3, 25].

При этом оптимальным вариантом считается изготовление системы на кристалле на одной кремниевой пластине (подложке), когда большую часть соединений кристаллов можно выполнить на подложке, а не через связи кристаллов через выводы корпуса на печатной (монтажной) плате (*printed circuit board = PCB*), что позволяет значительно повысить быстродействие системы [7].



Заменить картинку

Рис. 6. Система на кристалле (СнК), состоящая из двух кристаллов микросхем: сенсорной, генерирующей сигналы датчиков, и логической, обрабатывающей эти сигналы [3].

Однако если учитывать рост стоимости микросхем с повышением уровня технологии (УТ) (с уменьшением размера технологической нормы), сложность и дороговизну проектирования и тестирования таких системных кристаллов. А также трудности технологического совмещения низковольтных логических блоков и высоковольтных блоков памяти, не позволяющие использовать самые передовые УТ для всех блоков, входящих в систему, то этот путь уже не покажется идеальным.

Более перспективным считается направление, объединяющее различные кристаллы, сделанные по предельным УТ на оптимальных подложках, в столбчатый модуль, размещаемый в одном корпусе, так называемая микросхема типа «система в корпусе» (СвК) (*system-in-a-package – SiP*). СвК использует упаковочные технологии с использованием сквозных контактов через кремниевую пластину (*through-silicon via – TSV*) и промежуточной платы электрического интерфейса, называемого интерпозером (*interposer*), позволяющих адаптировать и перенаправлять электрические соединения для ин-

теграции разнородных кристаллов, МЭМС, фотонных или других устройств или компонентов, либо бок о бок, либо в столбик или совместно (рис. 7) [26].

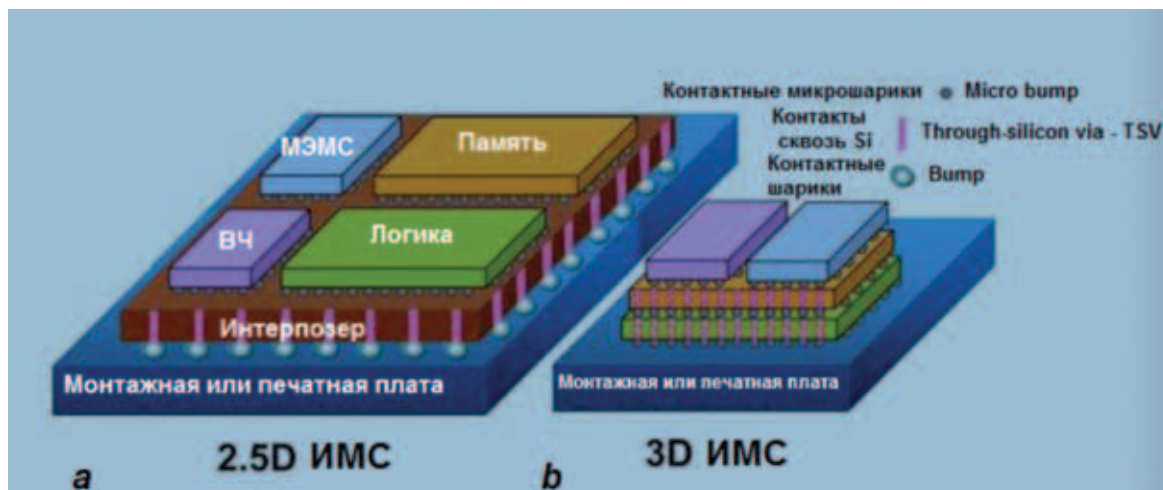


Рис. 7. Два основных типа технологий СвК (*SiP*): *a* – решение на основе интерпозера – вставляемой платы для адаптации и разводки электрических соединений; *b* – решение с более высокой плотностью упаковки 3D-штабелированных кристаллов за счет вертикальных сквозных межсоединений через кремниевые кристаллы (*through-silicon vias – TSV*) [26].

Технология 2.5D ИМС была так названа, поскольку кристаллы микросхем и микроэлектронных приборов располагаются на подложке в один слой, а интерпозер может быть многослойным, то есть в нем реализуется трехмерная структура межсоединений (рис. 7,*a*). От 2.5 D сборки ИМС всего один шаг до их 3D сборки, который обеспечивается применением того же интерпозера, и, на первый взгляд, все выглядит достаточно просто – нужно сложить подложки с сформированными на них кристаллами в стек (стопку) (*stack*), и обеспечить соединение между ними (рис. 7,*b*). В действительности же, одной из ключевых становится проблема теплоотвода, которая решается размещением теплопроводящих слоев, а геометрически все разнообразие технологических решений сводится к вертикальной сборке чипов (кристаллов) в стек (*chip stacking*), где существует много способов соединения между слоями кристаллов.

Причем кристаллы для технологии СвК могут быть спроектированы разными фирмами разработчиками без собственных производственных мощностей (*fabless*), изготовлены на различных кремниевых фабриках (*foundry*) с использованием пластин разных материалов и диаметров, иметь разные размеры и функциональные особенности [25].

В настоящее время существует широкий спектр современных изделий, использующих технологии 3D-микрочипирования и микросборки с вертикально расположенными кристаллами, или, иными словами, «системы в корпусе». Эти технологии можно упрощенно классифицировать по трем основным группам (рис. 8) [27]:

1. Многокристальные модули с кристаллами, расположенными один на другом (*stacked chips or dies*), и организацией межсоединений проволочными выводами.

2. Многоэтажные корпуса система корпус на корпусе (КнК) (*package-on package – PoP*) с организацией межсоединений с помощью шариковых выводов или так называемых «бампов» (*bumps*).

3. Многокристальные модули, с кристаллами, расположенными один на другом, использующие для организации межсоединений технологии создания переходных отверстий в материале самих полупроводниковых кристаллов (*through silicon vias – TSV*) и контактные микрошариковые выводы (*micro bumps*) или контактные микроплощадки (*contact micropad*) для контактов.

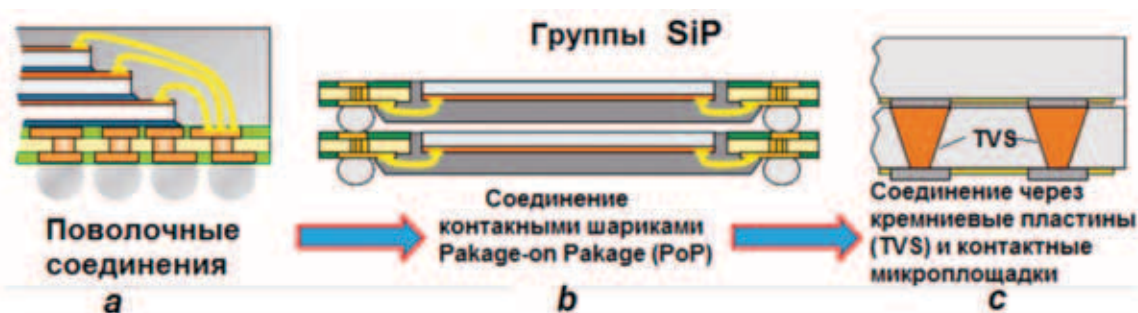


Рис. 8. Группы технологий микросборок вертикально расположенных кристаллов по базовому направлению кристалл в корпусе (КвК) (*SiP*): **a** – сборка с помощью проволочных соединений и контактных шариков; **b** – сборка кристаллов в корпусах с помощью контактных шариков (система «корпус на корпусе» – КнК) (*package-on package – PoP*); **c** – сборка с помощью межсоединений через переходные отверстия в материале самих полупроводниковых кристаллов (*through silicon vias – TSV*) и контактных микроплощадок.

Технологии гетерогенной интеграции (ГИ) (*heterogeneous integration – HI*) очень похожи на технологии система в корпусе (*SiP*), за исключением того, технологии ГИ адаптированы: для микросборки более тонких кристаллов; с большим количеством выводов (входов/выходов) (*inputs/outputs – I/O's*); более высокого уровня плотности элементов и производительности (совершенства, быстродействия) [25].

В настоящее время, кроме приведенных выше модернизированных СвК (*SiP*) технологий реализованы следующие технологии гетерогенной интеграции:

- гетерогенная интеграция на органических подложках;
- гетерогенной интеграции на керамических подложках;
- гетерогенной интеграции на кремниевых подложках с межсоединениями через сквозные отверстия (*through silicon vias – TSV*) в промежуточных кремниевых вставках – интерпозерах (*interposers*);
- гетерогенной интеграции на кремниевых подложках со вставками интерпозерами (*interposers*) без межсоединений через сквозные отверстия (*TSV*), а в виде мостов;

- гетерогенной интеграции на разветвленных подложках (*substrates with redistribution layer – RDL substrates*);
- гетерогенная интеграция на уровне пластин или панелей (*fan-out wafer/panel-level packaging – FOW/PLP*) путем формирования на их поверхности соединений с использованием разветвленных слоев (*redistribution layer – RDL*);
- гетерогенная интеграция КМОП-датчиков изображения (*CMOS image sensor – CIS*), светоизлучающих диодов (*light emitted diode – LED*), микроэлектромеханических систем (МЭМС) (*microelectromechanical systems – MEMS*), лазеров поверхностного излучения с вертикальным объемным резонатором (*vertical cavity surface emitting laser – VCSEL*) и фотодиодов (*photodiode – PD*) с устройствами логики, памяти и блоками питания имеет свои конкретные особенности, связанные с необходимостью обеспечения оптимального функционирования систем (рис. 9) [25].

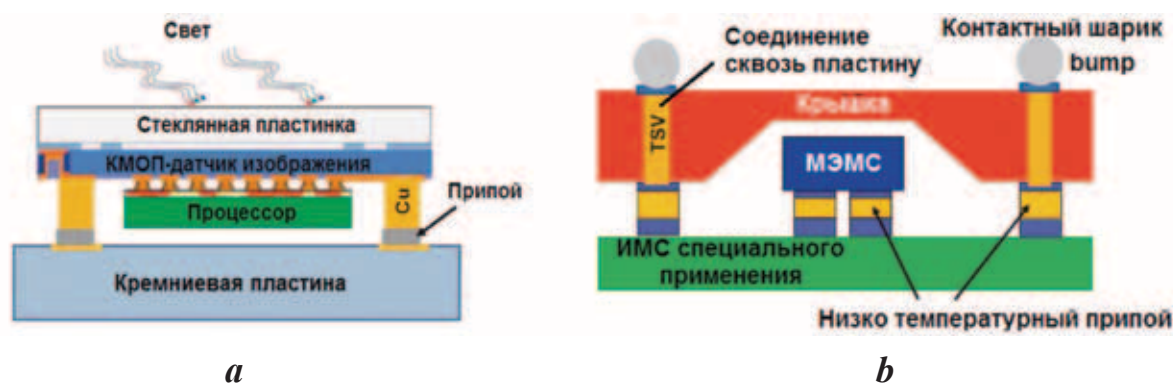


Рис. 9. Гетерогенная интеграция интегральных микросхем (ИМС) и различных микроэлектронных устройств и систем: *a* – 3D-микросборка микропроцессора размером (3,4×3,5) мм со 164 входами/выходами и КМОП-датчика изображения размером (5,0×4,4) мм с 80 входами/выходами; *b* – 3D-микросборка ИМС специального применения и микроэлектромеханической системы (МЭМС), расположенной под герметической кремниевой крышкой [25].

На рис. 10 показаны диапазоны применения гетерогенных интеграций на различных подложках в зависимости от количества выводов и площади кристалла 3D микросборок [25].

Как видно на рис. 10:

- гетерогенная интеграция на кремниевых подложках с TSV-интерпозерами может иметь наибольшее количество контактов >100000 штук, но самый большой размер кристалла пока ограничен площадью 1200 мм²;
- при гетерогенной интеграции на кремниевых подложках с интерпозерами без TSV (на мостиках) количество контактов может составлять до 4000 штук, а площадь кристалла – до 1200 мм²;

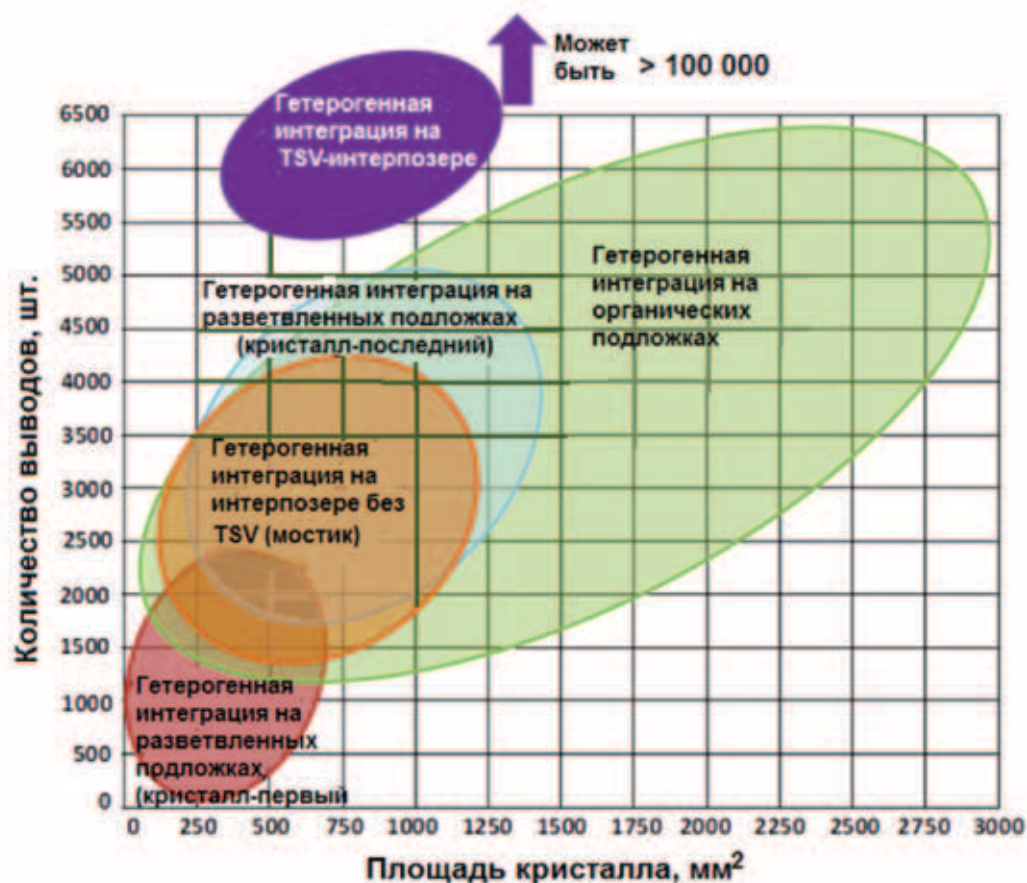


Рис. 10. Диапазоны применения гетерогенных интеграций на различных подложках в зависимости от количества выводов и площади кристалла [25].

– гетерогенная интеграция на разветвленных подложках с перераспределительным слоем (*FO RDL*) при монтаже кристалла первым (*chip-first*) может иметь количество контактов до 2500 штук и площадь кристалла (подложки) до 625 мм²;

– гетерогенная интеграция на разветвленных подложках с перераспределительным слоем (*FO RDL*) при монтаже кристалла последним (*chip-last*) может иметь количество контактов до 5000 штук и площадь кристалла (подложки) до 1400мм²;

– при гетерогенной интеграции на органических подложках количество контактов может составлять до 6000 штук, а площадь кристалла – до 3000 мм².

Таким образом, технология 3D гетерогенной интеграции различных микросхем и микроэлектронных приборов в единые системы является наиболее перспективным путем дальнейшего развития технологии микроэлектроники в рамках направления «Больше чем Мур» (*More than Moore*) [1].

По сути, эта технология является повторением старой технологии монтажа отдельных (дискретных) компонентов – электровакуумных приборов, полупроводниковых транзисторов и диодов, резисторов, емкостей,

индуктивностей и т.д. в единые системные приборные блоки. Единственный убедительный ответ на вопрос: «почему до сих пор не налажено производство, интегрирующее микросхемы и другие микроэлектронные системы и устройства на одном кристалле» заключается в том, что **пока не создана приемлемая для массового производства универсальная технология 3D сборки полупроводниковых кристаллов на общей полупроводниковой подложке в рамках гетерогенной интеграции.**

Кроме того, выпускаемые кристаллы должны быть приспособлены для 3D сборки. Поэтому кремниевые кристаллы, разработанные в последние два года ведущими компаниями и кремниевыми фабриками и адаптированные на технологию 3D сборки в рамках гетерогенной интеграции в общую микросхему или микроэлектронную систему, назвали «чиплетами» (*chipllets*) или «микрочипами» (*micro chips*). Такое название необходимо, для того чтобы отличать их от традиционных кристаллов (чипов), предназначенных для монтажа на печатную плату (PCB) [28].

По сути, технология 3D гетерогенной интеграции на основе чиплетов (*chipllets*) – это набор нужных компонентов, размещённых не на печатной плате (PCB), а объединённых в один кристалл (чип). Идея состоит в том, чтобы максимально минимизировать количество промежуточных соединений между центральным и графическим процессорами, оперативной и постоянной памятью, а также другими элементами. Это позволяет, с одной стороны, снизить помехи и повысить быстродействие, а с другой – повысить вычислительную мощность и гибкость при создании кристаллов (чипов) [29].

Чиплеты предполагают замену единого кристалла кремния набором более мелких модулей, которые взаимодействуют друг с другом внутри унифицированного корпуса. Такой подход позволяет значительно увеличить число транзисторов по сравнению с монолитным микрочипом, т.е. превысить показатели в соответствии с законом Мура, а главное, упростить конструкцию и снизить себестоимость микросхем и микроэлектронных систем, производимых по технологии 3D гетерогенной интеграции с помощью чиплетов. По оценкам аналитиков компании *Omdia*, глобальный рынок кристаллов, в производстве которых используются чиплеты, в период с 2018-го по 2024 год должен вырасти в девять раз, с 645 млн \$ до 5,8 млрд \$ [30].

Чиплеты активно берут на вооружение производители наиболее продвинутых полупроводниковых устройств с высокой степенью интеграции: микропроцессоров, много модульных систем на кристалле, графических процессоров и программируемых логических матриц (*field--programmable gate array – FPGA*). Сегмент микропроцессоров представляет собой крупнейший для чиплетов рынок с различными типами продуктов. Ожидается,

что оборот глобального рынка микропроцессоров с чиплетами увеличится с 452 млн \$ в 2018 году до 2,4 млрд \$ в 2024-м [30].

Основными новаторами, проектирующими передовые микросхемы и микроэлектронные системы по технологиям 3D гетерогенной интеграции на чиплетах в собственном корпусе, стали крупнейшие производители микропроцессоров Intel и AMD. Они возглавляют открытую инициативу *Open Compute Project (OCP)*, в рамках которой реализуется проект *Open Domain-Specific Architecture: (ODSA)* по разработке стандартов и технологий, помогающих внедрять передовые стратегии размещения элементов в едином корпусе.

Ожидается, что со временем продажи чиплетов будут значительно расти, и к 2035 году их объем достигнет 57 млрд \$. Большая часть этого роста будет осуществляться за счет чиплетов, используемых при производстве микросхем и микроэлектронных систем по технологиям 3D гетерогенной интеграции, которые сочетают в себе различные элементы: обычные и графические процессоры, кристаллы (чипы) безопасности, МЭМС-приборы, системы сенсоров и исполнительных механизмов с пониженным энергопотреблением и т.д. [30].

Оптимальное деление (секционирование) и проектирование сложных гетерогенных интеграционных систем на чиплетах невозможно без использования специализированных программно-аппаратных комплексов автоматизации электронного проектирования (*electronic design automation – EDA*). С использованием такого комплекса компании *UCSB* и *AMD* разработали высокопроизводительную гетерогенную интеграционную систему на чиплетах.

Эта система включает в себя: чиплеты центрального микропроцессорного устройства (ЦПУ) (*central processing unit – CPU*) и несколько чиплетов графических микропроцессоров (*graphics processor unit – GPU*), а также стеки (стопки) устройств памяти с высокой пропускной способностью (*high bandwidth memories – HBMs*), расположенных на активных TSV интерпозерах с перераспределительными слоями (рис. 11) [25].

Как показано в разделах 2 и 3, область окружающего интеллекта (ОИ) очень тесно связана с повсеместными и распределенными вычислениями, а также с пониманием контекста и ориентированным на человека дизайном взаимодействия с компьютером. Причем компьютеры для областей окружающего и искусственного интеллекта, а также для входящих в эти области доверенных интеллектуальных сенсорных систем (ДИСС) будут иметь вид представленный на рис. 12 [31].

