УДК 621.38

О потенциальной сложности наноструктур

В.П. Бакалов, Е.А. Субботин

В статье исследуется потенциальная сложность наноструктур (НС), которую можно достичь в условиях действия организующих факторов при синтезе НС «снизу – вверх» и деструктивных процессов, обусловленных помехами, фундаментальными и технологическими ограничениями. Найдены значения потенциальной сложности НС, которую можно достичь в условиях ограниченного и неограниченного множества наноэлементов (НЭ) при различных параметрах организующих факторов и помех.

Ключевые слова: наноструктура, наноэлементы, синтез, потенциальная сложность НС, организующие факторы и помехи.

1. Введение

Нанотехнология как набор методик, основанных на манипуляции с атомами и молекулами в масштабах 1–100 нм, породила целый ряд фундаментальных проблем, одной из которых является определение потенциальной (предельно достижимой) сложности наноструктур (НС), которая может быть получена при заданных условиях их синтеза.

Как известно [1 – 3], при синтезе наноструктур по принципу «снизу – вверх» основными ограничивающими факторами являются фундаментальные проблемы (тепловой и релятивистские пределы, принцип неопределённости) и технические причины (ограничение теплопроводности и тепловыделения, разброс параметров, помехи внутреннего и внешнего происхождения и др.).

В статье рассматриваются модели формирования НС заданной сложности, основанные на действии двух противодействующих факторов:

– организующих, целью которых является синтез НС заданной сложности;

– деструктивных процессов, обусловленных действием различных помех, и ограничений, приводящих к нарушению нормального функционирования НС или разрушению её. Определяется потенциальная сложность, которая может быть достигнута при тех или иных параметрах организующих факторов и помех, характеризующих деструктивные процессы.

2. Сложность наноструктур

Формально НС(S) можно определить как совокупность взаимосвязанных наноэлементов (НЭ), предназначенную для выполнения определённых функций, и задать в виде отношения порядка на множестве НЭ $\in A$. При этом НС будет полностью характеризоваться количеством и типом НЭ, числом, видом и конфигурацией функциональных связей между ними.

В соответствии с этим определением НС можно представить в виде графа $G[A, X]$, каждому узлу которого $a \in A$ поставлен в соответствие НЭ, а каждой ветви $x \in X$ – функциональные связи между НЭ. Подобное представление НС позволяет отвлечься от конкретной физической природы НЭ и путём исследования этой модели на графе выявить определённые закономерности, присущие наноструктуре и оценить её сложность.

В качестве меры сложности НС(S) в общем случае можно использовать обобщённую меру [4]:

$$V(S) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{k=0}^{m_i} \lambda(a_i) q_{ik} , \quad (1)$$

где $\lambda(a_i)$ – «вес» элементарного НЭ (атом, группа атомов, молекула и др.), из которых синтезируется заданная наноструктура – S; q_{ik} – весовой коэффициент k-ой связи наноэлемента a_j; n – число НЭ, входящих в состав НС-S.

В ряде случаев при невозможности учесть связи между НЭ или их несущественности для оценки сложности НС можно использовать упрощённую меру

$$\Lambda(S) = \sum_{i=1}^{n} \lambda(a_i) . \quad (2)$$

В случае если НС реализуется из идентичных НЭ $a_0 \in A$, (2) ещё больше упростится:

$$\Lambda(S) = n\lambda(a_0), \quad (3)$$

т.е. сложность НС становится линейной функцией числа НЭ.

3. Общая схема изменения сложности НС

Определим общую схему изменения сложности на примере меры $\Lambda(S)$. Формирование НС заданной сложности в общем случае определяется двумя противодействующими факторами: организующими факторами, приводящими, как правило, к усложнению НС, и деструктивными процессами, разрушающими наноструктуру.

Абстрагируясь от конкретных механизмов воздействия этих факторов, важно отметить, что они приводят к изменению потенциальной сложности НС. При этом S будет характеризоваться вероятностью реализации $p(S)$, зависящей от вида и характера воздействия организующих и деструктивных процессов.

