МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

в материаловедении электронных компонентов

МММЭК–2021

Материалы III Международной конференции

25–27 октября 2021 г.Москва Россия

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

Вычислительный центр Федерального исследовательского центра «Информатика и управление» РАН

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Факультет вычислительной математики и кибернетики

Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)

Научный совет РАН «Фундаментальные проблемы элементной базы
информационно-вычислительных и управляющих систем и материалов для их создания»

Консорциум «Перспективные материалы и элементная база информационных
и вычислительных систем»

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
в материаловедении электронных компонентов
МММЭК–2021

Материалы III Международной конференции

25–27 октября 2021 г., Москва

MATHEMATICAL MODELING
in materials science of electronic components
ICM3SEC–2021

Proceedings of the International conference

October 25–27, 2021 Moscow, Russia

МАКС ПРЕСС

МОСКВА – 2021

УДК 519.6.517.958.533.6
ББК 22.2.2218
М34

Ответственный редактор:

К. К. Абгарян – д-р.физ.-мат.наук, главный научный сотрудник, руководитель отдела ФИЦ ИУ РАН, заведующий кафедрой МАИ

М34 **Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов**. МММЭК–2021. 25–27 октября 2021 г., Москва : Материалы III Международной конференции. – Москва : МАКС Пресс, 2021. – 160 с. : ил.

ISBN 978-5-317-06692-5

https://doi.org/10.29003/m2455.MMMSEC-2021

Сборник включает в себя научные работы, отражающие современные мировые достижения в области материаловедения электронных компонентов и представляет новые методы математического моделирования и программные решения для разработки прикладных программных систем.

Для специалистов в области вычислительного материаловедения, прикладной математики, математического моделирования, проектирования и автоматизации изделий наноэлектроники, разработчиков современных прикладных программных систем, аспирантов и студентов старших курсов университетов и технических вузов.

Ключевые слова: математическое моделирование, вычислительное материаловедение, прикладная математика, дизайн материалов, электронные компоненты, наноэлектроника, прикладные программные системы, нейроморфные системы.

УДК 519.6.517.958.533.6
ББК 22.2.2218

Mathematical modeling in materials science of electronic component. ICM3SEC–2021. October 25–27, 2021, Moscow : Proceedings of the international conference. – Moscow : MAKS Press, 2021. – 160 p.

ISBN 978-5-317-06692-5

https://doi.org/10.29003/m2455.MMMSEC-2021

The вook includes scientific works reflecting modern achievements in the field of materials science of electronic components and presents new methods of mathematical modeling and software solutions for the development of applied software systems.

For specialists in the field of computational materials science, applied mathematics, mathematical modeling, design and automation of nanoelectronic products, developers of modern applied software systems, graduate and postgraduate students.

Key words: mathematical modeling, computational materials science, applied mathematics, materials design, nanoelectronics, applied software systems, neuromorphic systems.

Статьи публикуются в авторской редакции.
Использованные изображение получены из открытых источников.

ISBN 978-5-317-06692-5

© Авторы, 2021
© Оформление. ООО «МАКС Пресс», 2021

ОГЛАВЛЕНИЕ

1. A. Современные проблемы создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов с заданными свойствами, включая применение новых методов и средств анализа больших данных 7

I. Estévez, F. Oliveira, M. Oliveira, R.M. Pereira, N. Romanyshyn, S. Clain, G.V. Smirnov, L. Rebouta, M.I. Vasilevskiy. Artificial intelligence assisted polarimetry for materials' discrimination and characterization 8

К.И. Волович, С.А. Денисов. Организация хранения данных для параллельных вычислений в индивидуальных программных средах при решении задач материаловедения 11

А.А. Зацаринный, К.К. Абгарян. Современные проблемы создания новых материалов с заданными свойствами с использованием исследовательской инфраструктуры 15

В.В. Керемет, Я.М. Карандашев, А.В. Кузовков, Г.С Теплов. Применение нейросетевых автоенкодеров типа unet для задач инверсной фотолитографии..... 22

В.А. Кондрашев, С.А Денисов. Методы и алгоритмы выполнения параллельных вычислений с использованием технологий виртуализации в задачах материаловедения 26

О.В. Уварова, С.И Уваров. Построение модели на основе искусственной нейронной сети для изучения свойств кристаллических структур 31

В.С. Щербаков. Анализ технических деталей реализации программного и пользовательского интерфейсов для управления моделями нейроморфных вычислительных систем 34

К.К. Абгарян, Е.С. Гаврилов. Программный комплекс для проведения мультифизических и многоуровневых расчетов..... 38

2. B. Проблемы развития материаловедения квантоворазмерных электронных гетероструктур 43

В.В. Савельев, С.В. Хазанова. Численный расчёт транспортных характеристик двумерных наноматериалов 44

N.A. Sobolev, A.V. Turutin, J.V. Vidal, I.V. Kubasov, A.M. Kislyuk, S.P. Kobeleva, D.A. Kiselev, A.S. Bykov, A.A. Temirov, R.N. Zhukov, M.D. Malinkovich, Y.N. Parkhomenko, A.L. Kholkin. Magnetic Field Sensing and Energy Harvesting with Magnetoelectric Bidomain $LiNbO_3$-Based Composites..... 46

Qiaomu Yao, Peter K. Petrov. Strain-controlled morphology and optical properties of gold nanoparticles grown by pulsed laser deposition 48

3. С. Математическое моделирование в структурном материаловедении (многоуровневые, многомасштабные модели, имитационные модели и т.д.) 49

К.К. Абгарян. Многомаштабное моделирование и методы анализа данных в задачах микроэлектроники 50

К.К. Абгарян, Д.И. Бажанов, Н.А. Соболев. Многомасштабное моделирование многослойных наногетероструктур на основе ферромолибдата стронция (SFMO) 53

В.П. Бокарев, Г.Я. Красников. Расчет поверхностных свойств материалов микроэлектроники с использованием модели координационного плавления кристалла 57

В.Д. Кирилов, И.В Щемеров, С.П. Кобелева. Моделирование работы установки для измерения времени восстановления обратного тока в диодных структурах 60

С.П. Кобелева. Определение сверхмалых отклонений от стехиометрии по составу равновесной паровой фазы широкозонных полупроводниковых соединений A^2B^6 63

Б.С. Ксемидов, А.А. Аксентьев, К.К. Абгарян, Д.И. Бажанов. Параметрическая идентификация потенциала RGL для молекулярно-динамического моделирования 66

С.И. Марков. Прогнозирование анизотропных тепловых свойств фазоизменяемых материалов на базе прямого и обратного математического моделирования 69

А.Г. Настовьяк, Д.В. Штеренталь, Н.Л. Шварц. Импульсный режим роста нитевидных нанокристаллов GaAs 72

А.А. Орлов, Е.А. Ганыкина, А.А. Резванов. Учет пористости материала в модели временного пробоя диэлектрика в системе металлизации интегральных схем 75

А.И. Простомолотов, Н.А. Верезуб. Анализ гидродинамики при синтезе кристаллов из водно-солевых растворов 78

И.Д. Рубцов, К.В. Карпов, А.А. Митрофанов. Использование графовых нейронных сетей для предсказания ширины запрещённой зоны кристаллических материалов 81

С.А. Савельев, К.В. Карпов, А.А. Митрофанов. Моделирование ширины запрещённой зоны металлоорганических каркасных структур с применением методов машинного обучения 84

П.А. Сеченых. Математическое моделирование кристаллической структуры перовскитоподобных соединений 86

Е.Д. Тихонова, Е.С. Горнев. Исследование профиля фоторезиста в процессе самосовмещенного двойного паттернирования методом математического моделирования 89

В.И. Хвесюк, А.А. Баринов, Лю Бинь, Цяо Вэньпей. Принципиально новые подходы к решению теплофизических задач применительно к наноэлектронике 92

Н.Л. Шварц, А.А. Спирина. Особенности развития рельефа поверхности арсенида галлия в процессе неравновесных отжигов (Монте-Карло моделирование)..... 95

А.А. Журавлев, К.К. Абгарян, Д.И. Бажанов, Д.Л. Ревизников. Монте-Карло моделирование ионной динамики в мемристивных элементах 98

4. D. Моделирование размерных, радиационных, поверхностных и других дефектов в полупроводниковой наноэлектронике 103

João L. Gomes, Luís C. Nunes, José C. Pedro. AlGaN/GaN HEMT trap characteristic frequency dependence on temperature and its impact on the rf power amplifier linearizability 104

Igor Bdikin. Modeling the piezoelectric properties of nanomaterials in atomic force microscopy 107

Р.А. Жачук, Д.И. Рогило, А.С. Петров, Д.В. Щеглов, А.В. Латышев, Fabio Ronci, Stefano Colonna. Атомная структура ступени и динамика адатомов Sn на поверхности Si(111) - $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$-Sn 108

К.О. Петросянц. TCAD и SPICE моделирование элементов кремниевых БИС с учетом влияния температуры, радиации и старения 112

К.О. Петросянц, М.Р. Исмаил-Заде, Л.М. Самбурский. Исследование возможностей применения различных промышленных экстракторов для определения параметров SPICE-моделей субмикронных МОПТ в диапазоне температуры до 300°C 117

К.О. Петросянц, Д.С. Силкин, Д.А. Попов. Оценка влияния параметров структуры FinFET на электрические характеристики средствами TCAD-моделирования 120

А.В. Прохоренко, А.А. Гниденко, А.Н. Чибисов, М.А. Чибисова. Ab-initio расчет влияния положения адсорбции на перераспределение намагниченности в силицене, легированном фосфором 124

5. E. Моделирование работы многоуровневых элементов памяти для компьютеров следующего поколения..... 129

Е.А. Ганыкина, А.А. Резванов, Е.С. Горнев. Исследование физических принципов резистивного переключения в ReRAM-стуктурах на основе оскида гафния 130

А.Ю. Морозов, К.К. Абгарян, Д.Л. Ревизников. Стохастическая модель импульсной нейроморфной сети..... 133

Г.С. Теплов, А.Т. Галеева, А.В. Кузовков. Оптимизация структуры вектора входных данных для улучшения обучения нейронной сети, выполняющей ОРС 137

Е.С. Шамин, Д.А. Жевненко, Ф.П. Мещанинов, В.С. Кожевников, Е.С. Горнев. Анализ и сравнение различных подходов к экстракции параметров модели мемристора 140

6. F. Моделирование структур и свойств композиционных материалов с нанокристаллами, нанокластерами, наноаморфными включениями и т.д. 143

Ю.Д. Мочалова, К.К. Абгарян. Моделирование усталостных характеристик композитного материала с помощью программного продукта COMSOL multiphysics 144

А.А. Чистякова, Д.И. Бажанов. Исследование сегрегации примеси никеля вблизи границ дефектов структуры LSNT перовскита методом первопринципной молекулярной динамики 146

А.А. Шарапов, И.В. Матюшкин. Моделирование процесса роста массива одномерных монокристаллических структур ZnO 150

7. G. Проблемы обеспечения надежности ЭКБ микроэлектроники и систем на ее основе 153

А.А. Зацаринный, Ю.А. Степченков, Ю.Г. Дьяченко, Ю.В. Рождественский. Сравнение сбоеустойчивых синхронных и самосинхронных схем 154

О.А. Тельминов, Е.С. Горнев. Отечественная элементная база и программное обеспечение для реализации нейросетевых решений 157

1. А

СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ СОЗДАНИЯ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ ИНФРАСТРУКТУРЫ ДЛЯ СИНТЕЗА НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ С ЗАДАННЫМИ СВОЙСТВАМИ, ВКЛЮЧАЯ ПРИМЕНЕНИЕ НОВЫХ МЕТОДОВ И СРЕДСТВ АНАЛИЗА БОЛЬШИХ ДАННЫХ

https://doi.org/10.29003/m2456.MMMSEC-2021/8-10

ARTIFICIAL INTELLIGENCE ASSISTED POLARIMETRY FOR MATERIALS' DISCRIMINATION AND CHARACTERIZATION

I. Estévez, F. Oliveira, M. Oliveira, R.M. Pereira, N. Romanyshyn, S. Clain, G.V. Smirnov, L. Rebouta, M.I. Vasilevskiy*

Centro de Física, Universidade do Minho, Braga, Portugal

**mikhail@fisica.uminho.pt*

When an optical beam interacts with matter, the polarization state of the (specular or diffuse) reflected light usually changes and this change is related to certain properties of the material (refractive index, surface roughness, *etc*) and the incident beam characteristics. Therefore, small differences in such properties can cause the material reflect or transmit differently the same polarized incident beam. Consequently, measurements of polarization can be used as a method to characterize materials. Polarimetry is the name for a family of optical methods based on measurement and interpretation of the polarization of electromagnetic waves. For instance, ellipsometry is a widely used particular case of polarimetry, which employs polarized incident light and specular reflection and yields, most directly, the refractive index and thickness of a layer [1]. More generally, polarimetry techniques can enable also accurate studies of a variety of other properties such as the existence and orientation of surface defects, stress patterns, coating microstructure, surface anisotropy, *etc*. Moreover, polarimetry can be used for obtaining information about distant samples by analyzing backscattered light. Therefore, it has a strong potential for remote sensing applications [2].

Most real-world objects do not just change the state of polarization of reflected light to a certain state (e.g. by changing its ellipticity) but also depolarize it, so that a part of reflected photons do not have a definite polarization state. In polarimetry, one usually deals with partially polarized light. The Stokes-Mueller formalism [2] is the most appropriate representation of polarization when considering partially polarized light. The Mueller matrix (MM) contains information related to a sample and consists of 4×4 real elements (Fig. 1) that enable analysing the interaction of a totally or partially polarized or depolarized light, reflected/transmitted/scattered by the sample. It relates the Stokes parameters of the incident and output beams, which can be measured experimentally.

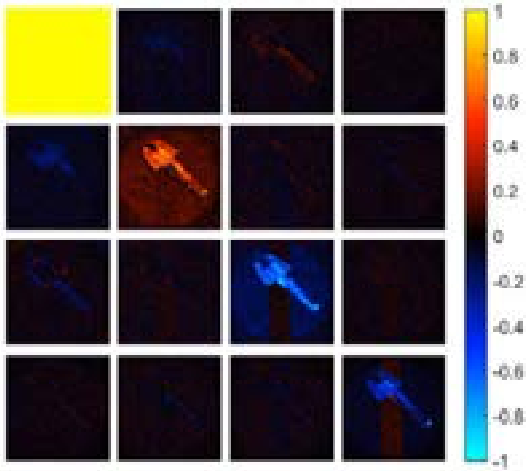

Figure 1. Images of sixteen Mueller matrix elements
of an object recorded with our Mueller matrix imaging polarimeter,
normalized by the first element

If one has an electromagnetic model for the scattering sample, it is possible to relate the MM elements to the physical parameters of the material (such as the refractive index and absorption coefficient) and the sample characteristics (such as surface roughness parameters). If no such mode is available, one can use one of the known MM decompositions into parts that have a clear physical meaning (such as the diattenuation, retardance and depolarization). The corresponding scalar metrics (expansion coefficients) can be used to characterize and classify different materials [3].

The success of such a procedure, when applied to complex real-world objects, is only partial. More recently, another approach has been applied [4], which is also pursued by our group. It is phenomenological and relies on the abundant (and even redundant) information about the sample contained, in a hidden form, in the complete set of the MM elements and machine learning (ML) algorithms. ML (or, more broadly, artificial intelligence, AI) is a category of fast and widely used methods that can be employed for classifying objects described by some (e.g. experimentally measured) data into a set of predefined classes based on “training data” [5]. Before the training process, a large amount of input data for it need to be measured.

In our work, the data (in our case, the MM elements as functions of the angle of incidence of the light beam onto the sample) were measured

on a few thousands of real-world samples using a specially designed laboratory Mueller matrix polarimeter. With this database at hand, several classification algorithms have been tried, including (i) a deterministic one and (ii) several AI approaches. The deterministic algorithm consisted in calculating a “distance” from the point representing a new sample in the multidimensional space of the MM elements to the centers of the data point clusters representing different pre-defined materials’ classes. Within the approach (ii), in particular, an Artificial Neural Network (ANN) was trained with a database containing the measured materials’ MMs and the corresponding angles of incidence. To validate the performance of the ANN, it was tested by classifying a new set of samples, obtaining a total accuracy of 95.7%, considerably superior to the results achieved with the approach (i).

In this talk, after a necessary introduction on the polarimetry and the Stokes-Mueller formalism, we shall present a comparative analysis of the different approaches to the materials’ classification. Benefits of polarimetric techniques for complex materials’ characterization will also be discussed.

References

[1] R. M. A. Azzam and N. M. Bashara, Ellipsometry and Polarized Light, Elsevier (1987)

[2] S. Cloude, Polarisation: Applications in Remote Sensing. Oxford University Press (2009)

[3] B. J. De Boo et al., Depolarization of diffusely reflecting man-made objects, Appl. Opt. 44, 5434 (2005)

[4] K. Omer, R. Chipman, and M. Kupinski, Road scene object detection using pre-trained RGB neural networks on linear Stokes images, SPIE Proc. vol. 11412, pp. 1141203 (2020)

[5] S. Shalev-Shwartz and S. Ben-David. Understanding machine learning: From theory to algorithms. Cambridge University Press (2014)

Keywords: Polarimetry, Stokes vector, Mueller matrix, materials’ classification, machine learning.

УДК 004.051
https://doi.org/10.29003/m2457.MMMSEC-2021/11-15

ОРГАНИЗАЦИЯ ХРАНЕНИЯ ДАННЫХ ДЛЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ В ИНДИВИДУАЛЬНЫХ ПРОГРАММНЫХ СРЕДАХ ПРИ РЕШЕНИИ ЗАДАЧ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ

Волович Константин Иосифович,
к.т.н., начальник УИТС,
KVolovich@frccsc.ru, +7(499)135-43-20[1],

Денисов Сергей Анатольевич,
начальник ЦКП «Информатика»,
SDenisov@frccsc.ru, +7(499)135-43-20[1]

[1] *ФИЦ ИУ РАН, г. Москва*

Аннотация. В работе рассматриваются методы хранения данных при выполнении параллельных вычислений в многомашинном высокопроизводительном вычислительном комплексе в виртуальных программных средах. Предлагаются подходы построению системы хранения данных при применении программных систем, предназначенных для решения задач материаловедения.

Ключевые слова: параллельные вычисления, параллельная файловая система, высокопроизводительные вычисления, кластер.

В настоящее время наблюдается возрастающая потребность научных коллективов, решающих задачи материаловедения, в вычислительных ресурсах суперкомпьютеров и многомашинных вычислительных комплексов различной архитектуры. Действительно, задачи математического моделирования в материаловедении не могут быть решены в рамках одного сервера и требуют разработки технологий по параллельной обработке заданий в многомашинном вычислительном комплексе. Для успешного решения ресурсоемких вычислительных задач в материаловедении и других областях прикладной и фундаментальной науки требуется создание исследовательской инфраструктуры, позволяющей научным коллективам получать доступ к самым современным научным инструментам, установкам и сервисам [1].

При этом тенденция построения крупных вычислительных установок для коллективного использования научными коллективами в различных областях знания предполагает разработку методов одновременного (параллельного) исполнения разнотипных вычисли-

тельных заданий в одном вычислительном комплексе в составе виртуальных индивидуальных программных сред [2]. При этом каждое из вычислительных заданий использует технологии параллельной обработки информации и межпроцессного взаимодействия в динамически изменяющейся виртуальной среде.

Для достижения максимальной производительности такого многомашинного комплекса особое значение имеет обеспечение каждой вычислительной задачи средствами для обработки данных. При этом скорость обмена данными должна позволять вычислительному модулю функционировать в режиме максимальной производительности за счет минимизации ожидания обмена данными.

Система хранения должна обеспечивать максимально высокую скорость обмена данными в условиях функционирования множества параллельных процессов в высокопроизводительной вычислительной среде.

Традиционно в суперкомпьютерных системах эти задачи решались использованием параллельных файловых систем, обеспечивающих доступ к единому файловому пространству через множество узлов хранения данных.

В настоящее время разработка и создание параллельных файловых систем активно производится как фирмами-производителями вычислительных систем (проприетарные решения), так и рамках проектов на основе открытого программного обеспечения.

В общем случае исследования направлены на:

– обеспечение максимальной емкости файлового хранилища;

– достижение максимальной производительности при передаче данных при заданном количестве вычислительных узлов и узлов хранения данных;

– обеспечение масштабируемости системы хранения без деградации производительности;

– обеспечение надежности и отказоустойчивости.

В качестве проприетарных решений можно привести разработку компании IBM General Parallel File System (GPFS), реализованную в составе аппаратно-программных комплексов IBM Elastic Storage System (ESS). Другим примером проприетарного решения является Google File System, созданная для поддержки кластера Google.

В качестве проектов с открытым кодом можно рассмотреть систему Lustre, созданную в Университете Карнеги и впоследствии приобретаемую различным крупными фирмами. В настоящее время Lustre владеет Intel и развивает ее под открытой лицензией GPL.

Другой системой на основе открытого кода является Ceph принадлежащая компании Red Hat (в настоящее время поглощена IBM).

Для решения задачи обеспечения прикладных заданий материаловедения высокоскоростным доступом к данным в условиях функционирования высокопроизводительном комплексе должны быть решены следующие задачи:

– разработана архитектура и методы построения параллельного файлового хранилища, обеспечивающего доступ к данным индивидуальных виртуальных программных сред, функционирующих в многомашинном вычислительном комплексе;

– разработаны модели хранения данных для различных типов вычислительных заданий.

В общем случае для каждого типа интегрированного программного обеспечения материаловедения (ABINIT, VASP, Quantum ESPRESSO, LAMMPS, MEEP, MPB, OpenFOAM) может потребоваться отдельная модель хранения данных. Такое требование связано с тем, что при выполнении параллельных заданий на группе узлов высокопроизводительного кластера преимущественные обращения к блокам данных может быть различным и вызывать либо образование «узких мест», либо, наоборот, простои функционирования системы хранения данных [3].

Поэтому требуется исследование и разработка моделей хранения данных, описывающих схему размещения и дублирования данных на группе узлов параллельного хранилища.

Задачи многомасштабного моделирования в материаловедении [4, 5] также требуют различных подходов к организации данных для разных программных компонентов многомасштабной модели. При оценке эффективности функционирования вычислительного комплекса [6] также следует учитывать не только параметры загрузки центральных процессоров и ускорителей вычислений, но и эффективность функционирования параллельной файловой системы [7].

Исследования и выработку схем хранения следует проводить на основе действующего макета (в соответствии с разработанной моделью) параллельного файлового хранилища, позволяющего предоставлять доступ к данным разнотипным вычислительным заданиям в составе виртуальных вычислительных сред. Такой макет функционирует в инфраструктуре Центра коллективного пользования «Высокопроизводительные вычисления и большие данные» (ЦКП «Информатика») ФИЦ ИУ РАН.

В ходе создания макета параллельной файловой системы и проведения на нем серии экспериментов включающие следующие научно-практические работы:

– развертывание базовой параллельной файловой системы на основе программного обеспечения с открытым кодом;

– оценка производительности и качества функционирования параллельной файловой системы в базовом варианте при выполнении вычислительных заданий различных типов;

– реализация разработанной архитектуры системы хранения, моделей данных, сценариев доступа за счет настройки базового программного обеспечения, а также разработки и внедрения собственных программных модулей, скриптов, сценариев.

– оценка производительности и качества функционирования параллельной файловой системы в доработанном варианте при выполнении вычислительных заданий различных типов;

– сравнение базовой и доработанной версий параллельной файловой системы и выработка рекомендаций по применению разработанных методов в высокопроизводительных вычислительных комплексах научных организаций при решении прикладных задач материаловедения.

Исследование выполнено при частичной финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта 19-29-03051 мк.

Список использованных источников

1. Зацаринный А.А., Абгарян К.К. Актуальные проблемы создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках цифровой трансформации общества // В сборнике: Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Материалы II международной конференции. 2020. С. 8–13.

2. Volovich Konstantin, Alexander Zatsarinnyy, Sergey Frenkel, Sergey Denisov High Performance Computing in a Shared Virtual Infrastructure // CEUR Workshop Proceedings. Volume 2930 (2021). P. 38–46.

3. Карцев А., С.И. Мальковский, К.И. Волович, А.А. Сорокин. Исследование производительности и масштабируемости пакета Quantum ESPRESSO при изучении низкоразмерных систем на гибридных вычислительных системах // Материалы I международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. МММЭК-2019». Москва. МАКС Пресс (2019). С. 18–21.

4. Абгарян К.К. Информационная технология построения многомасштабных моделей в задачах вычислительного материаловедения. – Издательство «Радиотехника», «Системы высокой доступности», 2018. – С. 9–15.

5. Абгарян К.К., Е.С. Гаврилов, А.М. Марасанов. Информационная поддержка задач многомасштабного моделирования композиционных материалов // International Journal of Open Information Technologies. Vol. 5. No 2. 2017. P. 24–28. ISSN 2307-8162.

6. Волович К.И. Оценка загрузки гибридного вычислительного комплекса при выполнении задач моделирования в материаловедении// Материалы II международной конференции. Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. 2020. С. 30–33

7. Rybintsev V. Optimizing the parameters of the Lustre-file-system-based HPC system for reverse time migration // Journal of supercomputing. Vol. 76. Issue 1. P. 536–548.

DATA STORAGE FOR PARALLEL COMPUTING IN INDIVIDUAL SOFTWARE ENVIRONMENTS WHEN SOLVING MATERIALS SCIENCE PROBLEMS

K. Volovich, S. Denisov

Abstract. The paper discusses methods of data storage when performing parallel computations in a multicomputer high-performance computing complex in virtual software environments. Approaches to building a data storage system using software systems designed to solve problems of materials science are proposed.

Keywords: parallel computing, parallel file system, high performance computing, cluster.

https://doi.org/10.29003/m2458.MMMSEC-2021/15-22

СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ СОЗДАНИЯ НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ С ЗАДАННЫМИ СВОЙСТВАМИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ ИНФРАСТРУКТУРЫ

***Зацаринный Александр Алексеевич*[1]**,
д.т.н., г.н.с., руководитель отделения ФИЦ ИУ РАН,
e-mail: alex250451@mail.ru

***Абгарян Каринэ Карленовна*[1,2]**,
д.ф.-м.н., г.н.с., зав. отделом ФИЦ ИУ РАН, зав.кафедрой МАИ,
e-mail: kristal83@mail.ru

[1] *Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук (ФИЦ ИУ РАН), Россия, 119333, Москва, ул. Вавилова, д.44.*

[2] *Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет) (МАИ), Россия, 125993, Москва, Волоколамское шоссе, д. 4.*

Аннотация. В докладе рассматриваются актуальные проблемы, связанные с созданием новых материалов с заданными свойствами – важнейшими факторами успешного развития цифровой трансформации общества. Отмечается необходимость развития высокопроизводительной пользовательской инфраструктуры для информационной поддержки методов многомасштабного компьютерного моделирования и их применения в области создания отечественной электронной компонентный базы.

Ключевые слова: цифровая трансформация, синтез новых материалов, многомасштабное компьютерное моделирование, высокопроизводительная пользовательская инфраструктура.

Введение

Цифровая трансформация общества, определяемая приоритетами Стратегии научно-технологического развития, в настоящее время становится все более значимой национальной целью России [1], которая органично вписывается в идеи глобальной перезагрузки мира, обозначенные на Юбилейном Всемирном экономическом форуме «Давос-2021» [2]. При этом в рамках первого приоритета создается, по существу, вся технологическая база современной цифровой экономики, включая цифровые интеллектуальные производственные технологии, роботизированные системы, методы получения новых материалов, обработки больших объемов данных, машинного обучения и искусственного интеллекта [3].

Особую стратегическую значимость в спектре задач первого приоритета приобретает синтез новых материалов, острая необходимость которых требуется во всех областях цифровой экономики [4]. Сообщения о новых материалах и технологиях появляются сегодня очень часто. Достаточно привести ряд примеров: самовосстанавливающийся бетон, стеклянная черепица, смарт-стекло, токопроводящий бетон, графеновое нанопокрытие (графен в сотни раз крепче стали), хлопковое волокно, разноцветные проводящие чернила, тесонит (tethonite), ThermalTech (запатентованная легкая умная ткань из нержавеющей стальной проволоки), Paptic (что-то среднее между бумагой и пластиком), гибкая батарея, металлическая липучка и др. [5, 6].

Интересно, что Нобелевскую Премию по физике в 2021 году получили сразу три человека – ученые из Италии, Германии и США.

При этом если американский и немецкий ученые получили премию за исследования в области влияния человека на глобальное потепление, то итальянец Дж. Паризи из римского университета «Сапиенца» получил премию «за открытие того, как беспорядочность и флуктуации взаимодействуют в физических системах – в масштабах от атомных до планетарных». Как пояснил Нобелевский комитет, Паризи открыл скрытые закономерности в материалах с неупорядоченной структурой [7]. Это открытие позволяет понять и описать множество различных и, очевидно, совершенно случайных явлений не только в физике, но и в других, очень разных областях (биология, нейробиология и машинное обучение).

Вместе с тем, вклад российских ученых в развитие этого направления характеризуется следующими показателями [8]: по уровню публикационной активности российских авторов в общемировом объеме в научных журналах, индексируемых в WEB OF SCIENCE, Россия занимает 7-е место (6399 публикаций, 4,14 %); по уровню патентной активности Россия на 8-м месте (доля российских патентов – 3,0%). Здесь лидеры: Китай, США, Япония, Германия, Корея, Испания, Тайвань.

Актуальные тенденции в области создания новых материалов

Важнейшим направлением в области синтеза новых материалов с заданными свойствами является развитие методов математического моделирования, в частности, методов многомасштабного моделирования [9, 10]. Интересный метод компьютерного проектирования новых полимерных композитов предложили ученые Ярославского государственного технического университета [11], который, по утверждению авторов, позволит резко сократить затраты на создание новых материалов с уникальными свойствами для машиностроения и других отраслей. Создана модель для полноценного компьютерного расчета характеристик полимеров на основе комплексного применения теории квантовой механики (описание структуры атомов и молекул), классической механики Ньютона (динамика диффузионных процессов) и механики сплошной среды Эйлера и Лагранжа (свойства всего изделия). Созданный метод планируется использовать для разработки покрытий из полимерных композитов с уникальными свойствами для космической отрасли и биотехнологий.

Вместе с тем, эффективное решение задач синтеза новых материалов на основе методов математического моделирования возможно только с использованием исследовательской инфраструкту-

ры. Основные факторы, определяющие значимость высокопроизводительных платформ для научных исследований, обоснованы в [4, 16, 17].

Большинство развитых стран приняли долгосрочные планы и программы развития исследовательских инфраструктур [12–14]. Так, в Стратегии развития Europe-2020 Strategy одним из инструментов социально-экономического развития признано создание и совершенствование общеевропейских исследовательских инфраструктур. Европейский Совет в 2002 году учредил специальный форум по исследовательским инфраструктурам (European Strategy Forum on Research Infrastructures 2012 (ESFRI). Во Франции в 2004 году создан Национальный центр научных исследований для развития больших исследовательских инфраструктур, в октябре 2012 г. утверждена «Французская Национальная стратегия исследовательских инфраструктур 2012–2020». В Германии в 2013 году Федеральное министерство образования и науки (BMBF) приняло «Дорожную карту развития исследовательских инфраструктур». Создана сеть национальных научных лабораторий (SNLs) для проблемно-ориентированных междисциплинарных исследований [12]. Китайская академия наук в начале «нулевых» разработала и приняла дорожную карту развития больших исследовательских инфраструктур до 2050 года, охватывает почти 50 действующих или проектируемых больших инфраструктурных исследовательских объектов [13].

Как показывает анализ мирового опыта [15-17], основными тенденциями являются использование гибридных вычислительных архитектур, организация вычислений в территориально распределенных вычислительных комплексах; виртуализация вычислительных сред и миграция вычислительной среды к источнику данных за счет использования технологий виртуализации и контейнеризации.

Опыт ФИЦ ИУ РАН

С учетом указанных тенденций для повышения эффективности проведения экспериментальных исследований в интересах цифровой трансформации в ФИЦ ИУ РАН создана современная цифровая платформа для научных исследований, которая предоставляет исследователям традиционные облачные услуги, а также технологии научного сервиса как услуги (RaaS – Research as a Service) в виде предметно-ориентированных программ [16–19].

На базе платформы зарегистрирован центр коллективного пользования (ЦКП) «Информатика», на котором успешно решается це-

лый ряд разнообразных задач, включая задачи синтеза материалов с заданными свойствами. Вместе с тем, ЦКП по своим характеристикам (15 узлов, 536 ядер, 26 графических ускорителей, 0,225 PFlops) уступает не только отечественным суперкомпьютерам, но и последним из TOP-500 (Китайский суперкомпьютер Inspur TS10000, 34 400 ядер и GPU, 3.0 PFlops).

Отметим, что в этом году обозначены перспективы создания отечественного ряда суперкомпьютеров на базе 32-ядерных отечественных процессорах «Эльбрус-32С» [19]. Так, опубликована дорожная карта, предусматривающая разработку суперкомпьютеров с производительностью от одного PFlops (в 2022 г.) до 100 PFlops (в 2027 г.). Если эта дорожная карта будет выполнена, то можно ожидать прорывное развитие задач синтеза новых материалов на базе отечественных высокопроизводительных исследовательских инфраструктур.

Однако и наличие высокопроизводительной инфраструктуры не является достаточным условием решения задач синтеза новых материалов: здесь обязательно следует указать на необходимость подготовки кадров высшей квалификации, способных выполнять постановки задач на основе современных математических методов, разрабатывать сложные программные модели для решения таких задач, а также способных выполнять обработку и анализ больших объемов данных (методы искусственного интеллекта, машинного обучения, теории управления, системного анализа) [20].

Заключение

Таким образом, в качестве выводов отметим следующее.

Новые материалы – важнейший компонент успешного развития цифровой трансформации.Создание отечественной электронной компонентный базы становится стратегической задачей в рамках цифровой трансформации. Без её решения невозможно обеспечить создание базовых доверенных компонентов.

Развитие методов многомасштабного математического моделирования для синтеза новых материалов с требуемыми свойствами – сложная наукоемкая задача.

Требуется отечественная высокопроизводительная среда для научных исследований, обладающая комфортным интерфейсом для пользователей, гибкостью в настройке ресурсов, высокой производительностью и надежностью.

Острой проблемой является подготовка высококвалифицированных кадров в области математического моделирования и программирования.

ФИЦ ИУ РАН накопил определенный опыт моделирования задач синтеза новых материалов с заданными свойствами на основе ЦКП «Информатика».

Работа выполнена при поддержке РФФИ гранты № 19-29-03051 мк и № 19-08-01191 А.

Список использованных источников

1. Указ Президента Российской Федерации от 01.12.2016 г. № 642 О Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации // http://kremlin.ru/acts/bank/41449 (дата обращения 06.10.2021).

2. Онлайн-форум «Давосская повестка дня 2021», .http://kremlin.ru/events/president/news/64938-(дата обращения 06.10.2021).

3. Зацаринный А.А., Киселев Э.В., Козлов С.В., Колин К.К. Информационное пространство цифровой экономики России. Концептуальные основы и проблемы формирования. – М.: ФИЦ ИУ РАН, 2018. – 236. С. 9.

4. Зацаринный А.А., Абгарян К.К. Факторы, определяющие актуальность создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках реализации приоритетов научно-технологического развития России // Материалы I Международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК-2019). 21–23 октября. Москва: МАКС Пресс.

5. 10 инновационных материалов // https://zaggo-ru.turbopages.org/zaggo.ru/s/article/stroitel_stvo/obshee/10_innovacionnyh_materialov_kotorye.html (дата обращения 06.10.2021).

6. 11 невероятных материалов будущего // https://rb.ru/list/11-new-materials/ (дата обращения 06.10.2021).

7. Нобелевку по физике присудили за модель климата Земли. // РБК: https://www.rbc.ru/society/05/10/2021/615bbeaf9a79473b1304acff (дата обращения 06.10.2021).

8. Индикаторы науки ВШЭ. Статистический сборник. 2019. // https://www.hse.ru/primarydata/in2019 (дата обращения 06.10.2021).

9. Абгарян К.К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. – М.: МАКС Пресс. 2017. 284 с.

10. Абгарян К.К., Осипова В.А. Применение методов поддержки принятия решений для многокритериальной задачи отбора многомасштабных композиций // «Издательство «Радиотехника», «Информатика и ее применение», 2019. № 2.

11. В России создали уникальный метод проектирования новых материалов // РИА Новости https://turbo.ria.ru/20210712/yagtu-1740104628.html (дата обращения 06.10.2021).

12. Изотова Г.С. Отчет Счетной палаты Российской Федерации «Определение основных причин, сдерживающих научное развитие в Российской Федера-

ции: оценка научной инфраструктуры, достаточность мотивационных мер, обеспечение привлекательности работы ведущих ученых», 2020 г. http://fgosvo.ru/uploadfiles/Work_materials_disscusion/sp.pdf (дата обращения 06.10.2021).

13. Large Research Infrastructures Development in China: A Roadmap to 2050 / Editor Hesheng Chen.-Berlin, Heidelberg: Science Press Beijing and Springer-Verlag, 2010.

14. Large Research Infrastructures: Report on Roadmapping of Large Research Infrastructures (2008); Report on Establishing Large International Research Infrastructures: Issues and Options (2010) / OECD Global Science Forum. – http://www.oecd.org/sti/inno/47057832.pdf (дата обращения 06.10.2021).

15. Zatsarinnyy A.A.. The experience of the FRC CSC RAS in creating a digital platform for scientific research in the cause of digital transformation // The International Science and Technology Conference «Modern Network Technologies, MoNeTec-2020».

16. Volovich K.I., S.A. Denisov, S.I. Malkovsky. Deployment of parallel computing in a hybrid high-performance cluster based on virtualization technologies // Procedia Computer Science. Volume 186 (2021). P. 40–47.