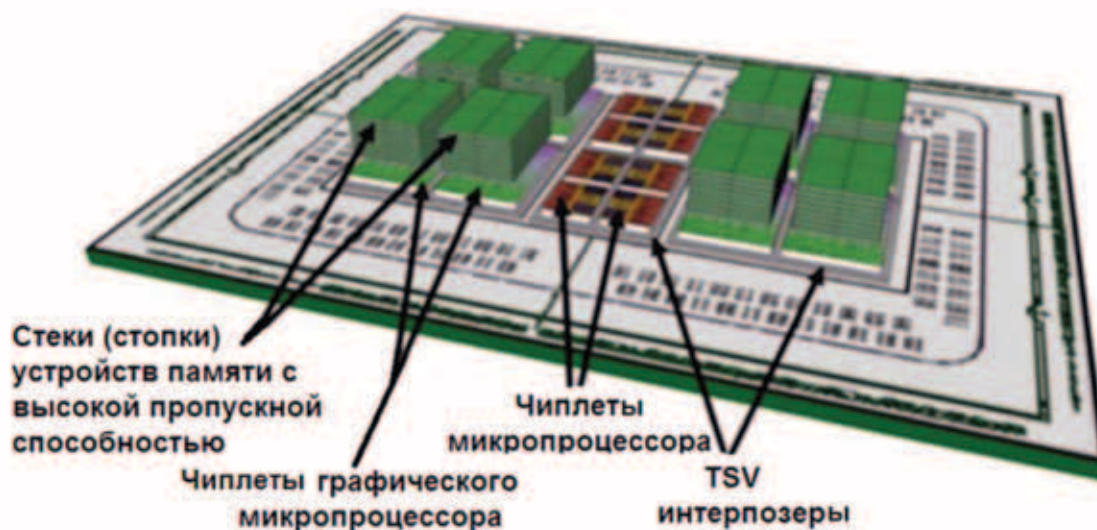


Рис. 11. Высокопроизводительное вычислительное устройство, изготовленное по технологиям 3D гетерогенной интеграции с применением чиплетов и активных TSV интерпозеров. Активный TSV интерпозер, в отличие от пассивного, имеет возможность автоматически переключать коммутацию распределительных межсоединений [25].



Рис. 12. Блок-схема компьютера для систем окружающего и искусственного интеллекта, а также доверенных интеллектуальных сенсорных систем (ДИСС) [31].

Таким образом, технологии направления «Больше чем Мур» (*More than Moore*), которая, согласно прогнозу специалистов [1], займет место основной технологии микроэлектроники в ближайшие тридцать лет. И эта технология должна иметь дело с тонкими (50 мкм и менее) кристаллами и пластинами кремния – фактически мембранами, в которых будут сформированы сотни сквозных отверстий диаметром (2 мкм и менее) с металлическими межсоединениями и контактами.

Кроме того, для производства сенсорных и исполнительных устройств на основе микроэлектромеханических систем (МЭМС) часто будут использоваться три мембранные кремниевые технологии на основе [3]:

– высокоселективных изотропных процессов жидкостного химического травления (ЖХТ);

– высокоселективных анизотропных процессов глубинного реактивного ионно-плазменного травления отверстий (РИПТ) с последовательно чередующимися за счет изменения состава газовой среды стадиями травления кремния и осаждения маскирующего покрытия на боковую стенку отверстия, так называемое Бош-травление (рис. 14) [32];

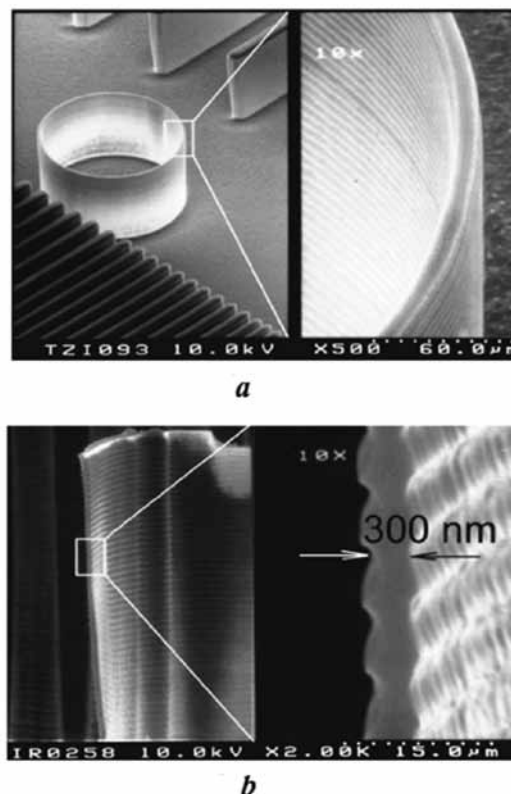


Рис. 14. Изготовление тонкостенных (мембранных) элементов МЭМС с аспектным отношением 137 с помощью Бош-технологии (глубинного реактивного ионно-плазменного травления монокремния с переключением газов с SF_6/Ar на CHF_3/CH_4 соответственно на стадиях травления и осаждения): *a* – фото на электронном микроскопе цилиндрического элемента МЭМС; *b* – детальное изображение поперечного сечения этого элемента (видны неровности боковой стенки, отражающие последовательность стадий травления и осаждения) [32].

Осаждение функциональных и служебных (жертвенных) слоев с последующим высокоселективным изотропным жидкостным, газовым или плазмохимическим удалением служебных слоев, лежащих под функциональными слоями с уже сформированной топологией. Такая технология изготовления МЭМС, разработанная первоначально для пленочных ИМС, получила название технологии на **основе метода поверхностного пленочного (последовательного) формирования структур**, также позволяет получать мембранные элементы (рис. 15) [32].

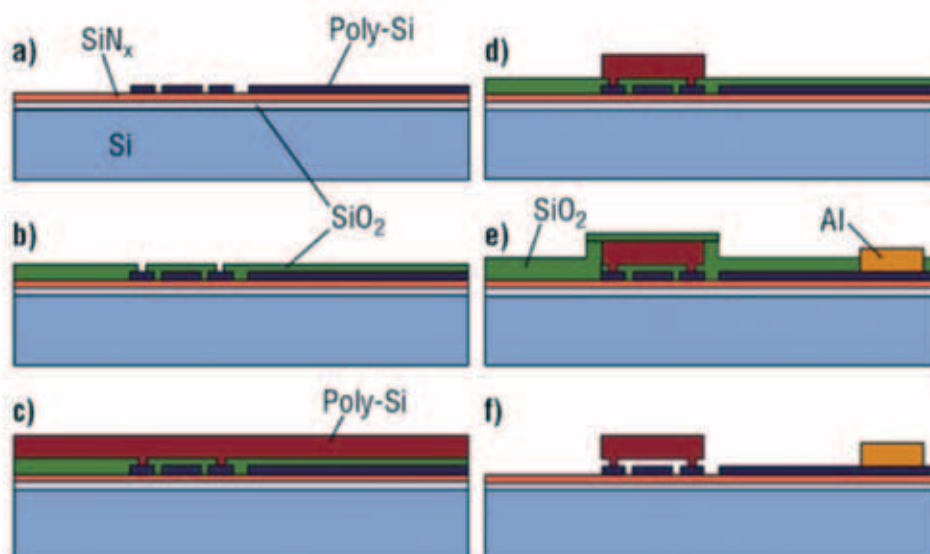


Рис. 15. Технологический процесс изготовления на кремниевой пластине резонаторной подсистемы МЭМС на основе метода поверхностного пленочного (последовательного) формирования структур: **a)** формирование топологии в слое поликремния (*poly-Si*), осажденного на структуру *Si-SiO₂-SiN_x*; **b)** осаждение служебного (жертвенного) (*sacrificial*) (в последующем удаляемого) слоя *SiO₂* и формирование в нем топологии; **c)** осаждение верхнего слоя поликремния (*poly-Si*); **d)** формирование топологии в слое верхнего слоя поликремния; **e)** осаждение жертвенного слоя *SiO₂*, формирование в нем топологии, нанесение слоя алюминия (*Al*) и создание в нем топологии; **f)** удаление жертвенных слоев *SiO₂* [32].

Заключение

Таким образом, развитие технологии и приборной базы микроэлектронике в ближайшие тридцать лет по магистральному направлению «Больше чем Мур» (*More than Moore*), определяемое универсальными драйверами в виде систем искусственного интеллекта, Интернета Всего и доверенных интеллектуальных сенсорных систем, выдвигает в первый ряд мембранные технологии и производство микро- и наноприборов на мембранных подложках и структурах, объединенных в микроэлектронные суперсистемы на основе 3D гетерогенной интеграции.

Такое положение настоятельно требует оперативного проведения комплекса работ по изучению и измерению механических свойств тонких пластин, мембран и пленочных структур на мембранах для определения их прочности, а также величины и распределения внутренних механических напряжений

в них. Так как указанные параметры определяют надежность и временную функциональную стабильность характеристик микросхем, микроприборов и микроэлектронных систем, как на отдельных кристаллах (подложках), так и в составе 3D структур, сформированных по технологиям гетерогенной интеграции. Причем очевидно, что с уменьшением линейных размеров элементов ИС и систем на их основе доля поверхностных атомов по отношению к внутренним возрастает. Это предопределяет переход науки от классической физики твердого тела к развитию физики поверхностного состояния.

Благодарность. Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (№ 075-03-2020-216, 0719-2020-0017) с использованием оборудования ЦКП «МСТ и ЭКБ» НИУ МИЭТ.

Литература

1. International Roadmap for Devices and Systems™ (IRDS). // 2018 Edition. Executive Summary. The Institute of Electrical and Electronics Engineers, Incorporated. 2019 – 32 p.
2. The International Technology Roadmap for Semiconductors // 2.0.2015 Edition. Executive Report. – Semiconductor Industry Association et al.
3. Дюжев Н.А., Куреев В.Ю. Элементный базис нано– и микросистемной техники. // Учебное пособие. Москва, ИПК МИЭТ, 2019. – 139 с.
4. Technology Node // https://en.wikichip.org/wiki/technology_node
5. В. Вернер, Г. Кузнецов, А. Сауров. Закону Мура 50 лет: Масштабирование элементов ИС. // Нано Индустрия. 2015, № 4 (58), с. 22 – 38.
6. Свистова Т.В. Основы микроэлектроники // учебное пособие. Воронеж, ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», 2017. – 148 с.
7. Куреев В.Ю. Введение в технологии микроэлектроники и нанотехнологии. // Москва: Изд-во ФГУП «ЦНИИХМ», 2008. – 427 с.
8. Gams M., Gu I.-H., Munoz A., Tam V. Journal of Ambient Intelligence and Smart Environments. // 2019, No. 11, pp. 71 – 86.
9. Интеллект. // Википедия. – <https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%98%D0%BD%D1%82%D0%B5%D0%BB%D0%BB%D0%B5%D0%BA%D1%82>
10. M. Arribas-Ayllon, Ambient Intelligence: An innovation narrative, available at // http://www.academia.edu/1080720/Ambient_Intelligence_an_innovation_narrative, 2003.
11. J.C. Augusto and P. McCullagh. Ambient intelligence: Concepts and applications. // Computer Science and Information Systems, 2007, v. 4, No. 1, pp. 1 – 27. doi:10.2298/CSIS0701001A
12. Сергей Яроцкий. Искусственный интеллект, разработка и области применения. // 06.05.2019. – <https://sci-news.ru/2019/oblasti-primeneniya-trendy-i-tehnologii-iskusstvennogo-intellekta/>
13. Большие данные. // Википедия. – <https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%91%D>

- 0%BE%D0%BB%D1%8C%D1%88%D0%B8%D0%B5_%D0%B4%D0%B0%D0%BD%D0%BD%D1%8B%D0%B5
14. Перспективные системы искусственного интеллекта требуют большей мощности. // 14 сентября 2018. – <https://www.compel.ru/lib/94727>
 15. Фреймворк. // Википедия. <https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%A4%D1%80%D0%B5%D0%B9%D0%BC%D0%B2%D0%BE%D1%80%D0%BA>
 16. FLOPS. // Википедия. – <https://ru.wikipedia.org/wiki/FLOPS>.
 17. Нейронный процессор. // Википедия. – https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%9D%D0%B5%D0%B9%D1%80%D0%BE%D0%BD%D0%BD%D1%8B%D0%B9_%D0%BF%D1%80%D0%BE%D1%86%D0%B5%D1%81%D1%81%D0%BE%D1%80
 18. *Игорь Королев*. Будущее искусственного интеллекта в России: как технологии превратятся в решения. // 02.10.2019. – https://cnews.ru/articles/2019-10-02_budushchee_iskusstvennogo_intellekta
 19. *Алексей Сычев*. Развитие искусственного интеллекта поднимает спрос на специализированные интегральные микросхемы. // – <https://overclockers.ru/hardnews/show/90367/razvitie-iskusstvennogo-intellekta-podnimaet-spros-na-specializirovannye-integralnye-mikroshemy>
 20. *James Morra*. Микросхема искусственного интеллекта поддерживает работу Amazon Alexa на устройствах с автономным питанием. // Электронный журнал «РадиоЛоцман» 2019, № 9, с. 38 – 39.
 21. Искусственный интеллект (мировой рынок). // [https://www.tadviser.ru/index.php/%D0%A1%D1%82%D0%B0%D1%82%D1%8C%D1%8F:%D0%98%D1%81%D0%BA%D1%83%D1%81%D1%81%D1%82%D0%B2%D0%B5%D0%BD%D0%BD%D1%8B%D0%B9_%D0%B8%D0%BD%D1%82%D0%B5%D0%BB%D0%BB%D0%B5%D0%BA%D1%82_\(%D0%BC%D0%B8%D1%80%D0%BE%D0%B2%D0%BE%D0%B9_%D1%80%D1%8B%D0%BD%D0%BE%D0%BA\)](https://www.tadviser.ru/index.php/%D0%A1%D1%82%D0%B0%D1%82%D1%8C%D1%8F:%D0%98%D1%81%D0%BA%D1%83%D1%81%D1%81%D1%82%D0%B2%D0%B5%D0%BD%D0%BD%D1%8B%D0%B9_%D0%B8%D0%BD%D1%82%D0%B5%D0%BB%D0%BB%D0%B5%D0%BA%D1%82_(%D0%BC%D0%B8%D1%80%D0%BE%D0%B2%D0%BE%D0%B9_%D1%80%D1%8B%D0%BD%D0%BE%D0%BA))
 22. *Дэвид Сандерс*. Искусственный интеллект в сенсорных системах. // Control Engineering Россия, 2014, № 1 (49), с. 34 – 39.
 23. *Каляев И., Заборский В.* Искусственный интеллект от метафоры к техническим решениям. // Control Engineering Россия, 2019, № 5 (83), с. 26 – 31.
 24. Интеллектуальные сенсорные системы. // Под ред. *Мейджера Дж. К. М.* / Пер. с англ. под ред. *Шубарева В.А.* М.: Техносфера, 2011. – 464 с.
 25. *Lau J.H.* Heterogeneous Integrations. // Springer Nature Singapore Pte Ltd. 2019. – 368 p.
 26. *Fritze M., Cheetham P., Lato J., Syers P.* The death of Moore's law. // STEPS: Science. Technology. Engineering and Policy Studies. 2016. Issue 3, pp. 35 – 40.
 27. *Андрей Хохлун*. 3D-интеграция – один из возможных путей опережающего развития отечественной микроэлектроники. // Компоненты и технологии, 2010, № 12, с. 148 – 150.
 28. Что такое чиплеты и какую проблему с их использованием решили в AMD? // 10.07.2018 – <http://www.aethra.ru/chto-takoe-chiplety-i-kakuyu-problemu-s-ix-ispolzovaniem-reshili-v-amd/>

29. Андрей Галадей. Intel представила первую трёхмерную архитектуру чипов Foveros. // 12.12.2018. – <https://tproger.ru/news/intel-3dchips-foveros/>
30. Чиплеты: новая жизнь закона Мура. // 08.06.2020. – <https://www.osp.ru/articles/2020/0608/13055514>
31. Л. Черняк. Электроника третьего измерения. // Открытые системы. СУБД. 2014, № 3. – <https://www.osp.ru/os/2014/03/13040839>
32. Springer Handbook of Nanotechnology. // Edited by B. Bhushan. – Springer, Berlin, Heidelberg, 2004. – 1222 p.

MEMBRANE TECHNOLOGIES OF MICROELECTRONICS: POSSIBILITIES, LIMITATIONS, FIELDS OF APPLICATION AND DIRECTIONS OF DEVELOPMENT

N.A. Djuzhev

*National Research University «MIET», Moscow, Russia
dyuzhev@ckp-miet.ru*

Received 03.12.2020

Annotation. The main direction of development of microelectronics technology and device base for the next thirty years, called in international forecasts "More than Moore" is considered. The main and almost unlimited field of application of this direction is super system of the "ambient intelligence", and the main drivers are: "artificial intelligence" systems, the Internet of Everything and trusted smart sensor systems. The technological basis of this direction is the processes of 3D heterogeneous integration using interconnections and contacts through a silicon wafer (through-silicon vias-TSV) and an intermediate board of an electrical interface called an interposer. This technology allows to combine in a single vertical system stack crystals made on different substrates and in different factories, but requires the use of thin (50 microns or less) crystals with through holes to form interconnections, which are actually membrane structures. This situation urgently requires the rapid implementation of a complex of works on the study and measurement of the mechanical properties of thin plates, membranes and film structures on membranes to determine their strength, as well as the size and distribution of internal mechanical stresses in them. Since these parameters determine the reliability and temporary functional stability of the characteristics of microchips, micro-devices and microelectronic systems, both on individual crystals (substrates) and as part of 3D structures formed by heterogeneous integration technologies.

Keywords: direction of development of microelectronics "More than Moore", ambient intelligence, artificial intelligence, trusted intelligent sensor systems, heterogeneous 3D integration, membrane technologies, mechanical properties of thin plates, membranes and film structures on membranes.

ТРАНСФОРМАЦИЯ РЕЗОНАНСНЫХ ТУННЕЛЬНЫХ УРОВНЕЙ ПРИ ОБРАЗОВАНИИ СЛОИСТОЙ КВАНТОВО-РАЗМЕРНОЙ СТРУКТУРЫ

В.Ф. Дегтярев^{1,а}, А.П. Жилинский^{1,б}

¹Московский технический университет связи и информатики,
Москва, Авиамоторная ул., 8а;
E-mail: ^аvfsteel2008@jmail.com, ^бzhilinsk@yandex.ru

Поступила 14.12.2020

Установлено, что при образовании цепочки, состоящей из последовательности потенциальных ям и барьеров, возникают резонансные уровни, для которых прозрачность структуры равна единице. С увеличением числа звеньев в цепи происходит расщепление этих уровней на близкие подуровни, энергия и полуширина которых зависит от параметров барьеров и числа ячеек в цепочке. Предложена модель, позволяющая определить характеристики этих уровней, в частности их энергию и полуширину. Исследована зависимость волновой функции от параметров цепочки.

Ключевые слова: квантовая механика, квантовый барьер, волновая функция, прозрачность, наноэлектроника, резонансное туннелирование.

УДК 537.9

DOI: 10.31145/2224-8412-2020-21-2-33-48

Введение

Изучение резонансного туннелирования представляет собой новое, быстро развивающееся направление в наноэлектронике. При этом возникает возможность использования квантовых эффектов для качественно новых технологий. Так в настоящее время полупроводниковые квантово-размерные структуры, в частности гетероструктуры с квантовыми ямами (КЯ) и барьерами (КБ), занимают лидирующие позиции в качестве материалов для

опто- и наноэлектроники [1]. Эффект резонансного туннелирования в тонкопленочных гетероструктурах является основой создания целого ряда новых резонансно-туннельных приборов.

Особый интерес представляет резонансное прохождение носителей заряда сквозь периодическую структуру. Исследованию этого вопроса посвящен ряд работ, например [2,3]. В этих работах рассмотрен ряд важных вопросов, связанных с поведением электронов в бесконечных структурах, и основное внимание было уделено вопросам зонной теории, энергетическому спектру электронов в идеальных и неидеальных системах.

Задачи, связанные с распространением волн (электромагнитных, электронных) в слоистых средах, возникают и во многих других разделах науки и техники. В частности, такие среды, как плазма, ионосфера, атмосфера, океан, содержат слоистые структуры. Решение задач о прохождении волн в этих средах, расчет коэффициентов отражения и прохождения при распространении электромагнитных волн имеют большое значение как для расчета радиотрасс с отражением от ионосферы, так и для многих задач дистанционной диагностики ионосферной плазмы [4,5]. Поэтому вопросы, рассмотренные в данной работе, могут представлять интерес и для специалистов этих направлений.