При независимости действия процессов первой и второй группы изменения сложности НС можно определить как

$$\Delta\Lambda(S) = \Delta\Lambda_w(S) + \Delta\Lambda_\xi(S), \quad (4)$$

где $\Delta\Lambda_w(S)$ – изменение сложности $\Lambda(S)$ за счёт организующих факторов; $\Delta\Lambda_\xi(S)$ – изменение $\Lambda(S)$ за счёт помех $\xi(t)$, характеризующих деструктивные процессы.

Предположим, что НС одинаковой сложности – равновероятны. Тогда из условия (4) следует, что вероятность реализации $p(S)$ является функцией только сложности

$$p(S) = p[\Lambda(S)]. \quad (5)$$

Формирование НС может осуществляться как в рамках фиксированного множества НЭ A = const, так и в рамках расширяющегося или сужающегося множества A. При A = const формирование более сложной НС в смысле $\Lambda(S)$ возможно только за счёт уменьшения потенциальной сложности оставшихся НС или НС, которые потенциально могут быть реализованы из $a \in A - S$. При этом в соответствии с (4) происходит перераспределение вероятностей $p(S) = p[\Lambda(S)]$.

Для уменьшающегося A перераспределение сложности для НС, формируемых из $a \in A - S$, происходит в основном в сторону меньших значений $\Lambda(S)$.

Если множество A расширяется, то, в принципе, усложнение НС, с точки зрения $\Lambda(S)$, может не изменять вероятность $p[\Lambda(S)]$ или изменять в сторону бóльших значений $\Lambda(S)$.

Таким образом, в общем случае изменение сложности $\Delta\Lambda(S)$ будет определяться как перераспределением вероятностей $p(S)$ при $\Lambda(S)=\text{const}$, так и изменением сложности $\Lambda(S)$ при $p(S)=\text{const}$:

$$\Delta\Lambda(S)=\left(\sum_S \Delta\Lambda(S)\underset{p(S)=\text{const}}{p(S)}\right)+\left(\sum_S \Lambda(S)\underset{\Lambda(S)=\text{const}}{\Delta p(S)}\right). \tag{6}$$

Причём в общем случае как организующие факторы, так и помехи будут вносить определённый вклад в обе суммы.

4. Потенциальная сложность НС в условиях организующих факторов и помех

Определим среднюю сложность $\Lambda(S)$ НС, которая может быть синтезирована из заданного множества НЭ $\in A$ под воздействием организующих факторов в условиях действия помехи $\xi(t)$. При этом в соответствии п. 3 полагаем, что организующие факторы действуют в направлении усложнения НС.

Положим для простоты, что НС синтезируется из идентичных НЭ $a_0 \in A$ путём образования соответствующих связей между ними. Сложность НС определится при этом уравнением (3)

$$\Lambda(S)=n\lambda(a_0). \tag{7}$$

За счёт организующих факторов сложность НС $\Lambda(S)$ в любой момент времени t может быть увеличена на единицу с вероятностью p_S. Действие помехи $\xi(t)$ заключается в том, что в любой момент t с вероятностью p_ξ НС может быть повреждена. Это повреждение может заключаться, в частности, в разрушении одной из связей НЭ, причём НЭ будет считаться полностью разрушенным (выведенном из строя), если разрушены все связи, соединяющие его с другим НЭ $\in S$. Будем считать, что в момент t НС может находиться в двух состояниях: активном и пассивном. Активное состояние соответствует неповреждённой НС, на базе которой возможно дальнейшее усложнение наноструктуры. В пассивном состоянии нормальное функционирование НС нарушено, поэтому в дальнейшем она выпадает из сферы действия организующих факторов. Если положить, что помеха $\xi(t)$ разрушает только связи между НЭ, то при $t = 0$ возможен синтез НС на базе любого элемента $a_0 \in A$. Определим сложность НС $\Lambda(S)$, которую можно достичь в момент времени t в заданных условиях.