17. Volovich Konstantin, Vadim Kondrashev, Mikhail Posypkin, Sergey Denisov. Some Approaches to Managing Computing Resources of a Hybrid High-Performance Cluster in a Cloud Environment // CEUR Workshop Proceedings. Vol. 2930 (2021). P. 47–53.

18. Volovich Konstantin, Alexander Zatsarinnyy, Sergey Frenkel, Sergey Denisov High Performance Computing in a Shared Virtual Infrastructure // CEUR Workshop Proceedings. Volume 2930 (2021). P. 38–46.

19. В России готовится строительство линейки суперкомпьютеров на «Эльбрусах» до 100 петафлопс // CNEWS https://www.cnews.ru/news/top/2021-09-30_v_rossii_gotovitsya_stroitelstvo (дата обращения 06.10.2021).

20. Академик РАН И. Соколов: ВМК МГУ – это безусловная востребованность // Интервью для электронного периодического издания «Научная Россия», 12.08.2020. https://ru-ru.facebook.com/bigdatamsu/posts/1696276627188339 (дата обращения 06.10.2021).

MODERN PROBLEMS OF CREATING NEW MATERIALS WITH GIVEN PROPERTIES USING RESEARCH INFRASTRUCTURE

Zatsarinnyy Aleksander Alekseevich,
chief Researcher, doctor of engineering, director of Department, Federal Research Centre “Computer Science and Control” (FRC CSC RAS), of the Russian Academy of Sciences (FRC CSC RAS).Vavilov st. 44, 119333 Moscow, Russia,
e-mail: alex250451@mail.ru.

Abgaryan Karine Karlenovna,
chief Researcher, doctor of physical and mathematical Science, head of the department Federal Research Centre «Computer Science and Control» (FRCCSC), of the Russian Academy of Sciences, (FRC CSC RAS). Vavilov st. 44, 119333 Moscow, Russia, head of the department Moscow Aviation Institute (National Research University), Volokolamskoe shosse, 4, 125993, Moscow, Russia (MAI),
e-mail: kristal83@mail.ru

Abstract. The report examines topical problems associated with the creation of new materials with desired properties – the most important factors in the successful development of the digital transformation of society. The need to develop a high-performance user infrastructure for information support of multiscale computer modeling methods and their application in the field of creating a domestic electronic component base is noted.

Keywords: digital transformation, synthesis of new materials, multiscale computer modeling, high-performance user infrastructure.

УДК 004.2:004.9
https://doi.org/10.29003/m2459.MMMSEC-2021/22-25

ПРИМЕНЕНИЕ НЕЙРОСЕТЕВЫХ АВТОЕНКОДЕРОВ ТИПА UNET ДЛЯ ЗАДАЧ ИНВЕРСНОЙ ФОТОЛИТОГРАФИИ

Керемет Владислав Вадимович,
студент[1],

Карандашев Яков Михайлович,
к.ф.-м.н., доцент[2], ведущий научный сотрудник[3],
karandashev@niisi.ras.ru

Кузовков Алексей Валерьевич,
ведущий инженер[4]

Теплов Георгий Сергеевич,
к.ф.-м.н., старший научный сотрудник[4]

[1] МГУ имени М.В. Ломоносова, Ленинские горы, 1, Москва, 119991
[2] Российский университет дружбы народов, ул. Миклухо-Маклая, д. 6, Москва, 117198
[3] ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН, Нахимовский проспект 36к1, Москва, 117218
[4] АО НИИМЭ, Москва, Зеленоград, улица Академика Валиева, 6/1, 124460

Аннотация: В работе обсуждается вопрос о применимости нейросетей к задачам проектирования микроэлектроники и постепенного встраивания в элементы специализированных САПР нейросетевых модулей, позволяющих существенно ускорить процессы моделирования на разных этапах проектирования. Рассматривается применение многослойной конволюционной архитектуры нейросети типа UNET к задаче прямой и инверсной вычислительной фотолитографии. С помощью данного нейросетевого подхода удалось на два порядка ускорить вычисление фотошаблона для 90-нм техпроцесса и достигнуть точности моделирования, превосходящую стандартные методы инверсной фотолитографии (ILT).

Ключевые слова: САПР, вычислительная фотолитография, нейронные сети, ускорение моделирования.

Введение

Традиционно модели нейросетей типа UNET [1] применялись для сегментации изображений и других задач автоматического перевода картинки в картинку. В настоящей работе показано, что подобная архитектура может быть успешно применена к решению обратных задач оптики, а именно инверсной задачи фотолитографии в проектировании микроэлектроники.

В качестве примера операции мы выбрали процесс формирования поликремниевых затворов КМОП-транзисторов по 90 нм технологии. Известно, что этот процесс является одним из самых сложных среди литографических процессов и традиционно для него используются методы оптической коррекции близости (OPC) для построения фотошаблона. С помощью коррекции эффектов оптической близости, а конкретнее ILT [2] – техники обратной литографии можно точно решить задачу OPC и по известному изображению на пластине восстановить изображение фотошаблона, однако, метод вычислительно сложный и применяться на все изделие не может, а применяется локально.

Нейросетевая парадигма позволяет отказаться от явного численного моделирования оптических эффектов. Имея достаточное количество пар изображений, представляющих собой конфигурации масок фотошаблона и полученных путём моделирования изображений фоторезиста, можно натренировать нейронную сеть, чтобы в дальнейшем заменить этот трудозатратный процесс.

В настоящей работе с помощью САПР Calibre Workbench была получена репрезентативная выборка изображений, состоящий из 1875 пар изображений 877×840 пикселей (примеры в Таблице), соответствующие фотошаблону и рисунку резиста. Техно-

логический процесс, соответствующий изображениям – 90 нм, 1 пиксель = 5 нм.

В основу нейронной сети была взята архитектура Unet [1], которая хорошо зарекомендовала себя в задачах сегментации картинок. Она состоит из сужающегося пути слева (encoder) и расширяющегося пути справа (decoder).

Таблица

Метрики качества модели в зависимости от эпохи

№ Эпохи	Train loss	Val loss	IoU	MSE
1	0.22669	0.15972	0.89204	0.00262
10	0.02240	0.02286	0.98000	0.00047
20	0.01661	0.01806	0.98460	0.00037
30	0.01089	0.01290	0.98935	0.00027

Модель обучалась 30 эпох, время прохождения каждой эпохи в среднем 2 минуты. Метрика Iou показала ошибку всего в 1%. В таблице приведены значения функции потерь на тренировочном и валидационном датасете, а также метрики качества на валидационной выборке, в зависимости от эпох обучения.

Оценка качества нашей модели осуществлялась с помощью метрики EPE, посчитанной в САПР «Calibre OPCpro», на 300 смоделированных, с помощью нашей модели фотошаблонах.

Наша модель дала даже лучший результат, чем оригинальный алгоритм инверсной фотолитографии, так как распределение ошибок нейронной сети ближе к нулю. Кро того, время расчёта одного изображения с помощью данного пакета занимало несколько секунд, в то время как работа нейронной сети порядка 17 мс.

Заключение

Задачи инверсной фотолитографии, как другие обратные задачи физики и математики – представляют особый класс задач, в которых применение нейронных сетей кажется наиболее естественным. Действительно, решение, предъявляемое нейронной сетью может быть с лёгкостью проверено прямым численным моделированием, которое не занимает столь много времени, как итерационный процесс решения обратных задач.

Современные фреймворки вроде Pytorch [5] значительно упрощают процесс создания нейронных сетей и их применение в раз-

личных инженерных задачах. В данной работе была реализована сверточная нейронная сеть на базе Unet, реализующая инверсную задачу литографии. Были приведены основные результаты эксперимента, оценена точность алгоритма. Полученная в работе нейросетевая модель на валидационной выборке из 300 пар изображений показала лучший результат, чем оригинальная модель инверсной фотолитографии, при этом время расчёта одной структуры уменьшилось на два порядка.

Список используемых источников

1. Ronneberger, Olaf, Philipp Fischer, and Thomas Brox. “U-net: Convolutional networks for biomedical image segmentation.” In International Conference on Medical image computing and computer-assisted intervention, pp. 234–241. Springer, Cham, 2015.
2. Linyong Pang, Yong Liu, and Dan Abrams "Inverse lithography technology (ILT): What is the impact to the photomask industry?", Proc. SPIE 6283, Photomask and Next-Generation Lithography Mask Technology XIII, 62830X (20 May 2006); https://doi.org/10.1117/12.681857.
3. “Algorithm and methodology for increasing the OPC-recipe efficiency” Medvedev Konstantin A., Kuzovkov Alexey V., Ivanov Vladimir V. 10.22184/NanoRus.2019.12.89.368.372
4. https://colab.research.google.com
5. Pytorch Documentation, https://pytorch.org/docs/stable/index.html

APPLICATION OF NEURAL NETWORK AUTO ENCODERS OF UNET TYPE FOR INVERSE PHOTOLITOGRAPHY TASKS

V.V. Keremet, I.M. Karandashev, A.V. Kuzovkov, G.S. Teplov

Abstract. The paper discusses the issue of the applicability of neural networks to the problems of designing microelectronics. The integration of neural network modules into the elements of specialized EDA systems can significantly speed up the modeling processes at different stages of design. The application of a multilayer convolutional architecture of a neural network of the UNET type to the problem of direct and inverse computational photolithography is considered. Using this neural network approach, we were able to speed up the computation of a photo mask for a 90nm process technology by two orders of magnitude and achieve simulation accuracy that surpasses standard inverse photolithography (ILT) methods.

Key words: EDA, computational photolithography, neural networks, simulation acceleration.

УДК 004.051
https://doi.org/10.29003/m2460.MMMSEC-2021/26-30

МЕТОДЫ И АЛГОРИТМЫ ВЫПОЛНЕНИЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТЕХНОЛОГИЙ ВИРТУАЛИЗАЦИИ В ЗАДАЧАХ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ

Кондрашев Вадим Адольфович,
к.т.н., заместитель директора,
VKondrashev@frccsc.ru, +7(499)135-43-20[1],

Денисов Сергей Анатольевич,
начальник ЦКП «Информатика»,
SDenisov@frccsc.ru, +7(499)135-43-20[1]

[1] *ФИЦ ИУ РАН, г. Москва*

Аннотация. В работе рассматриваются методы и алгоритмы предоставления высокопроизводительных вычислительных ресурсов в многомашинных комплексах в режиме коллективного пользования для проведения фундаментальных и прикладных исследований в области материаловедения. Предлагаются подходы по применению прикладных интегрированных программных сред (frameworks), предназначенных для решения задач материаловедения с использованием технологий виртуализации и параллельных вычислений.

Ключевые слова: параллельные вычисления, межпроцессное взаимодействие, высокопроизводительные вычисления, кластер.

Современные тенденции развития фундаментальной и прикладной науки в области материаловедения демонстрируют возрастающую потребность в высокопроизводительных вычислительных ресурсах.

Такие интегрированные прикладные программные системы как ABINIT, VASP, Quantum ESPRESSO, LAMMPS, MEEP, MPB, OpenFOAM ориентированы на использование технологий параллельного выполнения заданий на узлах высокопроизводительного кластера [1, 2].

Наиболее экономически эффективным способом организации вычислительных мощностей для широкого спектра задач материаловедения является использование Центров коллективного пользования, имеющих в своем составе высокопроизводительные вычислительные комплексы и предоставляющих вычислительные ресурсы научному сообществу [3]. Организация Центров коллек-

тивного пользования позволяет достаточно эффективно использовать вычислительные ресурсы за счет одновременной загрузки вычислительного оборудования разнородными вычислительными задачами. Предоставление ресурсов ЦКП как облачных сервисов цифровой платформы для научных исследований позволяет научным коллективам получать доступ к широкий спектр вычислительных услуг с использованием единого механизма заказа вычислительных ресурсов, выполнения вычислительных заданий и получения результатов [4].

При этом возникает ряд научно-технических задач, связанных с одновременным выполнением нескольких разнородных вычислительных задач, т.е. задач, требующих различных программных сред исполнения, в одном вычислительном комплексе. Эти задачи в настоящее время решаются за счет применения технологий виртуализации и контейнеризации, а также облачных технологий [5]. С их помощью в инфраструктуре высокопроизводительного вычислительного комплекса создаются индивидуальные вычислительные среды, выделяемые пользователям в виде вычислительных ресурсов.

Предлагается рассмотреть два подхода к созданию индивидуальной вычислительной среды: статический и динамический.

Статическая индивидуальная вычислительной среда строго соответствует согласованному с пользователем объему вычислительных ресурсов и остается неизменной на протяжении всего цикла проводимых пользователем вычислений, этапов моделирования, обработки информации, независимо от потребности в вычислительных ресурсах на том или ином этапе работы пользователя в среде высокопроизводительных вычислений.

Динамическая индивидуальная вычислительная среда способна менять объем вычислительных ресурсов, выделяемых пользователю, в зависимости от потребности в вычислительных ресурсах на том или ином этапе работы пользователя в среде высокопроизводительных вычислений.

В настоящее время происходит активное развитие технологий обеспечения параллельных вычислений и межпроцессного обмена данными.

Значительное место в обеспечении межпроцессного взаимодействия занимает реализация интерфейса обмена данными MPI (Message Passing Interface). Фактически, данный интерфейс де-факто является мировым стандартом и его реализации производятся как в рамках открытых проектов, так и в проприетарных решениях.

В качестве проприетарных решений можно выделить разработки фирм IBM (решение IBM Spectrim MPI, оптимизированное для платформ IBM Power); Intel (решение Intel MPI Library), Microsoft (решение Microsoft MPI). Проприетарные решения оптимизированы для тех или иных аппаратно-программных платформ с целью повышения производительности при межпроцессном взаимодействии и снижению задержек при передаче данных.

Интегрированные программные среды, используемые в задачах материаловедения характеризуются потребностями в поддержке технологий параллельных вычислений MPI, а также технологии ускорения вычислений с использованием графических ускорителей [6]. Развертывание и эксплуатация таких вычислительных сред в высокопроизводительном комплексе представляет собой довольно сложную инженерно-техническую задачу, связанную с детерминированностью вычислительной среды – определенным набором программных модулей и библиотек. Одновременное использование различных версий системного и прикладного ПО для выполнения задач различных пользователей в условиях Центра коллективного пользования также представляет собой сложную, зачастую неразрешимую задачу.

Применение технологий виртуализации позволяет решить большинство из этих проблем при развертывании прикладных программных систем материаловедения и других областей науки и техники [7, 8].

Задачей организации вычислительного процесса в Центре коллективного пользования является разработка методов и алгоритмов развертывания вычислительной среды для каждой научной задачи. При этом вычислительная среда должна поддерживать обеспечение межпроцессного взаимодействия MPI, а также вычисления на специализированных ускорителях [9].

Создание индивидуальной вычислительной среды решается за счет применения технологий виртуализации и контейнеризации, однако обеспечение при этом межпроцессного взаимодействия в задачах параллельной обработки информации требует отдельного научного исследования в виду динамичности виртуальной среды.

Методы и алгоритмы применения индивидуальных вычислительных сред позволят:

– преодолеть ограничения, связанные с детерминированностью вычислительной инфраструктуры высокопроизводительных вычислительных комплексов, что расширит сферу их применения для ре-

шения разнородных научных вычислительных задач в интересах исследователей и научных коллективов;

– обеспечить адаптивность вычислительной среды высокопроизводительных вычислительных комплексов к различным классам задач, что увеличит их загрузку и снизит время простоев, а также эксплуатационные расходы на перенастройку вычислительной среды;

– осуществлять миграцию имеющихся у научных коллективов вычислительных алгоритмов в среду высокопроизводительных вычислений, обеспечивающую высокую эффективность вычислений.

Экспериментальные исследования метода интеграции технологии параллельных вычислений и алгоритмов создания и управления функционированием индивидуальной вычислительной средой производятся на макете системы параллельных вычислений с использованием технологий виртуализации, функционирующем в инфраструктуре Центра коллективного пользования «Высокопроизводительные вычисления и большие данные» (ЦКП «Информатика») ФИЦ ИУ РАН.

Разработанные метод и алгоритмы планируется использовать при проектировании и создании систем управления вычислительным процессом в крупных высокопроизводительных вычислительных комплексах, что позволит увеличить их загрузку, снизить время простоев и эксплуатационные расходы на настройку вычислительной среды.

Применение результатов данной работы направлено на обеспечение одновременного выполнения нескольких разнородных вычислительных задач из различных областей науки и техники с использованием методов параллельной обработки информации с использованием различных программных вычислительных сред в рамках одного высокопроизводительного вычислительного комплекса и предоставление научным коллективам эффективного инструмента для математического моделирования и научных расчетов.

Исследование выполнено при частичной финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта 19-29-03051 мк.

Список использованных источников

1. Абгарян К.К., Журавлев А.А., Ревизников Д.Л. Параллельная обработка данных в задачах компьютерного моделирования высокоскоростного взаимодействия твердых тел // Материалы XX международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам «ИМСППС'2017», Алушта 24–31 Мая, 2017. С. 27–28.

2. Garaev, Timur & Grebennikova, Tatiana & Prilipov, Alexey & Lashkov, Alexander & S.N., Norkina & Timofeeva, Tatiana & S.V., Rubinskiy & G.K., Sadikova & Odnovorov, Artem & M.M., Zhuravleva. (2021). Studying the effect of amino acid substitutions in the M2 ion channel of the influenza virus on the antiviral activity of the aminoadamantane derivative.

3. Зацаринный А.А., Абгарян К.К. Актуальные проблемы создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках цифровой трансформации общества // В сборнике: Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Материалы II международной конференции. 2020. С. 8–13.

4. Кондрашев В.А., Денисов С.А. Интерфейсы научных сервисов системы моделирования новых материалов на цифровой платформе // В сборнике: Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Материалы II международной конференции. 2020. С. 22–25.

5. The Cloud is Reshaping High Performance Computing and Engineering Simulations. Avaliable at: https://www.theubercloud.com/how-it-works (date of application 01.06.2021).

6. K. I. Volovich, S. A. Denisov, and S. I. Malkovsky. Formation of an Individual Modeling Environment in a Hybrid High-Performance Computing System // Russian Microelectronics, 2020, Vol. 49, No. 8, pp. 580–583.

7. M. de Bayser and R. Cerqueira, “Integrating MPI with Docker for HPC,” 2017 IEEE International Conference on Cloud Engineering (IC2E), 2017, pp. 259–265, doi: 10.1109/IC2E.2017.40.

8. Azab A., “Enabling Docker Containers for High-Performance and Many-Task Computing,” 2017 IEEE International Conference on Cloud Engineering (IC2E), 2017, pp. 279-285, doi: 10.1109/IC2E.2017.52.

9. Волович К.И., С.А. Денисов. Основные научно-технические проблемы применения гибридных HPC кластеров в материаловедении // Материалы I международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. МММЭК-2019». Москва. МАКС Пресс (2019). С. 15–18.

METHODS AND ALGORITHMS FOR PARALLEL CALCULATIONS USING VIRTUALIZATION TECHNOLOGIES IN MATERIALS SCIENCE PROBLEMS

V. Kondrashev, S. Denisov

Abstract. The paper discusses methods and algorithms for the provision of high-performance computing resources in multicomputer systems in a shared mode for fundamental and applied research in the field of materials science. Approaches are proposed for the application of applied integrated software environments (frameworks) designed to solve material science problems using virtualization and parallel computing technologies.

Keywords: parallel computing, interprocess communication, high performance computing, cluster.

https://doi.org/10.29003/m2461.MMMSEC-2021/31-34

ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛИ НА ОСНОВЕ ИСКУССТВЕННОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР

Уварова Ольга Владимировна,
м.н.с.[1], olga25v@gmail.com

Уваров Сергей Игоревич,
м.н.с.[1], seruv25@gmail.com

[1] *Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук (ФИЦ ИУ РАН), Россия, 119333, Москва, ул. Вавилова, д. 44*

Аннотация. В работе рассматривается механизм построения модели на основе искусственной нейронной сети для получения значений когезионной энергии системы атомов. Когезионная энергия позволяет рассчитать полную энергию системы атомов и является одной из важнейших характеристик структуры. Вычислительный эксперимент проводится для однокомпонентных кристаллических структур Si, Ge и C.

Ключевые слова: кристаллическая структура, когезионная энергия структуры, нейронная сеть, потенциал Терсоффа, машинное обучение.

Введение

В настоящее время нейронные сети являются одним из активно развивающихся направлений в разработке систем искусственного интеллекта. С помощью искусственных нейронных сетей возможно распознавание сложных закономерностей в данных, что является распространенной задачей для различных научных направлений. Так, в материаловедении, необходимость получения значений характеристик структуры является важной задачей, скорость и точность решения которой влияет на качество и быстроту моделирования многослойных полупроводниковых структур.

Постановка задачи и метод решения

Целью настоящей работы является построение модели на основе искусственной нейронной сети для получения значения энергии взаимодействия атомов внутри структуры. Полная энергия системы E формируется как совокупность вкладов энергий каждого атома структуры E_i [1].

$$E = \sum_i E_i .$$

Расчет энергии возможен с использованием потенциалов межатомного взаимодействия. Так, с помощью потенциала Терсоффа можно осуществлять расчет энергии структур с ковалентным типом связи, но этот процесс осложняется необходимостью подбора большого числа параметров потенциала Терсоффа (для однокомпонентных соединений – 11 параметров, для двухкомпонентных – более 30 параметров) [1].

Еще одним способом расчета энергии системы является использование машиннообучаемых потенциалов, например, потенциала GAP (Gaussian Approximation Potential) [2].

В данной работе рассматривается построение нейросетевой модели для получения значения энергии однокомпонентных кристаллических структур. Нейронные сети способны продемонстрировать большую точность, чем модели машинного обучения и могут использовать для обучения большее признаковое пространство.

В качестве элементов вектора признаков использовались следующие характеристики структуры.

1. Координаты взаимодействующих атомов.
2. Величины ϕ, θ и θ_0, полученные в результате следующего преобразования [3]:

$$r \equiv \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \rightarrow \begin{array}{c} \phi = \arctan(\frac{y}{x}) \\ \theta = \arccos(\frac{z}{|r|}) \\ \theta_0 = \frac{|r|}{r_0} \end{array}$$

где $r_0 > \frac{r_{cut}}{\pi}$, а r_{cut} – радиус отсечения, выбираемый для каждой кристаллической структуры.

3. Значение постоянной решетки рассматриваемой структуры.
4. Указание на тип взаимодействующих атомов.

Для решения задачи регрессии использовалась нейронная сеть прямого распространения - многослойный персептрон (MLP). В качестве активационной функции скрытого слоя использовалась функция гиперболического тангенса. Такая функция имеет нелинейную природу, что позволяет группировать нейроны в несколько слоев.

Для оценки качества полученной сети применялись метрики средней квадратичной ошибки $MSE = \frac{1}{n}\sum(y_{true} - y_{pred})^2$.

Выводы

В рамках данной работы была построена модель на основе искусственной нейронной сети для получения значения энергии структур Si, C и Ge. Наилучшая точность *MSE* = 0.005 при использовании нейронной сети MLP была достигнута с использованием гиперболического тангенса в качестве активационной функции и алгоритма с ограниченной памятью L-BFGS в качестве оптимизационного алгоритма.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-29-03051 мк и гранта РФФИ № 19-08-01191 А. При проведении расчетов использовался вычислительный кла стер ФИЦ ИУ РАН.

Список использованных источников

1. Abgaryan K.K., Volodina O.V., Uvarov S.I. Mathematical modeling of point defect cluster formation in silicon based on molecular dynamic approach // Modern Electronic Materials. 2015. V. 1, N 3. P. 82 – 87. DOI: 10.1016/j.moem.2016.03.001.
2. Уварова О.В., Уваров С.И. Использование машиннообучаемых потенциалов межатомного взаимодействия для изучения свойств кристаллических структур. Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2020;23(4).
3. Behler J., Parrinello M. Generalized neural-network representation of high-dimensional potential-energy surfaces //Physical review letters. – 2007. – Т. 98. – №. 14. – С. 146401.
4. Representing high-dimensional potential-energy surfaces for reactions at surfaces by neural networks So¨nke Lorenz a, Axel Groß b,*, Matthias Scheffler.
5. Круглов И.А. Поиск новых соединений, изучение их стабильности и свойств с использованием современных методов компьютерного дизайна материалов //Дисс. канд. физ-мат. наук, Москва – 2018.

CONSTRUCTION OF NEURAL NETWORK MODEL FOR STUDYING OF CRYSTAL STRUCTURES PROPERTIES

Uvarova Olga Vladimirovna, *Junior Researcher*[1]
e-mail: olga25v@gmail.com

Uvarov Sergey Igorevich*, Junior Researcher*[1]
e-mail: seruv25@gmail.com

[1] *Federal Research Centre «Computer Science and Control» (FRCCSC) of the Russian Academy of Sciences, (FRC CSC RAS). Vavilov st. 44, 119333 Moscow, Russia*

Abstract. The paper considers a mechanism for constructing a model based on artificial neural network for obtaining the values of the cohesive energy of a system of atoms. Cohesive energy allows for calculation of total energy of system. It is one of the most important characteristics of a structure. A computational experiment is carried out for one-component crystal structures of Si, Ge and C.

Key words: crystal structure, cohesive energy of the structure, neural network, Tersoff potential, machine learning.

https://doi.org/10.29003/m2462.MMMSEC-2021/34-37

АНАЛИЗ ТЕХНИЧЕСКИХ ДЕТАЛЕЙ РЕАЛИЗАЦИИ ПРОГРАММНОГО И ПОЛЬЗОВАТЕЛЬСКОГО ИНТЕРФЕЙСОВ ДЛЯ УПРАВЛЕНИЯ МОДЕЛЯМИ НЕЙРОМОРФНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ

Щербаков Василий Сергеевич,
аспирант[1]*,*
basil-scherbakov@ya.ru, +7 (930) 893-88-10

[1] *МАИ, г. Москва*

Аннотация. В работе рассматриваются основные аспекты практической реализации программного и пользовательского интерфейсов для управления моделями нейроморфных вычислительных систем.

Ключевые слова: Нейроморфная сеть, пользовательский интерфейс, программных интерфейс, распознавание образов.

Введение

В рамках работы над интеграционной платформой многомасштабного моделирования нейроморфных систем [1] возникла задача разработки программного и пользовательского интерфейсов для системы нейроморфного моделирования [2]. Ранее рассматривались теоретические основы, архитектура программного комплекса, а также спектр технологий, позволяющих разработать такую систему, с учетом указанных требований [3]. В данной работе рассматриваются проблемные моменты, имевшие место быть при разработке, способы их решения, а также подходы, упрощающие разработку.

Ключевые моменты разработки

- Проблема зависимости от среды (необходимость наличия специфического ПО для запуска программного комплекса) решалась с помощью подхода виртуализации с применением технологии docker.
- Для решения проблем передачи данных между различными компонентами пользовательского интерфейса использовались шаблоны проектирования: управление состоянием(state management) и flux, при котором любое изменение данных пользователем влечет за собой отрисовку интерфейса.
- Архитектура комплекса подразумевает взаимодействие с удаленным сервером по протоколу ssh, однако зависимость от внешней среды несет ряд проблем, особенно при отладке работы в процессе разработки, для решения этой проблемы использовалась подсистема ОС Windows WSL(Windows sub system for linux). Данная технология представляет собой слой совместимости для запуска linux приложений. Подсистема использовалась для запуска ssh сервера с развернутой нейроморфной системой.
- Одним из ключевых требованием к комплексу является построение интерактивной системы ввода образов. Необходимо было построить компонент для возможности в режиме реального времени задавать шаблоны распознавания. Для решения данной задачи использовался HTML5 элемент Canvas.

Результаты

Финальная версия пользовательского интерфейса с учетом решения вышеописанных проблем представлена на рисунках 1–3.

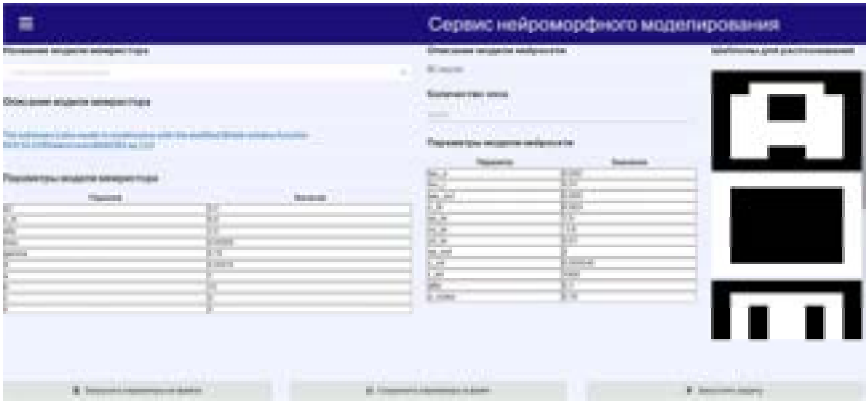

Рис. 1. Страница запуска задачи

Страница запуска задачи состоит из различных полей ввода, позволяющих выбрать математическую модель мемристора, указать значения ее параметров, указать значения параметров нейросети и задать необходимые изображения в интерактивном режиме.

Страница просмотра протоколов выполнения запущенных задач (рис. 2) представляет собой список задач, выбрав любую из которых, можно ознакомиться с протоколом ее выполнения.

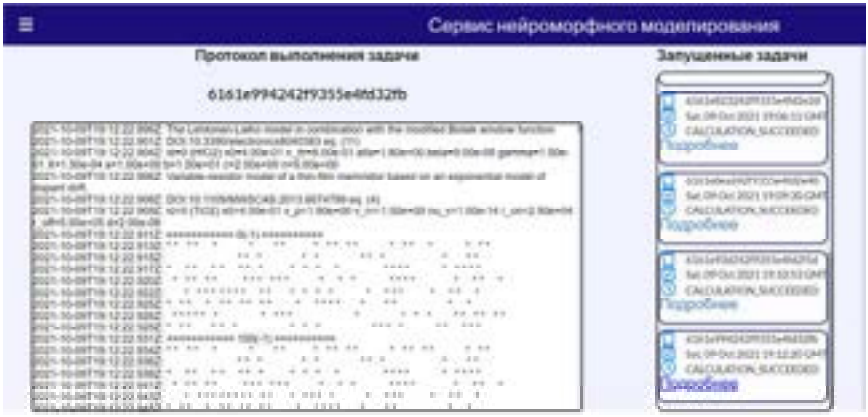

Рис. 2. Страница просмотра протокола выполнения задачи

На странице просмотра результатов распознавания (рис. 3) можно ознакомиться с результатами распознавания определенных эпох, чтобы оценить весь процесс в динамике.

Рис. 3. Страница просмотра результатов распознавания

Выводы

Работа сервиса была протестирована на различных вариантах входных данных. В ходе ручного тестирования были выявлены и исправлены основные проблемы, описанные выше. Несмотря на кажущуюся простоту разработки требуемой системы, возник ряд моментов, требующих детального анализа. Опыт решения этих проблем может быть полезен при разработке схожих программных комплексов.

В итоге, исходный код серверного приложения был скомпилирован и подготовлен к развертыванию на сервере.

Литература

1. Абгарян К.К, Гаврилов Е.С. «Интеграционная платформа для многомасштабного моделирования нейроморфных систем», «Информатика и ее применения», том 14, вып. 2, 2020. С. 104–110.
2. Морозов А.Ю., Абгарян К.К., Ревизников Д.Л. Математическое моделирование самообучающейся нейроморфной сети, основанной на наноразмерных мемристивных элементах с 1T1R-кроссбар-архитектурой // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2020;23(3):186–195.
3. Щербаков В.С. Разработка программного и пользовательского интерфейсов для управления моделями нейроморфных вычислительных систем // Гагаринские чтения – 2021: XLV Международная молодёжная научная конференция: Сборник тезисов докладов: М.; Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), 2019. – С. 476–477.

ANALYSIS OF THE DETAILS OF THE IMPLEMENTATION OF APPLICATION PROGRAMMING INTERFACE AND USER INTERFACE FOR MANAGING MODELS OF NEUROMORPHIC COMPUTING SYSTEMS

V.S. Scherbakov

Abstract. The paper discusses the main aspects of the practical implementation of software and user interfaces for managing models of neuromorphic computing systems.

Keywords: neuromorphic network, user interface, application programming interface, patterns recognition.

https://doi.org/10.29003/m2463.MMMSEC-2021/38-42

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ МУЛЬТИФИЗИЧЕСКИХ И МНОГОУРОВНЕВЫХ РАСЧЕТОВ

Абгарян Каринэ Карленовна,
г.н.с., д.ф.-м.н., заведующая отделом[1], заведующий кафедрой[2]
kristal83@mail.ru,

Гаврилов Евгений Сергеевич,
научный сотрудник[1], старший преподаватель[2],
eugavrilov@gmail.com

[1] *ФИЦ ИУ РАН, г. Москва*
[2] *МАИ, г. Москва*

Аннотация. Доклад посвящен демонстрации основных идей и подходов, которые были использованы при построении программного комплекса для проведения мультифизических и многоуровневых расчетов. Такой комплекс программ применяется в качестве информационной поддержки для решения многомасштабных проблем в области микроэлекроники.

Ключевые слова: программный комплекс, мультифические и многоуровневые расчеты, многомасштабное моделирование, вычислительный модуль, модуль сценариев.

Введение

Решение современных проблем, связанных с многомасштабным моделированием в области микроэлектроники из-за своей огромной ресурсоемкости, требует постоянного увеличения вычислительных возможностей аппаратных средств и обновления высокоэффективных программных решений. При этом исследование многомасштабных научных проблем, включающих в себя явления несопоставимых пространственных и/или временных масштабов невозможно без учета всех факторов, играющих ключевые роли в таких задачах. Например, к таким многомасштабным проблемам относятся – имитационное моделирование работы нейроморфорфной сети [1], оптимизация датчиков магнитных и температурных полей на основе наноразмерных гетероструктур «кремний на изоляторе» [2] и многие другие. Для решения таких проблем необходимо в рамках одной вычислительной задачи рассчитать несколько различных, сопряженных между собой физических процессов с разных масштабных уровней.

Программный комплекс

В настоящее время для решения задач в области микроэлектроники активно разрабатываются программные комплексы, такие как коммерческие симуляторы TCAD Sentaurus Synopsys[3] и TCAD Silvaco[4]. Однако, несмотря на большие возможности у них есть свои ограничения, связанные в том числе с тем, что существующие библиотеки моделей электронных компонентов, используемые в них, очень быстро устаревают и не могут в полной мере применяться для разработки новых устройств. Кроме того, их сложно использовать для предсказательного моделирования, то есть для прогнозирования того, что в них изначально не заложено. С другой стороны, в настоящее время активно развиваются пакетные приложения в области вычислительного моделирования наносистем, с помощью которых стало возможным проводить расчеты на разных масштабных уровнях с высокой степенью точности. В том числе проводить квантово-механические расчеты на атомно-кристаллическом уровне моделирования с применением пакетов Vasp [5], Quantum ESPRESSO (QE) [6] и др., на наноуровне выстраивать молекулярно-динамические расчеты пакетами LAMMPS [7], Nanolab [8] и др.

Для решения практических задач многомасштабного моделирования в области микроэлектроники актуальным является разработка программных комплексов, развернутых на высокопроизводительных кластерах, которые предоставляют исследователям возможность проводить многоуровневые и мультифизические расчеты, используя как собственные программные разработки, так и пакеты прикладных программ.

В данной работе представлен программный комплекс для информационной поддержки мультифизических и многоуровневых расчетов, базирующийся на технологии многомасштабного моделирования, описанной в [9]. Согласно данной технологии физико-математическим моделям, отнесенным к соответствующим масштабным уровням, поставлены в соответствие информационные структуры – базовые модели-композиции (композиционные объекты). Для описания базовых моделей-композиций и технологии построения многомасштабных композиций используется теоретико-множественный аппарат [9, 10], позволяющий передать вычислительную сущность соответствующих математических моделей (объединяет данные и методы их обработки). Базовые модели-композиции, классифицированные с учетом масштабной иерархии, применяются для построения

композиций и многомасштабных композиций – вычислительных аналогов многомасштабных моделей.

Необходимо отметить, что при построении программного комплекса для решения конкретных задач, используются как программные модули собственной разработки, в которых реализованы оригинальные численные решения созданных физико-математических моделей, так и готовые программные модули. В его основе лежит интеграционная платформа для многомасштабного моделирования, которая объединяет информационные потоки на разных масштабных уровнях. При решении конкретной задачи, такой как имитационное моделирование работы нейроморфной сети [1] или оптимизация датчиков магнитных и температурных полей на основе наноразмерных гетероструктур «кремний на изоляторе [2], выделяются конкретные уровни моделирования, которые необходимо задействовать, строится многомасштабная композиция- информационный аналог многомасштабной физико-математической модели. Для программной реализации на базе интеграционной платформы из имеющихся программных модулей формируется вычислительный комплекс.

Перечислим пользовательские роли в интеграционной платформе многомасштабного моделирования:

– разработчик вычислительных модулей, реализует расчетный модуль или осуществляет конфигурирование прикладного пакета;

– системный разработчик создает Web-сервисы для вычислительного модуля и его интеграция в платформу;

– разработчик расчетных сценариев создает сценарии в среде моделирования;

– ученый-исследователь прикладной области запускает расчетные сценарии с различными параметрами и анализирует результаты.

Вычислительный модуль представляет собой исполняемый файл (консольное приложение) на Linux или Windows, работающий в пакетном режиме и выполняющий расчеты по заданным параметрам. Примеры: пакет Vasp, Lammps, Quantum Espresso, собственные реализации на C++, Fotran. Адаптер к модулю – сервисы REST, обеспечивающие универсальный программный интерфейс для ввода параметров, запуска и захвата результатов вычислений.

Если вычислительному модулю требуются справочные данные, адаптер предоставляет их из базы данных, либо из своих файлов-ресурсов. Метаданные модуля содержат информацию о названиях,

типах входных параметров и результатов для дальнейшего использования в сценариях и передачи данных между модулями.

