

КВАНТОВЫЙ БАЛЛИСТИЧЕСКИЙ НАНОСЕНСОР: ГЕНЕТИЧЕСКИЙ АЛГОРИТМ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ОПТИМИЗАЦИИ

Колешко В.М., Гулай А.В., Гулай В.А., Ульянов В.Б.

Выполнено аналитическое моделирование чувствительных к микроудару сенсорных наноструктур типа металл-диэлектрик-металл (МДМ) на основе сверхтонких диэлектрических пленок. Определены параметры баллистического квантового МДМ-наносенсора для орбитального контроля высокоскоростных техногенных и метеороидных микрочастиц. Разработан генетический алгоритм оптимизации и определено поле решений в пространстве оптимизируемых параметров модели квантового наносенсора при воздействии космических микрочастиц. Функция оптимальности представляет собой зависимость выходных характеристик наносенсора от физико-механических параметров высокоскоростной микрочастицы и конструктивно-технологических параметров сенсорной наноструктуры.

В исследовании и разработке орбитальных сенсорных микросистем, физическое экспериментирование с которыми в космических или приближенных к ним условиях затруднительно, особый интерес представляют методы аналитического моделирования. Для оптимизации конструктивно-технологических параметров орбитальных наносенсоров, а также для моделирования зависимости сенсорных сигналов от характеристик внешнего воздействия используются оптимизационные алгоритмы. Одним из эффективных алгоритмов, позволяющих оптимизировать параметры сенсорных систем космического применения, является генетический алгоритм. За счет комбинации переборного и градиентного методов оптимизации и воплощения особенностей нечеткой логики генетический алгоритм дает возможность получить субоптимальное решение за приемлемое время. Функция оптимальности описывает модель наносенсора с налагаемыми ограничениями, не позволяющими генетическому алгоритму выводить параметры модели из заданного диапазона величин.

Процесс создания генетического алгоритма включает в себя следующие стадии: разработка аналитической модели наносенсора, определяющей зависимость выходных характеристик от конструктивно-технологических параметров наносенсора и воздействующих на него внешних факторов; моделирование и анализ работы наносенсора в условиях внешнего воздействия различного характера (скорость, плотность, диаметр микрочастицы) и конструктивных особенностей чувствительного элемента; разработка функции оптимизации на основе полученной модели для использования ее при создании генетического алгоритма; оптимизация параметров чувствительного элемента баллистического наносенсора для получения приемлемых свойств контроля высокоскоростных микрочастиц; анализ полученных результатов моделирования и оптимизации баллистического наносенсора при контроле высокоскоростных космических микрочастиц.

Создание генетического алгоритма выполняется на основе сформулированных требований к объекту и средствам разработки:

- о баллистический наносенсор – возможность контроля метеороидных и техногенных микрочастиц с параметрами: масса – 10^{-9} – 10^{-13} кг; скорость – 1–50 км/с; размеры – менее 10^{-5} – 10^{-6} м; возможность функционирования в космических условиях: невесомость, вакуум, колебания температуры в широком диапазоне; миниатюрное исполнение с использованием групповых технологий микроэлектроники;

- о аналитическая модель – определение зависимости выходных характеристик наносенсора от его конструктивно-технологических параметров; определение влияния воздействующих внешних факторов на выходные параметры наносенсора;

○ алгоритм моделирования – возможность выполнения следующих оптимизационных процедур: оптимизация выходных электрических параметров наносенсора; оптимизация конструктивно-технологических характеристик наносенсора; варьирование задаваемых исходных параметров в достаточно широких пределах; задание пределов оптимизации параметров наносенсора; нахождение субоптимального решения за относительно короткий промежуток времени; вывод результатов оптимизации в графической и текстовой форме.

Для проведения расчетов выбран пакет MATLAB и GEATbx (The Genetic and Evolutionary Algorithm Toolbox for Matlab), возможности которого в достаточной степени соответствуют целям нашего исследования.