4.1. Потенциальная сложность НС при неограниченном множестве НЭ

Рассмотрим вначале случай, когда множество A – неограничено (в соответствии с п. 3 формирование НС при этом не приводит к перераспределению вероятностей $p_S = p(S)$). Вероятность усложнения активной НС в течение времени Δt будет равна

$$p(t+\Delta t)=p_S\Delta t, \tag{8}$$

а вероятность повреждения НС в заданный промежуток времени равна

$$p_\xi(t+\Delta t)=p_\xi\Delta t. \tag{9}$$

Вероятность того, что сложность НС останется без изменений и не будет нарушено функционирование НС, образует совместно с (8) и (9) полную группу событий

$$q(t+\Delta t)=1-\left(p_S+p_\xi\right)\Delta t. \tag{10}$$

Вероятность реализации НС сложности (7) в соответствии с (9) – (10) определится как

$$\begin{aligned} P_n(t+\Delta t) &= p(t+\Delta t)P_{n-1}(t)+q(t+\Delta t)P_n(t)= \\ &= p_S P_{n-1}(t)\Delta t+\left[1-\left(p_S-p_\xi\right)\Delta t\right]P_n(t), \end{aligned} \tag{11}$$

где $P_n(t)$, $P_{n-1}(t)$ – вероятность реализации в момент t НС сложности (7) и (12) соответственно:

$$\Lambda(S)=(n-1)\Lambda\left(a_0\right). \tag{12}$$

Вероятность разрушения НС сложности (7) в момент $t+\Delta t$ найдётся аналогично

$$Q_n(t+\Delta t)=p_\xi(t+\Delta t)P_n(t)+Q_n(t)=p_\xi P_n(t)\Delta t+Q_n(t), \tag{13}$$

где $Q_n(t)$ – вероятность нарушения функционирования НС сложности (7) в момент времени t.

Перенося $P_n(t)$ и $Q_n(t)$ в уравнениях (11) и (13) в соответствующую левую часть и разделив эти уравнения на Δt после перехода к пределу $\Delta t \to 0$, получим

$$\dot{P}_n(t)=p_S P_{n-1}(t)-\left(p_S+p_\xi\right)P_n(t), \tag{14}$$

$$\dot{Q}_n(t)=p_\xi P_n(t), \tag{15}$$

где $\dot{P}_n(t)=dP_n/dt$; $\dot{Q}_n(t)=dQ_n/dt$.

Для решения (14) и (15) введем производящую функцию

$$\varphi_n(z,t)=\sum_{n=1}^{\infty} z^n P_n(t). \tag{16}$$

Среднее значение сложности определится согласно (7), (14), (15) уравнением

$$\begin{aligned} \Lambda(t) &= \Lambda_S(t)+\Lambda_\xi(t)=\sum_{n=1}^{\infty}\Lambda(S)P_n(t)+\sum_{n=1}^{\infty}\Lambda(S)Q_n(t)= \\ &= \Lambda\left(a_0\right)\left[\sum_{n=1}^{\infty} nP_n(t)+\sum_{n=1}^{\infty} np_\xi\int_0^t P_n(t)\,dt\right]. \end{aligned} \tag{17}$$

Уравнение (17) с учётом (16) можно переписать в форме

$$\Lambda(t)=\Lambda\left(a_0\right)\left[\left.\frac{\partial\varphi_n(z,t)}{\partial z}\right|_{z=1}+p_\xi\left.\int_0^t\frac{\partial\varphi_n(z,t)}{\partial z}\,dt\right|_{z=1}\right]. \tag{18}$$

Для нахождения $\varphi_n(z,t)$ продифференцируем (16) по t

$$\frac{\partial\varphi_n(z,t)}{\partial t}=\left[p_S(z-1)-p_\xi\right]\varphi_n(z,t). \tag{19}$$

Решая (19) с учётом начальных условий

$$P_n(0)=\begin{cases}1; & n=1\\ 0; & n\neq 1,\end{cases} \tag{20}$$

получим

$$\varphi_n(z,t)=z\exp\left\{-\left[p_\xi-p_S(z-1)\right]t\right\}. \tag{21}$$

Подставив (21) в (18), окончательно найдём

$$\Lambda(t)=\Lambda(a_0)\left[1+\frac{p_S}{p_\xi}\left(1-e^{-p_\xi t}\right)\right]. \tag{22}$$

Вероятность реализации в момент t НС сложности (22) определится уравнением

$$P_n(t)=\frac{1}{(n-1)!}\frac{\partial\varphi_n^{(n-1)}(z,t)}{\partial z^{(n-1)}}\bigg|_{Z=0}=\frac{(p_S t)^{n-1}}{(n-1)!}\exp\left\{-\left(p_S+p_\xi\right)t\right\}. \tag{23}$$

