

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» РАН
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Факультет вычислительной математики и кибернетики
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–2022

Материалы IV Международной конференции

24–26 октября 2022 г., Москва

MATHEMATICAL MODELING in materials science of electronic components ICM3SEC–2022

Proceedings of the International conference

October 24–26, 2022 Moscow, Russia



МОСКВА – 2022

УДК 519.6.517.958.533.6
ББК 22.2.2218
М34



<https://elibrary.ru/judgdl>

Ответственный редактор:

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

Математическое моделирование в материаловедении электрон-
М34 **ных компонентов.** МММЭК–2022. 24–26 октября 2022 г., Москва : Мате-
риалы IV Международной конференции. – Москва : МАКС Пресс, 2022. –
180 с. : ил.

ISBN 978-5-317-06871-4

<https://doi.org/10.29003/m3056.MMMSEC-2022>

Сборник включает в себя научные работы, отражающие современные мировые дости-
жения в области материаловедения электронных компонентов и представляет новые методы
математического моделирования и программные решения для разработки прикладных про-
граммных систем.

Для специалистов в области вычислительного материаловедения, прикладной матема-
тики, математического моделирования, проектирования и автоматизации изделий наноэ-
лектроники, 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–2022. October 24–26, 2022, Moscow : Proceedings of the
international conference. – Moscow : MAKS Press, 2022. – 180 p.

ISBN 978-5-317-06871-4

<https://doi.org/10.29003/m3056.MMMSEC-2022>

The book includes scientific works reflecting modern achievements in the field of materials sci-
ence 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 изображения получены из открытых источников.

ISBN 978-5-317-06871-4

© Авторы, 2022

© Оформление. ООО «МАКС Пресс», 2022

ОГЛАВЛЕНИЕ

1. А. Современные проблемы создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов с заданными свойствами, включая применение новых методов и средств анализа больших данных	7
<i>А.А. Зацаринный, К.К. Абгарян.</i> Синтез новых материалов как приоритетное направление инновационного развития промышленности.....	8
<i>M. Lisnichenko, S. Protasov.</i> Bio material modeling quantum circuit compression	15
<i>К.К. Абгарян, Е.С. Гаврилов.</i> Методы создания интеграционной платформы для решения задач материаловедения	18
<i>К.И. Волович, С.А. Денисов, В.А. Кондрашев.</i> Управление вычислительными заданиями высокопроизводительного вычислительного комплекса при решении задач материаловедения.....	24
<i>К.И. Волович, С.А. Денисов, В.А. Кондрашев.</i> Архитектура сети обработки данных для параллельных вычислений в высокопроизводительном комплексе для задач материаловедения.....	30
<i>Н.Н. Киселева, В.А. Дударев, О.В. Сенько, А.А. Докукин, Ю.О. Кузнецова.</i> Применение методов машинного обучения для конструирования новых неорганических соединений, перспективных для электроники	36
<i>А.Д. Маминов.</i> Проектирование службы мониторинга высокопроизводительного вычислительного комплекса для решения задач материаловедения.....	39
<i>А.А. Молотков, О.Н. Третьякова, Д.Н. Тужилин.</i> О разработке технологии производства компонентов электронных приборов	44
<i>Н.А. Полковникова, И.И. Кочетов.</i> Национальные вызовы в цифровом материаловедении.....	47
<i>В.С. Щербаков.</i> Архитектура программного комплекса для многомасштабного моделирования многослойных структур с магниторезистивными свойствами.....	51
2. В. Проблемы развития материаловедения квантоворазмерных электронных гетероструктур	57
<i>G. Suchanek, N. Kalanda, M. Yarmolich, E. Artiukh, G. Gerlach, N.A. Sobolev.</i> Magnetization of Magnetically Inhomogeneous Sr ₂ FeMoO ₆ -d Nanoparticles.....	58
<i>В.В. Савельев, С.В. Хазанова.</i> Численный расчёт транспортных характеристик двуслойного графена с разориентированными слоями	59

3. С. Математическое моделирование в структурном материаловедении (многоуровневые, многомасштабные модели, имитационные модели и т.д.)	61
<i>К.К. Абгарян.</i> Проектирование программных систем для моделирования в материаловедении электронных компонентов	62
<i>И.В. Матюшкин, О.А. Тельминов, А.Н. Михайлов.</i> Учет тепловыделения в малых объемах вещества на примере роста микростержней ZnO: поиск методики моделирования.....	68
<i>А.Г. Настовьяк, Д.В. Штеренталь, И.Г. Неизвестный, Н.Л. Шварц.</i> Моделирование высокотемпературных отжигов массива нанопроволок GaAs	71
<i>А.А. Спирина, Н.Л. Шварц.</i> Эшелонирование ступеней вицинальных поверхностей GaAs(111) в процессе высокотемпературных отжигов	74
<i>К.К. Абгарян, И.С. Колбин.</i> Применение метода модального подавления для расчёта эффективного коэффициента теплопроводности сверхрешеток.....	77
<i>Р.Л. Аляев, А.В. Лебедев.</i> Численный алгоритм для моделирования профилей травления методом уровней с произвольной функцией скорости.....	80
<i>Е.Д. Ватлин, Г.А. Карнуп, А.А. Шаранов.</i> Построение классической модели расчёта управляющих воздействий на экзоскелет руки.....	82
<i>С.А. Горохов, М.В. Черняев, С.И. Патюков, А.А. Резванов.</i> Кинетическая модель роста оксида кремния в процессе радикального окисления	85
<i>А.Л. Журавлев, К.К. Абгарян, Д.Л. Ревизников.</i> Дискретно-элементное моделирование композиционных материалов.....	88
<i>С.С. Зюзин, А.А. Резванов, Я.Г. Зассеев, В.А. Гвоздев, Е.А. Ганыкина, Е.С. Горнев.</i> Численное моделирование процесса осаждения слоёв оксида гафния методом RP-ALD.....	92
<i>В.Л. Литвинов, К.В. Литвинова.</i> Математическое моделирование элементов систем питания удаленных электронных устройств оптическим излучением.....	95
<i>А.А. Резник, А.А. Резванов.</i> Расчёт влияния легирующих добавок на электрофизические характеристики диоксида гафния методами квантово-химического моделирования	97
<i>А.М. Романенков.</i> Моделирование колебаний движущегося упругого полотна.....	100
<i>А.В. Саенко, В.В. Жейц, Г.Е. Билык, С.П. Малюков.</i> Численное моделирование фотоэлектрических характеристик солнечных элементов на основе гетероперехода $\text{TiO}_2/\text{Cu}_2\text{O}$	102

<i>П.А. Сеченых.</i> Математическое моделирование кристаллической структуры ГПУ металлов.....	105
<i>М.А. Степович, Д.В. Туртин, В.В. Калманович, М.Н. Филиппов.</i> Математическое моделирование и качественная оценка воздействия заряженных частиц или электромагнитного излучения на однородные полупроводниковые материалы.....	109
<i>Д.В. Туртин, М.А. Степович, Н.В. Щербаков.</i> О математическом моделировании и качественных оценках в методе времяпролётной катодолюминесценции.....	112
<i>О.В. Уварова, К.К. Абгарян, Д.И. Бажанов, С.И. Уваров.</i> Потенциалы межатомного взаимодействия для изучения свойств кристаллических структур.....	115
<i>А.Р. Фархутдинов.</i> Моделирование охлаждения однокомпонентной системы Леннард-Лжонса со скоростями, приближенными к экспериментально реализуемым.....	119
<i>В.И. Хвезюк.</i> Теплофизика для нанoeлектроники.....	120
<i>В.И. Хвезюк, Ц. Чжэн, А.А. Баринев.</i> Длины свободных пробегов фононов в наноплёнках.....	124
<i>К.М. Цысарь, Д.И. Бажанов, Е.М. Смелова.</i> Квантовомеханическое моделирование магнитооптических свойств одномерных проводов оксидов кобальта на поверхности платины.....	128
4. D. Моделирование размерных, радиационных, поверхностных и других дефектов в полупроводниковой нанoeлектронике	131
<i>А.И. Простомолотов, Н.А. Везезуб.</i> Дефектообразование в бездислокационных монокристаллах кремния.....	132
<i>С.П. Кобелева.</i> Структура собственных точечных дефектов в CdTe ..	135
<i>Е.В. Окулич, В.И. Окулич, Д.И. Тетельбаум.</i> Квантово-химический расчет энергетических характеристик легированного бором В-GA ₂ O ₃	138
<i>Е.В. Окулич, В.И. Окулич, Д.И. Тетельбаум, А.Н. Михайлов.</i> Молекулярно-динамическое моделирование начального этапа отжига диоксида кремния, облученного ионами SI ⁺	140
<i>А.В. Прохоренко, А.А. Гниденко, А.Н. Чибисов, М.А. Чибисова.</i> Исследование электронных и магнитных свойств при адсорбции двух атомов фосфора на поверхности силицена.....	143
5. E. Моделирование работы многоуровневых элементов памяти для компьютеров следующего поколения.....	147
<i>Е.А. Ганыкина, А.А. Резванов, С.С. Зюзин, Е.С. Горнев.</i> Компьютерное моделирование резистивного переключения в HFO ₂ -мемристорах... 148	148

А.Ю. Морозов, К.К. Абгарян, Д.Л. Ревизников. Иммитационное моделирование аналоговой импульсной нейронной сети на основе мемристоривных элементов с использованием параллельных технологий 150

О.А. Тельминов, Е.С. Горнев. Анализ элементной базы и схемотехнических решений для нейроморфных вычислений на мемристорных кроссбарах 156

6. Ф. Моделирование структур и свойств композиционных материалов с нанокристаллами, нанокластерами, наноаморфными включениями и т.д..... 161

И.Ю. Братухин, А.Ф. Крячко, О.В. Шакин, Г.М. Ревунов. Синтез микроуровневых структур композитных материалов 162

Г.С. Иванченко, А.В. Тен, М.А. Бутенко, Н.М. Кузьмин. Моделирование колебательных свойств гидрированных алмазоподобных нанопленок 164

Е.Д. Тихонова, Е.С. Горнев. Использование новых композиционных материалов в процессе самосовмещенного двойного паттернирования .. 167

Д.И. Бажанов, А.Ф. Фаттахов. Исследование влияния вакансий на процесс сегрегации примеси никеля вблизи границ дефектов структуры LSNT перовскита методом первопринципной молекулярной динамики . 170

7. Г. Проблемы обеспечения надежности ЭКБ микроэлектроники и систем на ее основе..... 175

А.А. Зацаринный, Ю.А. Степченко, Ю.Г. Дьяченко, Ю.В. Рождественский, Л.П. Плеханов. Отказоустойчивые самосинхронные схемы .. 176

1. А

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

СИНТЕЗ НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ КАК ПРИОРИТЕТНОЕ НАПРАВЛЕНИЕ ИННОВАЦИОННОГО РАЗВИТИЯ ПРОМЫШЛЕННОСТИ

Зацаринный Александр Алексеевич¹,

д.т.н., г.н.с., руководитель отделения ФИЦ ИУ РАН,

e-mail: alex250451@mail.ru

Абгарян Каринэ Карленовна¹,

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.*

Аннотация. В докладе рассматриваются актуальные проблемы, связанные с созданием новых материалов в различных сферах их применения. Приведены примеры новых материалов. Отмечено, что сегодня это важнейший фактор инновационного развития промышленности России. Показана актуальность разработки новых вычислительных методов для синтеза новых материалов. Сформулированы требования к высокопроизводительной инфраструктуре для многомасштабного компьютерного моделирования.

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

Введение

Сегодня Запад создал для России целый спектр реальных проблем, имеющих глобальный характер. Одна из них – в сфере электронной компонентной базы и материалов – ставит под угрозу возможность реализации стратегии научно-технологического развития страны на основе цифровой трансформации [1, 2]. Ключевой проблемой становится обеспечение технологического суверенитета страны в области микроэлектроники на основе создания полнофункциональной микроэлектронной отрасли. Эта задача сравнима по уровню стратегической значимости и масштабности успешно выполненной в конце 40-х гг. прошлого столетия задаче по созданию в СССР атомной промышленности, которая позволила обеспечить паритет в области ядерного оружия, а в последующем реализовать многие проекты и в гражданской сфере.

Представляется, что России необходимо срочно реализовать проект, по аналогии с упомянутым атомным, по созданию отечественной ЭКБ и материалов. Такой «электронный» проект должен предусматривать комплекс мероприятий, включая исследования, разработку технологий, реализующих их микроэлектронных изделий, необходимого технологического оборудования и расходных материалов, научно-производственной базы, в том числе серийных заводов, а также подготовку высококвалифицированных специалистов в области радиоэлектроники.

Основными заинтересованными потребителями новых материалов являются такие высокотехнологичные отрасли промышленности, как автомобилестроение, авиационная и космическая отрасли, медицинские изделия, радиоэлектроника и приборостроение.

В статье представлены основные современные тренды развития материаловедения как научного направления, а также возможности высокопроизводительной инфраструктуры для многомасштабного компьютерного моделирования.

Основные тренды в области создания новых материалов

Заметим, что проблема создания материалов с заданными свойствами имеет многовековые корни, так как на всем протяжении истории человечества освоение новых материалов оказывало ключевое влияние на развитие цивилизации. Достаточно упомянуть, что природный камень, бронза и железо дали названия целым эпохам [3]. Так, 1500 лет до нашей эры в Египте стали добавлять солому в глину при строении зданий, а также для укрепления керамических изделий. 1200 лет до н.э. древние монголы создали композиционный материал из дерева, костей и животного клея. В середине XIX века русские ученые В.В. Любарский и П.Г. Соболевский изобрели способ изготовления украшений с добавлением порошка платины. В 20–30-е годы XX века наступила эра полимеров, после чего трудно представить нашу жизнь без пластика и резины. Спустя несколько десятилетий на первый план вышел кремний, который дал импульс современному развитию электроники и цифровых технологий.

К настоящему времени основу современного производства примерно на 90% составляют всего два вида материалов: металлы (машиностроение, железных дорог, трубопроводы, линии электропередач) и керамика (строительство зданий, производство посуды, тепло- и электроизоляторы) [3]. В мире ежегодно производится

около 600 млн т металла – свыше 150 кг. на каждого жителя планеты. Примерно столько же производится керамики вместе с кирпичом. Однако изготовление металла в сотни раз дороже. Новые технологии открывают возможности замены металла керамикой. Так, с применением новых химических элементов (циркония, титана, бора, германия, хрома, молибдена, вольфрама) в последнее время синтезируют огнеупорную, термостойкую, химостойкую, высокопрочную керамику, а также керамику с набором заданных электрофизических свойств [4, 5, 6]. Сообщения о новых материалах и технологиях появляются все чаще [7, 8, 9].

Сегодня ученые переходят к созданию новейших материалов со свойствами, которые не встречаются в природе.

Одним из трендов в исследованиях является стремление создать «метаматериалы», свойства которых выходят за пределы свойств образующих их компонентов. С физической точки зрения это искусственно сформированные и особым образом выстроенные структуры, обладающие недостижимыми в природе электромагнитными или оптическими свойствами, в частности свойством невидимости [6]. Так, в 2020 году Forbes сообщил, что Армейская исследовательская лаборатория США (ARL) проводит исследования по созданию метаматериалов, которые могут направлять энергию механических волн вокруг объектов, защищая их от взрывов, ударных волн, землетрясений или вибрации. Подобные разработки могут сделать стратегически важные объекты (здания, мосты, системы вооружения и др.) «невидимыми» для механической энергии.

В 2020 году широкий резонанс вызвало научное достижение, связанное с заявлением о создании первого сверхпроводника, активного при комнатных температурах. Такого рода технологии, по словам авторов, позволят отказаться от использования электрических батарей. Сверхпроводимость (способность проводить электричество без сопротивления) входит в число наиболее выдающихся открытий XX века.

Развитие цифровых технологий моделирования, машинного обучения позволяют существенно повысить эффективность процессов разработки новых материалов при одновременном снижении временных и финансовых затрат. Многие подходы основаны на методах моделирования, использующих данные статистики, машинного обучения и искусственного интеллекта и оценки поведения материалов. Одним из актуальных направлений в области синтеза новых материалов с заданными свойствами является развитие методов ма-

тематического моделирования, в частности, методов многомасштабного моделирования [10, 11].

Применение технологии математического многомасштабного моделирования [10,11], согласно которой расчеты на каждом уровне проводятся с использованием соответствующих математических моделей и вычислительных алгоритмов, позволяет:

- объяснить многие явления и свойства объектов, включая исследование структурных особенностей физических явлений и процессов на нескольких масштабах;
- получать качественно новые результаты в области прогнозирования свойств новых объектов;
- решать задачи оптимизации состава и структуры многомасштабных объектов, выстраивать взаимосвязи между структурой и свойствами, что дает возможность синтезировать композиционные структуры, обладающие заданным набором свойств.

Использование таких подходов позволило решать широкий класс задач в области вычислительного материаловедения. Например, проводить исследования стабильности протяженных дефектных комплексов в кремниевых структурах [12], моделировать процессы распределения носителей заряда в наноразмерных полупроводниковых гетероструктурах с учетом поляризационных эффектов [13], решать задачи оптимизации для определения оптимального легирования барьерного слоя, состоящего из ряда подслоев, обеспечивающего заданную концентрацию электронов в канале проводимости полупроводниковых гетероструктур [14] и многие другие.

Исследовательская инфраструктура ФИЦ ИУ РАН

Для эффективного решения задач синтеза новых материалов на основе методов математического моделирования требуется исследовательская инфраструктура. Основные факторы, определяющие значимость высокопроизводительных платформ для научных исследований, обоснованы в [15, 16, 17]. 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 [18]. Зарегистрирован центр коллективного пользования

(ЦКП) «Информатика», на котором успешно решается целый ряд задач, в том числе в интересах синтеза материалов с заданными свойствами.

В рамках совершенствования ЦКП в настоящее время исследуются подходы к организации вычислительного процесса в высокопроизводительном комплексе с учетом широкого спектра вычислительных нагрузок для решения задач материаловедения [19]. Так, для ряда задач с интерактивным режимом работы высокопроизводительного комплекса предложен подход к динамическому распределению вычислительных ресурсов между очередями заданий, обслуживающих потоки интерактивных и пакетных расчетных заданий.

Реализованы несколько видов индивидуальных сред исполнения: среда моделирования физико-химических процессов в молекулярной динамике GROMACS, среда автоматизированных инженерных расчётов Ansys, среда разработки моделей машинного обучения и искусственного интеллекта на базе решения Jupyter Notebook, – среды материаловедения (ABINIT, VASP, Quantum ESPRESSO, LAMMPS, MEPP, MPB, OpenFOAM), образуемые средствами настройки платформенных сервисов PaaS [20].

Вместе с тем, для эффективного применения современной высокопроизводительной инфраструктуры для решения задач синтеза новых материалов обязательно требуется подготовка 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

Синтез новых материалов – важнейший фактор инновационного развития промышленности. Для успешного решения этих задач требуется:

- создание отечественной электронной компонентной базы;
- разработка и внедрение новых вычислительных методов;
- развитие высокопроизводительной и надежной исследовательской среды;
- подготовка высококвалифицированных кадров в области математического моделирования и программирования.

Работа выполнена при поддержке научного проекта № 075-15-2020-799 Министерства науки и высшего образования РФ.

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. 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.
3. Новые материалы в промышленности. – Агентство промышленного развития Москвы. 2020 г.
4. Тренды 2020/2021: топ-7 новых устойчивых материалов и технологий. <https://www.interior.ru/design/9908-trendi-2020-2021-top-7-novih-ustoichivih-materialov-i-tehnologii.html>
5. В России создали уникальный метод проектирования новых материалов // РИА Новости. <https://turbo.ria.ru/20210712/yagtu-1740104628.html> (дата обращения 06.10.2021)
6. Невидимые и сверхпроводящие: ученые создают материалы будущего. <https://ria.ru/turbopages.org/turbo/ria.ru/s/20201117/obrazovanie-1584864302.html>
7. Синтез новых материалов. <https://studopedia.org/5-41210.html>
8. «Фантастически интересные свойства»: российский учёный о новых материалах и технологиях. <https://russian-rt-com.turbopages.org/turbo/russian.rt.com/s/science/article/813171-intervyu-novye-materialy-tehnologii>
9. Исраилов М-А.М., Гасаналиев А.М., Гаматаева Б.Ю., П.Б. Шибает. Синтез и принципы создания новых материалов на основе сложных систем. <https://cyberleninka.ru/article/n/sintez-i-printsipy-sozdaniya-novyh-materialov-na-osnove-slozhnyh-sistem/viewer>
10. Абгарян К.К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. – М.: МАКС Пресс. 2017. 284 с.
11. Абгарян К.К., Осипова В.А. Применение методов поддержки принятия решений для многокритериальной задачи отбора многомасштабных композиций // «Издательство «Радиотехника», «Информатика и ее применение», 2019 г. № 2.
12. Abgaryan K. K., Mutigullin I. V. Theoretical investigation of the stability of defect complexes in silicon // *Phys.Status Solidi*. 2016. С. 13. № 4. P. 156–158.
13. Абгарян К.К., Ревизников Д.Л. Численное моделирование распределения носителей заряда в наноразмерных полупроводниковых гетероструктурах с учетом поляризационных эффектов. // *ЖВМ и МФ*. Т. 56. № 1.2016. С. 155–166.
14. Abgaryan K.K. Optimization Problems of Nanosized Semiconductor Heterostructures // *Russian Microelectronics*. 2018 Journal article. DOI: 10.1134/S1063739718080024. EID: 2-s2.0-85063261890
15. 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)*. М.: МАКС Пресс.
16. Зацаринный А.А., Абгарян К.К. Актуальные проблемы создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках цифровой

трансформации общества. – Материалы II международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК-2020). М.: МАКС Пресс. С. 8–13.

17. Zatsarinny A.A., Abgaryan K.K. FACTORS DETERMINING THE RELEVANCE OF CREATING A RESEARCH INFRASTRUCTURE FOR SYNTHESIZING NEW MATERIALS IN IMPLEMENTING THE PRIORITIES OF SCIENTIFIC AND TECHNOLOGICAL DEVELOPMENT OF RUSSIA. – Russian Microelectronics. 2020. T. 49. № 8. С. 600–602.

18. Zatsarinny 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»

19. Волович К.И., Денисов С.А., Кондрашев В.А. Управление вычислительными заданиями высокопроизводительного вычислительного комплекса при решении задач материаловедения. – Материалы 4 международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК-2022). М.: МАКС Пресс.

20. Волович К.И., Денисов С.А. Архитектура сети обработки данных для параллельных вычислений в высокопроизводительном комплексе для задач материаловедения. – Материалы 4 международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК-2022).

SYNTHESIS OF NEW MATERIALS AS A PRIORITY DIRECTION OF INNOVATIVE DEVELOPMENT OF THE INDUSTRY

Zatsarinny 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, e-mail: kristal83@mail.ru

Abstract. The report deals with topical problems associated with the creation of new materials in various fields of their application. Examples of new materials are given. It is noted that today it is the most important factor in the innovative development of Russian industry. The relevance of developing new computational methods for the synthesis of new materials is shown. The requirements for a high-performance infrastructure for multiscale computer simulation are formulated.

Keywords: digital transformation, synthesis of new materials, multiscale modeling, high-performance research infrastructure

BIO MATERIAL MODELING QUANTUM CIRCUIT COMPRESSION

*Marina Lisnichenko*¹,

m.lisnichenko@innopolis.university

*Stanislav Protasov*¹,

s.protasov@innopolis.ru

¹*Innopolis University, Innopolis*

Abstract. Bioelectronics is a perspective future of electronics. The modeling of the protein is an important part that allows to search the appropriate folding structure with applicable conductivity properties. The classical computers struggle from modelling large structures because of number degrees of freedom. The mathematical modelling inside the quantum programming paradigm is a possible way to overcome this factor. This work describes a simplification algorithm of bio material (protein) model used in bioelectronics.

Key words: quantum computation, protein folding, bio materials, bioelectronics, optimization.

Introduction

Bio- or proto-electronics is a potential development of the future electronics [1]. Researchers have already investigated s- and p-semiconductor properties [2], bio-molecular electronic junctions [3], and discovered electron transport [4]. Thus, bioelectronics and electronics with proteins evolved may become possible in near future.

The protein structure affects on its conductivity. Ha and Kim showed an interconnection between protein folding structure and the junction mechanism [5]. Thus, protein modelling is an important task, which makes possible further bio-electronics modelling and development.

At the same time, protein folding modelling is an NP-hard problem [6]. The quantum computations potentially overcome this problem due to natural computational parallelism. This fact allows the modelling and optimization in the bounded time limits [7]. Quantum computers encode molecules in a quantum state and model their evolution applying unitary operators U . These operators correspond to application of constant matrix Hamiltonians as $U = e^{-iHt}$. This work describes the quantum circuit optimization via detection and removal of adjoint operators and operators with small parameters without loss of folding structure prediction.

Protein folding modelling

Robert et al. introduced a hybrid classical-quantum pipeline to encode amino acids information and to predict a native protein folding structure [8]. The proposed pipeline, Variational Quantum Eigensolver with Conditional Value at Risk (CVaR) [9] computes the protein folding with minimum energy. After amino acid encoding, the quantum circuit includes a number of unitary operators – gates. The quantum circuit looks like a string with beads, where string (or wire) is a quantum bit – qubit – and beads are gates. The longest bead path in the circuit represents a metric called depth. In the case of a real quantum computer execution of gates is non-perfect and leads to computational errors. The more gates the quantum program has, the greater error is. Another reason for circuit optimization is cost of the gates. For instance, the cost in the IonQ server is $\$3 \cdot 10^{-5}$ per each single qubit gate, $\$3 \cdot 10^{-4}$ per each two-qubit gate and $\$33 \cdot 10^{-5}$ per each measurement shot [10].

The adjoint gates are destroyable in pairs. This mathematical property cuts the circuit depth when these pairs occur successively. The commutative property allows to find a complex conjugated gate for the initial one within circuit part, where all gates commute. The paper bases on this phenomena of commutative gates and makes possible to simplify the primary protein state initialization. Additionally, the compression algorithm includes the reduction of rotation gates with small parameters. Depending on the reduction threshold the folding prediction deviates from native structure to incorrect result. Combination of optimization based on adjoint gated and gate with small parameter reduction is named as full optimization pipeline.

Conclusion

The paper described the quantum circuit compression of the bio material modelling via adjoint pairs reduction and reduction of rotation gates with small parameters. The experimental modelling uses Azurin’s first five amino acids folding optimization. The algorithm successfully reduces the circuit depth from 635 to 500, and 478 (for original, reduced only based on adjoint property, and fully optimized algorithm with max parameter value 0.1 respectively) without negative effect on the output folding structure prediction. As result, quantum computations have a potential for better scaling of optimization and modelling tasks.