Физические основы и технические решения квантового МДМ-наносенсора для контроля микрочастиц

Для контроля высокоскоростных космических микрочастиц, имеющих массу 10^{-8} – 10^{-12} кг и скорость $(1-5) \cdot 10^4$ км/с, предложено использовать квантовую сенсорную микросистему, активным элементом которой является туннельная МДМ-наноструктура [1–3]. Туннельнотонкая диэлектрическая пленка МДМ-наноструктуры имеет толщину порядка 2–10 нм, и ее проводимость существенно возрастает при ударе микрочастицы [4]. На поверхность МДМ-наноструктуры наносится улавливающий полимерный слой, в котором при воздействии высокоскоростной космической микрочастицы образуется тепловой канал от точки удара до МДМ-наноструктуры (рис. 1). В конструкции МДМ-наносенсора используются тонкопленочные элементы, выполненные на основе редкоземельных соединений: оксидов, фторидов, силицидов, а также материалов, обладающих высокотемпературной сверхпроводимостью [5].

Попадание высокоскоростной космической микрочастицы в улавливающий полимерный слой возбуждает ударную волну, которая при достижении тыльной стороны данного слоя вызывает повышение электропроводности диэлектрика МДМ-наноструктуры. Повышение электропроводности ударно сжатой диэлектрической пленки связывают с изменением ее электрофизических свойств за счет ионизации, происходящей при высоких давлениях, возникающих на фронте ударной волны. Прохождение ударной волны через полимерный слой приводит к повышению его температуры, что в свою очередь влияет на токоперенос через туннельнотонкий диэлектрик МДМ-наноструктуры. Изменение плотности туннельного тока при повышении температуры характерно для температурно-зависимых механизмов проводимости сверхтонких диэлектрических пленок.

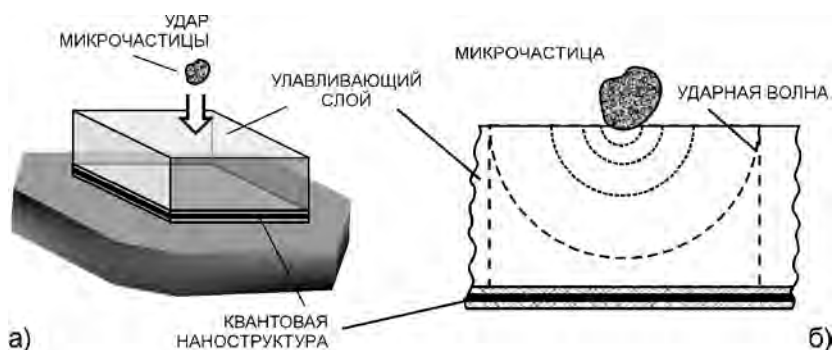


Рис. 1. Конструктивное решение баллистического наносенсора (а) и модель воздействия космической микрочастицы (б).

Таким образом, для анализа работы баллистического квантового наносенсора возможно использование аналитических моделей, описывающих ударное воздей-

ствие на диэлектрик, а также эффекты токопереноса в тонких диэлектрических пленках. При использовании указанных моделей делается ряд допущений, качественно не изменяющих характер физических процессов, происходящих в туннельной МДМ-наноструктуре при воздействии микрочастицы. Так, распределение параметров ударной волны и свойств материалов наносенсора в канале ее распространения предполагается однородным. При рассмотрении процесса распространения ударной волны в сенсорной системе учитывается только материал ловушки микрочастиц — полимерного слоя, при этом пренебрегаем параметрами МДМ-наноструктуры. Кроме этого предполагается, что проводимость металлических электродов квантовой наноструктуры много больше проводимости диэлектрической пленки и поэтому не оказывает влияния на изменение параметров наносенсора в момент удара микрочастицы. Такие упрощения вполне допустимы при следующих конструктивно-технологических параметрах МДМ-наноструктуры: толщина полимерного слоя — $\sim 2\text{--}20$ мкм, диэлектрика МДМ-наноструктуры — $\sim 2\text{--}10$ нм, металлических электродов — ~ 100 нм.