Вероятность нарушения функционирования НС сложности (7) в момент t можно найти с учётом (15) и (23):

$$\begin{aligned}Q_n(t)&=p_\xi\int_0^t P_n(t)\,dt=\\ &=p_\xi p_S^{n-1}\left[\frac{1}{\left(p_S+p_\xi\right)^n}-\sum_{k=0}^{n-1}\frac{t^k}{k!\left(p_S+p_\xi\right)^{n-k}}\exp\left\{-\left(p_S+p_\xi\right)t\right\}\right].\end{aligned} \tag{24}$$

Проанализируем полученные уравнения. Прежде всего отметим, что как $\Lambda(t)$, так и $P_n(t)$ и $Q_n(t)$ полностью определяются соотношением между вероятностями p_S и p_ξ. Располагая тем или иным законом распределения p_S и p_ξ, можно найти искомые значения сложности или вероятности $P_n(t)$ и $Q_n(t)$. Наибольший интерес представляет среднее значение сложности НС $\Lambda(S)$. Из (22) следует, что при $t = 0$, $\Lambda(0)=\Lambda(a_0)$, а при $t\to\infty$

$$\Lambda(\infty)=\Lambda(a_0)\left(1+\frac{p_S}{p_\xi}\right), \tag{25}$$

т.е. (25) определяет предельно достижимую сложность НС при заданных вероятностях p_S и p_ξ. В частности, при $p_\xi\to 1$ и $p_S = 1$ имеем

$$\Lambda(\infty)=\Lambda\to 2\Lambda(a_0), \tag{26}$$

а при $p_\xi\to 0$ получим

$$\lim_{p_\xi\to 0}\Lambda(t)=\Lambda(a_0)(1+tp_S). \tag{27}$$

Уравнения (26) и (27) определяют допустимую область существования НС по сложности $\Lambda(S)$ (рис. 1).

Из рис. 1 нетрудно видеть, что в случае неограниченного множества НЭ при $t\to\infty$ и отсутствии помех (деструктивных факторов) может быть синтезирована НС сколь угодно большой сложности.

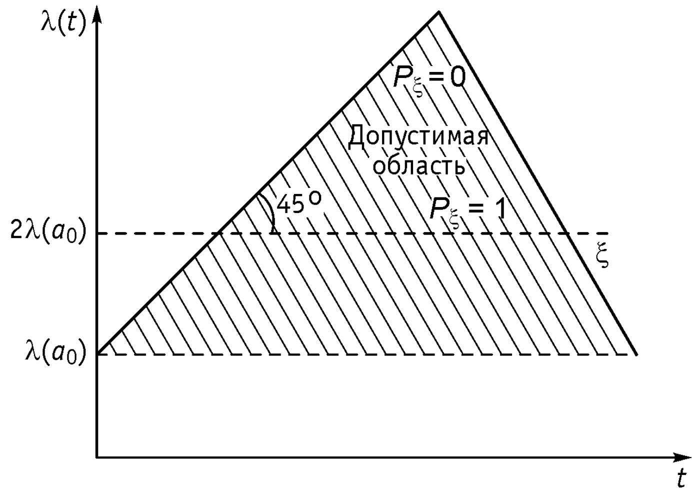

Рис. 1. Допустимая область существования НС по сложности при неограниченном множестве НЭ

4.2. Потенциальная сложность НС в условиях ограниченного множества НЭ

Положим теперь, что множество A ограничено. Очевидно, что в этом случае вероятность усложнения НС будет уменьшаться вследствие того, что «концентрация» НЭ $a_0 \in A$ будет падать:

$$g_0(t) = n_0(t)/n, \tag{28}$$

где $n_0(t)$ – число несвязанных НЭ $a_0 \in A$; n – общее число НЭ $a_0 \in A$.