Методика моделирования

В настоящей работе нахождение волновых функций и коэффициентов прозрачности системы барьеров проводилось путем непосредственного решения уравнения Шредингера для заданного потенциала с соответствующими граничными условиями в системе компьютерной алгебры MAPLE. Помимо одиночной ямы была рассмотрена цепочка ям и барьеров с параметрами: ширина барьера (a) – 10 \AA , его высота (U) – 2 эВ , ширина ямы (b) – 10 \AA , период (d) – 20 \AA . Амплитуда падающей волны принималась равной единице ($\Psi_{in}(x) = e^{ikx}$). По зависимости $T(E)$ (T – коэффициент прозрачности цепочки) определялось положение максимума пика (E_0), его энергетическая ширина ΔE_{05} на половине его высоты и добротность ($Q = \frac{E_0}{\Delta E_{05}}$). Так как добротность выражается через E_0 и ΔE_{05} , то основное внимание уделялось именно этим характеристикам. Подчеркнем, что результаты, полученные на данном примере, а также развитая методика, относятся и к цепочкам с другими параметрами.

Резонансно-туннельные уровни (РТУ) в одиночном звене.

Результаты расчета энергетического спектра и волновых функций в элементарной ячейке, состоящей из ямы и двух барьеров, приведены в данном разделе (рис. 1). Рассмотрен случай, когда энергия частицы меньше высоты барьера. Резонансные уровни и волновые функции для этого случая приведены на рис. 1.

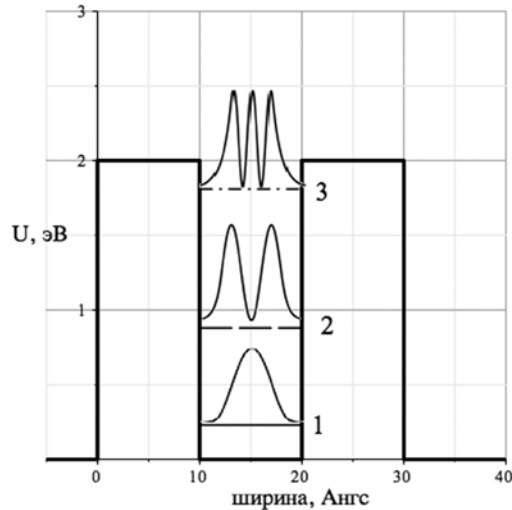


Рис. 1. Схема элементарного звена цепочки и волновые функции в случае: 1 – на ширине ямы укладывается одна полуволна, 2 – две полуволны, 3 – три полуволны.

Основные результаты расчетов перечислены ниже.

1. В одиночном звене, также как и в потенциальной яме конечной глубины (толщина барьера при этом считается бесконечно большой) при $E < U$ образуется система резонансно-туннельных уровней (РТУ) [6,7], положение которых определяется условием $b = n \frac{\lambda}{2}$, где b – ширина ямы, λ – длина волны для энергии частицы E , $n = 1, 2, \dots$ – число полуволн, укладываемых на ширине ямы (рис.1 (кривые 1, 2, 3)). Прозрачность цепочки для частиц с такой энергией равна единице.

2. В элементарном звене рассматриваемой структуры число таких уровней равно 3 (рис. 1). Их энергетическое положение следующее: $E_{01} = 0.228949$ эВ, $E_{02} = 0.887202$ эВ и $E_{03} = 1.818140$ эВ. Энергия этих пиков соответствует положению энергетических уровней в яме такой же глубины. Это легко понять, если учесть, что оба типа пиков соответствуют условию, что на ширине ямы уместается одинаковое число полуволн.

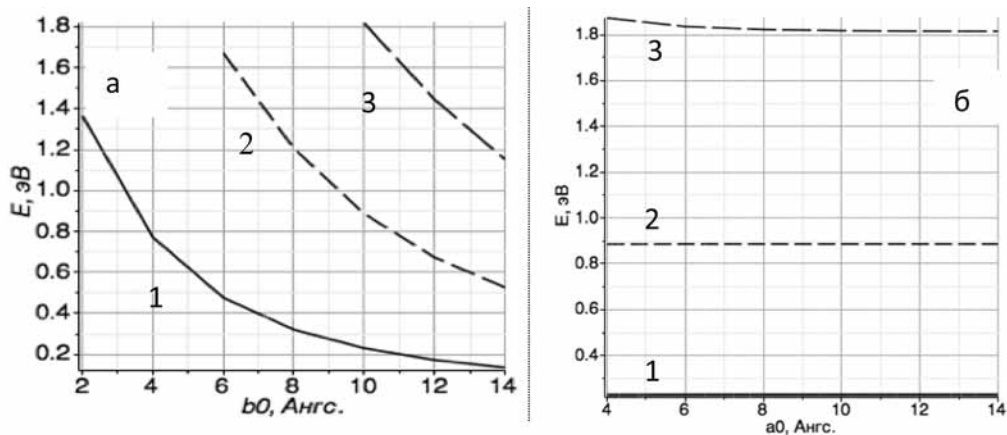


Рис. 2. Зависимость энергии РТУ от ширины ямы (а) и от ширины барьера (б). Значения энергии РТУ в одиночной ячейке ($a_0=10$ Ангстрем и $b_0=10$ Ангстрем): 1 – $E_{01} = 0.228949$ эВ, 2 – $E_{02} = 0.887202$ эВ, 3 – $E_{03} = 1.818140$ эВ.

3. Энергетическое положение пиков зависит от ширины и глубины ямы. С ростом ширины ямы энергия РТУ уменьшается, поскольку при этом увеличивается необходимая длина волны, что возможно только при уменьшении энергии частицы (рис. 2а). При постоянной ширине ямы положение резонансных пиков практически не зависит от ширины потенциального барьера, разделяющего звенья (рис. 2б).

Расщепление резонансных уровней на подуровни при увеличении числа звеньев

С увеличением числа звеньев в цепи резонансные уровни расщепляются на подуровни, число которых равно числу звеньев в системе (числу степеней свободы). Максимальная прозрачность каждого из подуровней равна единице. Схема расщепления уровней в цепочке, состоящей из $N=11$ звеньев приведена на рис. 3. Такое поведение РТУ представляется вполне естественным, если считать систему до образования цепочки N кратно вырожденной [6,7]. Образование цепочки приводит к снятию вырождения и возникновению подуровней. Каждый из подуровней характеризуется своей энергией и шириной на половине высоты. Один из пиков показан на рис. 4. Как видно из рисунка, форма пиков соответствует лоренцевой и определяется механизмом рассеяния частиц в цепочке. Отметим также симметричный характер расположения пиков относительно центрального, что обеспечивает выполнение закона сохранения энергии при образовании цепочки.

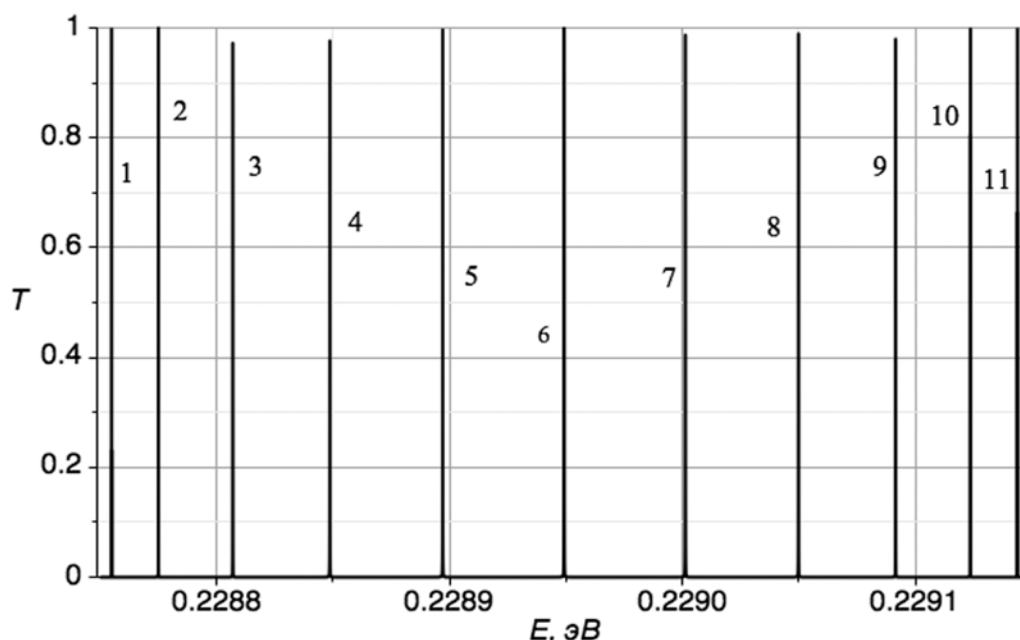


Рис. 3. Схема расщепления уровня $E_{01}=0.228949$ эВ в цепочке, состоящей из 11 звеньев.

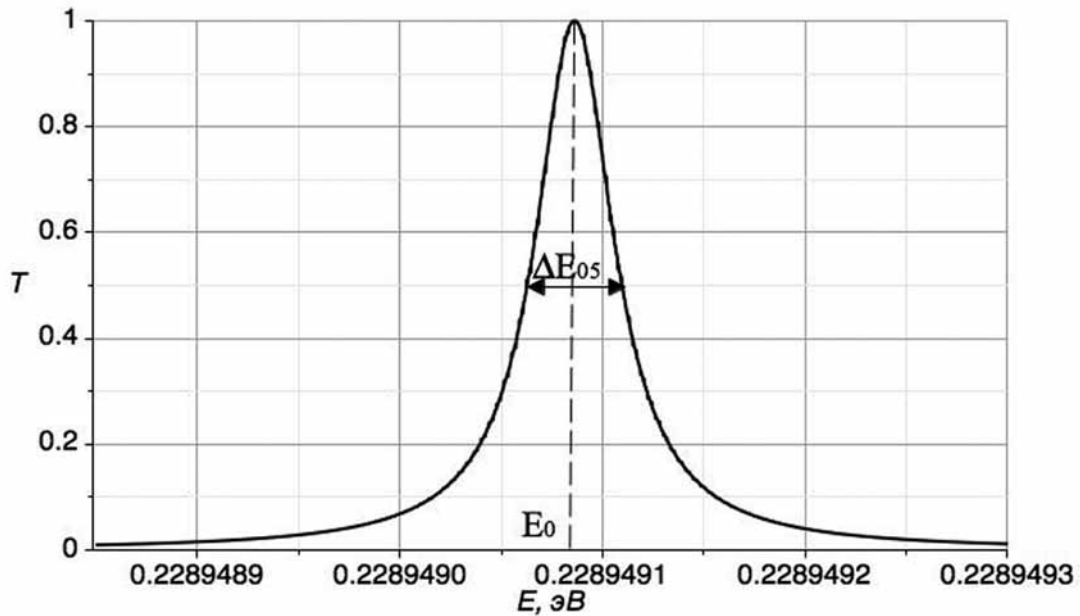


Рис. 4. Зависимость прозрачности резонансного пика $E_{01}=0.228949$ эВ от энергии микрочастицы.

Чтобы понять основные особенности распространения электронных волн в цепочке барьеров, рассмотрим собственные колебания электронов в одномерной цепочке потенциальных ям и барьеров. Будем считать, что высота барьера больше энергии электрона ($E < U$). Заметим здесь, что в дальнейшем форма барьера (прямоугольная или другая) нигде не учитывается. Поэтому приведенные в дальнейшем оценки и расчеты должны быть справедливы для барьеров любой формы. Форма барьера может быть существенна только при расчетах интегралов перекрытия.

Движение электрона в цепочке описывается уравнением Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \mathcal{H}\Psi, \text{ где } \mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} * \frac{d^2}{dx^2} + U. \quad (1)$$

U – потенциальная энергия взаимодействия электрона с барьером. Так как цепочка состоит из N одинаковых звеньев, то U и Ψ - периодические функции. В соответствии с принципом суперпозиции [5,6] $\Psi = \sum C_n \Psi_n$. Поскольку размеры цепочки ограничены, то необходимо учесть граничные условия, которые можно записать в виде:

$$\Psi(0) = 0 \text{ и } \Psi(x_{N+1}) = 0 \quad (2)$$

Естественно, что получить таким образом точное решение уравнения Шредингера без информации о виде потенциальной энергии взаимодействия, не удастся. Однако, некоторые выводы можно получить и без точного знания зависимости $U(x)$.

В качестве базисных состояний выберем состояния, когда электрон находится в ячейке с номером n . Учитывая взаимодействие электрона только с ближайшими соседями, получим [8].

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{C_{n-1}}{\partial t} &= H_{n-1,n-2}C_{n-2} + H_{n-1,n-1}C_{n-1} + H_{n-1,n}C_n \\ i\hbar \frac{\partial C_n}{\partial t} &= H_{n,n-1}C_{n-1} + H_{n,n}C_n + H_{n,n+1}C_{n+1} \\ i\hbar \frac{\partial C_{n+1}}{\partial t} &= H_{n+1,n}C_n + H_{n+1,n+1}C_{n+1} + H_{n+1,n+2}C_{n+2} \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь $H_{n,m} = \int \Psi_n^* \mathcal{H} \Psi_m dx$, $H_{n,n}$ – энергия электрона в n -ой ячейке, $H_{n,n-1}$ и $H_{n,n+1}$ – амплитуды перехода электрона к ближайшим соседям.

Пусть $H_{n,n-1} = H_{n,n+1} = -A$. Тогда уравнение, описывающее поведение электрона в n -ой ячейке принимает вид:

$$i\hbar \frac{\partial C_n}{\partial t} = E_0 C_n - A C_{n-1} - A C_{n+1} \quad (4)$$

Поскольку размеры цепочки ограничены, то происходит отражение волн от передней и задней границы. Поэтому искать решение уравнения (4) следует в виде

$$C_n = \psi(x_n) \exp(-i \frac{E}{\hbar} t) = (\alpha \exp(ikx_n) + \beta \exp(-ikx_n)) \exp(-i \frac{E}{\hbar} t) \quad (5)$$

Величина $\psi(x_n)$ представляет независимую от времени часть амплитуды того, что электрон может быть обнаружен в n -ой ячейке. При этом первое слагаемое представляет собой прямую волну, а второе – отраженную. Значения коэффициентов α и β определяются из граничных условий.

Если считать, что n -я ячейка имеет координату x_n , $(n+1)$ -я – x_{n+1} , то $\psi(x_{n+1}) = \psi(x_n + d)$ и $\psi(x_{n-1}) = \psi(x_n - d)$. Учитывая периодичность потенциала $U(x)$, можно записать $x_{n+1} = x_n + d$, а $x_{n-1} = x_n - d$. Подставляя выражение для C_n в (4), получим

$$C_n (E - E_0 + A \exp(ikd) + A \exp(-ikd)) = 0 \quad (6)$$

Приравниваем каждый из сомножителей (6) к нулю. Рассмотрим второй сомножитель, из которого получаем

$$E = E_0 - A e^{ikd} - A e^{-ikd} \text{ или } E = E_0 - 2A \cos(kd) \quad (7)$$

Это соотношение дает связь между энергией электрона и его волновым

числом (дисперсионное уравнение). Величина $A = \int \Psi_n^* H_{mn} \Psi_m dx$ представляет собой интеграл перекрытия. E_0 – энергия электрона в изолированном звене цепочки. Соотношение (7) позволяет оценить ширину разрешенной зоны ΔE_m для уровня с номером m (m -число полувольт, укладываемых на ширине ямы), а также величину запрещенной зоны ΔE_{gm} между соседними разрешенными зонами

$$\Delta E_m = 4A_m \quad (8)$$

$$\text{и } \Delta E_{gm} = (E_{0m} - E_{0(m-1)}) - 2(A_m - A_{m-1}) \quad (9)$$

Значение интеграла перекрытия можно найти, например, из данных по расщеплению исходных уровней на подуровни при росте числа звеньев. Следует отметить, что вид дисперсионного уравнения определяется только внутренней структурой цепочки, не зависит от граничных условий, типа элементов цепи и пр. [9].

Перейдем к рассмотрению первого сомножителя (C_n). С учетом граничных условий получаем

$$\begin{aligned} \alpha + \beta &= 0 \\ \alpha \exp(ik(N+1)d) + \beta \exp(-ik(N+1)d) &= 0 \end{aligned}$$

Отсюда

$$\exp(ik(N+1)d) - \exp(-ik(N+1)d) = 0 \text{ или } \sin(k(N+1)d) = 0 \quad (10)$$

Существует N возможных решений, соответствующих определенной моде m , где $m=1, 2, \dots, N$. Этим модам соответствуют значения

$$k = \frac{\pi m}{(N+1)d} \quad (11)$$

В цепочке, таким образом, существуют только такие моды, у которых на длине цепочки укладывается целое число полувольт.

Учитывая (7), можно получить выражение для энергии подуровней в цепочке в следующем виде:

$$E_m = E_0 - 2A * \cos\left(\frac{\pi m}{N+1}\right), \text{ где } m=1, 2, \dots, N \quad (12)$$

Полученная формула позволяет рассчитать энергии подуровней, образовавшихся при расщеплении исходного резонансного уровня при увеличении числа звеньев цепи.

Поскольку в ограниченной цепочке существует как прямая, так и отраженная волна, то их наложение дает стоячую волну.

Вероятность найти частицу в ячейке с номером n , если положить $x_n = nd$ может быть найдена из соотношения

$$\Psi^2 = \alpha^2 * \sin^2\left(\frac{\pi mn}{N+1}\right) \quad (13)$$

Здесь N – число звеньев в цепочке; m – номер моды; n – номер ячейки.

Проведенное рассмотрение приводит к зонному характеру распределения состояний по энергии и позволяет найти энергетический спектр частиц в зависимости от количества звеньев в цепи, а также распределение вероятности обнаружения частиц в зависимости от номера ячейки. Сравним результаты расчета расщепления уровней, полученные по рассмотренной модели и путем решения уравнения Шредингера в системе MAPLE. В первом случае расчет проводился по формуле (12) для уровней $m = 1, 2, 3$, где m – число полувольт, укладываемых на ширине ямы. Схема расщепления уровней в соответствии с (12) приведена на рис. 5, а результаты расчета двумя способами приведены в таблице 1. Совпадение полученных данных говорит об адекватности использованной модели. Полученные при этом значения параметров A ($A_1=0.0001008$ эВ; $A_2=0.0011926$ эВ; $A_3= 0.0168477$ эВ) также представляются разумными.

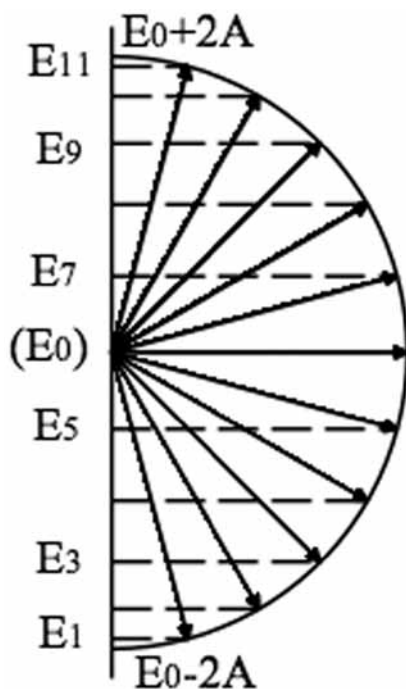


Рис. 5. Схема расщепления РТУ на подуровни согласно (12).

Из вышеприведенного рассмотрения вытекает, что при формировании цепочки образуется своеобразная зонная структура. Схема соответствующей зонной структуры показана на рис. 6. Эта структура подобна зонам, образующимся в соответствии с моделью Кронига-Пенни.

Таблица 1. Сопоставление расчетов энергии расщепившихся резонансных туннельных уровней по формуле (12) и в соответствии с результатами компьютерного моделирования для системы из 11 звеньев.