Следует отметить, что для МДМ-наноструктур вышеуказанное условие о соотношении значений проводимости металлических электродов и диэлектрической пленки может в некоторых случаях не выполняться. Данная ситуация наблюдается, например, при значительном возрастании проводимости диэлектрического слоя и снижении проводимости металлической пленки вследствие уменьшения их толщин с целью микроминиатюризации сенсорной системы. Для достижения технологической инвариантности создания квантового наносенсора в таком случае предложено при формировании электродов использовать материалы, обладающие высокотемпературной сверхпроводимостью [6]. Это обеспечивает достижение инвариантности параметров МДМ-наноструктуры относительно изменения проводимости тонкой диэлектрической пленки как при варьировании технологических факторов в процессе получения наносенсора, так и при изменении его характеристик в момент удара космической микрочастицы.

Проводимость G ударно сжатой МДМ-наноструктуры, зависящая от удельной электропроводности сверхтонкой диэлектрической пленки, определяется выражением:

$$G_g = G_0 \Phi(E_M) \Rightarrow G_0 \Phi[\exp(-\Delta E/k_B T)], \quad (1)$$

где G_0 — проводимость наноструктуры без учета механического воздействия удара микрочастицы; $\Phi(E_M)$ — функция от механической энергии E_M микрочастицы в момент удара; ΔE — энергия активации токопереноса в МДМ-наноструктуре за счет механического воздействия при ударе микрочастицы; k_B — постоянная Больцмана; T — абсолютная температура, зависящая от энергии воздействия микрочастицы. Величина проводимости G_0 обусловлена механизмами токопереноса в сверхтонком диэлектрике, которые могут быть как термически активируемыми ($\Delta G(T) \neq 0$), так и независимыми от температуры ($\Delta G(T) = 0$). Термически активируемый перенос заряда возрастает при увеличении температуры диэлектрика вследствие удара микрочастицы. Рост проводимости наноструктуры за счет увеличения токопереноса при повышении температуры в момент удара определяется путем введения следующей логической последовательности:

$$G_0 \Rightarrow J_0(T) = J_0^0 + \Delta J_0(T) \Rightarrow G_0^0 + \Delta G(T). \quad (2)$$

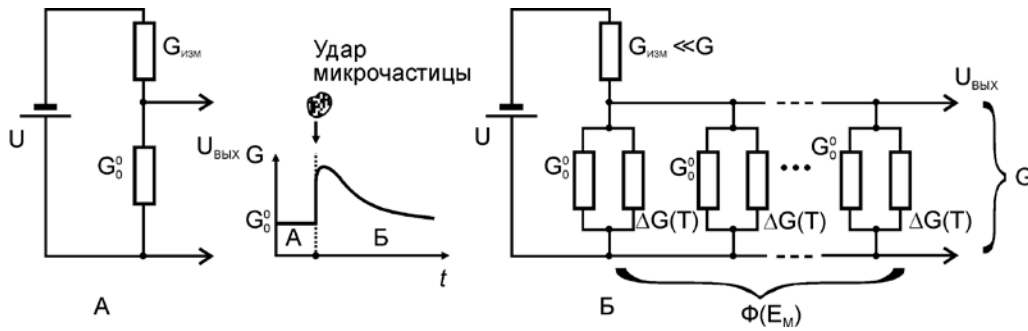


Рис. 2. Эквивалентная электрическая схема квантовой МДМ-наноструктуры до удара (а) и при воздействии (б) космической микрочастицы.

Суммарный эффект от обоих физических факторов, оказывающих влияние на проводимость туннельной МДМ-наноструктуры (за счет ионизации при высоких давлениях на фронте ударной волны и за счет увеличения токопереноса при повышении температуры) получит следующее выражение:

$$G_g = \{G_0^0 + \Delta G(T)\} \Phi[\exp(-\Delta E/k_B T)]. \quad (3)$$

Влияние моделируемых физических явлений, наблюдающихся в МДМ-наноструктуре в момент воздействия высокоскоростной микрочастицы, на электрические параметры наноструктуры поясняется с помощью ее эквивалентной электрической схемы, отражающей зависимости (1–3) и представленной на рис. 2. Изложенное представление о физических эффектах в МДМ-наноструктуре, сопровождающих удар космической микрочастицы, положено в основу аналитического моделирования и оптимизации параметров квантового наносенсора.