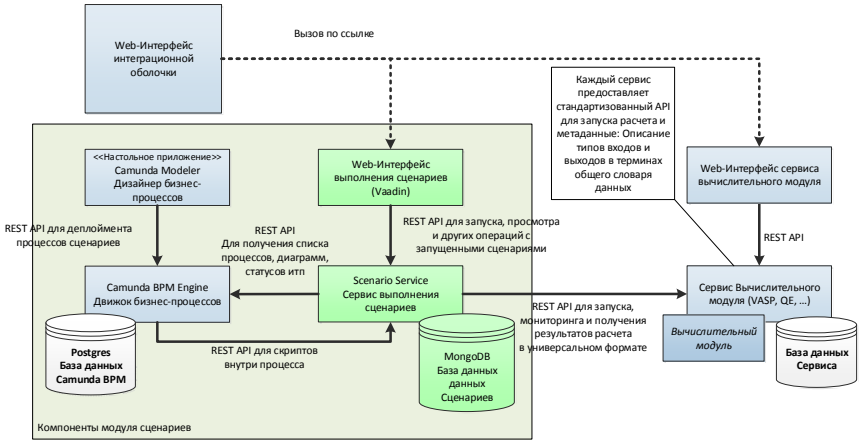

Рис. 1. Компоненты архитектуры модуля сценариев

В дальнейшем планируется наращивание встраиваемых в интеграционную платформу расчетных модулей, что позволит существенно расширить класс решаемых задач и возможности реализации программных решений в области вычислительного материаловедения

Выводы

Создание кроссплатформенной, расширяемой интеграционной системы, предназначенной для решения задач многомасштабного моделирования на высокопроизводительных вычислительных кластерах позволяет оперативно создавать программные комплексы для решения конкретных задач в области материаловедения.

Работа выполнена при поддержке РФФИ гранты № 19-29-03051 мк и №19-08-01191 А.

Список использованных источников

1. Абгарян К.К., Гаврилов Е.С. Интеграционная платформа для многомасштабного моделирования нейроморфных систем// Информатика и ее применение. 2020. №2, стр.104-111. https://elibrary.ru/item.asp?id=43946751. https://doi.org/10.14357/19922264200215.

2. V.N. Mordkovicha, K.K. Abgaryanb, D.L. Reviznikov and A.V. Leonov. Simulation of Hall Field Elements Based on Nanosized Silicon-on-Insulator Heterostructures/ ISSN 1063-7397, Russian Microelectronics, 2021, Vol. 50, No. 8, pp. 1–6. © Pleiades Publishing, Ltd., 2021.

3. https://www.synopsys.com/ru-ru/silicon/tcad.html
4. https://www.silvaco.com/tcad/
5. https://www.vasp.at
6. https://www.quantum-espresso.org
7. https://lammps.org
8. https://www.nano-lab.com
9. Абгарян К.К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. – М.: МАКС Пресс. 2017. 284 с.
10. Абгарян К.К. Информационная технология построения многомасштабных моделей в задачах вычислительного материаловедения // «Издательство «Радиотехника», «Системы высокой доступности». 2018. Т. 15. № 2. С. 9–15.

SOFTWARE PACKAGE FOR MULTIPHYSICS AND MULTI-LEVEL CALCULATIONS

Abgaryan Karine Karlenovna,
doctor of physical and mathematical Science, chief Researcher,
head of the department[1]
head of the department[2]
kristal83@mail.ru.

Gavrilov Evgeny Sergeyevich,
researcher[1],
senior lecturer[2]
eugavrilov@gmail.com

[1] *Federal Research Centre "Computer Science and Control" (FRCCSC), of the Russian Academy of Sciences, (FRC CSC RAS). Vavilov st. 44, 119333 Moscow, Russia*
[2] *Moscow Aviation Institute (National Research University), Volokolamskoe shosse, 4, 125993, Moscow, Russia (MAI)*

Abstract. The report is devoted to demonstration of the main ideas and approaches, which were used in the construction of a software package for multiphysics and multilevel calculations. Such a software package is used as information support for solving multiscale problems in the field of microelectronics.

Key words: software package, multiphysics and multilevel calculations, multiscale modeling, computational module, scenario module.

2. В

ПРОБЛЕМЫ РАЗВИТИЯ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ КВАНТОВОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР

УДК 538.91
https://doi.org/10.29003/m2464.MMMSEC-2021/44-45

ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЁТ ТРАНСПОРТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ДВУМЕРНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ

Савельев Владислав Владимирович,
асп., 1 год[1],
savelevvladv@mail.ru +7 (962)513-90-39

Хазанова Софья Владиславовна,
к.ф.-м.н., доцент[1],
khazanova@phys.unn.ru, +7 (902) 304-71-48

[1]*ННГУ им. Н.И. Лобачевского*

Аннотация. В данной работе численным методом матрицы переноса рассчитываются вольт-амперные характеристики графеновых структур со свехпериодом.

Ключевые слова: графен, двумерные материалы, матрица переноса.

Введение

Основными требованиями, предъявляемыми к современным электронным устройствам, являются минимальные размеры компонентов, быстродействие и низкое энергопотребление, поэтому элементная база таких устройств должна основываться на материалах с пониженной размерностью и высокой подвижностью носителей заряда. Кроме того, внедрение структур с пониженной размерностью позволяет использовать квантовые эффекты, такие как туннелирование, осцилляции проводимости в магнитном поле. Большой интерес в последнее время вызывает создание двухмерных материалов [1]. В частности, графен – монослой атомов углерода, обладающий рядом уникальных электрофизических свойств. При этом недостатком изолированного монослоя графена является отсутствие ширины запрещённой зоны, необходимой для управления электронным транспортом приборов.

Расчёт транспортных характеристик

Создание ограниченных структур пониженной размерности (полос, колец, спиралей) из графена с различной геометрией приводит к возникновению энергетической щели [2], что делает возможным реализацию быстродействующих полупроводниковых приборов нового поколения на его основе. При этом, наличие ка-

ких либо неоднородностей в профиле потенциала, обусловленных примесью или потенциалом подложки, может приводить к изменению зазоров энергетического спектра. Согласно нашим исследованиям, наблюдается немонотонная зависимость энергетических щелей от количества и размера дефектов, имеющихся в графеновом нанокольце. Таким образом, возникает возможность дополнительного управления электрофизическими характеристиками приборов на основе данных структур. Сопротивление графеновой сверхрешётки, как величина, обратная проводимости, имеет немонотонный осциллирующий вид [3].

В качестве исследуемых структур рассматриваются периодические структуры из графена с периодом порядка десяти нанометров. В данной работе численным методом матрицы переноса рассчитываются вольт-амперные характеристики. Исследуется влияние числа, размера и характера распределения дефектов на величину зазоров в энергетическом спектре на транспортные характеристики структуры.

Выводы

В работе численным методом матрицы переноса рассчитаны вольт-амперные характеристики графеновых структур со свехпериодом.

Список использованных источников

1. Ferrari and other, Science and technology roadmap for graphene, related two-dimensional crystals, and hybrid systems, *Nanoscale*, 7, 4598–4810, 2015.

2. Vitaly V. Porsev and other, Expanded hexagonal nanohelicenes of zigzag morphology under elastic strain: A quantum chemical study, *Carbon*, 152, P. 755-765, 2019.

3. Dubey S. [et al], Tunable Superlattice in Graphene To Control the Number of Dirac Points, *Nano Letters*. – 2013. – Vol. 13, № 9. – P. 3990–3995.

TRANSPORT CHARACTERISTICS NUMERICAL CALCULATION OF TWO-DIMENSIONAL NANOMATERIALS

V.V. Saveliev, S.V. Khazanova

Abstract. In this work, the current-voltage characteristics of graphene structures with an superperiod are calculated by the transfer matrix numerical method.

Keywords: graphene, two-dimensional materials, transfer matrix.

https://doi.org/10.29003/m2465.MMMSEC-2021/46-47

MAGNETIC FIELD SENSING AND ENERGY HARVESTING WITH MAGNETOELECTRIC BIDOMAIN $LINBO_3$-BASED COMPOSITES

N.A. Sobolev*[1,2]*, A.V. Turutin[2], J.V. Vidal[1,3], I.V. Kubasov[2], A.M. Kislyuk[2], S.P. Kobeleva[2], D.A. Kiselev[2], A.S. Bykov[2], A.A. Temirov[2], R.N. Zhukov[2], M.D. Malinkovich[2], Y.N. Parkhomenko[2], A.L. Kholkin[2,3]

[1] *Department of Physics and i3N, University of Aveiro, 3810-193 Aveiro, Portugal*

[2] *National University of Science and Technology MISiS, 119049 Moscow, Russia*

[3] *Department of Physics and CICECO, University of Aveiro, 3810-193 Aveiro, Portugal*

** Corresponding author: sobolev@ua.pt*

With the recent thriving of low-power electronic microdevices and sensors, the development of components capable of scavenging environmental energy has become imperative. We have developed a laminar composite based on bidomain LiNbO3 (b-LN) / metglas. This low-frequency, lead-free, and high-temperature MME system can scavenge power simultaneously from both low-level ambient vibration and magnetic field sources. With an appropriate storage circuit, it should thus be able to support ultralow-power electronic components. Due to its very large voltage transduction ratio, an attractive option could be a self-powered sensor used simultaneously as a vibration / magnetic sensor and a power generator when inactive.

At the same time, b-LN metglas composites can detect low magnetic fields at room temperature with a record value of sensitivity to the magnetic field as low as 200 fT at a frequency of ca. 7 kHz. Furthermore, ME tuning-fork-shaped composite structure based on a b-LN / metglas has shown a sensitivity down to 3 pT under real-life conditions at a low resonance frequency of ca. 300 Hz.

Importantly, the lead-free nature of LN meets the demands of the RoHS directive which assumes the restriction of the use of certain hazardous substances in electrical and electronic equipment. Thus, applications based on LN can substitute commonly used PZT ceramics. The b-LN crystals demonstrated excellent properties in the application of magnetoelectric magnetic sensors, vibration sensors, energy harvesters, actuators, position and magnetic field sensors.

This work was supported by the project i3N, UIDB/50025/2020 & UIDP/50025/2020, financed by national funds through the FCT/MEC, by the Russian Science Foundation through project No. 21-19-00872, and by the European project H2020-MSCA-RISE-2017-778308-SPINMULTIFILM.

References

[1] J.V. Vidal, A.V. Turutin, I.V. Kubasov, A.M. Kislyuk, M.D. Malinkovich, Y.N. Parkhomenko, S.P. Kobeleva, N.A. Sobolev, A.L. Kholkin. IEEE Trans. Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control, Vol. 67 (2020) 1219.

[2] A.V. Turutin, J.V. Vidal, I.V. Kubasov, A.M. Kislyuk, D.A. Kiselev, M.D. Malinkovich, Y.N. Parkhomenko, S.P. Kobeleva, A.L. Kholkin, and N.A. Sobolev. J. Magn. Magn. Mater. Vol. 486 (2019) 165209.

[3] J.V. Vidal, A.V. Turutin, I.V. Kubasov, A.M. Kislyuk, M.D. Malinkovich, Y.N. Parkhomenko, S.P. Kobeleva, O.V. Pakhomov, N.A. Sobolev and A.L. Kholkin. IEEE Trans. Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control, Vol. 66 (2019) 1480.

[4] I.V. Kubasov, A.M. Kislyuk, A.V. Turutin, A.S. Bykov, D.A. Kiselev, A.A. Temirov, R.N. Zhukov, N.A. Sobolev, M.D. Malinkovich, and Y.N. Parkhomenko. Sensors, Vol. 19 (2019) 614.

[6] A.V. Turutin, I.V. Kubasov, A.M. Kislyuk, M.D. Malinkovich, S.P. Kobeleva, Yu.N. Parkhomenko, N.A. Sobolev. Utility model “Magnetoelectric sensor of magnetic fields”. RU 188 677 U1. G01R 33/00 (2019.02). Priority from 08.02.2019.

[7] A.V. Turutin, J.V. Vidal, I.V. Kubasov, A.M. Kislyuk, M.D. Malinkovich, Y.N. Parkhomenko, S.P. Kobeleva, O.V. Pakhomov, A.L. Kholkin, N.A. Sobolev. Appl. Phys. Lett., Vol. 112 (2018) 262906.

[8] A.V. Turutin, J.V. Vidal, I.V. Kubasov, A.M. Kislyuk, M.D. Malinkovich, Y.N. Parkhomenko, S.P. Kobeleva, A.L. Kholkin, N.A. Sobolev. J. Phys. D: Appl. Phys., Vol. 51 (2018) 214001.

[9] J.V. Vidal, A.V. Turutin, I.V. Kubasov, M.D. Malinkovich, Y.N. Parkhomenko, S.P. Kobeleva, A.L. Kholkin, N.A. Sobolev. IEEE Trans. Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control, Vol. 64 (2017) 1102.

УДК 004.3:004.9
https://doi.org/10.29003/m2466.MMMSEC-2021/48-48

STRAIN-CONTROLLED MORPHOLOGY AND OPTICAL PROPERTIES OF GOLD NANOPARTICLES GROWN BY PULSED LASER DEPOSITION

Qiaomu Yao and Peter K. Petrov*

Department of Materials, Imperial College London,
Prince Consort Road, London SW7 2AZ, UK

Gold nanoparticle (AuNP)decorated thin films are used in many applications such as photocatalysis, biosensing and solar cell etc. The morphology and structure of AuNPs is one important factor determining the functionality of the sample. In this report, AuNPs were deposited on the surface of a perovskite thin film, strontium niobate (SNO), using pulsed laser deposition (PLD). Structures were fabricated in a high-vacuum and high-temperature environment. AuNPs exhibited a dramatic variation in their morphologies and the degree of crystallisation depending on whether they were deposited on SNO thin films grown on magnesium oxide (SNO/MgO) or strontium titanate (SNO/STO) substrates. On SNO/MgO, the Au aggregates to form large NPs with an average size of up to 3500 nm2. These AuNPs are highly crystalline with sharp edges and corners. When deposited on SNO/STO, the average size of AuNPs shrinks dramatically to 250 nm2. This shrinking in the average size is then compensated with a rise in the NPs' number density. The AuNPs on SNO/STO are of round shape which indicates a decrease in the extent of crystallisation. X-ray diffraction (XRD) and scanning electron microscopy (SEM) were used to characterise all samples and strain analysis was used to explain the growth mechanism and the crystallinity of AuNPs. Ellipsometry in the Visible-Near Infrared (Vis-NIR) region was used to characterise the optical response of all samples. AuNP-decorated SNO/MgO and SNO/STO thin films exhibit different optical properties with only AuNP-decorated SNO/MgO samples showing AuNP dependant epsilon-near-zero behaviour. These results can be used for the design and development of SERS and photocatalytic devices with enhanced performance.

3. С

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В СТРУКТУРНОМ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ (МНОГОУРОВНЕВЫЕ, МНОГОМАСШТАБНЫЕ МОДЕЛИ, ИМИТАЦИОННЫЕ МОДЕЛИ И Т. Д.)

УДК 004.3:004.9
https://doi.org/10.29003/m2467.MMMSEC-2021/50-53

МНОГОМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И МЕТОДЫ АНАЛИЗА ДАННЫХ В ЗАДАЧАХ МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ

***Абгарян Каринэ Карленовна*[1,2,3]**
д.ф.-м.н., г.н.с., зав. отделом ФИЦ ИУ РАН,
e-mail: kristal83@mail.ru

[1]*Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук (ФИЦ ИУ РАН), Россия, 119333,Москва, ул. Вавилова, д. 44*

[2] *Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет) (МАИ), Россия, 125993, Москва, Волоколамское шоссе, д. 4*

[3] *Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, (Факультет ВМК), Россия, 119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, стр. 52*

Аннотация. Доклад посвящен проблеме интеграции методов многомасштабного моделирования и анализа данных для создания прогностических моделей, базирующихся на подходах, основанных на теоретическом физико-математическом моделировании с применением математического аппарата анализа данных.

Ключевые слова: многомасштабное моделирование, методы анализа данных, физико-математическое моделирование, микроэлектроника, предсказательное моделирование.

Введение

Основная часть математических моделей, применяемых для изучения физических процессов и явлений предназначена для их описания в одном пространственно-временном масштабе. Исследования многомасштабных научных проблем, включающих в себя явления несопоставимых пространственных и/или временных масштабов в области микроэлектроники невозможно без учета всех факторов, играющих ключевые роли в таких задачах. К таким проблемам можно отнести имитационное моделирование работы нейроморфорфной сети в основе которой лежат мемристоры, моделирование процессов формирования и разрушения проводящих каналов в этих элементах, изучение процессов теплопереноса в многослойных наноструктурах, моделирование процессов формирования радиационных дефектов в гетероструктурах и многие другие.

Интеграция методов многомасштабного моделирования и анализа данных

Математическая технология многомасштабного моделирования, формально описанная в терминах теории множеств, позволяет провести исследование этих проблем, объединив в рамках одной модели, имеющиеся на разных масштабных уровнях модели, и выстроив взаимосвязи между ними, получить новые результаты в области предсказательного моделирования. Однако, одно многомасштабное моделирование часто не дает возможности эффективно комбинировать большие наборы данных из разных источников и с разных масштабных уровней.

Технологии машинного обучения активно развиваются в последнее десятилетие. В том числе ведутся исследования по их применению в задачах материаловедения. Известно, что получение наиболее точных эмпирических данных с помощью первопринципных расчетов связано с существенной вычислительной сложностью, в связи с чем рассматриваемые системы как правило ограничены размерами в сотни, а иногда и тысячи атомов. Однако, для предсказательного моделирования большинства процессов в микроэлектронике такого количества недостаточно и стоит задача используя минимальное количество эмпирических данных получать максимально точные характеристики и параметры изучаемых процессов. С другой стороны, бурно развивающиеся классические методы машинного обучения, применяемые в том числе и в области микроэлектроники, часто игнорируют фундаментальные законы физики, что приводит к некорректным задачам или нефизичным решениям.

Машинное обучение и многомасштабное моделирование могут дополнять друг друга, создавая надежные прогностические модели, базирующиеся на подходах, основанных на теоретическом физико-математическом моделировании с применением математического аппарата анализа данных. Сегодня можно говорить о том, что многомасштабное моделирование – это успешная стратегия интеграции мультимасштабных, многофизических данных, которая позволяет раскрыть механизмы, объясняющие появление функциональных зависимостей при изучении физических явлений и процессов. Работоспособность таких подходов демонстрируется на примере решения задач по многомасштабному моделированию нейроморфных систем, построенных на мемристивных элементах и расчете эффективного коэффициента теплопроводности в многослойных наноструктурах.

Выводы

Развивающиеся в настоящее время гибридные подходы демонстрируют, что применение методов машинного обучения позволяет проводить адаптированные первопринципные расчеты для систем из миллионов атомов на существующих сегодня вычислительных комплексах за приемлемое время.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-29-03051 мк и гранта РФФИ №19-08-01191 А.

Список использованных источников

1. Абгарян К.К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. – М.: МАКС Пресс. 2017. 284 с.

2. Абгарян К.К. Информационная технология построения многомасштабных моделей в задачах вычислительного материаловедения // Издательство «Радиотехника», «Системы высокой доступности». 2018. Т. 15. № 2. С. 9–15.

3. Абгарян К.К., Ревизников Д.Л., Бажанов Д.И. Многомасштабное моделирование многоуровневых элементов памяти для создания нейроморфных сетей. // Наноиндустрия. 2020. Т. 13. 4s, Спецвыпуск. С. 587.

4. Morozov A. Yu., Abgaryan K. K., Reviznikov D. L. Mathematical model of a neuromorphic network based on memristive elements // Chaos, Solitons & Fractals. 2021. V. 143. P. 110548. DOI:10.1016/j.chaos.2020.110548.

5. Абгарян К.К., Колбин И.С. Применение многомасштабного подхода и методов анализа данных для моделирования теплопроводности в слоистых структурах //Информатика и ее применение. – 2020. – № 4. С.91-99. DOI: 10.14357/19922264200413.

6. Abgaryan, K.K., Kolbin, I.S. Ab initio Calculation of the Effective Thermal Conductivity Coefficient of a Superlattice Using the Boltzmann Transport Equation. Russian Microelectronics, 2020, Vol. 49, No. 8, 594–599, Scopus (2020). DOI: 10.1134/S1063739720080028.https://link.springer.com/article/10.1134%2FS1063739720080028.

MULTI-SCALE MODELING AND METHODS OF DATA SCIENCE IN PROBLEMS OF MICROELECTRONICS

Abgaryan Karine Karlenovna[1,2,3]

[1] *chief Researcher, doctor of physical and mathematical Science, head of the department Federal Research Centre "Computer Science and Control" (FRCCSC), of the Russian Academy of Sciences, (FRC CSC RAS). Vavilov st. 44, 119333 Moscow, Russia*

[2] *head of the department Moscow Aviation Institute (National Research University), Volokolamskoe shosse, 4, 125993, Moscow, Russia (MAI)*

[3] *The faculty of Computational Mathematics and Cybernetics of Lomonosov Moscow State University, 119991, Moscow, GSP-1, Leninskie gory, 1, bldg. 52*
e-mail: kristal83@mail.ru.

Abstract. The report is devoted to the problem of integrating multiscale modeling and data analysis methods to create predictive models based on approaches based on theoretical physical and mathematical modeling using the mathematical apparatus of data analysis.

Keywords: multiscale modeling, data science methods, physical and mathematical modeling, microelectronics, predictive modeling.

https://doi.org/10.29003/m2468.MMMSEC-2021/53-56

МНОГОМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МНОГОСЛОЙНЫХ НАНОГЕТЕРОСТРУКТУР НА ОСНОВЕ ФЕРРОМОЛИБДАТА СТРОНЦИЯ (SFMO)

Абгарян Каринэ Карленовна [1, 2],
г.н.с., д.ф.-м.н., заведующая отделом,
kristal83@mail.ru,

Бажанов Дмитрий Игоревич [1,2],
к.ф.-м.н., с.н.с., ст. преп.,
dima@kintech.ru

Соболев Николай Андреевич [4.5]
Associate Professor, д.е.н., профессор
sobolev@ua.pt

[1] *ФИЦ ИУ РАН, г.Москва*
[2] *МАИ, г. Москва*
[4] *Department of Physics and i3N, University of Aveiro, Aveiro, Portugal*
[5] *National University of Science and Technology MISiS, Moscow, Russia*

Аннотация. Работа посвящена развитию многомасштабных подходов к моделированию спинтронных устройств с использованием многослойных наноструктур на основе ферромолибдата стронция для вычислительной техники нового поколения.

Ключевые слова: многомасштабное моделирование, наноструктуры, МДМ структуры, магнитные туннельные переходы (МТП), энергонезависимая память.

Нейроморфные вычисления лежат в основе искусственного интеллекта. Во всем мире предпринимаются огромные усилия для разработки и создания элементной базы нового поколения вычисли-

тельной техники на основе структур типа металл-диэлектрик-металл (МДМ) с резистивным переключением, включая быструю энергонезависимую память и искусственные синапсы для осуществления нейроморфных вычислений. Нейронные сети могут быть реализованы также на основе магнитных туннельных переходов (МТП), где металлы являются ферромагнитными, а переключение основано на туннельной инжекции спин-поляризованного тока[1-6]. Особый интерес для МТП представляют материалы со 100% спиновой поляризацией, например, такие как ферромолибдат стронция. Объединение двух парадигм – классической спинтроники и резистивных мемристоров – в одном приборе позволит получить многофункциональные устройства, повысить их быстродействие и степень интеграции, снизить энергопотребление вычислительных устройств.

В данной работе для проведения многомасштабного моделирования МДМ многослойной наногетероструктуры на основе SFMO разработана многомасштабная модель, в которой структура и свойства каждого слоя в наногетероструктуре рассчитываются с использованием соответствующих приближений и численных методов собственной разработки[7]. На ее основе создана компьютерная система, которая позволяет параллельно и в связи с этим эффективно решать задачи разного масштаба с учетом динамического обмена данными.

Современные мемристоры на основе МТП представляют собой сложные многослойные наноструктуры, содержащие ферромагнитные и антиферромагнитные слои, использующие эффекты обменного взаимодействия между слоями и процессы переноса спинового вращательного момента. В этой связи для моделирования ячеек магнитной памяти мемристров на основе МТП применяется комплекс программ (MagOasis [8], GoParallel [9], VASP [10], PWScf [11] и т.п.), который содержит набор программных компонент для описания различных физических характеристик:

1. программная компонента магнитной динамики для описания эволюции намагниченности в слоях ячейки памяти;
2. программная компонента расчета электрического тока и напряжений в структуре ячейки памяти.

Программная компонента магнитной динамики основывается на решении уравнения Ландау-Лифшица-Гильберта для динамики спинов:

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial t} = -\gamma \cdot [\mathbf{M} \times \mathbf{H}_{\mathrm{eff}}] - \gamma \frac{\alpha}{M_s} \left[\mathbf{M} \times [\mathbf{M} \times \mathbf{H}_{\mathrm{eff}}]\right] \quad (1)$$

где $\mathbf{M}$ – вектор намагниченностив данной точке пространства, M_s – намагниченность насыщения материала, γ – гиромагнитное отношение для электрона, α – безразмерный параметр затухания. Это уравнение описывает эволюцию намагниченности $\mathbf{M}_i$ в каждой точке **i** магнитного материала под действием эффективного поля $\mathbf{H}_{\mathbf{eff},i}$, которое включает вклады от обменного взаимодействия, магнитной анизотропии, приложенного внешнего поля $\mathbf{H}_{ext}$, размагничивающего поля $\mathbf{H}_{d,i}$, переноса спинового момента $\mathbf{H}_{STT}$, поля обменного смещения $\mathbf{H}_{EB}$ на границе раздела и поля магнитоупругого взаимодействия $\mathbf{H}_{ME}$:

$$\mathbf{H}_{\mathrm{eff,i}} = \frac{2A}{M_s^2} \Delta \mathbf{M}_{\mathrm{i}}(T) + \frac{2K(T)}{M_s^2} \mathbf{n}^{\mathrm{i}} \cdot \left(\mathbf{n}^{\mathbf{i}} \cdot \mathbf{M}_{\mathbf{i}}\right) + \mathbf{H}_{\mathrm{d,i}}(T) + \mathbf{H}_{\mathrm{ext}} + \mathbf{H}_{\mathrm{STT}} + \\ + \mathbf{H}_{\mathrm{EB}} + \mathbf{H}_{\mathrm{ME}}, \quad (2)$$

где A – константа обменного взаимодействия, K – константа магнитной анизотропии, $\mathbf{n}_i$ – направление оси легкой намагниченности. Для описания вклада переноса спинового момента используется формализм Слончевского [12]. Программная компонента магнитной динамики, в свою очередь, содержит несколько модулей для моделирования эволюции намагниченности с разной степенью детализации:

- модуль макроспиновой магнитной динамики;
- модуль гранулярной модели на основе метода Монте-Карло;
- модуль микромагнитной динамики;
- модуль атомистической микромагнитной динамики.

Наличие этих модулей позволяет проводить моделирование магнитной динамики в широком диапазоне пространственных и временных масштабов: от исследования влияния атомистического строения на магнитные свойства до описания поведения на макроскопических временах. Кроме того, программная компонента магнитной динамики включает модуль расчета спинового транспорта в туннельном переходе с магнитными электродами, который позволяет рассчитывать ТМС и спиновые вращательные моменты, переносимые электронами проводимости в туннельной спин-вентильной структуре.

Литература

[1] S.S.P. Parkin, C. Kaiser, A. Panchula, P.M. Rise, B. Hughes, M. Samant, S.-H. Yang, “Giant tunnelling magnetoresistance at room temperature with MgO (100) tunnel barriers”// *Nature Materials* ***3****, 862 (2004).*

[2] Y. Huai, “Spin-Transfer Torque MRAM (STT-MRAM): Challenges and Prospects”// *AAPPS Bulletin.* ***18****, 33-40 (2008).*

[3] T. Mauyama, Y. Shiota, T. Nozaki, K. Ohta, N. Toda, M. Mizuguchi, A.A. Tulapurkar, T. Shinjo, M. Shiraishi, S. Mizukami, Y. Ando, Y. Suzuki, “Large voltage-induced magnetic anisotropy change in a few atomic layers of iron” // *Nature Nanotechnology* ***4****, 158 (2009).*

[4] M. Miron, K. Garello, G. Gaudin, P.-J. Zermatten, M. V. Costache, S. Auffret, S. Bandiera, B. Rodmacq, A. Schuhl, and P. Gambardella, “Perpendicular switching of a single ferromagnetic layer induced by in-plane current injection”// *Nature* ***476****, 189 (2011).*

[5] Y.-W. Yin, M. Raju, W.-J. Hu, X.-J. Weng, K. Zou, J. Zhu, X.-G. Li, Z.-D. Zhang, Q. Li “Multiferroic tunnel junctions” // *Front. Phys.* ***7****, 380 (2012).*

[6] K. Watanabe, B. Jinnai, S. Fukami, H. Sato and H. Ohno, “Shape anisotropy revisited in single-digit nanometer magnetic tunnel junctions”// *Nature Communications* ***9****, 663 (2018).*

[7] Абгарян К.К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. – М.: МАКС Пресс. 2017. 284 с.

[8] URL: www.magoasis.com.

[9] URL: www.goparallel.net.

[10] URL: www.vasp.at.

[11] URL: www.quantum-espresso.org.

[12] J. Slonczewski, «Current-driven excitation of magnetic multilayers» // *J. Magn. Magn. Mater.* ***159****, L1 (1996).*

MULTI-SCALE SIMULATION OF MULTILAYER NANOGETEROSTRUCTURES BASED ON STRONTIUM FERROMOLYBDATE (SFMO)

K.K. Abgaryan [1,2], D.I. Bazhanov[1,2], NA. Sobolev[3]

[1] *Federal Research Centre “Computer Science and Control” (FRCCSC), of the Russian Academy of Sciences, (FRC CSC RAS). Vavilov st. 44, 119333 Moscow, Russia,*

[2] *Moscow Aviation Institute (National Research University), Volokolamskoe shosse, 4, 125993, Moscow, Russia (MAI), e-mail: kristal83@mail.ru*

[3] *Department of Physics and i3N, University of Aveiro, 3810-193 Aveiro, Portugal*

Abstract. The work is devoted to the development of multiscale approaches to modeling spintronic devices using multilayer nanostructures based on strontium ferromolybdate for a new generation of computing technology.

Keywords: multiscale modeling, nanostructures, MDM-structures, magnetic tunnel junctions (MTP).

УДК 544.227; 544.03
https://doi.org/10.29003/m2469.MMMSEC-2021/57-59

РАСЧЕТ ПОВЕРХНОСТНЫХ СВОЙСТВ МАТЕРИАЛОВ МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МОДЕЛИ КООРДИНАЦИОННОГО ПЛАВЛЕНИЯ КРИСТАЛЛА

Бокарев Валерий Павлович,
д.т.н., доцент, начальник отдела[1]
vbokarev@niime.ru, +7 (917) 558-40-94

Красников Геннадий Яковлевич,
академик РАН, д.т.н.,профессор, генеральный директор[1]
gkrasnikov@niime.ru, +7 (495) 229-70-00

[1] *АО «НИИМЭ», г.Москва, Зеленоград*

Аннотация. В данной работе показано, что модель координационного плавления кристалла позволяет рассчитывать значения удельной поверхностной энергии элементарных веществ и температуры поверхностного плавления металлов, а также связывает анизотропию удельной поверхностной энергии кристалла с его кристаллической структурой, работой выхода электрона и работой адгезии.

Ключевые слова: модель координационного плавления кристалла, анизотропия, удельная поверхностная энергия, температура плавления поверхности, работа выхода электрона, работа адгезии.

Введение

Поверхность кристалла является самым важным неустранимым дефектом кристаллов. Изменение структуры кристалла на его поверхности приводит к изменению физико-химических свойств и термодинамических постоянных поверхности, важнейшим из которых является удельная поверхностная энергия – σ_{hkl}. Поверхностная энергия определяет процессы зарождения, роста и плавления твёрдой фазы, а в случае монокристаллических веществ – анизотропию их свойств [1]. Её влияние на свойства кристаллов наиболее наглядно проявляются в размерной зависимости свойств кристаллов при наноразмерах.

Так как технология микроэлектроники является технологией получения и обработки поверхностных слоёв материалов, важность получения сведений о величинах и анизотропии удельной поверхностной энергии кристаллических материалов является неоспоримой. При этом большое значение имеет изучение свойств границ

раздела контактирующих веществ, влияющих на рабочие характеристики создаваемых устройств микроэлектроники [2, 3].

Расчёты поверхностных свойств по модели координационного плавления

Трудности в экспериментальном определении анизотропии удельной поверхностной энергии заключаются в отсутствии высокоточных экспериментальных методов определения величин удельной поверхностной энергии из-за влияния на эту величину дефектов кристаллической структуры, физических и химических примесей, а также незначительности её вклада во внутреннюю энергию монокристалла при макроразмерах.

Поэтому наиболее распространены не экспериментальные, а модельные расчёты удельной поверхностной энергии кристаллов, базирующиеся на различных теоретических подходах к данному вопросу [4–9]. Как правило, применяемые при расчётах модели используют сложные подгоночные коэффициенты, различающиеся для веществ с разным типом химических связей, и используют диаграммы Вульфа для расчёта анизотропии удельной поверхностной энергии.

В связи с важностью учёта анизотропии поверхности материалов при изготовлении изделий микро- и наноэлектроники нами была разработана статическая модель «координационного плавления кристалла» базирующаяся на упрощённом термодинамическом расчёте величин удельной поверхностной энергии идеальных гомодесмических монокристаллов [10–12]. Разработанная модель позволила рассчитать величины удельных поверхностных энергий всех элементов Периодической системы химических элементов Д.И. Менделеева; связать с кристаллической структурой анизотропию удельной поверхностной энергии, анизотропию работы выхода электрона и анизотропию работы адгезии монокристаллических веществ; а также рассчитать температуру поверхностного плавления металлов [12]. Проведённые расчёты подтвердили связь максимальных величин работы выхода электрона и работы адгезии с максимальными значениями удельных поверхностных энергий этих граней кристалла.

Литература

[1]. Современная кристаллография. Т. 3. Образование кристаллов. Под ред. Вайнштейна Б.К., Чернова А.А., Шувалова Л.А. М.: Наука,1980. 408 с.

[2]. Красников Г.Я. Исследование влияния материала верхнего электрода на свойства МДП структур // Диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук / Национальный исследовательский университет "МИЭТ". Москва, 1989.

[3]. Красников Г.Я. Взаимосвязь структурнопримесных и электрофизических свойств системы Si-SiO_2 // Электронная техника. Серия 3: Микро- и наноэлектроника. 1996. № 1. С. 67–68.

[4]. Русанов А.И. Фазовые равновесия и поверхностные явления. Л.: Химия, 1967. 388 с.

[5]. Задумкин С.Н., Шебзухова И.Г., Алчагиров Б.Б. Поверхностная энергия и работа выхода гладких граней металлического монокристалла. // Физика металлов и металловедение. – 1970. – Т. 80. – № 6. – С. 1313–1315.

[6]. Магомедов М.Н. Метод определения параметров парного межатомного потенциала// Физика твердого тела. – 2020. – Том 62. – Вып. 7. – С. 998–1003.

[7]. V. K. Kumikov and Kh. B. Khokonov. On the measurement of surface free energy and surface tension of solid metals // J. Appl. Phys. – 1983. – V 54. – P. 1346–1350.

[8]. Vitos L., Ruban A.V., Skriver H.L., Kollar J. The surface energy of metals // Surface Science. – 1998. – V. 411. – P. 186–202.

[9]. Erhieyovwe Akpata, Edison E. A., Iyayi S.E. Comparison of Surface Energy of BCC Alkali Metals and Transition Metals Using MAEAM // Review of Advances in Physics Theories and Applications. – 2014. –V. 1. – №1. – P. 34–41.

[10]. Бокарев В.П. Поверхностная энергия и плавление кристаллов // В сборнике Труды Межведомственного Совета по комплексным проблемам физики, химии и биологии при Президиуме РАН. Москва – Екатеринбург, 1995. С. 67–68.

[11]. Bokarev V.P., Krasnikov G.Ya. Model of coordination melting of crystals and anisotropy of physical and chemical properties of the surface // Surface Science. 2018. V. 668. P. 73–79.

[12]. Бокарев В.П. Поверхность и физико-химические свойства кристаллов. М.: МФТИ, 2018. 146 с.

CALCULATION OF THE SURFACE PROPERTIES OF MICROELECTRONICS MATERIALS USING THE MODEL OF COORDINATION MELTING OF A CRYSTAL

V.P. Bokarev, G.Ya. Krasnikov

Abstract. In this work, it is shown that the model of coordination crystal melting makes it possible to calculate the values of the specific surface energy of elementary substances and the surface melting temperature of metals, and also relates the anisotropy of the specific surface energy of a crystal with its crystal structure, electron work function, and adhesion work.

Keywords: model of coordination crystal melting, anisotropy, specific surface energy, surface melting temperature, electron work function, adhesion work.

УДК 53.082.7
https://doi.org/10.29003/m2470.MMMSEC-2021/60-62

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАБОТЫ УСТАНОВКИ ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ ВРЕМЕНИ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ОБРАТНОГО ТОКА В ДИОДНЫХ СТРУКТУРАХ

Кирилов Виктор Дмитриевич,
аспирант[1],
saks69a@mail.ru, +7 (983) 125-79-29

Щемеров Иван Васильевич,
к.т.н., доцент[1],
schemerov.iv@misis.ru

Кобелева Светлана Петровна,
к.ф.-м.н., доцент[1],
kob@misis.ru

[1] *НИТУ «МИСиС», г .Москва*

Аннотация. В работе проводилось моделирование работы электронной схемы для измерения времени восстановления обратного тока диода по методу Лакса. Моделирование проводилось в среде NI Multisim с использованием встроенных библиотек коммерчески доступных транзисторных и диодных структур. Было показано, что построенная схема позволяет измерять времена восстановления обратного тока диодных структур в микросекундном диапазоне.

Ключевые слова: время жизни неравновесных носителей заряда, время обратного восстановления тока диодов, метод Лакса.