№ моды	Число полувольт, укладываемых на ширине ямы в одиночном звене (m)					
	m = 1		m = 2		m = 3	
	Расчет по формуле (12), эВ	Расчет путем, решения уравнения Шредингера, эВ	Расчет по формуле (12), эВ	Расчет путем, решения уравнения Шредингера, эВ	Расчет по формуле (12), эВ	Расчет путем, решения уравнения Шредингера, эВ
1	0.2287544	0.2287548	0.8848981	0.8848990	1.7855928	1.7859004
2	0.2287745	0.2287749	0.8851364	0.8851357	1.7889590	1.7889568
3	0.2288065	0.2288068	0.8855154	0.8855131	1.7943138	1.7939338
4	0.2288483	0.2288485	0.8860094	0.8860059	1.8012923	1.8006532
5	0.2288969	0.2288970	0.8865846	0.8865816	1.8094190	1.8088450
6	0.2289491	0.2289490	0.8872020	0.8872013	1.8181400	1.8181402
7	0.2290013	0.2290012	0.8878193	0.8878233	1.8268609	1.8280474
8	0.2290498	0.2290498	0.8883945	0.8884047	1.8349876	1.8379366
9	0.2290916	0.2290915	0.8888885	0.8889056	1.8419662	1.8470320
10	0.2291236	0.2291235	0.8892676	0.8892901	1.8473210	1.8544606
11	0.2291438	0.2291437	0.8895058	0.8895334	1.8506871	1.8593638

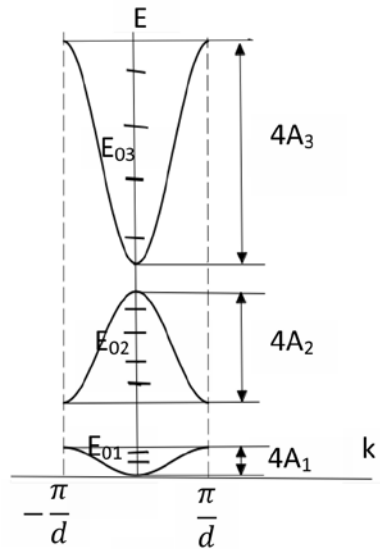


Рис. 6. Схема зонной структуры, возникающей при образовании цепочки барьеров.

В силу периодичности $\cos(x)$ физический смысл имеют только значения $-\frac{\pi}{d} \leq k \leq \frac{\pi}{d}$ (в этих точках происходит брегговское рассеяние). Центрами зарождения зон являются резонансно-туннельные уровни (РТУ), энергетическое положение которых определяется числом полувольт, укладываемых на ширине ямы. На схеме они обозначены как E_{01} , E_{02} и E_{03} . В одиночных звеньях эти состояния вырождены. При увеличении числа звеньев вырождение снимается и эти уровни расщепляются на подуровни, количество кото-

рых равно числу звеньев цепи. Энергия подуровней определяется формулой (12). Эти значения энергии лежат в пределах зоны шириной $4A_m$. Ширина разрешенной зоны определяется выражением (8). Из (8) вытекает, что ширина разрешенной зоны увеличивается с ростом энергии электронов и определяется внутренней структурой звена (параметрами барьера и ямы, взаимодействием электрона с преградой), но не зависит от числа ячеек в цепочке. С ростом числа звеньев расстояние между подуровнями уменьшается. В зависимости от соотношения между энергией РТУ (E_{01} , E_{02} и E_{03}) и значениями A_m могут образовываться запрещенные зоны, разрешенные зоны могут быть отдельными, а могут и перекрываться.

Отметим, что амплитуда того, что электрон находится вблизи какого-либо определенного атома определяется выражением $C_n \sim \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right)$. Отсюда вытекает, что вероятность обнаружить частицу возле любого атома не зависит от координаты и времени. Это означает, что в периодическом поле бесконечно длинной цепочки электрон при своем движении не испытывает никакого сопротивления. Заметим также, что проведенный расчет и полученные результаты не зависят от вида барьера, препятствующего движению частицы.

О волновых функциях электрона в слоистой квантово-размерной структуре.

Полученные результаты показывают, что волновая функция в цепочке из N звеньев представляет собой стоячую волну, образованную наложением прямой и отраженной волн.

При этом наблюдается определенная аналогия между колебаниями грузиков, связанных пружинками, и колебаниями осцилляторов в потенциальных ямах. В обоих случаях колебания происходят с определенными частотами, обусловленными структурой колебательной системы. При образовании цепочки происходит расщепление исходных РТУ, наблюдавшихся в одиночном звене, на систему подуровней. Каждому такому подуровню соответствует определенная мода колебаний всей цепочки. При этом первому РТУ соответствует первая мода с энергией 0.2287548 эВ. Схема расщепления и перечень энергий мод приведен в таблице 1. Графики волновых функций для цепочки из 11 звеньев показаны на рис.7. Отметим основные особенности волновых функций.

1. Каждому расщепленному подуровню соответствует своя мода колебаний. Состоянию с наименьшей энергией соответствует первая мода и т.д. При этом для первого типа колебаний на длине цепочки укладывается одна полуволна, для второго – две и т.д. Число мод равно числу звеньев в цепочке. Так как все эти пики порождены одним и тем же исходным уровнем (когда в яме размещалась только одна полуволна), то и в цепочке в яме размещается тоже только одна полуволна (рис. 7).

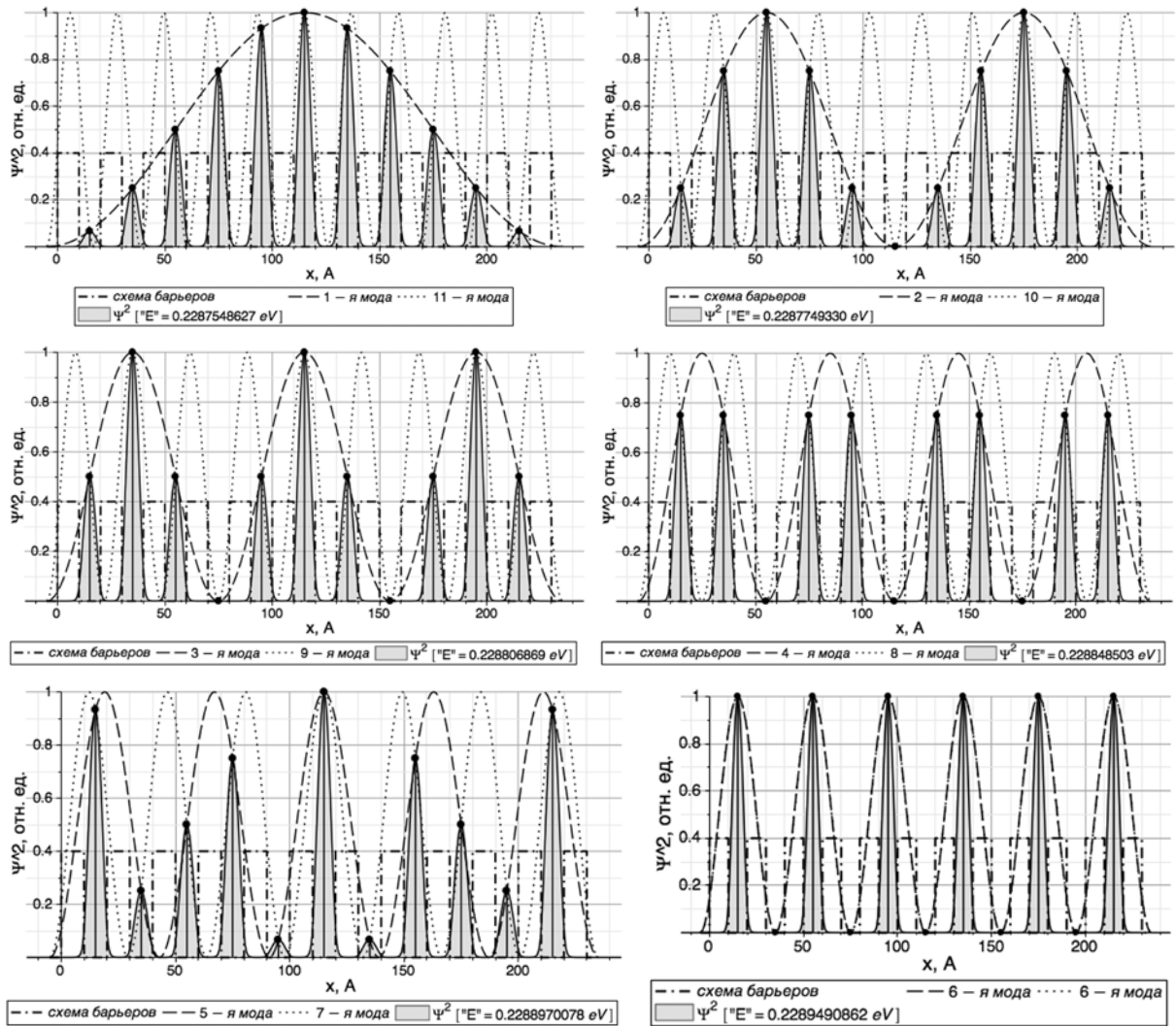


Рис. 7. Волновые функции цепочки из 11 звеньев (сплошная кривая с заливкой) для различных мод колебаний. Штриховая кривая – m -я мода, точечная кривая $N - m$ -я мода. Эти кривые являются огибающими для $\Psi^2(x)$. Точки – расчет по формуле (13). Штрих-пунктирная кривая – схема барьеров.

2. Обращает на себя внимание симметричный вид волновых функций относительно середины цепочки. Именно такой вид волновой функции обеспечивает, по нашему мнению, равенство потоков частиц слева направо и справа налево, что и приводит к высокой прозрачности цепочки.

3. Следует отметить, что волновые функции m -ой и $(N-m)$ -ой мод имеют совершенно одинаковый вид. Эта особенность вытекает из (13), согласно которому для цепочки из N звеньев $\Psi_m^2(x) = \Psi_{N-m}^2(x)$ для одинаковых значений координаты, т.е. огибающие в соответствующих точках цепочки для m -ой и $(N-m)$ -ой мод совпадают.

4. Максимальное значение Ψ^2 определяется соотношением (13). Из этого соотношения видно, что максимумы Ψ^2 располагаются в точках пересечения m -ой и $(N-m)$ -ой мод (см. рис.7а). Отсюда понятно, что амплитуда стоячей волны (13) является огибающей для зависимости $\Psi^2(x)$. Такой подход по-

звонит понять, почему в некоторых ячейках $\Psi^2(x)=0$. Оказывается, что в этих ячейках амплитуда стоячей волны равна нулю и соответствующие колебания не возбуждаются.

Аналогичные заключения могут быть сделаны и относительно других РТУ, возникающих в одиночной ячейке.

Туннельное уширение резонансных уровней

Рассмотрим теперь вопрос о ширине резонансных пиков (см. рис. 4) [9-11]. Полагая, что пики имеют лоренцеву форму, можно прийти к заключению, что ширина линии определяется прежде всего временем пребывания частицы в цепочке. Чем больше это время, тем уже линия. В нашем случае основную роль играют следующие факторы: число столкновений в единицу времени с потенциальным барьером, прозрачность этого барьера, вероятность нахождения частицы в ячейке. На рис. 8 приведена зависимость ширины РТУ от толщины потенциального барьера, разделяющего ячейки. Из рисунка видно, что во всех трех случаях эта зависимость носит экспоненциальный характер. Такой характер кривой свидетельствует в пользу туннельного механизма движения частицы, поскольку прозрачность барьера экспоненциально уменьшается с ростом его толщины. Рассмотрим сначала цепочку, состоящую лишь из одного звена. Ширину пика РТУ (ΔE_1) в этом случае можно оценить, используя соотношение неопределенностей:

$$\Delta E_1 = \frac{h}{\tau_1} \quad (14),$$

где τ_1 – время пребывания частицы в одиночном звене; h – постоянная Планка. Зная величину ΔE_1 (хотя бы из результатов моделирования), из соотношения (14) можно определить τ_1 .

С учетом возникновения в ячейке квазистоячей волны

$$\tau_1 = \tau_0 * \Psi_1^2, \quad (15)$$

Здесь Ψ_1^2 – квадрат модуля волновой функции частицы в одиночном звене, $\tau_0 = \frac{1}{\nu_0}$, где ν_0 – частота перехода частиц из данного звена в соседнее. К сожалению, величина ν_0 не известна с достаточной точностью и поэтому использовать её можно только для оценок по порядку величины. Более точным представляется эмпирический подход, использующий данные о волновой функции и ширине РТУ в одиночном звене.

В цепочке, состоящей из N звеньев, полуширину РТУ, соответствующего m -ой моде, можно определить следующим образом:

$$\Delta E_m = \frac{h}{\tau_m} = \frac{h}{\tau_0 \sum_{n=1}^N \Psi_{nm}^2} \quad (16)$$

Здесь Ψ_{nm}^2 – волновая функция электрона в n-ом звене цепочки, состоящей из N ячеек (учитывает вероятность нахождения электрона в данной ячейке при m-ой моде). $\tau_m = \tau_0 \sum \Psi_{nm}^2$ – полное время пребывания электрона в цепочке (для m-ой моды);

Величина τ_0 может быть определена из (14) и (15). В результате простых преобразований получаем $\tau_0 = \frac{h}{\Delta E_1 \Psi_1^2}$

$$\text{И тогда } \Delta E_m = \Delta E_1 \cdot \frac{\Psi_1^2}{\sum_{n=1}^N \Psi_{nm}^2} \quad (17)$$

Здесь ΔE_m – полуширина расщепленного пика, соответствующего m-ой моде колебаний в цепочке из N звеньев;

ΔE_1 – ширина резонансного уровня в одиночном звене;

$\sum_{k=1}^N \Psi_{nm}^2$ – волновая функция электрона, соответствующая m-ой моде колебаний, в цепочке из N звеньев (например, рис. 7).

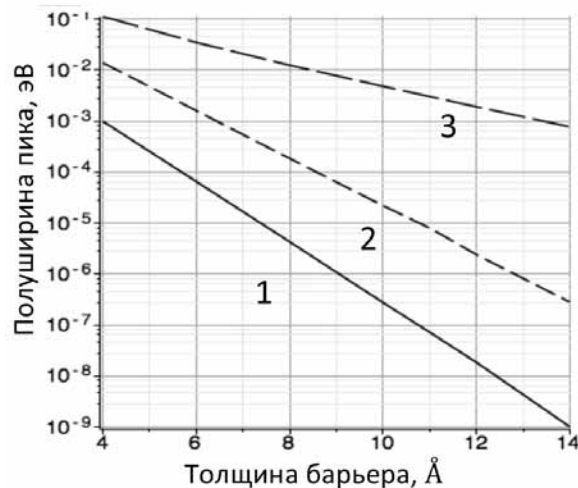


Рис. 8. Зависимость полуширины резонансных пиков от толщины барьера, разделяющего ячейки:
1 – на ширине ямы укладывается одна полуволна; 2 – две полуволны; 3 – три полуволны.

Результаты, приведенные в таблице 2, показывают, что значения ширины пиков, рассчитанные двумя методами достаточно хорошо совпадают между собой. Наибольшее расхождение наблюдается в случае, когда на ширине ямы укладывается три полуволны ($E_{03} = 1.818140$ эВ). Такое различие может быть связано с тем, что энергия E_{03} близка к высоте барьера U .

Таблица 2. Полуширина резонансно-туннельных уровней в цепочке

Число ячеек	№ моды	Число полувольт, укладываемых на ширине ямы в одиночном звене (m)								
		m=1			m=2			m=3		
		Энергия РТУ, эВ	$\Delta E_{05}, \text{эВ}^1)$	$\Delta E_{05}, \text{эВ}^2)$	Энергия РТУ, эВ	$\Delta E_{05}, \text{эВ}^1)$	$\Delta E_{05}, \text{эВ}^2)$	Энергия РТУ, эВ	$\Delta E_{05}, \text{эВ}^1)$	$\Delta E_{05}, \text{эВ}^2)$
1	1	0.228949	$2.80 \cdot 10^{-7}$	$2.80 \cdot 10^{-7}$	0.228949	$2.80 \cdot 10^{-7}$	$2.80 \cdot 10^{-7}$	0.228949	$2.80 \cdot 10^{-7}$	$2.80 \cdot 10^{-7}$
11	1	0.228754	$3.20 \cdot 10^{-9}$	$3.15 \cdot 10^{-9}$	0.884899	$2.40 \cdot 10^{-7}$	$2.37 \cdot 10^{-7}$	1.785904	$4.5 \cdot 10^{-5}$	$4.48 \cdot 10^{-5}$
	2	0.228774	$1.11 \cdot 10^{-8}$	$1.17 \cdot 10^{-8}$	0.885136	$8.40 \cdot 10^{-7}$	$8.92 \cdot 10^{-7}$	1.788957	$1.53 \cdot 10^{-4}$	$1.64 \cdot 10^{-4}$
	3	0.228806	$2.30 \cdot 10^{-8}$	$2.33 \cdot 10^{-8}$	0.885513	$1.80 \cdot 10^{-6}$	$1.78 \cdot 10^{-6}$	1.793934	$3.15 \cdot 10^{-4}$	$3.37 \cdot 10^{-4}$
	4	0.228848	$3.49 \cdot 10^{-8}$	$3.50 \cdot 10^{-8}$	0.886006	$2.64 \cdot 10^{-6}$	$2.67 \cdot 10^{-6}$	1.800653	$5.04 \cdot 10^{-4}$	$5.27 \cdot 10^{-4}$
	5	0.228897	$4.38 \cdot 10^{-8}$	$4.40 \cdot 10^{-8}$	0.886581	$3.36 \cdot 10^{-6}$	$3.33 \cdot 10^{-6}$	1.808845	$6.84 \cdot 10^{-4}$	$7.03 \cdot 10^{-4}$
	6	0.228949	$4.67 \cdot 10^{-8}$	$4.67 \cdot 10^{-8}$	0.887201	$3.60 \cdot 10^{-6}$	$3.57 \cdot 10^{-6}$	1.818140	$8.1 \cdot 10^{-4}$	$8.08 \cdot 10^{-4}$
	7	0.229001	$4.38 \cdot 10^{-8}$	$4.38 \cdot 10^{-8}$	0.887823	$3.24 \cdot 10^{-6}$	$3.33 \cdot 10^{-6}$	1.828047	$8.37 \cdot 10^{-4}$	$8.11 \cdot 10^{-4}$
	8	0.229050	$3.50 \cdot 10^{-8}$	$3.50 \cdot 10^{-8}$	0.888405	$2.64 \cdot 10^{-6}$	$2.67 \cdot 10^{-6}$	1.837936	$7.56 \cdot 10^{-4}$	$7.13 \cdot 10^{-4}$
	9	0.229092	$2.34 \cdot 10^{-8}$	$2.34 \cdot 10^{-8}$	0.888906	$1.80 \cdot 10^{-6}$	$1.78 \cdot 10^{-6}$	1.847032	$5.49 \cdot 10^{-4}$	$5.05 \cdot 10^{-4}$
	10	0.229124	$1.2 \cdot 10^{-8}$	$1.17 \cdot 10^{-8}$	0.889290	$9.60 \cdot 10^{-7}$	$8.92 \cdot 10^{-7}$	1.854460	$3.06 \cdot 10^{-4}$	$2.72 \cdot 10^{-4}$
	11	0.229144	$3.2 \cdot 10^{-9}$	$3.2 \cdot 10^{-9}$	0.889533	$2.44 \cdot 10^{-7}$	$2.38 \cdot 10^{-7}$	1.859364	$9.0 \cdot 10^{-5}$	$7.65 \cdot 10^{-5}$
	Σ		$2.78 \cdot 10^{-7}$	$2.80 \cdot 10^{-7}$		$2.15 \cdot 10^{-5}$	$2.14 \cdot 10^{-5}$		$5.05 \cdot 10^{-3}$	$4.96 \cdot 10^{-3}$

- 1) Расчет, исходя из решения уравнения Шредингера.
- 2) Расчет по соотношению (17).

Из таблицы видно, что сумма полуширин отдельных расщепленных подуровней есть величина постоянная для различных цепочек и равная полуширине исходного одиночного пика (примерно $2.8 \cdot 10^{-7}$ эВ). Это, по нашему мнению, вызвано тем обстоятельством, что возбуждение различных мод происходит независимо друг от друга [10, 11]. Тогда для перехода системы из начального состояния в конечное существует N независимых каналов и $\frac{1}{\tau_1} = \sum_{n=1}^N \frac{1}{\tau_n}$. Суммирование проводится здесь по всем модам колебаний. В итоге

$$\sum_{n=1}^N \Delta E_n = \sum_{n=1}^N \frac{h}{\tau_n} = h \sum_{n=1}^N \frac{1}{\tau_n} = \frac{h}{\tau_1} = \Delta E_1$$

Таким образом, сумма полуширин всех расщепленных пиков в цепочке оказывается равной полуширине исходного пика до расщепления.

Заключение

В работе рассмотрены некоторые свойства резонансно-туннельных уровней, возникающих при образовании цепочки потенциальных ям и барьеров.

1. Установлено, что при образовании цепочки РТУ расщепляются на систему подуровней, число которых равно числу звеньев в цепочке.