Моделирование процесса воздействия космических микрочастиц на квантовую сенсорную МДМ-наноструктуры

Влияние космической микрочастицы на сенсорную МДМ-наноструктуру определяется на основании алгоритма моделирования высокоскоростного механического воздействия микрочастицы на диэлектрик [7]. Температура T во фронте ударной волны рассчитывается с учетом ее связи с внутренней энергией, запасенной в объеме канала распространения ударной волны за время действия микрочастицы на сенсорную систему. Путем определения закона движения фронта ударной волны и ее скорости, а также промежутка времени от момента удара до прихода ее к тыльной поверхности улавливающего слоя, рассчитывается закон охлаждения полимерного слоя. Проводимость МДМ-наноструктуры в момент воздействия микрочастицы складывается из проводимостей образовавшегося теплового канала и остальной части МДМ-контакта.

С учетом указанных факторов проводимость сенсорной МДМ-наноструктуры как функция параметров улавливающего слоя и контролируемой микрочастицы определяется системой следующих аналитических выражений:

$$G_g = G_0[1 + B(A - 1)], \quad (4)$$

$$\Delta G = G_g - G_0 = G_0 B(A - 1), \quad (5)$$

$$A = \{\exp[-\Delta E/k_B(T_0 + EN^{-1})]\} / \exp(-\Delta E/k_B T_0), \quad (6)$$

$$B = \pi D t (Dt + 2L) / S_g, \quad (7)$$

где D – скорость ударной волны; T_0 – температура до удара микрочастицы; E – энергия в канале распространения ударной волны; N – параметр, определяемый температурой во фронте ударной волны; L – толщина полимерного улавливающего слоя; S_g – площадь МДМ-наноструктуры; t – время.

Проводимость G_0 ударно сжатой МДМ-наноструктуры, определяемая протекающим через нее током, обусловлена механизмами токопереноса в туннельнотонком диэлектрике. В соответствии со схемой измерения параметров сенсорной МДМ-наноструктуры (рис. 1) взаимосвязь между проводимостью G_0 и током J_0 имеет следующий вид:

$$G_0 = J_0 G_{изм} / (U G_{изм} - J_0), \quad (8)$$

где U — напряжение питания; $G_{изм}$ — проводимость измерительной цепи. Наибольший интерес представляют термически активируемые механизмы токопереноса в сверхтонкой диэлектрической пленке МДМ-наноструктуры. Значение тока через тонкую диэлектрическую пленку МДМ-наноструктуры определяется с использованием выражений, характеризующих, например, процесс эмиссии по механизму Шоттки-Ричардсона:

$$j_0 = R T \exp(-\phi_0/k_B T) \exp(\beta_S \sqrt{U/d} / k_B T), \quad (9)$$

где R — постоянная Ричардсона; ϕ_0 — высота энергетического барьера; β_S — коэффициент Шоттки.