Тогда для вероятности (8) можно записать:

$$p(t+\Delta t) = p_S g_0(t)\Delta t. \tag{29}$$

Если вероятность (9) считать неизменной, то вероятность (10) примет следующий вид:

$$q(t+\Delta t) = 1 - \left[p_S g_0(t) + p_\xi\right]\Delta t. \tag{30}$$

Проведя выкладки, аналогичные (11) – (13), получим

$$\dot{P}_n(t) = p_S g_0(t) P_n(t) - \left[p_S g_0(t) + p_\xi\right] P_n(t), \tag{31}$$

$$\dot{Q}_n(t) = p_\xi P_n(t). \tag{32}$$

Введя производящую функцию

$$\varphi_n(z,t) = z \cdot \exp\left\{-\left[p_\xi - p_S g_0(t)(z-1)\right]t\right\},$$

после подстановки в (18) найдём

$$\Lambda(t) = \Lambda(a_0)\left[1 + p_S g_0(t)\cdot t\cdot e^{-p_\xi t} + p_S p_\xi \int_0^t g_0(t)\cdot t\cdot e^{-p_\xi t} dt\right]. \tag{33}$$

Располагая законом изменения $g_0(t)$ из (33), можно найти искомую среднюю сложность НС. Положим, например, что

$$g_0(t) = e^{-\alpha t}, \tag{34}$$

где $0 \le \alpha \le 1$,
тогда (33) примет вид

$$\Lambda(t) = \Lambda(a_0)\left\{1 + p_S t e^{-(p_\xi+\alpha)t} + \frac{p_S p_\xi}{p_\xi + \alpha} \times \right.$$
$$\left. \times \left[\frac{1}{p_\xi + \alpha}\left(1 - e^{-(p_\xi+\alpha)t} - t e^{-(p_\xi+\alpha)t}\right)\right]\right\}. \tag{35}$$

Проведём более подробный анализ (35):

$$\text{при} \quad t = 0, \quad \Lambda(0) = \Lambda(a_0),$$
$$\text{при} \quad t \to \infty, \quad \Lambda(\infty) = \Lambda(a_0)\left(1 + \frac{p_S p_\xi}{(p_\xi + \alpha)^2}\right), \tag{36}$$

т.е. предельно достижимое значение сложности в этих условиях зависит как от вероятностей p_S и p_ξ, так и от коэффициента α. В отличие от (22), которая является монотонно-возрастающей функцией, зависимость (35) в общем случае носит экстремальный характер. Причём экстремум соответствует точке

$$t_1 = 1/\alpha, \tag{37}$$

т.е. не зависит от организующих факторов и помех, а определяется только «концентрацией» свободных НЭ $a \in A$.

Максимальное значение сложности НС в точке $t = t_1$ определяется уравнением

$$\Lambda_{\max}(t_1) = \Lambda(a_0)\left\{1 + \frac{p_S}{\alpha} e^{-\left(\frac{p_\xi}{\alpha}+1\right)} + \frac{p_S p_\xi}{p_\xi + \alpha}\left[\frac{1}{p_\xi + \alpha}\left(1 - e^{-\left(\frac{p_\xi}{\alpha}+1\right)} - \frac{1}{\alpha} e^{-\left(\frac{p_\xi}{\alpha}+1\right)}\right)\right]\right\}. \tag{38}$$

Рассмотрим поведение функции $\Lambda(t)$ в зависимости от вероятностей p_S и p_ξ. Определим границы изменения потенциальной сложности $\Lambda(t)$. Из (36) следует, что

$$\Lambda_{\min}(\infty) = \Lambda(a_0) \tag{39}$$

при $p_S = 0$; $p_\xi = 0$; $\alpha \ne 0$,

$$\Lambda_{\max}(\infty) = \Lambda(a_0)\left(1 + \frac{1}{4\alpha}\right) \tag{40}$$

при $p_S = 1$; $p_\xi = \alpha$; $0 \le \alpha < 1$.

Из (40) следует, что при достаточно малых α и слабых помехах $\Lambda(\infty)$ может быть достаточно большой, хотя будет и меньше предельно достижимой сложности, достигаемой при неограниченном A:

$$\Lambda_{\max}(\infty) = \Lambda(a_0)\left(1 + \frac{1}{\alpha}\right). \tag{41}$$

На рис. 2 показана допустимая область существования НС сложности $\Lambda(S)$. Точка перегиба кривых $\Lambda(t)$ на рис. 2 достигается при $t = t_2$:

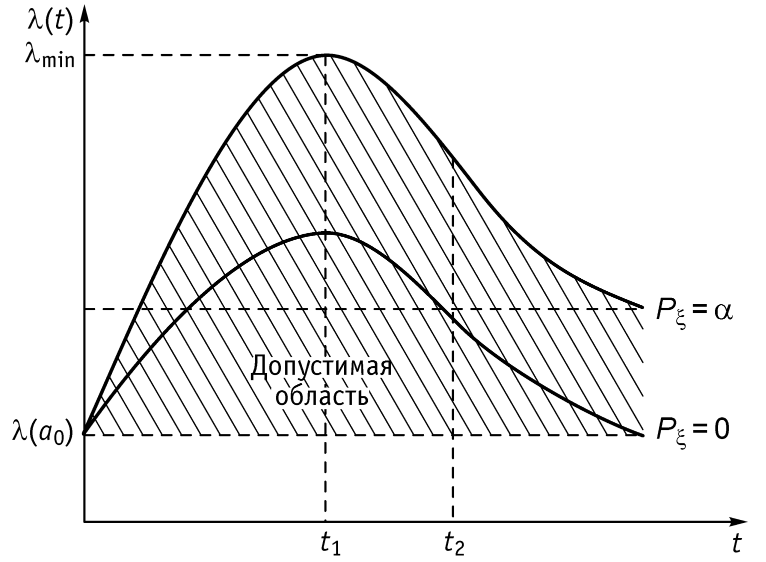

Рис. 2. Допустимая область существования НС по сложности при ограниченном множестве наноэлементов

$$t_2 = \frac{p_\xi + 2\alpha}{\alpha\left[p_\xi + \alpha\right]}. \tag{42}$$

т.е. зависит также от ограничений (свойств помех). В частности, при $p_\xi = \alpha$

$$t_2 = \left(\frac{3}{2}\right) t_1 .$$

Определённый интерес представляет поведение функции $\Lambda(t)$ при $p_\xi \to 0$. Для этого случая в соответствии с (35) имеем

$$\lim_{P_\xi \to 0} \Lambda(t) = \Lambda(a_0)\left(1 + p_S t e^{-\alpha t}\right). \tag{43}$$

Откуда при $t = t_1$ получим

$$\lim_{p_\xi \to 0} \Lambda(t) \simeq \Lambda(a_0) + 0.37\frac{1}{\alpha}, \tag{44}$$

т.е. в условиях отсутствия ограничений (помех), максимально достижимая сложность оказывается ниже, чем при их наличии при $p_\xi = \alpha$. Этот несколько неожиданный результат объясняется тем обстоятельством, что при $p_\xi = 0$ в заданном ограниченном базисе A формируется большое количество НС малой сложности, в то время как при $p_\xi = \alpha$ уже в начальной фазе некоторые НС с вероятностью p_ξ будут необратимым образом исключены из процесса синтеза, в результате оставшиеся НЭ $a_0 \in A$ могут использоваться для синтеза активных НС большей сложности. На рис. 3 представлено семейство кривых $\Lambda(t)$ при различных значениях параметра α. Из графиков видно, что с увеличением коэффициента α максимум функциональной сложности достигается при бóльших значениях времени синтеза *t*.