References

1. L Zhang, JR Lu, and TA Waigh. Electronics of peptide-and protein-based biomaterials. *Advances in Colloid and Interface Science*, 287:102319, 2021.
2. Yuichi Tokita, Seiji Yamada, Wei Luo, Yoshio Goto, Nicole Bouley-Ford, Hiroshi Nakajima, and Yoshihito Watanabe. Protein photoconductors and photodiodes. *Angewandte Chemie International Edition*, 50(49):11663–11666, 2011.
3. Jerry A Fereiro, Gilad Porat, Tatyana Bendikov, Israel Pecht, Mordechai Sheves, and David Cahen. Protein electronics: chemical modulation of contacts control energy level alignment in gold-azurin-gold junctions. *Journal of the American Chemical Society*, 140(41):13317–13326, 2018.
4. Meike Cordes. *How do amino acids transport electrons through peptides?* Cuvillier Verlag, 2008.
5. Minju Ha and V Narry Kim. Regulation of microrna biogenesis. *Nature reviews Molecular cell biology*, 15(8):509–524, 2014.
6. William E Hart and Sorin Istrail. Robust proofs of np-hardness for protein folding: general lattices and energy potentials. *Journal of Computational Biology*, 4(1):1–22, 1997.
7. Carlos Outeiral, Martin Strahm, Jiye Shi, Garrett M Morris, Simon C Benjamin, and Charlotte M Deane. The prospects of quantum computing in computational molecular biology. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, 11(1):e1481, 2021.
8. Anton Robert, Panagiotis Kl Barkoutsos, Stefan Woerner, and Ivano Tavernelli. Resource-efficient quantum algorithm for protein folding. *npj Quantum Information*, 7(1):1–5, 2021.
9. Panagiotis Kl Barkoutsos, Giacomo Nannicini, Anton Robert, Ivano Tavernelli, and Stefan Woerner. Improving variational quantum optimization using cvar. *Quantum*, 4:256, 2020.
10. IonQ, Programs, Research credits, Resource Estimator, accessed 20 September 2022, <https://ionq.com/programs/research-credits/resource-estimator>

МЕТОДЫ СОЗДАНИЯ ИНТЕГРАЦИОННОЙ ПЛАТФОРМЫ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ

Абгарян Каринэ Карленовна¹,

д.ф.-м.н., г.н.с., зав. отделом ФИЦ ИУ РАН,

e-mail: kristal83@mail.ru

Гаврилов Евгений Сергеевич¹

н.с. ФИЦ ИУ РАН,

e-mail: eugavrilov@gmail.com

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

Аннотация. В докладе рассматриваются проблемы построения информационных систем для решения задач материаловедения. Представлены методы создания интеграционной платформы для многомасштабного моделирования. Отмечена актуальность разработанных подходов для изучения свойств материалов и построения взаимозависимостей структурасвойства. В качестве инструмента для автоматизации процесса распределенных вычислений были использованы подходы, применяющиеся при автоматизации бизнес-процессов. Построенные решения реализуются с применением параллельных вычислений на высокопроизводительных ресурсах ЦКП «Информатика» ФИЦ ИУ РАН

Ключевые слова: многомасштабное моделирование, программные системы, интеграционная платформа, высокопроизводительные ресурсы, автоматизация бизнес-процессов.

Введение

Развитие методов проектирования программных систем в ресурсоемкой области получения современных материалов весьма актуально и востребовано. В настоящее время, во всем мире ускоренными темпами ведется разработка и внедрение современных материалов с заданными свойствами. Так, например, согласно прогнозам экспертов, мировой рынок композиционных материалов ежегодно будет увеличиваться в диапазоне от 4 до 7,7 процентов вплоть до 2024 г. и его стоимость возрастет до 103–131,6 млрд долларов [1]. По причине нарастающей конкуренции в данной области, важным фактором опережающего развития является использование предсказательного компьютерного моделирования с применением

высокопроизводительных вычислительных комплексов. Тематика развития высокопроизводительной среды для научных исследований в условиях цифровой трансформации применительно к решению задач синтеза новых материалов с заданными свойствами рассматривалась в работах [2, 3]. Дан анализ опыта ФИЦ ИУ РАН в создании современной высокопроизводительной платформы для научных исследований. Обоснована необходимость ее применения для решения прикладных задач, связанных с подбором новых материалов в области микроэлектроники и других областях.

Имитационному моделированию сложных процессов и систем посвящен ряд работ Н.П. Бусленко [4], Ю.Н. Павловского [5], идеи которых нашли свое применение в работах Бродского Ю.И., предложившего формализованный модельно-ориентированный подход к построению и реализации имитационных моделей. В работах К.К. Абгарян [6, 7] данный подход был развит и применен к созданию формализованной технологии построения многомасштабных вычислительных моделей и многоуровневых информационных систем для исследования процессов и явлений, характеризующихся широким спектром пространственных и/или временных масштабов. Было показано, что одним из наиболее эффективных решений в области вычислительного материаловедения является разработка методов многомасштабного моделирования, позволяющих в рамках одной модели проводить исследования современных материалов с учетом основных факторов с разных пространственно-временных масштабов, играющих ключевые роли в таких задачах. Их использование дает возможность существенно удешевить и ускорить процессы разработки и применения современных технологий получения современных материалов с требуемыми свойствами. На данный момент, многомасштабный подход реализуется во множестве зарубежных программных САПР пакетов (CAD/CAE/TCAD) и некоторых отечественных разработках [8]. Основными недостатками зарубежных пакетов являются высокая стоимость и проблемы с получением лицензий, в большинстве случаев закрытая архитектура платформы, ограничивающая расширение сторонними или собственными разработками, и узкая специализация для конкретной индустрии. В связи с этим, разработка и автоматизация методов и средств информационной поддержки многомасштабного моделирования с открытой расширяемой архитектурой, делающее возможным применять их к новым типам задач, является актуальной.

Подходы к построению информационных систем в задачах материаловедения

Построение информационных систем в области естественнонаучных исследований является сложной задачей, требующей значительных усилий по организации эффективного взаимодействия входящих в эти системы компонент. В настоящее время в области развития теоретических подходов к разработке программных систем, предназначенных для моделирования свойств современных материалов или сложных многоуровневых процессов с ними связанных, не выработано общих стандартов. Особенно это можно отнести к исследованиям, в которых для выявления взаимосвязей структура-свойство, необходимо использовать данные, полученные с применением физико-математических моделей, описывающих процессы на разных масштабных уровнях. Многие работы российских и зарубежных исследователей посвящены данной тематике [9–15]. Можно сказать, что в основном, при создании схем многомасштабного моделирования для решения широкого класса задач в этих работах, используются либо методы, основанные на использовании алгоритмов теории графов [16], либо описательные, неформализованные подходы к созданию многомасштабных моделей. При программной реализации применяются различные инструменты, в большей степени – это коммерческие программные комплексы (например, TCAD Sentaurus Synopsys, TCAD Silvaco, ANSYS) с закрытой архитектурой для сторонних разработчиков, поэтому интеграция сторонних программ, или собственная реализация обмена данными между модулями в них сильно затруднена или невозможна. С другой стороны, в последние годы появляется все больше реализаций отдельных алгоритмов или даже пакетов программ с открытыми исходным кодом, с которыми активно работает научное сообщество (например, пакет квантово-механических расчетов QuantumEspresso [17], пакет молекулярно-динамических расчетов LAMMPS [18]). Также, коллективы ученых часто создают собственные программные реализации отдельных моделей, специализированных под конкретные задачи проектов. Таким образом, в рамках одного проекта возникает необходимость использовать полный спектр программных средств – от собственных реализаций, готовых пакетов, до отдельных функций дорогостоящих программных комплексов.

В работе [19] был представлен формализованный подход к построению и компьютерной реализации имитационных моделей сложных систем, состоящих из разных компонент, использующий

теоретико-множественное представление. Развитие данного подхода было получено в работах [6, 7], где была создана формализованная технология формирования многомасштабных моделей и многоуровневых информационных систем для изучения процессов и явлений, характеризующихся широким спектром пространственных и/или временных масштабов.

Доклад посвящен компьютерной реализации моделей многомасштабных систем из области материаловедения, сформированных с помощью технологии, описанной в [6, 7], и методам создания интеграционной платформы для автоматизации программных решений при распределенной и параллельной обработке расчетных данных с разных масштабных уровней.

В докладе описана программная инфраструктура интеграционной платформы многомасштабного моделирования. Представлены разработанные методы и модели создания программных систем. многомасштабного моделирования в задачах материаловедения, позволяющие сократить трудозатраты на выполнение серий типовых параметризованных вычислительных экспериментов, а также расширить область исследования в рамках фиксированных ресурсов. Обоснована архитектура интеграционной платформы многомасштабного моделирования на высокопроизводительных программных комплексах позволяет эффективно выполнять экспериментальные исследования по расчету структурных характеристик различных классов материалов. В качестве инструмента для автоматизации процесса распределенных вычислений, были использованы подходы, применяющиеся при автоматизации бизнес-процессов. Был выбран подход моделирования сценариев как бизнес-процессов и его реализация в виде Camunda BPM.

Заключение

В докладе отмечена актуальность развития методов проектирования программных систем в ресурсоемкой области получения современных материалов весьма актуально и востребовано. Представлены основные методы и подходы, применяемые для создания интеграционной платформы для многомасштабного моделирования в задачах материаловедения. На конкретных примерах продемонстрирована работоспособность разработанного подхода. Созданные методы и решения используются в актуальных прикладных задачах из области вычислительного материаловедения. Построенные ре-

шения реализуются с применением параллельных вычислений на высокопроизводительных ресурсах ЦКП «Информатика» ФИЦ ИУ РАН [20].

Работа выполнена при поддержке научного проекта № 075-15-2020-799 Министерства науки и высшего образования РФ

Список использованных источников

1. Дориомедов, М.С. Российский и мировой рынок полимерных композитов (обзор) // Труды ВИАМ. – 2020. – № 6–7 (89). – С. 29–37.
2. Зацаринный А.А., Абгарян К.К. Факторы, определяющие актуальность создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках реализации приоритетов научно-технологического развития России // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2019; 22(4):298–301.
3. Абгарян К.К., Зацаринный А.А. Актуальные проблемы создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках цифровой трансформации общества // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2020;23(4):270-276.
4. Бусленко Н.П. Моделирование сложных систем // М.: Наука. 1978. 400 с.
5. Павловский Ю.Н. Имитационные модели и системы // М.: Фазис: ВЦ РАН. 2000. 134 с.
6. Абгарян К.К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. – М.: МАКС Пресс. 2017. 284 с.
7. Абгарян К.К. Информационная технология построения многомасштабных моделей в задачах вычислительного материаловедения // «Издательство «Радиотехника», «Системы высокой доступности». 2018. Т. 15. № 2. С. 9–15.
8. Akhukov M., Kniznik A., Shirabaykin D. Multicomp: Software Package for Multiscale Simulations // Communications in Computer and Information Science (см. в книгах). – 2021. – Vol. 1510 CCIS. – P. 174–185.
9. Lesar, R. Introduction to Computational Materials Science. Fundamentals to Applications. – Cambridge University Press. Handback. 2013. 414 p.
10. Karakasidis, T.E., Charitidis, C.A., Multiscale modeling in nanomaterials science. // Mat. Science & Engineering. C. 27. 2007. P. 1082–1089.
11. Годунов С.К., Киселев С.П., Куликов И.М., Мали В.И. Моделирование ударноволновых процессов в упругопластических материалах на различных (атомный, мезо и термодинамический) структурных уровнях. – Изд.-во: Ижевский институт компьютерных исследований. 2014. С. 279.
12. Зинченко Л.А., Шахнов В.А. Особенности математического моделирования в задачах проектирования наносистем. // Информационные технологии и вычислительные системы. 2009. № 4. С. 84–92.
13. Раткин Л. Многомасштабное моделирование процессов и структур в нанотехнологиях // Наноиндустрия. 2009. № 1. С. 46–47.
14. Tadmor E.B., Miller R.E. Modeling materials. Continuum, Atomistic and Multiscale Techniques // Cambridge university press. 2014. 759 p.

15. Borg M.K., Lockerby D.A. and Reese J.M. A Hybrid molecular-continuum method for unsteady compressible multiscale flow. // Journal of Fluid Mechanics. 2015. Vol. 768. P. 388–414.

16. Pizzi G., Cepellotti A., Sabatini R., Marzari N. et al. AiiDA. Automated interactive infrastructure and database for computational science. – Elsevier. 2015. 30 p.

17. Программный пакет квантово-механических расчетов QuantumEspresso [Электронный ресурс] URL: <https://www.quantum-espresso.org>

18. Программный пакет молекулярно-динамических расчетов LAMMPS [Электронный ресурс] URL: <https://lammps.org>

19. Бродский Ю.И. Модельный синтез и модельно-ориентированное программирование. – М.: ВЦ РАН. 2013. 142 с.

20. Положение о ЦКП «Информатика». [Электронный ресурс] URL: <http://www.frccsc.ru/ckp> (дата обращения 20.10.2022).

METHODS OF CREATING AN INTEGRATION PLATFORM FOR SOLVING MATERIAL SCIENCE PROBLEMS

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, e-mail: kristal83@mail.ru.

Gavrilov Evgeny Sergeevich,

researcher, Federal Research Centre “Computer Science and Control” (FRCCSC), of the Russian Academy of Sciences, (FRC CSC RAS). Vavilov st. 44, 119333 Moscow, Russia, e-mail: eugavrilov@gmail.com

Abstract. The report considers the problems of building information systems for solving the problems of materials science. The methods for creating an integration platform for multiscale modeling are presented. The relevance of the developed approaches for studying the properties of materials and the construction of structure-property interdependencies was noted. As a tool for automating the process of distributed computing, the approaches used in the automation of business processes were used. The developed solutions are implemented with the use of parallel computing on the high-performance resources of the Informatics Center of the RAS Research Institute.

Key words: multi-scale modeling, software systems, integration platform, high-performance resources, business process automation.

УПРАВЛЕНИЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫМИ ЗАДАНИЯМИ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНОГО ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО КОМПЛЕКСА ПРИ РЕШЕНИИ ЗАДАЧ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ

Волович Константин Иосифович,

*к.т.н., начальник УИТС, KVolovich@frccsc.ru,
+7(499)135-43-20¹,*

Денисов Сергей Анатольевич,

*начальник ЦКП «Информатика», SDenisov@frccsc.ru,
+7(499)135-43-20¹*

Кондрашев Вадим Адольфович,

*к.т.н., заместитель директора, VKondrashev@frccsc.ru,
+7(499)135-43-20¹,*

¹ *ФИЦ ИУ РАН, г. Москва*

Аннотация. В работе рассматриваются подходы к организации вычислительного процесса в высокопроизводительном комплексе с учетом широкого спектра вычислительных нагрузок для решения задач материаловедения. Для ряда задач, для которых востребован интерактивный режим работы в вычислительной среде высокопроизводительного комплекса, предложен подход к динамическому распределению вычислительных ресурсов между очередями заданий, обслуживающих потоки интерактивных и пакетных расчетных заданий, что позволяет повысить эффективность загрузки ресурсов высокопроизводительного вычислительного комплекса в условиях совместного применения интерактивного и пакетного подходов к вычислениям.

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

Современные высокопроизводительные комплексы обеспечивают решение широкого спектра задач и проведения междисциплинарных исследований, включая задачи вычислительного материаловедения. Такой обширный набор задач определяет специфику организации вычислительного процесса на таких комплексах. От вычислительной среды требуется большая гибкость и адаптивность к изменяющимся требованиям со стороны приложений и задач пользователей. Такие интегрированные прикладные программные системы как ABINIT, VASP, Quantum ESPRESSO, LAMMPS,

МЕЕР, MPB, OpenFOAM ориентированы на использование технологий параллельного выполнения заданий на узлах высокопроизводительного кластера [1,2].

В работе [3] в дополнение к классическому пакетному режиму функционирования вычислительной среды был обоснован интерактивный режим работы пользователя в своей индивидуальной среде исполнения в вычислительной среде высокопроизводительного комплекса. В работе предложен подход для размещения расчетных заданий, относящихся к классу пакетных или интерактивных заданий с учетом организации индивидуальной среды исполнения. В настоящей работе будут рассмотрены вопросы выделения вычислительных ресурсов и допустимых временных интервалов выполнения расчетных заданий разным пулам очередей. На примере Центра коллективного пользования «Высокопроизводительные вычисления и большие данные» (ЦКП «Информатика») ФИЦ ИУ РАН [4] будет предложен подход к динамическому распределению вычислительных ресурсов между очередями заданий, обслуживающих потоки интерактивных и пакетных расчетных заданий.

Функции управления вычислительной средой высокопроизводительного комплекса возлагаются на систему управления вычислительными заданиями (в отечественной литературе также может обозначаться термином «диспетчер задач», в иностранных источниках – терминами «workload management system», «job scheduler» и проч.).

Как правило система управления вычислительными заданиями функционирует в парадигме «клиент-сервер» и управляет процессом выполнения расчетных заданий основываясь на настроенных политиках обслуживания – совокупности правил (алгоритмов) распределения вычислительных ресурсов между расчетными заданиями и управления ходом их конкурентного выполнения.

Процесс управления выполнением расчетных заданий сводится к реализации трех ключевых функций системы управления вычислительными заданиями:

- 1) предоставление пользователям исключительного и/или неисключительного доступа к вычислительным ресурсам на некоторый период времени;

- 2) обеспечение среды для запуска, выполнения и мониторинга работы параллельного задания, например, MPI (Message Passing Interface – интерфейс передачи сообщений);

- 3) выполнение арбитража соперничества за ресурсы путем управления очередью ожидающих заданий.

Как правило в системах управления вычислительными заданиями имеется встроенный набор алгоритмов, реализующих следующие политики обслуживания:

- политику обработки входного потока расчетных заданий;
- политику управления поведением выполняемого расчетного задания.

Классическим подходом организации вычислительного процесса в высокопроизводительном комплексе считается пакетное обслуживание расчетных заданий, обеспечивающее наиболее эффективный способ использования вычислительных ресурсов [5].

Однако в ряде случаев сложившаяся практика использования вычислительных средств диктует необходимость совместно с пакетным режимом обслуживания реализовывать интерактивный режим работы пользователя в своей индивидуальной среде исполнения за счет применения технологии виртуальной контейнеризации на базе системы Docker [6]. С точки зрения системы управления вычислительными заданиями, нет разницы в управлении заданием, содержащим прикладную задачу, или содержащим контейнер с прикладной задачей. Такая возможность реализована в ЦКП «Информатика», где индивидуальная среда исполнения интегрирована в вычислительную среду комплекса и позволяет различным группам пользователей параллельно решать свои задачи в разных вычислительных средах. В [7] обоснованы подходы к формированию и обеспечению функционирования индивидуальной среды моделирования в интересах конкретного пользователя.

В настоящее время в ЦКП «Информатика» реализованы следующие виды индивидуальных сред исполнения:

- среда моделирования физико-химических процессов в молекулярной динамике GROMACS [8] с возможностью запуска нескольких копий и организации MPI взаимодействия между ними;
- среда автоматизированных инженерных расчётов Ansys [9];
- среда разработки моделей машинного обучения и искусственного интеллекта на базе решения Jupyter Notebook [10];
- средствами настройки платформенных сервисов PaaS возможно развертывание программных сред материаловедения таких как ABINIT, VASP, Quantum ESPRESSO, LAMMPS, MEEP, MPB, OpenFOAM [7].

Для обеспечения одновременного функционирования пакетного и интерактивного режимов работы предлагается создание следующих очередей.

Интерактивная очередь предназначена для выполнения функций разработки и отладки и позволяет исполнять расчетные задания практически в режиме он-лайн. Политиками обслуживания для данной очереди ограничено время исполнения задания.

Основная очередь предназначена для выполнения расчетных заданий в пакетном режиме и позволяет размещать на исполнение расчетные задания, время функционирования которых пользователь определил той или иной величиной.

Дополнительная очередь также предназначена для выполнения расчетных заданий в пакетном режиме и позволяет размещать на исполнение расчетные задания, для которых не представляется возможным оценить время их исполнения. Очередь имеет наименьший приоритет. Для очереди предоставляется ограниченный пул ресурсов, задания могут приостанавливаться.

Обозначенные очереди определяются следующими параметрами:

- интерактивная очередь: приоритет – высокий, доступность ресурсов – по принципу «лучшее из возможного», максимальное время выполнения задачи – сильно ограничено;
- общая очередь: приоритет – средний, доступность ресурсов – в рамках ограниченного пула, максимальное время выполнения задачи – ограничено;
- дополнительная очередь: приоритет – низкий, доступность ресурсов – в рамках ограниченного пула, максимальное время выполнения задачи – не ограничено.

Далее будет рассмотрен подход динамического распределения вычислительных ресурсов между очередями заданий, обслуживающих потоки интерактивных и пакетных расчетных заданий с учетом того, что система управления вычислительными заданиями (для примера это система базе программного продукта Slurm [11]) предоставляет пользователям гибкие возможности для решения их научных и практических задач посредством запуска расчетных заданий:

- на одном сервере из состава вычислительного комплекса;
- на группе серверов, относящихся к одному вычислительному комплексу;
- на серверах и/или группе серверов, относящихся к разным вычислительным комплексам.

Для системы управления вычислительными заданиями ЦКП «Информатика» выделяются два режима работы: «день» – дневной режим работы с 8.31 до 21.30 и «ночь» – ночной режим работы с 21.31 до 8.30.

Предлагаемый подход динамического распределения вычислительных ресурсов между очередями заданий, обслуживающих потоки интерактивных и пакетных расчетных заданий, выполняется два раза в сутки при смене режимов работы на дневной и ночной режимы. Смена режимов осуществляется автоматически путем переназначения параметров очередей в соответствии с следующими условиями.

В режиме «день» интерактивной очереди назначаются следующие параметры:

- 1) приоритет – высокий;
- 2) пул ресурсов – все гибридные вычислительные узлы;
- 3) время резервирования – не более одного часа;

В режиме «день» общей очереди назначаются следующие параметры:

- 1) приоритет – средний;
- 2) пул ресурсов: все вычислительные узлы для задач, время резервирования которых не превышает временную границу окончания режима «день».

В режиме «ночь» интерактивной очереди назначается только параметр «режим работы» – закрыта. Параметры приоритет, пул ресурсов, порция ресурсов, время резервирования – не назначаются ввиду режима работы.

В режиме «ночь» общей очереди назначаются следующие параметры:

- 1) приоритет – высокий;
- 2) пул ресурсов:
 - все имеющиеся узлы для задач, время резервирования которых не превышает временную границу окончания режима «ночь»;
 - один гибридный вычислительный узел для задач время резервирования которых превышает временную границу окончания режима «ночь»;
 - три вычислительных узла для задач, время резервирования которых превышает временную границу окончания режима «ночь».

Таким образом, в режиме «ночь» пользователям доступен только пакетный режим вычислений в высокопроизводительном комплексе. При этом расчетные задачи, для которых определено время резервирования ресурсов, имеют приоритетное преимущество над расчетными задачами, для которых не представляется возможным оценить время их исполнения.

С учетом того, что интерактивный режим используется с ограниченным набором ресурсов на начальных этапах создания моделей, в то время как для эксплуатации хорошо подходит классический пакетный режим, такой подход в организации вычислений в значительной мере расширяет доступность вычислительных ресурсов для выполнения задач материаловедения.

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. Volovich K., Kondrashev V., Posypkin M., Denisov S. Some Approaches to Managing Computing Resources of a Hybrid High-Performance Cluster in a Cloud Environment // *CEUR Workshop Proceedings*, 2021, 2930, p. 47–53.

4. ЦКП «Информатика» // [Электронный ресурс] – Режим доступа <http://www.frccsc.ru/ckp> (дата обращения 19.07.2022)

5. Volovich K.I., Denisov S.A., Shabanov A.P., Malkovsky S.I. Aspects of the assessment of the quality of loading hybrid high-performance computing cluster // *CEUR Workshop Proceedings*, 2019, 2426, p. 7–11.

6. Docker Docs // [Электронный ресурс] – <https://docs.docker.com/get-started/overview/> (дата обращения 19.07.2022)

7. Volovich K.I., Denisov S.A., Malkovsky S.I. Formation of an Individual Modeling Environment in a Hybrid High-Performance Computing System // *Russian Microelectronics*, 2020, 49(8), p. 580–583.

8. Gromacs // [Электронный ресурс] – <https://www.gromacs.org/> (дата обращения 19.07.2022)

9. Ansys // [Электронный ресурс] – <https://www.ansys.com/> (дата обращения 19.07.2022)

10. Jupyter Notebook // [Электронный ресурс] – <https://jupyter.org/> (дата обращения 19.07.2022)

11. Slurm Documentation // [Электронный ресурс] -<https://slurm.schedmd.com/documentation.html> (дата обращения 19.07.2022)

CONTROL OF COMPUTATIONAL TASKS OF A HPC CLUSTER WHEN SOLVING PROBLEMS OF MATERIALS SCIENCE

S. Denisov, V. Kondrashev, K. Volovich

Abstract. The paper considers approaches to the organization of the computational process in a HPC cluster, taking into account a wide range of computational loads in the problems of computational materials science. For a number of tasks for which the interactive mode of operation in the computing environment of a high-performance cluster is in demand, an approach is proposed to the dynamic distribution of computing resources between job queues serving the flows of interactive and batch computational tasks, which makes it possible to increase the efficiency of loading resources of a HPC cluster with the combined use of interactive and batch approaches to computing..

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

УДК 004.051

<https://doi.org/10.29003/m3061.MMMSEC-2022/30-36>

АРХИТЕКТУРА СЕТИ ОБРАБОТКИ ДАННЫХ ДЛЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ В ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНОМ КОМПЛЕКСЕ ДЛЯ ЗАДАЧ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ

Волович Константин Иосифович,

к.т.н., начальник УИТС, KVolovich@frccsc.ru,

+7(499)135-43-20¹,

Денисов Сергей Анатольевич,

начальник ЦКП «Информатика», SDenisov@frccsc.ru,

+7(499)135-43-20¹

Кондрашев Вадим Адольфович,

к.т.н., в.н.с, VKondrashev@frccsc.ru, +7(499)135-43-20¹

¹ *ФИЦ ИУ РАН, г. Москва*

Аннотация. В работе рассматривается архитектура построения параллельных систем хранения данных в высокопроизводительных вычислительных комплексах. Анализируются особенности представления данных в параллельных файловых системах для прикладных задач материаловедения.

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

Возрастающая потребность научных коллективов, промышленных предприятий, коммерческих фирм в решении задач, требующих высокопроизводительных вычислительных ресурсов требует создания вычислительных инструментов, предоставляемых пользователям с использованием облачных и платформенных технологий [1]. В настоящее время в качестве таких вычислительных ресурсов выступают суперкомпьютеры и высокопроизводительные вычислительные комплексы, позволяющие осуществлять расчеты с использованием технологий параллельных вычислений. Так, в частности, задачи материаловедения не могут быть решены с использованием одного сервера, требуются мощные многомашинные кластеры, объединенные высокопроизводительными вычислительными сетями. Такие распространенные интегрированные системы материаловедения как ABINIT, VASP, Quantum ESPRESSO, LAMMPS, MEPP, MPB, OpenFOAM ориентированы на применение многомашинных кластеров и максимальную эффективность демонстрируют именно на таких вычислительных комплексах. Организация вычислительного процесса является комплексной научной задачей, направленной на оптимизацию загрузки вычислительных ресурсов, минимизацию времени ожидания и вычисления, управления приоритетами заданий, обеспечения вычислительных заданий исходными данными [2, 3].

Для реализации таких требований к вычислительному комплексу особое значение приобретает обеспечение вычислительных заданий исходными данными. Производительность средств предоставления данных вычислительным заданиям должно быть таково, чтобы минимизировать простой обработки за счет ожидания предоставления данных. Задачи предоставления данных вычислительным заданиям в многомашинных вычислительных комплексах решаются за счет создания специализированного файлового хранилища, обеспечивающего параллельный доступ вычислительных узлов кластера к данным. Таким образом обеспечивается максимальная скорость обмена данными в условиях параллельного функционирования виртуальных программных сред исполнения разнотипных вычислительных заданий [4].

Классической схемой организации параллельного файлового доступа является применение группы узлов хранения данных, связанных с вычислительными узлами высокоскоростной сетью. Параллельная файловая система, развернутая на узлах хранения, создает единое пространство данных, обеспечивает непротиворечивость

информации, дублирование информации на разных узлах, управление доступом к файлам со стороны вычислительных узлов [5].

На сегодняшний день имеются как проприетарные, так и открытые реализации параллельных файловых систем.

К проприетарным решениям относятся:

- General Parallel File System (GPFS) – разработка компании IBM;
- Google File System.

GPFS применяется фирмой-производителем в составе коммерческого продукта Elastic Storage System, представляющего собой масштабируемый аппаратно-программный комплекс хранения данных.

Google File System используется корпорацией Google в кластерах компании, предоставляющих услуги высокопроизводительных вычислений.

Среди параллельных файловых систем с открытым кодом в настоящее время активно развивается проект Lustre, берущий начало из Университета Карнеги, принадлежащий в настоящее время корпорации Intel. Другим открытым проектом является параллельная файловая система Ceph, сопровождаемый RedHat (IBM).

Рассмотрим архитектуру параллельной файловой системе на примере проекта Lustre.

Lustre – это высокопроизводительная файловая система, состоящая из серверов и хранилища. Сервер метаданных (MDS) отслеживает метаданные (например, право собственности и права доступа к файлу или каталогу). Серверы объектных хранилищ предоставляют файловые службы ввода-вывода для целевых объектов объектных хранилищ, в которых размещается фактическое хранилище данных. Целевые объекты хранения обычно представляет собой один дисковый массив. Параллельная файловая система Lustre достигает своей производительности за счет автоматического разделения данных на фрагменты, известные как «полосы» (stripes), и записи полос в циклическом режиме по нескольким объектам хранения. Этот процесс, называемый «чередованием», может значительно повысить скорость файлового ввода-вывода за счет устранения узких мест, связанных с одним диском [6].