2. Определены значения энергии этих подуровней и соответствующие им волновые функции в зависимости от числа звеньев. Прозрачность цепочки для этих значений энергии равна единице. Предложена методика, позволяющая рассчитать эти энергии и построить соответствующие волновые функции.

3. Рассмотрен вопрос о полуширине резонансно-туннельных и механизме ее зависимости от параметров цепочки.

4. Предложена методика расчета полуширины РТУ. Показано, что суммарная полуширина всех пиков в цепочке равна полуширине пика в элементарном звене. Получено хорошее совпадение значений, полученных в результате компьютерного моделирования и расчета по предложенной методике.

Литература

1. Демиховский В.Я, Вугальтер Г.А. Физика квантовых низкоразмерных структур// М., Логос, 2000, 248 с.
2. Драгунов В.П., Неизвестный И.Г., Гридчин В.А. Основы наноэлектроники// Новосибирск: НГТУ, 2000. 331 с.
3. Аладышкин А.Ю. Туннельные явления в нанопизике // Нижегород. гос. ун-т. Н. Новгород, 2011. 32 с.
4. Стефанчук А.Д. Расчет полей электромагнитных волн в слоистой ионосфере с учетом нелинейных эффектов. Автореферат// М., 2000, 24 с.
5. Голант В.Е., Жилинский А.П., Сахаров И.Е. Основы физики плазмы// СПб, изд. Лань, 2011, 448 с.
6. Давыдов А.С. Квантовая механика //М., Наука, 1973, 702 с.
7. Левич В.Г., Вдовин Ю.А., Мямлин В.А. Курс теоретической физики, т. 2// М., Наука, 1971, 936 с.
8. Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике, т. 9, Квантовая механика (II)// М., «Мир», 1967, 259 с.
9. Крауфорд Ф. Берклевский курс физики, т. 3, Волны// М., Наука, 1984, 521 с.
10. Курбатов Л.Н. Оптоэлектроника видимого и инфракрасного диапазонов спектра// М., МФТИ, 1999, 320 с.
11. Пихтин А.Н. Физические основы квантовой электроники и оптоэлектроники// М., «Высшая школа», 1983, 304 с.

TRANSFORMATION OF RESONANCE TUNNEL LEVELS IN THE FORMATION OF A LAYERED QUANTUM-DIMENSIONAL STRUCTURE

V.F. Degtyarev^{1,a}, A.P. Zhilinsky^{1,b}

¹*Moscow Technical University of Communications and Informatics,*

Moscow, Aviamotornaya st., 8a;

E-mail: ^avfsteel2008@jmail.com, ^bzhilinsk@yansdex.ru

Received 14.12.2020

It was found that the formation of a chain consisting of a sequence of potential wells and barriers gives rise to resonance levels for which the transparency of the structure is equal to unity. When the number of chain links increases, these levels are split into close sublevels, the it's energy and half-width depends on the parameters of the barriers and the chain cells number. The proposed model makes possible to determine the characteristics of these levels, in particular, their energy and half-width. The dependence of the wave function on the parameters of the chain is investigated.

Key words: quantum mechanics, quantum barrier, wave function, transparency, nanoelectronics, resonant tunneling.

АКТУАЛЬНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПРОШЛЫХ ЛЕТ

Продолжение. Начало в предыдущих номерах.

НА ПУТИ К ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ БИОЛОГИИ. I. ПРОЛЕГОМЭНЫ.

Перевод с английского
С.Г. Васецкого

Под редакцией и с предисловием
акад. Б.Л. Астаурова

Издательство «Мир» Москва, 1970.

Предисловие к английскому изданию

Теоретическая физика представляет собой вполне сложившуюся самостоятельную науку, и во многих университетах ею занимаются специальные лаборатории и кафедры. Более того, наши теории о природе окружающего нас материального мира, безусловно, оказывают глубокое влияние на общепhilosophические концепции. Что же касается теоретической биологии, то едва ли можно сказать, что такая наука уже существует. Трудно сказать, чем она должна заниматься и по каким путям ей следует развиваться; к тому же очень редко случается, что

философы ощущают связь таких биологических проблем, как теория эволюции или восприятие раздражения, с традиционными проблемами философии.

Международный союз биологических наук (МСБН) счел своим долгом, как организация, объединяющая биологов из разных стран, стимулировать создание некоего костяка понятий и методов, на котором могла бы формироваться теоретическая биология. Это совсем не простая задача; поэтому было решено провести три симпозиума на эту тему с годовыми интервалами. Эти симпозиумы предполагалось посвятить не обсуждению теоретических основ каких-либо частных биологических процессов, например проницаемости мембран, наследственности, нервной деятельности и т. д., а попыткам выявить и сформулировать основные концепции и логические связи, характеризующие живые системы в отличие от неживых, и рассмотрению вытекающих из них общефилософских представлений.

На меня была возложена обязанность пригласить докладчиков и организовать заседания.

Первый симпозиум проходил с 28 августа по 3 сентября 1966 г. на вилле Сербеллони в Беладжо (озеро Комо). Чтобы создать известную базу для дискуссии и сосредоточить внимание на некоторых проблемах, я разослал участникам симпозиума свои лекции, прочитанные за год до этого в университете Северного Уэльса и нарочито переработанные с тем, чтобы придать им несколько полемический характер. Одновременно были разосланы некоторые комментарии Рене Тома к этим лекциям, а также статья Эрнста Майра.

Заседания на вилле Сербеллони, носившие весьма непринужденный характер и оказавшиеся очень плодотворными, не стенографировались.

В процессе обсуждения внимание было сосредоточено главным образом на проблемах биологической теории, а не на более общих проблемах. Хотя в результате работы симпозиума стали вырисовываться пусть еще не очень четкие, но уже определенные контуры теоретической биологии, было совершенно ясно, что необходимо продолжить обсуждение и обмен мнениями между приверженцами различных точек зрения, прежде чем удастся разработать некое подобие схемы стройной и самостоятельной науки. Поэтому предлагаемая вниманию читателя книга состоит из отдельных статей, написанных после симпозиума в духе проводившегося на нем обсуждения. Они еще не связаны друг с другом в некое единое целое. Именно сознание того, что такого единого целого не существует, что его создание представляет собой длительную и нелегкую задачу, и заставило принять решение провести три симпозиума. Мы надеемся, что на втором симпозиуме будут сделаны дальнейшие шаги на пути к синтезу различных точек зрения. Поэтому этот первый том и получил подзаголовок «Прологомены».

К. Уоддингтон

ФИЗИЧЕСКАЯ ОСНОВА КОДИРОВАНИЯ И НАДЕЖНОСТЬ В БИОЛОГИЧЕСКОЙ ЭВОЛЮЦИИ

Г. Патти
(Стенфордский университет)

Приведенные ниже два письма имеют прямое отношение
к статье д-ра Патти.

Д-ру Говарду Патти.
Центр теоретических исследований
Университет в Майами

17 февраля 1967 г.

Дорогой Говард!

Я надеюсь, Вы не будете возражать против того, чтобы включить в статью, которую Вы для нас готовите, несколько совсем элементарных разделов для биологов, не имеющих соответствующей подготовки. Например, мне все еще совершенно не ясен смысл понятия «неголономная связь», Я думаю также, что Вам следует более определенно связать квантовый и классический подход в физике с простым эмпирическим подходом в биологии. Например, Вы полагаете, что простейшие классические механизмы, которые характеризуются некой абстрактной наследственностью, действуют скорее как катализаторы, чем как матрицы; на этом основании Вы думаете, что в ходе репликации ДНК специфичность спаривания оснований определяется полимерами. Однако биолог будет думать, что наследуемая мутация представляет собой прежде всего изменение в последовательности оснований, а не в строении полимера. Мне хочется также, чтобы Вы остановились на различии между «ферментами как реализаторами», делающими возможным спаривание между аденином и тиминном, и «ферментами как спецификаторами», определяющими спаривание аденина именно с тиминном, а не с гуанином.

Искренне Ваш

К. Х. Уоддингтон

Профессору К.Х. Уоддингтону
Институт генетики животных
Эдинбург

21 февраля 1967 г.

Дорогой профессор Уоддингтон!

Отвечая очень кратко на Ваши замечания, я могу сказать, что провожу грань между *хранением* наследственной информации и процессами ее *передачи*. Хранение совершенно не зависит от времени, подобно непрочитанным книгам, упакованным в пачки, или магнитной ленте, лежащей на полке. Во время хранения, разумеется, могут возникнуть мутации, и поскольку информация хранится в молекулах ДНК, в ней могут происходить некоторые мутации. Но мутация при неизменных условиях хранения не может иметь никаких последствий до тех пор, пока она не будет передана (в ходе репликации, транскрипции или декодирования). Поэтому я пришел к выводу, что *все процессы передачи наследственной информации должны осуществляться посредством неголономных связей*. Для большинства биологов представление об аллостерическом механизме почти идентично понятию неголономной связи, т. е. механизма, состоящего из многих структурных элементов, который изменяет свою структуру при столкновении с каким-либо внешним элементом (активатором или субстратом), вызывая ускорение какой-либо специфической реакции. Или, иными словами, определенный класс столкновений с неголономными или аллостерическими механизмами порождает решение и реакцию «регулируемое действие» (наподобие усиления). Весьма вероятно, что ДНК обладает некоторыми аллостерическими или неголономными свойствами (трудно определить, когда квантово-механические структуры бывают неголономными), однако известные мне данные в большей степени согласуются с тем, что именно фермент представляет собой верховную структуру, принимающую решение относительно спаривания при всех процессах передачи информации, в том числе и репликации. Аминоацилеинтетазы, несомненно, полностью обеспечивают связывание аминокислот с транспортными РНК. Я думаю, что можно было бы представить себе фермент, который обеспечивает связывание любых двух нуклеотидов в цепи и, следовательно, полимеризацию; однако образующаяся при этом структура, которая служит для хранения информации, была бы менее устойчива, чем формы, возникающие в результате действительно происходящих спариваний. Или, если выразить это в иной форме, надежность репликации клеточной ДНК составляет, скажем, одну ошибку на 10^8 спариваний. Я полагаю, что по крайней мере 99,9%

этой *надежности передачи* обеспечивает фермент, а не чисто химический процесс образования водородных связей (что тем не менее приемлемо для хранения информации).

Многие химики и даже биологи считают ферменты прежде всего катализаторами, которые в настоящее время обеспечивают достаточную скорость жизненных процессов, но без которых можно было бы в принципе обойтись, особенно в период зарождения жизни, поскольку продолжительность репликации нуклеиновой кислоты или прохождения какой-либо реакции в масштабах геологического времени не имела большого значения. Подобная точка зрения, на мой взгляд, совершенно неверна; я считаю, что наследственные процессы (к которым относятся и все регулируемые памятью процессы) могут возникнуть лишь после того, как специфические или тактические катализаторы начинают осуществлять «регулируемое действие» в указанном выше смысле. Более того, чтобы дать физическое определение таких понятий, как репликация, наследственность, регулируемое действие, тактический катализ и специфический фермент, необходимо ввести представление о надежности. (Коуэн согласится в этом со мной.) Именно здесь на сцену выходит квантовая механика, но это уже более длинная история, не имеющая пока определенного конца. Ортодоксальная механистическая точка зрения, по-видимому, достаточно полезна, пока дело не доходит до проблемы надежности хранения и передачи наследственной информации. А это – главное.

Искренне Ваш

Г. Патти

ФИЗИЧЕСКАЯ ОСНОВА КОДИРОВАНИЯ И НАДЕЖНОСТЬ

Что представляет собой биологическая теория? У физиков возникла вера в существование общих и универсальных теорий о природе, и можно сказать, что именно стремление к созданию таких теорий лежит в основе теоретических рассуждений и большинства экспериментов в физике. Трудно дать исчерпывающую характеристику того, что есть «хорошая теория» с точки зрения физика. Разумеется, такая теория «должна удовлетворять данным» и «предсказывать наблюдения» в некотором общем смысле. Однако для оценки физической теории используются, нередко чисто интуитивно или без упоминания об этом, гораздо более глубокие и менее четкие критерии. Например, общие физические теории никогда не бывают «бесхитростными описаниями», которые создаются по кусочкам, по мере накопления фактов. Они часто возникают из сравнительно простых гипотез, которые можно проверить экспериментально, например из предположения о постоянстве скорости света или дискретности энергии фотонов, испускаемых атомами. Однако они могут основываться также и на более общих принципах, как, например, принципы сохранения, инвариантности или симметрии. Эти абстрактные принципы приходится принимать, потому что мы убеждаемся на опыте, что они в некотором смысле неизбежны. Иными словами, без таких принципов трудно даже представить себе, что мы понимаем под общей физической теорией вселенной [1].

В биологии связь между теорией и экспериментом была по традиции менее тесной. Многие из того, что иногда называют биологическими теориями, кажется физикам простым описанием, поскольку это нередко всего лишь математический аппарат, предназначенный для практического решения задач определенного типа и не имеющий прямого отношения к общим физическим законам. Такое положение дел часто приписывают существенным различиям в предмете изучения физических и биологических наук. Возможно, что именно отсутствие общей биологической теории лежит в основе до сих пор не разрешенных давних споров между виталистами и механицистами, ибо большая часть биологической терминологии никогда даже не приближается к языку физики.

Однако в последнее время, после так называемого молекулярно-биологического переворота, неоднократно высказывалось мнение, что теперь, наконец, загадка жизни сведена к языку и законам физики. В частности, как заявляют биохимики и молекулярные генетики, им удалось доказать, что обычные физические и химические законы дают относительно ясную и простую основу для понимания наследственности и большинства процессов обмена веществ. Модель матричной ДНК, предложенная Уотсоном и Криком,

общепринята как главный ключ к загадке наследственности [2], подобно тому как выяснение детальной структуры белков позволило в основном понять ферментативные механизмы [3], обычное рабочее допущение молекулярных биологов заключается в том, что оставшиеся проблемы будут разрешены с помощью дополнительных экспериментов. Во всяком случае, они не видят перед собой никаких препятствий или принципиальных загадок [4]. В результате возникает представление о том, что биология объяснима в рамках обычных физических законов и что поэтому приложение физической теории к живой материи не требует особых усилий.

Вместе с тем, несмотря на эти подробные описания взаимодействия полинуклеотидов и полипептидов в клетке, многие физики, а также и биологи не могут успокоиться. Можно ли считать, что эта масса феноменологических описаний действительно оправдывает уверенность, проникшую ныне даже в элементарные учебники биологии, что мы теперь умеем объяснять основные свойства живого, исходя из законов физики, что явление наследственности оказалось в конечном итоге необыкновенно простым и что все остающееся пока неизвестным о живой материи – это лишь детали, которые должны быть выяснены в дальнейших экспериментах? Имеем ли мы право говорить, что мы понимаем, как законы физики объясняют сущность жизни?

В этой статье я попытаюсь показать, почему утверждения о возможности объяснения биологических явлений в терминах физики остаются пока неубедительными. Я приведу также некоторые доводы в пользу того, что одного лишь накопления новых фактов недостаточно для объяснения основных загадок живой материи. Более того, я считаю, что для выявления основных различий между живым и неживым необходимо сначала решить некоторые фундаментальные логические и физические проблемы на уровне квантовой механики. Я попытаюсь доказать, в частности, что любая общая теория биологии должна описывать физическую основу регулируемых ферментами процессов наследования, которые обладают достаточной для эволюции надежностью, и что это потребует более глубокого понимания квантовой теории измерения на молекулярном уровне.

Современные молекулярно-биологические представления. Нет необходимости повторять здесь сколько-нибудь подробно представления, развиваемые в современной молекулярной биологии и изложенные в столь многих обзорах. Говоря о них, мы имеем в виду использование таких понятий, как матричная репликация ДНК, транскрипция генетической информации с ДНК на информационную РНК, трансляция этой кодированной информации к аминокислотам и синтез белков [5]. Об этих процессах в настоящее время известно очень многое и еще больше станет известно в ближайшем будущем. Однако главный вопрос связан не с количеством и качеством этих

данных, а скорее с их физическим истолкованием. В частности, мы хотели бы обсудить, можно ли на основе представлений, развиваемых в молекулярной биологии, сделать вывод о том, что природа живой материи может быть понята теперь в рамках общих законов физики.

Обычно, если физик говорит, например, что химическая связь объяснима с точки зрения общих физических законов, он имеет в виду не только то, что химические связи согласуются с законами квантовой механики или что химические связи можно при желании без особых затруднений описать в соответствии с представлениями квантовой механики. Напротив, хотя химическая связь впервые была открыта и весьма подробно рассматривалась в рамках классической теории, большинство физиков считало природу этой связи глубоко загадочной, пока Гейглер и Лондон не вывели количественно уравнение для обменного взаимодействия и не показали, что наблюдаемые свойства валентности и устойчивости объясняются этим квантовомеханическим уравнением. С другой стороны, молекулярные биологи довольно часто используют классическое описание репликации ДНК и кодирования, для того чтобы оправдать положение о распространении законов физики на живые клетки, ни разу не сославшись при этом на какой-либо физический закон или не показав количественно, как описываемые процессы подчиняются этим законам. Разумеется, подобные положения приемлемы в качестве спекулятивного предсказания. Однако трудно представить себе что-либо более бесплодное, чем подобные высказывания молекулярных биологов, пренебрегающие установленными терминами и законами физики и затемняющие самый важный и волнующий вопрос о возможности свести живое к общим физическим законам.

В чем вопрос? Попробуем, однако, допустить, что экспериментальные исследования в области молекулярной биологии и генетики в самом деле показали, что никакой частный процесс жизни не выходит за рамки обычных физических законов и не нарушает их. Был бы тем самым решен и вопрос о природе жизни? Иными словами, если бы даже оказалось, что живая материя тождественна неживой при описании их на языке физики, могли бы мы утверждать, что полностью понимаем жизнь в рамках физических законов? Мне кажется, что нет, потому что при этом остается без ответа вопрос, почему живое столь явственно *отличается* от неживого. Другими словами, физическое сходство живой и неживой материи вызывает меньшее удивление, чем наблюдаемые между ними различия. Прежде чем попытаться объяснить эти различия на основе физических законов, мы должны четко указать, в чем они заключаются. Старые учебники биологии обычно начинаются с перечисления таких «признаков жизни», как рост, размножение, раздражимость и пр., однако это недостаточно общие понятия. Какова наиболее общая черта жизни, отличающая ее от неживой материи? Конечно, самым *общим* свой-

ством живого является способность к эволюции. Поэтому основной вопрос следует перефразировать следующим образом: можно ли понять процесс биологической эволюции в рамках основных законов физики?

Два основных допущения. Чтобы показать трудности, возникающие при попытке ответить на этот вопрос, сформулируем всю ситуацию в форме следующих допущений.

Допущение А. Живое и неживое никак не различаются при их детальном описании в терминах начальных условий или элементарных законов движения, т. е. и живая и неживая формы материи подчиняются одним и тем же физическим законам.

Допущение Б. Живая материя отличается от неживой лишь способностью к эволюции, т. е. к наследственной передаче свойств, возникших в результате естественного отбора.

Чтобы сделать эти допущения более правдоподобными, рассмотрим противоположные допущения. Предположим, например, что различия между живой и неживой материей зависят от разных начальных условий. Физик назвал бы такое явление «специальным актом творения», которое можно рассматривать как в высшей степени невероятное событие или просто как чудо. С научной точки зрения такое предположение было бы бесплодным, поскольку его нельзя вывести из какой-либо физической теории или проверить в реальном эксперименте [6]. Далее, если допустить, что живая и неживая материя подчиняются различным элементарным законам движения, то в соответствии с понятием закона в физике должны существовать наблюдаемые или выводимые закономерности или корреляции между результатами детальных измерений, относящиеся лишь к одному виду материи, по не к другому. Поскольку, несмотря на огромное количество проведенных опытов, таких закономерностей обнаружено не было, это противоположное допущение представляется неоправданным. Отметим, что допущение А не содержит утверждения, что все аспекты физической теории уже сформулированы, а лишь постулирует, что общепринятые в настоящее время теории должны быть в равной мере применимы как к живой, так и к неживой материи. Наконец, если мы отвергнем допущение Б и допустим, что и живая и неживая материя в определенном смысле способны к эволюции, то это лишь породит новый вопрос: почему живая материя в отличие от неживой в процессе эволюции стала столь многообразной? Иными словами, допущение А о *сходстве* живой и неживой материи необходимо дополнить другим допущением о четком *различии* между живой и неживой материей. Если мы опустим второе допущение, то вся проблема утратит смысл.

Какие выводы можно сделать из допущений А и Б, принятых нами для обсуждения? Некоторые физики полагают, что эти допущения противоречивы. К ним относится, например, Вигнер [7], который считает, что объяснить

самовоспроизведение на основании одних лишь законов квантовой механики невозможно. Другие физики, например Бор [8], Эльзассер [9] и Бергер [10], полагают, что должны существовать какие-то особые биологические законы.