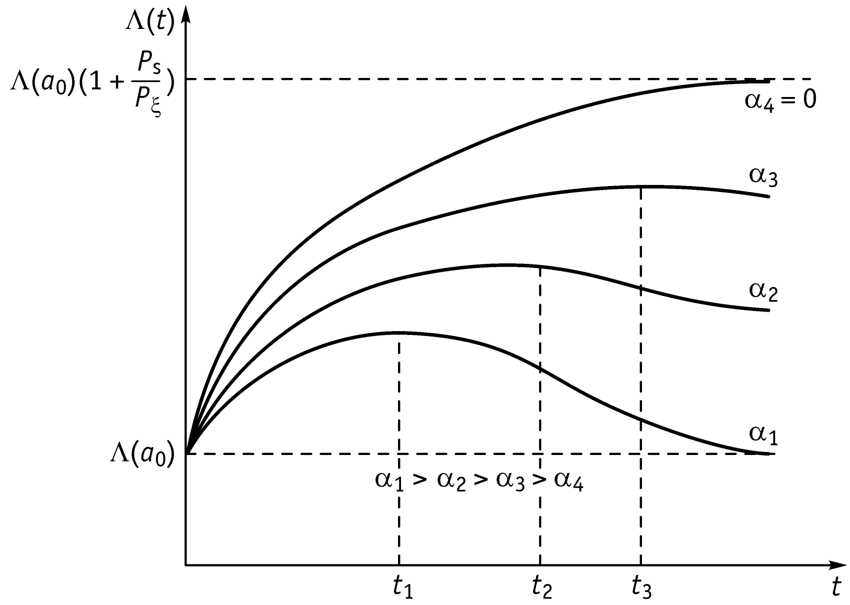

Рис. 3. Зависимость сложности НС от времени в условиях помех

Таким образом, полученные зависимости позволяют количественно оценить потенциальную сложность наноструктур, которые можно синтезировать в тех или иных условиях при заданных вероятностных параметров организующих факторов и помех, характеризующих деструктивные процессы.

5. Заключение

Получены оценки потенциальной сложности наноструктур при их синтезе при неограниченном и ограниченном базисе наноэлементов в различных условиях действия организующих факторов и помех, характеризующих деструктивные процессы.

Показано, что средняя сложность НС при неограниченном множестве НЭ полностью определяется вероятностью её реализации НС – p_S, вероятностью разрушения p_ξ и временем t. Причём средняя сложность $\Lambda(S)$, которая может быть достигнута при изменении вероятности разрушения НС от 1 до 0, заключена в пределах от $2\Lambda(a_0)$ до $\Lambda(a_0)$ при $p_S = 1$, где $\Lambda(a_0)$ – сложность стандартного НЭ (рис. 1).

В случае неограниченного множества НЭ и отсутствии помех может быть синтезирована НС сколь угодно большой сложности. При этом сложность является линейной функцией времени синтеза.

Для ограниченного множества НЭ закон изменения сложности $\Lambda(t)$ НС дополнительно определяется характером изменения числа несвязанных НЭ и носит экстремальный характер. Показано, что при экспоненциальном законе распределения несвязанных НЭ может иметь случай, когда в отсутствии помех максимально достигаемая сложность оказывается ниже, чем при их воздействии. Этот результат можно объяснить тем обстоятельством, что при $p_\xi = 0$ в заданном ограниченном базисе НЭ формируется большее количество НС малой сложности, в то время как при $p_\xi = p_{\mathrm{opt}}$ уже в начальной фазе некоторые НС с вероятностью $p_\xi = p_{\mathrm{opt}}$ будут необратимым образом исключены из процесса синтеза. В итоге оставшиеся НЭ могут использоваться для синтеза НС большей сложности. Этот результат в определённой степени объясняет и процесс эволюции в биологических системах в результате действия факторов естественного отбора.

Литература

1. *Кобояси Н.* Введение в нанотехнологию (пер. с японск.). М.: Бином. Лаборатория знаний, 2005. – 134 с.
2. *Мартинес-Дуарт Дж. М., Мартин-Палма Р. Дж., Агулло-Руеда Ф.* – Нанотехнологии в микро- и оптоэлектронике. М.: Техносфера, 2007. – 368 с.
3. *Mitin V.V., Kochelap V.A., Strosio M.A.* Quantum Heterostructures. Cambridge University Press, 1999.
4. *Бакалов В.П. Субботин Е.А.* Оптимизация многомерных информационно-измерительных систем. – Новосибирск, Наука, 2009. – 456 с.

Статья поступила в редакцию 18.01.2013

Бакалов Валерий Пантелеевич
Доктор технических наук, профессор, зав. каф. ТЭЦ ФГОБУ ВПО «СибГУТИ»
тел. 286-80-25, e-mail: bvp@sibsutis.ru

Субботин Евгений Андреевич
Кандидат технических наук, доцент, директор УРТИСИ ФГОБУ ВПО «СибГУТИ»
тел. (343)-242-14-83

On the potential complexity of nanostructures

V.P. Bakalov, E.A. Subbotin

This paper explores the potential complexity of nanostructures (NS), which can be obtained under conditions of the organizing factors in case of NS synthesis «bottom – up» and destructive processes, determined by noises, fundamental and technological limitations. The values of the potential complexity of NS which can be obtained with limited sets of nanoelements (NE) in case of different parameters of organizing factors and noises are determined.

Keywords: nanostructures, nanoelements, synthesis, potential complexity of NS, organizing factors and noises.