Параллельная система хранения состоит из множества компонентов, включая диски, контроллеры хранения, платы ввода-вывода, серверы хранения, коммутаторы сети хранения данных и соответствующее программное обеспечение для управления. Объединение всех этих компонентов вместе и их настройка для достижения оптимальной производительности сопряжены со значитель-

ными трудностями. На рисунке 1 показана архитектура параллельной файловой системы Lustre.

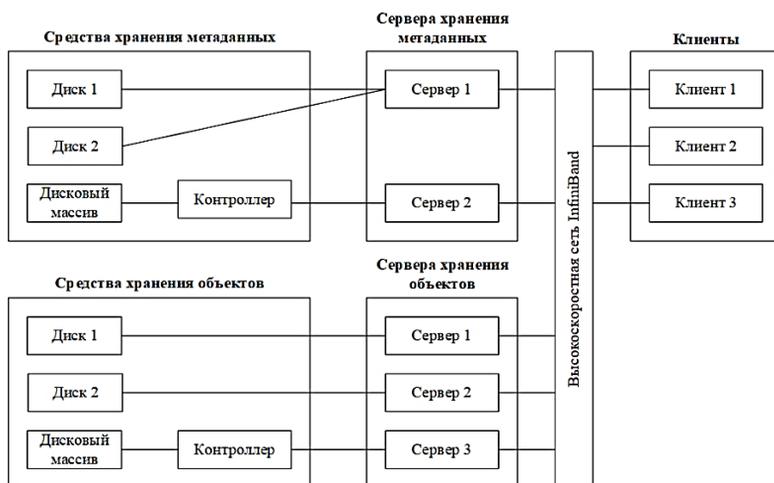


Рис. 1. Архитектура параллельной файловой системы Lustre

Элементами архитектуры являются:

- управляющие узлы – серверы метаданных (MDT);
- узлы хранения и предоставления данных (OSS);
- элементы хранения данных (OST);
- элементы хранения метаданных (MST);
- высокоскоростная сеть обработки данных.

Как отмечено выше, архитектура параллельного файлового хранилища позволяет предоставлять вычислительным узлам доступ к различным узлам хранения, что позволяет избегать «узких мест» и предотвращать деградацию производительности.

Отметим, что различные прикладные задачи могут предъявлять разные требования к структуре данных, хранящейся в файловой системе.

Для задач материаловедения, где параллельные процессы одного вычислительного задания, выполняемые на разных вычислительных узлах, требуют доступа к независимым массивам данных, достаточно размещения одной копии прикладных данных на каждом узле хранения и обеспечение взаимодействия каждой пары «вычислительный узел – узел хранения» по высокоскоростной сети передачи данных. В случае необходимости возможна более сложная организация хранения данных, позволяющая различным вычислительным узлам получать доступ к одному и тому файлу со стороны несколь-

ких вычислительных узлов. Такая функция поддерживается параллельной файловой системой за счет фрагментации файлов на отдельные блоки (полосы).

Термин «количество полос» относится к количеству фрагментов, на которые разделен файл; другими словами, количество OST, которые используются для хранения файла. Таким образом, каждая полоса файла будет находиться в другом OST. «Размер полосы» относится к размеру полосы, записанной в виде единого блока в OST [5].

На рисунке 2 показан пример распределения файла по шести элементам хранения данных.

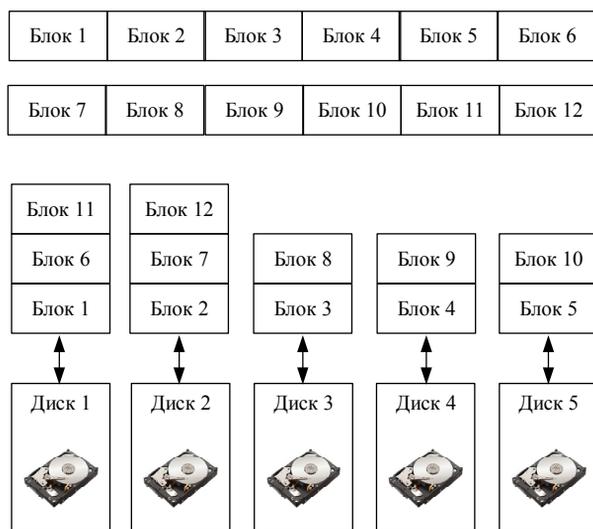


Рис. 2. Распределение файла по элементам хранения данных

Параллельная файловая системы является неотъемлемой частью высокопроизводительного вычислительного комплекса, предназначенного для решения широкого спектра научных и научно-практических задач. Параллельная файловая система эффективно предотвращает образования «узких мест», снижающих производительность вычислительного комплекса за счет задержек в дисковых операциях. Ее применение в центрах коллективного пользования, предоставляющего услуги высокопроизводительных вычислений, позволяет обеспечить достаточной пропускной способностью дисковой подсистемы все задачи материаловедения, выполняемые параллельно воспроизводительным вычислительным комплексом [7, 8].

В зависимости от типа задачи и характеристик файлового хранилища выбирается шаблон хранения данных. В общем случае, для максимизации производительности файловой системы требуется максимизация количества используемых объектов хранения.

Таким образом, при развертывании проектов, предназначенных для решения вычислительных задач, требующих высокую дисковую эффективность, следует выделять максимальное количество элементов хранения, преимущественно NVMe SSD.

Задачам со средней и низкой дисковой интенсивностью достаточно выделения небольшого количества элементов хранения типа SAS или SATA.

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. А. Карцев, 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». М.: МАКС Пресс (2019). С. 18–21.

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

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

5. 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.

6. Kokorev A.A., Belyakov D.V., Lyubimova M.A.. Data storage systems of «hybrilit» heterogeneous computing platform for scientific research carried out in JINR: filesystems and raids performance research CEUR Workshop Proceedings. Volume 3041 (2021). P. 296–303.

7. Зацаринный А.А., Волович К.И., Денисов С.А., Ионенков Ю.С., Кондрашев В.А. Методические подходы к оценке эффективности центра коллективного пользования «Информатика» // Системы высокой доступности. 2020. Т. 16. № 2. С. 60–66. DOI: 10.18127/j20729472-202002-04

8. Seiz, M., Offenhäuser, P., Andersson, S. et al. Lustre I/O performance investigations on Hazel Hen: experiments and heuristics. J Supercomput 77, 12508–12536 (2021). <https://doi.org/10.1007/s11227-021-03730-7>

DATA PROCESSING NETWORK ARCHITECTURE FOR PARALLEL COMPUTING IN A HIGH-PERFORMANCE COMPLEX FOR MATERIALS SCIENCE PROBLEMS

K. Volovich, S. Denisov, V. Kondrashev

Abstract. The paper considers the architecture of building parallel data storage systems in high-performance computing systems. The features of data representation in parallel file systems for applied problems of materials science are analyzed.

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

УДК 004.89

<https://doi.org/10.29003/m3062.MMMSEC-2022/36-39>

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ КОНСТРУИРОВАНИЯ НОВЫХ НЕОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ, ПЕРСПЕКТИВНЫХ ДЛЯ ЭЛЕКТРОНИКИ

Киселева Надежда Николаевна,

д.х.н., заведующая лабораторией¹, kis@imet.ac.ru

Дударев Виктор Анатольевич,

к.т.н., ведущий научный сотрудник¹, vic_dudarev@mail.ru

Сенько Олег Валентинович,

д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник², senkoov@mail.ru

Докукин Александр Александрович,

к.ф.-м.н., старший научный сотрудник², dalex@ccas.ru

Кузнецова Юлия Олеговна,

инженер-исследователь¹ jul1998@ya.ru

¹ИМЕТ РАН, г. Москва

²ФИЦ ИУ РАН, г. Москва

Аннотация. Рассмотрены возможности и результаты применения методов машинного обучения для прогнозирования свойств новых соединений для электроники.

Ключевые слова: machine learning, inorganic materials for electronics.

Согласно [1] к электронным материалам относятся полупроводниковые, магнитные, оптические, пьезоэлектрические, сегнетоэлектрические и другие материалы, применяемые в современной электронике. В настоящее время накоплена большая информация

о свойствах этих веществ и материалов, что позволило провести компьютерный анализ экспериментальных данных с целью поиска закономерностей, связывающих свойства веществ с параметрами химических элементов, входящих в их состав. Наиболее перспективными для решения этой задачи являются методы машинного обучения. Задача конструирования новых неорганических соединений может быть сведена к обнаружению зависимостей между свойствами неорганических систем, в том числе, свойствами соединений, и свойствами элементов, образующих эти системы. Первые успешные работы по использованию машинного обучения для конструирования еще не полученных неорганических соединений были проведены нами еще в семидесятые годы [2]. Со средней точностью более 80% удалось предсказать возможность образования и тип кристаллической структуры тысяч еще не полученных соединений: халькошпинелей, перспективных для поиска магнитных полупроводников, фаз Гейслера, среди которых проводился поиск новых магнитных материалов, соединений состава ABO_3 , у которых в дальнейшем были обнаружены акусто-, электро- и нелинейно-оптические свойства, и т.д. [3]. Сейчас нами разработаны методы и программы для прогнозирования не только возможности образования и типа кристаллической структуры, но и физических свойств новых соединений [4, 5]. Разработанный нами подход к конструированию новых соединений с использованием машинного обучения сейчас применяется во всем мире, в том числе и для поиска новых материалов для электроники, например, [6–8].

Основным ограничением при применении машинного обучения является репрезентативность анализируемой информации. Источником информации для проводимого нами компьютерного анализа средствами машинного обучения является разработанная нами интегрированная система баз данных [9], включающая и подсистему свойств материалов для электроники. В настоящее время эта система содержит информацию о десятках тысяч неорганических веществ, имеет единую точку входа <https://imet-db.ru/> и широко используется специалистами.

Система машинного обучения интегрирована с разработанными базами данных и состоит из двух подсистем: ИАС (информационно-аналитической системы) для прогноза категориальных свойств (возможности образования, типа кристаллической структуры, пространственной группы и т.д.) [4], объединяющей более 20 программ машинного обучения, и ParIS (Parameters of Inorganic Substances)

для прогноза свойств (параметров кристаллической решетки, температур фазовых переходов, ширины запрещенной зоны и т.д.) [5], в которую входят более 30 программ машинного обучения.

С помощью этих подсистем удалось предсказать не только новые соединения, представляющие интерес для применения в электронике, но и оценить их свойства (например, тип кристаллической структуры, пространственную группу, параметры кристаллической решетки, температуру плавления, ширину запрещенной зоны и т.д.) [10–12]. При этом точность оценки линейных параметров решетки (средние абсолютные ошибки (MAE), определенные методом скользящего контроля в режиме LOOCV), например, для соединений состава $A_2BV'B_6$ (A, B, B' – разные химические элементы), была в пределах $\pm 0.0120\text{--}0.8264 \text{ \AA}$ [11], а точность прогноза температуры плавления двойных галогенидов MAE = 29–52 К в зависимости от состава галогенидов и выбранного алгоритма. Разработанные системы также широко применяются не только для прогнозирования новых неорганических соединений и оценки их свойств на основе знания только параметров химических элементов, но и в промышленных разработках, например, для прогнозирования коррозии сталей, металлов и их сплавов в зависимости от условий внешней среды.

Список использованных источников

1. Encyclopedia of Materials Science and Engineering. V.2. Ed.by M.B.Bever. Oxford: Pergamon Press, 1986. – 1605 p.
2. Киселева Н.Н., Покровский Б.И., Комиссарова Л.Н., Ващенко Н.Д. Моделирование образования сложных окислов из исходных компонентов на основе кибернетического метода формирования понятий // Журнал неорганической химии, 1977, т. 22, №. 4, с. 883–886.
3. Киселева Н.Н. Компьютерное конструирование неорганических соединений. Использование баз данных и методов искусственного интеллекта. М.: Наука. 2005, 288 с.
4. Kiselyova N.N., Stolyarenko A.V., Ryazanov V.V., et al. A system for computer-assisted design of inorganic compounds based on computer training // Pattern Recognition and Image Analysis, 2011, v. 21, no. 1, pp. 88–94.
5. Dudarev V.A., Kiselyova N.N., Stolyarenko A.V., et al. An Information System for Inorganic Substances Physical Properties Prediction Based on Machine Learning Methods. CEUR Workshop Proceedings (CEUR-WS.org), v. 2790. Supplementary Proceedings of the XXII International Conference on Data Analytics and Management in Data Intensive Domains (DAMDID/RCDL 2020), pp. 89–102.
6. Huang Y., Yu C., Chen W., et al. Band gap and band alignment prediction of nitride-based semiconductors using machine learning // J. Mater. Chem., 2019, v. C7, N. 11, pp. 3238–3245.
7. Plata J.J., Posligua V., Marquez A.M., et al. Charting the Lattice Thermal Conductivities of I–III–VI₂ Chalcopyrite Semiconductors // Chem. Mater., 2022, v. 34, N. 6, pp. 2833–2841.

8. Furmanchuk A., Saal J.E., Doak J.W., et al. Prediction of Seebeck coefficient for compounds without restriction to fixed stoichiometry: A machine learning approach // J. Comput. Chem., 2018, v. 39, N. 4, pp. 191–202.

9. Киселева Н.Н., Дударев В.А., Столяренко А.В. Интегрированная система баз данных по свойствам неорганических веществ и материалов // Теплофизика высоких температур. 2016. Т.54. № 2. С. 228–236.

10. Киселева Н.Н., Дударев В.А., Рязанов В.В. и др. Компьютерное конструирование соединений с кристаллической структурой мелилита // Материаловедение, 2019, N. 9, с. 41–48.

11. Kiselyova N.N., Dudarev V.A., Stolyarenko A.V., et al. Prediction of Space Groups for Perovskite-Like $A^{II}_2B^{III}B^{IV}O_6$ Compounds // Inorganic Materials: Applied Research, 2022, v.13, N.2, pp. 277–293.

12. Kiselyova N.N., Dudarev V.A., Korzhuev M.A. Database on bandgaps of inorganic substances and materials // Inorganic Materials: Applied Research, 2016, v. 7, № 1, pp. 34–39.

APPLICATION OF MACHINE LEARNING METHODS FOR THE DESIGN OF NEW INORGANIC COMPOUNDS PROMISING FOR ELECTRONICS

*N.N. Kiselyova, V.A. Dudarev, O.V. Senko,
A.A. Dokukin, Yu.O. Kuznetsova*

Abstract. The possibilities and results of using machine learning methods for predicting the properties of new compounds for electronics are considered.

Key words: machine learning, inorganic materials for electronics.

УДК 004.3:004.9

<https://doi.org/10.29003/m3063.MMMSEC-2022/39-43>

ПРОЕКТИРОВАНИЕ СЛУЖБЫ МОНИТОРИНГА ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНОГО ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО КОМПЛЕКСА ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ

*Маминов Артем Дмитриевич,
аспирант, математик¹,
artem_taminov@mail.ru*

¹ФИЦ ИУ РАН, г.Москва

Аннотация. В работе рассматриваются методы мониторинга загрузки ресурсов высокопроизводительного комплекса при постановке вычислительных задач материаловедения в общую очередь выполнения. В связи с тем, что алгоритмы материаловедения могут быть эффективно запущены параллельно и требовательны к вычислительным ресурсам, воз-

никает необходимость в использование суперкомпьютерных систем. Однако неэффективное использование ресурсов значительно увеличивает расчётное время задач. Предлагается реализация системы мониторинга для последующего анализа выделяемых вычислительных ресурсов.

Ключевые слова: высокопроизводительные вычисление, система мониторинга, материаловедение.

В последнее время увеличивается потребность в вычислительных ресурсах со стороны научных коллективов в задачах материаловедения [1, 2]. Для выделения и распределения необходимых вычислительных мощностей активно используются Гибридные Высокопроизводительные Центры Коллективного Пользования (ЦКП) [3]. Организация выполнения расчётных задач в таких центрах состоит из следующих шагов:

- запрос ресурсов, необходимых для выполнения задачи;
- постановка задачи в общую очередь выполнения;
- выполнение задачи при освобождении необходимых ресурсов и нахождение задачи в начале очереди.

ЦКП имеют в своей структуре современные вычислительные узлы, которые могут быть эффективно использованы для запуска различных вычислительных задач. Одной из важных составляющих современных высокопроизводительных комплексов является система мониторинга загрузки ресурсов системы. В связи с тем, что многие современные инструменты [4] и алгоритмы [5] материаловедения могут быть запущены параллельно, важной задачей является адекватное распределение имеющихся в системе вычислительных ресурсов. Однако, в процессе постановки задачи в очередь на выполнение, пользователи могут допускать ошибки, связанные с:

- выделением недостаточного или избыточного количества ядер для задачи;
- запуск задачи на нескольких ядрах без использования технологии параллельного программирования;
- выделение GPU-ускорителей для задач без фактического использования GPU;
- выделение вычислительных ресурсов узла без их использования для расчётных задач;

Такие ошибки могут занимать значительное количество ресурсов ЦКП, необходимых для выполнения другими пользователями. Наиболее распространённая службой организации очереди задачи в ЦКП является *SLURM* [6]. Однако, большинство таких ошибок не

могут быть распознаны **SLURM** при запуске вычислительных задач на выполнение. Поэтому необходимо использовать службу мониторинга для анализа выделяемых ресурсов. В данной работе предлагается подход для создания такой службы для Центра Коллективного Пользования «Высокопроизводительные Вычисления и Большие Данные» (ЦКП «Информатика») ФИЦ ИУ РАН. В дальнейшем, полученные и проанализированные данные можно использовать для распознавания неэффективных задач и регламентации выделяемых ресурсов пользователям.

Известными службами мониторинга являются программы **JobDigest** [7] и **Savio** [8]. В основе таких систем используются различные утилиты для считывания характеристик (загрузка CPU, GPU; использование оперативной памяти; сетевая нагрузка и т.д.) и база данных для хранения информации. Однако, в этих работах подразумевает выделение целого узла для задач пользователей. Такая стратегия может быть применима при небольшом количестве пользователей и задач. В ЦКП «Информатика» предполагается выделение некоторого количества ядер для задачи пользователя, поэтому требуется анализировать нагрузку отдельных ядер, выделенных службой **SLURM** для задачи.

Предлагается использование службы **Telegraf** [9] для мониторинга активности ядер. **Telegraf** представляет собой серверный агент, основанный на плагинах. Под плагинами подразумевается ряд входных (input) и выходных (output) плагинов, регулирующих то, как собираются метрики системы (в случае входных плагинов) и куда отправляются собранные данные (в случае выходных плагинов). В данной работе мы собираем информацию об использовании CPU в виде 10 метрик (*usage_guest*, *usage_guest_nice*, *usage_idle*, *usage_iowait*, *usage_irq*, *usage_nice*, *usage_softirq*, *usage_steal*, *usage_system*, *usage_user*). Обычно, для расчёта CPU утилизации используется следующая формула:

$$cpu_util = \sum_{i \in N} \left(\frac{\sum_{k=1}^{10} cpu_i^k - cpuidle_i - cpuIowait_i}{\sum_{k=1}^{10} cpu_i^k} \right) \cdot 100\%,$$

где cpu_i^k это k -ая метрика i -го ядра, $cpu = \{cpuUser, cpuNice, cpuSystem, cpuIRQ, cpuSoftIRQ, cpuSteal, cpuGuest, cpuGuestNice, cpuidle, cpuIowait\}$ и N – множество выделенных ядер. Также мы собираем информацию о запущенных задачах с использованием службы **SLURM**. Мы получаем информацию о `user_id` и множестве выделенных ядер на задачу.

Последним компонентом данной системы мониторинга является считывание данных об использовании GPU-ускорителей вычислительного узла. В связи с тем, что многие алгоритмы материаловедения используют вычислительные сетки [10], они могут быть эффективно распараллелены на GPU. Таким образом, считывание информации об использовании видеокарты является важным компонентом системы мониторинга. Сбор данных об использовании GPU-ускорителей осуществляется при помощи команды *nvidia-smi*. Данная команда возвращает информацию о названии, энергопотребление, утилизации памяти и вычислительных ядер видеокарты.

Итоговые данные представляют собой временные ряды, где каждому моменту времени соответствуют метрики. Для хранения таких временных рядов была использована база данных *InfluxDB* [11].

В результате данной работы был разработан прототип системы мониторинга вычислительных ресурсов ЦКП «Информатика» при постановке задач материаловедения на выполнение. С использованием различных программных средств осуществляется сбор данных о запущенных вычислительных задачах. Такая система позволяет проводить анализ полученных временных рядов и выявлять как различные ошибки при запуске задач, так и неэффективное использование выделяемых ресурсов. В дальнейшем планируется увеличить количество собираемых метрик и разработать программный комплекс по анализу ресурсов суперкомпьютера: выявление неэффективных задач, выявление ошибочно запущенных задач, регулирование выделяемых ресурсов.

Исследование выполнено с использованием инфраструктуры Центра коллективного пользования «Высокопроизводительные вычисления и большие данные» (ЦКП «Информатика») ФИЦ ИУ РАН (г. Москва).

Список использованных источников

1. Абгарян К.К., Зацаринный А.А. Актуальные проблемы создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках цифровой трансформации общества // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. – 2021. – Т. 23. – № 4. – С. 270–276.
2. Волович К.И., Денисов С.А. Подходы к организации вычислительного процесса гибридного высокопроизводительного вычислительного комплекса для решения задач материаловедения // Информатика: проблемы, методы, технологии. – 2020. – С. 368–377.
3. Волович К.И., Денисов С.А. Основные научно-технические проблемы применения гибридных высокопроизводительных вычислительных комплексов в ма-

териаловедении // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. – 2020. – Т. 22. – № 4 – С. 262–267.

4. Gordeeva L. G. et al. Metal-organic frameworks for energy conversion and water harvesting: A bridge between thermal engineering and material science // Nano Energy. – 2021. – Т. 84. – С. 105946.

5. Dardzinska A., Zdrodowska M. Classification algorithms in the material science and engineering data mining techniques // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – IOP Publishing, 2020. – Т. 770. – № 1. – С. 012096.

6. Yoo A. B., Jette M. A., Grondona M. Slurm: Simple linux utility for resource management // Workshop on job scheduling strategies for parallel processing. – Springer, Berlin, Heidelberg, 2003. – С. 44–60.

7. Nikitenko D. et al. JobDigest—detailed system monitoring-based supercomputer application behavior analysis // Russian Supercomputing Days. – Springer, Cham, 2017. – С. 516–529.

8. Chan N. A resource utilization analytics platform using grafana and telegraf for the savio supercluster // Proceedings of the Practice and Experience in Advanced Research Computing on Rise of the Machines (learning). – 2019. – С. 1–6.

9. Telegraf: <https://docs.influxdata.com/telegraf/v1.24/>

10. Korpała G., Kawalla R. Optimization and application of GPU calculations in material science // Computer Methods in Materials Science. – 2015. – Т. 15. – № 1. – С. 185–191.

11. InfluxDB: <https://www.influxdata.com/>

MONITORING SYSTEM DESIGN IN HIGH PERFORMANCE COMPUTING CENTER FOR SOLVING MATERIAL SCIENCE PROBLEMS

A.D. Maminov

Abstract. The paper considers methods for monitoring the workload of resources of a high-performance complex when setting computational problems of materials science in a common execution queue. Since materials science algorithms can be effectively run in parallel and are demanding on computing resources, there is a need to use supercomputer systems. However, inefficient use of resources significantly increases the estimated time of tasks. We propose to implement a monitoring system for subsequent analysis of allocated computing resources.

Key words: high-performance computing, monitoring system, material science.

О РАЗРАБОТКЕ ТЕХНОЛОГИИ ПРОИЗВОДСТВА КОМПОНЕНТОВ ЭЛЕКТРОННЫХ ПРИБОРОВ

*Молотков Андрей Андреевич^{1,2},
аспирант, инженер-программист.
karacerr@gmail.com.*

*Третьякова Ольга Николаевна^{1,2},
к.ф.-м.н, доцент в.н.с.
treti yakova_olga@mail.ru,*

*Тужилин Дмитрий Николаевич²,
заместитель генерального директора
tuzhilin@laserapr.ru*

¹МАИ, Москва,

²ООО «Лаборатория промышленных исследований» НПЦ
«Лазеры и аппаратура ТМ». Москва

Аннотация. Работа посвящена разработке современных промышленных технологий производства компонентов электронных приборов. Создан программный комплекс для моделирования процесса селективного лазерного сплавления и визуализации процессов обработки, применимый к другим технологиям, таким как прямое лазерное плавления, лазерная резка, лазерная сварка, прецизионная микрообработка различных материалов. Разработанный программный комплекс позволяет решать задачи организации эффективного и автоматизированного производственного цикла исследования и изготовления компонентов электронных приборов и деталей сложной геометрии.

Ключевые слова: технология, лазер, программное обеспечение ПО, моделирование, автоматизация.

Введение

Применение современных лазерных технологий производства компонентов электронных приборов и изделий сложной геометрии необходимо там, где существует необходимость в минимизации сборочных операций и уменьшение числа сборочных единиц, уменьшении массогабаритных характеристик изделия, изготовлении высокоточных изделий и их прототипов в кратчайшие сроки. Для реализации технологии селективного лазерного сплавления (SLM – selective laser melting) осуществлено проектирование и производство лазерного технологического оборудования.

Неотъемлемой частью каждой технологической установки является программное обеспечение для её автоматической работы. Создан программный комплекс для моделирования процесса селективного лазерного сплавления и визуализации процессов обработки, применимый и к другим технологиям, таким как прямое лазерное плавление, лазерная резка, лазерная сварка, прецизионная микрообработка различных материалов.

Особенности программного комплекса для лазерного технологического оборудования

Программный комплекс обеспечивает весь технологический процесс производства электронных приборов от 3D моделирования прототипа изделия до подбора технологических параметров производства, включая программные блоки для математического моделирования тепловых процессов и термоупругости [1–8]. Его составной частью является разработанная платформа машинного зрения, позволяющая применять методы машинного зрения к современным лазерным технологиям обработки и изготовления деталей сложной формы. Нами были решены некоторые задачи распознавания объектов, возникающие в процессе разработки лазерных технологий. Решена одна из задач распознавания объектов в промышленности – задача нахождения плоской заготовки свободной формы в рабочем поле станка. Разработан и реализован алгоритм определения контуров объекта по ранее найденным углам. Он был применен для решения задачи нахождения и анализа качества отверстий при перфорации и для нахождения геометрии сплавливаемого слоя в процессе селективного лазерного сплавления.

Разработанная программная платформа машинного зрения дает возможность видеофиксации процессов в изолированных средах, определения границ объектов на изображении, анализа и обработки визуальных данных, формирования и представления картины распределения тепла в трехмерном объекте. Она позволила реализовать совмещение расчетных данных о геометрии изделия, данных, полученных при помощи анализа видеоданных от средств визуального наблюдения, с данными о распределении тепла, которые были получены в результате проведения численного эксперимента в соответствии с реализованной нами математической моделью исследуемого процесса селективного лазерного сплавления.

Выводы

Применение разработанного программного обеспечения позволяет упростить технологам анализ процесса производства. Созданная программная платформа машинного зрения позволяет упростить выявление критических областей, а также подбор технологических параметров процесса селективного лазерного сплавления. А решение задач распознавания объектов в рабочем поле станка может использоваться для широкого круга технологических процессов.

Разработанное программное обеспечение внедрено в ряде высокотехнологичных промышленных производств. Оно позволяет решать задачи организации эффективного производственного цикла подготовки, исследования и изготовления компонентов электронных приборов и иных деталей сложной геометрии.