Я считаю, что попытки опровергнуть подобные доводы не представляют никакой ценности для науки, ибо они базируются скорее на языке и логике физики, чем на данных молекулярной биологии. Допущения *A* и *B* отражают некое коренное противоречие, которое следует досконально изучить, если мы хотим создать общую теорию биологии, основанную на законах физики. Кроме того, на мой взгляд, можно полагать, что эти допущения тесно связаны с центральным гносеологическим противоречием сознания и материн. Однако в этой статье я коснусь этого парадокса лишь в связи с проблемой происхождения жизни. Прежде всего я попытаюсь создать более ясное представление об этих допущениях, чтобы заострить противоречие, иначе центральная проблема слишком легко может потонуть в многочисленных деталях новых экспериментальных открытий.

Что представляют собой физические законы? Допущение *A* сравнительно легко разъяснить, потому что смысл начальных условий законов физики уже был исчерпывающе проанализирован [11]. Мне хотелось бы подчеркнуть, однако, что «подчинение законам движения» с точки зрения физика представляет собой строгое утверждение, которое может быть проверено количественно с помощью измерений и расчетов. Элементарный закон движения является правилом, связывающим значения некоторых переменных, характеризующих состояние системы в любое данное время, со значениями этих же переменных в любое другое время. Это означает, что если мы выберем некоторое определенное состояние данной системы, задав для нее начальные условия в некоторый момент времени, то любые дополнительные данные относительно предшествующих или последующих состояний системы будут излишними. Это означает, что такие дополнительные данные в принципе не дают возможности лучше предсказывать будущее или прошлое системы. Правила использования этого описательного языка точно сформулированы, и нельзя, например, сказать, что молекула подчиняется элементарным динамическим законам физики, на основе одних лишь данных, характеризующих среднюю структуру большого числа таких молекул, или рассмотрения классической настольной модели одной из этих молекул. Другими словами, с точки зрения физика заявление о том, что молекула фермента или нуклеиновой кислоты подчиняется динамическому уравнению движения в квантовой механике, не может считаться обоснованным в отсутствие данных, действительно подтверждающих справедливость этого заявления.

Поэтому мы назвали наше положение *A* допущением, так как, хотя квантовая механика в прошлом правильно описывала многие разнообразные эф-

фекты на молекулярном уровне, следует учитывать и возражения о том, что основное свойство самовоспроизведения не согласуется с законами квантовой механики.

При разъяснении допущения *B* мы сталкиваемся с другой трудностью. Немногие биологи стали бы возражать против того, что эволюция живого отличается от эволюции неживого. В самом деле, способность к эволюции наследуемых свойств можно использовать для определения ныне существующей жизни. Но можно возразить, что эволюция наследуемых свойств не является самым элементарным или основным условием для возникновения жизни. Например, аутокатализ, обмен веществ или процессы репликации также можно назвать первичными свойствами живого. Однако для краткости мы будем считать, что необходимое условие возникновения и сохранения жизни заключается в способности к надежной передаче по наследству признаков, сложившихся под влиянием естественного отбора. К сожалению, это положение еще нельзя сформулировать на языке физики, и его смысл часто неточен даже для биологии. Поэтому мы попытаемся дать определение наследственной передачи и естественного отбора на языке физики.

Что такое наследственность? Согласно традиционному представлению, процесс наследования заключается в передаче специфических признаков от родителей потомкам. Для биолога специфический признак – это не один из инвариантов уравнений движения, а одно свойство из нескольких возможных альтернатив. Передаваемый признак зависит от некоего *описания*, зарегистрированного или записанного в какое-то более раннее время. Таким образом, главная особенность биологической проблемы эволюции наследуемых свойств заключается в том, что процесс естественного отбора действует на реальные признаки или фенотипы, а не на одну из записей этого фенотипа в хранилище памяти, обычно называемом геном. Это очень важно с биологической точки зрения, так как делает возможным существование такого внутреннего описания или памяти в качестве особого состояния, отделенного на протяжении конечного периода жизни, обычно не менее, чем продолжительность одной генерации, от прямого взаимодействия, с которым все время приходится сталкиваться фенотипу.

Основной логический момент передачи по наследству, соответствующий биологическому различию между генотипом и фенотипом, заключается в том, что передача по наследству осуществляется при участии *описания* или *кода* и поэтому требует выбора из ряда альтернатив, а не просто действия неумолимых физических законов движения на ряд начальных условий. Как было сказано в предыдущем разделе, эти законы движения показывают, как единственным и строго определенным путем система из состояния, в котором она находится в данное время, переходит в состояние, отвечающее дру-

тому моменту времени. Поэтому говорят, что уравнения движения осуществляют взаимно однозначное отображение или, более точно, задают группу преобразований множества состояний системы. С другой стороны, в процессе наследования, при котором передается один из ряда альтернативных признаков, непременно должен участвовать процесс выбора, а это связано с не взаимно однозначным отображением. Именно поэтому такие основные генетические понятия, как память, описание и код, нельзя выразить непосредственно в терминах элементарных физических законов. Процессы прямого копирования, например рост кристалла или комплементарное спаривание оснований в ДНК, не требуют участия кодирования или выбора из альтернатив. Поэтому даже с точки зрения классической теории процессы простого матричного копирования недостаточны для эволюции путем естественного отбора. Там, где нет различия между генотипом и фенотипом, или между описанием признака и самим признаком (иными словами, где нет процесса кодирования, который связывает описание с описываемым путем сведения многих состояний к одному), не может быть эволюции посредством естественного отбора.

Логические аспекты этого основного эволюционного принципа нашли отражение в схеме самовоспроизводящегося автомата фон Неймана [12], созданной им на основе машины Тьюринга. Примечательно, что этот автомат базируется на той же логике, которая теперь обнаружена в клетках, хотя в схеме фон Неймана не были использованы какие-либо детальные данные о способах передачи информации в клетках или о роли нуклеиновых кислот и ферментов. Тем не менее фон Нейману было ясно, что простая матричная репликация, или копирование, не представляет интереса ни с точки зрения логики, ни с точки зрения эволюции и что только понятие наследственности включающей в себя код, может обусловить возрастание сложности, имеющее какое-то реальное значение для обучения и эволюции. Таким образом, можно сказать, что для возникновения эволюционирующих наследственных структур необходимо достигнуть некоторого порога логической сложности. Вслед за работой фон Неймана появилось немало исследований, посвященных интересной и содержательной логике этой проблемы [13]. К сожалению, лишь очень немногие биологи знакомы с этой работой и с логической основой процесса кодирования в биологической эволюции.

Главная проблема. Теперь у нас есть некоторое представление о том, почему элементарные законы физики непригодны для непосредственного описания процессов наследования. На уровне логики мы можем сказать, что законы физики описывают процесс взаимно однозначного отображения, тогда как в ходе наследования происходит не взаимно однозначное отображение. Пользуясь языком физики, можно сказать, что элементарные физические законы симметричны по отношению ко времени, тогда как наследование име-

ет определенную временную направленность. Иными словами, временные отношения между памятью о признаке и самим признаком несимметричны.

Существует, разумеется, общая физическая теория – термодинамика, которая рассматривает и необратимые явления. Можно поэтому спросить, нельзя ли использовать термодинамические или статистические теории для объяснения явлений наследственности. Использовать их, конечно, можно, однако они не приводят к представлению о неизбежности биологической эволюции. В самом деле, на первый взгляд кажется, что второй закон термодинамики противоречит биологической эволюции, так как, согласно этому закону, происходит возрастание неупорядоченности, тогда как в процессе эволюции возрастает сложность живых организмов. Можно поэтому сказать, что при описании процессов наследования в рамках законов физики необходимо не только преодолеть трудность объяснения необратимых явлений на основе обратимых законов, но и, кроме того, показать, что необратимость наследственных процессов приводит к явлению эволюции живой материи, а не к полному термодинамическому равновесию неживой материи.

Уклонение классической физики от главной проблемы. Одна из распространенных концепций живой материи, которая, по-видимому, избегает этого противоречия, это описание молекулярно-биологических процессов на языке теории автоматов. При этом клетка рассматривается как некая классическая машина, сходная по своему поведению с современной вычислительной машиной [14]. Такие классические машины явно обладают памятью и способностью к наследственной передаче, а также кодированию и выбору. Как описать эти классические машины в терминах физических законов?

Это можно сделать, лишь допустив существование некоторой структуры, которая в какой-то степени регулирует динамику системы, по которую нельзя непосредственно вывести из основных уравнений движения. Для проявления основного свойства, присущего наследственности, – способности к классификации или выбору одного признака из нескольких альтернативных – статическое описание машины должно включать большее число степеней свободы, чем описание ее динамики. Другими словами, самое понятие памяти в наследственной системе подразумевает существование большей свободы в описании статического состояния системы, чем в описании ее движения, поскольку она должна быть динамически ограничена таким образом, чтобы обеспечить передачу по наследству лишь того частного признака, который был зарегистрирован в памяти. Такая структура, которая обладает большим числом степеней свободы в статическом, нежели в динамическом состоянии, называется в физике *неголономной связью* [15]. Если принять классическое описание неголономных связей, то можно приспособить машину для воспроизведения почти любого кода или логической функции, которые только можно себе представить, и это положение лежит

в основе конструирования всех вычислительных машин. Для цифровой вычислительной машины можно составить такую программу, чтобы она имитировала макромолекулярные процессы, протекающие в живых клетках, в том числе репликацию ДНК, транскрипцию и трансляцию [16]. В связи с этим встает вопрос: дают ли классические описания или модели живых клеток достаточную основу для понимания природы живой материи и ее эволюции?

Частично на этот вопрос ответил еще в 1944 г. физик Шредингер в своей книге «Что такое жизнь?» [17]. Шредингер указал, что упорядоченность, которую мы связываем с классическими механизмами, основана на средних, относящихся к большим совокупностям молекул, тогда как упорядоченность в клетке создается одиночными молекулами. Шредингер высказал предположение, что относительную устойчивость отдельных молекул можно понять в рамках стационарных состояний квантовых систем, но он не рассматривал передачу этой упорядоченности макроскопическим системам, т. е. ее проявление как наследуемого признака. Это другой аспект главной проблемы, которая все еще остается нерешенной.

Чтобы более детально осветить проблему, вернемся к классическому представлению о наследственной системе, которая должна включать в себя некую неголономную связь. Каковы некоторые из основных свойств неголономных систем? Идея связи (constraint) полностью относится к классической механике; она возникла из рассмотрения некоторых из степеней свободы как чисто геометрических структур, не зависящих ни от времени, ни от законов движения. Однако при более детальном изучении проблемы становится ясно, что все макроскопические структуры должны в конечном счете определяться элементарными силами, поддерживающими их целостность. Тогда мы будем рассматривать постоянные структуры лишь как метастабильные конфигурации, у которых время релаксации велико по сравнению с временем наблюдения. Например, обычные часы, которые в течение непродолжительного периода могут показывать очень точное время, в течение более длительного периода постепенно утрачивают свою точность и необратимо приближаются к равновесию, к которому должны стремиться все классические машины. Хорошие часы – это просто механическое устройство, которое может измерять один и тот же временной интервал много раз подряд, прежде чем оно достигнет состояния равновесия. Таким образом, для описания процессов наследования в статистических системах необходимы по крайней мере, две сильно различающиеся шкалы времени релаксации и по крайней мере одна из этих временных шкал должна описывать необратимый процесс. Обычно одна из этих шкал столь длинна, что ее не принимают во внимание при рассмотрении динамической задачи и замещают одними лишь геометрическими условиями. Более полное математическое описание

этого классического процесса наследования в неравновесных нелинейных системах статистической физики может быть весьма сложным [18]. Но, как показал Шредингер в случае хrapения наследственной информации, особенность биохимии заключается в том, что в основе всех процессов наследования лежит динамика отдельных молекул, а не статистических средних, относящихся к большому числу молекул. Поэтому следует попытаться распространить эти представления о процессе наследования, почерпнутые из классической и статистической механики, на отдельные реакции, протекающие на уровне квантовой механики.

Однако ввиду явных трудностей, возникающих при таком микроскопическом описании, можно вновь поставить вопрос: почему необходимо описание, основанное на квантовой механике, тогда как известно, что во многих случаях, даже в химии, описания, основанного на классической механике, достаточно для адекватного понимания описываемых процессов? Иными словами, почему нельзя допустить, что хотя квантовая механика позволяет более точно описывать явления, однако для всех практических целей можно считать достаточно точным описание, основанное на классической механике?

Условие надежности для эволюции. Итак, мы подошли к главному вопросу: когда теорию или описание можно считать «достаточно точными»? Мы задавали этот вопрос в связи с нашими собственными попытками описать живое в терминах физических законов, однако тот же вопрос можно, разумеется, задать и по отношению к самому процессу наследования: когда описание наследуемого признака можно считать «достаточно точным»? Это весьма важный вопрос, и ответ на него зависит от того, какова цель данной частной теории или описания наследования. В связи с происхождением жизни этот вопрос можно сформулировать следующим образом: когда хранение и передача наследственной информации становятся достаточно надежными, чтобы обеспечивать непрерывную эволюцию по пути усложнения, несмотря на термодинамические ошибки, т. е. вопреки второму закону термодинамики? Даже несмотря на то, что мы не понимаем, как это происходит, единственный, на мой взгляд, оправданный вывод заключается в том, что живое отличается от неживого своей способностью обеспечивать большую надежность процессов хранения и передачи наследственной информации на молекулярном уровне по сравнению с любой термодинамической или классической системой.

Хотя мы вправе допустить, что относительно высокая надежность хранения наследственной информации в клетках основана на квантовомеханических стационарных состояниях отдельных молекул, нам все еще остается найти объяснение относительно высокой надежности проявления этой наследственной информации в виде классических признаков, взаимодействующей

щих с классической средой. Другими словами, мы можем сказать, что описание признака дается на уровне квантовой механики, тогда как естественный отбор действует на классическом уровне взаимодействия фенотипа и среды. Но даже несмотря на то, что мы не понимаем процесса наследственной передачи, ответ на наш вопрос о том, «достаточно ли точны» законы классической механики для построения теории биологии, теперь очевиден, ибо если сама клетка не может использовать классическую механику для описания процессов наследования, то как же мы можем объяснить эту уникальную биологическую надежность, не выходя за рамки классической механики?

Далее следует спросить, какого рода физическую теорию можно использовать для того, чтобы описать реализацию наследственной информации, записанной на квантовомеханическом уровне, в форме взаимодействия между фенотипом и средой на уровне классической механики. В частности, с помощью какой физической теории можно описать процесс наследственной передачи, в ходе которого информация, записанная на квантовомеханическом уровне, расшифровывается и дает фенотипическое проявление на уровне классической механики?

Квантовая теория измерения. Существует несколько других типов физических явлений, в которых описания на квантовомеханическом и классическом уровнях должны быть тесно связаны; к ним относятся ферромагнетизм, такие низкотемпературные явления, как сверхпроводимость и сверхтекучесть, а также процессы измерения в квантовомеханических системах. Интересно, что не существует полного описания всех этих типов явлений посредством элементарных квантовомеханических уравнений движения. В силу этого, хотя и вряд ли можно ожидать, что явление наследственности немедленно удастся объяснить на молекулярном уровне, обсуждаемая проблема по крайней мере не абсолютно чужда физике. Поэтому, не разделяя оптимистической веры многих молекулярных биологов, считающих, что проблема наследственности достаточно проста и ей легко дать физическое объяснение, я в то же время не могу быть столь пессимистичным, как некоторые физики, утверждающие, что жизненные процессы не могут быть выведены из физических законов.

Проблема описания процесса измерения в терминах квантовых уравнений движения не стала яснее за все время, прошедшее после создания квантовой механики. Поскольку эта проблема детально обсуждается во многих работах [19], я ограничусь лишь тем, что выскажу предположение о характере связи молекулярных процессов наследования с квантовой теорией измерения. Основная проблема может быть сформулирована следующим образом: квантовые уравнения движения относятся к наблюдаемым волновым функциям, которые можно интерпретировать как амплитуды вероятностей. При определенных условиях эти ненаблюдаемые амплитуды вероятностей

могут быть сопоставлены с наблюдаемыми переменными в мире классической механики, и, когда это сделано, мы говорим, что квантовое измерение выполнено. Однако квантовые уравнения движения, по-видимому, не учитывают эту связь амплитуд вероятностей с наблюдаемыми вероятностями в мире классической физики, и для получения измеримого количества необходимы преобразования другого типа, называемые «редукцией волновой функции». Квантовые уравнения движения обратимы во времени и описывают взаимно однозначное преобразование волновых функций, тогда как редукция волновой функции или измерение представляют собой необратимый процесс и связаны с классификацией альтернатив или сведением многих состояний к одному. Необходимость сочетания двух способов описания глубоко связана с двойственностью волна – частица, с принципом неопределенности и представлением о непрерывной дополненности при полном описании квантовых явлений.

Однако именно эта двойственность вызывает принципиальные трудности, связанные с процессом измерения, поскольку у нас пока нет объективных критериев, позволяющих определить, в каком именно из ряда последовательных событий происходит измерение. Другими словами, констатация наличия или отсутствия измерения зависит несколько произвольным образом от того, где наблюдатель проводит границу между квантовым и классическим описаниями данной ситуации. Если он рассматривает всю систему, в том числе и то, что мы обычно называем измерительным прибором, как одну квантовую систему, то тогда он не может зафиксировать измерения. Если же он будет рассматривать как одну квантовую систему совокупность молекул, характеризующуюся тем, что мы обычно называем наследственной памятью, то ему не удастся обнаружить наследования [20].

Ферменты как измеряющие молекулы. Несмотря на то что теория измерения в квантовой механике недостаточно разработана, физики продолжают делать точные измерения, подобно тому как биологи продолжают реплицироваться, не вполне понимая, что они делают. Однако в случае физиков это можно частично объяснить размерами измерительных приборов, которые обычно достаточно велики, так что их легко распознать и признать классическими системами. Во всяком случае, измерительные приборы созданы человеком, и их никто не считает спонтанным образованием. Относительно биологической репликации этого сказать нельзя. Говоря о сходстве между передачей наследственной информации отдельными молекулами и процессом измерения, необходимо установить, что же соответствует измерительному прибору на этом микроскопическом уровне. Или, если обратиться к проблеме происхождения жизни, какова простейшая конфигурация молекул, в виде которой может проявиться наследуемый признак и которую

можно было бы считать достаточно вероятной спонтанной молекулярной организацией?

Здесь мы должны вернуться к нашему основному определению наследования как процесса выбора, а не простого копирования или размножения инварианта движения. Мы уже говорили, что процесс классификации в рамках классической физики определяется неголономными связями, т. е. структурами, которые в статическом состоянии обладают большим числом степеней свободы, чем при подлинном движении системы. На молекулярном уровне это означало бы, что неголономные связи допускают большее число энергетически возможных реакций, чем это действительно возможно с точки зрения динамики системы. С точки зрения химии *доступные* реакции могут отличаться от энергетически возможных реакций лишь энергией активации и энтропией, и мы неизбежно приходим к тому, что процесс выбора или наследования должен быть связан с регуляцией скоростей специфических химических реакций. Разумеется, регуляция скорости и специфичности реакций в клетках осуществляется ферментными молекулами. Очень важно далее, что классические модели механизмов действия ферментов основаны на описании гибких структур или аллостерических взаимоотношений [21] и взаимоотношений по типу индуцированного соответствия [22], равноценных неголономным связям в физике. Возможно, конечно, что другие молекулы, например нуклеиновые кислоты, также обладают неголономными, каталитическими свойствами, но это еще требуется доказать.

Как мы уже отмечали, физик может спланировать и провести эксперимент с квантовыми системами без микроскопического анализа процесса измерения, поскольку в большинстве случаев измеряемая квантовая система четко отличается от классического измерительного прибора. Другими словами, мы принимаем неголономные связи часов, выключателя или автоматического запора, потому что они представляют собой большие классические системы со многими степенями свободы, которые мы статистически можем приспособить к нашим потребностям с необходимой для наших целей точностью или надежностью. Но из этого вовсе не следует, что на микроскопическом уровне мы можем создать одиночную молекулу, которая действовала бы со скоростью и надежностью, характерными для специфических реакций, контролируемых ферментами. Прежде всего сама идея о неголономной связи в элементарной квантовой системе вынуждает к глубоким изменениям в языке физики [23]. Необходимо не только расширить понятие измерения, с тем чтобы оно относилось и к ненаблюдаемым количествам, но, кроме того, существенно изменить уравнения движения путем введения неголономных условий, поскольку у нас нет возможности получить столь строгие связи, исходя из существования дополнительных степеней свободы. С другой сто-

роны, эта потребность в надежной микроскопической неголономной связи согласуется с предположением, высказанным сначала Лондоном [24], а затем Литтлом [25], о том, что макромолекулы находятся в состоянии сверхтекучести или сверхпроводимости, что делает возможным изменение формы и перенос вещества без рассеяния энергии. Как указывал Лондон, такое квантовое жидкое состояние сочетало бы в себе характерную устойчивость стационарных состояний с возможностью динамического движения без теплового возбуждения. А именно такими свойствами должны были бы обладать специфические катализаторы, действующие как точные молекулярные измерительные устройства.