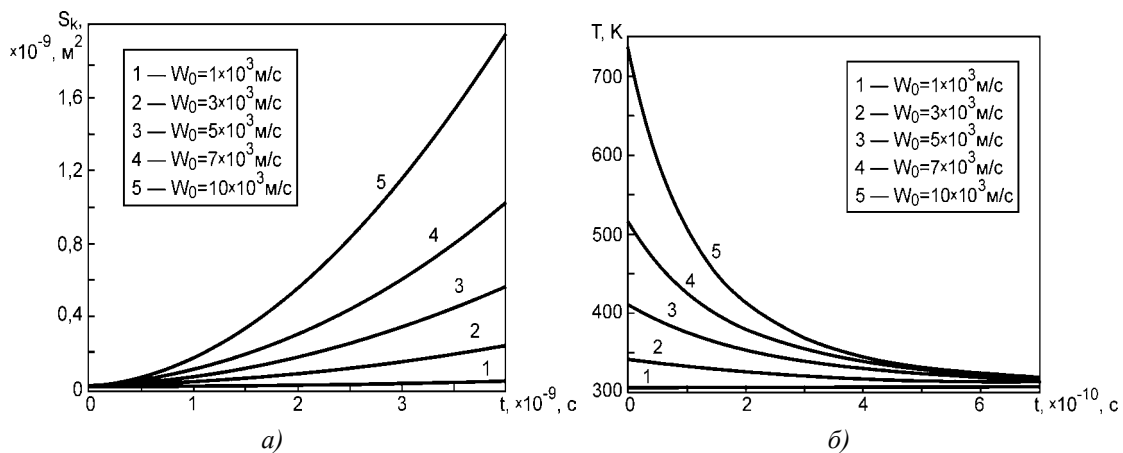


Рис. 3. Изменение площади (а) и температуры (б) нагрева МДМ-наноструктуры после удара микрочастицы.

На основе предложенной модели выполнен расчет зависимости параметров квантового наносенсора (в частности, его проводимости) от времени после удара, от параметров микрочастицы (скорости, плотности, радиуса), от конструктивно-технологических параметров наноструктуры (плотности и толщины полимерного слоя, толщины диэлектрической пленки), от параметров сенсорного интерфейса (напряжения питания, измерительного сопротивления). В расчетах приняты следующие основные исходные данные: толщина тонкой диэлектрической пленки МДМ-наноструктуры равна 10 нм, диаметр космической микрочастицы составляет 1 мкм, ее скорость лежит в пределах $(1-10) \cdot 10^3$ м/с. Изменение площади канала ударной волны, температуры в данном канале и тока через МДМ-наноструктуру при разной скорости микрочастицы, а также изменение проводимости наноструктуры при различной толщине улавливающего слоя показано на рис. 3, 4.

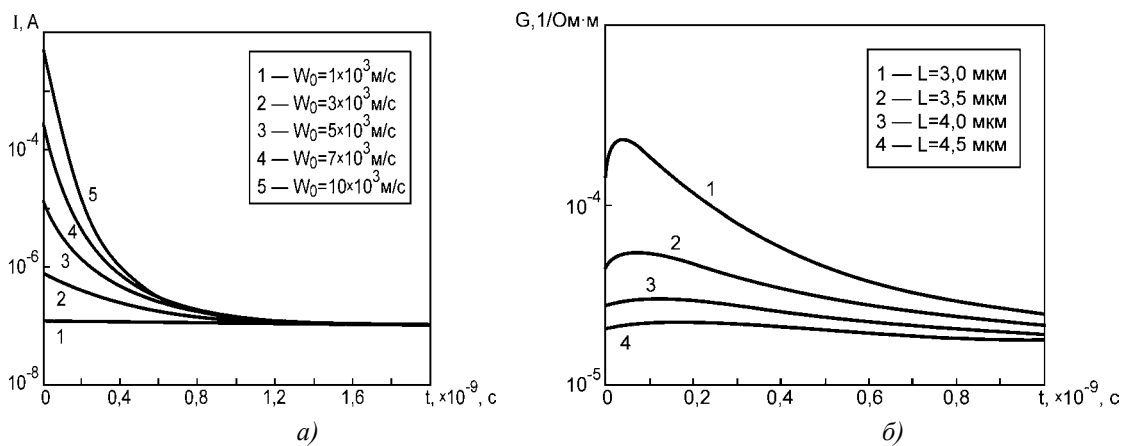


Рис. 4. Изменение тока через МДМ-наноструктуру (а) и ее проводимости (б) после удара микрочастицы.