Список использованных источников

1. Лебёдкин И.Ф., Молотков А.А., Третьякова О.Н. Математическое моделирование сложного теплообмена при разработке лазерных SLM технологий / Труды МАИ. Электронный журнал. ISSN: 1727-6924, № 101, 2018.
2. Molotkov A.A., Tretiayakova O.N. On possible approaches to visualizing the process of selective laser melting / Scientific Visualization, 2019. Vol. 11. № 4. P. 1–12.
3. Лебёдкин И.Ф., Молотков А.А., Третьякова О.Н. Разработка промышленной технологии селективного лазерного сплавления / Прикладная физика. 2020. № 3. С. 83–89.
4. Кондратенко В.С., Молотков А.А., Сапрыкин Д.Л., Третьякова О.Н., Тужилин Д.Н. Разработка промышленной технологии и специализированного оборудования для послойного лазерного сплавления / Приборы. 2022. № 2. С. 1–6.
5. Кондратенко В.С., Сапрыкин Д.Л., Третьякова О. Н., Тужилин Д. Н. Разработка системы автоматического управления подстройкой фокуса для технологии лазерной микрообработки материалов. / Приборы. 2022. № 4. С. 26–31.
6. Молотков А. А., Третьякова О. Н. Применение методов машинного зрения и математического моделирования для разработки технологий создания электронных приборов. / Приборы. 2022. № 4. С. 55–58.
7. Молотков А.А., Сапрыкин Д.Л., Третьякова О.Н., Тужилин Д.Н. Разработка комплекса программ для создания промышленного лазерного технологического оборудования / Приборы 2022. № 5. С. 15–22.
8. Tretiayakova O.N., Molotkov A.A. About the development of applied software for mechatronic systems of SLM technology / MATEC Web of Conferences. Volume 362, 2022. XXII International Conference on Computational Mechanics and Modern Applied Software Systems (CMMASS 2021). Article Number 01031. Number of page(s) 8. DOI <https://doi.org/10.1051/mateconf/202236201031>. Published online 14 September 2022.

ABOUT THE DEVELOPMENT OF PRODUCTION TECHNOLOGY FOR ELECTRONIC DEVICE COMPONENTS

A.A. Molotkov, O.N. Tretyakova, D.N. Tuzhilin

Abstract. The paper presents a development of the modern industrial technologies for the production of components of electronic devices. A software package has been created for modeling the process of selective laser melting and visualization of processing processes, applicable to other technologies, such as direct laser melting, laser cutting, laser welding, laser micro-micromachining of various materials. The developed software package allows solving the problems of arranging of effective and automated production cycle for researching and manufacturing of components of electronic devices and parts of complex geometry.

Key words: technology, laser, software, modeling, automation.

<https://doi.org/10.29003/m3065.MMMSEC-2022/47-51>

НАЦИОНАЛЬНЫЕ ВЫЗОВЫ В ЦИФРОВОМ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

Полковникова Наталья Александровна,

руководитель проекта «Цифровое моделирование материалов»¹,

Natalia.Polkovnikova@rusnano.com

Кочетов Иван Иванович,

руководитель проекта по разработке онлайн-платформы

«Цифровое моделирование материалов»¹,

Ivan.Kochetov@rusnano.com

¹*Фонд инфраструктурных и образовательных программ
(Группа РОСНАНО), г. Москва*

Аннотация. В работе исследованы ключевые сферы научных исследований в России и мире, а также представлена платформа для взаимодействия науки и бизнеса material.business.

Ключевые слова: цифровое материаловедение, наука, бизнес.

Введение

Цифровое материаловедение является общепризнанным направлением в современном материаловедении. Базы данных и машинное обучение стали общепризнанным инструментом в создании и исследовании новых материалов и конструировании различных товаров. В этой статье исследуются ключевые сферы интересов материаловедов в России и мире. Мы признаем растущую потребность

щей всей этой цепочки является тема «Компьютерные симуляции». Все это говорит о том, что зарубежные исследования как правило направлены на решение каких-либо технологических проблем промышленных (и не только) компаний, что говорит о высокой эффективности коммуникации между наукой и бизнесом.

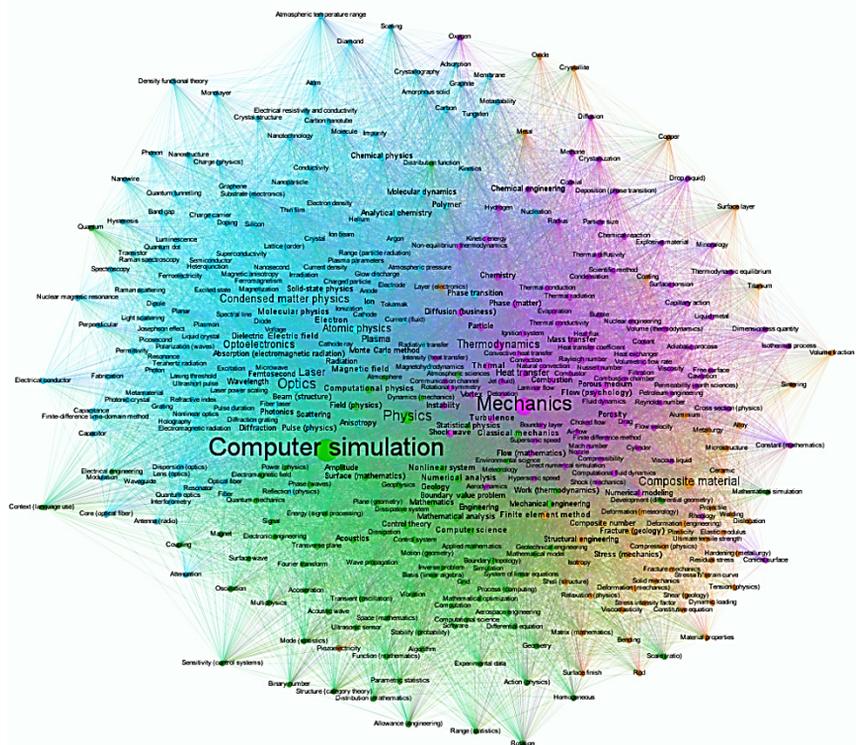


Рис. 2. Актуальные российские научные исследования

Данные, представленные на рисунке 2, показывают, что в российских исследованиях преобладают фундаментальные темы в области физики, механики и оптики, имеющие весьма отдаленные перспективы реального применения в промышленности, что говорит о существующих проблемах во взаимодействии между научными группами и промышленными компаниями (бизнесом), ввиду чего многие научные исследования российских ученых остаются невостребованными и не находят практического применения в реальной жизни.

Для решения данной проблемы мы предлагаем создать онлайн-портал material.business.ru, который позволит наладить коммуника-

цию между наукой и бизнесом, тем самым повышая востребованность российских научных исследований с одной стороны и решая актуальные проблемы индустриальных и промышленных компаний с другой.



MATERIAL.BIZNES – это

-  Запросы предприятий на подбор или разработку новых материалов
-  Сообщество единомышленников, которые понимают, что технологический прорыв невозможен без новых материалов
-  Последние новости из мира передовых технологий в материаловедении
-  Кейсы ведущих российских и зарубежных компаний и анонсы ключевых отраслевых мероприятий
-  Информация о лучших мировых инструментах для математического моделирования материалов, в том числе open-source ПО и приложения на базе AI и ML

РЕГИСТРИРУЙТЕСЬ НА ПОРТАЛЕ MATERIAL.BIZNES

Подписывайтесь на наш ТГ-канал

 t.me/MathModMat

Будьте в курсе самого актуального!

Рис. 3. Онлайн-платформа для взаимодействия науки и бизнеса material.biznes

Выводы

В работе исследованы ключевые научные направления исследований российских и зарубежных ученых, определена существующая проблема в коммуникации науки и бизнеса в России, и представлена онлайн-платформа material.biznes в качестве решения этой проблемы.

NATIONAL CHALLENGES IN MATERIAL INFORMATICS

N.A. Polkovnikova, I.I. Kochetov

Abstract. The paper explores the key areas of interest of scientists in Russia and the world, and also presents a platform for the interaction of science and business material.business.

Key words: material informatics, business, science.

<https://doi.org/10.29003/m3066.MMMSEC-2022/51-55>

АРХИТЕКТУРА ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА ДЛЯ МНОГОМАСШТАБНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУР С МАГНИТОРЕЗИСТИВНЫМИ СВОЙСТВАМИ

Щербаков Василий Сергеевич,

аспирант¹,

basil-scherbakov@ya.ru, +7 (930) 893-88-10

¹*МАИ, г. Москва*

Аннотация. Работа посвящена вопросам проектирования программного комплекса, предназначенного для многомасштабного моделирования многослойных структур с магниторезистивными свойствами. Рассматриваются сценарии использования данного программного обеспечения, функциональные и нефункциональные требования, предъявляемые к нему, а также детали технического решения и архитектуры.

Ключевые слова: программный комплекс, многомасштабное моделирование, архитектура программного комплекса, сценарий использования, функциональные требования, техническое решение.

Введение

В рамках работы над программным комплексом для многомасштабного моделирования [3] требовалось спроектировать техническое решение, предусматривающее взаимодействие с существующей платформой проведения расчетов [1], использование средств интеллектуального анализа данных, автоматический запуск расчетов, а также пользовательский интерфейс для управления. Также при проектировании учитывались информационные технологии построения многомасштабных моделей [2].

Сценарии использования и требования

Перед проектированием архитектуры и выбором технических средств реализации (языка программирования, библиотек, плат-

форм и т.д.) были проанализированы возможные сценарии использования программного комплекса, а также требования, предъявляемые к нему.

Были выделены следующие сценарии использования:

- Запуск сценария расчета с использованием пакета моделирования магнитных структур.
- Запуск автоматического проведения расчетов с варьированием параметров.
- Исследование данных и обучение модели на основе данных расчетов.
- Получение материала по заданным свойствам.
- Запуска сценариев многомасштабных расчетов [1].

Для обеспечения выполнения данных сценариев, необходимо, чтобы система удовлетворяла требованиям, перечисленным ниже.

Функциональные требования:

- Возможность надежно накапливать результаты расчетов.
- Наличие средств интеллектуального анализа данных для работы с результатами расчетов свойств материалов многослойных структур.
- Автоматический повторный запусков расчетов с варьированием параметров.

Нефункциональные требования:

- Наличие интуитивно понятного графического пользовательского интерфейса.
- Асинхронный процесс записи результатов экспериментов.

Техническое решение

С учетом перечисленных требований и сценариев использования получилось следующее техническое решение. Программный комплекс для многомасштабного моделирования разделяется на следующие части.

1. Оболочка над одним или несколькими программными пакетами для моделирования структур с магнитными свойствами. Для ее взаимодействия с моделью, предсказывающей структуру на основе параметров, необходим надежный механизм передачи информации. Этот механизм должен позволять асинхронно (то есть без ожидания ответа получателя) передавать данные для того, чтобы была возможность развернуть хранилище экспериментальных данных вне основного кластера, на котором разворачивается сервис

управления сценариями расчетов. Это может быть полезно, чтобы, к примеру, хранилище было доступно извне (если сервис сценариев развернут внутри закрытой сети). Требование к асинхронности обуславливается необходимостью продолжать работу сервиса, не дожидаясь записи результатов выполнения расчета. Для данной задачи подходят так называемые брокеры сообщений, которые позволяют приложениям асинхронно обмениваться сообщениями в заданном формате с гарантированной доставкой. Среди наиболее продвинутых систем этого типа можно выделить следующие: Apache Kafka и RabbitMQ. Каждая из этих систем имеет свои достоинства и недостатки. Принципиальным различием является способ передачи сообщения клиенту: в то время как RabbitMQ отправляет данные непосредственно приложению, а затем удаляет его из своего внутреннего хранилища, Apache Kafka записывает его в так называемый журнал, из которого клиент впоследствии считывает результаты расчетов. При таком подходе в случае прекращения работы приложения по той или иной причине, после его перезапуска сообщение не пропадет, что и делает этот подход более желательным. Также среди достоинств этого решения можно выделить возможность интеграции с хранилищем данных, разработанным компанией Яндекс – Clickhouse [4]. Данное хранилище позволяет настроить конфигурацию таким образом, чтобы получать данные из брокера сообщений Apache Kafka и сохранять их в необходимом формате, что является удовлетворением еще одного функционального требования – хранения данных в подходящем для обучения предсказывающей модели виде. Также при данном подходе сходит на нет зависимость от базы данных сервиса управления сценариями и ее формата – используя отдельную базу данных, всегда можно переконфигурировать структуру ее таблиц, а также мигрировать данные (по необходимости).

2. Средства интеллектуального анализа данных для предсказания структуры по параметрам. Для этой цели предполагается использовать язык программирования python и библиотеку tensorflow [5].

3. Пользовательский интерфейс и сервис для работы моделью. Для реализации пользовательского интерфейса был выбран фреймворк Angular, который позволяет строить надежные в работе веб приложения, при этом обеспечивая необходимую для веб приложения функциональность (взаимодействие с сервером, управление состоянием и т.д.). Для сервиса был выбран стандартный подход с использованием языка программирования kotlin и библиотеки ktor [6].

4. Сервис для автоматизации запуска сценариев с варьированием параметров. Этот сервис необходим для автоматизации процесса запусков расчета в системе сценариев. Он должен иметь возможность хранить в виде конфигурации формат входных данных сценария, а также перечень или диапазон возможных значений каждого из параметров для автоматического варьирования при запуске. Таким образом для накопления данных для обучения модели не будет необходимости каждый раз вручную запускать сценарий расчета с различными параметрами, это будет происходить автоматически, при этом широкий (по возможности) спектр значений и результатов, полученных на их основе позволит повысить точность модели.

Результаты

С учетом предъявляемых функциональных и нефункциональных требований, а также согласно техническому решению, описанному выше, архитектура программного комплекса принимает следующий вид:

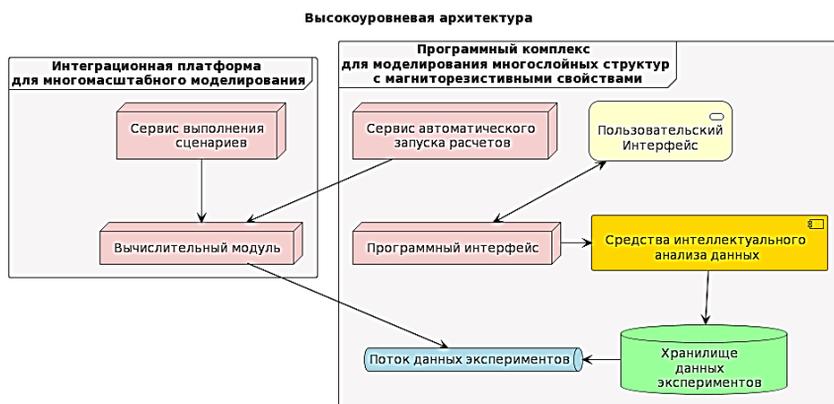


Рис. 1. Архитектура программного комплекса

Выводы

В итоге, была спроектирована начальная версия архитектуры программного комплекса, по ней разработан прототип, который был развернут на сервере. Прототип позволяет убедиться в пригодности использования такой архитектуры для проведения необходимых расчетов [7]. В данный момент ведется дальнейшая разработка, интеграция программных средств в комплекс, а также его тестирование.

Список использованных источников

1. Абгарян К.К, Гаврилов Е.С. Программный комплекс для проведения мультифизических и многоуровневых расчетов // Материалы III Международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» МММЭК-2021. 25–26 октября. 2021 г., Москва, с. 38–42.
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. Щербаков В.С. Программные средства для моделирования многослойных структур с магниторезистивными свойствами // Гагаринские чтения – 2022: XLVIII Международная молодёжная научная конференция: Сборник тезисов докладов: М.; Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), 2022. – С. 453–454.
4. <https://clickhouse.com/>
5. <https://www.tensorflow.org/>
6. <https://ktor.io/>
7. Абгарян К.К., Бажанов Д.И., Соболев Н.А. Многомасштабное моделирование многослойных наногетероструктур на основе ферромолибдата стронция // Материалы III международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» МММЭК–2021. 25–26 октября 2021 г., Москва, с. 53–57 <https://doi.org/10.29003/m2455.MMMSEC-2021>.

ARCHITECTURE OF A SOFTWARE PACKAGE FOR MULTISCALE MODELING OF MULTILAYER STRUCTURES WITH MAGNETORESISTIVE PROPERTIES

V.S. Scherbakov

Abstract. The work is devoted to demonstrating the details of designing a software package designed for multiscale modeling of multilayer structures with magnetoresistive properties. The user scenarios that the complex should allow to perform, functional and non-functional requirements imposed on it, as well as details of the technical solution and architecture are considered.

Key words: software, multiscale modeling, software architecture, user scenario, functional requirements.

2. В

**ПРОБЛЕМЫ РАЗВИТИЯ
МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ
КВАНТОВОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ
ГЕТЕРОСТРУКТУР**

MAGNETIZATION OF MAGNETICALLY INHOMOGENEOUS Sr₂FeMoO₆-D NANOPARTICLES

**Gunnar Suchaneck¹, Nikolai Kalanda², Marta Yarmolich²,
Evgenii Artiukh^{1,2}, Gerald Gerlach¹, Nikolai A. Sobolev³**

¹ *Solid-State Electronics Laboratory, TU Dresden, 01062 Dresden, Germany;*

² *Cryogenic Research Division, Scientific-Practical Materials Research
Centre of NAS of Belarus (SSPA), 220072 Minsk, Belarus;*

³ *i3N and Departamento de Física, Universidade de Aveiro,
3810-193 Aveiro, Portugal*

Strontium ferromolybdate (Sr₂FeMoO₆-d, SFMO) is a widely studied ferrimagnetic double perovskite. SFMO is a promising candidate for magnetic electrode materials for room-temperature spintronic applications because they present a half-metallic character (with theoretically 100% polarization), a high Curie temperature (T_C) of about 415 K, and a low-field magnetoresistance [1].

Recently, an inhomogeneous magnetic state was obtained in SFMO nanoparticles fabricated by solid-state reactions from partially reduced SrFeO_{3-x} and SrMoO₄ precursors by studying the temperature dependences of the magnetization measured in the field-cooling (FC) and zero-field-cooling (ZFC) modes and small-angle neutron scattering [2]. This state was attributed to the frustration of the exchange bonds and the simultaneous occurrence of various magnetic states: antiferromagnetic, ferrimagnetic, and superparamagnetic when the spin inversion does not change the energy of the system in a wide range of temperatures.

We fabricated nanosized SFMO particles with a narrow size distribution around ca. 70 nm by the citrate-gel technique. Single-phase composition and superstructure ordering degree were proved by X-ray diffraction. Superparamagnetic behaviour was demonstrated by magnetization measurements using ZFC and FC protocols as well as by electron magnetic resonance. The linear slope of the shift of the resonance field B_r versus reduced temperature served as the basis for the derivation of an approximate $4/3$ power dependency of the magnetocrystalline anisotropy constant on the reduced temperature $J = (1 - T/T_C)$. The origin of the simultaneous superparamagnetic and blocked behaviour was attributed to a nanoparticle size distribution around a value on the order of the critical diameter of single-domain particles.

[1] K.I. Kobayashi et al., *Nature* **395**, 677 (1998).

[2] N. Kalanda et al., *J. Mater. Sci.* **56**, 11698 (2021).

ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЁТ ТРАНСПОРТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ДВУСЛОЙНОГО ГРАФЕНА С РАЗОРИЕНТИРОВАННЫМИ СЛОЯМИ

Савельев Владислав Владимирович,

аспирант, 1 год¹,

savelevladv@mail.ru, +7 (962)513-90-39

Хазанова Софья Владиславовна,

к.ф.-м.н., доцент¹, 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 свех периодом.

Ключевые слова: графен, двумерные материалы, твистроника, 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 двумерных 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 требуемых энергетических свойств для однослойного графена возможно с помощью легирования или воздействия подложки. Кроме того, в последнее время большой интерес вызывают гетероструктуры из двух или нескольких слоёв двумерных материалов с различными параметрами. Также управление характери-

ками структур может осуществляться путем поворота слоёв относительно друг друга. Приборы, созданные на основе графена из нескольких слоёв, развёрнутых относительно друг друга, открывают новый раздел электроники – твистронику [2]. В двуслойном графене с различным углом разориентации появляются периодически расположенные области (т.н. АА- и АВ-упаковки или), при этом свойства графена периодически меняются и возникает узор, напоминающий муаровый. Таким образом, появляется сверхпериод в геометрии данных слоев, а вследствие этого и в энергетической структуре. Размеры областей и, соответственно, параметр сверхпериода зависят от угла разориентации. Учитывая, что фаза графена с АА-упаковкой метастабильна, чередование различных упаковок делает структуру более стабильной и дает более широкие возможности для создания устройств на их основе.

В качестве исследуемых структур рассматриваются слои графена со слоями, повернутыми друг относительно друга с различным сверхпериодом в зависимости от угла поворота. В данной работе численным методом матрицы переноса рассчитываются коэффициенты прохождения структуры и вольт-амперные характеристики на их основе. Исследуется влияние угла поворота слоёв и силы межслойного взаимодействия в двуслойном графене на транспортные характеристики структуры.

Выводы

Результаты расчетов показывают, что особенности вольт-амперных характеристик двуслойного муарового графена с зависят от угла разориентации слоев.

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. Rozhkov A.V. et al, Electronic properties of graphene-based bilayer systems, *Physics Reports*, 648, 1–104, 2016.

TRANSPORT CHARACTERISTICS NUMERICAL CALCULATIONS OF TWISTED BILAYER GRAPHENE

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.

Key words: graphene, two-dimensional materials, twistrionics, transfer matrix.

3. С

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

ПРОЕКТИРОВАНИЕ ПРОГРАММНЫХ СИСТЕМ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ ЭЛЕКТРОННЫХ КОМПОНЕНТОВ

*Абгарян Каринэ Карленовна¹,
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.*

Аннотация. В докладе рассматриваются современные проблемы, связанные с созданием новых программных систем в области материаловедения электронных компонентов. Рассмотрены перспективные подходы к построению программных систем в данной области. Отмечена актуальность применения методов многомасштабного компьютерного моделирования для изучения свойств материалов и построения взаимозависимостей структура – свойства. Перечислены основные тенденции, связанные с развитием цифрового моделирования в материаловедении. Показано, что разработка интеллектуальных систем в области материаловедения электронных компонентов на сегодня является одним из важнейших направлений. При их создании могут быть использованы программные решения под управлением онтологий. Отмечено, что успехи в данной области позволят достигнуть опережающего развития не только в создании новых материалов с требуемыми свойствами, но и в промышленном производстве в целом.

Ключевые слова: многомасштабное моделирование, цифровое материаловедение, интеллектуальные системы, программные решения под управлением онтологий.

Введение

На сегодня, приборное моделирование в микро- и наноэлектронике позволяет предсказывать электрические, тепловые и оптические свойства полупроводниковых приборов без проведения натуральных экспериментов. Современные программы приборного моделирования позволяют:

- сконструировать и оптимизировать любые приборы и устройства, включая приборы, работа которых основана на новых физических принципах или материалах;

- объяснить принципы работы приборов посредством изучения отдельных этапов и факторов влияния: распределения потенциала, электрического поля, тока, плотности тока, температуры, скорости генерации и рекомбинации носителей заряда и т.д.;
- изучить стационарные и переходные процессы при разных условиях эксплуатации приборов;
- сформировать данные для компактных моделей приборов, которые могут быть использованы при схемотехническом анализе и моделировании;
- объединить в общую электрическую цепь один или несколько физически смоделированных приборов с пассивными и активными элементами и компактными моделями.

Одним из основных этапов при изучении принципов работы микроэлектронных приборов и устройств с целью оптимизации их функционирования или улучшения основных характеристик является этап моделирования структуры и свойств материалов, лежащих в их основе.

Перспективные подходы к построению программных систем в области материаловедения электронных компонентов

Зачастую только детальное понимание процессов, происходящих в материалах современной микроэлектроники (в основном искусственно выращенных), зависящее от их строения могут помочь построить прогностические модели, позволяющие связать структуру материала, его свойства, а далее характеристики прибора, в которых этот материал применяется. Сегодня, компьютерное моделирование в материаловедении стало важнейшей частью технологии и инженерии, применяемой к созданию новых материалов. Известно, что материал можно рассматривать как сложную иерархическую конфигурацию вложенных друг в друга подсистем. Изучение взаимосвязей между структурой и свойствами материала в рамках одной модели на единственном пространственно-временном масштабе затруднено, так как учесть все детали каждой подсистемы весьма сложно. Объяснить многие свойства современных материалов без учета явлений и факторов играющих ключевые роли в таких подсистемах, относящихся к несопоставимым пространственным и/или временным масштабам, невозможно. Применение методов многомасштабного моделирования позволяет распределить подсистемы и соответствующие им модели по разным масштабным уровням

(атомно-кристаллическом, нано-, микро-, мезо- и макроуровням) и взаимосогласовать [1–4]. При этом модели более высокого масштабного уровня связаны с моделями нижнего уровня глобальными параметрами и учитывают их свойства в интегральной форме. Таким образом, стало возможным в рамках одной модели провести исследование сложной иерархической системы и выстроить взаимосвязи структура – свойство. В работах [5, 6] представлены теоретические основы построения многомасштабных моделей.

Для информационной поддержки разработанного математического аппарата (методов, моделей, алгоритмов) и технологии построения многомасштабных моделей были разработаны методы создания интеграционной платформы для автоматизированной реализации формализованной технологии построения многомасштабных вычислительных моделей, характеризующихся широким спектром пространственных и/или временных масштабов. Это позволило подготовить инструментарий для разработки многоуровневых программных систем [7] для решения задач в области вычислительного материаловедения. Применение высокопроизводительных ресурсов [8] и программных средств распараллеливания вычислений позволяют существенно ускорить и удешевить процесс получения результатов многомасштабного моделирования. Корректность и практическая значимость результатов, показана на примере решения задач в области моделирования и оптимизации новых полупроводниковых материалов с заданными свойствами [9–13] для микроэлектроники.

Необходимо отметить, что в настоящее время развивается цифровое моделирование материалов (цифровое материаловедение). Развитие данного направления предполагает:

- создание банков мета – данных структур и свойств известных классов материалов;
- разработку новых и развитие существующих физико-математических моделей, методов, алгоритмов, а также программных решений, позволяющих проводить комплексные исследования по созданию цифровых моделей для предсказательного моделирования структуры и свойствах новых материалов;
- применение методов многомасштабного компьютерного моделирования и методов анализа данных с применением высокопроизводительных программных средств, а также баз метаданных для хранения результатов вычислительных экспериментов;

- использование банков мета – данных структур и свойств известных классов материалов для верификации результатов вычислительных экспериментов;
- разработку на основе банков мета-данных интеллектуальных систем, позволяющих осуществлять целенаправленный поиск материалов по заданным параметрам.

На сегодня, разработка интеллектуальных систем в данной предметной области является одним из центральных направлений, успехи в котором позволят в ближайшем будущем достигнуть опережающего развития не только в создании новых материалов с требуемыми свойствами, но и в промышленном производстве в целом. Важным аспектом является проектирование систем программного обеспечения для реализации интеллектуальных решений. Как показано в работе [14], общим трендом на сегодня становится «использование методов и средств онтологического моделирования и спецификаций разрабатываемых систем». В данной работе обсуждаются вопросы моделирования процессов разработки и программный инжиниринг с повторным использованием имеющихся компонент. При этом в качестве общего подхода используется «программирование через генерацию». В работе [14] показано, что на сегодня теоретические основы онтологического моделирования процессов проектирования программного обеспечения переходят к моделям, подразумевающим «генерацию блоков из согласованной системы онтологических паттернов их внутренней спецификации».

Данный общий подход, согласуется с методикой построения программных решений через генерацию сценариев, изложенной в работе [15], реализованной на примере построения информационной системы для расчета структурных свойств композиционных материалов. Аналогичные подходы в настоящее время применяются для построения программных решений при моделировании работы нейроморфных систем [12, 13].

В качестве перспективных направлений развития в области вычислительного материаловедения, включая область цифрового моделирования в материаловедении электронных компонентов, могут быть использованы методы и средства, представленные в работе [14], позволяющие создавать программное обеспечение под управлением онтологий. Такие подходы могут быть использованы для построения прикладных интеллектуальных систем в данной предметной области с основными компонентами в виде базы знаний и машины вывода, построенной на базе онтологических моделей [14]. В дальнейшем,

применение методов и средств машинного обучения может быть использовано для генерации новых «онтологических» моделей проектирования программных средств в материаловедении электронных компонентов.

Заключение

Переход к цифровому моделированию в задачах материаловедения, включая интеграцию, методов многомасштабного моделирования, Machine Learning, знаний в предметной области через создание баз знаний, с применением информационной поддержки многомасштабного моделирования, реализованной на высокопроизводительных вычислительных ресурсах гибридной архитектуры в дальнейшем позволит перейти от разработки человеко-машинных систем к созданию интеллектуальных систем. В качестве перспективного направления при проектировании систем программного обеспечения для реализации интеллектуальных решений могут быть использованы программные решения под управлением онтологий. Успехи в области создания интеллектуальных систем позволят достигнуть опережающего развития не только в создании новых материалов с требуемыми свойствами, но и в промышленном производстве в целом.