Введение

Время жизни (ВЖ) – это марочная характеристика, которая говорит о том насколько много у нас остаточных примесей в непрямозонном полупроводнике. В диодах на основе кремния и германия ВЖ определяет скорость переключения диода и потери на безызлучательную рекомбинацию. В частности, ВЖ в СВЧ диодах и в импульсных диодах не должно превышать долей мкс, в мощных диодах может достигать единиц мс. Основным параметром, характеризующим переходные характеристики диодов, считается время восстановления обратного тока (ВВ), которое напрямую зависит от ВЖ. Этот параметр определяет насколько быстро при переключении смещения с прямого на обратное меняется величина протекающего тока. Этот параметр обязательно указывается в технической

документации на диодные и транзисторные структуры. Измерение времени восстановления обратного тока диода является важной частью технологического процесса изготовления полупроводниковых приборов.

В исследуемой работе рассматривается метод Лакса для измерения ВВ [1]. Метод Лакса заключается в том, что через диод пропускают разнополярные прямоугольные импульсы тока, измеряют интервал постоянства обратного тока $t_п$ (для достаточно больших времён – длительность «полочки») и определяют время жизни из соотношения [2]:

$$erf\sqrt{\frac{t_n}{\tau}} = \frac{1}{(1+\alpha)},$$

где α – отношение обратного тока к прямому.

В данной работе проводилось моделирование работы прибора для измерения этого параметра.

Моделирование электрической схемы для измерения времени восстановления обратного тока диода и рекомбинационного времени жизни

Была разработана модель аналоговой схемы измерителя времени восстановления обратного тока в среде моделирования «National Instruments Multisim». Схема построена на основе транзисторного ключа, который переключается при помощи триггера Шмидта, управляемого импульсами напряжения. Переключаемое напряжение может достигать 200 В при прямом токе 1А в течении 200 мкс. Генератор тока построен на биполярном транзисторе управляемым полевым МОП транзистором. Задаваемый ток контролируется операционным усилителем с низким смещением уровня нуля OP07. Измерение обратного тока производится по падению напряжения на постоянном сопротивлении 0,1 Ом. Преобразователь тока в напряжение построен на быстродействующем операционном усилителе AD797. Управляющий импульсы переключения задаются при помощи микроконтроллера серии STM-32. Быстродействие схемы ограничено скоростью нарастания и спада управления (300 нс на фронт) и скоростью работы в строенных АЦП (2MSPS).

Для испытаний построенной модели были проведены виртуальные измерения выпрямительного диода 1N4004.

По результатам моделирования измерений диода «1N4004» были получены следующее данные: время обратного восстановления при прямом токе 0,25 А и обратном 0,5 А составляет 2,5±0,5 мкс. Это значение сравнимо с результатами, приведёнными в технической документации на эту серию диодов: 2±0,5мкс.

Время восстановления обратного тока диода напрямую связанно с временем жизни неравновесных носителей заряда в базовых областях структуры. Время жизни рассчитанное по результатам измерений и исходя из соотношений прямого и обратного токов составило 25 ± 5 мкс.

Выводы

Разработана экспериментальная модель схемы реализующей метод Лакса для измерения времени восстановления обратного тока диода. Модель построена в программе моделирования «NI Multisim».

Проведено моделирование измерений переходных параметров диода 1N4004. Данная работа показала, что разработанная и смоделированная схема, позволяет определять и рассчитывать рекомбинационное время жизни.

Список использованных источников

1. Lax B., Neustadter S.F. // Transient Response of a p-n Junction, MIT.: «Journal of applied physics». – Vol. 25. 1954. P. 1148–1154.

2. Kingston R.H. // Switching time in junction diodes and junction transistors, MIT.: «Proceedings of the I R E» 1954. P. 829–834.

SIMULATION OF REVERSE CURRENT RECOVERY TIME MEASURING DEVISE

V.N. Kirilov, S.P. Kobeleva, I.V. Schemerov

Abstract. In this work the simulation of reverse current recovery time in diode structures was performed. Simulation was provided in “NI Multisim” system using internal libraries with models of state-of-art diodes and transistors. It will be shown that simulated device can measure time of reverse recovery in microseconds diapasone.

Keywords: non-equilibrium charge carriers lifetime, diode reverce current recovery time, Lax method.

УДК 546.47:547.22:546.72
https://doi.org/10.29003/m2471.MMMSEC-2021/63-65

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СВЕРХМАЛЫХ ОТКЛОНЕНИЙ ОТ СТЕХИОМЕТРИИ ПО СОСТАВУ РАВНОВЕСНОЙ ПАРОВОЙ ФАЗЫ ШИРОКОЗОННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СОЕДИНЕНИЙ A^2B^6

Кобелева Светлана Петровна,
к.ф.-м.н., доцент,
kob@misis.ru, +7 (916) 618-55-48

НИТУ «МИСиС», г. Москва

Аннотация. В работе рассмотрены возможности определения отклонения от стехиометрии в халькогенидах кадмия и цинка по составу равновесной паровой фазы. Рассмотрены условия проведения испарения. Показано, что в случае отношения объемов твердой и паровой фазы не менее 120 можно определять отклонение от стехиометрии на уровне 10^{14} см-3.

Ключевые слова: халькогениды кадмия и цинка, отклонение от стехиометрии, собственные точечные дефекты, уравнение электронейтральности, уравнение материального баланса.

Введение

Широкозонные полупроводниковые соединения группы A^2B^6 востребованы в оптоэлектронике и как детекторные материалы. Однако их применение ограничено проблемами, связанными с особенностями термодинамики соединений. Собственные точечные дефекты (СТД) в этих соединениях электрически активны, играют определяющую роль в формировании величины проводимости и в сочетании с примесями – в формировании оптических свойств. Поэтому определение отклонения от стехиометрии (δ) важно как для понимания механизмов возникновения СТД, так и для определения качества технологических процессов при изготовлении этих материалов. Как отмечено в [1], стандартных методов определения δ в настоящее время нет. Для определения δ в работе предложен метод, основанный на особенностях процесса испарения этих соединений.

Описание процесса испарения

Халькогениды кадмия и цинка относятся к соединениям с двухсторонней областью гомогенности. Величины максимальных отклонений от стехиометрии достигают 10^{18}–10^{19} см$^{-3}$ избыточного компонента [2]. В паровой фазе соединения разлагаются на атомы

металла и двух (четырех – шести) атомные молекулы халькогена. На границах области гомогенности равновесная паровая фаза состоит преимущественно из избыточного компонента, т.е отношение парциальных давлений компонентов P_A /P_{B2} в пределах области гомогенности изменяется на много порядков. Внутри области гомогенности при определенной температуре имеется состав, который испаряется конгруэнтно, т. е. P_A /P_{B2} = 2. В методе квазихимических реакций [3] концентрации СТД определяются равновесным парциальным давлением компонента и концентрацией свободного носителя зарядов. Рассматривая уравнение электронейтральности и уравнение материального баланса в замкнутой системе, в котором учитываются $\delta(T)$ и δ_0, получаем систему двух уравнений с тремя неизвестными (искомое δ_0 и в данной работе P_A и n). Показано, что для отношения объемов паровой и твердой фаз α меньше 120 изменение объемов при испарении можно не учитывать. Измеряя P_A/ $P_{B2}(T)$, можно рассчитать искомую величину δ_0. В принципе, если параметры образования СТД точно известны, для расчетов δ_0 достаточно измерения при одной температуре. В настоящее время даже в наиболее изученном соединения этой группы – CdTe – нет однозначного понимания состава СТД и, тем более, констант реакций их образования. Поэтому для определения δ_0 и уточнения параметров образования СТД предлагается анализировать температурную зависимость состава равновесной паровой фазы. Наиболее оптимальным для этой цели является метод определения парциальных давлений компонентов по оптической плотности паров [4]. В методе измеряются парциальные давления обоих компонентов пара и это расширяет пределы чувствительности метода по отношению к δ_0,. На примере CdTe показано, что измеряя оптическую плотность паров в интервале температур 500–900 °С для составов внутри области гомогенности чувствительность по избыточному теллуру не менее 10^{14} см$^{-3}$. Проведены измерения CdTe, полученного методом многократной возгонки-сублимации [5]. Определено, что синтезированный состав имеет температуру конгруэнтной сублимации 630 ± 10 С. Температурная зависимость отношения парциальных давлений Cd и Te_2 хорошо согласуется с моделью дефектов по Френкелю по обеим подрешеткам с учетом дефектов типа антиструктурного теллура на месте кадмия или дивакансии Cd. Отклонение от стехиометрии в соединении при расчетах в рамках предложенной модели $\delta_0 = (7 \pm 1)10^{16}$ см$^{-3}$.

Выводы

В работе предложен метод определения отклонения от стехиометрии в широкозонных соединениях A^2B^6 на основе анализа температурной зависимости отношения парциальных давлений компонентов равновесной паровой фазы. Предложено уравнение материального баланса и проведены оценки критических значений отношения объемов паровой и твердой фаз, при которых изменение относительных объемов паровой и твердой фаз можно не учитывать. На примере CdTe показано, что чувствительность метода не хуже 10^{-14} см$^{-3}$.

Список использованных источников

1. Avetisov I. at all. Universal approach for nonstoichiometry determination in binary chemical compounds // Cryst. Res. Technol., 2015. V. 50, no 1, pp 93–100.
2. Аветисов И. Х. Фазовые равновесия в системах A(II)B(VI) // Высокочистые вещества. – Научный мир. Москва, 2018. С. 704–753.
3. Крегер Ф. Химия несовершенных кристаллов // Мир, Москва, 1969.
4. Brebric R.F., Strauss A.J. Partial Pressures in Equilibrium with Group IV Tellurides. I. Jptical Absorption Method and Results for PbTe // J. Chem. Prys. V. 40. 1964. P. 3230–3235.
5. Медведев С.А и др. Способ получения возгоняющихся полупроводниковых соединений. // Авт. св. № 705926. 1979.

DETERMINATION OF ULTRA-SMALL DEVIATIONS FROM STOICHIOMETRY BY EQUILIBRIUM VAPOR PHASE COMPOSITION OF WIDE BEND GAP A^2B^6 SEMICONDUCTORS

S.P. Kobeleva

Abstract. The paper considers the possibility of determining the deviation from the stoichiometry in cadmium and zinc chalcogenides by the composition of the equilibrium vapor phase. The conditions for the evaporation are considered. It is shown that if the ratio of the of the solid and vapor phases volumes is more then 120, it is possible to determine the deviation from stoichiometry at the order of magnitude 10^{14} cm^{-3}.

Keywords: cadmium and zinc chalcogenides, deviation from stoichiometry, intrinsic point defects, electroneutrality equation, material balance equation.

УДК 004.3:004.9
https://doi.org/10.29003/m2472.MMMSEC-2021/66-69

ПАРАМЕТРИЧЕСКАЯ ИДЕНТИФИКАЦИЯ ПОТЕНЦИАЛА RGL ДЛЯ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Ксемидов Борис Сергеевич,
stalker.anonim@mail.ru,

Аксентьев Артем Алексеевич,
akseart@ya.ru,

Абгарян Каринэ Карленовна [1, 2]***,***
д.ф.-м.н., заведующая отделом,
kristal83@mail.ru, +7 (903) 108-03-40

Бажанов Дмитрий Игоревич [1,2]***,***
к.ф.-м.н., с.н.с., ст. преп.,
dima@kintech.ru

[1] *ФИЦ ИУ РАН, г. Москва*
[2] *МАИ, г. Москва*

Аннотация. В работе рассмотрены подходы к решению задачи по идентификации параметров потенциала RGL, применяемого к моделированию процессов взаимодействия металлов с поверхностью.

Ключевые слова: многомасштабное моделирование, потенциал RGL, параметры потенциала.

Введение

Использование первопринципных методов для моделирования динамических процессов в различных твердотельных системах крайне затруднено в связи с вычислительной сложностью проводимых расчётов. Поэтому для проведения динамических расчётов с большим количеством атомов используются методы молекулярной динамики, в которых временная эволюция системы взаимодействующих атомов отслеживается интегрированием уравнений движениях [1, 2]. Их положения и скорости определяются путем интегрирования систем дифференциальных уравнений. При этом силы, действующие на атомы определяются межатомным взаимодействием. Оно может быть описано с помощью модельных потенциалов, подобранных в соответствии с типом химической связи в исследуемом материале или с особенностями процесса, который изучается. При этом параметры такого потенциала, могут быть определены с

применением идентификационных процедур с использованием результатов квантово-механических расчетов.

При моделировании процессов взаимодействия металлов с поверхностью твердых тел возможно использовать молекулярно-динамические подходы, при этом для повышения точности моделирования в качестве потенциала межатомного взаимодействия, в данной работе применялся потенциал RGL [3], хорошо зарекомендовавший себя в расчетах металлических структур. Для того, чтобы под конкретные процессы взаимодействия уточнить параметры потенциала были проведены расчёты структурных характеристик металлов, участвующих в рассматриваемом процессе.

Определение параметров потенциала RGL

В рамках работы с помощью программного комплекса для проведения квантово-механических расчетов Quantum ESPRESSO (QE) [4] вычислялись энергетические характеристики исследуемых металлов. Для этих целей использовались высокопроизводительные ресурсы вычислительного кластера ФИЦ ИУ РАН. После чего рассчитывались необходимые значения когезионной энергии, константы упругости и другое [5].

Процесс взаимодействия металла с поверхностью другого металла изучался с применением потенциала RGL.

$$E_R^i = \sum_j \left(A_{\alpha\beta}^1\left(r_{ij} - r_0^{\alpha\beta}\right) + A_{\alpha\beta}^0\right)\exp\left(-p_{\alpha\beta}\left(\frac{r_{ij}}{r_0^{\alpha\beta}} - 1\right)\right)$$

$$E_B^i = -\left(\sum_j \xi_{\alpha\beta}^2 \exp\left(-2q_{\alpha\beta}\left(\frac{r_{ij}}{r_0^{\alpha\beta}} - 1\right)\right)\right)^{1/2}, \qquad (1)$$

$$E^i = E_R^i + E_B^i$$

где r_0, A^0, A^1, ξ, p, q являются параметрами потенциала, индексы α, β отвечают за сорт атомов участвующих во взаимодействии, E – полная энергия системы, E_R^i – энергия отталкивания, а E_B^i – энергия притяжения.

Решалась задача по определению параметров данного потенциала с использованием характеристик материала, вычисленных на базе квантово-механических расчетов, выполненных в Quantum ESPRESSO (QE). Для этого был построен целевой функционал (2), который оптимизировался.

$$F = \sqrt{\frac{\sum_{i}^{n}(value_{table} - value_{calc})^2}{n}} \quad (2)$$

Для оптимизации функционала использовались методы нулевого порядка, включая следующие: метод Нелдера-Мида, метод Хука–Дживса [5] и метод Granular Radial Search (GRS)[6]. Наилучшие результаты были получены при применении метода GRS. Кроме этого, так как функционал обладает множеством локальных экстремумов, для повыщения вероятности нахождения глобального минимума, были использованы случайные рестарты.

Выводы

В данной работе было проведено решение поставленной задачи с помощью программного комплекса для проведения квантово-механических расчетов Quantum ESPRESSO (QE). Для уточнения параметров потенциала RGL была реализована программа на языке программирования C++. В целях оптимизации расчетов были использованы технологии распараллеливания Open MP.

Сравнение значений когезионной энергии, полученных в ходе расчётов в QE, и расчётов, полученных с помощью RGL с параметрами, идентифицированными при помощи созданной программной реализации, показало, что результаты получаются с допустимой погрешностью.

Список использованных источников

1. Зализняк В.Е. Основы вычислительной физики. Часть 2. Введение в методы частиц.-Москва.Ижевс:. Ниц «Регулярная и хаотическая динамика»; Институт компьютерных исследований. 2006 г. – 156 с.
2. Абгарян К.К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. – Москва. МАКСПресс. – 2017. 284 с.
3. Rosato V., Guillope M., Legrand B. Thermodynamical and structural properties of fcc transition metals using a simple tight-binding model // Philosophical Magazine A. – 1989. – Т. 59. – №. 2. – P. 321–336.
4. Giannozzi P. et al. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials //Journal of physics: Condensed matter. – 2009. – Т. 21. – №. 39. – P. 395502.
5. Хук Р., Дживс Т.А.. Прямой поиск решения для числовых и статических проблем. -М.: Mir,. pp.212–219, 1961.
6. Powell D. Elasticity, Lattice Dynamics and Parameterisation Techniques for the Tersoff Potential Applied to Elemental and Type III-V Semiconductors : дис. – University of Sheffield, 2006.

PARAMETRIC IDENTIFICATION OF RGL POTENTIAL FOR MOLECULAR DYNAMIC SIMULATION

B.S. Ksemidov, A.A. Aksentiev, K.K. Abgaryan, D.I. Bazhanov

Abstract. The paper considers approaches to solving the problem of identifying the parameters of the RGL potential applied to modeling the processes of interaction of metals with a surface.

Keywords: multiscale modeling, RGL potential, potential parameters.

УДК 536.2
https://doi.org/10.29003/m2473.MMMSEC-2021/69-72

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ АНИЗОТРОПНЫХ ТЕПЛОВЫХ СВОЙСТВ ФАЗОИЗМЕНЯЕМЫХ МАТЕРИАЛОВ НА БАЗЕ ПРЯМОГО И ОБРАТНОГО МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

***Марков Сергей Игоревич*,**
к.ф.-м.н., научный сотрудник[1, 2],
www.sim91@list.ru, +7 (923) 131-54-59

[1] *Новосибирский государственный технический университет, г. Новосибирск*
[2] *Институт нефтегазовой геологии и геофизики СО РАН, г. Новосибирск*

Аннотация. В работе приведены результаты применения разработанных алгоритмов прямого и обратного математического моделирования для вычисления эффективного тензора теплопроводности образцов фазоизменяемых материалов.

Ключевые слова: фазоизменяемые материалы, эффективный тензор теплопроводности, задача Стефана, неконформные методы конечных элементов.

Введение

Фазоизменяемые материалы (ФИМ) обладают теплоаккумулирующими свойствами, что позволяет применять их для решения широкого класса инженерных задач, связанных со строительной отраслью и разработкой систем охлаждения. ФИМ состоят из твёрдой матрицы, физические свойства которой не являются фазоизменяющимися, и микровключений фазоизменяемых веществ. Особый интерес представляют образцы с анизотропными тепловыми свойствами. В рамках доклада рассматривается теплопроводность ани-

зотропных сред, которая описывается симметричным тензором второго ранга. Задача определения эффективного тензора теплопроводности решена для ограниченного набора объектов: слоистые, периодические и самоподобные. На сегодняшний день разработаны алгоритмы определения эффективного тензора теплопроводности для ортотропных и трансверсально-изотропных сред в предположении о диагональной структуре эффективного тензора. Разработка и реализация алгоритма определения плотного эффективного тензора теплопроводности гетерогенных сред, имеющих произвольную внутреннюю структуру, – цель данного исследования.

Алгоритм вычисления эффективного тензора теплопроводности

Математическая модель процесса теплопроводности с фазовыми переходами – задача Стефана. Решение данной задачи осложняется наличием подвижной границы, для учёта которой применяются комбинированные подходы, базирующиеся на методах фиксированных точек, установки уровня энтальпии и фазового поля [1, 2, 3]. В работе для дискретизации задачи Стефана предлагается использовать вычислительную схему многомасштабного разрывного метода Галёркина: разрывная компонента решения определена только в зоне фазового перехода, а непрерывная – всюду. Такая стратегия позволяет использовать несогласованные сетки и сократить время решения задачи за счёт использования специальных многоуровневых схем решения дискретных аналогов. Разрывный метод Галёркина относится к классу неконформных методов конечных элементов, обладающих свойством локальной консервативности, что позволяет использовать их для дискретизации математических моделей физических процессов в многомасштабных средах с резкоменяющимся градиентом решения и контрастными физическими свойствами. Для дискретизации по времени хорошо зарекомендовали себя схемы Рунге-Кутты. В англоязычной литературе такие подходы более известны под аббревиатурой RK-DG [4].

Для определения эффективного тензора теплопроводности формулируется обратная коэффициентная задача как процедура минимизации нормы отклонения наблюдаемых данных от экспериментальных. В качестве наблюдаемых данных рассматривается тепловой поток в однородной среде при тех же выбранных начальных и краевых условиях, которые использовались для получения экспериментальных данных на базе решения задачи Стефана в не-

однородной среде с учётом всех структурных особенностей. В работе предлагается минимизировать энергетическую норму отклонения модели наблюдения от экспериментальных данных, поскольку конечноэлементные методы позволяют найти решение, близкое в энергетической норме. Процедура минимизации состоит из двух этапов: градиентный метод Флетчера-Ривса и локальный метод Ньютона для уточнения решения.

Вычислительные эксперименты были проведены для разных типов и объёмных концентраций включений из парафина, помещённых в матрицу из полиуретана. Тепловой поток, постоянный по времени, инициализировался по высоте образцов разностью температуры 60 ^{o}C. Температура ликвидуса парафина составляла 57 ^{o}C.

Выводы

При отсутствии взаимодействия между контрастными включениями с одинаковой ориентацией в пространстве перпендикулярно тепловому потоку наблюдается трансверсально-изотропный тип анизотропии независимо от объёмной локализации неоднородностей. При произвольной ориентации в пространстве и равномерном распределении наблюдается ортотропный тип анизотропии. Если теплопроводность включения больше теплопроводности матрицы образца, то наибольшая контрастность эффективных тепловых свойств формируется в направлении наибольшей площади поверхности, через которую переносится тепловой поток. Анизотропия тепловых свойств зависит от наличия контрастных пространственно-локализованных неоднородных структур внутри матрицы образца. Иначе главные оси анизотропии совпадают с главными осями анизотропии матрицы, и величина диагональных элементов тензора определяется контрастностью тепловых свойств включений.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 20-71-00134.

Список использованных источников

1. Javierre-Perez E. Literature study: numerical methods for solving Stefan problems // Reports of the Department of Applied Mathematical Analysis, 2003, p. 85.
2. Date A.W. A novel enthalpy formulation for multidimensional solidification and melting of a pure substance // Sadhana, 1994. Vol. 19, no. 5, pp. 833–850.
3. Singer-Loginova I., Singer H.M. The phase field technique for modeling multiphase materials // Rep. Prog. Phys., 2008. V. 71, 106501.
4. Pei Ch., Sussman M., Hussaini M. A space-time discontinuous Galerkin spectral element method for the Stefan problem // Discrete & Continuous Dynamical Systems, 2018. V. 23, no. 9, pp. 3595–3622.

RECOVERING OF ANISOTROPIC THERMAL PROPERTIES IN PHASE-CHANGE MATERIALS USING DIRECT AND INVERSE MATHEMATICAL MODELLING

S.I. Markov

Abstract. We present the results of applying the developed algorithms for direct and reverse mathematical modelling to calculate the effective thermal conductivity tensor in samples of phase-change materials.

Key words: phase-change materials, effective thermal conductivity tensor, Stefan's problem, non-conforming finite element methods.

УДК 538.911, 51-73
https://doi.org/10.29003/m2474.MMMSEC-2021/72-75

ИМПУЛЬСНЫЙ РЕЖИМ РОСТА НИТЕВИДНЫХ НАНОКРИСТАЛЛОВ GaAs

Настовьяк Алла Георгиевна,
к.ф.-м.н., доцент[2], научный сотрудник[1],
alla@isp.nsc.ru, +7 (383) 333-14-75

Штеренталь Давид Викторович,
студент[2]
kibbudohan@gmail.com, +7 (383) 333-14-75

Шварц Наталия Львовна,
к.ф.-м.н., доцент[2], старший научный сотрудник[1],
nataly.shwartz@gmail.com, +7 (383) 333-14-75

[1] *Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск, Россия*
[2] *Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия*

Аннотация. В работе представлены результаты моделирования самокаталитического роста нанопроволок GaAs по механизму пар-жидкость-кристалл в различных импульсных режимах.

Ключевые слова: Монте-Карло, моделирование, нанопроволоки, ПЖК.

Введение

Ключевой технологией создания нанопроволок (НП) GaAs является самокаталитический рост по механизму пар–жидкость–кристалл (ПЖК). Важной проблемой этого процесса является преждевременное поглощение капли катализатора Ga в процессе роста. Понижение температуры роста приводит к уменьшению длины

диффузии галлия по боковой поверхности проволоки и, следовательно, к ограничению длины НП. С целью расширения температурного диапазона самокаталитического роста был предложен вариант роста с переменным включением и выключением потоков (импульсная эпитаксия) [1]. В настоящей работе с помощью моделирования методом Монте-Карло (МК) было проведено изучение роста НП GaAs в условиях импульсной эпитаксии.

Моделирование импульсного режима роста нанопроволок

Моделирование роста проводилось на основе решеточной модели, описанной в работах [2–3]. Система состояла из частиц пяти сортов: атомов галлия в твердом и жидком состоянии Ga(s) и Ga(liq), мышьяка в атомарной и молекулярной форме As и As_2 и атомов пленки-маски M_f. Все частицы располагались в узлах алмазоподобной кристаллической решетки. В латеральных направлениях использовались циклические граничные условия. В качестве исходной подложки была взята подложка GaAs(111)B, покрытая пленкой-маской со сквозным отверстием, в котором находилась капля галлия. Рост НП происходил за счет осаждения на подложку атомов Ga и молекул As_2. Моделирование импульсного режима роста осуществлялось с помощью попеременного включения/выключения потоков галлия и мышьяка.

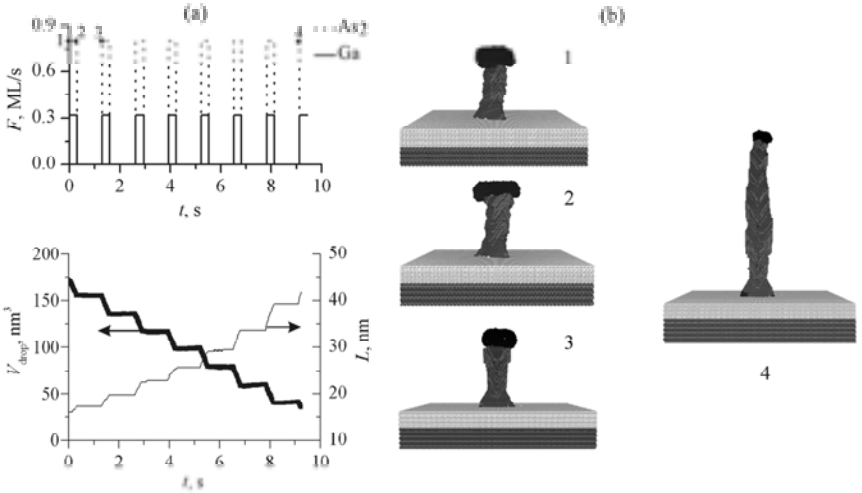

Рис. 1. Рост НП в режиме модуляции потоков Ga и As_2 при T=800 K: (a) временная диаграмма потоков и зависимость объема капли Ga V_{drop} и длины НП L от времени; (b) Морфология НП, соответствующая точкам 1–4 на рис. (a)

В работе проанализированы три варианта импульсного роста: 1) модуляция потока мышьяка при постоянном потоке Ga; 2) модуляция обоих потоков с одинаковой скважностью; 3) модуляция обоих потоков с различной скважностью. Аналогично работе [1], ростовой процесс для импульсного режима был разбит на 2 этапа. Первый этап роста осуществлялся в постоянных потоках галлия и мышьяка, а на втором этапе использовалась модуляция потоков. Первый, кратковременный, этап роста проходил при $T = 890$ K. На втором этапе расчеты проводились в режиме прерывания потоков при температурах 890 K, 840 K и 800 K. В условиях импульсной эпитаксии были получены зависимости длины НП и объема капли от времени. Пример зависимостей для режима прерывания обоих потоков приведен на рис. 1. Недостатком такого режима является постепенное сокращение объема капли-затравки в процессе роста. Мы предложили использовать разные длительности импульсов Ga и As_2. При этом размер капли сокращается гораздо медленнее, чем в условиях одновременного включения/выключения Ga и As_2. Однако, оптимальным вариантом из рассмотренных нами режимов оказался рост в условиях модуляции потока мышьяка при постоянном потоке Ga – в этих условиях длина НП оказалась максимальной. При всех режимах, начиная с некоторой высоты НП, у основания НП появлялась дополнительная капля галлия. Расчеты показали, что расстояние между каплями в существенной степени определяется процессами реадсорбции мышьяка, уменьшающими длину диффузии галлия по боковой поверхности НП.

Выводы

С помощью атомистического моделирования методом Монте-Карло рассмотрены различные режимы импульсного самокаталитического роста нанопроволок GaAs по механизму пар-жидкость-кристалл. Оптимальным среди рассмотренных режимов оказался режим модуляции потока мышьяка при постоянном потоке галлия. Показано, что расстояние между каплями на боковой поверхности НП определяется массопереносом вещества не только по поверхности, но и через паровую фазу.

Работа выполнена при поддержке программы Минобрнауки РФ (№ 0242-2021-0008).

Список использованных источников

1. Balaghi L. et al. Droplet-Confined Alternate Pulsed Epitaxy of GaAs Nanowires on Si Substrates down to CMOS-Compatible Temperatures // Nano Lett., 2016. Vol. 16, pp. 4032–4039.
2. Spirina A. et al. Langmuir Evaporation of GaAs(111)A and GaAs(111)B: Monte Carlo Simulation // Appl. Surf. Sci., 2021. Vol. 540, no. 148281.
3. Князева М. и др. Имитационное моделирование роста нитевидных нанокристаллов GaAs: каталитический и самокаталитический рост // ФТП, 2015. Вып. 49. С. 63–70.

PULSE GROWTH OF THE GAAS NANOWIRES

A.G. Nastovjak, D.V. Shterental, N.L. Shwartz

Abstract. The results of the simulation of the GaAs nanowire self-catalyzed growth via vapor-liquid-solid mechanism using various pulse modes are presented in this work.

Key words: Monte Carlo, simulation, nanowires, VLS.

УДК 621.3.049.771.12
https://doi.org/10.29003/m2475.MMMSEC-2021/75-78

УЧЕТ ПОРИСТОСТИ МАТЕРИАЛА В МОДЕЛИ ВРЕМЕННОГО ПРОБОЯ ДИЭЛЕКТРИКА В СИСТЕМЕ МЕТАЛЛИЗАЦИИ ИНТЕГРАЛЬНЫХ СХЕМ

Орлов Андрей Алексеевич,
младший научный сотрудник[1,2],
aorlov@niime.ru, +7 (495) 229-74-28

Ганыкина Екатерина Андреевна,
научный сотрудник[1, 2],
eganykina@niime.ru, +7 (495) 229-74-28

Резванов Аскар Анварович,
к.ф.-м.н., начальник лаборатории[1, 2],
arezvanov@niime.ru, +7 (495) 229-74-28

[1] *АО НИИМЭ, г. Зеленоград*
[2] *МФТИ (НИУ), г. Долгопрудный*

Аннотация. В работе выполняется имитационное моделирование процессов диффузии ионов меди в low-k диэлектрик между двумя близлежащими медными линиями.

Ключевые слова: low-k диэлектрик, пористость, TDDB.

Введение

Временной пробой диэлектрика (*Time-Dependent Dielectric Breakdown – TDDB*), согласно международной дорожной карте для устройств и систем (International Roadmap for Devices and Systems – *IRDS* 2020), является одной из основных проблем, приводящих к отказу сверхбольших интегральных схем (СБИС) [1]. В системе медной металлизации для технологий 90 нм и ниже основной причиной снижения надежности СБИС являются диффузия и дрейф ионов меди в low-k диэлектрик под действием внешнего электрического поля [2, 3]. Одной из перспективных моделей для оценки времени до пробоя пористого low-k диэлектрика является модель, основанная на расчете изменения концентрации ионов металла на границе межслойный диэлектрик/low-k диэлектрик [4, 5]. Основными недостатками описанной в указанных работах модели являются отсутствие явного учета пористости и размера пор low-k диэлектрика в диффузионно-дрейфовом уравнении движения ионов металла в материале, а также ограниченный температурный диапазон.

Расчет временного пробоя low-k диэлектрика

Для расчета изменения входных параметров в модели оценки времени до пробоя диэлектрика при введении пористости в качестве плотного материала будет рассмотрен диоксид кремния SiO_2. Предположим, что введение пористости в плотный SiO_2 будет имитировать пористый low-k диэлектрик. Дополнительно, не рассматривается движение ионов меди внутри пор.

В качестве факторов, влияющих на изменение времени до пробоя диэлектрика с введением пористости, рассматриваются:

- увеличение диффузионного пути, так как вместо расстояния 2r (диаметр поры; r – радиус поры) ему необходимо пройти расстояние πr (половину длины дуги поры);
- увеличение напряженности внешнего электрического поля на краях пор: исходя из расчетов получено, что область краевого эффекта (движения в повышенном поле) для пор размера порядка единиц нанометров составляет примерно 42 % от половины длины окружности поры;
- понижение энергии активации диффузии ионов меди за счет внешнего электрического поля [6].

Моделирование проводилось в программе COMSOL Multiphysics® методом конечных элементов (процесс расчета описан в

[4, 5]) со следующими входными параметрами: пористость 30%, r=1 нм, разность потенциалов 3.63 В, температура 398 К, энергия активации 0.93 эВ, множитель перед экспонентой в законе Аррениуса для коэффициента диффузии 1.68×10^{-14} $м^2/с$, расстояние между линиями 50 нм. Получено, что увеличение времени диффузии иона в материале за счет увеличения диффузионного пути можно оценить в 16%, а совместный учет эффекта увеличения электрического поля на краях пор и уменьшения энергии активации диффузии приводит к уменьшению времени до пробоя на 26% относительно плотного материала.

Выводы

Проведены оценки влияния явного учета пористости материала на численное значение временного пробоя low-k диэлектрика ионами меди. Получено, что увеличение времени диффузии иона в материале с пористостью 30%, радиусом пор 1 нм за счет увеличения диффузионного пути можно оценить в 16%, а совместный учет эффекта увеличения электрического поля на краях пор и уменьшения энергии активации диффузии приводит к уменьшению времени до пробоя на 26% относительно плотного материала. В дальнейшем планируется провести калибровку полученных результатов на экспериментальных структурах.

Список использованных источников

1. International Technology Roadmap for Semiconductors (ITRS) Interconnect, 2020 Edition. [Online]. Available: https://irds.ieee.org/editions/2020
2. Lloyd J.R., Murray C.E., Ponoth S., Cohen S., [и др.]. The effect of Cu diffusion on the TDDB behavior in a low-k interlevel dielectrics // Microelectronics Reliability. – 2006. – V. 46. – № 9-11. – P. 1643 – 1647.
3. Красников Г.Я. Исследование влияния материала верхнего электрода на свойства МДП структур //Диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук / Национальный исследовательский университет МИЭТ. Москва, 1989.
4. Huang X., Sukharev V., Qi Z., Kim T., Tan S. X.-D. Physics-based full-chip TDDB assessment for BEOL interconnects // Proceedings of the 53rd Annual Design Automation Conference 2016 – DAC ’16.
5. Peng S., Zhou H., Kim T., Chen H.-B., [и др.]. Physics-Based Compact TDDB Models for Low-k BEOL Copper Interconnects With Time-Varying Voltage Stressing // IEEE Transactions on Very Large Scale Integration (VLSI) Systems. – 2018. – V. 26. – № 2. – P. 239–248.
6. Hwang S.-S., Jung S.-Y., Joo Y.-C. The electric field dependence of Cu migration induced dielectric failure in interlayer dielectric for integrated circuits // Journal of Applied Physics. – 2007. – V. 101. – № 7. – P. 074501.

ACCOUNTING OF THE POROSITY OF THE MATERIAL IN THE SIMULATION OF THE TIME-DEPENDENT DIELECTRIC BREAKDOWN IN THE METALLIZATION SYSTEM OF INTEGRATED CIRCUITS

A.A. Orlov, E.A. Ganykina, A.A. Rezvanov

Abstract. In this work, simulation modeling of processes of the diffusion of copper ions in low-k dielectric between two neighboring copper lines is performed.

Key words: low-k dielectric, porosity, TDDB.

УДК 548.55
https://doi.org/10.29003/m2476.MMMSEC-2021/78-81

АНАЛИЗ ГИДРОДИНАМИКИ ПРИ СИНТЕЗЕ КРИСТАЛЛОВ ИЗ ВОДНО-СОЛЕВЫХ РАСТВОРОВ

Простомолотов Анатолий Иванович,
д.т.н., доцент, ведущий научный сотрудник[1],
prosto@ipmnet.ru, +7 (495) 434-41-53

Верезуб Наталия Анатольевна,
к.ф.-м.н., доцент, старший научный сотрудник[1],
verezub@ipmnet.ru, +7 (495) 434-41-53

[1] *ИПМех РАН, г.Москва*

Аннотация. Применительно к выращивания KDP кристаллов на действующем кристаллизаторе методом математического моделирования определяются локальные особенности гидродинамики в растворе вблизи поверхности растущего кристалла, которые влияют на кристаллографические условия роста кристалла и образование дефектов. Рассматривается конструкция модернизированного кристаллизатора, обеспечивающая осесимметричное обтекание растущего кристалла водно-солевым раствором.

Ключевые слова: рост кристаллов, водно-солевые растворы, пересыщение, гидромеханика.

Введение

Известен ряд экспериментальных и теоретических [1] исследований с целью выявления влияния конвекции на морфологическую ростовую неустойчивость и образование включений. Показано, что направление течения потока раствора вблизи границы раствор/кристалл в значительной степени влияет на возникновение морфологической ростовой неустойчивости. Если поток направлен

против движения ступеней роста, то устойчивость сохраняется. Напротив, течение раствора по направлению движения ступеней приводит к морфологической неустойчивости. Из двух возможных механизмов послойного роста кристаллов (дислокационно-спиральный и двумерного зарождения) при высоких пересыщениях раствора создаются условия для реализации механизма двумерного зарождения [2]. Устойчивое воспроизведение такого роста кристалла обусловливает разработку новых устройств и технологических режимов для скоростного роста KDP кристаллов. Это связано с постановкой и решением малоизученных или существенно новых задач гидродинамики и массообмена в водных растворах, характеризующихся трехмерностью контейнера и каналов подачи и слива раствора, сложной геометрией кристалла и его положением в объеме раствора, наличием вращающихся или вибрирующих устройств для интенсификации перемешивания и т.д.