Площадь канала распространения ударной волны после воздействия микрочастицы плавно возрастает и за $4 \cdot 10^{-9}$ с увеличивается от 0 до $2 \cdot 10^{-9}$ м². Наблюдается также плавный спад температуры со временем, причем изменение ее происходит более резко в первые $0,2 \cdot 10^{-9}$ с. Изменение тока через МДМ-наноструктуру повторяет ход временной зависимости температуры в канале ударной волны. Проводимость МДМ-наноструктуры после удара микрочастицы сначала несколько увеличивается, изменение проводимости ΔG достигает максимальной величины ΔG_{\max} , а затем происходит плавное снижение данного параметра. С уменьшением толщины улавливающего полимерного слоя от 4,5 до 3,0 мкм наблюдается рост изменения проводимости ΔG и, следовательно, ΔG_{\max} .

Следует отметить, что зависимость проводимости МДМ-наноструктуры от таких ее конструктивно-технологических параметров как толщина диэлектрического слоя, плотность материала мишени и его толщина имеют следующий характер. Увеличение d , L , ρ_m до некоторых критических значений приводит к резкому спаду G , а при дальнейшем возрастании указанных параметров происходит более медленное уменьшение проводимости. Такие критические значения параметров МДМ-наноструктуры равны: $d \sim 3-4$ нм; $L \sim 3-4$ мкм; $\rho_m \sim (1,5-2,0) \cdot 10^3$ кг/м³. С ростом радиуса, плотности и скорости микрочастицы проводимость сенсорной МДМ-наноструктуры плавно увеличивается. Например, при увеличении радиуса микрочастицы от $1 \cdot 10^{-7}$ до $5 \cdot 10^{-7}$ м проводимость МДМ-наноструктуры возрастает от $1 \cdot 10^{-5}$ до $2 \cdot 10^{-4}$ 1/Ом.

Разработка генетического алгоритма оптимизации конструктивно-технологических параметров МДМ-наносенсора

Решение оптимизационной задачи с использованием генетического алгоритма включает, как правило, несколько последовательных шагов: классификация проблемы и определение функции оптимизации; предварительное исследование поведения оптимизируемой системы; выбор подхода к оптимизации на основе результатов исследования; запуск алгоритма и осуществление процедуры оптимизации. Реализация указанных стадий в случае оптимизации параметров квантового наносенсора высокоскоростных космических микрочастиц выполнялась следующим образом.

Функция оптимизации определяется с учетом требований формата выбранной среды разработки (MATLAB, GEATbx), а также ограничений, накладываемых на параметры модели квантового наносенсора. Ограничения параметров наносенсора описываются в функции оптимизации в качестве набора верхних и нижних границ значений данных параметров. Процедура разработки функции оптимизации включает в себя несколько этапов: описание проблемы в М-файле на языке MATLAB; опре-

деление числа и границ переменных; определение ограничивающих функций; выбор критериев оптимальности; выбор целевых значений для критериев оптимизации; написание функции оптимизации проблемы; выбор операторов и параметров работы эволюционного алгоритма.

В данном случае стоит задача оптимизации конструктивно-технологических параметров наносенсора, сочетание которых наилучшим образом будет влиять на его отклик в виде изменения проводимости. Предложенная модель квантового наносенсора описана на языке программирования MATLAB, что позволяет провести расчеты и выполнить моделирование поведения наносенсора с использованием встроенных в MATLAB средств вычислений и визуализации. Модель описана в виде функции, принимающей в качестве входных параметров как конструктивно-технологические параметры МДМ-наноструктуры, так и параметры микрочастицы и сенсорного интерфейса. При выполнении функции формируется набор выходных значений, характеризующих отклик моделируемой системы.

Оптимизации подлежат следующие параметры: толщина диэлектрической пленки; удельная проводимость диэлектрика; его относительная диэлектрическая проницаемость; толщина полимерного слоя (мишени); плотность материала слоя-мишени; проводимость измерительной цепи; напряжение питания. При этом параметры МДМ-наносенсора, не подлежащие оптимизации, рассматриваются фиксированными. Причем возможна как оптимизация всех вышеперечисленных параметров одновременно, так и отдельных переменных из приведенного перечня, в этом случае незадействованные параметры также фиксируются.