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

Список использованных источников

1. Abgaryan K.K., Mutigullin I.V. Theoretical investigation of the stability of defect complexes in silicon // *Phys.Status Solidi*. 2016. С. 13. № 4. P. 156–158.
2. Абгарян К.К., Ревизников Д.Л. Численное моделирование распределения носителей заряда в наноразмерных полупроводниковых гетероструктурах с учетом поляризационных эффектов // *ЖВМ и МФ*. Т. 56. № 1. 2016. С. 155–166.
3. Журавлев К.С., Малин Т.В., Мансуров В.Г, Терещенко О.Е., Абгарян К.К., Ревизников Д.Л. и др. AlN/GaN гетероструктуры для нормально-закрытых транзисторов. // *Физика и техника полупроводников*. 2017. Т. 51. Вып. 3. С. 395–402.
4. Abgaryan K.K. Optimization Problems of Nanosized Semiconductor Heterostructures. // *Russian Microelectronics*. 2018 Journal article. DOI: 10.1134/S1063739718080024. EID: 2-s2.0-85063261890
5. Абгарян К.К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения // М.: МАКС Пресс. 2017. 284 с.
6. Абгарян К.К. Информационная технология построения многомасштабных моделей в задачах вычислительного материаловедения // «Издательство «Радиотехника», «Системы высокой доступности». 2018. Т. 15. № 2. С. 9–15.

7. Abgaryan, K.K., Gavrilov, E.S. Integration platform for multiscale modeling of neuromorphic systems //Informatics and Applications, 2020, 14(2), стр. 104–110. DOI: <https://doi.org/10.14357/19922264200215>.

8. Зацаринный А.А., Абгарян К.К. Актуальные проблемы создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках цифровой трансформации общества. – Материалы II международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК-2020). М.: МАКС Пресс. С. 8–13.

9. Abgaryan, K.K., Kolbin, I.S. Calculation of Heat Transfer in Nanosized Heterostructures. Russian Microelectronics, 48(8), 559–563. 2019. DOI: 10.1134/S1063739719080031

10. Abgaryan K.K., Kolbin I.S. Numerical simulation of heat transfer in semiconductor heterostructures //Prepared for the Workshop/Conference/Book: International Conference “Information Technologies and High-Performance Calculations” (ITHPC 2019). Khabarovsk. Russia. 16–19, Sep. 2019. <http://ceur-ws.org/Vol-2426/paper6.pdf>. Vol-2426 urn:nbn:de:0074-2426-4.

11. Mordkovich V.N., Abgaryan K.K., Reviznikov D.L., c, and Leonov A.V. Simulation of Hall Field Elements Based on Nanosized Silicon-on-Insulator Heterostructures// ISSN1063-7397, Russian Microelectronics, Pleiades Publishing, Ltd., 2021, Vol. 50, No. 8, pp. 617–622. DOI: 10.1134/S1063739721080059

12. Zhuravlev, A.A., Abgaryan, K.K., Reviznikov, D.L. Multiscale discrete element modeling, Symmetry, 2021, 13(2), pp. 1–11, 219. DOI: 10.3390/sym13020219

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

14. Хорошевский В.Ф. Проектирование систем программного обеспечения под управлением онтологий: модели, методы, реализация // Онтология и проектирование. 2019. том 9, №4₍₃₄₎. С.429-448. DOI: 10.18287/2223-9537-2019-9-4-429-448.

15. Абгарян К.К., Гаврилов Е.С. Распределенная информационная система для расчета структурных свойств композиционных материалов // Информатика и ее применение. 2021. №4., 2021, том 15, вып. 4, С. 50–58. DOI: <https://doi.org/10.14357/19922264210407>

DESIGNING SOFTWARE SYSTEMS FOR MODELING IN THE MATERIAL SCIENCE OF ELECTRONIC COMPONENTS

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,
e-mail: kristal83@mail.ru*

Abstract. The paper considers current problems associated with the creation of new software systems in the field of material science of electronic components. Perspective approaches to construction of software systems in this field are considered. Relevance of using methods of multiscale computer modeling

for studying material properties and construction of structure-property relations is noted. Main tendencies related to the development of digital modeling in materials science are listed. It is shown that development of intellectual systems in the field of material science of electronic components is one of the most important directions today. Software solutions under the management of ontologies may be used as a promising direction in the development of information support for their creation. It is noted that successes in this area will allow to achieve outstripping development not only in creation of new materials with required properties, but also in industrial production as a whole.

Key words: multiscale modeling, digital materials science, intelligent systems, ontology-based software engineering.

УДК 621.315.592

<https://doi.org/10.29003/m3070.MMMSEC-2022/68-71>

УЧЕТ ТЕПЛОВЫДЕЛЕНИЯ В МАЛЫХ ОБЪЕМАХ ВЕЩЕСТВА НА ПРИМЕРЕ РОСТА МИКРОСТЕРЖНЕЙ ZnO: ПОИСК МЕТОДИКИ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Матюшкин Игорь Валерьевич,

к.ф.-м.н., старший научный сотрудник¹,

matyushkin@niime.ru

Тельминов Олег Александрович,

к.т.н., начальник лаборатории¹, otelminov@niime.ru

Михайлов Алексей Николаевич,

к.ф.-м.н., заведующий лабораторией², mian@nifti.unn.ru

¹АО НИИМЭ, г. Москва, Зеленоград

²НИФТИ ННГУ, г. Нижний Новгород

Аннотация. Предлагается общая методика учета температурного фактора и вводятся новые понятия «элементарный акт тепловыделения» (ЕАТ) и «регион теплового воздействия» (РТВ). Предложена корректирующая поправка в закон Аррениуса.

Ключевые слова: мемристор, экзотермическая реакция, молекулярная механика, температура, закон Аррениуса.

Введение

Потребность в моделировании тепловыделения и теплопередачи возникает во многих областях нанотехнологии. Актуальность такой проблемы связана с разработкой цифрового двойника интегральной схемы, где тепловыделение локализовано в наноразмерных обла-

стях. Ярким примером этого является запутанный вопрос о температуре области филамента при протекании тока в мемристивном элементе [1]. В случае роста микростержней ZnO [2] с переходами VS или VLS мы покажем возникающие противоречия при лобовом применении для малых объемов классических методов, т.е. закона Фурье и уравнения теплопроводности. Другая альтернатива состоит в использовании методов квантовой химии, атомистического моделирования, что было бы целесообразно для нанобъемов, но является ресурсоемким и избыточным для решаемой практической задачи. Методическая цель статьи, состоящая в разработке прежде всего концептуального базиса для учета тепловыделения, оправдана в контексте многомасштабного моделирования [3].

Методика моделирования

Она состоит в последовательном выполнении пяти пунктов, четыре из которых связаны с вводимыми понятиями

«Элементарный акт тепловыделения» (ЕАТ) моделируется тройкой $\langle \tau_{EAT} \cdot \nu_{EAT}, q_{EAT} \rangle$, характерными длительностью, объемом и тепловым эффектом.

Область и распределение ЕАТ по пространству, моделируется многообразием $G \in \mathbb{R}^3$, дискретным, но возможно и непрерывным, облаком точек, центров ЕАТ. Надо помнить, что АЕТ распределены и во времени, наверняка, присутствуют флуктуации во времени. Радиус ЕАТ-воздействия ρ_{EAT} , для кристаллического материала это длина свободного пробега фонона, а в формализме колебаний атомных связей это характерная длина затухания (корректнее рассматривать избыточную энергию колебаний), и затухание до величины $\approx \frac{1}{10} \max\{kT_\infty, q_{EAT}\}$. Регион теплового воздействия (РТВ). На его границах можно задавать краевые условия для решения классического уравнения теплопроводности вне РТВ, баланса тепловых потоков, сравнения $T_\infty > T_{ex}$, выявления степени перегретости РТВ (разность температур его границы и внешней среды). Характеризация ключевых электрофизических процессов, для которых будет рассматриваться температурный фактор, осуществляется вначале характерным временем, затем коррекцией классических соотношений, как, например, нами сделано для закона Аррениуса.

В обычной ситуации, допустим генерации вакансий, мы имели бы $A = A_0 \exp(-B/kT)$, где A – целевая величина (число вакансий

как динамическое равновесие прямого и обратного процесса, т.е. генерация и рекомбинация), A_0 , предэкспонента, величина экстенсивная, B – энергия активации.

$$A = \frac{A}{I} \sum_{i \geq 1}^I m_i \exp(-B/kT_i) \quad \sum (m_i > 0) = 1 \quad T_i \in \left[T_\infty; T_\infty + \frac{n}{k} \nu Q \right], T_i < T_{i+1}$$

Здесь k – постоянная Больцмана, Q – теплота, ν – доля теплоты, пошедшая на разогрев, I – число пулов, m_i – веса, отражающие распределение энергии по флуктуациям. Параметр n учитывает превышение случайного выброса над ожидаемым средним, $n \sim 2$. За T_∞ можно принять температуру внешней среды.

Выводы

При интенсивном тепловыделении структура вещества рандомизируется, а значит, возникает легкая некорректность использования привычных в физике твердого тела понятий вакансии и фонона, да и само понятие температуры не дает полноту описания.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ, тема АААА-А20-120110990073-7.

Список использованных источников

1. Flexible Monte-Carlo Approach to Simulate Electroforming and Resistive Switching in Filamentary Metal-Oxide Memristive Devices / D.V. Guseinov, D.S. Korolev, A.I. Belov, E.V. Okulich, V.I. Okulich, D.I. Tetelbaum, A.N. Mikhaylov // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. – 2020. – Vol.28. – P.015007 (16pp) – DOI 10.1088/1361-651X/ab580e.

2. Упорядоченные массивы наностержней оксида цинка на кремниевых подложках / А.Н. Редькин, М.В. Рыжова, Е.Е. Якимов, А.Н. Грузинцев // *Физика и техника полупроводников*. – 2013. – Т. 47. – № 2. – С. 216–222.

3. Ab initio Calculation of the Effective Thermal Conductivity Coefficient of a Superlattice Using the Boltzmann Transport Equation / K.K. Abgaryan, I.S. Kolbin // *Russian Microelectronics*. – 2020. – Vol. 49. – No 8. – P. 594-599. – DOI 10.1134/S1063739720080028.

ACCOUNTING FOR HEAT RELEASE IN SMALL VOLUMES OF MATTER ON THE EXAMPLE OF THE GROWTH OF ZnO MICRO-RODS: SEARCH FOR A MODELING TECHNIQUE

I.V. Matyushkin, O.A. Telminov, A.N. Mikhaylov.

Abstract. A general method of accounting for the temperature factor is proposed and new concepts of “elementary act of heat release” EAT and ”region of

thermal impact” RTV are introduced. A corrective amendment to the Arrhenius relationship is proposed.

Key words: memristor, exothermic reaction, molecular mechanics, temperature, Arrhenius relationship.

УДК 538.911

<https://doi.org/10.29003/m3071.MMMSEC-2022/71-74>

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ОТЖИГОВ МАССИВА НАНОПРОВОЛОК GaAs

Настовьяк Алла Георгиевна,

*к.ф.-м.н., доцент², научный сотрудник¹,
alla@isp.nsc.ru*

Штеренталь Давид Викторович,

*студент²
kibbudohan@gmail.com*

Неизвестный Игорь Георгиевич,

*член-корр. РАН, советник¹,
neizv@isp.nsc.ru*

Шварц Наталия Львовна,

*к.ф.-м.н., доцент², старший научный сотрудник¹,
nataly.shwartz@gmail.com*

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

²*Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия*

Аннотация. Работа посвящена имитационному моделированию процесса отжига массива нанопроволок GaAs методом Монте-Карло. Дано объяснение неоднородному утонению нанопроволок, наблюдаемому экспериментально в плотных массивах длинных проволок.

Ключевые слова: Монте-Карло, моделирование, GaAs, нанопроволоки, отжиг.

Введение

Полупроводниковые нанопроволоки (НП) представляют собой подходящие объекты для наблюдения квантово-размерных эффектов и созданию приборов на их основе. В последние годы распространенным способом получения НП является их рост под каплей-

затравкой по механизму пар-жидкость-кристалл (ПЖК). В этом случае диаметр проволоки задается размером капли-затравки. Недавно для уменьшения диаметра вертикальных НП GaAs, полученных методом ПЖК, был предложен их послеростовой отжиг, в процессе которого происходило испарение материала НП [1]. В настоящей работе с помощью имитационного моделирования методом Монте-Карло исследован процесс отжига вертикальных нанопроволок GaAs в условиях конгруэнтного и неконгруэнтного испарения.

Моделирование отжига нанопроволок GaAs

Расчеты осуществлялись с использованием пакета программ SilSim3D [2]. Была рассмотрена следующая система: мышьяк в атомарном и молекулярном виде (As и As_2), галлий в твердой и жидкой фазе ($Ga(s)$ и $Ga(liq)$) и материал пленки-маски (M_f). В модель были заложены следующие события для частиц: образование и распад молекул мышьяка $As + As \leftrightarrow As_2$, десорбция атомов $Ga(s)$ и $Ga(liq)$ и молекул мышьяка, плавление и кристаллизация арсенида галлия (плавление $Ga(s) + As \rightarrow Ga(liq) + As$ и кристаллизация $Ga(liq) + As \rightarrow Ga(s) + As$), диффузия атомов мышьяка в жидком галлии ($As + Ga(liq) \rightarrow Ga(liq) + As$), а также диффузия всех видов частиц по поверхности. Выбор энергий активации этих процессов подробно рассмотрен в работе по ленгмюровскому испарению арсенида галлия [3]. Испарение частиц в модельной системе происходило под произвольным углом, а при наличии развитого рельефа поверхности была возможна реадсорбция испарившегося материала. Исходная модельная система представляла собой вертикально ориентированный кристалл GaAs цилиндрической формы, расположенный в центре подложки GaAs(111) размером 35×41 нм, покрытой пленкой-маской со сквозным отверстием. Использование циклических граничных условий делает такую систему эквивалентной бесконечному массиву одинаковых НП. Было проведено моделирование процесса отжига НП GaAs с учетом образования жидкого галлия и без него.

Моделирование отжига при температуре 1200 К показало, что в процессе отжига НП с исходной цилиндрической формой утоняются, причем неоднородно вдоль вертикальной оси. В нижней части кристалла формируется пьедестал, которой отделен от основной части НП тонким перешейком. Верхняя часть НП приобретает за-

остренную конусообразную форму. Скорость испарения кристалла в верхней его части оказывается больше, чем в средней, из-за возможности свободного испарения, что приводит к заострению кристалла.

Моделирование отжига нанопроволок с учетом образования жидкой фазы Ga проводилось при температуре 890 К. В процессе отжига на боковой поверхности появлялись капли галлия, что связано с неконгруэнтным испарением GaAs. Анализ испарения плотного массива длинных НП проводился с учетом реадсорбции испаряемого материала. Если длина НП больше, чем длина массопереноса мышьяка за счет переотражения между соседними НП, то в нижней части НП разрушение боковых стенок за счет испарения компенсируется реадсорбционным потоком. Таким образом испарение нижней части кристалла оказывается близко к квазиравновесному, а верхней части к свободному испарению в вакуум. Это означает, что температура конгруэнтного испарения оказывается неоднородна вдоль оси НП. Можно найти такие температурные условия и длину НП, при которых нижняя часть кристалла будет испаряться конгруэнтно, а верхняя – неконгруэнтно. В этих условиях в верхней части НП формируются капли галлия. В особых условиях находится основание НП, где наблюдается образование капель галлия независимо от исходной длины нанопроволок. Приток атомов галлия в эту область происходит не только за счет реадсорбции, но и за счет диффузионного сбора галлия реадсорбированного на подложку.

Выводы

В работе выполнено имитационное моделирование отжига в вакууме плотного массива вертикальных нанопроволок арсенида галлия. В результате отжига на боковой поверхности нанопроволок формируются капли галлия. Дано объяснение неравномерному распределению капель вдоль оси проволоки.

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

Список использованных источников

1. Loitsch B. et al. Tunable Quantum Confinement in Ultrathin, Optically Active Semiconductor Nanowires Via Reverse-Reaction Growth //Adv. Mat., 2015, Vol. 27, pp. 2195–2202.

2. Карпов А.Н. и др. Решеточная модель Монте-Карло для изучения процессов формирования наноструктур // Выч. методы и программирование: новые вычислительные технологии, 2014, т. 15, с. 388–399.

3. Spirina A. et al. Langmuir Evaporation of GaAs(111)A and GaAs(111)B: Monte Carlo Simulation // Appl. Surf. Sci., 2021, Vol. 540, p. 148281.

SIMULATION OF HIGH-TEMPERATURE ANNEALING OF GaAs NANOWIRE ARRAY

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

Abstract. The paper deals with Monte Carlo simulation of GaAs nanowire array annealing. Non uniform nanowire shrinking experimentally observed in dense array of long nanowires was explained.

Key words: Monte Carlo, simulation, GaAs, nanowires, annealing.

УДК 51-73: 538.971: 519.245

<https://doi.org/10.29003/m3072.MMMSEC-2022/74-77>

ЭШЕЛОНИРОВАНИЕ СТУПЕНЕЙ ВИЦИНАЛЬНЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ GaAs(111) В ПРОЦЕССЕ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ОТЖИГОВ

*Спирина Анна Александровна,
младший научный сотрудник¹,
an.spirits@isp.nsc.ru, +7 (383) 333-14-75*

*Шварц Наталия Львовна,
к.ф.-м.н., доцент², старший научный сотрудник¹
nataly.shwartz@gmail.com, +7 (383) 333-14-75*

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

²Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия

Аннотация. В работе с помощью моделирования методом Монте-Карло проанализировано влияние капель галлия на развитие рельефа вицинальных поверхностей GaAs(111) с разными углами отклонения от сингулярности в процессе отжига в широком диапазоне температур.

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

Введение

В процессе высокотемпературных отжигов GaAs выделяют два температурных диапазона: конгруэнтное испарение, когда скорость испарения галлия и мышьяка одинакова; и неконгруэнтное, когда

мышьяк испаряется интенсивнее, а галлий накапливается на поверхности и собирается в капли. Экспериментально показано, что капли галлия направленно движутся в процессе отжига [1]. Интересным является исследование морфологии следа после капли. В [2] показано, что рельеф поверхности следа периодичен, каждый период содержит большую гладкую террасу и эшелон ступеней, то есть участок поверхности, на которых плотность моноатомных ступеней заметно выше, чем на соседних областях поверхности вицинальной подложки. Вопрос о том, как капли галлия влияют на формирование эшелонов ступеней в процессе высокотемпературного отжига подложек, до сих пор остается открытым. В настоящей работе детально рассмотрен процесс формирования эшелонов ступеней в процессе отжига вицинальных подложек GaAs(111)A и GaAs(111)B.

Моделирование отжигов подложек GaAs

Моделирование проводилось методом Монте-Карло с использованием программного пакета SilSim3D [3]. Для имитации неравновесных отжигов подложек GaAs(111)A рассматривалась 4-х компонентная система: галлий в твердом и жидком состоянии и мышьяк в атомарной и молекулярной формах. Элементарные процессы, заложенные в модель, включают в себя поверхностную диффузию всех компонентов; образование и распад молекул As₂; десорбцию атомов галлия и молекул мышьяка; растворение арсенида галлия в жидком галлии, кристаллизацию арсенида галлия; диффузию мышьяка в жидком галлии. Подробное описание Монте-Карло модели можно найти в [4].

Рассматривались вицинальные поверхности GaAs(111) с углами отклонения поверхности 5.2°, 3.2°, 2.6° и 1.3°. Капли галлия формировались вблизи ступеней вицинальных поверхностей. Вокруг капель возникала повышенная концентрация адатомов галлия, выходящих из капель, что приводило к увеличенному притоку галлия к краям террас вблизи капель. Галлий встраивался в ступени, замедляя испарение поверхности вокруг капли. В результате около капель расстояние между ступенями уменьшалось: ступени стягивались в один массив, называемый эшелоном. На удалении от капель расстояние между ступенями сохранялось, то есть эшелон ступеней имеет локальный характер. При движении капли по поверхности локальный эшелон ступеней смещается вместе с каплей. Движение эшелона осуществляется путем изменения направления движения ступеней вблизи капли галлия. На рис.1 представлена ки-

нетика изменения направления движения ступеней на поверхности GaAs(111)A с углом отклонения 5.2° . На рис. 1 выбраны такие моменты времени отжига подложки, при которых капля галлия практически не смещается.

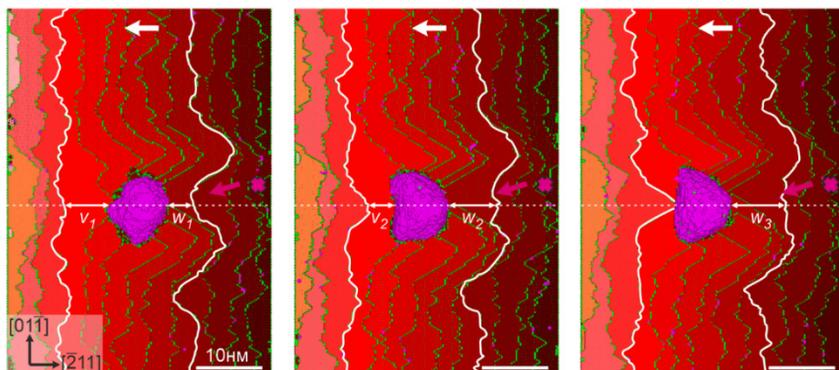


Рис. 1. Виды сверху поверхности GaAs(111)A углом отклонения 5.2° после отжига в течение 5 с (а), 5.8 с (б), 6.2 с (в) при $T = 840$ К: розовой стрелкой показано направление движения капли, белой – сублимации ступеней; крестик обозначает место зарождения капли

Белыми линиями на рис. 1 выделены две ступени, расположенные выше и ниже капли на расстоянии v_i и w_i , соответственно. Видно, что расстояние от выше расположенной ступени до капли уменьшается со временем ($v_1 > v_2$) и становится равным нулю ($v_3 = 0$). А расстояние от ниже расположенной ступени до капли увеличивается в процессе отжига ($w_1 < w_2 < w_3$). Уменьшение v_i и увеличение w_i происходит за счёт роста террас вблизи капли.

Выводы

Моделирование показало, что капли галлия могут быть причиной эшелонирования ступеней в процессе высокотемпературных отжигов вицинальных поверхностей GaAs(111).

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

Список использованных источников

1. Kanjanachuchai S., Euaruksakul C. Self-Running Ga Droplets on GaAs (111)A and (111)B Surfaces // ACS Appl. Mater. Interfaces, 2013. Vol. 5, P.7709–7713.
2. Wu J. et al. Nanoscale footprints of self-running gallium droplets on GaAs surface // PLoS ONE, 2011. Vol. 6, P. e20765.

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.

4. 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.

STEP BUNCHING OF GAAS(111) VICINAL SURFACES DURING THE HIGH-TEMPERATURE ANNEALING PROCESS

A.A. Spirina, N.L. Shwartz

Abstract. In this work, simulation of GaAs(111) high-temperature annealing has been carried out. The effect of gallium droplets on the surface relief evolution of the vicinal GaAs(111) substrates with different misorientation angles during annealing in a wide temperature range is analyzed.

Key words: Monte Carlo, simulation, gallium arsenide, annealing, step bunching.

УДК 004.3:004.9

<https://doi.org/10.29003/m3073.MMMSEC-2022/77-79>

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА МОДАЛЬНОГО ПОДАВЛЕНИЯ ДЛЯ РАСЧЁТА ЭФФЕКТИВНОГО КОЭФФИЦИЕНТА ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ СВЕРХРЕШЕТОК

Абгарян Каринэ Карленовна,

*д.ф.-м.н., г.н.с., заведующая отделом¹,
kristal83@mail.ru*

Колбин Илья Сергеевич,

*к.ф.-м.н., научный сотрудник¹,
iskobin@gmail.com*

¹ФИЦ ИУ РАН, г. Москва

Аннотация. В работе проведен расчет эффективного коэффициента теплопроводности GaAs/AlAs с использованием метода модального подавления, проведены сравнения с экспериментом.

Ключевые слова: эффективный коэффициент теплопроводности, кинетическое уравнение Больцмана, модальное подавление, сверхрешетки.

Введение

Моделирование тепловых процессов в наноструктурах представляет актуальную научно-техническую задачу, связанную со значительным увеличением выделяемого тепла при росте рабочих частот

и уменьшением размеров устройств, которые используют подобные материалы [1, 2]. Одним из важных параметров для рассматриваемых задач является эффективный коэффициент теплопроводности, значения которого можно получить, в частности, из кинетического уравнения Больцмана. Как правило, для расчетов используется метод Монте-Карло. С другой стороны, для определения эффективного коэффициента теплопроводности можно применить метод модального подавления, который в ряде случаев демонстрировал хорошую точность и высокую вычислительную эффективность.

Результаты вычислительных экспериментов

В работе проведены вычисления эффективного коэффициента теплопроводности для сверхрешеток GaAs/AlAs для температур 30–296 К, с размером слоя 12 нм и числом периодов 1–9, в соответствии с экспериментальными данными, представленным в публикации [3]. Для расчета был использован метод модального подавления, реализованный в программном пакете AlmaVTE [2], при этом сверхрешетка моделировалась как сплав на основе метода виртуального кристалла с дополнительным барьерным членом [2]. Вычисления велись на расчетной сетке $24 \times 24 \times 24$, входные данные по материалам сверхрешеток GaAs/AlAs были взяты из базы данных пакета AlmaVTE. Полученные результаты в целом дали удовлетворительное соответствие с экспериментальными данными, существенное отклонение было в области низких температур. Так же бы проведено моделирование с использованием метода Монте-Карло, при этом интерфейсное сопротивление было учтено на основе модели диффузного несоответствия [4]. В данном случае в области низких температур было получено хорошее соответствие с экспериментом, однако с увеличением температуры и размеров образца результаты значительно расходились, что обусловлено ограничением модели диффузного рассогласования [4].

Выводы

Для расчета эффективного коэффициента теплопроводности сверхрешетки GaAs/AlAs был применен метод модального подавления, проведены сравнения с экспериментом, полученные результаты показали удовлетворительное соответствие с экспериментальными данными, что позволяет говорить о применимости метода в рассматриваемых задачах.

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

Список использованных источников

1. Хвесюк В.И., Скрыбин А.С. Теплопроводность наноструктур. Теплофизика высоких температур, том 55, н. 3, с. 446–471 (2017).
2. Carrete J., B. Vermeersch, A. Katre, et al. AlmaBTE: a solver of the space-time dependent Boltzmann transport equation for phonons in structured materials. Comp. Phys. Commun. 220C, 351 (2017)
3. Luckyanova M.N., J. Garg, K. Esfajani et al. Coherent Phonon Heat Conduction in Superlattices. Science 338(6109):936-9 (2012).
4. Swartz E.T., R.O. Pohl. Thermal boundary resistance. Rev. Mod. Phys. 61, 605 (1989).

APPLICATION OF THE MODAL SUPPRESSION METHOD TO CALCULATE THE EFFECTIVE THERMAL CONDUCTIVITY COEFFICIENT OF SUPERLATTICES

K.K. Abgaryan,

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

kristal83@mail.ru

I.S. Kolbin,

*Researcher, candidate of physical and mathematical Science, researcher
at Research Centre “Computer Science and Control”(FRC CSC),
of the Russian Academy of Sciences, (FRC CSC RAS). Vavilov st. 44,
119333 Moscow, Russia.*

iskolbin@gmail.com

Abstract. In this work, the effective thermal conductivity coefficient of GaAs/AlAs superlattices was calculated using the modal suppression method and comparisons with experiment were made.

Key words: effective thermal conductivity coefficient, BTE, modal suppression, superlattices.

ЧИСЛЕННЫЙ АЛГОРИТМ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОФИЛЕЙ ТРАВЛЕНИЯ МЕТОДОМ УРОВНЕЙ С ПРОИЗВОЛЬНОЙ ФУНКЦИЕЙ СКОРОСТИ

Аляев Роман Леонидович,

*студент¹, младший научный сотрудник²,
aliaev.rl@phystech.edu*

Лебедев Александр Владимирович,

*к.ф.-м.н., научный сотрудник²,
lebedev@kintechlab.com*

¹*МФТИ, г. Москва*

²*KinTech Lab., г. Москва*

Аннотация. В работе выполняется разработка и верификация программного инструмента для моделирования травления двумерных профилей методом влажного и сухого травления.