Гидродинамика в действующем и модернизированном кристаллизаторах

Для математического моделирования процесса роста KDP кристаллов были применены трехмерные численные методики и программы для решения уравнений Навье–Стокса и тепломассопереноса на основе разработок авторов: прямое численное моделирование на основе решения нестационарных уравнений Навье–Стокса в приближении Буссинеска для трехмерной задачи.

В действующем кристаллизаторе (рис. 1) раствор полностью заполняет контейнер (1), гидродинамические потоки в котором вызваны втеканием раствора из трубки (2) и его вытеканием через трубку (3), а также действием внутренней вращающейся мешалки (4). На структуру потоков также оказывает влияние форма и расположение модели кристалла (5). В результате расчетов были визуализированы структуры течения и определены особенности обтекания кристалла раствором при различных скоростях подачи/слива раствора и вращения мешалки. При ускоренно-замедленном вращении мешалки со скоростью ±15 об/мин следует, что в центральной части контейнера раствор вовлечен в интенсивное вращательное движение, которое в основном способствует его хорошему перемешиванию вблизи вращающейся мешалки. Однако вдали от мешалки существуют только вторичные потоки, которые довольно слабо влияют на массоперенос соли при обтекании кристалла. Можно заключить, что рассмотренный кристаллизатор относится к смесительному типу.

Рис. 1. Схема действующего кристаллизатора

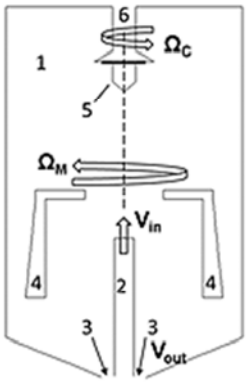

Рис. 2. Схема модернизированного кристаллизатора

В модернизированном кристаллизаторе (рис. 2) раствор полностью заполняет контейнер (1), гидродинамические потоки в котором вызваны втеканием раствора из трубки (2) и его вытеканием через трубку (3), а также действием внутренней вращающейся мешалки (4). Кристалл (5,6) и мешалка (4) могут вращаться в одну или разные стороны с постоянными скоростями или в ускоренно-замедленных режимах.

Выводы

В действующем кристаллизаторе за счет ускоренно-замедленного вращения мешалки в растворе возникают колебания скорости течения и концентрации соли. Вблизи кристалла периодические изменения вихревой структуры течения способствуют объемному выравниванию концентрации соли. Однако изменения направления течения потока раствора вблизи границы раствор/кристалл способствуют возникновению морфологической ростовой неустойчивости. Осесимметричная конструкция кристаллизатора и центральное положение кристалла способствуют симметризации течения раствора и росту KDP кристалла по двумерному механизму зародышеобразования. Плоскопараллельное обтекание боковой поверхности кристалла обеспечивает однородный солевой поток к его поверхности.

Работа выполнена по теме госзадания № АААА-А20-120011690136-2.

Список использованных источников

1. Chernov A.A., Rashkovich L.N., Vekilov P.G. Steps in solution growth: dynamics of kinks, bunching and turbulence // J. Crystal Growth, 2005. Vol. 275. P. 1–18.

2. Волошин А.Э., Рашкович Л.Н., Руднева Е.Б., Маноменова В.Л. Выращиваем кристаллы // Природа. 2014. № 10. С. 62–72.

ANALYSIS OF HYDRODYNAMICS IN THE SYNTHESIS OF CRYSTALS FROM WATER-SALT SOLUTIONS

A.I. Prostomolotov, N.A. Verezub

Abstract. In application to KDP crystal growth on a functioning crystallizer, the local features of solution hydrodynamics near the growing crystal surface, which may affect on the crystallographic conditions of crystal growth and the defect formation, are established by mathematical modeling. The design of a modernized crystallizer, which provides an axisymmetric flow around of a growing crystal by a water-salt solution, is considered.

Key words: crystal growth, water-salt solutions, supersaturation, hydromechanics.

https://doi.org/10.29003/m2477.MMMSEC-2021/81-83

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ГРАФОВЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ ШИРИНЫ ЗАПРЕЩЁННОЙ ЗОНЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

Рубцов Иван Дмитриевич,
студент[1],
rubtsov.ivan3791@gmail.com, +7 (916) 340-20-84

Карпов Кирилл Викторович,
аспирант, ведущий инженер[1],
karpov@radio.chem.msu.ru

Митрофанов Артем Александрович,
к.х.н., зав. лабараторией[1],
MitrofJr@gmail.com

[1]МГУ имени М.В. Ломоносова, г. Москва

Аннотация. В работе моделируется графовая сверточная нейронная сеть для предсказания ширины запрещенной зоны по кристаллической структуре на основе экспериментальной базы [1].

Ключевые слова: ширина запрещенной зоны, CGCNN, графовая нейронная сеть, QSAR.

Введение

Ширина запрещенной зоны (Eg) является главной характеристикой полупроводниковых материалов. Помимо этого, по величине Eg можно судить о типе химической связи, доминирующей в соединении, устойчивости соединения в определенном интервале изменений состава и внешних параметров, склонности материала к ионной проводимости, а также основных термодинамических характеристиках соединения и.т.д.

Известные теоретические методы определения ширины запрещенной зоны основываются на квантовой теории, в частности, распространенным является метод теории функционала плотности. При этом погрешность теоретических методов часто превышает 0.3 эВ, а время расчета может измеряться днями. В то же время, точность экспериментальных методов может достигать 0.01–0.1 эВ. Большинство же подходов машинного обучения, требуют значительных объемов данных для тренировки, что является большой проблемой в силу редкости больших физико-научных баз.

В данной работе был применен новый нейросетевой подход к определению ширины запрещенной зоны по структуре вещества. В исследовании была использована разработанная нами ранее графовая сверточная архитеутура нейронной сети (CGCNN) [2].

CGCNN моделирование

В качестве базы данных использовалась экспериментальная база со значениями ширины запрещенной зоны [1]. Кристаллическая структура была взята из большой базы данных Material Project [3].

Архитектура сети предполагает построение векторов свойств для каждого узла графа. В случае CGCNN роль узлов играют атомы кристаллической решетки. Векторы свойств хранят информацию как о самом атоме, так и о его окружении. В последующих слоях происходило объединение узлов с построением общего вектора свойств уже для кристалла и конечное сопоставление “структура-свойство”, с нахождением ширины запрещенной зоны.

Модель, обученная в процессе работы, показывает хороший результат на тестовой выборке (R^2 = 0,946, RMSE = 0,241). Полученную модель можно использовать для предсказания Eg по кристаллографическим данным о материале, однако в силу ограниченности

базы, применимость является узкой. Одним из способов решения данной проблемы является трансферное обучение, в соответствии с которым часть слоев заменяется слоями модели, обученной на более широкой базе данных. Донорной моделью в нашем случае стал результат обучения на базе Material Project, со значениями Eg, посчитанными DFT-методом.

Выводы

В работе было выполнено обучение модели графовой сверточной неронной сети. Полученная модель была использована для предсказания ширины запрещенной зоны ряда кристаллических материалов.

Список использованных источников

1. Pedro Borlido, Thorsten Aull, Ahmad W. Huran, Fabien Tran, Miguel A.L. Marques, and Silvana Botti. Large-Scale Benchmark of Exchange–Correlation Functionals for the Determination of Electronic Band Gaps of Solids // J. Chem. Theory Comput. 2019, 15, 9, 5069–5079. DOI: 10.1021/acs.jctc.9b00322.
2. Vadim Korolev, Artem Mitrofanov, Alexandru Korotcov, and Valery Tkachenko. Graph Convolutional Neural Networks as “General-Purpose” Property Predictors: The Universality and Limits of Applicability. J. Chem. Inf. Model. 2020, 60, 1, 22–28 Publication Date:December 20, 2019 DOI: 10.1021/acs.jcim.9b00587.
3. A. Jain*, S.P. Ong*, G. Hautier, W. Chen, W.D. Richards, S. Dacek, S. Cholia, D. Gunter, D. Skinner, G. Ceder, K.A. Persson. The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation. APL Materials, 2013, 1(1), 011002. Doi:10.1063/1.4812323.

PREDICTION OF THE BAND GAP OF CRYSTAL MATERIALS USING GRAPH NEURAL NETWORK

I.D. Rubtsov, K.V. Karpov, A.A. Mitrofanov

Abstract. In this paper, graph convolutional neural network is modeled to predict band gap from the crystal structure using the experimental base.

Key words: band gap, CGCNN, graph neural network, QSAR.

https://doi.org/10.29003/m2478.MMMSEC-2021/84-86

МОДЕЛИРОВАНИЕ ШИРИНЫ ЗАПРЕЩЁННОЙ ЗОНЫ МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКИХ КАРКАСНЫХ СТРУКТУР С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Савельев Сергей Алексеевич,
студент бакалавриата[1],
savelyev.s.a.2002@gmail.com, +7 (985) 738-71-40

Карпов Кирилл Викторович,
аспирант, ведущий инженер[1],
karpov@radio.chem.msu.ru, +7 (995) 924-72-18

Митрофанов Артём Александрович,
к.х.н., заведующий лабораторией[1],
mitrofjr@gmail.com

[1] *МГУ имени М.В. Ломоносова, г. Москва*

Аннотация. В работе проводится построение и исследование машинно-обучаемых моделей, пригодных к предсказанию ширины запрещённой зоны полупроводящих металлоорганических каркасов, а также к физико-химической интерпретации получаемых результатов.

Ключевые слова: запрещённая зона, металлоорганический каркас, машинное обучение, нейронные сети, интерпретируемость.

Введение

Металлоорганические каркасные структуры – это класс перспективных пористых материалов, полупроводниковые (и прочие) свойства которых поддаются тонкой настройке путём изменения образующих каркас металлических центров и органических связок. Неограниченная вариативность последних усложняет экспериментальный дизайн новых структур и приводит к необходимости применения такого быстродействующего предсказательного метода, как машинное обучение (МО). При этом ценность представляет как максимально точное досинтетическое определение значения целевого свойства, так и выявление для последующих исследований особенностей исходной структуры, повлиявших на предсказанное значение. Цель данной работы – обучение моделей, реализующих оба упомянутых аспекта успешного прогнозирования ширины запрещённой зоны.

Моделирование ширины запрещённой зоны

Все приведённые исследования проводились с применением инструментов языка программирования Python.

Наиболее точным методом МО в оценке свойств металлорганических каркасов показали себя нейронные сети с графовым представлением кристаллической структуры (Crystal Graph Convolutional Neural Networks, CGCNN). С использованием базы данных QMOF [1], содержащей сведения о полупроводниковых свойствах более чем 14000 структур, были обучены модели, способные количественно предсказывать ширину запрещённой зоны на основе кристаллической структуры каркаса. Для увеличения точности предсказаний применялся метод кросс-валидации, т.е. одновременного обучения нескольких моделей на тренировочном наборе данных с отсечением собственного валидационного фрагмента для каждой модели. Модели тестировались на отдельном наборе данных и точность составила 0.36 эВ для показателя СКО (R^2 = 0.91). Помимо непосредственного применения моделей, возможно и их использование в качестве донорных для трансферного обучения в областях исследования металлоорганических каркасов, страдающих от недостатка данных.

Вторая группа моделей была обучена на той же базе QMOF методом ускоренного градиентного спуска (XGBoost), основанным на ансамблях деревьев решений. Уступая в точности, новые модели заметно выигрывают в скорости обучения, что позволяет в разумные сроки провести автоматический подбор гиперпараметров метода для минимизации ошибок. Однако более важным преимуществом является возможность простейшего представления входных данных по структуре в виде вектора значений с конкретным физико-химическим смыслом и последующей оценки влияния его составляющих на предсказываемое значение, что и было выполнено с применением подхода, основанного на теории игр (shap). Таким образом, на основе XGBoost была быстро построена модель с приемлемой точностью определения ширины запрещённой зоны и одновременной возможностью интерпретации структурных данных.

Выводы

В результате работы сгенерирована совокупность моделей для точного и физико-химически обоснованного предсказания ширины запрещённой зоны полупроводников из класса металлоорганических каркасных структур.

Список использованных источников

1. Rosen A. et al. Machine learning the quantum-chemical properties of metal–organic frameworks for accelerated materials discovery. Matter, Volume 4, Issue 5, 2021, Pages 1578-1597, ISSN 2590-2385, https://doi.org/10.1016/j.matt.2021.02.015.

MACHINE LEARNING THE BAND GAP OF METAL-ORGANIC FRAMEWORKS

S.A. Savelyev, A.A. Mitrofanov, K.V. Karpov

Abstract. This work presents building and study of physico-chemically interpretable machine learning models fit for metal-organic frameworks' band gap prediction.

Key words: band gap, metal-organic framework, machine learning, neural networks, interpretability.

УДК 004.94
https://doi.org/10.29003/m2479.MMMSEC-2021/86-88

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ПЕРОВСКИТОПОДОБНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Сеченых Полина Алексеевна,
младший научный сотрудник[1], старший преподаватель[2],
p-sechenyh@mail.ru

[1] *ФИЦ ИУ РАН, г. Москва*
[2] *МАИ НИУ, г. Москва*

Аннотация. в работе представлен расчет метрических параметров кристаллических соединений по заданным химической формуле и пространственной группе симметрии. Рассмотрены структуры перовскита (Perovskite) и двойного перовскита (Double Perovskite).

Ключевые слова: структура перовскита, структура двойного перовскита, алгоритм имитации отжига, плотная упаковка.

Введение

Необходимость применять методы математического моделирования для прогнозирования свойств перовскитоподобных материалов обусловлена востребованностью таких соединений в микроэлектронике, в частности, при разработке солнечных батарей, оптоэлек-

тронных приборов и фотоэлементов. В данной работе рассматривались соединения с кубической кристаллической решеткой, реализуемые в следующих структурных типах:

- перовскит (пространственная группа симметрии $Pm\bar{3}m$);
- двойной перовскит (пространственная группа симметрии $Fm\bar{3}m$).

Расчёт метрических параметров

Определение метрических параметров кристаллических структур является начальным этапом расчета свойств материалов с заданной химической формулой и пространственной группой симметрии. К таким параметрам, в частности, относятся постоянные кристаллической решетки и координаты атомов, входящих в элементарную ячейку.

Для расчета метрических параметров и плотности упаковки соединений, реализуемых в рассматриваемых структурных типах, была применена модель ионно-атомных радиусов, подробно изложенная в [1]. Для решения поставленной задачи в рамках данной модели была использована программная реализация алгоритма имитации отжига [2] на языке программирования C#, ранее подробно описанная в [3]. Радиусы атомов химических элементов были взяты из [4].

Были рассмотрены наиболее распространенные химические соединения, реализуемые в данных структурных типах. Основные результаты вычислений приведены в таблице 1.

Таблица 1

Структурные характеристики

Формула	**Группа симметрии**	**Плотность упаковки ρ**	**Постоянная решетки a (выч.), Å**	**Постоянная решетки a (таб.), Å [5,6]**	**Относительная погрешность**
$SrTiO_3$	$Pm\bar{3}m$	0.566	4.01	3.899	0.0285
$BaTiO_3$	$Pm\bar{3}m$	0.577	4.01	3.97	0.0101
$CaTiO_3$	$Pm\bar{3}m$	0.513	4.01	3.99	0.0050
$LaAlO_3$	$Pm\bar{3}m$	0.572	3.87	3.78	0.0238
$LaFeO_3$	$Pm\bar{3}m$	0.517	4.02	3.87	0.0388
Sr_2FeMoO_6	$Fm\bar{3}m$	0.593	7.880	7.899	0.0024
La_2CuTiO_6	$Fm\bar{3}m$	0.483	8.270	7.869	0.0509
Sr_2CoMoO_6	$Fm\bar{3}m$	0.555	8.080	7.918	0.0205
Ba_2CoWO_6	$Fm\bar{3}m$	0.566	8.100	8.103	0.0004

Данные, приведенные в таблице 1, показывают, что результаты расчета структурных характеристик рассмотренных соединений близки к опубликованным значениям [5, 6].

Полученные результаты могут быть использованы при проведении квантовомеханических расчетов на базе теории функционала электронной плотности [7, 8], с помощью которых можно уточнить структуру системы атомов, а также рассчитать электронные, магнитные, тепловые свойства перовскитоподобных соединений.

Выводы

В работе выполнено моделирование материалов с кристаллической структурой перовскита и двойного перовскита. Полученные значения метрических параметров согласуются с экспериментальными данными.

Список использованных источников

1. Абгарян К.К., Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения.- М.:МАКС Пресс, 2017. – 284 с.
2. Metropolis N., Ulam S. The Monte Carlo Method. Journal of the American Statistical Association, Vol. 44, No. 247 (Sep., 1949), pp. 335–341.
3. Сеченых П.А. Математическое моделирование перспективных структур оксидов металлов // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2019. Т. 22, № 4. С. 268-271. DOI: 10.17073/1609-3577-2019-4-268-271.
4. Хьюи Дж. Неорганическая химия. Строение вещества и реакционная способность. – Пер. С англ. / Под ред. Б.Д. Степина, Р.А. Лидина. – М.: Химия, 1987. –696 с.
5. Crystallography Open Database [электронный ресурс]. URL: http://www.crystallography.net/cod/ (дата обращения 10.09.2021).
6. Зиненко В.И., Павловский М.С., Шинкоренко А.С. Электронная структура, динамика решетки и магнитоэлектрические свойства двойного перовскита La_2CuTiO_6 // Физика твердого тела, 2016, том 58, № 11. С. 2212–2217.
7. Hohenberg, P. Phys. Rev. 136, B864 / P. Hohenberg, W. Kohn // 1964.
8. Kohn, W. Phys. Rev. 140, A1133 / W. Kohn, L. J. Sham // 1965.

MATHEMATICAL MODELING OF THE CRYSTAL STRUCTURE OF PEROVSKITE-LIKE MATERIALS

Sechenykh P.A.

Abstract. the paper presents the calculation of the metric parameters of crystalline compounds according to a given chemical formula and a space symmetry group. The structures of perovskite and double perovskite are considered.

Keywords: perovskite structure, double perovskite structure, annealing simulation algorithm, close packing.

УДК 621.382
https://doi.org/10.29003/m2480.MMMSEC-2021/89-91

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОФИЛЯ ФОТОРЕЗИСТА В ПРОЦЕССЕ САМОСОВМЕЩЕННОГО ДВОЙНОГО ПАТТЕРНИРОВАНИЯ МЕТОДОМ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Тихонова Елена Дмитриевна,
студент[1], научный сотрудник[2],
etikhonova@niime.ru, +7 (910) 447-02-96

Горнев Евгений Сергеевич,
член-корреспондент РАН, д.т.н, профессор[1],
начальник управления РПТН[2],
egornev@niime.ru, +7 (903) 969-60-97

[1] *МФТИ (НИУ), г. Долгопрудный*
[2] *АО «НИИМЭ», г. Москва*

Аннотация. В работе описывается способ улучшения неравномерности профиля фоторезиста в процессе самосовмещенного двойного паттернирования с помощью моделирования в программной среде Prolith. Новая методика помогает не только отыскать слабые места в процессе травления, но и улучшить ширину линий итоговых элементов.

Ключевые слова: методы улучшения разрешения, самосовмещенный метод двойного паттернирования, математическое моделирование.

Введение

Для успешного освоения и внедрения на отечественный рынок технологии 28 нм необходимо использовать комплексный набор инструментальных и технических приемов, важную роль в которых играет процесс фотолитографии [1]. Для формирования рисунка требуемых размеров необходимо использовать более агрессивные методы улучшения разрешения (resolution enhancement techniques, RET). Мультипаттернирование (multi-patterning, MP), в частности самосовмещенное двойное паттернирование (self-aligned double patterning, SADP) [2], является одним из ключевых способов масштабирования элементов до технологических норм 28 нм и ниже.

Моделирование профиля фоторезиста

В данной работе было проведено моделирование профиля фоторезиста для процесса двойного паттернирования с помощью программного обеспечения Prolith от разработчика KLA. Для симуля-

ции данного процесса из базы данных была выбрана строгая фоторезистивная модель, применяемая при стандартном промышленном производстве линий затворов по технологии 28 нм. Было исследовано, как неравномерный профиль фоторезиста, а именно потери сверху, влияют на получившееся изображение, и что надо сделать, чтобы улучшить данную модель.

Откалиброванная по предложенной разработчиком методике модель показала, что слабые места пост-экспозиционной обработки тесно связаны с тем, какие потери сверху были выявлены на профиле фоторезиста [3]. Однако при дальнейшем исследовании оказалось, что не всегда детектирование таких слабых мест после верификации ведет к значительному улучшению значения верхних потерь профиля фоторезиста.

В связи с этим были исследованы альтернативные методы коррекции профиля фоторезиста. В работе комплексно было рассмотрено, как изменяется профиль интересующего нас фоторезиста и рядом находящихся элементов в зависимости от показателей интенсивности воздушного изображения.

Уровни интенсивности были построены по двум разрезам: вертикальному и горизонтальному, для того, чтобы иметь ясное представление о поведении профиля в разных окрестностях. Построенная таким образом многоуровневая модель распределения интенсивности дает четкое местонахождение горячих точек в фоторезисте, которое совпадает с результатом моделирования по заданной разработчиками строгой модели.

Чтобы избежать предсказанных таким образом пост-экспозиционных ошибок, нужный нам слой, как и при модификации эффектов оптической близости (optical proximity correction, OPC), был настроен таким образом, чтобы контур был более гладким. Для этого было проведено разбиение контура каждого соответствующего на определенные интервалы, после чего для заданных интервалов в соответствии с желаемым значением результата литографии и травления была подобрана наиболее выгодная спецификация. В результате использования данной методологии при моделировании профиля фоторезиста удалось не только получить более сглаженный контур, но и улучшить размер ширины линий после травления.

Выводы

По итогам проделанной работы была предложена новая модель, в которой для оценки профиля рисунка на основных этапах травле-

ния используются уровни разной интенсивности, полученные при моделировании воздушного изображения. Таким образом, нам удалось восстановить двумерное распределение интенсивности профиля линий, которое помогает заранее предугадать слабые места, которые могут возникнуть после травления, а также уменьшить верхние потери профиля фоторезиста, что в итоге дает нам более стабильный результат критических размеров линий после травления.

Список использованных источников

1. Красников, Г.Я. Общая теория технологии и микроэлектроника: часть 2. Вопросы метода и классификации / Г. Я. Красников, Е. С. Горнев, И. В. Матюшкин // Электронная техника. Серия 3: Микроэлектроника. – 2017. – № 4(168). – С. 16-41.
2. Тихонова, Е.Д. Использование материала spin-on-carbon для улучшения метода самосовмещенного двойного паттернирования / Е.Д. Тихонова, Е.С. Горнев // Наноиндустрия. – 2020. – Т. 13. – № S5-3(102). – С. 859-861.
3. Furubayashi Ken Mask defect printability in the Self-Aligned Quadruple Patterning (SAQP) process / Ken Furubayashi, Koutarou Sho, Seiro Miyoshi, Shinji Yamaguchi, Kazunori Iida, Satoshi Usui, Tsuyoshi Morisaki, Naoki Sato, Hidefumi Mukai // Proc. SPIE 978: Optical Microlithography XXIX. – 2016. –V. 97800O – P. 7.

INVESTIGATION OF THE PHOTORESIST PROFILE IN SELF-ALIGNED DOUBLE PATTERNING PROCESS APPLYING MATHEMATICAL MODELING METHOD

E.D. Tikhonova, Y.S. Gornev

Abstract. This paper describes a method that can improve the photoresist profile irregularity in self-aligned double patterning process using the Prolith software environment simulation. The new technique helps not only to find the weak points in the etching process, but also to improve the line width of the resulting elements.

Keywords: resolution enhancement techniques (RET), self-aligned double patterning (SADP), mathematical simulation.

УДК 536.2.01, 536.21, 539.219.3
https://doi.org/10.29003/m2481.MMMSEC-2021/92-94

ПРИНЦИПИАЛЬНО НОВЫЕ ПОДХОДЫ К РЕШЕНИЮ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ ЗАДАЧ ПРИМЕНИТЕЛЬНО К НАНОЭЛЕКТРОНИКЕ

Хвесюк Владимир Иванович,
д.т.н., профессор,
khvesyuk@bmstu.ru, +7 (916) 873-31-08

Баринов Александр Алексеевич,
аспирант,
barinov@bmstu.ru, +7 (985) 950-88-67

Лю Бинь,
аспирант, liubinbmstu@gmail.com

Цяо Вэньпей,
апирант, 1055387366@qq.com

МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва

Аннотация. В работе обсуждаются актуальные задачи, связанные с переносом тепла в твердотельных наноструктурах: влияние реальных шероховатых границ на эффективную теплопроводность и контактное термическое сопротивление.

Ключевые слова: фононы, наноструктуры, эффективная теплопроводность, контактное термическое сопротивление

Введение

Изучение процессов переноса энергии в наномасштабных электрических схемах с мощным удельным тепловыделением – большой, сложный и очень важный круг задач, решение которых совершенно необходимо в ближайшем будущем. Последние десятилетия много сделано в этом направлении. Например, большим достижением признано создание методов расчёта теплопроводности полупроводников и изоляторов методом «из первых принципов» (*ab initio*). Это – результат успешной работы нескольких групп исследователей. Однако, в этой исключительно важной области до сих пор имеется ряд «белых пятен» в фундаментальных направлениях, что тормозит развитие, как новой теплофизики, так и, собственно, наноэлектроники. Здесь мы обсуждаем некоторые из этих направлений.

1. Взаимодействие фононов с шероховатыми поверхностями

Экспериментальные исследования наноструктур (на примере нанонитей) по взаимодействию фононов с свободными поверхностями показывают, как сильно влияет шероховатость на перенос тепла [1]. Данное обстоятельство играет определяющую роль в связи с задачей по созданию надёжных нанотранзисторов, нанолазеров, сверхрешёток и других устройств. Условия в наноструктурах таковы, что длины пролётов фононов от одной поверхности плёнок к другой значительно меньше, чем средние длины пробега фононов в изучаемом газе. Это так называемый баллистический режим переноса тепла. Текущая теория теплопроводности не позволяет проводить прогнозирование теплофизических свойств таких структур. Дальнейшее развитие расчетной модели, очевидно, требует привлечение статистических методов к анализу механизма рассеяния фононов на шероховатых поверхностях. Однако, такой подход только начинает развиваться [2].

Авторами данной работы развита новая модель, позволяющая изучать влияние шероховатостей поверхности плёнок на интенсивность переноса тепла. В основе разработанного метода впервые применена статистика наклонов профиля случайной поверхности (гауссово распределение наклонов шероховатостей [2]). Затем изучается характер рассеяния фононов на разных наклонах в зависимости от углов падения фононов. Эти результаты позволяют определить средние длины пробега фононов между противоположными границами плёнок и соответствующие времена пролётов. Полученные данные используются для определения так называемой эффективной теплопроводности плёнок (интенсивности переноса тепла) в зависимости от размеров шероховатостей и температуры.

2. Контактные термические сопротивления

Анализ переноса тепла через контактные поверхности двух тел из различных материалов является продолжением классической задачи определения сопротивления (проводимости) Капицы. Задача исключительно важная, так как, во-первых, наноэлектронные схемы будущего должны содержать миллионы контактов, во-вторых, оценки показывают, что именно контактные тепловые сопротивления создают наибольшее суммарное сопротивление отводу тепла.

В этом направлении нам первые удалось показать, что метод расчёта сопротивлений Капицы, предложенный в 1952 году Халат-

никовым [3], может быть распространён на температуры выше 300 К [4,5]. Ранее предельной температурой применимости этого метода считалась температура 30 К [6]. Причина – аккуратный учёт всех особенностей упругих волн.

Развитием этого направления стали работы, посвящённые созданию методов расчёта сопротивлений (проводимостей) Капицы с учётом шероховатостей интерфейсов [2]. Здесь также используется статистический учёт наклонов реального профиля поверхности.

3. Совершенствование методов кинетики фононного газа

В этом направлении разработан оригинальный метод расчёта теплопроводности полупроводников и диэлектриков [7]. Недостаток современных методов – взаимодействия фононов рассматриваются интегрально, без учёта каждого из типов взаимодействий. В работе развит метод, учитывающий все типы взаимодействий отдельно. Это позволило получить значительно более подробные данные в сочетании с хорошим соответствием экспериментальным результатам.

Список использованных источников

1. Lim J., et all. Nano Lett.,2012. Vol. 12. P. 2475.
2. Liu B., Khvesyuk V.I., and Barinov A.A. Physics of the Solid State, 2021. Vol. 63, No. 7, pp. 1128–1133.
3. Khalatnikov I. M. Zh. Eksp. Teor. Fiz., 1952. Vol. 22. P. 687.
4. Liu B., Khvesyuk V.I. Int. J. Heat Mass Transfer, 2020. Vol. 159, 120117. (9 p.)
5. Khvesyuk V.I., Liu B., Barinov A.A. Tech. Phys. Lett., 2020. Vol. 46, pp. 983–987.
6. Swartz E.T. and Pohl R. O. Rev. Mod. Phys., 1989. Vol. 61. P. 605.
7. Khvesyuk V.I., Qiao W., Barinov A.A. J. Phys. Conf. Ser., 2019. Vol. 1382. N.012156. (5 pp.)

FUNDAMENTALLY NEW APPROACHES TO SOLVING THERMOPHYSICAL PROBLEMS IN THE FIELD OF NANOELECTRONICS

V.I. Khvesyuk, A.A. Barinov, B. Liu, W. Qiao

Abstract. The paper discusses current problems related to the heat transfer in solid-state nanostructures: the influence of real rough boundaries on the effective thermal conductivity and contact thermal resistance.

Keywords: phonons, nanostructures, effective thermal conductivity, thermal boundary resistance.

УДК 51-73: 538.971: 519.245
https://doi.org/10.29003/m2482.MMMSEC-2021/95-98

ОСОБЕННОСТИ РАЗВИТИЯ РЕЛЬЕФА ПОВЕРХНОСТИ АРСЕНИДА ГАЛЛИЯ В ПРОЦЕССЕ НЕРАВНОВЕСНЫХ ОТЖИГОВ (МОНТЕ-КАРЛО МОДЕЛИРОВАНИЕ)

Шварц Наталия Львовна,
к.ф.-м.н., доцент[2], старший научный сотрудник[1]
nataly.shwartz@gmail.com, +7 (383) 333-14-75

Спирина Анна Александровна,
аспирант[1], младший научный сотрудник[1],
an.spirits@isp.nsc.ru, +7 (383) 333-14-75

[1] *Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск, Россия*

[2] *Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия*

Аннотация. В работе выполнено имитационное моделирование высокотемпературных отжигов подложек GaAs(111). Проанализированы зависимости характеристик ленгмюровского испарения и морфологических преобразований подложек от температуры и наличия дефектов на поверхности.

Ключевые слова: Монте-Карло, моделирование, арсенид галлия, отжиг.

Введение

Высокотемпературные отжиги в условиях вакуума являются неравновесными и называются ленгмюровским испарением (ЛИ). При ЛИ полупроводников $A^{III}B^{V}$ выделяют две температурные области: конгруэнтное испарение, когда скорость испарения компонентов одинакова; и неконгруэнтное, когда компонент пятой группы испаряется интенсивнее, а металл третьей группы накапливается на поверхности и собирается в капли. Образование капель металла и развитие рельефа поверхности в процессе отжига происходит при температурах, начиная с максимальной температуры конгруэнтного испарения T_c [1]. Ранее нами была предложена решеточная Монте-Карло модель ленгмюровского испарения GaAs [2]. В [2] было показано, что T_c более чувствительна к рельефу поверхности с ориентацией (111)A, чем с ориентацией (111)B. В настоящей работе анализировалось влияние неравновесных высокотемпературных отжигов на рельеф поверхностей подложек GaAs(111)A с различной исходной морфологией.

Моделирование отжигов подложек GaAs

Расчеты осуществлялись с использованием программного пакета SilSim3D на базе решеточной Монте-Карло модели [3]. Для моделирования неравновесных отжигов подложек GaAs(111)A использовалась 4-х компонентная система: галлий в твердом и жидком состоянии и мышьяк в атомарной и молекулярной формах. В модели рассматривались следующие элементарные процессы: поверхностная диффузия всех компонентов; образование и распад молекул As_2; десорбция галлия и As_2; растворение GaAs в жидком галлии, кристаллизация GaAs; диффузия As в жидком галлии. Вероятность каждого процесса экспоненциально зависит от его энергии активации. Более подробное описание модели и определения энергий активации процессов можно найти в [2].

Имитация отжигов проводилась в интервале температур 940–1050 K. Рассматривались сингулярные подложки размером 120 × 120 нм^2 без дефектов и содержащие поверхностные дефекты в виде одиночных вакансий. Плотность вакансия варьировалась от $1.9\cdot10^{10}$ до $1.7\cdot10^{11}$ см$^{-2}$. Сравнение результатов моделирования преобразования рельефа дефектных и бездефектных подложек демонстрирует влияние поверхностных дефектов на преобразование морфологии поверхности при отжигах. На рис.1 представлены виды модельных поверхностей после отжига и температурные зависимости плотности вакансионных островков и капель галлия. Видно, что плотность вакансионных островков и капель на дефектной поверхности во всем температурном диапазоне больше, чем на идеальной поверхности.

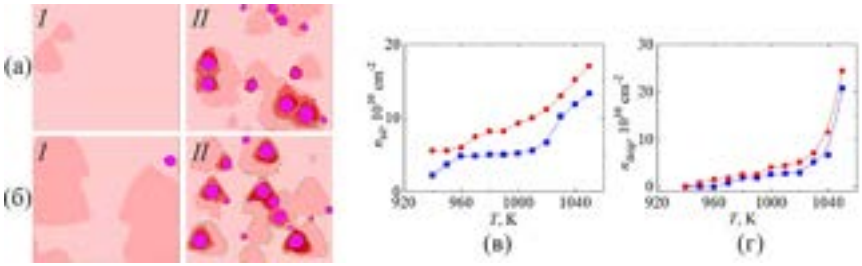

Рис. 1. Виды идеальных поверхностей (а) и поверхностей содержащих дефекты с плотностью n_{def} = $1.7\cdot10^{11}$ cm^{-2} (б) отожженных при 960 K (*I*) и 1050 K (*II*). Температурные зависимости плотности вакансионных островков (в) и плотности капель (в) на идеальных (квадраты) и дефектных (кружочки) поверхностях

Введение дефектов увеличивает вероятность разрастания точечной вакансии до вакансионного островка критического размера. Начиная с некоторой температуры на поверхности зарождаются капли галлия. Появление капель приводит к резкому увеличению общей концентрации атомов Ga на поверхности, что приводит к предотвращения возникновения новых вакансионных островков на идеальных поверхностях в диапазоне температур 960–1000 K. Вакансионные островки, зарождающиеся из-за наличия дефектов, являются дополнительным источником адатомов Ga. В результате этого капли металла не только зарождаются при более низких температурах, чем на идеальной поверхности, но и с большей плотностью.

Выводы

С помощью Монте-Карло моделирования получены температурные зависимости плотности капель галлия и вакансионных островков при неравновесном отжиге подложек GaAs(111)A. Показано, что плотность вакансионных островков и капель на дефектной поверхности во всем температурном диапазоне больше, чем на идеальной поверхности. Появление капель стабилизирует концентрацию вакансионных островков на идеальных поверхностях в диапазоне температур 960–1000 K.

Работа выполнена при поддержке программы Минобрнауки РФ (№ 0242-2021-0008).

Список использованных источников

1. S. Kanjanachuchai, C. Euaruksakul. Self-Running Ga Droplets on GaAs (111)A and (111)B Surfaces // ACS Appl. Mater. Interfaces, 2013. Vol.5, P. 7709–7713.
2. Spirina A. et al. Langmuir evaporation of GaAs(111)A and GaAs(111)B: Monte Carlo simulation // Appl. Surf. Scien, 2021, Vol.540, P. 148281. DOI: 10.1016/j.apsusc.2020.148281.
3. Карпов А.Н. и др. Решеточная модель Монте-Карло для изучения процессов формирования наноструктур // Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии, 2014, 15, 388.

FEATURES OF GALLIUM ARSENIDE SURFACE RELIEF EVOLUTION DURING ANNEALING (MONTE CARLO SIMULATION)

N.L. Shwartz, A.A. Spirina

Abstract. In this work, simulation of high-temperature annealing of GaAs (111) substrates has been carried out. The dependences of the substrate morpho-

logical transformations on the temperature and the presence of surface defects are analyzed.

Keywords: Monte Carlo, simulation, gallium arsenide, annealing.

УДК 004.3:004.9
https://doi.org/10.29003/m2483.MMMSEC-2021/98-101

МОНТЕ-КАРЛО МОДЕЛИРОВАНИЕ ИОННОЙ ДИНАМИКИ В МЕМРИСТИВНЫХ ЭЛЕМЕНТАХ

Журавлев Андрей Андреевич,
м.н.с.[1],
zhuravlyow.andrei@gmail.com,

Абгарян Каринэ Карленовна,
г.н.с., д.ф.-м.н, зав. отделом[1], *зав. кафедрой*[2],
kristal83@mail.ru

Бажанов Дмитрий Игоревич,
с.н.с. [1], *доцент*[3],
dima@kintechlab.com,

Ревизников Дмитрий Леонидович,
д.ф.-м.н., в.н.с.[1], *профессор*[2],
reviznikov@mai.ru

[1]*ФИЦ ИУ РАН, г.Москва,*
[2]*МАИ, г. Москва,*
[3]*МГУ, г. Москва*

Аннотация. Доклад посвящен статистическому моделированию образования/разрушения кислородных вакансий и миграции ионов кислорода в оксидных слоях мемристивных элементов.