Прямая экспериментальная проверка такой теории измерения применительно к специфическому катализу может встретиться с трудностями, о которых говорил Бор, а именно измерение важнейших процессов жизнедеятельности извне может оказаться несовместимым с результатами этих процессов. Если измерение, производимое отдельными молекулами ферментов, зависит от внутренней корреляции их электронов, то любое устройство, производящее измерение этих электронов извне, неизбежно нарушит некоторые из этих корреляций, что вызовет соответствующее понижение специфичности и каталитической способности фермента. Однако, быть может, такую теорию удастся проверить каким-либо иным, более косвенным путем [26].

Следует ожидать, конечно, что классическое описание во многом действительно окажется полезным и что для многих практических целей можно обойтись без привлечения квантовой механики. Однако для любой общей теории биологических систем *надежность* передачи по наследству или скорость и точность измерения имеют решающее значение. Например, столь, казалось бы, небольшое различие между частотой мутаций, как 10^{-4} и 10^{-8} на 1 акт передачи наследственной информации, может оказаться для вида чрезвычайно важным, так как первая может привести к немедленному вымиранию, а вторая обеспечивает длительную эволюцию вида [27]. Именно это количественное различие в скорости и надежности наследственной передачи может объяснить квантовая механика, тогда как классическая физика сделать это не в состоянии.

Если вернуться к проблеме происхождения жизни, то это допущение приведет нас к предположению, что *жизнь началась с какого-то каталитического процесса кодирования на уровне отдельных молекул*, поскольку никакая спонтанная термодинамическая система или классическая машина, по-видимому, не может обеспечить скорость и надежность, необходимые для эволюционного процесса, протекающего в классической среде. Поэтому, хотя мы и можем ценой больших усилий создать сложные классические машины, имитирующие способность к наследованию и приспособлению к

классической среде в течение ограниченного времени, вряд ли можно думать, что такие сложные устройства спонтанно возникли в условиях первобытной Земли или же что их процессы наследования достигли такой статистической надежности, которая позволила им оставаться вполне отличными от внешней среды в течение пяти миллионов лет.

План моделирования происхождения жизни. Какого рода абиотические эксперименты можно провести на основе этой измерительной теории процессов наследования? Прежде всего следует сказать, что специфические молекулы-катализаторы играют существенную роль в процессе кодирования передающейся по наследству информации. В отличие от так называемой главной догмы, согласно которой нуклеиновые кислоты передают всю наследственную информацию, а белки могут лишь воспринимать ее, мы должны были бы прийти к выводу, что, в то время как матричные молекулы или голономные системы можно называть *хранителями* наследственной информации, лишь неголономные системы или аллостерические катализаторы могут *передавать* ее. Более того, важно понять, что невозможно дать *сколько-нибудь полезное определение хранимой информации без детального описания механизма кодирования, участвующего в ее передаче*. Без полного описания этого передаточного кода нельзя определить, какие переменные в данной физической структуре состоят из наследственной информации, подлежащей передаче, а какие переменные следует рассматривать просто в качестве начальных условий, необходимых для создания определенной структуры-хранилища в данное время. Непонимание того, что для объективного определения хранимой информации необходимо предварительное описание передаточного кода, привело к значительной путанице в использовании понятия информации, особенно применительно к биологическим системам.

Экспериментальный подход, вытекающий из этой теории, резко отличается от большинства экспериментов, связанных с так называемой «химической эволюцией» или абиогенным органическим синтезом; в последних основное внимание уделяется повышению сложности ненаследственных химических структур, которое постулируется на основе сходства между отдельными спонтанно возникающими видами молекул и видами молекул, существующими в клетках [28]. Если судить о сходстве этих спонтанно возникающих молекул с клеточными молекулами, возникшими в ходе эволюции, сравнительно легко, то вопрос о значении молекул каждого вида остается открытым. Это породило много споров о том, какой именно тип синтеза наиболее тесно связан с происхождением жизни на Земле и в других местах. Поскольку весьма различные сочетания начальных условий могут приводить к образованию большого числа сходных органических молекул, возникли также споры относительно таких неопределенных факторов, как условия равновесия или источники свободной энергии, которые по суще-

ству обусловили образование первых предбиологических молекул на Земле, а также по поводу того, какие внеземные условия могли бы способствовать появлению некоторых видов предбиологических молекул.

Я хотел бы подчеркнуть, что с точки зрения наследования для общей проблемы происхождения жизни не имеет особого значения, образовалась ли данная молекула под действием тепла, ультрафиолетовых лучей, ионизирующих частиц или же просто получена от фирмы, торгующей химикалиями, – *при условии, что молекула не имеет памяти*. Далее, поскольку мы связываем наследование лишь с регулированием скорости, или, иными словами, поскольку равновесные состояния не могут иметь памяти, мы не можем ожидать, что последние играли главную роль в возникновении жизни. Разумеется, я не имею в виду, что органические синтезы и факторы равновесия не имеют значения для проблемы происхождения жизни. Я хочу лишь подчеркнуть, что только в связи с самим свойством наследований эти другие вопросы могут получить объективное биологическое истолкование. Поэтому поиски простейших возможных наследственных химических *процессов* не будут иметь смысла до тех пор, пока мы не сможем плодотворно сравнить получаемые нами продукты с живыми клетками.

Примеры наследственных сополимерных реакций. Как можно экспериментально распознавать самые примитивные наследственные реакции или коды в простых молекулах? Это очень трудный вопрос, который я не могу полностью обрисовать, однако общую идею можно проиллюстрировать рядом примеров, касающихся роста полимеров. Представим себе рост простого гомополимера в таких условиях, когда присоединение мономеров происходит с постоянной скоростью K_a . Предположим далее, что, после того как цепь достигнет достаточной длины, она образует спиральную структуру, на каждый виток которой приходится пять мономеров, и что в результате скорость присоединения мономеров возрастает до $K'_a > K_a$. Характер связи не изменился, возросла лишь скорость образования связей. Примером такого зависящего от конформации катализа служит синтез полипептидов через N-карбоксиянгидрид [29]. Важная особенность этой простой зависящей от конформации реакции состоит в том, что каждый предыдущий мономер в спиральной цепи определяет скорость присоединения следующего мономера. Это равносильно задержке действия регулирующего механизма, соответствующей одному витку. Такой процесс регуляции вряд ли может обладать значительными эволюционными потенциями. Однако мы покажем, как естественные изменения таких специфических каталитических эффектов, зависящих от конформации, могут привести к возникновению сложного наследственного кодирования в простых сополимерах.

Рассмотрим рост сополимера, в котором начальные скорости присоединения мономеров составляют K_a и K_b . Предположим, что эта цепь так-

же образует спиральную структуру, на каждый виток которой приходится пять мономерных звеньев, и что в ней определенное расстояние между этими звеньями в положениях $(n - 4)$ и $(n + 1)$ катализирует присоединение следующего звена, как и в предыдущем примере. Однако теперь, когда мы имеем дело с двумя видами мономеров, маловероятно, чтобы каталитический эффект положения $(n - 4)$ не зависел от вида мономера, находящегося в этом положении. Если мы допустим, что только мономер в положении $(n - 4)$ оказывает сильное влияние на скорость присоединения следующего мономера, то при этом возможны четыре схемы регуляции, или *кода* (табл. 1).

Таблица 1

Код	Тип мономера в положении $(n - 4)$	Тип катализируемого мономера в положении $(n + 1)$
1	<i>a</i>	<i>a</i>
	<i>b</i>	<i>b</i>
2	<i>a</i>	<i>b</i>
	<i>b</i>	<i>a</i>
3	<i>a</i>	<i>a</i>
	<i>b</i>	<i>a</i>
4	<i>a</i>	<i>b</i>
	<i>b</i>	<i>b</i>

Какое влияние окажут эти коды на последовательность мономеров в сополимерной цепи? Два последних кода явно приведут к образованию простых гомополимеров независимо от исходной последовательности мономеров. Однако первые два кода приведут к образованию соответственно 8 и 4 видов периодических сополимеров. Ясно также, что линейная последовательность в каждом из этих видов целиком определяется для каждого кода в табл. 1 любыми пятью последовательными мономерами в одном витке спирали, и поэтому каждый виток спирали можно рассматривать как генетическую последовательность. Например, если какой-либо мономер *a* или *b* в положении $(n - 4)$ увеличивает относительную скорость присоединения мономера того же типа (код 1 в табл. 1), то любая из пяти возможных циклических перестановок – *ababa, baaaa, abaab, baaba* и *aabab* – представляет собой эквивалентную генетическую последовательность для одного из видов сополимеров. Другие семь видов произошли от двух гомополимеров *aaaaa* и *bbbbbb* и от последовательностей *babab, aabaa, bbaba, baaab* и *abbba* или одной из их циклических перестановок. Важно понять, что специфичность или относительная каталитическая активность мономера в положении $(n - 4)$ или, другими словами, *надежность* тактического катализатора по

отношению к типам присоединяемых мономеров будет определять частоту мутаций, присущую этому типу наследования. Конечно, присоединение какого-либо некатализируемого, т. е. некодированного, мономера не всегда будет приводить к возникновению нового вида, поскольку все циклические перестановки последовательности мономеров в конечном витке спирали в генетическом смысле излишни. Такую ситуацию можно было бы сравнить с такой мутацией в ДНК, при которой она продолжает кодировать ту же аминокислоту.

Предположим теперь, что мы хотим повысить надежность такого процесса кодирования. Другими словами, мы хотим повысить специфичность и соответственно скорость присоединения отдельных мономеров. Один из разумных способов для этого состоит в том, чтобы допустить, что на активный центр приходится больше мономеров, т. е. что степень взаимодействия с присоединяемым мономером будет выше. Используя все ту же модель спирального сополимера, предположим, что не только мономер в положении $(n - 4)$ определяет тип присоединяющегося мономера, но что и последний, т. е. n -й полимер, также влияет на специфичность присоединения. Такое предположение стерически вполне допустимо, поскольку n -й и $(n - 4)$ -й мономеры образуют в спирали шаговое смещение в том положении, в котором присоединяется следующий мономер. Но теперь вместо четырех возможных схем кодирования, представленных в табл. 1, мы имеем уже 16 возможных кодов, опять-таки лишь при условии абсолютной специфичности или так называемой эутактической регуляции. Если мы выберем код, при котором в случае одинаковых мономеров в положениях n и $(n - 4)$ катализируется присоединение мономера a , а в случае разных мономеров в этих положениях – присоединение мономера b , то мы получим четыре вида сополимеров, которые могут быть представлены следующими четырьмя периодическими последовательностями:

$$\begin{aligned} S_1: & (a)_n \\ S_2: & (bba)_n \\ S_3: & (bbbaaba)_n \\ S_4: & (bbbbababaabbaaaba) \end{aligned}$$

Молекулы в пределах S_2 , S_3 и S_4 будут отличаться друг от друга лишь начальной последовательностью. Сумма длин всех периодов составляет $2^5 = 32$, и поэтому для данной конформации и данного кода невозможны никакие иные эутактические виды. Разумеется, мы можем также определить каждый вид по пяти последовательным мономерам из любого участка каждой цепи. Например, для $S_1 - aaaaa$, для $S_2 - abbab$, для $S_3 - baaba$, $S_4 - bbbbb$. Ясно, что виды S_2 , S_3 и S_4 имеют соответственно 2, 6 и 20 других равноценных начальных генетических пятичленных последовательностей.

Если создать переходную матрицу для этого процесса роста полимера, перечислив все 32 начальных и конечных состояния, ее наследственное свойство будет проявляться в возможности сведения этой матрицы к четырем субматрицам, соответствующим четырем звеньям цепи. Из этого описания переходной матрицы явствует, что пространство, в котором может происходить рост данной начальной пятичленной цепи, меньше, чем физически мыслимое пространство для пятичленных цепей. Поэтому механизм этого процесса роста, который мы здесь не описывали, эквивалентен неголокомной связи.

Разумеется, эти упрощенные сополимерные модели приведены здесь лишь для того, чтобы показать, как самым простым способом могут возникнуть на молекулярном уровне истинные процессы наследования.

Маловероятно, чтобы рост тактических полипептидов мог идти при столь немногих ограничивающих условиях или именно таким автономным способом. Оптимальные условия, при которых такой тактический каталитический рост полипептидов мог идти на стерильной первобытной Земле, требуют дальнейшего обсуждения [30]. На основании тактических процессов, известных для клеток современных организмов, и допущения непрерывности эволюции представляется правдоподобным, что самый примитивный тактический катализ полипептидов также происходил при участии полинуклеотидов и каких-то систем частиц или мембран. Происхождение нуклеотидно-аминокислотного кода остается в высшей степени загадочным, однако, принимая во внимание все сказанное выше, участие в этом матричных моделей или некаталитических процессов приходится исключить.

Надежность сополимерных катализаторов. Даже несмотря на то, что мы не можем в настоящее время представить себе сколько-нибудь детальный квантовый механизм для этого зависящего от конформации каталитического процесса, изучение специфических свойств таких одиночных сополимерных наследственных катализаторов, влияющих на их надежность, было бы весьма важным, поскольку надежность имеет существенное значение для эволюции. Одна из главных черт ферментативного катализа состоит в том, что специфичность может контролироваться лишь слабыми взаимодействиями, тогда как катализ или регуляция скорости осуществляется только на уровне прочных ковалентных связей субстрата. В отличие от этого в классических машинах, например в часах, такие прочно связанные структуры, как зубчатые колеса и спуски, используются для регулирования образования слабых связей, т. е. фрикционных контактов между цапфами спуска и зубцами колеса. На уровне сополимеров различие между сильными и слабыми связями уже заложено в концепциях *последовательности* и *конформации* мономеров, поскольку ни один

из этих терминов не имел бы смысла, если бы между мономерами существовали связи лишь одного типа. Линейная последовательность – это последовательность мономеров, соединенных сильными связями на всем протяжении цепи, тогда как конформация линейных цепей определяется слабыми связями, допускаемыми подвижностью и вращением сильных связей, но не их разрывом. Конечно, в молекулах ферментов имеются и ковалентные связи, так называемые поперечные связи, но тем не менее линейная последовательность определяется по преимуществу более стабильной сильной связью.

Какое значение имеет эта различная роль сильных и слабых связей для надежности процесса наследственной передачи в классических и квантовых системах? Мы уже указали вслед за Шредингером, что ковалентная связь в сополимерной цепи представляет идеальный статический механизм *хранения* наследственной информации. Однако не менее важно, что все динамические процессы *передачи* наследственной информации, включающие репликацию, транскрипцию и кодирование, действуют с большой надежностью, несмотря на внешние и внутренние помехи. Очень важно, в частности, что процесс передачи по наследству обычно прекращается в тех случаях, когда возникают ошибки или нарушаются правила кодирования. В противном случае подобная нерегулируемая каталитическая активность лишь ускоряет разрушение наследственной информации. Можно ожидать, например, что спиральная модель сополимера, в которой спиральная структура поддерживается лишь слабыми связями, а генетическая память обеспечивается сильными связями, способна в какой-то мере предупреждать появление ошибок при нагревании – она при этом скручивается случайным образом и поэтому перестает катализировать присоединение мономеров. Между тем классические машины, например часы, при постепенном повышении температуры, вероятно, сначала просто начнут идти неправильно и лишь позднее остановятся окончательно. Иными словами, без использования специального корректирующего приспособления классические часы сначала начнут показывать неверное время, а потом расплавятся, тогда как фермент расплавится (денатурируется), прежде чем он начнет катализировать не ту реакцию. В силу этих соображений можно ожидать, что оптимальной надежностью и, следовательно, выживаемостью будут обладать те наследственные системы, в которых неколономные связи, лежащие в основе механизма трансляции, образованы структурами со слабой связью, тогда как хrapение памяти и фенотипическое выражение этой памяти осуществляются метастабильными структурами с сильной связью. Поэтому данные о специфических катализаторах, инактивирующихся под действием тепла, имеют большое значение при абиогенных экспериментах.

Однако даже при оптимальных условиях сохраняется некоторый уровень случайных тепловых нарушений, которые воздействуют на скорость и точность любого классического измерительного прибора. Обычно, если броуновское движение или колебания частиц снижают точность измерения, единственный выход из положения заключается в том, чтобы увеличить массу прибора или время наблюдения и таким образом путем усреднения уменьшить колебания. Следовательно, в классических машинах высокая точность не совместима ни с маленькой массой, ни с высокими скоростями операций. В результате перед нами встает необычайно интересная проблема: найти объяснение огромной скорости и точности действия отдельных ферментных молекул в условиях, когда нельзя использовать статистику большого числа степеней свободы, которую мы связываем с макроскопическими объектами.

На первый взгляд объяснение подобной скорости и точности в единичной квантовой системе может показаться даже еще более трудным делом, если вспомнить о принципе неопределенности. Мы можем сказать, например, что если мы решили измерить энергию системы с точностью ΔE , то измерение должно происходить в течение интервала времени $\Delta t \geq h/\Delta E$, так что скорость и точность измерения в данном случае в принципе несовместимы. Однако более точное описание подлинных функций ферментов не укладывается в такую простую связь сопряженных переменных, участвующих в процессе измерения. Специфичность ферментов, по-видимому, зависит от точного соответствия некоторой части субстрата некоторой части фермента. Из этого следует, что специфичность зависит от измерения координат, определяющих относительное положение некоторых участков субстрата. Но поскольку катализируемая связь может иметь иную локализацию, координаты импульса, сопряженные с определяющими специфичность координатами, могут и не иметь непосредственного отношения к скорости катализа. С другой стороны, если структура фермента обладает неголономными свойствами, что, как мы считаем, необходимо для передачи наследственной информации, то из этого следует, что между измеренными координатами, характеризующими специфичность, и координатами импульса, связанными с катализом, должны существовать динамические корреляции. Надежность узнавания субстрата и скорость катализа, как мы видим, связаны с проблемой описания подобных динамических корреляций без помощи классических структур. Как мы указывали выше, это трудная логическая и математическая проблема.

Подобные соображения о надежности, по-видимому, имеют самое непосредственное отношение к размерам ферментных молекул и структур, участвующих в передаче наследственной информации, в частности механизмов репликации и транскрипции ДНК, а также кодирования. Было показано, что

допустимая точность квантовомеханических измерений возрастает с увеличением размеров измерительных устройств, так что эти измерения можно считать точными лишь в рамках классической механики [31]. Эту неточность нельзя интерпретировать как обычные ошибки измерения или связать с неопределенностью измерения *пары* некоммутирующих переменных. Она скорее представляет собой результат попытки описать изменения, происходящие при измерении, с помощью квантовых уравнений движения. Хотя надежность и не была оценена количественно, вполне вероятно, что сополимеры должны были спонтанно дорасти до определенной величины, прежде чем они оказались способными к тактическому катализу, обладающему достаточной надежностью, чтобы обеспечить определенный успех в эволюции. Подобная надежность, возможно, требовала, чтобы сополимеры были связаны с мембранами или частицами, как в тактических реакциях в клетках современных организмов.

Основная цель этого обсуждения заключается в том, чтобы подчеркнуть необходимость надежного молекулярного кодирования для любой длительной эволюции. Существуют два аспекта этой надежности: во-первых, *логический порог*, продемонстрированный фон Нейманом (см. стр. 76 – 78) и разделяющий описание, или генотип, и построение фенотипа, и, во-вторых, *порог физической надежности*, который поддерживает динамику наследования с тем, чтобы скорость накопления информации под действием естественного отбора могла превосходить уровень появления ошибок в процессе передачи наследственной информации в целом. Из этого следует, что ни процессы матричного копирования, ни неспецифический катализ не могут объяснить происхождение жизни. Даже несмотря на то, что человек может создать классические автоматы, удовлетворяющие логическому порогу и порогу надежности, без которых немислима наследственная эволюция, квантовомеханическое описание все же, по-видимому, окажется очень важным для понимания природы живой материи [32]. Кроме того, трудности квантовомеханического описания надежных процессов наследования, по-видимому, обусловлены не только их сложностью, но связаны с некоторыми очень трудными общими проблемами, лежащими в основе физической теории. В конце концов будет ли удивительно, если окажется, что загадка жизни основана на чем-то более сложном, чем простое химическое описание?