В качестве критерия оптимизации принята максимизация величины ΔG ($\Delta G = G_g - G_0$) с одновременной максимизацией длительности импульса роста проводимости на уровне $0,7\Delta G$. Это позволяет в процессе оптимизации учесть, что системе обработки информации на выходе моделируемого квантового наносенсора необходимо определенное время для анализа выходного сигнала. Задача при этом становится многокритериальной, а для многокритериальной оптимизации можно установить дополнительные «мягкие» целевые значения критериев оптимизации. Решения, лежащие ближе к таким значениям, являются более предпочтительными при их отборе.

Функция оптимизации квантового наносенсора, написанная на языке MATLAB, предназначена для выполнения в тулбоксе GEATbx, являющемся универсальной реализацией генетического алгоритма. Сделан выбор следующих параметров работы генетического алгоритма: количество субпопуляций – 5; количество индивидуумов (для каждой субпопуляции) – 50, 30, 20, 20, 10; точность мутации (для вещественных чисел) – 24; визуализация проведения оптимизации многокритериальной задачи – каждые 10 популяций; визуализация промежуточных решений – каждые 10 популяций; вывод текстовой информации – каждые 5 популяций; тип завершения алгоритма – максимальное количество популяций + время оптимизации.

Особенностью использованного тулбокса GEATbx является то, он позволяет в процессе оптимизации выводить решение задачи в графической форме. Отслеживание результата в графической форме дает возможность контролировать процесс оптимизации в режиме реального времени, а также получить наглядное представление о решении оптимизационной задачи. Кроме того, GEATbx в графической форме выводит дополнительную информацию о процессе проведения оптимизации и работе генетического алгоритма, что отмечается как достоинство данной реализации используемого алгоритма.

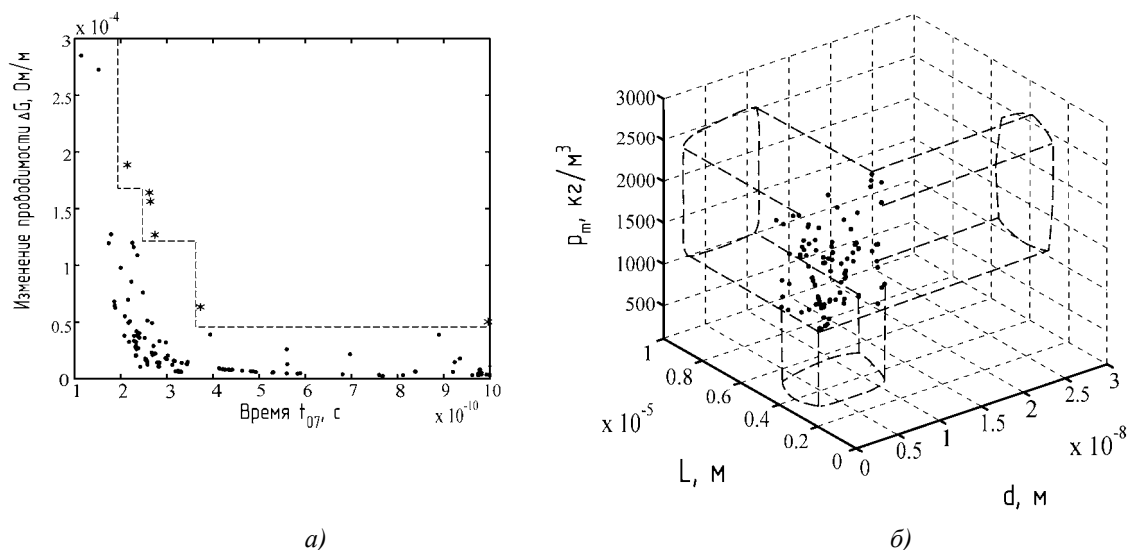


Рис. 5. Фронт решений в поле критериев оптимизации (а) и объем решений в пространстве оптимизируемых параметров модели квантового наносенсора (б).