Ключевые слова: мемристор, кислородные вакансии, миграция ионов, филамент, многомасштабное моделирование, кинетический метод Монте-Карло.

Переключение между различными состояниями мемристивного элемента на основе тонкого оксидного слоя связано с образованием/разрушением филаментарных структур, представляющих собой кластеры кислородных вакансий. Широкий спектр временных масштабов, присущий рассматриваемому классу явлений, обуславливает актуальность многомасштабного подхода к моделированию [1–3]. Можно выделить два основных класса математических моделей, описывающих динамику переключений мемристора.

Модели первого класса являются аппроксимационными (полуэмпирическими). Они основаны на представлении мемристора нелинейной динамической системой относительно переменной состояния, связанной с концентрацией кислородных вакансий. Идентификация параметров модели осуществляется путем минимизации отклонения расчетных вольт-амперных характеристик от наблюдаемых в экспериментах или полученных на основе прямого моделирования. Такие модели, будучи вычислительно довольно экономичными, могут эффективно использоваться при имитационном моделировании нейроморфных систем на основе мемристорных кросс-баров [4–6].

Второй класс моделей основан на прямом моделировании процессов генерации/рекомбинации ионов кислорода, ионного и электронного транспорта в мемристорном слое. Такой подход связан с высокими вычислительными затратами, однако позволяет провести моделирование, основываясь на первичной информации – данных о химическом составе материала и его кристаллической структуре.

Можно выделить следующие основные этапы многомасштабного моделирования.

На первом этапе проводятся квантово-механические (первопринципные) расчеты, позволяющие определить распределение электронной плотности в структуре и энергетические барьеры генерации/рекомбинации ионов кислорода.

По результатам первопринципного моделирования формируется информация для идентификации эмпирических потенциалов межатомного взаимодействия, используемых на втором этапе, где проводится молекулярно-динамическое моделирование. Для параметрической идентификации потенциалов межатомного взаимодействия нами реализованы градиентные алгоритмы оптимизации с применением быстрого автоматического дифференцирования. Использование молекулярно-динамического моделирования непосредственно в данной задаче затруднительно в связи с несопоставимостью характерных временных масштабов. Однако, с его помощью могут быть рассчитаны энергетические барьеры миграции ионов кислорода.

Информация об энергетических барьерах поступает на следующий уровень, где осуществляется Монте-Карло моделирование ионной динамики в мемристивном элементе. На данном этапе осуществляется статистическое моделирование, основанное на случай-

ной реализации следующих событий: генерация свободного иона путём освобождения от связи с кристаллической решёткой, рекомбинация свободного иона и незанятой вакансии, миграция ионов по узлам и междоузлиям кристаллической решетки. Вероятности событий рассчитываются исходя из энергетических барьеров, определенных с помощью молекулярно-динамического моделирования. Здесь используется метод эластичной ленты в сочетании с методом сопряженных градиентов для релаксации атомарной структуры. С целью согласования электрического поля с распределением ионов и вакансий в мемристивном элементе на каждом шаге кинетического метода Монте-Карло решается трехмерное уравнение Пуассона. Разработан оригинальный вычислительный алгоритм, позволяющий получать решение уравнения Пуассона с теоретически оптимальным порядком числа операций. Алгоритм основан на аддитивном обновлении набора функций Грина при каждом изменении в распределении плотности зарядов. Вычислительные эксперименты, проведенные на модельном оксиде, продемонстрировали стадии роста и разрушения проводящего филамента под действием меняющегося во времени напряжения.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-29-03051 мк.

Список использованных источников

1. Абгарян К.К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. – М.: МАКС Пресс. 2017. 284 с.

2. Абгарян К.К. Информационная технология построения многомасштабных моделей в задачах вычислительного материаловедения // «Издательство «Радиотехника», «Системы высокой доступности». 2018. Т. 15. № 2. С. 9–15.

3. Zhuravlev A.A., Abgaryan K.K. Reviznikov, D.L. Multiscale discrete element modeling // Symmetry. 2021. 13 (2): 219. P. 1-11..

4. Абгарян К.К., Ревизников Д.Л., Бажанов Д.И. Многомасштабное моделирование многоуровневых элементов памяти для создания нейроморфных сетей. // Наноиндустрия. 2020. Т. 13. 4s, Спецвыпуск. С. 587.

5. Morozov A.Yu., Abgaryan K.K., Reviznikov D.L. Mathematical model of a neuromorphic network based on memristive elements // Chaos, Solitons & Fractals. 2021. V. 143. P. 110548. DOI:10.1016/j.chaos.2020.110548.

6. Морозов А.Ю., Абгарян К.К., Ревизников Д.Л. Математическое моделирование самообучающейся нейроморфной сети, основанной на наноразмерных мемристивных элементах с 1T1R-кроссбар-архитектурой // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2020. Т. 23. № 3. С. 186. DOI: 10.17073/1609-3577-2020-3-186-195.

MONTE CARLO SIMULATION OF ION DYNAMICS IN MEMRISTIVE ELEMENTS

A.A. Zhuravlev, K.K. Abgaryan, D.L. Bazhanov, D.L. Reviznikov

Abstract. The work is devoted to Monte Carlo modeling of the formation / destruction of oxygen vacancies and the migration of oxygen ions in oxide layers of memristive elements.

Keywords: memristor, oxygen vacancies, ion migration, filament, multiscale modeling, kinetic Monte Carlo method.

.

4. D

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗМЕРНЫХ, РАДИАЦИОННЫХ, ПОВЕРХНОСТНЫХ И ДРУГИХ ДЕФЕКТОВ В ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ НАНОЭЛЕКТРОНИКЕ

https://doi.org/10.29003/m2484.MMMSEC-2021/104-107

AlGaN/GaN HEMT TRAP CHARACTERISTIC FREQUENCY DEPENDENCE ON TEMPERATURE AND ITS IMPACT ON THE RF POWER AMPLIFIER LINEARIZABILITY

João L. Gomes[1,2], Luís C. Nunes[1,2], and José C. Pedro[1,2],
joaolucas@ua.pt, cotimos@ua.pt, jcpedro@ua.pt, +351 234377900

[1] *Instituto de Telecomunicações, Aveiro, Portugal*
[2] *Universidade de Aveiro, Aveiro, Portugal*

Abstract. This paper presents a study of the linearizability of AlGaN/GaN HEMT based RF power amplifiers, RFPAs, and its relation with the active device trap activation energy. Based on the theory of thermally activated traps and on the experimental determination of the trap activation energy, we could show that despite different devices may exhibit traps with the same emission time-constant at room temperature, their characteristic frequency may change significantly under nominal operation because of their temperature rise. And this was found to be key to explain the distinct linearizability performance of the tested devices because different stimulus dynamics excite the long-term memory effects imposed by traps with sensible different levels.

Keywords: Activation energy, GaN HEMT, modeling, nonlinear measurements, power amplifier linearizer, trapping.

RF PA Linearizability and Its Dependence on Long-Term Memory Effects

RF power amplifiers, RFPAs, of mobile communication base-stations handle the highest amplitude signals of the whole amplifier chain, which turns them into the most power hungry electronic components of the transmitter. They play, therefore, a key role in the overall system efficiency. Increasing this power efficiency requires that the devices are operated at their available full current and voltage swings, which exposes the transistors' nonlinearities, degrading the communications signal fidelity as well as widening the spectral occupation. So, nowadays, all high-efficiency RFPAs are preceded by a linearizer, a nonlinear device intended to pre-distort the signal in a way that compensates for the RFPA's nonlinear effects. This device, usually implemented as a mathematical algorithm in the digital domain, is thus known as the digital pre-distorter, DPD, and constitutes the nonlinear inverse function of the RFPA signal transfer map. In a very simplistic way, the DPD effectiveness, depends on whether the RFPA map, $y = f(x)$, is invertible, i.e., that its derivative $f'(x)$ has no nulls – the RFPA is not operating up to signal clipping –, and that $f(x)$ is single-valued – the RFPA exhibits no

memory effects. Since the first of these conditions is easily met, it is this nonlinear dynamic behavior of RFPA input-output maps that, in practice, determines the effectiveness of the DPD-RFPA cascade, something known in the linearization field as the RFPA linearizability.

Beyond the fast memory imposed by the RFPA reactive components, along with the GaN HEMT capacitances – easily overcome by current DPD designs [1] –, nowadays, the RFPA linearizability is limited by the slow transistor memory imposed by electro-thermal effects and mostly trapping [2]. Indeed, and as shown in the following figures, the trapping state notoriously varies with the incoming signal amplitude (Fig. 1), depending on the similarity of the signal dynamics (roughly its bandwidth) and the emission time-constant (or the trap characteristic frequency). Essentially, this turns the RFPA single-valued input-output map, when the signal and the trapping dynamics are far apart ($\tau = 0.1\ \mu$s and $\tau = 10$ ms for a 1.4 MHz signal – Fig. 2), into a map with memory, when these two dynamics match.

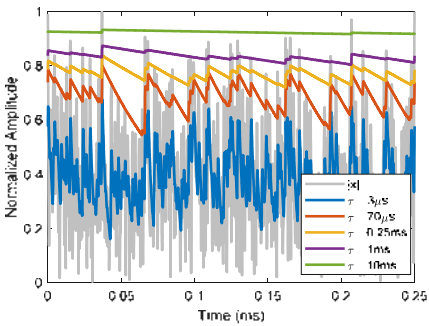

Fig. 1 – Simulation of GaN HEMT trap-state variation for different emission time-constants, when the RFPA is excited with a 1.4 MHz bandwidth signal

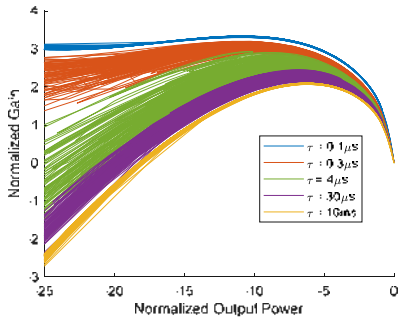

Fig. 2 – Simulation of the RFPA input-output map for different trap emission time-constants, when the RFPA is excited with a 1.4 MHz bandwidth signal

Practical Results of RFPA Linearizability for GaN HEMTs of Distinct Activation Energies

Although these detrimental long-term memory effects were so far illustrated by the device's trapping dynamics, something similar could also be said for the memory imposed by the electro-thermal time-constants. However, our studies demonstrated that, contrary to trapping, which is characterized by two clearly distinct capture (much faster) and emission (slower) time-constants (a nonlinear dynamic process), this source of memory has only a minor effect on the RFPA linearizability

since thermal phenomena are characterized by equal rise and fall (linear dynamic process) and usually longer, time-constants. However, temperature does play its role in the linearizability of the RFPA, albeit in an indirect way. What a temperature rise does is to move the trapping characteristic frequency, $\omega_0 \propto T^2 e^{-\frac{Ea}{kT}}$, to higher values, mimicking the change of the emission time-constants simulated in Figs. 1 and 2.

Fig. 3 and Fig. 4 show, respectively, the emission transients versus temperature, and the resulting Arrhenius plots, of two similar AlGaN/GaN HEMTs with an Iron-dopped buffer, grown on top of a SiC substrate. Although these devices present an almost equal trap emission time-constant ($\tau = 10$ ms) at room temperature, its evolution is notoriously different as temperature rises, as shown in Fig. 4.

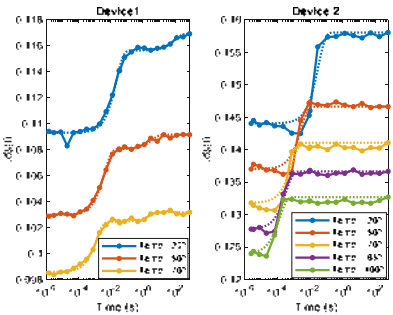

Fig. 3 – Trap emission transients measured in two similar AlGaN/GaN HEMT devices but with different activation energies

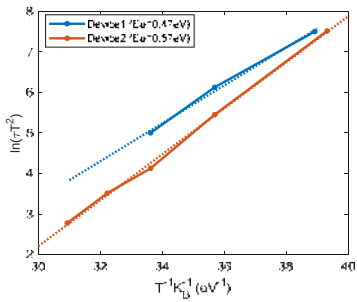

Fig. 4 – Measured Arrhenius plots of two similar AlGaN/GaN HEMT devices but with different activation energies

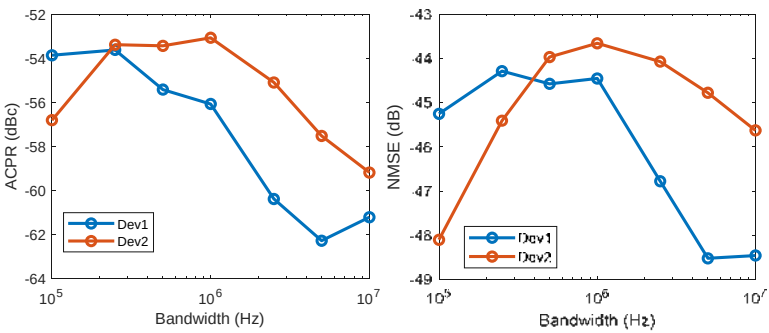

Fig. 5 – Linearization performance measured in terms of spectral occupation (adjacent-channel power ratio, ACPR) and signal fidelity (normalized mean squared error magnitude, NMSE) of two RFPAs built with the two GaN HEMTs of different activation energies

As predicted, because of these different activation energies, RFPAs built with these two devices evidence different linearizabilities when their excitation signal bandwidth is varied, as shown in Fig. 5.

References

[1] – J. Wood, *Behavioral Modeling & Linearization of RF Power Amplifiers*, Artech House, Inc., 2014.

[2] – F.M. Barradas, L.C. Nunes, T.R. Cunha, P.M. Lavrador, P.M. Cabral, and J.C. Pedro, "*Compensation of Long-Term Memory Effects on GaN HEMT-Based Power Amplifiers*," IEEE Trans. Microw. Theory Tech., vol. 65, no. 9, pp. 3379–3388, 2017.

https://doi.org/10.29003/m2485.MMMSEC-2021/107-108

MODELING THE PIEZOELECTRIC PROPERTIES OF NANOMATERIALS IN ATOMIC FORCE MICROSCOPY

Igor Bdikin

TEMA-NRD, Mechanical Engineering Department and Aveiro Institute of Nanotechnology (AIN), University of Aveiro, Aveiro, 3810-193, Portugal

Piezoelectricity and ferroelectricity, where the electric field and mechanical deformation are linearly coupled, are known in many materials. Nowadays, tremendous research activity is going on nanoscale materials (semiconductor, ferromagnetic, piezoelectric ferroelectrics, polymers and biology objects). Due abnormal 2D- and 3D-shape of these nanomaterials demonstrated unique physical properties. It can be used in important applications: sensors, generators, actuators, nonvolatile ferroelectric memories, etc. Various types of piezoelectric nanostructures have been developed. Currently, it is becoming increasingly obvious that develop new methods for investigation of micro- and nano- structures is extremely necessary. Therefore, methods for detection, visualization, analysis of the microstructures must be in priority nanotechnology. The rapid development of atomic force microscopy (AFM) and piezoresponse force microscopy (PFM) in the last time resulted in a collection of local probing tools capable of addressing the various aspects of ferroelectric behavior on submicrometer and often nanometer level [1].

Here we show the applicability and current problems of AFM and PFM for studying a broad range of materials at the nanoscale for organic and non-organic complex structures: nano tubes [2], fibers [3], nanodomains [4], thin films [5].

This work is supported by the Portuguese Foundation for Science and Technology (FCT): IF/00582/2015, UID/EMS/00481/2019-FCT and CENTRO-01-0145-FEDER-022083.

References

1. N. Balke, I. Bdikin, S.V. Kalinin and A.L. Kholkin, Electromechanical Imaging and Spectroscopy of Ferroelectric and Piezoelectric Materials: State of the Art and Prospects for the Future, Journal of the American Ceramic Society, 92 (8), 1629 – 1647 (2009).

2. I. Bdikin, V. Bystrov, S. Kopyl, R.P.G.Lopes, I. Delgadillo, J. Gracio, E. Mishina, A. Sigov, and A. L. Kholkin, Evidence of ferroelectricity and phase transition in pressed diphenylalanine peptide nanotubes, Appl. Phys. Let. 100, 043702 (2012).

3. V. Sencadas, C. Ribeiro, A. Heredia, I.K. Bdikin, A.L. Kholkin, S. Lanceros-Mendez, Local piezoelectric activity of single poly(L-lactic acid) (PLLA) microfibers, APPLIED PHYSICS A-MATERIALS SCIENCE & PROCESSING 109, 51-55 (2012).

4. I.K. Bdikin, J. Gracio, D.A. Kiselev, S.I. Raevskaya, I.P. Raevski, S.A. Prosandeev, and A.L. Kholkin, Local domain engineering in relaxor 0.77PbMg1/3Nb2/3O3-0.23PbSc1/2Nb1/2O3 single crystals, J. Appl. Phys. 110, 052002 (5pp) (2011).

5. A.V. Semchenko, V.V. Sidsky, I. Bdikin, V.E. Gaishun, S. Kopyl, D.L. Kovalenko, O. Pakhomov, S.A. Khakhomov and A.L. Kholkin, Nanoscale Piezoelectric Properties and Phase Separation in Pure and La-Doped BiFeO3 Films Prepared by Sol-Gel Method, Materials 14(7), 1694 (2021).

УДК 004.94
https://doi.org/10.29003/m2486.MMMSEC-2021/108-111

АТОМНАЯ СТРУКТУРА СТУПЕНИ И ДИНАМИКА АДАТОМОВ Sn НА ПОВЕРХНОСТИ Si(111) - $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$-Sn

Жачук Руслан Анатольевич,
к.ф.-м.н., старший научный сотрудник[1],
zhachuk@gmail.com, +7 (952) 911-44-50

Рогило Дмитрий Игоревич,
к.ф.-м.н., научный сотрудник[1],
rogilo@isp.nsc.ru, +7 (383) 330-91-49

Петров Алексей Сергеевич,
инженер-исследователь[1],
alexey_petrov@isp.nsc.ru, +7 (383) 330-90-82

Щеглов Дмитрий Владимирович,
к.ф.-м.н., старший научный сотрудник[1],
sheglov@isp.nsc.ru, +7 (383) 330-90-82

Латышев Александр Васильевич,
д.ф.-м.н., академик РАН[1],
latyshev@isp.nsc.ru, +7 (383) 333-10-80

Fabio Ronci,
PhD, senior researcher[2],
fabio.ronci@artov.ism.cnr.it, +39 06 49931

Stefano Colonna,
PhD, senior researcher[2],
stefano.colonna@artov.ism.cnr.it, +39 06 49931

[1] *ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13, Россия*
[2] *CNR_Istituto di Struttura della Materia, via del Fosso del Cavaliere 100, I-00133 Roma, Italy*

Аннотация. Изучены атомная структура ступеней на поверхности Si(111)-$\sqrt{3}\times\sqrt{3}$-Sn и динамика адатомов Sn вблизи них. Работа выполнена с помощью методов сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) и расчетов на основе теории функционала плотности. Разработана атомная модель ступени, состоящая из цепочек атомов Sn вдоль краев ступеней. Эта структура приводит к формированию двойных потенциальных ям вблизи ступеней, действующих как ловушки для атомов Sn. Найдено, что атомы Sn, флуктуирующие в двойных потенциальных ямах, приводят к флуктуирующему туннельному току СТМ в этих областях.

Ключевые слова: кремний, олово, поверхность, ступень, структура, теория функционала плотности, сканирующая туннельная микроскопия.

Среди других химических элементов, используемых при создании гетероструктур на кремнии для применений в микро- и оптоэлектронике, олово вызывает особенный интерес, так как оно относится к той же группе элементов, что и германий с кремнием. В этой работе с помощью методов сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) и расчетов на основе теории функционала плотности с применением программного пакета SIESTA была исследована атомная структура ступеней на поверхности Si(111)-$\sqrt{3}\times\sqrt{3}$-Sn и динамика адатомов Sn вблизи них.

Разработана атомная модель ступени, состоящая из цепочек атомов Sn вдоль краев ступеней (фрагмент цепочки см. на рис. 1(a), (b)). Предложенная модель обладает наименьшей энергией формирования среди 50 рассмотренных, а также хорошо согласуется с СТМ изображениями высокого разрешения ступеней на поверхности Si(111)-$\sqrt{3}\times\sqrt{3}$-Sn, полученными при обеих полярностях приложенного напряжения.

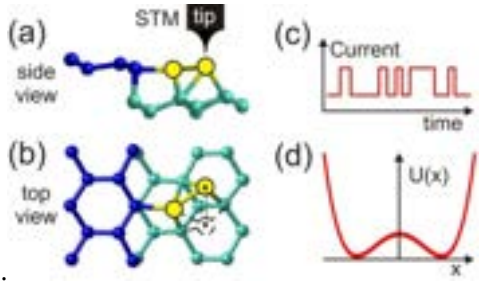

Рис. 1. (a), (b) Атомная ступень на поверхности Si(111)-$\sqrt{3}\times\sqrt{3}$-Sn: синие шары – атомы Si верхнего бислоя, бирюзовые шары – атомы нижнего бислоя, желтые шары – атомы Sn. Ближайший к краю ступени атом Sn входит в состав цепочек Sn вдоль краев ступеней на поверхности Si(111)- $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$-Sn и является стационарным. Второй, более удаленный, атом Sn перескакивает между двумя устойчивыми положениями двойной потенциальной ямы под действием тепловых флуктуаций. (a) Вид сбоку на ступень. (b) Вид сверху на ступень. (c) Вид зависимости туннельного тока от времени при расположении острия СТМ над флуктуирующим адатомом. (d) Вид потенциала в двойной потенциальной яме. Ось *x* – вдоль края ступени

Динамику флуктуирующих адатомов Sn на поверхности Si(111)-$\sqrt{3}\times\sqrt{3}$-Sn регистрировали с помощью записи туннельного тока как функции времени при отключенной системе обратной связи в СТМ. При температуре 80 К динамика адатомов регистрировалась только на нижних террасах вблизи ступеней. Вид зависимости туннельного тока от времени в таких областях представляет собой шум, имеющий верхнее и нижнее значение туннельного тока и случайным образом переключающийся между ними (рис. 1(c)). Ранее динамику адатомов Sn на поверхностях Si(111)-$\sqrt{3}\times\sqrt{3}$-Sn и Ge(111)-$\sqrt{3}\times\sqrt{3}$-Sn без ступеней с помощью этого метода успешно исследовали в работах [1, 2].

Используя разработанную модель атомной ступени были рассчитаны карты потенциальной энергии для адсорбированных атомов Sn и Si. Было найдено, что для атомов Sn наиболее глубокие минимумы потенциальной энергии находятся как раз на нижней террасе вблизи края ступени и при этом образуют двойную потенциальную яму (рис. 1(d)). Таким образом, атомы Sn, совершающие прыжки между двумя минимумами потенциальной ямы, приводят к флуктуирующему туннельному току СТМ в этих областях. Величина рассчитанного энергетического барьера в двойной потенциальной яме хорошо согласуется с частотой шума при записи туннельного тока в

СТМ. Расчет показал, что наиболее глубокие минимумы потенциальной энергии для адсорбированных атомов Si расположены со стороны верхних террас. Поэтому наличие на поверхности атомов кремния можно исключить, так как экспериментальные данные указывают на адсорбцию со стороны нижних террас.

Работа выполнена при поддержке РНФ (грант № 19-72-30023) и опубликована в [3].

Список использованных источников

1. F. Ronci, S. Colonna, S. D. Thorpe, A. Cricenti. Direct Observation of Sn Adatoms Dynamical Fluctuations at the Sn/Ge(111) Surface // Phys. Rev. Lett. 95, 156101 (2005). DOI: 10.1103/PhysRevLett.95.156101.

2. F. Ronci, S. Colonna, A. Cricenti. Evidence of Sn Adatoms Quantum Tunneling at the α-Sn/Si(111) Surface // Phys. Rev. Lett. 99, 166103 (2007). DOI: 10.1103/PhysRevLett.99.166103.

3. R.A. Zhachuk, D.I. Rogilo, A.S. Petrov, D.V. Sheglov, A.V. Latyshev, S. Colonna, F. Ronci. Atomic structure of a single step and dynamics of Sn adatoms on the Si(111)-$\sqrt{3}\times\sqrt{3}$-Sn surface // Phys. Rev. B 104, 125437 (2021). DOI: 10.1103/PhysRevB.104.125437.

ATOMIC STRUCTURE OF A SINGLE STEP AND DYNAMICS OF Sn ADATOMS ON THE Si(111)-$\sqrt{3}\times\sqrt{3}$-Sn SURFACE

R.A. Zhachuk, D.I. Rogilo, A.S. Petrov, D.V. Sheglov, A.V. Latyshev, S. Colonna, F. Ronci

Abstract. The atomic structure of single steps on the Si(111)- $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$-Sn surface and the dynamics of Sn adatoms in the vicinity of these steps were studied. The work was performed using scanning tunneling microscopy (STM) and *ab initio* calculations based on the density functional theory. The atomic structure model of the single steps consisting of Sn atomic chains along the steps was developed. This structure leads to the formation of potential double-wells near the steps acting as traps for Sn atoms and explains the fluctuating tunneling current recorded in these areas.

Keywords: silicon, tin, surface, step, structure, density functional theory, scanning tunneling microscopy.

УДК 621.382.32
https://doi.org/10.29003/m2487.MMMSEC-2021/112-116

TCAD И SPICE МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕМЕНТОВ КРЕМНИЕВЫХ БИС С УЧЕТОМ ВЛИЯНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ, РАДИАЦИИ И СТАРЕНИЯ

Петросянц Константин Орестович,
д.т.н., профессор,
kpetrosyants@hse.ru, +7 (495) 772-95-90 доб. 15208

МИЭМ НИУ ВШЭ, г. Москва

Аннотация. для компонентов БиКМОП БИС с субмикронными и нанометровыми размерами разработаны версии TCAD и SPICE-моделей, учитывающие воздействие различных видов радиации, температуры в сверхширокомдиапазоне –260°C…+300°C и старения при длительной эксплуатации.

Ключевые слова: БТ и МОП-транзисторы, TCAD модели, компактные SPICE-модели, радиационные и тепловые эффекты, эффекты старения.

Введение

Спрос на изделия экстремальной электроники в мире неуклонно растет. Как следствие, резко возрастает потребность в работах по проектированию полупроводниковых приборов, микросхем и систем, работающих в условиях влияния внешних воздействующих факторов (ВВФ) (радиации, температуры и старения). К сожалению библиотеки моделей электронных компонентов, встроенные в коммерческие TCAD и SPICE-симуляторы, не отвечают современным требованиям разработчиков радиационно- и температурно-стойкой аппаратуры.

В работе поставлена и в значительной степени решена задача создания TCAD и SPICE моделей компонентов кремниевых ИС и БИС, учитывающих влияние различных видов радиации, расширенного диапазона температур (-260°C…+300°C) и старения.

Модели разделены на три группы: для конструкторов-технологов полупроводниковых приборов, для схемотехников, для специалистов по надежности.

Подсистема TCAD-RAD-THERM моделирования компонентов БИС

Структура подсистемы приведена на рис. 1. Ее ядром является стандартная версия TCAD Sentaurus Synopsys. Ключевую роль в

процессе расчетов характеристик биполярных и МОП приборов, подверженных влиянию ВВФ, играют новые RAD- и THERM-модели, дополняющие стандартное ядро (на рис. 1 они окружены пунктиром) [1]. Блок новых RAD-моделей учитывает воздействие нейтронов, гамма-лучей, протонов на электрофизические характеристики полупроводниковой структуры прибора.

Блок THERM-моделей базируется на новых зависимостях коэффициентов теплопроводности $\lambda(T)$ Si, SiO_2, HfO_2 и других материалов в расширенном диапазоне температур (–260°C…+300°C).

Подсистема рис. 1 по своим возможностям в части учета RAD и THERM эффектов превосходит известные TCAD аналоги.

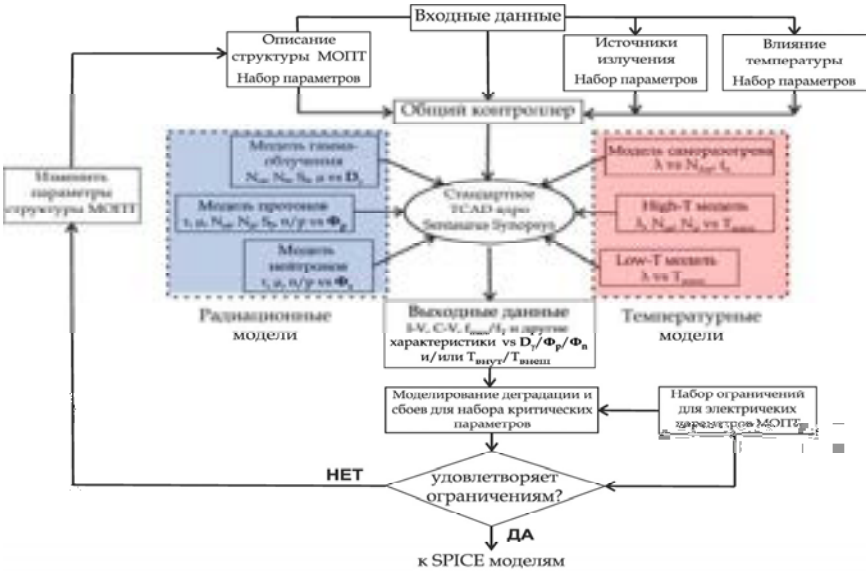

Рис. 1. Расширенная TCAD RAD-THERM библиотека физических моделей, учитывающих воздействие радиационных и температурных эффектов

Библиотека компактных SPICE-RAD-THERM-моделей компонентов БИС

Разработаны RAD-THERM версии SPICE моделей GP, VBIC, HICUM, MEXTRAM биполярных транзисторов и 7-ми наиболее популярных моделей MOSFET и FinFET транзисторов (см. табл. 1). Для их построения в систему уравнений стандартной SPICE модели введены дополнительные выражения, а в эквивалентную схему подключены схемные фрагменты, учитывающие радиационные и тепловые эффекты [1, 2].

Таблица 1

Перечень стандартных SPICE моделей, для которых разработаны RAD-THERM версии

№	Обозначение SPICE модели	Тип МОПТ				Тип температурной модели			Тип радиационной модели	
		Субмикронные		Нанометровые						
		На объемном кремнии	КНИ/КНС	На объемном кремнии	КНИ/КНС	Расшир. диапазон (–260…+300°С)	Low-T (–260°С)	High-T (+300°С)	Гамма, Нейтроны, Электроны, Протоны	Импульс, ОЯЧ
1	BSIM4	+	+				+		+	+
2	BSIMSOI4		+			+	+	+	+	+
3	BSIM6	+		+			+			
4	BSIM-CMG			+	+	+	+	+	+	
5	PSP103	+		+			+		+	
6	UTSOI2		+		+	+	+	+	+	
7	EKV	+	+	+	+		+		+	+

В качестве примера, RAD-THERM макромодель МОПТ со структурой КНИ приведена на рис. 2. RAD-модели учитывают воздействие нейтронов, электронов, гамма-лучей, протонов, импульсного излучения, одиночных ядерных частиц (ОЯЧ).

Температурный диапазон моделей расширен со стандартного (–60°С…+125°С) до сверхширокого (–260°С…+300°С).

В случае одновременного воздействия RAD- и THERM факторов их совместный учет осуществляется в рамках одной модели.

Разработаны методики определения параметров SPICE-RAD-THERM моделей из результатов измерения ВАХ и ВФХ тестовых приборов в диапазонах температур и радиационных воздействий.

По своим возможностям библиотека SPICE-RAD-THERM моделей превосходит существующие аналоги.

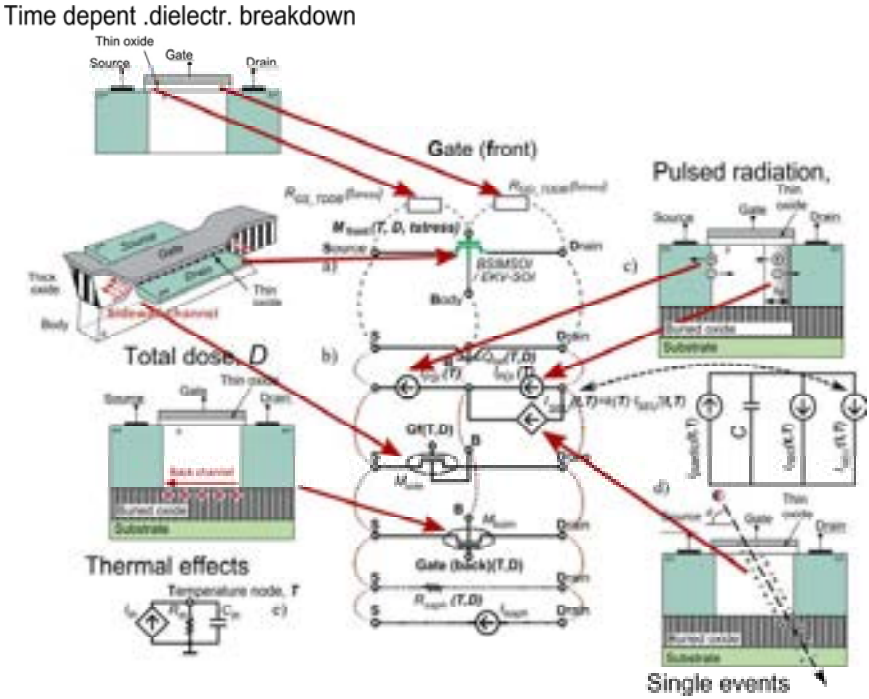

Рис. 2. Структура SPICE RAD-THERM макромодели,
учитывающая влияние 3-х факторов: радиации, температуры и старения

SPICE модели элементов БИС, учитывающие эффекты старения (Aging)

Разработана версия SPICE-RAD-THERM-AGING- моделей, учитывающих физические механизмы старения биполярных и МОП-приборов: генерацию «горячих» носителей заряда (hot carrier injection – HCI); отрицательное (NBTI для p-МОПТ) или положительное (PBTI для n-МОПТ) смещение I_C–$V_{ЗИ}$ ВАХ из-за температурной нестабильности; пробой диэлектрика затвора со временем (time dependent dielectric breakdown) [3].

В результате, основные параметры МОПТ V_{TH}, μ_{eff}, SS и др., рассчитанные по макромодели рис. , зависят не только от интенсивности радиации D, температуры T, но и от времени работы прибора в схеме t_{stress}. Это дает возможность рассчитать с помощью программы SPICE основные показатели надежности, такие как время бесбойной работы t_{MTTF} (mean time to failure – MTTF) и др.

Выводы

Разработаны библиотеки моделей TCAD-RAD-THERM, SPICE-RAD-THERM и SPICE-AGING, учитывающие эффекты различных видов радиации, сверхвысоких и криогенных температур и старения. Модели встроены в существующие коммерческие симуляторы TCAD Sentaurus Synopsys, LTSpice, Miltisim, ADS, HSpice, Eldo, Spectre, что позволило распространить возможности этих симуляторов на проектирование радиационно- и температурно-стойких ИС/БИС и СнК.

Приведены примеры использования разработанных моделей при проектировании аналоговых и цифровых фрагментов радиационно- и температурно-стойких БиКМОП БИС.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 20-57-53004.

Список использованных источников

1. Петросянц К.О., и др. TCAD и SPICE-модели для описания радиационных эффектов в наноразмерных МОП-транзисторных структурах // Проблемы разработки перспективных микро- и наноэлектронных систем (МЭС). 2020. Выпуск 4. С. 2–8.
2. Petrosyants K.O., at el. SPICE Compact BJT, MOSFET and JFET Models for ICs Simulation in the Wide Temperature Range (from -200°C to +300°C) // IEEE Trans. on CAD of ICs and Systems. 2021. Vol. 40. No. 4. P. 708–722.
3. Li, X., Qin, J., Bernstein, J.B. Compact modeling of MOSFET wearout mechanisms for circuit-reliability simulation // IEEE Transactions on Device and Materials Reliability, 2008, Vol. 8. No 1. P. 98–121.

TCAD AND SPICE MODELING OF SILICON VLSI ELEMENTS TAKING INTO ACCOUNT FOR TEMPERATURE, RADIATION AND AGING EFFECTS

Petrosyants K.O.

Abstract. RAD-THERM-AGING versions of TCAD and SPICE models have been developed for BiCMOS VLSI components with submicron and nanometer sizes, taking into account for various types of radiation effects, temperatures in the wide range of -260°C…+300°C and aging during long-term operation.

Keywords: BJT and MOSFETs, TCAD and SPICE models, radiation and thermal effects, aging effects.

УДК 621.382.32
https://doi.org/10.29003/m2488.MMMSEC-2021/117-120

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТЕЙ ПРИМЕНЕНИЯ РАЗЛИЧНЫХ ПРОМЫШЛЕННЫХ ЭКСТРАКТОРОВ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ SPICE-МОДЕЛЕЙ СУБМИКРОННЫХ МОПТ В ДИАПАЗОНЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ДО 300°С

Петросянц Константин Орестович,
д.т.н., профессор-исследователь[1, 2],
kpetrosyants@hse.ru, +7 (495) 772-95-90 доб. 15208

Исмаил-Заде Мамед Рашидович,
преподаватель[1],
mismailzade@hse.ru, +7 (495) 772-95-90 доб. 15227

Самбурский Лев Михайлович,
к.т.н., доцент[1, 2],
lsambursky@hse.ru, +7 (495) 772-95-90 доб. 15227

[1] *МИЭМ НИУ ВШЭ, г. Москва*
[2] *ИППМ РАН, г. Москва*

Аннотация. Исследовались возможности определения параметров SPICE-моделей в расширенном диапазоне температур с помощью трех наиболее распространенных коммерческих экстракторов IC-CAP, MBP и BSIMProPlus. Приведены сравнительные оценки эффективности экстракторов на примере расчета ВАХ МОПТ с учетом температуры до +300°С.

Ключевые слова: компактные SPICE-модели, экстракция параметров модели, МОП-транзисторы, высокая температура, SPICE моделирование.