Ключевые слова: метод уровней, влажное травление, метод узкой полосы, численная вязкость.

Введение

Моделирование профиля травления необходимо для быстрой и эффективной разработки микроэлектронных и микроэлектромеханических систем таких, как транзисторы, зеркала, гироскопы и т.д. Разработка и развитие численных методов позволяет улучшить предсказательную силу модели для оптимизации параметров технических процессов. За счет применения метода узкой полосы и приема численной вязкости в данной работе создан алгоритм, позволяющий с высоким пространственным разрешением моделировать такие задачи, как травление сигма-профилей, характеризующихся наличием острых углов в решении.

Численный метод

Численный алгоритм создан на основе метода уровней [2]:

$$d\phi/dt + H(\nabla\phi) = 0,$$

где $H = V(\nabla\phi)|\nabla\phi|$ – гамильтониан, $V(\nabla\phi)$ – скорость травления поверхности.

Эволюция профиля описывается функцией уровней ϕ , значения которой есть знаковая функция расстояния до границы профиля. Профиль представляет собой геометрическое место точек, где $\phi = 0$.

Существующая в литературе информация показывает, что такой подход позволяет описывать профили сложной формы вычислительно эффективным образом [2]. Добавление к уравнению дополнительного члена, представляющего собой численную вязкость ν , позволяет сгладить разрывы производной функции ϕ и добиться устойчивого решения для задач, включающих в том числе острые углы.

$$H' = H + \nu(\phi)$$

Сформулированное таким образом уравнение решается методом конечных разностей по схеме Lax-Friedrichs с граничными условиями типа «постоянный градиент».

Расчет идет по точкам в активном слое – наборе точек, непосредственно соседствующих с границей раздела. Также программа использует адаптивный шаг по времени достаточно большой, чтобы при этом удовлетворять критерию Куранта для численной устойчивости.

Функция скорости может быть как анизотропной алгебраической функцией, так и функцией, определяемой решением кинетической системы уравнений с плазмохимическим механизмом.

Верификация

Работоспособность разработанного метода была проверена сравнением с экспериментом [1].

В расчете использована анизотропная функция скорости, задаваемая алгебраическим выражением:

$$R(x, y) = \frac{1}{x} \left(x + y \frac{R_{10}}{R_{11}} \right) R_{11},$$

где $R_{11} = 5 \frac{\text{нм}}{\text{мин}}$, $R_{10} = 24$.

Использована функция вязкости аналогичная работе [2].

Было проведено сравнение с экспериментальным профилем и получено совпадение с относительной погрешностью не выше 10%.

Выводы

В работе создан численный метод, позволяющий моделировать эволюцию профиля травления и являющийся заделом для развития и применения к задачам плазменного травления.

Список использованных источников

1. Qin C. et al. Study of sigma-shaped source/drain recesses for embedded-SiGe pMOSFETs, 2017. Vol. 181, pp. 22–28. DOI: 10.1016/j.mee.2017.07.001

2. Toifl A. Novel Numerical Dissipation Scheme for Level-Set Based Anisotropic Etching Simulations, 2019, 2019 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD). DOI: 10.1109/SISPAD.2019.8870443

NUMERICAL ALGORITHM FOR SIMULATING ETCHING PROFILES BY LEVEL-SET METHOD WITH AN ARBITRARY RATE FUNCTION

R.L. Alyaev, A.V. Lebedev

Abstract. The work includes the development and verification of a software tool for modelling the etching of two-dimensional profiles using wet and dry etching.

Key words: level-set method, wet etching, narrow band approach, numerical viscosity.

УДК 004.942+007.51

<https://doi.org/10.29003/m3075.MMMSEC-2022/82-85>

ПОСТРОЕНИЕ КЛАССИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ РАСЧЁТА УПРАВЛЯЮЩИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ НА ЭКЗОСКЕЛЕТ РУКИ

Ватлин Евгений Дмитриевич,

техник¹, студент², evatlin@niime.ru

Карнуп Герман Александрович,

младший научный сотрудник¹, студент², gkarnup@niime.ru

Шарапов Андрей Анатольевич,

научный сотрудник¹, аспирант², asharapov@niime.ru

¹АО «НИИМЭ», г. Зеленоград

²МФТИ (НИУ), г. Долгопрудный

Аннотация. В работе выполнено описание построения классической модели оценки управляющих воздействий к элементам разрабатываемой модели экзоскелета руки.

Ключевые слова: антропоморфная техника, экзоскелет, модель управления.

Введение

Одной из областей технологии, получившей значительный импульс развития в последние десять лет, стала область антропоморфной робототехники и экзоскелетостроения [1]. Управление антропоморфными робототехническими комплексами сводится

к формированию системы дифференциальных уравнений в зависимости от параметров комплекса [2]. Современные классические методы требуют больших вычислительных затрат и не имеют стабильной сходимости, что вынуждает разработчиков комбинировать классические методы расчета траектории движения с интеллектуальными.

Однако в обоих случаях необходим модуль, преобразующий рассчитанную траекторию в управляющие сигналы. В настоящей работе предлагается классический алгоритм расчета воздействий на робототехнический комплекс руки в зависимости от рассчитанной траектории и физических параметров комплекса, а также алгоритм преобразования полученных воздействий непосредственно в сигналы привода.

Моделирование

По аналогии с работой [3] построена классическая модель системы, состоящей из элементов плеча, предплечья, а также локтевого и плечевого шарниров. Исходя из механических и кинематических ограничений каркасов современных экзоскелетов, предложена структурно-механическая схема человеческой руки для дальнейшего расчёта [4]. В качестве входных данных указаны размеры, массы двух элементов, а также вес локтевого шарнира и масса нагрузки.

Модель эквивалентна двойному маятнику, подвешенному в точке плечевого сустава. Записав для него уравнение Лагранжа 2 рода, получим равенства для моментов сил, создаваемых в местах двух суставов электрическими двигателями. В эти уравнения входят как вышеупомянутые параметры конструкции экзоскелета, так и угловая динамика положения звеньев.

После задания двух зависимостей углов в двух сочленениях от времени (рис. 1), обусловленных физиологией человека и принципами работы экзоскелета, получены функции моментов сил на шарнирах от времени (рис. 2).

Выводы

В работе выполнено описание построения классической модели оценки управляющих воздействий к элементам разрабатываемой модели экзоскелета руки.

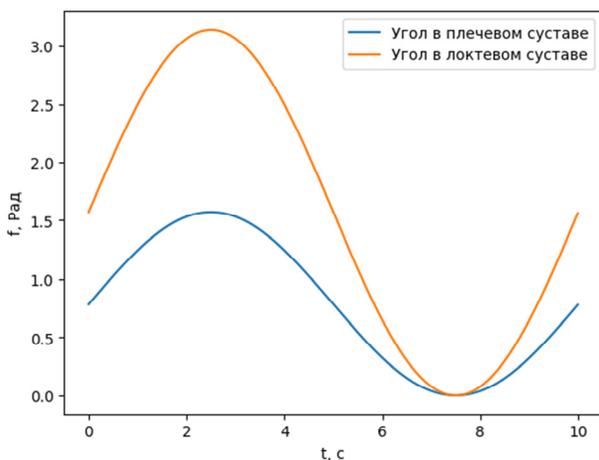


Рис. 1. Заданная требованиями динамика движения элементов экзоскелета

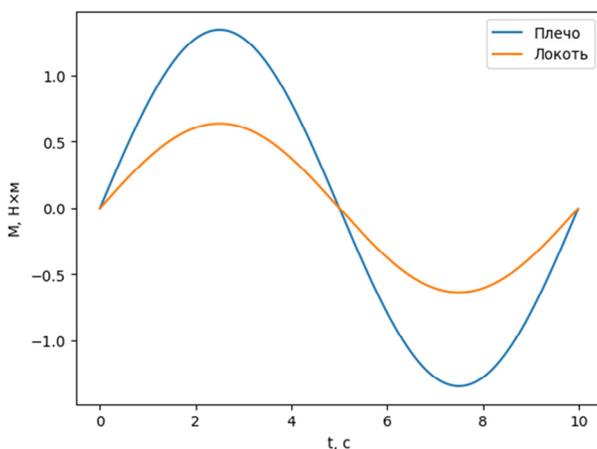


Рис. 2. Рассчитанная зависимость моментов сил на шарнирах от времени

Список использованных источников

1. Красников Г.Я. Общая теория технологии и микроэлектроника: часть 3. Уровень технологической операции / Г. Я. Красников, Е. С. Горнев, И. В. Матюшкин // Электронная техника. Серия 3: Микроэлектроника. – 2018. – № 3(171). – С. 63–93.

2. Kulic D. et al. Anthropomorphic Movement Analysis and Synthesis: A Survey of Methods and Applications. IEEE Transactions on Robotics. – 2016. – 32(4). – С. 776–795. – DOI:10.1109/tro.2016.2587744.

3. Borisov A.V., Chigarev A.V. Mathematical Models of Exoskeleton: Dynamics, Strength, Control. Springer Nature. – 2022. – DOI: 10.1007/978-3-030-97733-7.

4. Карнуп Г.А. Исследование вариационного автоэнкодера для обработки сигналов мышц и управления экзоскелетом руки. Российский форум «Микроэлектроника 2022» Научная конференция «Электронная компонентная база и микроэлектронные модули». Сборник тезисов, 2–8 октября 2022 г. М.: ТЕХНОСФЕРА. – 2022. – С. 716–718.

DESIGN OF CLASSICAL MODEL FOR CONTROL ACTIONS ESTIMATION ON THE ARM EXOSKELETON

E.D. Vatlin, G.A. Karnup, A.A. Sharapov

Abstract. The paper describes the construction of a classical model for estimation of control actions to the elements of the arm exoskeleton model under development.

Key words: anthropomorphic devices, exoskeleton, control model.

УДК 621.315.592.4

<https://doi.org/10.29003/m3076.MMMSEC-2022/85-88>

КИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РОСТА ОКСИДА КРЕМНИЯ В ПРОЦЕССЕ РАДИКАЛЬНОГО ОКИСЛЕНИЯ

Горохов Сергей Александрович,
научный сотрудник¹, аспирант²,
sgorohov@niime.ru

Черняев Михаил Владимирович,
ведущий инженер-технолог¹,
mchernyaev@niime.ru

Патюков Сергей Иванович,
к.т.н., начальник лаборатории¹,
spatyukov@niime.ru

Резванов Аскар Анварович,
к.ф.-м.н., начальник лаборатории¹, ассистент²,
arezvanov@niime.ru

¹АО «НИИМЭ», г. Зеленоград

²МФТИ (НИУ), г. Долгопрудный

Аннотация. Исследована кинетика радикального окисления в процессе ISSG (in situ steam-generation), основанном на сгорании водорода. Процесс роста оксида описывался линейно параболической моделью Дила-Гроува и экспоненциальным законом.

Ключевые слова: радикальное окисление, кинетика роста оксида кремния, модель Дила-Гроува, экспоненциальный закон роста, модель реактора идеального смешения.

Введение

Термическое окисление кремния относится к ключевым процессам в производстве интегральных схем, позволяет создавать бездефектные, надежные тонкие пленки оксида кремния [1]. Актуальность приобрел процесс термического окисления с генерацией пара у поверхности кремниевой пластины (ISSG) на установке быстрого термического окисления. В процессе ISSG окисления источником воспламенения смеси молекулярного водорода и кислорода выступает нагретая кремниевая подложка, вблизи поверхности которой происходит реакция горения. Радикалы кислорода играют важную роль при ISSG окислении, поэтому оно также называется радикальным. На эффективность ISSG окисления влияют многие технологические параметры процесса, в связи с чем важно исследовать кинетику роста оксида.

Результаты и обсуждение

Данные временных рядов толщины оксида, полученные на установке RTO Centura XE+ в диапазоне температур 850–1050 °С, представлены на рис. 1а. Экспериментальные точки были аппроксимированы согласно модели Дила-Гроува (ДГ) [2]. Модель ДГ позволяет вывести обобщенное линейно-параболическое соотношение толщины оксида L от времени t и трех параметров:

$$L^2 + AL - B(t + \tau) = 0,$$

где B – параболическая константа скорости, B/A – линейная константа скорости и τ – постоянная для учёта начальной толщины оксида. Для получения универсальных зависимостей скорости роста оксида от параметров процесса было проведено математическое моделирование состава газовой среды в реакторе RTO с использованием модели реактора идеального смешения [3].

Процесс радикального окисления хорошо описывается линейно параболическим законом роста. Энергия тепловой активации параболической константы близка к 0,78 эВ. Несоответствие с классической моделью ДГ касается энергии активации линейной константы, что подтверждает ограниченность модели ДГ для тонкого диэлектрика, не учитывающей явления на границе раздела кремний-оксид в рамках концепции переходного слоя [4].

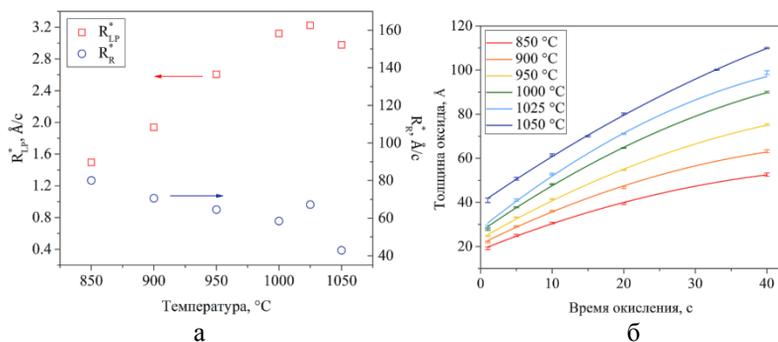


Рис. 1. (а) Временные зависимости толщины оксида, аппроксимированные линейно параболической зависимостью по модели ДГ; (б) линейно параболическая скорость роста и экспоненциально затухающая скорость роста с поправкой на концентрации молекул

При описании кинетики окисления экспоненциальной моделью скорость роста представляется суперпозицией двух слагаемых – постоянного, описывающего линейно параболический рост (R_{LP}), и экспоненциально затухающего с увеличением толщины оксида (R_R):

$$R(L) = \Delta L / \Delta t = R_{LP} + R_R \cdot e^{-L/L_C},$$

где $R_{LP}, R_R, L_C = f(T, p, C)$, R – скорость окисления, L – толщина оксида, L_C – критическая толщина, t – время, T – температура процесса, p – давление, C – концентрация окислителя.

Параметры модели R_{LP} , R_R , L_C определены с учетом концентраций окислительных реагентов, полученных в результате моделирования газовой среды моделью реактора идеального смешения, в результате чего были получены приведенные параметры R_{LP}^* , R_R^* , представленные на рис. 1б. Показана применимость экспоненциальной модели для описания кинетики процессов ISSG окисления. Полученными зависимостями объяснены некоторые свойства радикального окисления: повышенная равномерность толщины, слабая чувствительность толщины оксида к кристаллической ориентации, степени легирования и напряжениям.

Список использованных источников

1. Красников Г.Я., Горнев Е.С., Матюшкин И.В. Общая теория технологии и микроэлектроника: часть 3. Уровень технологической операции // Электронная техника. Серия 3: Микроэлектроника. – 2018. – № 3. – С. 63–93.
2. Черняев М.В., Горохов С.А., Патюков С.И., Ганькина Е.А., Резванов А.А., Заев И.А., Хорьков В.А. Моделирование процесса ISSG окисления с применением модели реактора идеального смешения // Электронная техника. Серия 3: Микроэлектроника. – 2022. – № 1. – С. 87–93.

KINETIC MODEL OF SILICON OXIDE GROWTH IN THE PROCESS OF RADICAL OXIDATION

S.A. Gorokhov, M.V. Chernyaev, S.I. Patyukov, A.A. Rezvanov

Abstract. The kinetics of radical oxidation in the ISSG (in situ steam-generation) process based on hydrogen combustion is investigated. The process of oxide growth was described by the linear parabolic Deal-Grove model and the exponential growth laws.

Key words: radical oxidation, kinetics of silicon oxide growth, Deal-Grove model, exponential growth law, well stirred reactor.

УДК 004.4:004.9

<https://doi.org/10.29003/m3077.MMMSEC-2022/88-92>

ДИСКРЕТНО-ЭЛЕМЕНТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

Журавлев Андрей Андреевич,

м.н.с., zhuravlyow.andrei@gmail.com,

Абгарян Каринэ Карленовна,

*д.ф.-м.н., г.н.с., зав. отделом,
kristal83@mail.ru,*

Ревизников Дмитрий Леонидович,

*д.ф.-м.н., профессор, в.н.с.,
reviznikov@mai.ru,*

ФИЦ ИУ РАН, г. Москва

Аннотация. Работа посвящена вопросам определения эффективных характеристик композиционных материалов. С этой целью применяется многомасштабный метод дискретных элементов. Представленный подход позволяет учитывать атомарный состав и микроструктуру материала и его компонентов.

Ключевые слова: композиционный материал, гомогенизация, многомасштабное моделирование, метод дискретных элементов.

Введение

При моделировании композиционных материалов важную роль играет вычисление эффективных физико-механических характеристик. Это позволяет рассматривать материал как однородный и использовать развитые методы моделирования сплошных сред. Традиционно задача гомогенизации (определения эффективных ха-

рактических характеристик материала) решается с опорой на знание свойств отдельных материалов, составляющих композицию. Используются приближенные аналитические и полуэмпирические зависимости, методы асимптотического осреднения [1, 2].

В настоящей работе для решения задачи гомогенизации предлагается использовать многомасштабное дискретно-элементное моделирование. Этот подход представлен в работах [3, 4]. Его отличительной особенностью является использование молекулярно-динамического моделирования, что позволяет учитывать микроструктуру материала и его составляющих. Применение метода дискретных элементов продемонстрировано в работах авторов [5, 6]. Многомасштабный подход применялся к анализу упругих свойств поликристаллических материалов с металлическими и ковалентными межатомными связями [3, 4]. В первом случае для молекулярно-динамического моделирования использовался межатомный потенциал погруженного атома, во втором – потенциал Терсоффа.

Вычислительная модель

Наличие в композитных материалах полимерного связующего обуславливает актуальность применения специальных потенциалов, которые учитывают геометрическую структуру связей между атомами в полимере. Примерами таких потенциалов являются consistent-valence forcefield (CVFF) и polymer consistent force field (PCFF). Для расчёта энергии системы с помощью данных потенциалов сначала всем атомам, помимо их элемента и набора связей с соседями, присваивается специальный подтип, так как характер взаимодействия, например, атомов углерода в бензольном кольце и обычной цепочке заметно отличается, затем производится перераспределение эффективного заряда между атомами и после этого проводятся расчёты. Потенциальная энергия системы включает в себя такие слагаемые, как энергии взаимодействия пар связанных атомов, энергии, зависящие от плоских углов, составляемых тройками связанных атомов, энергии, зависящие от двугранных углов, составляемых четвёрками связанных атомов и иные энергии, позволяющие хорошо воспроизводить геометрию связей между соседними атомами в молекулах полимеров. Выражение для суммарной энергии имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
E = & \sum_b [K_2(b-b_0)^2 + K_3(b-b_0)^3 + K_4(b-b_0)^4] \\
& + \sum_\theta [H_2(\theta-\theta_0)^2 + H_3(\theta-\theta_0)^3 + H_4(\theta-\theta_0)^4] \\
& + \sum_\phi [V_1(1-\cos(\phi-\phi_1^0)) + V_2(1-\cos(2\phi-\phi_2^0)) + V_3(1-\cos(3\phi-\phi_3^0))] \\
& + \sum_x K_x x^2 + \sum_b \sum_{b'} F_{bb'}(b-b_0)(b'-b'_0) + \sum_\theta \sum_{\theta'} F_{\theta\theta'}(\theta-\theta_0)(\theta'-\theta'_0) \\
& + \sum_b \sum_\theta F_{b\theta}(b-b_0)(\theta-\theta_0) + \sum_b \sum_\phi (b-b_0)[V_1 \cos(\phi) + V_2 \cos(2\phi) + V_3 \cos(3\phi)] \\
& + \sum_{b'} \sum_\phi (b'-b'_0)[V_1 \cos(\phi) + V_2 \cos(2\phi) + V_3 \cos(3\phi)] \\
& + \sum_\phi \sum_\theta \sum_{\theta'} K_{\phi\theta\theta'}(\theta-\theta_0)(\theta'-\theta'_0)\cos\phi + \sum_{i>j} \frac{q_i q_j}{\epsilon r_{ij}^2} + \sum_{i>j} \left[\frac{A_{ij}}{r_{ij}^9} - \frac{B_{ij}}{r_{ij}^6} \right]
\end{aligned}$$

Для проведения расчётов структура полимера задаётся в формате SMILES с небольшими дополнениями для упрощения ввода длинных полимерных структур, затем выстраивается начальная структура полимера, простая длинная цепочка из множества атомов, данная цепочка размножается необходимое число раз, чтобы получить достаточно представительный элемент материала и на первом этапе нагревается и сжимается, чтобы убрать пустое пространство и сплести полимерные цепи между собой.

В многомасштабном дискретно-элементном методе молекулярно-динамическое моделирование применяется многократно. Общая схема вычислительного процесса представляется следующим образом. Моделируемое тело разбивается на тетраэдры, каждому из которых присваивается тип материала, что определяет его отклик на деформации. Задаётся структура включений, которые могут быть внедрены в матрицу как в виде отдельных случайных включений, так и в виде каких-либо структурных элементов (эллипсоидов, волокон, сеток и т.д.). Таким образом, дискретные элементы представляют собой тетраэдры, взаимодействующие между собой по смежным граням. Элементы взаимодействуют со своими соседями через давление, возникающее в результате деформации. Каждый тетраэдр содержит в себе представительный фрагмент (сэмпл) атомарной структуры. Предполагается, что тензоры напряжений и деформаций дискретного элемента и его атомарного сэмпла одинаковы. Тензор напряжений на атомарном уровне рассчитывается с помощью молекулярно-динамического моделирования. Эта информация передается на уровень элемента, что позволяет рассчитать тензор деформации элемента, предварительно определив силы,

действующие на вершины элемента и произведя расчет динамики вершин. Рассчитанный тензор деформации передается на атомарный уровень, производится деформация атомарного сэмпла, после чего снова осуществляется молекулярно-динамическое моделирование, определяется тензор напряжений и процесс повторяется.

Проведение численных экспериментов с различными видами нагрузок, применяемых к исследуемому образцу, позволяет определить искомые эффективные свойства композиционных материалов.

Основной проблемой представленного подхода является необходимость наличия не просто произвольной химической формулы моделируемого вещества, а структурной формулы с полной информацией о типах связей между всеми соседями, которую не всегда просто получить для произвольного материала. Однако такой подход позволяет проводить поисковые расчёты материалов, для которых вовсе отсутствуют экспериментальные данные, достаточно лишь понимания того, как их синтезировать.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, научный проект 075-15-2020-799. Параллельные вычисления проводились на высокопроизводительных ресурсах ФИЦ ИУ РАН.

Список использованных источников

1. Полилов А.Н. Этюды по механике композитов. – М. Физматлит, 2015, 320 с.
2. Соколов А.П., Першин А.Ю., Козов А.В., Кириллов Н.Д. Гомогенизация многоуровневых многокомпонентных гетерогенных структур для определения физико-механических характеристик композиционных материалов. // Физическая мезомеханика, 2018, т. 21, № 5, С. 90–107.
3. Zhuravlev, A.A., Abgaryan, K.K., Reviznikov, D.L. Discrete element method adopting microstructure information. // *Advances in Theory and Practice of Computational Mechanics*, Springer, Smart Innovation, Systems and Technologies, 2020, N173. DOI: 10.1007/978-981-15-2600-8_17
4. Zhuravlev, A.A., Abgaryan, K.K., Reviznikov, D.L. Multiscale discrete element modeling // *Symmetry*, 2021, 13 (2), № 219, pp. 1-11. DOI 10.3390/sym13020219
5. Абгарян К.К., Журавлев А.А., Загордан Н.Л., Ревизников Д.Л. Дискретно-элементное моделирование внедрения шара в массивную преграду. // Компьютерные исследования и моделирование, 2015, Т. 7, № 1, С. 71–79.
6. Абгарян К.К., Елисеев С.В., Журавлев А.А., Ревизников Д.Л. Высокоскоростное внедрение. Дискретно-элементное моделирование и эксперимент. // Компьютерные исследования и моделирование, 2017, Т. 9, № 6, С. 937–944.

SIMULATION MODELING OF AN ANALOGUE SPIKING NEURAL NETWORK BASED ON MEMRISTIC ELEMENTS USING PARALLEL TECHNOLOGIES

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

Abstract. The work is devoted to the issues of determining the effective characteristics of composite materials. For this purpose, the multiscale method of discrete elements is used. The presented approach makes it possible to take into account the atomic composition and microstructure of the material and its components.

Key words: composite material, homogenization, multiscale modeling, discrete element method.

УДК 621.793.162

<https://doi.org/10.29003/m3078.MMMSEC-2022/92-94>

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОСАЖДЕНИЯ СЛОЁВ ОКСИДА ГАФНИЯ МЕТОДОМ RP-ALD

Зюзин Сергей Сергеевич,

инженер-технолог 2 кат.¹, аспирант², szuzin@niime.ru

Резванов Аскар Анварович,

к.ф.-м.н., начальник лаборатории^{1,2}, arezvanov@niime.ru

Зассеев Ясон Георгиевич,

инженер-технолог³, zasse95@mail.ru

Гвоздев Владимир Александрович,

инженер-технолог 1 кат.¹, vgvozdev@niime.ru

Ганыкина Екатерина Андреевна,

научный сотрудник¹, аспирант², eganukina@niime.ru

Горнев Евгений Сергеевич,

*член-корр. РАН, д.т.н., начальник управления РПТН¹,
egornev@niime.ru*

¹АО «НИИМЭ», г. Зеленоград, г. Москва

²МФТИ (НИУ), г. Долгопрудный

³АО «НИИТМ», г. Зеленоград, г. Москва

Аннотация. В работе рассмотрена модель процесса плазмостимулированного атомно-слоевого осаждения слоёв оксида гафния. Модель основана на методе Монте-Карло и учитывает химическую кинетику осаждения.

Ключевые слова: атомно-слоевое осаждение, ALD, плазма, оксид гафния, моделирование, Монте-Карло, конформность.

Введение

Плазмостимулированное атомно-слоевое осаждение (RP-ALD, или PEALD) является непревзойдённым методом нанесения тонких слоёв различных материалов, особенно когда важна высокая равномерность и требуется контроль толщины слоя на атомарном уровне. Указанные свойства RP-ALD важны при изготовлении MOSFET транзисторов, а также ячеек энергонезависимой памяти (ReRAM и др. [1, 2]). Несмотря на большой объём публикаций по данной теме, определение правильных параметров и условий процесса остаётся сложной и затратной задачей, не в последнюю очередь из-за большой длительности процесса и его дороговизны. Поэтому для решения подобных задач всё чаще применяется моделирование [2–5]. В данной работе представлена модель осаждения слоёв оксида гафния на кремниевой пластине. Используемые в модели упрощения позволяют описать процесс с достаточной точностью и при этом значительно повысить эффективность вычислений.

Моделирование

Был предложен алгоритм, основанный на методе кинетического Монте-Карло, который заключается в случайном выборе из набора возможных реакций, происходящих на поверхности образца. Суммарная скорость набора из N реакций выражается по формуле (1) [5]:

$$R_{total} = \sum_{i=1}^N R_i, i = 1, \dots, N, \quad (1)$$

где R_i – это скорость i -ой реакции из набора. Для каждой реакции вводится т.н. нормализованный индикатор $L_i \in (0; 1]$ по формуле (2):

$$L_i = \frac{\sum_{j=1}^i R_{unw}^j C_j}{\sum_{k=1}^N R_{unw}^k C_k}. \quad (2)$$

Для выбора реакции генерируется случайное число y_1 . Если это число лежит в пределах $L_{i-1} \dots L_i$, то выбирается i -ая реакция. Также для расчёта времени процесса генерируется ещё одно случайное число y_2 :

$$\Delta t = \frac{-\ln y_2}{R_{total}}. \quad (3)$$

Это время прибавляется к общему таймеру, пока не будет превышено предустановленное время цикла.