Некоторые более общие вопросы. Я обсуждал проблемы кодирования и надежности в связи с происхождением жизни, потому что на этом уровне можно построить простейшую из возможных концепций о молекулярной передаче наследственной информации. Как мы убедились, даже на этом уровне встречаются достаточно серьезные теоретические трудности. Тем не менее я полагаю, что понятия кодирования и надежности не только полезны, но и необходимы на всех уровнях биологической организации – клеточном,

морфогенетическом, эволюционном и, безусловно, на уровне высшей нервной деятельности, связанной с головным мозгом. Мы использовали код для обозначения связи между неким элементарным генотипом и фенотипом, т. е. между символическим описанием и физическим объектом, воссоздаваемым на основе этого символического описания.

Процессы клеточной репликации и особенно развития организма можно представить как процесс создания целой системы, для которого, необходим механизм кодирования, обеспечивающий реализацию и репликацию данного описания. Мы начинаем понимать теперь, главным образом благодаря изучению логики абстрактных автоматов, как с помощью простых кодов по относительно кратким описаниям создаются сложно организованные структуры. Процесс, идущий по пути «описание – код – структура», нельзя исчерпывающе охарактеризовать, назвав его преформацией или эпигенезом, поскольку, с одной стороны, структура может не иметь никакого сходства с описанием, а с другой – описание и код совместно обеспечивают полное, автономное и притом надежное формирование фенотипической структуры.

На эволюционном уровне это представление о символическом генетическом описании и его кодовых структурах должно быть расширено до более крупной системы, включающей в себя не только описание самой системы, но и описание, или «теорию», среды. В эволюционном плане сам фенотип играет теперь роль сложного измерительного прибора, который проверяет описание в процессе его взаимодействия с реальной средой. Мы должны расширить также понятие надежности, включив в него способность этой системы типа «описание – код» или «теория – измерение» к общим предсказаниям, Я полагаю, что эту способность к предсказанию было бы разумно связать с тем, что в эволюционной теории называют «мерой приспособленности».

Наконец, на уровне нервной деятельности, т. е. в процессах создания памяти и теории интеллекта, мы вновь стремимся отыскать более изящные кодовые структуры, позволяющие делать максимально надежные предсказания в самом широком объеме, с тем, однако, условием, чтобы эти структуры могли возникать из сравнительно кратких символических описаний. Вероятно, мы могли бы даже сказать, что характерным признаком биологической активности на всех уровнях служит наличие эффективных и надежных кодов. Однако пи на одном из этих уровней мы не можем избежать основного вопроса о том, каким образом биологические системы достигают этой уникальной надежности кодов, благодаря которой они столь четко отличаются от неживой материи. Возможно, что даже на уровне памяти и сознания отдельные ферменты служат главными передающими звеньями или кодами от органов чувств к внутренним описаниям в мозгу.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

И вновь встает исторический вопрос: можно ли выразить процессы, характерные для биологических организмов, в понятиях основных законов физики? Я попытался показать, что, несмотря на наличие множества классических моделей клеточных структур и функций, объяснение надежности передачи наследственной информации на основе законов физики встречается с серьезными трудностями. Я высказал предположение, что в основе уникального различия между живой и неживой материей лежат не идеализированные классические модели макромолекул, матричной репликации или регуляции обмена веществ, а количественная надежность молекулярных кодов, которые могут связывать содержание квантовомеханического описания с его классическим фенотипическим выражением. Для понимания такой связи между квантовым описанием и соответствующими наблюдаемыми классическими явлениями необходимо приложить к элементарным молекулярным процессам наследования квантовую теорию измерения. Такая теория ставит перед физиком ряд серьезных, но, я надеюсь, разрешимых трудностей как теоретического, так и формального характера. Однако, несмотря на нерешенные теоретические вопросы, мы можем уточнить некоторые необходимые условия существования отдельных молекулярных кодирующих структур. Из этих условий следует, что процессы кодирования или измерения в живых организмах осуществляют одиночные неголопомпы ферменты-катализаторы, хотя возможно, что и другие структуры клетки способствуют повышению надежности этих кодов.

В широком смысле существование исключительно надежного молекулярного кода необходимо не только для возникновения жизни, но и для развития особи, эволюционного процесса естественного отбора и сохранения наследственных признаков и даже для символических закодированных описаний, которые мы называем «интеллектуальными теориями». Однако на любом уровне сложности можно, как нам кажется, найти зависящий от конформации тактический катализатор, представляющий собой самый элементарный механизм для передачи наследственной информации. Поэтому я думаю, что описание таких надежных молекулярных процессов наследования в терминах квантовой механики остается основной проблемой, которую мы должны изучать не только для развития теоретической биологии, но и для создания более прочной гносеологической основы самой физической теории.

ЛИТЕРАТУРА И ПРИМЕЧАНИЯ

1. См., например, *Wigner E.P.*, Proc. Natl. Acad. Sci, 51, 956 (1964).
2. Такое мнение высказывал, в частности, Уотсон (*Watson J. D.*, The molecular biology of the gene, N. Y., p. 67, 1965): «До недавнего времени наследственность представлялась одним из самых загадочных свойств живого. Трудно переоценить важность того факта, что современные данные по структуре ДНК практически достаточны для понимания всех главных особенностей феномена наследственности на молекулярном уровне. Мы видим теперь, что на основе законов химии можно понять не только структуру белка; все известные нам явления из области наследственности также подчиняются этим законам». (*Дж. Уотсон*, Молекулярная биология гена, изд-во «Мир». М., стр. 72, 1967.)
Значительно раньше, в 1919 г., т.е. в до-ДНК-ю эру, оптимистическое отношение к проблеме наследственности высказал Томас Гент Морган: «То обстоятельство, что основные аспекты наследственности оказались столь простыми, укрепляет в нас надежду найти в конце концов объяснение всех явлений природы» (цит. по *Crick F. H.C.*, On molecules and men, Univ. of Washington Press, Seattle, 1966).
3. См., например, *Philipps D.C.*, Scientific American, 215, 90, 1966: «...в результате всех проводящихся в настоящее время исследований активность лизоцима Флеминга, несомненно, скоро будет полностью понята. И самое хорошее – это то, что, как теперь ясно, существуют методы для раскрытия секретов действия ферментов».
4. См., например, *Kendrew J.C.*, Scientific American, 216, № 3, 142, 1967 (рецензия на книгу «Phage and the origins of molecular biology», J. Cairns et al., Eds.): «...до настоящего времени обычных элементарных законов физики и химии было достаточно, и, по крайней мере с точки зрения автора, горизонт будущего свободен от таких фактов, для объяснения которых потребовались бы новые или усложненные законы».
5. См., например, *Ingram V.M.*, The biosynthesis of macromolecules, W. A. Benjamin, New York, 1965 (Ингрэм В., Биосинтез макромолекул, изд-во «Мир», М., 1966); *Perutz M.F.*, Proteins and nucleic acids, Elsevier Pub. Co., Amsterdam, 1962; *Watson J.D.*, The molecular biology of the gene, New York, 1965.
6. Нередко делают попытки представить происхождение жизни делом случая (см. например, *Wald G.*, Scientific American. 3, 1954. Об отношении физика к случайности как объяснению см. *Bridgman P. V.*, Science, 123, 16, 1954).
7. *Wigner E.P.* in: The logic of personal knowledge, Routledge and Kegan Paul, London, p. 231, 1961. См. также *Landsberg P. T.*, Nature, 203, 928, 1964.
8. *Bohr N.*, Atomic physics and human knowledge, New York, 1958.

9. *Elsasser W.M.*, Atom and organism, Princeton Univ. Press, 1966; см. также *Elsasser W.M.*, The physical foundations of biology, New York, 1958.
10. *Burgers J.M.*, Experience and conceptual activity, MIT Press, Mass., 1965,
11. См., например, *Houtappei R.M.F van Dam H.*, *Wigner E.P.*, Rev. Mod. Phys., **37**, 595, 1965. Краткое изложение см. *Wigner E.P.*, Science, **145**, 995, 1964.
12. *Neumann J. von*, in: Cerebral mechanisms in behaviour, L. E. Jcfress, ed., John Wiley a. Sons, New York, p. 1, 1951. Более специальное наложение см. *Neumann J. von*, in: The theory of scifreplicating systems, A. W. Burks, ed., Univ. of Illinois Press, Urbana, 1966.
13. См., например, *Arbib M.*, Information a. Control, **9**, 177, 1966; *Lee C. V.*, in: Mathematical theory of automata, Polytechnic Press, Brooklyn, p. 155; *Thatcher J. V.*, ibid, p. 165; *M y h i I J.*, in: Views on general systems theory, M. D. Mesarovic, ed., John Wiley a. Sons, New York, p. 106, 1964.
14. См., например, *Changeaux J.P.*, Scientific American, **212**, 36, 1965.
15. *Sommerfeld A.*, Mechanics, Acad. Press, New York, 1952; *Whittaker E. F.*, A treatise on the analytical dynamics of particles and rigid bodies, 4th ed., Dover Publ., New York, ch. 8, 1944.
16. *Stahl W. R.*, *H. E. Gohcen*, J. Theoret. Biol., **5**, 266, 1963; *Stahl W. R.*, ibid, **14**, 187, 1967.
17. *Schrödinger E.*, What is life? Cambridge Univ. Press, 1944. (Э. Шредингер, Что такое жизнь? ИЛ. М, 1947.)
18. См. *Frieman E.*, *Goldman R.*, J. Math. Phys. **1**, 2153, 1966, и ссылки в этой статье.
19. Две классические работы по этому вопросу: *Heisenberg W.*, The physical principles of quantum theory., Dover Publ., New York, ch. 4, 1930. (В. Гейзенберг, Физические принципы квантовой теории, М.—Л., 1932); *Neuman J. von*, Mathematical foundations of quantum mechanics, Princeton Univ. Press, 1955 (И. Нейман, Математические основы квантовой механики, ИЗД-ЕО «Наука», М., 1964). Недавно этот вопрос обсуждался п двух других работах: *Wigner E.P.*, Am. J. Phys., **31**, 6, 1963. *Daneri A.*, *Loinger A.*, *Prosperi G.M.*, Nile. Phys., **33**, 297, 1962. В более общем плане этот вопрос обсуждался в следующих работах: *Bohr N.*, Atomic physics and human knowledge, John Wiley, New York, p. 32, 1958. (Н. Бор, Атомная физика и человеческое познание. ИЛ, М., 1961); *Feyerabend P.K.*, in: Observation and interpretation in the philosophy of physics, S. Korner, ed., Dover Publ., New York, 1957; *Sussman G.*, ibid.
20. Материал изложен в соответствии с наиболее широко распространенной интерпретацией, принятой, например, фон Нейманом (loc. cit.).
21. *Monod J.*, *Changeaux J.-P.*, *Jacob F.*, J. Molec. Biol., **6**, 306, 1963.
22. *Koshland D. E., Jr.*, Fed, Am. Soc. Exp, Biol. Proc., **23**, 719, 1964.
23. *Eden R. J.*, Proc. Roy. Soc., **205A**, 583, 1951.

24. *London F.* Superfluids, 2nd ed., vol. I, Dover Publ., New York, p. 8, 1961.
25. *Little W.A.*, Phys. Rev., **134A**, 1416, 1964.
26. Например, ферментативный катализ изучался в очень сильных магнитных полях ($\sim 220\,000$ гаусс) – см. *Rabinovitch B., Maling J, E., Weissbluth M., Biophys J*, (in press); *ibid.*, **7**, 187, 1967. Никаких эффектов при этом не наблюдалось; однако из-за неопределенности предпосылок, лежащих в основе теории, а также из-за того, что критические поля оказываются тем выше, чем меньше сверхпроводники, эти результаты никоим образом не исключают возможности наличия у ферментов свойств сверхпроводимости или сверхтекучести.
27. Хотя подход с позиций классической физики может оказаться плодотворным для многих описательных целей в биологии, мы надеемся, что проблема скорости и надежности кодов на квантовом уровне не будет ограничена эволюционным планом. В частности, при рассмотрении памяти и мышления мы сталкиваемся с теми же проблемами малых размеров, высокой скорости и надежности. Но в случае сознания возникает еще менее ясная проблема физической основы самосознания.
28. Перечень экспериментов по абиогенному синтезу, проведенных до 1964 г., см.: *Pattee H.*, in: *Advances in Enzymology*, F. Nord, ed., v. 27, John Wiley and Sons, New York, p. 381, 1965.
29. *Idelson M., Blout E.*, Polypeptides, XVIII, *J. Am. Chem. Soc.*, **80**, 2387 (1938).
30. *Pattee H.*, in: *The stereochemistry of macromolecules*, L.I. P. Ketley, ed., Marcel Dekker, New York (in press).
31. *Araki H., Yanase M. M.*, Phys. Rev., **120**, 622 (1960).
32. *Cowan J. D.*, in: *Prog. in Brain Research*, v. 17, New York, p. 9, 1965.

Информация и правила для авторов

Общие положения

Журнал «Наноструктуры. Математическая физика и моделирование» (сокращенно: НМФМ) публикуется с 2009 года и является периодическим научным изданием. Электронная версия журнала размещается на сайте <http://www.nano-journal.ru>. Основная цель издания: представление новых теоретических и вычислительных методов моделирования наноструктур и мягкой материи, общих подходов в исследовании мезосистем, а также ключевых экспериментальных результатов в данной области и связанных с этим проблем математической физики.

Журнал НМФМ имеет междисциплинарный характер и в силу этого несет определенную образовательную направленность, а не только узко научную. Работы, представляемые в журнал, должны содержать вводные сведения, которые обеспечат понимание постановок задач и восприятие результатов не только прямыми специалистами. Определения понятий, объяснение обозначений и терминов, оценки характерных параметров, теоретические предпосылки и идеи, используемые методы, и т.п., должны быть кратко объяснены в тексте статьи, имея в виду читателей, специализирующихся в иных направлениях. Должны быть описаны базовые математические модели и уравнения. Во Введении и в последующих разделах очерчивается стратегия и основные трудности, это увязывается с используемыми моделями. Структура статьи ориентируется на прояснение общей логики и методики исследования, содержит резюмирующие выводы. В тексте должны быть рассмотрены характерные примеры (хотя бы, методические), ясно иллюстрирующие предлагаемые алгоритмы.

Журнал публикует научные обзоры, исследовательские статьи и краткие научные сообщения, а также избранные аналитические и информационно-образовательные материалы, тексты докладов и циклов лекций, прочитанных в университетах, научных центрах, на школах-семинарах, конференциях, нигде ранее не публиковавшиеся и не принятые к публикации в других изданиях. Язык публикации в журнале НМФМ, как правило, русский. Работы, представляемые в журнал, не могут иметь научно-популярный или компилятивный характер. Все статьи рецензируются и могут быть отклонены редколлегией журнала. В случае принятия работы к печати ее авторы передают издателю журнала НМФМ право на разовую безвозмездную публикацию текста и его размещение в электронной версии на сайте журнала. Перевод опубликованных в журнале статей на другие языки может осуществляться только с разрешения и при участии авторов.

Порядок представления статей

- В редакцию изначально представляются:
 - файл статьи, файлы с иллюстрациями;
 - сопроводительное письмо, можно в электронной форме, содержащее сведения об объеме статьи и обо всех авторах (фамилии, имена, отчества, полные названия мест работы, почтовый адрес с индексом, номер контактного телефона с кодом города, электронный адрес автора, ответственного за переписку с редакцией); предпочтительно, чтобы это письмо было выполнено на бланке учреждения, в котором работает кто-то из авторов, было заверено печатью и содержало утверждение о возможности открытого опубликования статьи;
 - файл с переводом на английский язык названия статьи, фамилий и инициалов авторов, аннотации, ключевых слов.
- Авторские файлы могут быть присланы на электронный адрес: papers@nano-journal.ru; (резервный адрес в случаях затруднений с пересылкой: nano@miem.edu.ru) или переданы в редакцию на любом электронном носителе. Авторы получают из редакции подтверждение о получении их материалов.
- Телефон (факс) редакции: +7 (495) 916-8876. Адрес редакции: Москва 109028, Б. Трехсвятительский пер., 3/12, Московский институт электроники и математики (МИЭМ), комн. 449.

Общие требования к представляемым файлам

- Допускается использование текстовых редакторов WORD и LATEX. К рабочим файлам должна быть приложена их pdf-копия. В названии файлов используется латинский алфавит, пробелы заменяются знаком `_`. Шапка статьи содержит название, инициалы и фамилии авторов, место работы, электронный адрес, краткую аннотацию, ключевые слова. В аннотации не следует использовать формулы и ссылки на текст работы или список литературы; в конце она должна содержать индекс УДК (к английской версии аннотации можно добавить индексы зарубежных рубрикаторов).
- Объем кратких сообщений 4-8 страниц, исследовательских статей, как правило, до 20 страниц, а обзоров – более 20 страниц. Верхняя граница согласуется с редколлегией. При подсчете объема нужно ориентироваться на страницы формата А4, шрифт 12, знаков в строке 80, интервалов между строками 1.
- Авторы не должны злоупотреблять сокращениями, составленными из заглавных начальных букв терминов. Предпочтительней каждый раз использовать полное наименование объекта. Возможно использование только устоявшихся аббревиатур.

Требования к файлам Word

- Рекомендуемый шрифт – Times New Roman.
- Строки в пределах абзаца не должны разделяться символом возврата каретки (Enter).
- Нельзя использовать автоматическое создание сносок, автоматический перенос или автоматический запрет переносов, создание списков, автоматический отступ и т.п.
- Ссылки на список литературы даются цифрами в квадратных скобках: [1], [5,6,7], [1-9].
- Все без исключения формулы и обозначения размерности, даже состоящие из одной латинской буквы, и в тексте и вынесенные в отдельную строку, всегда набираются в формульном редакторе и никогда – в обычном текстовом редакторе.

- При создании таблицы рекомендуется использовать возможности Word или MS Excel. Таблицы, набранные вручную (с помощью большого числа пробелов), не принимаются.

Требования к иллюстрациям

- Иллюстрации представляются в отдельных файлах, черно-белыми. Они должны иметь разрешение не менее 600 dpi.
- Форматы файлов – TIFF, EPS, PSD, JPEG.

Требования к списку литературы

- Ф.И.О. авторов или редакторов выделяются курсивом.
- Для статей приводится название. Названия отделяются от выходных данных знаком //. Расположение выходных данных указано на образце ниже. Номер тома выделяется жирным шрифтом, номер выпуска дается в скобках. Указываются номера первой и последней страниц статьи, либо уникальный номер статьи и ее объем. Для книг желательно указывать их объем. Если известна ссылка на электронный архив или сайт, то ее желательно указать.

Фамилия И.О. Название статьи // Назв. журн., 2000, **1** (1), 1-6.

Family F.M. and Family F. Title of the paper // Name of the Journal, 2006, **73**, 165313, 9 pp.

Фамилия И.О., Фамилия И.О. Название книги // Наука, С.-П., 1999, 176 стр.

Family F.M. Title of the paper // In book: Family F.M. (et al. eds), Title of the collection, Publisher, Boston, 2005, 9-24.

Family F.M. (ed.), Title of the collection // Publisher, N.Y., 2005, 324 pp.

Фамилия И.О. Название доклада // Доклад на конференции «Название конференции (место и дата проведения)»; ссылка на электронный ресурс.

Наноструктуры. Математическая физика и моделирование

Журнал зарегистрирован

в Министерстве РФ по делам печати,
телерадиовещания и средств массовых коммуникаций.

Свидетельство о регистрации

ПИ № ФС77-34934 от 29 декабря 2008 г.

Учредители

Московский институт электроники и математики (МИЭМ),

Европейский центр по качеству

Издатель

Европейский центр по качеству

ООО Сенсор Микрон

Журнал входит в перечень ВАК РФ

Статьи рецензируются

ПОДПИСКА НА ЖУРНАЛ НМФМ

Подписной индекс журнала в каталоге агентства «Урал-Пресс» 70017.

Электронный подписной каталог и контакты всех представительств «Урал-Пресс»
на сайте www.ural-press.ru.

Редакция предлагает подписчикам возможность безвозмездно получить подборку прошлых
выпусков журнала. Пришлите на электронный адрес nanostructures@hse.ru (или на почтовый адрес:
123458, Москва, ул. Таллинская, д. 34, каб. 429, редакция журнала НМФМ)
копию подписной квитанции, а также адрес для отсылки выпусков.