Введение

Высокотемпературная электроника является самостоятельным направлением, которое включает в себя полупроводниковые приборы и схемы космических аппаратов, спутниковых систем связи и телекоммуникаций, прецизионных измерительных систем гражданского и военного назначения [1]. Проектирование и разработка таких устройств на схемотехническом уровне требует наличия SPICE-моделей электронных приборов, работающих при температурах порядка +300°С.

Традиционным способом определения набора параметров SPICE-модели МОП структур является использование коммерческих специализированных пакетов, таких как IC-CAP [2], MBP [3],

BSIMProPlus [4]. В каждый из этих экстракторов заложен общепринятый стандартный подход [5] к определению параметров SPICE-моделей, который обеспечивает удовлетворительную точность в ограниченном температурном диапазоне –60°С…+125°С [6].

В связи с этим была поставлена задача по исследованию возможностей применения перечисленных экстракторов в качестве универсального инструмента по построению масштабируемой SPICE-модели МОПТ в широком диапазоне температуры (до +300°С), а также модификации и автоматизации стандартного маршрута экстракции, распространив его на сверхширокий температурный диапазон.

Порядок проведения и результаты исследований

С использованием указанных экстракторов были определены SPICE-параметры модели BSIM4 [5] для набора 0,18-мкм КНИ *n*-МОПТ с размерами длины и ширины канала от L_{min}/W_{min} = = 0,18/0,7 мкм до L_{max}/W_{max} = 10/10 мкм при различных значениях температуры от комнатной до +300°С.

На первом этапе исследовались возможности экстракторов по определению параметров модели с использованием стандартной модели BSIM4 и стандартной процедуры экстракции при комнатной температуре. При этом оценивались время экстрагирования и погрешность моделирования сток-затворных ВАХ, которые показали следующее: IC-CAP – 5 мин., 11%; MBP – 10 мин., 10%; BsimProPlus – 3 мин., 14%.

На втором этапе была проведена модификация стандартной модели BSIM4 и процедуры экстракции путем добавления корректирующих температурных выражений для порогового напряжения, подвижности, сопротивления сток-исток и др. Получены следующие результаты: IC-CAP – 15 мин., 14%; MBP – 45 мин., 17%; BsimProPlus – 50 мин., 16%.

После выполнения всех этапов для каждого экстрактора проведена оценка эффективности применимости по следующим критериям: 1) возможность модификации SPICE-модели в экстракторе, 2) возможность модификации стандартного маршрута экстракции и 3) выполнение экстракции.

В таблице 1 приведены результаты сравнения экстракторов с использованием модифицированной модели и процедуры экстракции в диапазоне T=27°С…300°С.

Таблица 1

Сравнительные оценки параметров эффективности экстракторов

	IC-CAP	MBP	BsimProPlus
Модификация модели в экстракторе			
• возможность	+	+	+
• удобство	+	+	+
• время, мин	10	10	10
Модификация маршрута экстракции			
• возможность	+	~*	~*
• удобство	+	–	–
• время, мин	30	100	120
Выполнение экстракции			
• возможность	+	+	+
• удобство	+	–	–
• время, мин	15	45	50

~* в конце маршрута можно вставить дополнительный шаг по оптимизации введенных температурных коэффициентов

Выводы

По результатам сравнения сделаны следующие выводы.

1. Все рассмотренные экстракторы хорошо работают для стандартных моделей в стандартном диапазоне температур –60°С…+125°С.

2. Для реализации полноценного маршрута экстракции с учетом расширенного диапазона температур (до +300°С) полное, удобное, быстрое решение достигается только с использованием IC-CAP.

3. Однако, данная задача частично решаема с использованием MBP и BsimProPlus, но с большими затратами по времени и с неполной автоматизацией.

Список использованных источников

1. Cressler J.D., Mantooth H.A. Extreme environment electronics. – CRC Press, 2017.
2. IC-CAP Users’ Manual, Keysight Technologies.
3. MBP Users’ Manual, Keysight Technologies.
4. BSIMProPlus Users’ Manual, ProPlus Design Solutions, Inc.
5. X. Xi, et al., BSIM4.3.0 MOSFET Model. Berkeley, CA: Dept. Elect. Eng. Comput. Sci., Univ. California, 2003.

6. Petrosyants K.O., Sambursky L.M., Kozhukhov M.V., Ismail-zade M.R., Kharitonov I.A., Li B. SPICE Compact BJT, MOSFET and JFET Models for ICs Simulation in the Wide Temperature Range (from -200°C to +300°C) // IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems. 2021. Vol. 40. No. 4. P. 708–722.

INVESTIGATION OF THE POSSIBILITIES OF USING VARIOUS INDUSTRIAL EXTRACTORS TO DETERMINE THE SPICE MODEL PARAMETERS OF SUBMICRON MOSFETS IN THE TEMPERATURE RANGE UP TO +300°C

Petrosyants K.O., Ismail-zade M.R., Sambursky L.M.

Abstract. The possibilities of determining the SPICE model parameters in an extended temperature range were investigated using the three most common commercial extractors IC-CAP, MBP and BSIMProPlus. Comparative estimates of the efficiency of extractors are given on the example of calculating MOSFETs I–V characteristic taking into account the temperatures up to +300°C.

Keywords: compact SPICE models, model parameter extraction, MOSFETs, high temperature, SPICE modeling.

УДК 621.382.323
https://doi.org/10.29003/m2489.MMMSEC-2021/120-123

ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ ПАРАМЕТРОВ СТРУКТУРЫ FINFET НА ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СРЕДСТВАМИ TCAD-МОДЕЛИРОВАНИЯ

Петросянц Константин Орестович,
профессор, д.т.н., профессор-исследователь[1,2],
kpetrosyants@hse.ru, +7 (495) 772-95-90,15208

Силкин Денис Сергеевич,
к.т.н., научный сотрудник[1],
dsilkin@hse.ru, +7 (495) 772-95-90,15214

Попов Дмитрий Александрович,
к.т.н., доцент[1],
da.popov@hse.ru, +7 (495) 772-95-90,15214

[1] *МИЭМ НИУ ВШЭ, г. Москва*
[2] *ИППМ РАН, г. Москва*

Аннотация. С помощью TCAD-моделирования исследовано влияние изменения параметров структуры FinFET, таких как размеры слоёв затвор-

ного стека, форма ребра или уровни легирования, на электрические характеристики прибора.

Ключевые слова: TCAD-моделирование, FinFET, параметры структуры.

Введение

Базовым элементом современных СБИС, серийно выпускаемых по технологическим процесса 28-7 нм, является FinFET (от англ. «fin» – ребро) [1]–[2]. Экспериментальное исследование влияния структурных параметров этих транзисторов на электрические может быть затруднено вследствие того, что из-за их линейных размеров паразитные значения сопротивления, индуктивности и ёмкости, вносимые схемой измерения, могут быть сопоставимы с внутренними параметрами самого транзистора. Поэтому большое значение при решении такого рода задач приобретает приборно-технологическое моделирование.

TCAD моделирование FinFET структуры

В рамках российско-китайского гранта была разработана TCAD-модель 8-fin FinFET с различными длинами канала и трапецеидальным ребром. Основой для модели послужили экспериментальные структуры производства Институтом микроэлектроники Китайской академии наук (IMECAS). Элементарная ячейка и сравнение смоделированных и измеренных сток-затворных ВАХ транзистора представлено на рис. 1. Погрешность модели не превышает 15%.

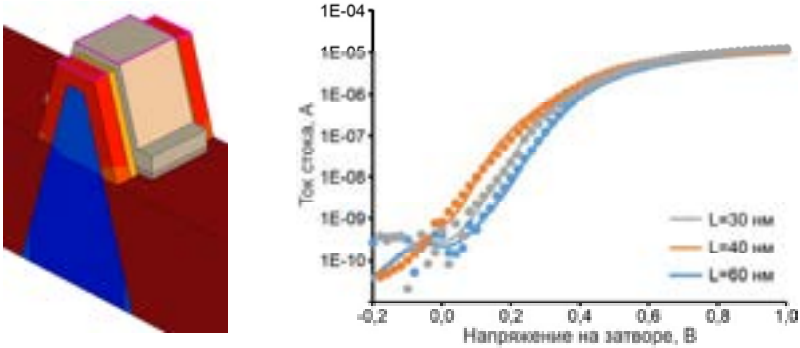

Рис. 1. Элементарная ячейка (слева) и сравнение эксперимента и моделирования (справа) для 8-fin FinFET с длинами канала 30, 40 и 60 нм

На базе разработанной модели была проведена оценка влияния на электрические характеристики следующих параметров.

1. Уровень легирования ребра.
2. Уровень легирования областей сток/исток.
3. Толщины подзатворных диэлектриков.
4. Формы ребра.

Оценивалось влияние данных параметров на максимальный ток FinFET, крутизну характеристики, а также напряжение смещения. Анализ экспериментальных данных показал, что ток утечки при измерениях ведёт себя нестабильно. Выяснить причины такого поведения и отразить их в модели не представляется возможным, поэтому в рамках данной работы оценка влияния параметров структуры на ток утечки не проводилась.

Для оценки влияния формы ребра трапецеидальное ребро было преобразовано в прямоугольное ребро с сохранением постоянной ширины канала. Далее снималась зависимость параметров транзистора от ширины ребра.

Краткие результаты проведённой оценки.

1. Уровень легирования ребра FinFET оказывает влияние на максимальный ток и пороговое напряжение. С увеличением уровня легирования максимальный ток уменьшается, а пороговое напряжение растёт. Изменение уровня легирования на порядок приводит к изменению максимального тока на 17% и напряжения смещения в 3,5 раза.

2. Уровень легирования областей сток-исток FinFET оказывает влияние на максимальный ток. С увеличением уровня легирования максимальный ток растёт. Изменение уровня легирования на порядок приводит к изменению максимального тока в 2 раза.

3. Толщины подзатворных диэлектриков оказывают влияние на максимальный ток и пороговое напряжение. С увеличением толщины максимальный ток уменьшается, а пороговое напряжение растёт. Изменение толщины в два раза приводит к изменению максимального тока на 8% и напряжения смещения на 10%.

Преобразование трапеции в прямоугольник повлияло на пороговое напряжение и крутизну. Пороговое напряжение снизилось на 5%, а крутизна уменьшилась на 6,5%. Уменьшение ширины прямоугольника сказалось на максимальном токе, пороговом напряжении и крутизне. При этом ток вырос, а крутизна и пороговое напряжение уменьшились. При изменении ширины в 4 раза ток изменился на 7,5%, пороговое напряжение на 41,5%, а крутизна на 8%.

Выводы

В работе выполнено TCAD моделирование FinFET структур с различными геометрическими параметрами. Результаты показывают, что в части уровней легирования и строения затворного стека FinFET демонстрирует поведение, близкое к традиционным МОПТ, но вместе с тем существенное влияние на его электрические параметры оказывает геометрия ребра.

Работа выполнена при финансовой поддержке совместного гранта РФФИ и Фонда научных исследований Китая (грант № 20-57-53004).

Список использованных источников

1. Lee H.-J., Rami S., Ravikumar S., Neeli V., Phoa K., Sell B., Zhang Y. Intel 22nm FinFET (22FFL) Process Technology for RF and mm Wave Applications and Circuit Design Optimization for FinFET Technology // 2018 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM). – San Francisco: IEEE, 2018. – P. 14.1.1–14.1.4.

2. Hook T.B. Fully depleted devices for designers: FDSOI and FinFETs // Proceedings of the IEEE 2012 Custom Integrated Circuits Conference. – San Jose: IEEE, 2012. – P. 1–7.

EVALUATION OF THE INFLUENCE OF FINFET STRUCTURE PARAMETERS ON ELECTRICAL CHARACTERISTICS BY TCAD

K.O. Petrosyants, D.S. Silkin, D.A. Popov

Abstract. In this work, the influence of changes in the FinFET structure parameters, such as the dimensions of the gate stack layers, the shape of the fin or doping levels, on the electrical characteristics of the device is investigated with the TCAD modeling.

Keywords: TCAD modeling, FinFET, structure parameters.

УДК 537.9:004.94
https://doi.org/10.29003/m2490.MMMSEC-2021/124-127

AB-INITIO РАСЧЕТ ВЛИЯНИЯ ПОЛОЖЕНИЯ АДСОРБЦИИ НА ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЕ НАМАГНИЧЕННОСТИ В СИЛИЦЕНЕ, ЛЕГИРОВАННОМ ФОСФОРОМ

Прохоренко Анастасия Валерьевна,
научный сотрудник[1],
aimpva@pnu.edu.ru, +7 (924) 225-42-40

Гниденко Антон Александрович,
к.ф.-м.н., научный сотрудник[1,2],
agnidenko@mail.ru, +7 (924) 203-06-65

Чибисов Андрей Николаевич,
к.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник[1,3],
andreichibisov@yandex.ru, +7 (924) 402-89-08

Чибисова Мария Анатольевна,
к.ф.-м.н., старший научный сотрудник[1,3],
omariya2003@yandex.ru, +7 (924) 113-42-09

[1] *Тихоокеанский государственный университет, г. Хабаровск*
[2] *ФГБУН Институт Материаловедения ХНЦ ДВО РАН, г. Хабаровск*
[3] *Вычислительный центр ДВО РАН, г. Хабаровск*

Аннотация. Поведение (замещение и адсорбция) атома фосфора на поверхности силицена изучено с помощью квантово-механических расчетов. Установлены наиболее выгодные положения, энергии связи и величина активационного барьера для диффузии фосфора. Описано изменение локального магнитного момента на атоме фосфора в зависимости от его позиции и положений окружающих атомов кремния.

Ключевые слова: теория функционала плотности, метод псевдопотенциала, силицен, фосфор.

Введение

После открытия графена значительные усилия были направлены на теоретическое исследование и попытки экспериментального синтеза аналогичных двумерных материалов из других элементов IV группы, в том числе кремния. Гипотетический гексагональный монослой атомов кремния получил название силицена. На практике двумерные кремниевые структуры получают путём осаждения кремния на поверхности металлов, с которыми он очень слабо взаимодействует и не образует химических соединений. Силицен

представляет огромный интерес для фундаментальной физики и практического применения. Экспериментальные и теоретические исследования [1–4] показали перспективы использования силицена, который можно легко функционализировать химически или механически и внедрить в современную электронику [6]. Также стоит отметить, что силицен гораздо проще интегрировать в современную кремниевую электронику, нежели графен. Исследование взаимодействия атомов фосфора с поверхностью силицена, представленное в данной работе, может представлять интерес в перспективе создания кубитов для квантовых вычислителей на основе данного материала, по аналогии с кристаллическим кремнием, допированным фосфором.

Результаты расчетов и их анализ

Квантово-механические расчёты проводились с использованием пакета программ Quantum Espresso [7], в основе которого лежит теория функционала плотности и метод псевдопотенциала. Для обменно-корреляционного потенциала использовалось приближение обобщённых градиентов в форме PBEsol [8]. Расчёты выполнялись с учётом спин-орбитального неколлинеарного взаимодействия. Полнорелятивистские псевдопотенциалы для кремния и фосфора были выбраны из библиотеки программы Quantum Espresso [9] и тщательно протестированы. В работе были использованы ультрамягкие псевдопотенциалы, но для выполнения анализа Бейдера для определения величин заряда на атомах ключевые атомные конфигурации были рассчитаны с использованием PAW псевдопотенциалов. Энергия обрезания базиса плоских волн составила 476 эВ. Тестовые расчеты для элементарной ячейки силицена были проведены с однородной сеткой k-точек 36×36×1, построенной по схеме Монкхорста-Пэка. Для увеличенной, 32-х атомной ячейки силицена была использована сетка k-точек размерности 9×9×1.

Изначально был рассмотрен процесс замещения. В силицене один атом кремния заменялся на атом фосфора. Проводились расчёты с использованием ультрамягкого потенциала с учётом намагниченности, без учёта и с PAW псевдопотенциалом с намагниченностью. Энергия связи составляет -3.34, -5.11, -3.34 эВ.

Для адсорбции силицен имеет четыре возможных расположения (рис. 1). Было выявлено, что наиболее выгодное положение соответствует точке Hill. Энергетических выигрыш по сравнению с замещением получается 0.5 эВ. Значение намагниченности больше в энерге-

тически невыгодных положениях. То есть намагниченность возрастает в том случае, когда фосфор располагается в положении, при котором система находится в менее равновесном состоянии. Намагниченность на фосфоре однозначно зависит от кремниевого окружения, количества соседних атомов кремния, расстояний до них.

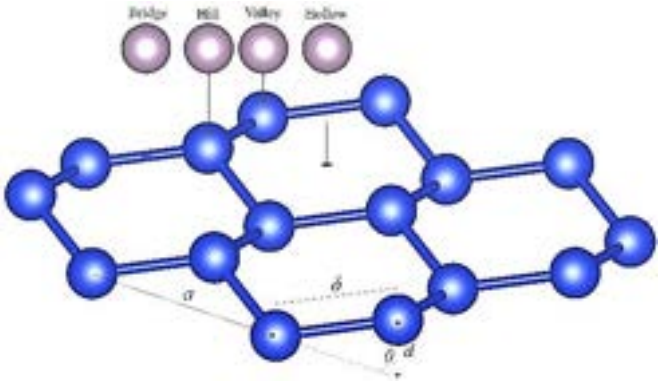

Рис. 1. Структура силицена и возможные места адсорбции

Метод Nudged Elastic Band (NEB) используется для определения пути реакции и переходного состояния между реагентом и состоянием продукта. Рассматривался случай перемещения атома фосфора по поверхности силицена и точки Hill через гексагональное кольцо в точку Hill. Энергетический барьер данной системы находится при положении Hollow-Hill. Была определена энергия активации для преодоления энергетического барьера, которая составляет 1.51 эВ.

Вывод

Проведенные квантово-механические расчеты позволили получить следующие результаты: определено оптимальное положение атома фосфора на поверхности силицена при адсорбции. Установлено, что адсорбция является более выгодной, нежели замещение. Энергетический выигрыш составляет 0.5 эВ. Определена величина намагниченности на атоме фосфора при замещении атома кремния фосфором в кристаллической ячейке, замещении в силицене и при различных положениях адсорбции. Благодаря методу NEB была уточнена величина энергетического барьера по сравнению с расчётом, в котором промежуточные точки задавались вручную.

Данные результаты могут быть полезны для планирования проведения последующих исследований, как экспериментальными, так и теоретическими методами.

Работа выполнялась в рамках тематики Лаборатории моделирования квантовых процессов ТОГУ в соответствии с Государственным заданием на выполнение НИР Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № 0818-2020-0005).

Список использованных источников

1. Padova, P.D., Quaresima, C. et al. Evidence of graphene-like electronic signature in silicene nanoribbons // Physical Review Letters, 2010, V. 96, P. 261905.
2. Padova, P.D., Leandri, C. et al. Burning Match Oxidation Process of Silicon Nanowires Screened at the Atomic Scale // Nano Letters, 2008, V. 8, P. 2299.
3. Vogt, P., Padova, P.D. et al. Silicene: Compelling Experimental Evidence for Graphenelike Two-Dimensional Silicon // Physical Review Letters, 2012, V. 108, P. 155501.
4. Lin, C.-L., Arafune, R. et al. Structure of silicene grown on Ag (111) // Applied Physics Express, 2012 – V. 5, P. 045802.
5. Jamgotchian, H., Colignon, Y. et al. Growth of silicene layers on Ag(111): Unexpected effect of the substrate temperature // Journal of Physics Condensed Matter, 2012, V. 24, P. 172001.
6. Fleurence, A., Friedlein, R. et al. Experimental Evidence for Epitaxial Silicene on Diboride Thin Films // Physical Review Letters, 2012, V. 108, P. 245501.
7. Giannozzi, P., Baroni, S. et al. // QUANTUM ESPRESSO: A Modular And Open-Source Software Project For Quantum Simulations Of Materials. Journal of Physics: Condensed Matter 2009, 21, 395502.
8. Perdew, J., Ruzsinszky, A. et al // Restoring The Density-Gradient Expansion For Exchange In Solids And Surfaces. Physical Review Letters 2008, 100, 136406.
9. Dal Corso, A. Pseudopotentials Periodic Table: From H to Pu. Computational Materials Science 2014, 95, 337-350.

AB INITIO CALCULATION OF ADSORPTION POSITION EFFECT ON MAGNETIZATION REDISTRIBUTION IN P-DOPED SILICENE

A.V. Prokhorenko, A.A. Gnidenko, A.N. Chibisov, M.A. Chibisova

Abstract. The behavior (substitution and adsorption) of a phosphorus atom on the surface of silicene is studied using quantum mechanical calculations. The most favorable positions, binding energy and activation of the phosphorus diffusion barrier have been established. The change in the local magnetic moment of the phosphorus atom is described depending on its position and the position of the surrounding silicon elements.

Keywords: density functional theory, pseudopotential method, silicene, phosphorus.

5. E

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАБОТЫ МНОГОУРОВНЕВЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ПАМЯТИ ДЛЯ КОМПЬЮТЕРОВ СЛЕДУЮЩЕГО ПОКОЛЕНИЯ

УДК 621.382
https://doi.org/10.29003/m2491.MMMSEC-2021/130-132

ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРИНЦИПОВ РЕЗИСТИВНОГО ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ В ReRAM-СТУКТУРАХ НА ОСНОВЕ ОСКИДА ГАФНИЯ

Ганыкина Екатерина Андреевна,
научный сотрудник[1, 2],
eganykina@niime.ru, +7 (495) 229-74-28

Резванов Аскар Анварович,
к.ф.-м.н., начальник лаборатории[1, 2],
arezvanov@niime.ru, +7 (495) 229-74-28

Горнев Евгений Сергеевич,
член-корреспондент РАН, д.т.н, профессор,
начальник управления РПТН[1],
egornev@niime.ru, +7 (903) 969-60-97

[1] *АО НИИМЭ, г. Зеленоград*
[2] *МФТИ (НИУ), г. Долгопрудный*

Аннотация. В настоящей работе исследуются физические принципы резистивного переключения в структуре Au/Ti/HfO_2/Au/Si, описывается перенос ионов кислорода, теплопередача, а также протекание электрического тока через структуру.

Ключевые слова: резистивное переключение, мемристор, проводящий филамент.

Введение

Резистивная память (ReRAM) представляет собой наиболее перспективный вид энергонезависимой памяти, основными преимуществами которого являются высокая скорость работы, долговечность и совместимость с КМОП-технологией, что в свою очередь позволяет эффективно использовать ReRAM-память для нейроморфных вычислений [1].

Для улучшения контроля электрических характеристик данного типа устройств необходимо тщательное изучение физики транспортного механизма кислородных ионов внутри резистивного слоя оксида.

Основные положения модели

В работе рассматривается мемристорная структура на основе оксида гафния – Au/Ti/HfO_2/Au/Si. При подаче положительного

напряжения на верхний электрод начинается формирование проводящего филамента, что приводит устройство в состояние SET. При смене полярности происходит разрыв филамента и изменение состояние устройства с SET на RESET [2]. Такой тип переключения обусловлен миграцией кислородных вакансий внутри проводящего слоя, которая в значительной степени зависит от температуры и электрического поля.

В модели совместно решаются 3 уравнения для вычисления концентрации кислородных вакансий n_V, электрического потенциала V и температуры T: уравнение диффузии кислородных вакансий (1), уравнение непрерывности (2) и уравнение теплопроводности (3), представленные ниже.

$$\frac{dn_V}{dt} = \nabla \cdot (-u_V n_V + D_V \nabla n_V + S_V D_V n_V \nabla T)$$

$$\nabla \cdot \left(\sigma \nabla V + \varepsilon \frac{d}{dt} \nabla V\right) = 0$$

$$\rho C_p \frac{dT}{dt} - \nabla \cdot (k \nabla T) = \sigma (\nabla V)^2$$

где u_V – скорость дрейфа вакансий, D_V – коэффициент диффузии вакансий, S_V – коэффициент термодиффузии, V – электрический потенциал, σ – электрическая проводимость, ε – диэлектрическая проницаемость, ρ – плотность, C_P – удельная теплоемкость.

Здесь учитывается дрейф, диффузия и термодиффузия кислородных вакансий внутри проводящего слоя, а также протекание тока и теплопередача во всех направлениях [3]. Благодаря объединению нескольких физических эффектов, а именно: дрейфа (движущая сила – электрическое поле), диффузии (движущая сила – градиент концентрации) и термодиффузии (движущая сила – градиент температуры), кислородные вакансии образуют проводящий слой внутри слоя диэлектрика. Электроны, инжектированные из электрода, прыгают по положительно заряженным вакансиям, переводя оксид гафния в проводящее состояние [4]. Предполагается, что электрическая проводимость и коэффициент теплопроводности зависят от n_V.

Данная модель количественно объясняет динамический процесс резистивного переключения: процесс SET включает в себя образование проводящего филамента под действием температуры и электрического поля с его последующим расширением; в свою очередь

процесс RESET включает в себя термический разрыв филамента с образованием изолирующей области.

Выводы

В работе представлена физическая модель мемристора на основе оксида гафния, учитывающая дрейф, диффузию и термодиффузию кислородных вакансий, с помощью которой были получены распределения концентрации кислородных вакансий, электрического потенциала и температуры в процессах SET и RESET.

Изменение свойств материала, расположение слоев, выбор электродов и подложки сильно влияют на электрические характеристики устройства, однако предложенная модель позволяет точно прогнозировать характеристики резистивного переключения.

Список использованных источников

1. Красников Г.Я. Исследование влияния материала верхнего электрода на свойства МДП структур //Диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук / Национальный исследовательский университет МИЭТ. Москва, 1989.
2. Goux L. OxRAM technology development and performances //Advances in Non-volatile Memory and Storage Technology. – 2019. – С. 3–33.
3. Larentis S. et al. Resistive switching by voltage-driven ion migration in bipolar RRAM – Part II: Modeling //IEEE Transactions on Electron Devices. – 2012. – Т. 59. – №. 9. – С. 2468–2475.
4. Kalantarian A. HfO 2-Based Resistance Switching Non-Volatile Random Access Memory: Low Power Operation and Reduced Variability. – Stanford University, 2015.

INVESTIGATION OF PHYSICAL PRINCIPLES OF RESISTIVE SWITCHING IN RERAM STRUCTURES BASED ON HAFNIUM OXIDE

E.A. Ganykina, A.A. Rezvanov, Ye.S. Gornev

Abstract. In this paper, the physical principles of resistive switching in the Au/Ti/HfO_2/Au/Si memristor are investigated, including oxygen ions transport, heat transfer and electric current flow through the structure.

Keywords: resistive switching, memristor, conductive filament.

УДК 004.3:004.9
https://doi.org/10.29003/m2492.MMMSEC-2021/133-136

СТОХАСТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ИМПУЛЬСНОЙ НЕЙРОМОРФНОЙ СЕТИ

Морозов Александр Юрьевич,
к.ф.-м.н., н.с.[1], старший преподаватель[2],
morozov@infway.ru

Абгарян Каринэ Карленовна,
д.ф.-м.н., зав. отделом[1], зав. кафедрой[2],
kristal83@mail.ru

Ревизников Дмитрий Леонидович,
д.ф.-м.н., в.н.с.[1], профессор[2],
reviznikov@mai.ru

[1] ФИЦ ИУ РАН, г.Москва, [2]МАИ, г. Москва

Аннотация. Работа посвящена имитационному моделированию аналоговой нейронной сети основанной на мемристивных элементах с учетом стохастической динамики их функционирования.

Ключевые слова: мемристор, аддитивный шум, стохастические ОДУ, нейронная сеть, STDP, распознавание.

Введение

Функционирование мемристивных элементов носит отчасти стохастический характер, что подтверждается экспериментальными данными [1]. Процесс переключения мемристора из низкоомного состояния в высокоомное и наоборот происходит от цикла к циклу, как правило, по-разному. Природа такого поведения связана со случайными процессами, происходящими на уровне перемещения кислородных вакансий в диэлектрической пленке мемристивного элемента. Подробное экспериментальное и теоретическое исследование этого эффекта проведено в [2]. Было отмечено, что внутренний и внешний шум могут играть положительную роль в процессе резистивного переключения, вызывая рост контрастности между состояниями низкого и высокого сопротивления, а также ускоряя процесс релаксации.

Ранее авторами настоящей работы была предложена математическая модель аналоговой импульсной нейронной сети основанной на мемристивных элементах с методом самообучения Spike Timing Dependent Plasticity (STDP) [3–4]. Интерес представляет исследова-

ние влияния стохастической динамики переключения мемристоров на функционирование нейроморфной сети [5].

Стохастическая математическая модель мемристора

Математические модели мемристоров обычно формулируются в виде динамических систем относительно параметра состояния мемристора, характеризующего уровень проводимости элемента. Один из самых простых подходов к учету стохастических эффектов – использовать стохастическое уравнение для переменной состояния вместо детерминированного. В [6] использовалось уравнение состояния с аддитивным шумом $d\mathbf{x} = -\nabla V(\mathbf{x})dt + G(t)dW$ (где $\mathbf{x}$ – вектор переменных случайного процесса; $V(\mathbf{x})$ – потенциал, присущий системе; $G(t)$ – функция, задающая сигнал, входящий в систему; W – винеровский процесс) и наблюдался эффект стохастического резонанса в мемристоре.

В настоящей работе используется модель, предложенная в [7], с учетом шума:

$$dx = \eta dW + a \cdot V^s \begin{cases} \left[1-(1-x)^p\right]dt, V \le -v_{thr}, \\ 0, -v_{thr} < V \le v_{thr}, \\ \left[1-x^p\right]dt, V > v_{thr}, \end{cases}$$

$$I = x^n \beta \sinh(\alpha_M V) + \chi\left[\exp(\gamma V) - 1\right],\ p = 2\,\mathrm{round}\left[b\left(|V| + c\right)^{-1}\right],$$

где $x \in [0,1]$ – переменная состояния; a – постоянная, определяемая свойствами материала; s – нечетное целое число; I, V – текущие значения тока, напряжения и сопротивления; v_{thr} – пороговое значение напряжения активации; $n, \beta, \alpha_M, \chi, \gamma$ – подгоночные параметры в выражении для тока; round – функция получения целочисленного результата; b, c – подгоночные коэффициенты основного уравнения; η – коэффициент, характеризующий интенсивность шума.

Имитационное моделирование нейроморфной сети

Производится модификация ранее разработанной математической модели нейроморфной сети [3], путем замены уравнения отвечающего за изменение состояний мемристивных элементов на стохастическое. Выполнятся решение задачи распознавания двух

черно-белых изображения размером 8 на 8 пикселей. Параметры и начальное состояние модели, а также последовательность обучения соответствуют работе [3], т.е. детерминированной модели. Результаты получены при $\eta = 0.05$. На рис. 1 показана зависимость точности распознавания от номера эпохи обучения. Здесь наблюдается, что сеть успешно обучилась распознавать заданные шаблоны во всех реализациях.

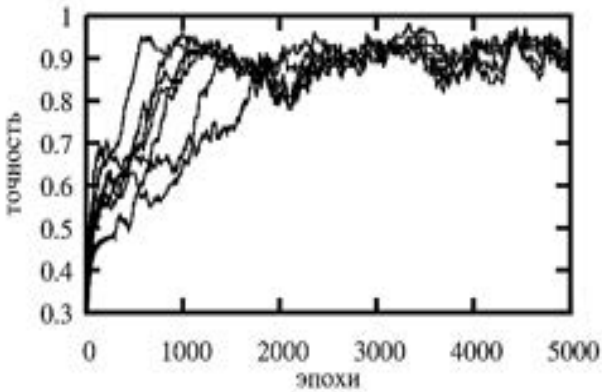

Рис. SEQ Рис. * ARABIC 1.
Зависимость точности распознавания от номера эпохи

Выводы

В работе выполнено имитационное моделирование нейроморфной сети на мемристивных элементах с учетом стохастической динамики их функционирования. Получено, что сеть успешно обучилась распознавать заданные шаблоны при значениях параметров, подобранных в рамках детерминированной модели, но в каждой конкретной реализации за разное количество эпох.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-29-03051 мк.

Список использованных источников

1. Rodriguez-Fernandez A., Cagli C., Perniola L., et al. Characterization of HfO2-based devices with indication of second order memristor effects // Microelectronic Engineering. 2018. V. 195. P. 101–106. DOI:10.1016/j.mee.2018.04.006.

2. Filatov D.O., Vrzheshch D.V., Tabakov O.V., et al. Noise-induced resistive switching in a memristor based on ZrO2(Y)/Ta2O5 stack // Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment. 2019. № 12. P. 124026. DOI: 10.1088/1742-5468/ab5704.

3. Morozov A.Yu., Abgaryan K.K., Reviznikov D.L. Mathematical model of a neuromorphic network based on memristive elements // Chaos, Solitons & Fractals. 2021. V. 143. P. 110548. DOI:10.1016/j.chaos.2020.110548.

4. Морозов А.Ю., Абгарян К.К., Ревизников Д.Л. Математическое моделирование самообучающейся нейроморфной сети, основанной на наноразмерных мемристивных элементах с 1T1R-кроссбар-архитектурой // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2020. Т. 23. № 3. С. 186. DOI: 10.17073/1609-3577-2020-3-186-195.

5. Morozov A.Yu., Abgaryan K.K., Reviznikov D.L. Simulation of the Neuromorphic Network Operation Taking into Account Stochastic Effects // Short Paper Proceedings of the VI International Conference on Information Technologies and High-Performance Computing (ITHPC 2021), Khabarovsk, Russia, September 14–16, 2021. P. 84–91.

6. Васильев А., Чернов П.С. Математическое моделирование мемристора в присутствии шума // Математическое моделирование. 2014. Т. 26. № 1. С. 122.

7. Mladenov V. Analysis of Memory Matrices with HfO2 Memristors in a PSpice Envi-ronment // Electronics, 8(4), 383, March 2019, p. 16. DOI: 10.3390/electronics8040383.

STOCHASTIC MODEL OF THE SPIKING NEUROMORPHIC NETWORK

A.Y. Morozov, K.K. Abgaryan, D.L. Reviznikov

Abstract. The work is devoted to the simulation of an analog neural network based on memristive elements, taking into account the stochastic dynamics of their functioning.

Keywords: memristor, additive noise, stochastic ODEs, neural network, STDP, recognition.

УДК 004.896
https://doi.org/10.29003/m2493.MMMSEC-2021/137-140

ОПТИМИЗАЦИЯ СТРУКТУРЫ ВЕКТОРА ВХОДНЫХ ДАННЫХ ДЛЯ УЛУЧШЕНИЯ ОБУЧЕНИЯ НЕЙРОННОЙ СЕТИ, ВЫПОЛНЯЮЩЕЙ ОРС

Теплов Георгий Сергеевич,
к.ф.-м.н., старший научный сотрудник[1, 2],
gteplov@niime.ru, +7 (963) 677-05-14

Галеева Альмира Табрисовна [1]
galeeva.at@phystech.edu, +7 (915) 080-98-14

Кузовков Алексей Валерьевич,
ведущий инженер [2],
akuzovkov@niime.ru, +7 (903) 572-84-35

[1]*МФТИ, г. Долгопрудный*
[2]*НИИМЭ, г. Зеленоград*

Аннотация. в работе выполняется исследование влияния структуры входного вектора данных на точность обучения искусственной нейронной сети. Изучалось влияние на точность обучения сети двух вариантов входного вектора данных. Первый вариант входного вектора включал воздушное изображение. Второй вариант входного вектора включал воздушное изображение и топологию микросхемы.

Ключевые слова. оптимизация входного вектора, улучшение качества обучения, ML-OPC, сверточные нейронные сети, распознавание изображений, вычислительная фотолитография.

Введение

Коррекция оптической близости [1] – важная технология при производстве интегральных схем размера меньше 0.13 мкм. Основная идея этого метода заключается в намеренном и систематическом искажении маски для компенсации эффектов оптической близости. Коррекция оптической близости, основанная на моделях (model-based OPC, MBOPC) [2], состоит в итеративном литографическом моделировании и коррекции маски. Можно выделить два основных подхода к уменьшению времени вычислений. Первый подход – использовать коррекцию эффектов оптической близости на основе сопоставления с образцом (pattern matching-based OPC) [3]. Данный метод применим только к блокам с периодическими топологическими структурами из-за конечного количества возмож-

ных шаблонов. Второй подход – основан на методах машинного обучения (ML-OPC) и не обладает указанным недостатком [4]. Исследование направлено на улучшение второго подхода.

Сравнение различных структур входных векторов данных

Входные данные представлены в виде матриц интенсивностей воздушного изображения и бинарного изображения исходной топологии микросхемы. Выходные данные представлялись в виде вектора со смещениями сегментов. Генерация данных производилась в программе Calibre. Обучающая выборка состояла из 31 036 пар выходных векторов. Значения выходных векторов в обучающей выборки были распределены почти равномерно для исключения проблем, возникающих при обучении на несбалансированной выборке [5]. Для получения равномерного распределения выходных векторов были отобраны обучающие примеры, смещение в которых не превышало 40 нм. Входные данные представляются воздушным изображением и фрагментом топологии с размерами 300x300 нм. На меньших размерах корректно обучить нейронную сеть не удавалось. Каждый пиксель воздушного изображения отображал среднее значение интенсивности на площади 5x5 нм. Общая интенсивность излучения представлялась в диапазоне значений 0 до 255 включительно. Каждый пиксель исходной топологии микросхемы имел значение 0 для непрозрачных участков и 1 для целевой топологии микросхемы с площадью 5x5 нм.

Для проверки гипотезы о том, что на точность предсказания смещения сегмента влияет также исходное изображение, кроме воздушного, была выбрана архитектура, подобная представленной в работе [6]. Структура сети включала: сверточный слой, слой с функцией ReLU, Dropout, MaxPooling, сверточный слой, слой с функцией ReLU, Dropout, MaxPooling и два полносвязных слоя. Обучение сети осуществлялось помощью оптимизатора Adam. В первом случае на вход сети подавалось только воздушное изображение. Во втором случае на вход сети подавалось воздушное изображение и бинарное изображение исходной топологии. Для функции потерь использовалась функция L1loss. Обучение каждой из двух нейронных сетей заняло около 50 мин.