Заключение

Предварительная оценка полученных результатов показывает хорошее соответствие представленной модели и реальных образцов [6]. Модель может быть успешно применена для анализа процесса осаждения и предсказания базовых характеристик слоев оксида гафния.

Список использованных источников

1. Красников Г.Я., Орлов О.М. Отличительные особенности и проблемы КМОП-технологии при уменьшении проектной нормы до уровня 0.18 мкм и меньше //Российские нанотехнологии. – 2008. – Т. 3. – №. 7–8. – С. 124–128.
2. Guan X., Yu S., Wong H. S. P. On the switching parameter variation of metal-oxide RRAM – Part I: Physical modeling and simulation methodology //IEEE Transactions on electron devices. – 2012. – Т. 59. – №. 4. – С. 1172–1182.
3. Shirazi M. Multi-scale modelling of atomic layer deposition: дис. – University College Cork, 2014.
4. Abbaspour E. et al. KMC simulation of the electroforming, set and reset processes in redox-based resistive switching devices //IEEE transactions on nanotechnology. – 2018. – Т. 17. – №. 6. – С. 1181-1188.
5. Zhang Y., Ding Y., Christofides P. D. Multiscale computational fluid dynamics modeling and reactor design of plasma-enhanced atomic layer deposition //Computers & Chemical Engineering. – 2020. – Т. 142. – С. 107066.
6. Зюзин С. С. и др. Атомно-слоевое осаждение тонких пленок оксида гафния с использованием установки «Изофаз ТМ 200-01» //Наноиндустрия. – 2022. – Т. 15. – №. S8-2. – С. 548–552.

NUMERIC MODELING OF A DEPOSITION OF HAFNIUM OXIDE LAYERS USING RP-ALD METHOD

*S.S. Zyuzin, A.A. Rezvanov, Ya.G. Zasseev,
V.A. Gvozdev, E.A. Ganykina, E.S. Gornev*

Abstract. In this work, model of remote plasma atomic layer deposition (RP-ALD) of hafnium oxide layers was considered. This model is based on Monte-Carlo method and takes into account the chemical kinetics of a process.

Key words: atomic layer deposition, ALD, plasma, hafnium oxide, modeling, Monte-Carlo, conformality

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕМЕНТОВ СИСТЕМ ПИТАНИЯ УДАЛЕННЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ УСТРОЙСТВ ОПТИЧЕСКИМ ИЗЛУЧЕНИЕМ

Литвинов Владислав Львович,

*к.т.н., доцент, заведующий кафедрой^{1, 2},
vladlitvinov@rambler.ru*

Литвинова Кристина Владиславовна,

*студент^{1, 2},
kristinalitvinova900@rambler.ru*

¹МГУ им. М. В. Ломоносова, г. Москва

²СамГТУ, г. Самара

Аннотация. В работе выполняется математическое моделирование систем питания удаленных электронных устройств оптическим излучением. Разработана методика, позволяющая получить расчет максимальной длины фокона, при которой отсутствуют потери световой энергии, связанные с излучением через боковую поверхность.

Ключевые слова: системы питания оптическим излучением, фотовольтаический преобразователь, волоконные световоды.

Разработана математическая модель вычисления основных параметров фотовольтаического преобразователя, входящих в уравнение ВАХ, для определения эффективности преобразования энергии монохроматического излучения в электрическую энергию. Важной практической задачей для получения высокоэффективных фотовольтаических преобразователей является снижение величины последовательного сопротивления и повышение значения параллельного сопротивления [1–4].

Построена математическая модель согласования элементов волоконных световодов с фотовольтаическим преобразователем с использованием диэлектрических фоконов в качестве согласующих элементов. При апертуре волокна, в которое вводится излучение, в качестве согласующих элементов целесообразно использовать фоконы с углом конусности не более 0,5 град.

Разработана методика математического моделирования элементов систем питания оптическим излучением, позволяющая получить расчет максимальной длины фокона, при которой отсутствуют потери световой энергии, связанные с излучением через боковую поверхность.

Для математического моделирования элементов систем питания удаленных электронных устройств оптическим излучением [4–7] получены выражения, определяющие оптимальную длину градиентных линз для непараксиальных световых пучков. Выбор оптимальной длины линзы позволяет снизить потери при стыковке волоконных световодов с фотовольтаическими преобразователями.

Разработанные математические модели реализованы в программном комплексе Simulink пакета MatLab при моделировании переходных процессов [8,9].

Список использованных источников

1. Володин, В.Я. LTspice. Компьютерное моделирование электронных схем. – СПб: БХВ Петербург. 2010. – 392 с.
2. Зограф, Ф. Г. Основы компьютерного проектирования и моделирования радиоэлектронных средств / Ф. Г. Зограф. – Красноярск: Сиб. федерал. ун-т, 2011. – 120 с.
3. Пригарин, С. М. Методы численного моделирования случайных процессов и полей / С. М. Пригарин. – Новосибирск : Изд-во ИВМиМГ СО РАН, 2005. – 259 с.
4. Васильев, К. К. Математическое моделирование систем связи: учебное пособие / К. К. Васильев, М. Н. Служивый. – 2-изд., перераб. и доп. – Ульяновск: УлГТУ, 2010.– 170 с.
5. Тихонов, А.Н. Вводные лекции по прикладной математике: учебное пособие / А. Н.Тихонов, Д. П.Костомаров. – М.: Наука, 1984. – 190 с.
6. Самарский, А.А. Математическое моделирование. Идеи. Методы. Примеры / Самарский А.А., Михайлов А.П. – 2-е изд., испр.– М.: Физматлит, 2001.
7. Мышкис, А.Д. Элементы теории математических моделей / А.Д. Мышкис – 3-е изд., испр. – М.: КомКнига, 2007. – 192 с.
8. Литвинов, В.Л. Программа динамического управления мощностью лазера в системе оптического питания «МО_ОПТ_WIN / Литвинов В.Л., Светличный В.Ю. – Федеральная служба по интеллектуальной собственности. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2020663924 от 05.11.2020г.
9. Литвинов, В.Л. Программа динамического управления мощностью лазера в системе оптического питания «МО_ОПТ» / Литвинов В.Л., Светличный В.Ю. – Федеральная служба по интеллектуальной собственности. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2020663925 от 05.11.2020 г.

MATHEMATICAL MODELING OF ELEMENTS OF POWER SYSTEMS OF REMOTE ELECTRONIC DEVICES BY OPTICAL RADIATION

V.L. Litvinov, K.V. Litvinova

Abstract. In this work, mathematical modeling of power supply systems for remote electronic devices by optical radiation is carried out. A technique has

been developed that makes it possible to obtain a calculation of the maximum length of the focon, in which there are no losses of light energy associated with radiation through the side surface.

Key words: power supply systems by optical radiation, photovoltaic converter, fiber light guides.

УДК 004.087.2, 537.226

<https://doi.org/10.29003/m3080.MMMSEC-2022/97-99>

РАСЧЁТ ВЛИЯНИЯ ЛЕГИРУЮЩИХ ДОБАВОК НА ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ДИОКСИДА ГАФНИЯ МЕТОДАМИ КВАНТОВО- ХИМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Резник Александр Анатольевич,
студент¹, младший научный сотрудник²,
futa006@mail.ru

Резванов Аскар Анварович,
к.ф.-м.н., начальник лаборатории²,
arezvanov@niime.ru

¹МФТИ, г. Москва

²АО «НИИМЭ», г. Зеленоград

Аннотация. В работе рассматривается влияние 20 легирующих добавок на электрофизические свойства трех структурных модификаций диоксида гафния (HfO₂), в частности, на диэлектрическую проницаемость и остаточную поляризацию. Сравниваются различные программные алгоритмы диагонализации матриц.

Ключевые слова: диоксид гафния, диэлектрическая проницаемость, остаточная поляризация, расчёты из первых принципов, диагонализация.

Введение

Разработка и производство полупроводниковых изделий в настоящий момент является очень трудоёмким и дорогостоящим процессом, полный цикл которого способны осуществить лишь дюжина компаний в мире. Одним из способов ускорить и удешевить разработку новых электронных изделий является компьютерное моделирование, которое позволяет узнать свойства материала без проведения реальных измерений или экспериментов.

Одним из материалов, который в настоящее время находит все более широкое применение в электронике, является диоксид гафния

(HfO₂). Благодаря своим электрофизическим свойствам, HfO₂ уже используется при создании подзатворных диэлектриков полевых транзисторов, а также как функциональный слой для сегнетоэлектрической памяти и мемристоров [1].

В данной работе, на основе расчётов из первых принципов, была проведена оценка влияния легирования диоксида гафния различными легирующими элементами на такие важные характеристики, как остаточная поляризация $2P_0$ и диэлектрическая проницаемость ϵ .

Моделирование диоксида гафния

В настоящей работе, для проведения расчётов, был использован программный комплекс Quantum ESPRESSO [2, 3]. Было рассмотрены три структурные модификации диоксида гафния: моноклинная (m-HfO₂), тетрагональная (t-HfO₂) и орторомбическая (f-HfO₂). При описании электронной плотности атомов кислорода, гафния и введенных элементов использовались обменно-корреляционный функционал и соответствующие ему псевдопотенциалы [4]. Для описания волновых функций и дискретизации импульсного пространства применялась сетка Монкруста-Пака размера $5 \times 5 \times 5$ и базис плоских волн с энергиями до 250 Ридберг = $250 \cdot 13,6 = 3400$ эВ. Для нахождения собственных значений и диагонализации матриц были использованы встроенные программные алгоритмы: диагонализация Дэвидсона [5], PPCG [6] и ParO [7]. Расчет энергии основного состояния завершался, если разница энергий основного состояния последовательных итераций оказывалась меньше 10^{-8} Ридберг = $10^{-8} \cdot 13,6$ эВ = $1,36 \cdot 10^{-7}$. Расчет положения атомов в ячейке проводился до тех пор, пока в процессе релаксации ячеек межатомные силы не становились меньше 10^{-3} Ридберг/Бор = $10^{-3} \cdot 2,18 \cdot 10^{-11} : 5,29 \cdot 10^{-9} = 4,12 \cdot 10^{-6}$ (эрг/см) = $2,57 \cdot 10^6$ (эВ/см) и разница энергий основных состояний между последовательными итерациями не становилась меньше 10^{-4} Ридберг = $10^{-4} \cdot 13,6$ эВ = $1,36 \cdot 10^{-3}$ эВ.

Работа выполнялась с использованием инфраструктуры Центра коллективного пользования «Высокопроизводительные вычисления и большие данные» ФИЦ ИУ РАН (Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской Академии Наук) и отдела 27 ФИЦ ИУ РАН.

Выводы

В результате проведенного моделирования было установлено, что тетрагональная фаза диоксида гафния обладает наибольшей диэлектрической проницаемостью по сравнению с другими модификациями HfO_2 , а при помощи легирования можно изменять значение ϵ . Орторомбическая фаза показала наличие остаточной поляризации $2P_0$, а при помощи легирования возможно добиться уменьшения или повышения остаточной поляризации в широких пределах. Также из рассмотренных алгоритмов диагонализации, алгоритм ParO показал наилучшие результаты в большинстве случаев.

Список использованных источников

1. Красников Г.Я. и др. Современное состояние разработок в области энерго-независимой памяти типа PCM // Электронная техника. Серия 3: Микроэлектроника, 2015. №. 2. С. 38–44.
2. Giannozzi P. et al. Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO // Journal of physics: Condensed matter, 2017. Vol. 29. no. 46. p. 465901.
3. Giannozzi P. et al. Quantum ESPRESSO toward the exascale //The Journal of chemical physics, 2020. Vol. 152. no. 15. p. 154105.
4. Hartwigsen C., Gødecker S., Hutter J. Relativistic separable dual-space Gaussian pseudopotentials from H to Rn // Physical Review B, 1998. Vol. 58. no. 7. p. 3641.
5. Davidson E.R. The iterative calculation of a few of the lowest eigenvalues and corresponding eigenvectors of large real-symmetric matrices // J. Comput. Phys, 1975. Vol. 17. P. 87–94.
6. Vecharynski E., Yang C., Pask J.E. A projected preconditioned conjugate gradient algorithm for computing many extreme eigenpairs of a Hermitian matrix // Journal of Computational Physics, 2015. Vol. 290. pp. 73–89.
7. Pan Y. et al. A parallel orbital-updating based plane-wave basis method for electronic structure calculations //Journal of Computational Physics, 2017. Vol. 348. P. 482–492.

CALCULATION OF THE INFLUENCE OF ALLOYING ELEMENTS ON THE ELECTROPHYSICAL CHARACTERISTICS OF HAFNIUM DIOXIDE USING QUANTUM-CHEMICAL SIMULATION METHODS

A.A. Reznik, A.A. Reznanov

Abstract. The paper considers the effect of 20 alloying elements on the electrical properties of three structural modifications of hafnium dioxide (HfO_2), in particular, on the dielectric constant and remanent polarization. Various software algorithms for matrix diagonalization are compared.

Key words: hafnium dioxide, permittivity, remanent polarization, first principles calculations, diagonalization.

МОДЕЛИРОВАНИЕ КОЛЕБАНИЙ ДВИЖУЩЕГОСЯ УПРУГОГО ПОЛОТНА

Романенков Александр Михайлович,

к.т.н., доцент, старший научный сотрудник^{1,2},
romanaleks@gmail.com

¹ФИЦ ИУ РАН, г.Москва

²МАИ, г. Москва

Аннотация. В работе рассматривается модельная задача одномерных малых поперечных колебаний упругого полотна, движущегося с постоянной скоростью. Колебательный процесс описывается линейным дифференциальным уравнением 4-го с постоянными коэффициентами. Стоит отметить, что задачи исследования влияния упругих сил типичны для изучения прочности волокнистых композиционных материалов. В практике необходимо предсказывать и описывать колебания стеклянных, углеродных, борных и органических волокон. В рассматриваемой модели происходит учет силы Кориолиса, что приводит к появлению в дифференциальном уравнении слагаемого со смешанной производной. Данный эффект сильно затрудняет получение точного решения в виде ряда Фурье, однако удается предложить алгоритм построения семейства точных решений в виде специального тригонометрического ряда.

Для различных условий закрепления, установлено, что решение может быть построено в виде ряда Фурье по системе собственных функций вспомогательной задачи о колебаниях балки. В работе исследован вопрос о сходимости возникающих рядов.

Ключевые слова: уравнение колебаний движущегося полотна, закон сохранения энергии, точные решения.

Введение

Рассматривается начально-краевая задача для определения поперечных колебаний движущегося полотна. Известно [1], что колебания полотна описываются уравнением (1)

$$u_{tt} + 2v_0 u_{tx} + (v_0^2 - c^2)u_{xx} + \frac{D}{m}u_{xxxx} = 0, \quad (1)$$

где $u = u(x, t)$ – отклонение движущегося полотна от положения равновесия в точке x в момент времени t , v_0 – постоянная скорость движения полотна, c – скорость распространения колебаний в покоящемся полотне, D – величина жесткости на изгиб, соответству-

ющего композиционного материала. В качестве краевых условий рассматриваются шарнирный тип закрепления полотна:

$$u|_{x=0} = u_{xx}|_{x=0} = u|_{x=l} = u_{xx}|_{x=l} = 0, \quad (2)$$

или свободное закрепление на левом и правом концах полотна:

$$u_x|_{x=0} = u_{xxx}|_{x=0} = u_x|_{x=l} = u_{xxx}|_{x=l} = 0, \quad (2')$$

также считаются известными начальные условия:

$$u|_{t=0} = f(x), u_t|_{t=0} = g(x). \quad (3)$$

В работе установлено следующие утверждение:

Для набора чисел $\lambda_n = i \sqrt{\sqrt{\frac{a^2}{4} + \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 \left(a + \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2\right)} - \frac{a}{2}}, n \in \mathbb{N}$

функции вида

$$u_n(x, t) = \left(C_{1n} e^{c\lambda_n \sqrt{1 - \frac{D}{mc^2} \lambda_n^2} t} + C_{2n} e^{-c\lambda_n \sqrt{1 - \frac{D}{mc^2} \lambda_n^2} t} \right) e^{\lambda_n (x - v_0 t)} \quad (4)$$

являются решениями уравнения (1). Решение начально-краевой задачи (1–3) определяется рядом:

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \left(C_{1n} e^{c\lambda_n \sqrt{1 - \frac{D}{mc^2} \lambda_n^2} t} + C_{2n} e^{-c\lambda_n \sqrt{1 - \frac{D}{mc^2} \lambda_n^2} t} \right) e^{\lambda_n (x - v_0 t)}, \quad (5)$$

где коэффициенты C_{1n}, C_{2n} определяются через коэффициенты рядов Фурье для начальных условий (3), которые разложены по системе собственных функций вспомогательной задачи о колебаниях двутавровой балки [2].

Выводы

В работе рассмотрены поперечные колебания движущегося полотна. Математической моделью этого процесса является начально-краевая задача для уравнения с постоянными коэффициентами 4-го порядка. Получены явные формулы описывающие семейства точных решений в виде бегущей волны.

Список использованных источников

1. Banichuk N., Jeronen J., Neittaanmäki P., Saksa, T., Tuovinen T. Mechanics of Moving Materials. January 2014. Solid Mechanics and its Applications 207 DOI:10.1007/978-3-319-01745-7 Publisher: Springer.

2. Романенков, А. М. (2022). О решениях уравнения малых поперечных колебаний движущегося полотна. Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия, 9(2), 346-356. <https://doi.org/10.21638/spbu01.2022.214>

SIMULATION OF OSCILLATIONS OF A MOVING ELASTIC FABRIC

A.M. Romanenkov

Abstract. The paper considers a model problem of one-dimensional small transverse vibrations of an elastic web moving at a constant speed. The oscillatory process is described by a linear differential equation of the 4th with constant coefficients. In the model under consideration, the Coriolis force is considered, which leads to the appearance of a term with a mixed derivative in the differential equation. This effect makes it very difficult to obtain an exact solution in the form of a Fourier series, but it is possible to propose an algorithm for constructing a family of exact solutions in the form of a special trigonometric series.

For various conditions of fastening, it is established that the solution can be constructed in the form of a Fourier series according to the system of eigenfunctions of the auxiliary problem of beam oscillations. In the paper, the question of the convergence of the resulting series is investigated.

Key words: equation of vibrations of a moving canvas, law of conservation of energy, exact solutions

УДК 621.383.4

<https://doi.org/10.29003/m3082.MMMSEC-2022/102-105>

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК СОЛНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ НА ОСНОВЕ ГЕТЕРОПЕРЕХОДА $\text{TiO}_2/\text{Cu}_2\text{O}$

Саенко Александр Викторович,

к.т.н., доцент, avsaenko@sfedu.ru, +7 (989) 704-40-01

Жейц Виталий Владимирович,

студент, vzhuyayc@sfedu.ru, +7 (951) 845-69-05

Билык Герман Евгениевич, аспирант,

bilyk@sfedu.ru, +7 (988) 252-44-11

Малюков Сергей Павлович,

д.т.н., профессор,

sptalyukov@sfedu.ru, +7 (918) 518-41-64

ЮФУ, г. Таганрог

Аннотация. В работе проведено численное моделирование оксидного солнечного элемента на основе р-п гетероперехода $\text{Cu}_2\text{O}/\text{TiO}_2$ для оптимизации его структуры и повышения эффективности преобразования энергии.

Ключевые слова: солнечный элемент, оксиды металлов, численное моделирование, концентрация акцепторов, концентрация доноров, эффективность.

Введение

Полупроводники на основе оксидов металлов представляют группу новых недорогих материалов с большим потенциалом для применения в фотоэлектрических преобразователях. В последнее время большое внимание уделяется тонким пленкам диоксида титана (TiO_2), которые являются нетоксичными, имеют высокий показатель преломления, хорошую долговременную стабильность [1]. В качестве фотоэлектрического материала р-типа с более узкой запрещенной зоной широко исследуется оксид меди (Cu_2O) с шириной запрещенной зоны 2,17 эВ, отличающийся не токсичностью, низкой стоимостью, высокой подвижностью дырок (до $110 \text{ см}^2/\text{Вс}$), относительно высоким коэффициентом поглощения солнечного света и низким электронным сродством (3,2 эВ) [2, 3]. Это делает Cu_2O хорошим материалом р-типа для переноса дырок и перспективным материалом для поглощения солнечного света.

Моделирование структуры солнечного элемента

В данной работе создана модель полностью оксидного солнечного элемента в программе численного моделирования SCAPS-1D. Проведено исследование влияния концентрации доноров и акцепторов в слоях n- и р-типа на фотоэлектрические характеристики солнечного элемента.

При моделировании рассматривался солнечный элемент, состоящий из р-n гетероперехода и двух контактов: фронтальный контакт (ITO), прозрачный оконный слой n-типа (TiO_2), фотоактивный слой р-типа (Cu_2O) и тыльный контакт (Ni/Cu). Важным фактором, влияющим на фотоэлектрические параметры оксидного солнечного элемента, является концентрация акцепторов (вакансий меди) и доноров (кислородных вакансий) в слоях оксидных полупроводников р- (Cu_2O) и n-типа (TiO_2) проводимости, которые также являются точечными дефектами (дефекты по Шоттки) [3]. При этом большая концентрация дефектов может приводить к более высокой скорости рекомбинации носителей заряда и снижению эффективности солнечного элемента.

Для исследования влияния концентраций акцепторов и доноров на фотоэлектрические характеристики солнечного элемента прове-

дено моделирование при концентрации акцепторов и доноров от 10^{14} до 10^{19} см^{-3} , толщине слоя TiO_2 равной 100 нм, толщине слоя Cu_2O равной 1,5 $\mu\text{м}$ [3].

Показано, что увеличение концентрации акцепторов в фотоактивном слое Cu_2O от 10^{14} до 10^{16} см^{-3} приводит к увеличению эффективности солнечного элемента с 7,1 до 8,78%, а дальнейшее увеличение концентрации акцепторов до 10^{19} см^{-3} приводит к снижению эффективности до 0,49%. Увеличение эффективности солнечного элемента до 10^{16} см^{-3} связано с тем, что энергетический уровень Ферми в слое Cu_2O снижается и приводит к возрастанию напряжения холостого хода с 1,28 до 1,36 В, а возрастающая скорость рекомбинации не приводит к значительному снижению концентрации носителей заряда. Так плотность тока короткого замыкания уменьшается незначительно с 10,85 до 9,73 мА/см^2 . Дальнейшее возрастание концентрации акцепторов (больше 10^{17} см^{-3}) приводит к существенному уменьшению плотности тока короткого замыкания до 0,65 мА/см^2 , что связано с увеличением скорости рекомбинации носителей заряда в слое Cu_2O , и снижению эффективности солнечного элемента до 0,49%. Таким образом, оптимальная концентрация акцепторов в слое Cu_2O должна составлять 10^{16} см^{-3} , что позволяет получить максимальную эффективность 8,78% (плотности тока короткого замыкания 9,73 мА/см^2 , напряжения холостого хода 1,36 В, фактор заполнения 66,35%).

Увеличение концентрации доноров в слое TiO_2 от 10^{14} до 10^{19} см^{-3} приводит к возрастанию эффективности оксидного солнечного элемента до 10,21%, что связано со смещением энергетического уровня Ферми в слое TiO_2 (возрастанием напряжения холостого хода до 1,38 эВ) и небольшими рекомбинационными потерями в слое TiO_2 (плотность тока короткого замыкания 9,71-9,89 мА/см^2) из-за малой толщины (100 нм), высокой подвижности и диффузионной длины носителей заряда. Таким образом, оптимальная концентрация доноров в слое TiO_2 должна составлять 10^{19} см^{-3} .

Выводы

В работе проведено численное моделирование оксидного солнечного элемента на основе p-n гетероперехода $\text{Cu}_2\text{O/TiO}_2$ в программе SCAPS-1D. Показано, что для получения высокой эффективности солнечного элемента концентрация акцепторов в слое Cu_2O должна составлять 10^{16} см^{-3} , а концентрация доноров в слое TiO_2 должна быть 10^{19} см^{-3} . Получена максимальная эффективность

солнечного элемента равная 10,21% (плотность тока короткого замыкания 9,89 мА/см², напряжение холостого хода 1,38 В).

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта Правительства РФ (Соглашение № 075-15-2022-1123).

Список использованных источников

1. Mingzhen Liu, Michael B. Johnston, Henry J. Snaith. Efficient planar heterojunction perovskite solar cells by vapour deposition // Nature. – 2013. Vol. 501, pp. 395–398.
2. Kudryashov D.A., A.S. Gudovskikh, A.V. Babichev, et al. Nanoscale Cu₂O Films: Radio-Frequency Magnetron Sputtering and Structural and Optical Studies // Semiconductors. – 2017. Vol. 51, No. 1, pp. 110–114.
3. Саенко А.В., В.С. Климин, А.А. Рожко, С.П. Малюков. Моделирование структуры оксидного солнечного элемента // Прикладная физика. – 2022. № 4, с. 54–63.

NUMERICAL MODELING OF PHOTOVOLTAIC CHARACTERISTICS OF SOLAR CELLS BASED ON A TiO₂/Cu₂O HETEROJUNCTION

A.V. Saenko, V.V. Zheits, G.E. Bilyk, S.P. Malyukov

Abstract. Numerical modeling of an oxide solar cell based on Cu₂O/TiO₂ p-n heterojunction was carried out in order to optimize its structure and increase the energy conversion efficiency

Key words: solar cell, metal oxides, numerical modeling, acceptor concentration, donor concentration, efficiency.

УДК 004.94

<https://doi.org/10.29003/m3083.MMMSEC-2022/105-108>

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ГПУ МЕТАЛЛОВ

Сеченых Полина Алексеевна,

*младший научный сотрудник¹, старший преподаватель²,
p-sechenyh@mail.ru*

¹ ФИЦ ИУ РАН, г. Москва

² МАИ НИУ, г. Москва

Аннотация. В работе представлен расчёт метрических параметров кристаллических соединений по заданным химической формуле и пространственной группе симметрии. Рассмотрены металлы с гексагональной плотноупакованной структурой (ГПУ).

Ключевые слова: алгоритм имитации отжига, гексагональная плотная упаковка, ГПУ.

Введение

Металлы (в том числе, редкоземельные) широко применяются в различных отраслях электронной промышленности, что обуславливает актуальность исследования их свойств. Гексагональная плотноупакованная (ГПУ) структура является одним из часто встречающихся структурных типов, характерных для многих металлов. Данная работа посвящена определению метрических параметров – постоянных кристаллической решётки (a , b , c) и плотности упаковки атомов в элементарной ячейке.

Расчёт метрических параметров

Для расчёта метрических параметров был применён подход, подробно изложенный в [1]. Ранее этот подход использовался для расчёта метрических параметров соединений различных классов (оксиды металлов [2], перовскит, двойной перовскит [3]) с кристаллической решёткой кубического типа симметрии ($a = b = c$, углы ячейки $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$). В данной работе показано его применение для кристаллов с гексагональной решёткой ($a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$). Были рассмотрены металлы, кристаллическая решётка которых реализуется в структурном типе ГПУ (гексагональная плотная упаковка). Такая структура описывается пространственной группой симметрии $P6_3/mmc$, позиция Уайкова $2c$.

Для решения поставленной задачи применялась программная реализация алгоритма имитации отжига [4] на языке программирования C# [5], входными данными для которой являются:

- химическая формула,
- радиусы атомов, входящих в соединение,
- справочная кристаллографическая информация (операции симметрии и позиции Уайкова [6]).

Радиусы атомов химических элементов были взяты из [7].

Основные результаты вычислений приведены в таблице 1.

Данные, приведенные в таблице 1, показывают, что результаты моделирования структурных характеристик рассмотренных соединений согласуются с опубликованными значениями [8].