В качестве результата выполнения задачи на рисунке 5,а представлен Парето-оптимальный фронт в поле критериев оптимизации, то есть множество недоминирующих альтернативных решений. Точками отмечены решения, распределенные по Парето-оптимальному фронту, они являются доминирующими по отношению к остальным значениям, лежащим вне фронта Парето (отмечены звездочкой). На рисунке 5,б показан объем решений в пространстве оптимизируемых параметров модели квантового МДМ-наносенсора (толщина диэлектрической пленки, толщина полимерной мишени, плотность материала мишени). Поскольку задача оптимизации является многокритериальной, не существует одно наилучшее ее решение, напротив, можно выделить набор доминирующих решений задачи. Поле решений задачи оптимизации сконцентрировано в области значений оптимизируемых конструктивно-технологических параметров, при которых модель сенсорной наносистемы на выходе дает сигнал, максимально удовлетворяющий установленным критериям оптимизации.

Заключение.

Выполнено аналитическое моделирование чувствительных к микроудару сенсорных наноструктур типа металл–диэлектрик–металл на основе сверхтонких диэлектрических пленок. Определены параметры баллистического квантового МДМ-наносенсора для орбитального контроля высокоскоростных техногенных и метеороидных микрочастиц. Установлены зависимости отклика квантового наносенсора от времени после удара, механических параметров микрочастицы, конструктивных особенностей наноструктуры, параметров сенсорного интерфейса. Разработан генетический алгоритм оптимизации и определен объем решений в пространстве оптимизируемых параметров модели квантового наносенсора при воздействии космических микрочастиц. Полученная функция оптимальности представляет собой зависимость выходных характеристик наносенсора от физико-механических параметров высокоскоростной микрочастицы и конструктивно-технологических параметров сенсорной наноструктуры. Разработанная конструкция баллистического квантового наносенсора положена в основу создания распределенных орбитальных сенсорных систем для многомерного (многопараметрового) контроля космических факторов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Колешко В. М., Гулай А. В., Гулай В. А., Ульянов В. Б. Сенсорный контроль космических микрочастиц: моделирование квантового наносенсора / В. М. Колешко [и др.] // Четвертый Белорусский Космический Конгресс, 27–29 октября 2009 г., Минск: Материалы конгресса. — Минск, 2009. — С. 78–83.
2. Колешко В. М., Гулай А. В., Гулай В. А. Квантовый наносенсор для контроля космических микрочастиц / В. М. Колешко [и др.] // 19-я Международная Крымская конференция «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии» (КрыМиКо'2009). Севастополь, 14–18 сентября 2009 г.: материалы конференции. — Севастополь: Вебер, 2009. — С. 631–632.
3. Колешко В. М., Гулай А. В., Гулай В. А. Баллистические наносенсоры на туннельном эффекте / В. М. Колешко [и др.] // Наноструктурные материалы—2008: Беларусь-Россия-Украина (НАНО-2008): Первая международная научная конференция, Минск, 22–25 апреля 2008 г.: Материалы конференции. — Минск, 2008. — С. 601–602.
4. Колешко В. М., Гулай А. В., Гулай В. А. Туннельные МДМ-наносенсоры: стратегии и технологии моделирования / В. М. Колешко [и др.] // Нано- и микросистемная техника. — 2007. — № 9. — С. 46–52.
5. Колешко В. М., Гулай А. В., Гулай В. А. Наносенсоры на основе сверхтонких пленок редкоземельных соединений / В. М. Колешко [и др.] // Нанотехника. — 2009. — № 1. — С. 45–48.
6. Колешко В. М., Гулай А. В., Гулай В. А., Польшкова Е. В. Моделирование инвариантных микро-нанотехнологий сенсорики / В. М. Колешко [и др.] // Межведомственный сборник научных статей «Машиностроение». — БНТУ, Минск. — 2009. — Вып. 24, т. 2. — С. 223–228.
7. Семкин Н. Д., Воронов К. Е. Проводимость ударно сжатых МДМ структур на основе полиметилметакрилата // ЖТФ. — 1998. — Т. 68. — № 8 — С. 63–66.