Использование в составе входного вектора воздушного изображения привело к снижению функции потерь на тренировочной выборке с 20.1 нм до 15.8 нм. Результат на тестовой выборке – функция потерь снизилась с 23.3 нм до 20.9 нм. Использование во

входном векторе воздушного изображения и исходной топологии привело к снижению функции потерь на тренировочной выборке с 20.1 нм до 15.8 нм. Результат на тестовой выборке – функция потерь снизилась с 23.1 нм до 14.9 нм.

Выводы

Минимальный размер вектора для обучения составляет 300x300 нм. Наиболее предпочтительной является структура входного обучающего вектора, включающая воздушное изображение и исходную топологию.

Список использованных источников

1. Ambrogio S. et al. Neuromorphic Learning and Recognition With One-Transistor-One-Resistor Synapses and Bistable Metal Oxide RRAM // IEEE Transactions on Electron Devices, 2016. Vol. 63, no. 4, pp. 1508–1515.
2. Hsu TzuJeng. Optical proximity correction (OPC) method for improving lithography process window. – 2001. – Feb. 27. – US Patent 6, 194, 104.
3. Lucas Kevin D, Word James C, Vandenberghe Geert et al. Modelbased OPC for firstgeneration 193nm lithography // Optical Microlithography XIV / International Society for Optics and Photonics. – Vol. 4346. – 2001. – P. 119–130.
4. Du Yaojun. The patternmatching based OPC approach for preemptively fixing the weak points // Optical Microlithography XXX / International Society for Optics and Photonics. – Vol. 10147. – 2017. – P. 101471H. 4. Nguyen Anh, Yosinski Jason, Clune Jeff. Understanding innovation engines: Automated creativity and improved stochastic optimization via deep learning // Evolutionary computation. – 2016. – Vol. 24, no. 3. – P. 545–572.
5. Chawla Nitesh V, Japkowicz Nathalie, Kotcz Aleksander. Special issue on learning from imbalanced data sets // ACM SIGKDD explorations newsletter. – 2004. – Vol. 6, no. 1. – P. 1–6.
6. Watanabe Yuki, Kimura Taiki, Matsunawa Tetsuaki, Nojima Shigeki. Accurate lithography simulation model based on convolutional neural networks // Photomask Japan 2017: XXIV Symposium on Photomask and NextGeneration Lithography Mask Technology / International Society for Optics and Photonics. – Vol. 10454. – 2017. – P. 104540I.

OPTIMIZATION OF THE INPUT DATA VECTOR TO IMPROVE THE NEURAL NETWORK TRAINING FOR OPC

Teplov G.S., Galeeva A.T., Kuzovkov A.V.

Abstract. This work explored the impact of input data structure to improve the neural network training. The impact of two variants of the input data vector on the training accuracy of the network was studied. The first version of the input vector included the intensity of the exposure radiation map. The second

version of the input vector included the intensity of the exposure radiation map and IC topology.

Keywords: optimization of input data vector, training optimization, ML-OPC, convolutional neural network, image recognition, computation photolithography.

УДК 004.33.087.2
https://doi.org/10.29003/m2494.MMMSEC-2021/140-142

АНАЛИЗ И СРАВНЕНИЕ РАЗЛИЧНЫХ ПОДХОДОВ К ЭКСТРАКЦИИ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ МЕМРИСТОРА

Шамин Евгений Сергеевич,
н.с.[1], аспирант[2],
eshamin@niime.ru, +7 (999) 988-48-20

Жевненко Дмитрий Алексеевич,
с.н.с.[1], аспирант[2],
DmitryZhev@yandex.ru, +7 (925) 441-23-72

Мещанинов Федор Павлович,
н.с.[1], аспирант[2],
fmeshaninov@yandex.ru, +7 (915) 360-49-69

Кожевников Владислав Сергеевич,
н.с.[1], студент[2],
vladislavkozhevnikov@gmail.com, +7 (977) 517-66-39

Горнев Евгений Сергеевич,
чл.-корр. РАН, д.т.н. профессор[1], Заместитель руководителя приоритетного технологического направления – начальник управления РПТН[2],
egornev@niime.ru, +7 (903) 969-60-97

[1] МФТИ, г.Москва
[2] АО «НИИМЭ», г. Москва, г. Зеленоград

Аннотация. Работа посвящена анализу различных подходов к задаче экстракции параметров эмпирической модели мемристора. Приводится описание особенностей процесса экстракции, а также предлагается оригинальный вариант алгоритма экстракции. Проводится сравнение предложенного алгоритма с другими рассмотренными.

Ключевые слова: мемристор, экстракция, оптимизация, модель мемристора.

Введение

Один из основных вопросов, возникающих при работе с эмпирическими моделями мемристора является вопрос экстракции модельных параметров из эксперимента. Чаще всего эта операция проводится посредством применения алгоритмов оптимизации, или, иначе, с помощью аппроксимации экспериментального контура моделью. Такая операция в зависимости от сложности выбранного алгоритма, целевой функции, модели мемристора и экспериментальных данных может занимать значительное время.

На сегодняшний день вопрос выбора оптимального алгоритма оптимизации – задача в общем смысле не решённая [1]. Более того, как указано в [2], эффективность алгоритмов и их параметров неразрывно связана с задачей, для которой они применяются. Таким образом, исследования, направленные на улучшение качества аппроксимации в каждом конкретном случае имеют важное прикладное значение.

Описание подхода к решению проблемы

В работе предлагается к рассмотрению разработанное программное средство под названием Visualizer. Данный инструмент удобен для сравнения различных алгоритмов решения задачи экстракции между собой. Также его можно использовать для исследования взаимосвязей между параметрами рассматриваемой модели мемристора и особенностями соответствующих им вольтамперных характеристик.

С помощью разработанного программного средства проводится анализ поведения модели модификации подвижности [3] и выделение признаков ВАХ, наиболее подверженным изменениям при варьировании параметров модели. На базе этих признаков составляется целевая функция для задачи экстракции, в основе которой лежит суммирование отношений признаков оптимизируемой и модельной ВАХ в степени приписанных каждому признаку весов.

В рамках работы было проведено сравнение трёх вариантов локального алгоритма Нелдера-Мида с разными целевыми функциями, которые в дальнейшем предполагается глобализовать:

- на основе симметрической разности площадей;
- на основе MSE между 200 точками обрабатываемых контуров;
- на основе признаков ВАХ с приписанными весами.

Сравнение проводилось по значениям целевой функции симметрической разности площадей, как самой показательной.

Наилучшим вариантом (в рассматриваемом частном случае) является алгоритм на основе симметрической разности площадей. Тем не менее алгоритм на основе признаков BAX не слишком уступает ему в точности, при этом предлагая широкий функционал по тонкой настройке.

Список использованных источников

1. Bartz-Beielstein T. et al. Benchmarking in optimization: Best practice and open issues //arXiv preprint arXiv:2007.03488. – 2020.
2. Brownlee J. et al. A note on research methodology and benchmarking optimization algorithms // Complex Intelligent Systems Laboratory (CIS), Centre for Information Technology Research (CITR), Faculty of Information and Communication Technologies (ICT), Swinburne University of Technology, Victoria, Australia, Technical Report ID. – 2007. – Т. 70125.
3. Zhevnenko D. et al. Simulation of memristor switching time series in response to spike-like signal // Chaos, Solitons & Fractals. – 2021. – Т. 142. – С. 110382.

ANALYSIS AND COMPARISON OF DIFFERENT APPROACHES TO THE PROBLEM OF MEMRISTOR MODEL PARAMETERS EXTRACTION

E.S. Shamin, D.A. Zhevnenko, F.P. Meschaninov, V.S. Kozhevnikov, E.S. Gornev

Abstract. The work is devoted to the analysis of various approaches to the problem of the empirical memristor model parameters extraction. A description of the peculiarities of the extraction process is given, and an original version of the extraction algorithm is proposed. The proposed algorithm is compared with other considered ones.

Keywords: memristor, extraction, optimization, memristor model.

6. F

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУР И СВОЙСТВ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ С НАНОКРИСТАЛЛАМИ, НАНОКЛАСТЕРАМИ, НАНОАМОРФНЫМИ ВКЛЮЧЕНИЯМИ И Т.Д.

УДК 004.4:004.9
https://doi.org/10.29003/m2495.MMMSEC-2021/144-146

МОДЕЛИРОВАНИЕ УСТАЛОСТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК КОМПОЗИТНОГО МАТЕРИАЛА С ПОМОЩЬЮ ПРОГРАММНОГО ПРОДУКТА COMSOL MULTIPHYSICS

Мочалова Юлия Дмитриевна,
аспирантка[1], математик[1],
juliamochalova96@gmail.com

Абгарян Каринэ Карленовна,
г.н.с., д.ф.-м.н., заведующая отделом[1, 2],
kristal83@mail.ru

[1] *ФИЦ ИУ РАН, г.Москва*
[2] *МАИ, г. Москва*

Аннотация. В работе выполняется обзор возможностей моделирования композитных материалов с помощью программного продукта COMSOL.

Ключевые слова: композитные материалы, COMSOL, многомасштабное моделирование.

Введение

Многослойный композитный материал представляет собой набор слоев из волокнистых композиционных материалов. Он необходим для обеспечения требуемой жесткости в плоскости, жесткости на изгиб, жесткости на сдвиг, коэффициента теплового расширения и т. д. В разных слоях могут использоваться различные материалы, в результате чего получается гибридный ламинат. Отдельные слои являются ортотропными или поперечно изотропными, что делает ламинат анизотропным. Ввиду сложности создания материала с заданными свойствами возникает необходимость предварительного моделирования и прогнозирования поведения материала под воздействием различных внешних факторов.

Моделирование композитного материала в COMSOL multiphysics

Для моделирования свойств композитных материалов в программном продукте COMSOL предусмотрен модуль Composite Materials Module, который позволяет моделировать многослойную композитную оболочку (композитный ламинат).

Многомасштабный анализ многослойного композитного материала может быть выполнен с использованием подходов микромеха-

нического и макромеханического моделирования. Микромеханический анализ рассматривает отдельный слой, в котором используются репрезентативные объемные элементы матрицы, содержащей волокна. Цель состоит в том, чтобы рассчитать свойства гомогенизированного материала одного слоя. Напротив, макромеханический анализ рассматривает весь ламинат, состоящий из нескольких слоев. Цель состоит в том, чтобы вычислить макроскопический отклик ламината при различных условиях нагружения.

В COMSOL Multiphysics композитные ламинаты анализируются либо с помощью теории послойной трехмерной упругости через интерфейс Layered Shell, либо с использованием теории сдвиговой деформации первого порядка (ESL-FSDT) через модель Layered Linear Elastic Material в интерфейсе Shell. Очень тонкие ламинаты с практически нулевой жесткостью на изгиб анализируются с использованием эквивалентной однослойной теории с использованием слоистого линейно-эластичного материала на границе раздела мембраны.

В композитных ламинатах могут возникать разного рода отказы. Таким образом, важно выполнить анализ разрушения композитных ламинатов. Оба метода позволяют рассчитывать индексы отказов на основе различных общих, а также специфических для волоконных композитов критериев отказа. COMSOL предоставляет возможность проводить анализ отказов, анализ устойчивости КМ, и моделирование расслоения. Помимо этого, COMSOL позволяет оценивать результаты в каждом слое, а также в направлении всей толщины, а не только на контрольной поверхности. Существуют различные стандартные инструменты, которые помогают визуализировать результаты для композитного ламината.

Выводы

В работе выполнено моделирование композитного материала и расчет его свойств при нагружении и нагревании в программной среде COMSOL. Полученные данные в дальнейшем, при успешной валидации модели, можно использовать для анализа с помощью машинного обучения.

Список использованных источников

1. COMSOL Multiphysics Reference Manual, [Электронный ресурс] – https://doc.comsol.com/5.4/doc/com.comsol.help.comsol/COMSOL_ReferenceManual.pdf

2. J. Llorca, C. Gonzalez, J.M. Molina-Aldereguia, Multiscale Modeling of Composites: Toward Virtual Testing... and Beyond / The journal of the Minerals, Metals & Materials Society [Электронный ресурс] – https://link.springer.com/chapter/10.1007/s11837-012-0509-8

3. Ning Nu, Composites and their properties / [Электронный ресурс] – http://www.issp.ac.ru/ebooks/books/open/Composites_and_Their_Properties.pdf

SIMULATION OF FATIGUE CHARACTERISTICS OF A COMPOSITE MATERIAL USING COMSOL MULTIPHYSICS SOFTWARE

Y.D. Mochalova, K.K. Abgaryan

Abstract. The paper reviews the capabilities of modeling composite materials using the COMSOL software product.

Keywords: composite materials, Comsol, multiscale modeling.

https://doi.org/10.29003/m2496.MMMSEC-2021/146-150

ИССЛЕДОВАНИЕ СЕГРЕГАЦИИ ПРИМЕСИ НИКЕЛЯ ВБЛИЗИ ГРАНИЦ ДЕФЕКТОВ СТРУКТУРЫ LSNT ПЕРОВСКИТА МЕТОДОМ ПЕРВОПРИНЦИПНОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Чистякова А.А.[1], Бажанов Д.И.[1-4]

anutochkachi@gmail.com

[1] *Физический факультет, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Ленинские горы, д.1, стр.2, Москва 119991, Россия*

[2] *Факультет вычислительной математики и кибернетики, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Ленинские горы, д.1, стр.52, Москва 119991, Россия*

[3] *Вычислительный центр имени А. А. Дородницына ФИЦ ИУ РАН, ул. Вавилова, д.44, кор.2, Москва 119333, Россия*

[4] *Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), Волоколамское шоссе, д. 4, Москва, А-80, ГСП-3, 125993, Россия*

Аннотация. В данной работе исследуется сегрегация примеси Ni вблизи границ дефектов структуры перовскита $La_{0.2}Sr_{0.7}Ni_{0.1}Ti_{0.9}O_{2.9}$ (LSNT), на примере модельной ячейки со стехиометрией $La_{0.5}Sr_{0.5}TiO_3$ (LST).

Ключевые слова: перовскит, сегрегация, кластер, катион, LST и LSNT материалы, антифазные границы, подрешётка, теория функционала плотности.

Введение

Традиционные ископаемые виды топлива являются основными источниками энергии в настоящее время и в обозримом будущем. Однако источники энергии этого типа ограничены по своей природе и не возобновляемы, что может привести к серьезным энергетическим кризисам в будущем. Твердооксидные топливные элементы появились как эффективная и экологически безопасная технология для решения некоторых проблем энергетической промышленности. Перовскиты, класс оксидов металлов, недавно заняли лидирующее положение в классе соединений, которые были исследованы в качестве электродных материалов для топливных элементов. Перовскиты состоят из подрешеток двух типов: ‘A’ и ‘B’, таким образом, общая структура перовскита записывается как ABX_3, где ‘A’ и ‘B’ это два катиона, а ‘X’ – анион (чаще всего кислород) [1]. Перовскиты на основе титаната стронция $SrTiO_3$, легированные La (LST материалы, например: $La_{0.4}Sr_{0.4}TiO_3$, $La_{0.1}Sr_{0.9}TiO_3$ и др. [1]), широко исследуются из-за их высокой электронной проводимости, превосходной химической стабильности при окислительно-восстановительных реакциях и стойкости к углеводородным соединениям. Высокий интерес также представляют LSMT соединения, допированные другими каталитически активными металлами (M) в ‘B’ – подрешётке (например, $La_{0.2}Sr_{0.25}Ca_{0.45}TiO_3$ $(LSCT)$, $La_{0.4}Sr_{0.4}Ga_{0.05}Ti_{0.95}O_3(LSGT)$ и др. [1]).

В связи со всеми вышеперечисленными свойствами перовскитов, в данной работе исследуется сегрегация примеси Ni в соединении $La_{0.2}Sr_{0.7}Ni_{0.1}Ti_{0.9}O_{2.9}$ (LSNT) [1]. Нашей целью является подтверждение экспериментальных данных о сегрегации Ni к поверхности данного перовскита и формирование им кластеров на этой поверхности.

Метод исследования

В результате экспериментальных исследований было обнаружено, что примесные атомы Ni сегрегируют в ‘B’ – подрешетке из кристаллического массива в направлении поверхности перовскита, формируя на ней кластеры. Также было установлено, что наличие двух разных катионов с разными размерами в подрешётке ‘A’ в блоках перовскита и их упорядочение в локальных областях, могут быть причиной возникновения противофазных границ (antiphase

boundaries, APB) [1]. Из литературных источников [1] известно, что наличие APB в свою очередь приводит к химической неоднородности в локальных областях и улучшает сегнетоэлектрическую усталостную способность слоистых оксидов перовскита.

Мы предполагаем, что процесс сегрегации обусловлен наличием структурных дефектов перовскита (кислородные вакансии, дислокации, APB и др.), которые приводят к активной кластеризации атомов Ni вблизи границ дефектов структуры. Как следствие, в результате сегрегации и кластеризации никеля может возрастать каталитическая активность и электрохимические характеристики соединения [1]. Важно отметить, что для ‘A’-подрешётки перовскита необходимо наличие именно двух типов катионов, в нашей системе это La и Sr. Это связано с тем, что в процессе формирования APB, разные типы катионов не создают кластеры, а наоборот заполняют межузельные пространства ‘A’- подрешётки равномерно, образуя более упорядоченную структуру, что делает APB стабильной. Используя методы математического моделирования и пакет VASP [2] для выполнения квантово-механических вычислений, мы исследуем сегрегацию Ni на примере модельной LST ячейки со стехиометрией $La_{0.5}Sr_{0.5}TiO_3$ [1,3]. Мы рассматриваем процесс сегрегации в направлении двух поверхностей LST(001) и LST(110), в виду того, что данные поверхности участвуют в формировании дефектов структуры, таких как дислокации и APB в LST.

Сегрегация исследуется на основе расчёта энергии сегрегации E_{seg}, которая определяется, как разность полных энергий системы с металлом M в ‘B’ – подрешётке, расположенным на поверхности и в объёме:

$$E_{seg} = E_{(B)_{surf}} - E_{(B)bulk} \text{ [3]},$$

где $E_{(B)_{surf}}$ и $E_{(B)bulk}$ – полные энергии системы с примесным металлом M в ‘B’ – подрешётке, расположенным вблизи поверхности и внутри кристаллического массива соответственно. Расчёт полной энергии системы проводится в рамках теории функционала плотности, через решение уравнений Кона – Шэма по формуле:

$$E_{\text{полн}} = \sum_i \varepsilon_i - \frac{1}{2}\int \frac{n'(r)n'(r')}{|r-r'|}\, dr'dr + E_{xc}[n] - \int v_{xc}(n)n(r)dr, \text{ [3]}$$

где ε_i – действительные собственные значения гамильтониана Кона – Шэма, $v_{xc}(r)$ – функциональная производная, E_{xc} – обменно-корреляционная энергия.

Основные результаты

При расчётах были использованы две модельные поверхности для рассмотрения процесса сегрегации: $TiO-$ терминированная (LST(001)) и $SLTO-$ терминированная (LST(110)), поскольку именно эти поверхности формируют АРВ. На данный момент успешно проведены исследования сегрегации Ni в направлении поверхностей LST(001) и LST(110). Исходя из полученных результатов для энергии ($-1{,}01\ eV$ для TiO − терминированной поверхности, $-2{,}62\ eV$ для $SLTO$ − терминированной поверхности), можно сказать, что в направлении открытых поверхностей сегрегация идёт очень активно, и Ni действительно может сегрегировать в направлении этих поверхностей, образуя каталитические частицы, что подтверждает экспериментальные данные. Аналогичные расчёты для АРВ показывают, что энергия сегрегации уменьшается и является очень чувствительной к релаксации системы, однако в целом результат показывает, что Ni сегрегирует к АРВ, что способствует образованию кластеров и последующей сегрегации к открытым поверхностям. Это также объясняет данные экспериментальных наблюдений.

Заключение

В результате проведённых исследований были получены значения энергии сегрегации, которые подтверждают её энергетическую выгодность для исследуемой системы, а значит, никель действительно имеет тенденцию к сегрегации, как на открытых поверхностях LST(001) и LST(110), так и вблизи антифазных границ, образованных этими поверхностями. Таким образом, были объяснены результаты экспериментальных наблюдений. Анализ показывает, что релаксации могут влиять на процесс сегрегации вблизи антифазных границ.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 19-29-03051 мк.

Список использованных источников

1. Hyeon Han, J.P. Lattice strain-enhanced exsolution of nanoparticles. Nature communications, 2019. 1-8.
2. Sourceforge: https://sourceforge.net/projects/vasp-full-version/
3. S. Lundqvist, N. M. Теория неоднородного электронного газа. М.: «Мир», 1987. 86–175.

INVESTIGATION OF THE SEGREGATION OF NICKEL IMPURITIES NEAR THE BOUNDARIES OF STRUCTURAL DEFECTS IN LSNT PEROVSKITE BY THE METHOD OF AB INITIO MOLECULAR DYNAMICS

A.A. Chistyakova, D.I. Bazhanov

Abstract. In this paper, we investigate the segregation of Ni impurities near the boundaries of defects in the perovskite structure $La_{0.2}Sr_{0.7}Ni_{0.1}Ti_{0.9}O_{2.9}$ (LSNT), using the example of a model cell with stoichiometry $La_{0.5}Sr_{0.5}TiO_3$ (LST).

Keywords: perovskite, segregation, cluster, cation, LST and LSNT materials, antiphase boundaries, sublattice, density functional theory.

УДК 536.421
https://doi.org/10.29003/m2497.MMMSEC-2021/150-151

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА РОСТА МАССИВА ОДНОМЕРНЫХ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР ZnO

Шарапов Андрей Анатольевич,
научный сотрудник[1], аспирант[2],
andrey.sharapov@phystech.edu, +7 (905) 747-68-35

Матюшкин Игорь Валерьевич,
к.ф.-м.н., старший научный сотрудник[1],
imatyushkin@niime.ru, +7 (906) 048-21-11

[1] *АО «НИИМЭ», г. Зеленоград*
[2] *МФТИ (НИУ), г. Долгопрудный*

Аннотация. В работе выполняется моделирование формирования стержней оксида цинка методом газофазного роста на поверхности оксида кремния.

Ключевые слова: оксид цинка, наностержни, газофазный рост.

Введение

Оксид цинка – полупроводник с широкой прямой запрещённой зоной (3,37 эВ), образующий вюрцитную кристаллическую структуру. Перспективным видится создание на основе монокристаллических массивов стержней ZnO датчиков ультрафиолетового излучения. Модельное описание механизма формирования наностержней, которое представлено в данной работе, позволит проанализировать возможность интеграции процесса выращивания с технологией КМОП [1].

Моделирование CVD-роста наностержней

Термодинамическая математическая модель описывает газофазный синтез стержней ZnO, связывая параметры капли на вершине стержня и окружающей газовой среды со скоростью роста стержня. Рост стержня и кристаллизация ZnO обеспечивается материалом капли, при этом вещество капли восполняется за счёт прилипания атомов Zn и молекул O_2 из окружающей газовой фазы.

В объёме капли происходит экзотермическая реакция. При повышении температуры жидкой фазы усиливается испарение атомов Zn и молекул O_2, что приводит к истощению капли и замедлению роста кристаллической части наностержня.

В численном расчёте реализована схема Кранка–Николсона для моделирования теплопроводности и математическое представление химической реакции с помощью закона кинетики второго порядка [2].

Выводы

В работе выполнено одномерное моделирование газофазного роста стержней ZnO. Модель позволяет количественно оценить скорость роста и распределение температур в наностержне.

Работа профинансирована грантом Минобрнауки России в форме субсидии от 25.09.2020 г. № 075-15-2020-791 (номер государственного учета НИОКТР АААА-А20-120110990073-7).

Список использованных источников

1. Редькин А. Н., Рыжова М. В., Якимов Е. Е. и др. Упорядоченные массивы наностержней оксида цинка на кремниевых подложках // Физика и техника полупроводников. – 2013. – Т. 47. – № 2. – С. 216–222.
2. Красников Г.Я., Зайцев Н.А., Матюшкин И.В. Математическое моделирование кинетики высокотемпературного окисления кремния и структуры пограничного слоя в системе Si-SiO_2 // Физика и техника полупроводников. – 2003. – Т. 37. – № 1. – С. 44-49.

SIMULATION OF SINGLE CRYSTAL ONE DIMENSIONAL ZnO RODS ARRAY GROWTH PROCESS

A.A. Sharapov, I.V. Matyushkin

Abstract. In this work, the formation of zinc oxide arrows by gas-phase growth on the surface of silicon oxide is simulated.

Keywords: zinc oxide, nanorods, gas-phase growth.

7. G

ПРОБЛЕМЫ ОБЕСПЕЧЕНИЯ НАДЕЖНОСТИ ЭКБ МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ И СИСТЕМ НА ЕЕ ОСНОВЕ

УДК 621.382:004.052.2
https://doi.org/10.29003/m2498.MMMSEC-2021/154-156

СРАВНЕНИЕ СБОЕУСТОЙЧИВЫХ СИНХРОННЫХ И САМОСИНХРОННЫХ СХЕМ

Зацаринный Александр Алексеевич,
д.т.н., заместитель директора ФИЦ ИУ РАН[1]
AZatsarinny@ipiran.ru, +7 (499) 137-60-31

Степченков Юрий Афанасьевич,
к.т.н., заведующий отделом[1],
YStepchenkov@ipiran.ru +7(495) 671-15-20

Дьяченко Юрий Георгиевич,
к.т.н., с.н.с.[1],
diaura@mai.ru, +7 (495) 135-20-43

Рождественский Юрий Владимирович,
к.т.н., вед.н.с.[1],
YRogdest@ipiran.ru, +7 (495) 135-20-43

[1] *ФИЦ ИУ РАН, г. Москва*

Аннотация. Статья рассматривает проблему разработки синхронных и самосинхронных (СС) цифровых схем, устойчивых к логическим сбоям. В синхронных схемах для обеспечения устойчивости к однократному сбою традиционно используется принцип голосования «2-из-3», приводящий к увеличению аппаратных затрат в три раза. В СС-схемах, благодаря парафазному кодированию сигналов и двухфазной дисциплине функционирования, даже дублирование обеспечивает уровень защиты от логического сбоя в 2,1–3,5 раз выше, чем троированный синхронный аналог. Разработка новых средств высокоточного моделирования механизмов возникновения сбоев в микроэлектронных компонентах позволит получить более точные оценки сбоеустойчивости электронных схем.

Ключевые слова: синхронная схема, самосинхронная схема, логический сбой, сбоеустойчивость, троирование, дублирование, надежность.

Введение

Маскирование логических сбоев, возникающих из-за воздействия ядерных частиц, электромагнитных импульсов, шумовых наводок и других причин и не приводящих к выходу из строя активных компонентов, является важной задачей.

Обнаружение и маскирование сбоя в синхронных схемах обеспечивается с помощью сбоеустойчивых кодов [1] или голосованием

по нескольким параллельным каналам [2]. С увеличением плотности размещения транзисторов на площади микросхемы целесообразность применения сбоеустойчивых кодов уменьшается. Принцип голосования (обычно «2-из-3») гарантирует надежную работу схемы лишь при наблюдении одиночных сбоев.

Самосинхронные (СС) цифровые схемы [3] обладают более высокой естественной устойчивостью к логическим сбоям [4], чем их синхронные аналоги. Они допускают более экономичный способ обеспечения сбоеустойчивости схемы – ее дублирование. Если совпадают и информационные, и индикаторные выходы обоих каналов, сбоя нет. Иначе либо какой-то канал еще не закончил переключения, либо где-то случился логический сбой. В работе [3] были предложены методы повышения уровня сбоеустойчивости СС-схем, которые, однако, не обеспечивают полной защиты от сбоев.

Данная статья посвящена исследованию возможностей и способов построения стопроцентных сбоеустойчивых СС-схем и их сравнению с синхронными аналогами.

Сравнение синхронных и СС-схем

Будем считать, что вероятность сбоя прямо пропорциональна числу транзисторов в ней и все ветви в «дереве» событий, порождаемом причиной логического сбоя, имеют равную вероятность наблюдения и вероятность сбоя при воздействии на один транзистор равны $\alpha_{S1} = 0{,}5$ и $\alpha_{ST1} = 0{,}156$ для комбинационных синхронной и СС-схем [4] соответственно и $\alpha_{S2} = 0{,}5$ и $\alpha_{ST2} = 0{,}17$ для последовательностных синхронной и СС-схем [4]. Аппаратная сложность комбинационной СС-схемы в среднем в 2,7 раза больше сложности синхронного аналога, а в последовательностных схемах это отношение равно 1,5. Тогда отношение средних времен бессбойной работы СС-схемы и ее синхронного аналога оказывается равным 2,14 для комбинационных схем и 3,53 для последовательностных схем.

Выводы

1. В первом приближении дублированная СС-схема обладает в 2,1–3,5 раза лучшей устойчивостью к сбоям, чем троированный синхронный аналог.

2. СС-схемы являются перспективным базисом для проектирования высоконадежных микроэлектронных устройств.

Работа выполнена в рамках государственного задания № 0063-2019-0010.

Список использованных источников

1. Alagoz B.B. Boolean Logic with Fault Tolerant Coding // OncuBilim Algorithm and Systems Labs. – 2009. – Vol. 09, Art. No:03.

2. Dubrova E. Fault-tolerant design. KTH Royal Institute of Technology, Krista, Sweden, 2013, Springer, 185 p. DOI 10.1007/978-1-4614-2113-9.

3. А.А. Зацаринный, Ю.А. Степченков, Ю.Г. Дьяченко, Ю.В. Рождественский. Самосинхронные схемы как база создания высоконадежных высокопроизводительных компьютеров следующего поколения / Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. МММЭК–2020. 19–20 октября 2020, Москва. Материалы II Международной конференции. – Москва: МАКС Пресс, 2020. – С 114–116. DOI: https://doi.org/10.29003/m1535.MMMSEC-2020/114-116 (дата обращения 08.06.2021).

4. Stepchenkov, Y.A., Kamenskih, A.N., Diachenko, Y.G., Rogdestvenski, Y.V., and Diachenko, D.Y., Improvement of the natural self-timed circuit tolerance to short-term soft errors, Advances in Science, Technology and Engineering Systems Journal, 2020, vol. 5, no. 2, pp. 44–56 https://doi.org/10.1109/DESSERT.2019.8770047 (дата обращения 08.06.2021).

FAILURE TOLERANT SYNCHRONOUS AND SELT-TIED CIRCUITS COMPARISON

A.A. Zatsarinny, Yu.A. Stepchenkov, Yu.G. Diachenko, Yu.V. Rogdestvenski

Abstract. The article considers the problem of developing synchronous and self-timed (ST) digital circuits that are tolerant to soft errors. Synchronous circuits traditionally use the 2-of-3 voting principle to ensure single failure, resulting in three times the hardware costs. In ST circuits, due to dual-rail signal coding and two-phase control, even duplication provides a soft error tolerance level 2.1 to 3.5 times higher than the triple modular redundant synchronous counterpart. The development of new high-precision software simulating microelectronic failure mechanisms will provide more accurate estimates for the electronic circuits' failure tolerance.

Keywords: synchronous circuit, self-timed circuit, soft error, failure tolerance, triple modular redundancy, duplication, reliability.

УДК 004.383.8
https://doi.org/10.29003/m2499.MMMSEC-2021/157-159

ОТЕЧЕСТВЕННАЯ ЭЛЕМЕНТНАЯ БАЗА И ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДЛЯ РЕАЛИЗАЦИИ НЕЙРОСЕТЕВЫХ РЕШЕНИЙ

Тельминов Олег Александрович,
к.т.н., начальник лаборатории[1],
otelminov@niime.ru, +7 (916) 693-08-14

Горнев Евгений Сергеевич,
член-корреспондент РАН, профессор, заместитель руководителя приоритетного технологического направления[1],
egornev@niime.ru, +7 (495) 229-55-70

[1] *АО «НИИМЭ», г. Москва*

Аннотация. рассмотрены современные и перспективные возможности нейросетевых решений, развитие их отечественной аппаратной и программной поддержки, возможности средств сравнения их относительной эффективности.

Ключевые слова: нейронные сети, нейросетевые процессоры, нейроморфные вычисления.

Введение

Нейросетевой подход к решению слабоформализуемых задач является одним из приближений к реализации «слабого» и «сильного» искусственного интеллекта. В отличие от алгоритмов на основе правил и математических уравнений, нейросетевые решения имеют право на незначительную погрешность в ответе – в зависимости от класса задач от единиц до долей %. Для основных направлений – распознавания и синтеза изображений, текста, речи и звуков, а также систем помощи принятия решения разработаны и активно разрабатываются специализированные виды нейронных сетей. Такие сети основаны на моделях искусственных нейронов и вычисляют выходы на основе входных сигналов, а также значений внутренних, настраиваемых в процессе обучения, коэффициентов.

Модель искусственного нейрона определяет тип нейросети, построенной на ее основе. Классическая (формальная) модель оперирует непрерывными сигналами и широко реализуется в коммерчески успешной электронной компонентной базе (ЭКБ). Модели искусственных нейронов, основанные на наиболее современных представлениях о работе человеческого мозга, называются нейро-

морфными, а соответствующая ЭКБ – нейроморфной. В настоящее время такой моделью является спайковая модель, в которой информация представляется в виде импульсов. Нейроморфные процессоры имеют архитектуру, отличающуюся от классической фон Неймана, а память для таких устройств является энергонезависимой и сверхбыстродействующей.

Программное обеспечение позволяет сформировать архитектуру нейронной сети, выполнить ее обучение, применить в работе, а также преобразовать в вид, пригодный для исполнения на конкретном нейросетевом процессоре.

Возможности нейросетевых решений в ключевых направлениях

Рассмотрены действующие и перспективные решения распознавания и синтеза изображений, текста, речи и звуков, а также систем помощи принятия решения.

Программная поддержка нейросетевых решений

В сложившейся практике нейросетевых решений наиболее распространенным языком объектно-ориентированного программирования является Python. Различные компании создают программные библиотеки – платформы, позволяющие в компактном виде на Python и других языках описывать и отображать архитектуры нейросетей, подготавливать и использовать данные для обучения нейросетей, запускать нейросети на целевых процессорах. Три наиболее распространенных платформы – TensorFlow и Keras (Google, США), а также PyTorch (Facebook, США). Несмотря на это, Китай активно продвигает две своих платформы: PaddlePaddle (Beidu) и MindSpore (Huawei).

В России развиваются собственные платформы. Рассмотрен основной функционал платформы PuzzleLib (ООО «Нейросети Ашманова») для построения нейронных сетей с поддержкой вычислений на CPU (Intel/AMD) и GPU (NVIDIA/AMD), а также концепция построения открытой платформы ГНС (ФГУП «ГосНИИАС») с поддержкой отечественных процессоров Эльбрус, RoboDeus, Нейроматрикс и др.

Аппаратная поддержка нейросетевых решений

По функциональному назначению процессоры делятся на процессоры общего (CPU) и специального назначения (сопроцессоры, например: FPU, GPU, TPU и др.). Универсальные процессоры спо-

собны решать практически любые задачи и управлять вспомогательными сопроцессорами, предназначенными для наиболее эффективного решения специализированных задач.

Рассмотрены отечественные предложения по аппаратной поддержке классических нейросетей, реализованных по кремниевой технологии [1, 2]: линейка отечественных центральных процессоров Эльбрус, нейроускорителей семейства Нейроматрикс, IVA TPU, гетерогенного процессора RoboDeus.

Приведена информация по отечественному нейроморфному процессору Алтай, по ряду зарубежных классических и нейроморфных процессоров, а также тестам (бенчмарку) для сравнения эффективности нейросетевых решений MLPerf для обучения и применения нейросетей (инференсу) в облаке и в периферийных (краевых) решениях.

Обсуждена необходимость создания открытого отечественного нейросетевого процессорного ядра с целью решения задач по формированию и закреплению на местах кадрового потенциала, а также его применения в отечественных разработках процессоров первого уровня.

Выводы

Выявлены закономерности эволюции аппаратно-программного подхода к реализации нейросетевых решений, даны рекомендации по его отечественному развитию.

Список использованных источников

1. Красников Г.Я., Горнев Е.С., Матюшкин И.В. Общая теория технологии и микроэлектроника: Электронная техника. Серия 3: Микроэлектроника. 2017. № 1 (165). С. 51–69.

2. Тельминов О.А., Горнев Е.С., Теплов Г.С. Процессоры, память и программное обеспечение для эффективной реализации нейронных сетей // Наноиндустрия. 2020. № S96-2. С. 580–584.

DOMESTIC ELEMENT BASE AND SOFTWARE FOR THE IMPLEMENTATION OF NEURAL NETWORK SOLUTIONS

O.A. Telminov, E.S. Gornev

Abstract. the article considers the modern and promising possibilities of neural network solutions, the development of their domestic hardware and software support, the possibilities of means of comparing their relative efficiency.

Keywords: neural networks, neural network processors, neuromorphic computing.

Научное издание

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
в материаловедении электронных компонентов
МММЭК–2021
25–27 октября 2021 г., Москва
Материалы III Международной конференции

Подготовка оригинал-макета
Издательство «МАКС Пресс»
Главный редактор: *Е. М. Бугачева*
Компьютерная верстка: *Н. С. Давыдова*
Обложка: *М. А. Еронина*

Подписано в печать 27.10.2021 г.
Формат 60x90 1/16. Усл. печ. л. 10,0.
Тираж 300 (1–20) экз. Изд. № 156.

Издательство ООО «МАКС Пресс»
Лицензия ИД N00510 от 01.12.99 г.

119992, ГСП-2, Москва, Ленинские горы,
МГУ им. М. В. Ломоносова, 2-й учебный корпус, 527 к.
Тел. 8(495) 939–3890/91. Тел./Факс 8(495) 939–3891.

Отпечатано в полном соответствии с качеством
предоставленных материалов в ООО «Фотоэксперт»
115201, г. Москва, ул. Котляковская, д.3, стр. 13.