Структурные характеристики

Металл	Плотность упаковки	a (выч.), Å	c (выч.), Å	c/a	a (таб.), Å	c (таб.), Å
Be	0.602	2.269	3.615	1.593	2.29	3.58
Ce	0.592	3.559	5.59	1.571	3.65	5.96
α -Co	0.594	2.419	3.81	1.575	2.51	4.07
Dy	0.605	3.599	5.754	1.599	3.59	5.65
Er	0.614	3.567	5.772	1.618	3.56	5.59
Gd	0.604	3.644	5.822	1.598	3.64	5.78
Hf	0.614	3.246	5.254	1.619	3.2	5.06
Ho	0.605	3.575	5.721	1.600	3.58	5.62
La	0.623	3.81	6.24	1.638	3.75	6.07
Lu	0.602	3.501	5.576	1.593	3.5	5.55
Mg	0.609	3.217	5.177	1.609	3.21	5.21
Nd	0.616	3.707	6.019	1.624	3.66	5.9
Os	0.624	2.728	4.473	1.640	2.74	4.32
Pr	0.621	3.732	6.098	1.634	3.67	5.92
Re	0.62	2.78	4.537	1.632	2.76	4.46
Ru	0.602	2.7	4.303	1.594	2.7	4.28
Sc	0.593	3.227	5.078	1.575	3.31	5.27
Tb	0.602	3.62	5.784	1.598	3.6	5.69
Ti	0.595	2.959	4.67	1.578	2.95	4.69
Tl	0.591	3.145	4.938	1.570	3.46	5.53
Tm	0.606	3.531	5.653	1.601	3.54	5.55
Y	0.592	3.557	5.592	1.572	3.65	5.73
Zr	0.623	3.258	5.339	1.639	3.23	5.15

Полученные результаты могут быть использованы при проведении квантовомеханических расчетов на базе теории функционала электронной плотности [9, 10], с помощью которых можно уточнить координаты системы атомов, а также рассчитать электронные, магнитные и другие свойства соединений.

Выводы

В работе выполнено моделирование металлов с кристаллической структурой типа ГПУ. Полученные значения метрических параметров согласуются с экспериментальными данными.

Работа выполнена при поддержке проекта № 075-15-2020-799 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Список использованных источников

1. Абгарян К.К., Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. – М.: МАКС Пресс, 2017. – 284 с.
2. Сеченых П.А., Абгарян К.К. Математическое моделирование кристаллической структуры оксидов металлов //Материалы I Международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК-2019), 21–23 октября 2019 г. Москва: МАКС Пресс. – 2019. – С. 74–76. – [Doi.org/10.29003/m682.MMMSEC-2019/74-76](https://doi.org/10.29003/m682.MMMSEC-2019/74-76)
3. Сеченых П.А. Математическое моделирование кристаллической структуры перовскитоподобных соединений //Материалы III Международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК-2021), 25-27 октября 2021 г. Москва: МАКС Пресс. – 2021. – С. 86–88. – <https://doi.org/10.29003/m2479.MMMSEC-2021/86-88>.
4. Metropolis N., Ulam S. The Monte Carlo Method. Journal of the American Statistical Association, Vol. 44, No. 247 (Sep., 1949), pp. 335-341.
5. 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
6. Hahn T. International Tables for Crystallography. Vol. A. // Springer, 2005 – 911 с.
7. WebElements [электронный ресурс]. URL: <https://www.webelements.com> (дата обращения 20.09.2022).
8. Ashcroft N.W., Mermin N.D. Solid state physics. – New York: Saunders College Publishing, 1976.
9. Hohenberg, P. Phys. Rev. 136, B864 / P. Hohenberg, W. Kohn // 1964.
10. Kohn, W. Phys. Rev. 140, A1133 / W. Kohn, L. J. Sham // 1965.

MATHEMATICAL MODELING OF THE CRYSTAL STRUCTURE OF HEXAGONAL CLOSE-PACKED METALLS

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 hexagonal close-packed structure is considered.

Keywords: annealing simulation algorithm, hexagonal close-packed,hcp.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И КАЧЕСТВЕННАЯ ОЦЕНКА ВОЗДЕЙСТВИЯ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ ИЛИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ОДНОРОДНЫЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫЕ МАТЕРИАЛЫ

Степович Михаил Адольфович,

д.ф.-м.н., профессор¹, m.stepovich@mail.ru

Туртин Дмитрий Витальевич,

к.ф.-м.н., доцент², turtin@mail.ru

Калманович Вероника Валерьевна,

старший преподаватель¹, v572264@yandex.ru

Филиппов Михаил Николаевич,

*д.ф.-м.н., профессор, зав. лабораторией³,
mn@filippov.org.ru*

¹КГУ им. К.Э. Циолковского, г. Калуга

²ИвГУ, г. Иваново

³ИОНХ им. Н.С. Курнакова РАН, г. Москва

Аннотация. Описаны результаты математического моделирования и качественные оценки, позволяющие оценить степень воздействия заряженных частиц или электромагнитного излучения на однородные полупроводниковые материалы, используемые в материаловедении электронных компонентов.

Ключевые слова: математическое моделирование, заряженные частицы, электромагнитное излучение, полупроводники, неравновесные неосновные носители заряда, качественные оценки.

Введение

При исследованиях полупроводниковых материалов с использованием пучков заряженных частиц или электромагнитного излучения наиболее часто в качестве информативного регистрируется сигнал, связанный с генерацией и диффузией в полупроводниковой мишени неравновесных неосновных носителей заряда (ННЗ) и/или регистрируются сигналы, характеристики которых существенно зависят от ННЗ, например, катодолюминесценция (КЛ).

Если по какой-то причине характер внешнего возбуждения изменился, то это приведёт к изменению распределений ННЗ после их

диффузии в полупроводнике. При математическом моделировании диффузии генерированных ННЗ это отвечает изменению правой части дифференциального уравнения диффузии и, соответственно, изменению решения этого уравнения. Отметим, что для многослойных структур даже при идеальных условиях проведения эксперимента: наличии идеальных слоёв полупроводниковой структуры и исходном моноэнергетическом пучке электронов – для второго и последующих слоёв условие моноэнергетичности пучка нарушается и при математическом моделировании это должно отражаться на описании правой части дифференциального уравнения диффузии. Однако учёт этого явления в полной мере в настоящее время отсутствует и потому особое значение при описании процесса диффузии приобретают качественные оценки для однородных полупроводников, что может служить основой для получения подобных оценок для многослойных структур [1–3].

Постановка задачи

В настоящей работе компьютерное моделирование проводится и качественные оценки даются при описании процессов взаимодействия широких электронных пучков с одним из перспективных полупроводниковых материалов для СВЧ-техники, микро- и оптоэлектроники – монокристаллическим GaN – и различными материалами подложек, используемых для создания структур на основе нитрида галлия (SiC и Si). А поскольку при моделировании вид функции $\rho(z)$ в правой части дифференциального уравнения диффузии $D d^2 \Delta p(z) / dz^2 - \Delta p(z) / \tau = -\rho(z)$, не конкретизируется, полученные результаты справедливы для расчёта распределений генерированных ННЗ после их диффузии в полупроводнике $\Delta p(z)$ как для широкого потока заряженных частиц, так и для широкого потока квантов электромагнитного излучения.

Результаты

При наличии внешних воздействий на полупроводник для математической модели в правой части дифференциального уравнения диффузии будем иметь различные функции $\rho_1(z)$ и $\rho_2(z)$ и, соответственно, два различных его решения $\Delta p_1(z)$ и $\Delta p_2(z)$. Получено, что если $|\rho_2(z) - \rho_1(z)| \leq \varepsilon$, где ε – неотрицательная константа,

то справедлива следующая оценка: $|\Delta p_2(z) - \Delta p_1(z)| \leq C\varepsilon$, где C – постоянная, зависящая от D и $\sigma = 1/D\tau$. Для мишени конечной толщины l постоянная $C = \left[\operatorname{ch}(l\sqrt{\sigma}) - 1 \right] / D\sigma$.

Однако возможен и иной метод оценки, без использования вышеуказанных соотношений. Для этого достаточно провести расчёты для различных правых частей дифференциальных уравнений и оценить влияние этого на распределения $\Delta p(z)$ и информативный сигнал, например КЛ. В настоящей работе компьютерное моделирование проведено для параметров, характерных для GaN и по характеру изменения сигнала КЛ получена оценка разброса в значениях $\rho(z)$ и $\Delta p(z)$.

Выводы

Описаны возможности оценки влияния на информативный сигнал нестационарных условий облучения однородных полупроводниковых материалов заряженными частицами или электромагнитным излучением. Модельные расчёты проведены для катодoluminesцентного излучения при параметрах, характерных для GaN.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-03-00271.

Список использованных источников

1. Mikheev N.N., Stepovich M.A. The energy spectrum of electrons passing through film targets and some of its applications to electron beam engineering // Materials Science and Engineering B. Solid State Materials for Advanced Technology. 1995. V. B32, nos. 1–4. Pp. 11–16.
2. Stepovich M.A., Kalmanovich V.V., Filippov M.N. On some problems of modeling the processes of interaction of wide electron beams with planar microwave structures based on gallium nitride // Инфокоммуникационные и радиоэлектронные технологии. 2021. Т. 4, № 2. С. 85–94.
3. Stepovich M.A., Seregina E.V., Kalmanovich V.V., Filippov M.N. On some problems of mathematical modeling of diffusion of non-equilibrium minority charge carriers generated by kilovolt electrons in semiconductors // Journal of Physics: Conf. Series. 2021. Vol. 1740. Art. No. 012035. DOI: 10.1088/1742-6596/1740/1/012035.

MATHEMATICAL MODELING AND QUALITATIVE ASSESSMENT OF THE EFFECT OF INFLUENCE OF CHARGED PARTICLES OR ELECTROMAGNETIC RADIATION ON HOMOGENEOUS SEMICONDUCTOR MATERIALS

M.A. Stepovich, D.V. Turtin, V.V. Kalmanovich, M.N. Filippov

Abstract. the results of mathematical modeling and qualitative assessments are described, which make it possible to assess the degree of influence of charged particles or electromagnetic radiation on homogeneous semiconductor materials used in materials science of electronic components.

Key words: mathematical modeling, charged particles, electromagnetic radiation, semiconductors, nonequilibrium minority charge carriers, qualitative assessments.

УДК 004.94:537.533.9:535.215.1:53.043

<https://doi.org/10.29003/m3085.MMMSEC-2022/112-115>

О МАТЕМАТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ И КАЧЕСТВЕННЫХ ОЦЕНКАХ В МЕТОДЕ ВРЕМЯПРОЛЁТНОЙ КАТОДОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ

*Туртин Дмитрий Витальевич,
к.ф.-м.н., доцент¹, turtin@mail.ru*

*Степович Михаил Адольфович,
д.ф.-м.н., профессор², m.stepovich@mail.ru*

*Щербаков Никита Владиславович,
аспирант², shcerbackow@yandex.ru*

¹ИвГУ, г. Иваново

²КГУ им. К.Э. Циолковского, г. Калуга

Аннотация. Описаны результаты математического моделирования и качественные оценки, позволяющие оценить распределение неравновесных неосновных носителей заряда, генерированных электронным зондом, после их диффузии в однородном полупроводниковом материале. Рассмотрение проведено для условий, реализующихся в методе времяпролётной катодолюминесценции.

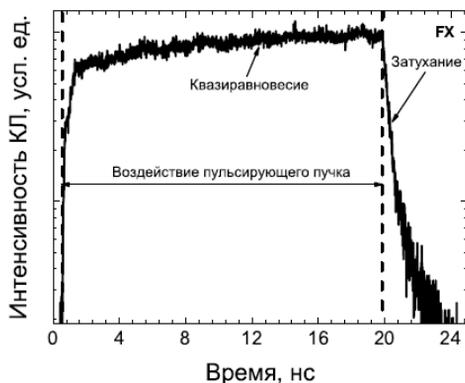
Ключевые слова: математическое моделирование, электронный зонд, однородные полупроводники, неравновесные неосновные носители заряда, качественные оценки.

Введение

При времяпролётных исследованиях диффузии и излучательной рекомбинации носителей заряда, генерированных остро сфокусированным электронным пучком, электронным зондом, используются образцы, покрытые непроницаемой для КЛ излучения маской, имеющей круглые отверстия различного диаметра. Катодолюминесцентное (КЛ) излучение возбуждается в центре отверстия при помощи пульсирующего электронного зонда и регистрируется в

области спектра, характерной для излучательной рекомбинации в исследуемом полупроводнике.

В процессе облучения в образце устанавливается квазиравновесие между процессами генерации и рекомбинации, затем электронный пучок отклоняется системой бланкирования, возбуждение прекращается и наблюдается затухание КЛ (см. рисунок), характер которого зависит в общем случае только от известного радиуса отверстия, времени жизни генерированных зондом носителей заряда τ (которое может быть получено из измерений в открытой области образца вдали от края маски) и коэффициента диффузии D , характеризующего движение генерированных носителей под маску [1, 2]. Это позволяет при наличии математической модели, описывающей спад интенсивности КЛ, на основе анализа экспериментальных данных получать оценки электрофизических параметров полупроводника путем решения соответствующей обратной задачи. Ранее [3, 4] был проведён качественный анализ дифференциальных уравнений диффузии неравновесных неосновных носителей заряда, генерированных электронным зондом. Полученные результаты позволяют говорить о корректности рассмотренной задачи, однако некоторые из оценок нуждаются в уточнении. В настоящей работе такие исследования продолжены и получены уточнённые оценки рассматриваемого процесса.



Постановка задачи

Объектом рассмотрения в настоящей работе является анализ результатов, изложенных в [3] и [4], изучение вопросов, связанных с корректностью математической модели времяпролётной КЛ, и получение уточнённых качественных оценок диффузии ННЗ.

Результаты

В состоянии квазиравновесия при наличии внешних воздействий на полупроводник для математической модели в правой части диф-

ференциального уравнения диффузии [3, 4] будем иметь различные функции генерации $\rho_1(x, y, z)$ и $\rho_2(x, y, z)$, описывающие концентрации генерированных в единицу времени ННЗ и, соответственно, два различных решения уравнения диффузии $n_1(x, y, z)$ и $n_2(x, y, z)$. Получено, что если $|\rho_2(x, y, z) - \rho_1(x, y, z)| \leq \varepsilon$, где ε – неотрицательная константа, то в условиях квазиравновесия для соответствующих концентраций ННЗ справедлива следующая оценка: $|n_2(x, y, z) - n_1(x, y, z)| \leq C\varepsilon$, где $C = \lambda^2 / 2$, $\lambda^2 = D\tau$. Такая оценка при этих условиях получена и для изменения концентрации ННЗ $c(x, y, z, t)$ на спаде сигнала КЛ: $|c_2(x, y, z, t) - c_1(x, y, z, t)| \leq C\varepsilon$. При этом корректность модели очевидна.

Выводы

Получены оценки влияния нестационарных условий облучения электронным зондом на распределение генерированных неравновесных носителей заряда после их диффузии в однородных полупроводниковых материалах. Рассмотрение проведено для условий, реализующихся в методе времяпролётной КЛ.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ № 19-00271.

Список использованных источников

1. Noltemeyer M., Bertram F., Hempel T., Bastek B., Polyakov A.N., Christen J., Brandt M., Lorenz M., Grundmann M. Excitonic transport in ZnO // Journal of Materials Research. 2012, vol. 27, issue 17, pp. 2225–2231.
2. Поляков А.Н., Noltemeyer M., Hempel T., Christen J., Степович М.А. Като-долюминесцентные экспериментальные исследования транспорта экситонов в нитриде галлия // Известия РАН. Серия физическая. 2012, т. 76, № 9, с. 1082–1085.
3. Тургин Д.В., Серегина Е.В., Степович М.А. Качественный анализ одного класса дифференциальных уравнений тепломассопереноса в конденсированном веществе // Проблемы математического анализа: Межвузовский сборник. 2020, вып. 104, с. 149–156.
4. Степович М.А., Тургин Д.В., Серегина Е.В. О корректности математических моделей диффузии, обусловленной остро сфокусированным электронным зондом в однородном полупроводниковом материале // Итоги науки и техники. Современная математика и ее приложения. Тематические обзоры. 2021, т. 193, с. 122–129.

ON MATHEMATICAL MODELING AND QUALITATIVE ESTIMATIONS IN THE METHOD OF TIME-OF-FLIGHT CATHODOLUMINESCENCE

D.V. Turtin, M.A. Stepovich, N.V. Shcherbakov

Abstract. The results of mathematical modeling and qualitative estimates are described, which make it possible to estimate the distribution of nonequilibrium minority charge carriers generated by an electron probe after their diffusion in a homogeneous semiconductor material. The consideration is carried out for the conditions realized in the method of time-of-flight cathodoluminescence.

Key words: mathematical modeling, electron probe, homogeneous semiconductors, nonequilibrium minority charge carriers, qualitative assessments.

<https://doi.org/10.29003/m3086.MMMSEC-2022/115-118>

ПОТЕНЦИАЛЫ МЕЖАТОМНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР

Уварова Ольга Владимировна,

м.н.с.¹,

olga25v@gmail.com

Абгарян Каринэ Карленовна,

д.ф.-м.н., г.н.с.¹,

kristal83@mail.ru

Бажанов Дмитрий Игоревич,

к.ф.-м.н., с.н.с.¹, dima@kintech.ru

Уваров Сергей Игоревич,

м.н.с.¹,

servv25@gmail.com

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

Аннотация. В работе выполнен обзор потенциалов межатомного взаимодействия для изучения свойств структур с различными типами кристаллической решетки. Рассмотрены потенциал Терсоффа, потенциал MEAM, а также модифицированный потенциал 2NN MEAM.

Ключевые слова: кристаллическая структура, потенциал Терсоффа, потенциал MEAM, потенциал 2NN MEAM.

Введение

Изучение свойств кристаллических структур является одной из важнейших задач материаловедения. Верное воспроизведение поведения структуры в рамках молекулярно-динамического моделирования во многом зависит от правильного выбора потенциала, с помощью которого выполняется расчет энергии системы и других характеристик структуры, таких как объемный модуль упругости, модуль сдвига и др.

Постановка задачи и метод решения

Целью настоящей работы является выявление особенностей выбора потенциала межатомного взаимодействия для структур с различным строением кристаллической решетки. С помощью выбранного потенциала будет рассчитываться энергия системы для дальнейшего использования значений энергии при молекулярно-динамическом моделировании. Полная энергия рассматриваемой структуры E рассчитывается как совокупность вкладов энергий каждого атома структуры E_i [1, 2].

$$E = \sum_i E_i.$$

Для расчета энергии необходимо построение потенциала межатомного взаимодействия. Было выявлено, что с помощью потенциала Терсоффа хорошо моделируются полупроводниковые структуры с ковалентным типом связи, для чего требуется подбор 11 параметров потенциала (для однокомпонентных соединений) или 30 параметров (для двухкомпонентных соединений). В рамках работ [1, 2] с помощью потенциала Терсоффа проводился расчет энергии таких соединений с кубическим типом решетки, как Si, C, Ge.

Расчет когезионной энергии подразумевает получение значения энергии одного атома в присутствии третьего атома. Таким образом, учитываются вклады соседних атомов, окружающих структуру. В случае с моделированием соединений с алмазной структурой, достаточно задать значение радиуса отсечения, которое позволит учитывать воздействие соседних атомов, лежащих на определенном расстоянии, и не учитывать воздействие остальных атомов, расположенных на большем расстоянии.

Для описание структур металлов с кристаллическими решетками hcp (гексагональная плотноупакованная) и fcc (гранцентрированная) подходит потенциал MEAM [3]. Он позволяет хорошо описы-

вать такие структуры, как Al, Mg, Cu. Для расчета значения когезионной энергии E_i с помощью MEAM также учитывается воздействие окружающих атомов, попадающих в радиус отсечения r_c .

$$E_i = F_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \bar{\phi}_{ij}(r_{ij}) S_{ij}$$

$$S_{ij} = \prod_{k \neq i, j} S_{ikj} f_c\left(\frac{r_c - r_{ij}}{\Delta r}\right),$$

где ρ_i – электронная плотность, r_{ij} – расстояние между атомами

Однако в [4] было установлено, что при использовании потенциала MEAM для металлов с кристаллической структурой бсс (объемноцентрированная), рассчитанное значение энергии существенно отличалось от экспериментальных значений. Такое отличие вызвано расположением второго ряда соседствующих атомов на расстоянии, превышающим расстояние до первого ряда соседствующих атомов, всего на 15%. Таким образом, атомы из второго ряда соседствующих атомов располагаются достаточно близко, они также оказывают воздействие на рассматриваемую группу атомов и такое воздействие необходимо учитывать. Модифицированный потенциал 2NN MEAM подходит для моделирования таких металлов, имеющих бсс структуру, как Fe, Cr, Mo, W, V, Nb и Ta.

Расчет когезионной энергии приобретает вид [5]:

$$E(r) = F(\rho(r)) + \frac{1}{2} Z_1 \phi(r) + \frac{S}{2} Z_2 \phi(\alpha r),$$

где Z_1 – количество соседствующих атомов из первого ряда, Z_2 – количество соседствующих атомов из второго ряда, α – соотношение расстояний между первым и вторым рядом соседствующих атомов, S – функция отсечения для учета взаимодействия атомов, находящихся во втором ряду соседствующих атомов.

Выводы

В рамках данной работы был выполнен обзор потенциалов, подходящих для изучения свойств кристаллических структур, имеющих следующий тип решетки: объемноцентрированная (бсс), гексагональная плотноупакованная (hcp) и гранцентрированная (fcc), кубическая. Для моделирования полупроводниковых структур с кубической решеткой хорошо подходит потенциал Терсоффа. Для металлов, имеющих структуры hcp и fcc – потенциал MEAM. Для

металлов, имеющих структуру бcc – модифицированный потенциал 2NN MEAM.

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

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. Abgaryan, K.K., Grevtsev, A.V. Parametric Identification of Tersoff Potential for Two-Component Materials.// Smart Innovation, Systems and Technologies, 2020, 173, с. 257–268. Scopus.DOI: 10.1007/978-981-15-2600-8_19
3. Jelinek B. et al. MEAM potential for Al, Si, Mg, Cu, and Fe alloys //APS South-eastern Section Meeting Abstracts. – 2010. – Т. 77. – С. MB. 003.
4. Lee B. J. et al. Second nearest-neighbor modified embedded atom method potentials for bcc transition metals //Physical Review B. – 2001. – Т. 64. – №. 18. – С. 184102.
5. Bangwei Z. et al. An analytic MEAM model for all BCC transition metals // Physica B: Condensed Matter. – 1999. – Т. 262. – №. 3–4. – С. 218–225.

POTENTIAL INTERATOMIC INTERACTIONS FOR STUDYING OF CRYSTAL STRUCTURES PROPERTIES

Uvarova Olga Vladimirovna,

Junior Researcher¹, e-mail: olga25v@gmail.com

Abgaryan Karine Karlenovna,

Principal scientist¹, e-mail: kristal83@mail.ru

Bazhanov Dmitry Igorevich,

Senior Researcher¹ e-mail: dima@kintech.ru

Uvarov Sergey Igorevich,

Junior Researcher¹, 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 presents a review of the potentials of interatomic interaction for studying the properties of structures with different types of crystal lattice. Tersoff potential, MEAM potential, and modified 2NN MEAM potential are considered.

Key words: crystal structure, Tersoff potential, MEAM potential, 2NN MEAM potential.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОХЛАЖДЕНИЯ ОДНОКОМПОНЕНТНОЙ СИСТЕМЫ ЛЕННАРД-ДЖОНСА СО СКОРОСТЯМИ, ПРИБЛИЖЕННЫМИ К ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО РЕАЛИЗУЕМЫМ

*Фархутдинов Альберт Ришатович,
аспирант¹,
farhutdinovalbert@yandex.ru*

¹Казанский (Приволжский) федеральный университет, г. Казань

Аннотация. В работе представлена методика моделирования охлаждения расплавов со скоростями, приближенными к экспериментально реализуемым.

Ключевые слова: молекулярная динамика, машинное обучение.

Скорость охлаждения γ , используемая при моделировании процессов охлаждения системы классическими методами молекулярной динамики, обычно составляет $\gamma \sim 10^{12}$ К/с. Однако, максимальные скорости охлаждения, реализуемые в эксперименте на данный момент, как правило, не превышают $\gamma \sim 10^7$ К/с [1]. Моделирование глубокого переохлаждения системы $N \sim 10^4$ частиц при таких значениях γ будет длиться месяцы и годы. Следовательно, разработка методов, позволяющих моделировать многочастичную систему в экспериментально реализуемых условиях, является актуальной задачей. Решение этой задачи позволит интерпретировать реальные эксперименты по фазовым переходам с помощью методов моделирования молекулярной динамики. Цель данной работы заключалась в развитии оригинальной методики моделирования охлаждения расплавов со скоростями, приближенными к экспериментально реализуемым.

Рассматривается система из $N = 1372$ частиц, взаимодействие между которыми описывается потенциалом Леннард-Джонса [2]:

$$U(r_{ij}) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (1)$$

где r_{ij} – расстояние между частицами i и j . Температура системы меняется в диапазоне от $1.3\varepsilon/k_B$ до $10^{-4}\varepsilon/k_B$. Плотность системы $\rho \approx 0.75\sigma^{-3}$ поддерживается постоянной. Интегрирование уравнений движения осуществляется с помощью скоростного алгоритма Верле [3] с временным шагом $\Delta t = 0.005\tau = 0.005\sigma(m/\varepsilon)^{1/2}$, где m – масса частицы. Скорость охлаждения γ принимает значение $\gamma = 4 \cdot 10^{-4}\varepsilon/k_B\tau \sim 10^{10}$ К/с.

На примере системы Леннард-Джонса показано, что оригинальная методика позволяет восстановить интересующие состояния системы с заданной температурой T_2 , идентичные получаемым при охлаждении с произвольно заданными скоростями, начиная с температуры T_1 , не прибегая к моделированию такого охлаждения на всём диапазоне температур $[T_1; T_2]$.

Работа была поддержана грантом Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (проект № 20-1-2-38).

Список использованных источников

1. Ryltsev R.E. et al. Cooling rate dependence of simulated $\text{Cu}_{64.5}\text{Zr}_{35.5}$ metallic glass structure // The Journal of Chemical Physics, 2016. Vol. 145, p. 034506.
2. Jones J.E. On the Determination of Molecular Fields. I. From the Variation of the Viscosity of a Gas with Temperature // Proceedings of the Royal Society A, 1924, Vol. 106, p. 441.
3. Swope W.C. et al. A computer simulation method for the calculation of equilibrium constants for the formation of physical clusters of molecules: Application to small water clusters // The Journal of Chemical Physics, 1982. Vol. 76, p. 637.

A MONATOMIC LENNARD-JONES SYSTEM COOLING SIMULATION WITH RATES CLOSE TO THE EXPERIMENTALLY IMPLEMENTED ONES

A.R. Farkhutdinov

Abstract. A technique for melts cooling simulation at rates close to those experimentally implemented ones is presented in this work.

Key words: molecular dynamics, machine learning.

УДК 536.2.01, 536.21, 539.219.3

<https://doi.org/10.29003/m3088.MMMSEC-2022/120-123>

ТЕПЛОФИЗИКА ДЛЯ НАНОЭЛЕКТРОНИКИ

Хвесьюк Владимир Иванович,

д.т.н., профессор,

khvesyuk@bmstu.ru, +7 (916) 873-31-08

МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва

Аннотация. Показано, что изучение процессов переноса тепла в наноструктурах требует развития принципиально нового направления теплофизики. Обсуждается состояние изучения теплофизических проблем нанoeлектроники.

Ключевые слова: электроника, теплофизика наноструктур, статистическая физика.

Создание наноэлектронных устройств обеспечит существенное увеличение памяти, а также скоростей обработки и передачи информации. Это очень важно для создания больших баз информации, «умных» объектов различного уровня.

Но уменьшение размеров до наномасштабов ставит перед теплофизикой серьёзные проблемы, так как ведёт к резкому снижению электропроводности и теплопроводности полупроводников. В условиях роста тепловыделения и снижения теплопроводности очень сложно обеспечить оптимальные температурные условия для полупроводников. В данном сообщении обсуждается, что надо сделать, и что делается для решения соответствующих проблем.

1. Первое – необходимость разработки нового направления – теплофизики наноструктур. Очевидно, что средства классической теплофизики непригодны для изучения тепловых процессов в наноструктурах. По определению, теплофизикой наноструктур называется область теплофизических явлений, изучающая термодинамические и транспортные свойства твёрдых тел, размеры которых порядка, меньше или существенно меньше длин свободного пробега переносчиков тепла в макроскопических телах из изучаемого материала. Из этого следует принципиальное отличие нового направления от классической теплофизики. Последняя является, в основном, феноменологической теорией, которая справедлива при обратном соотношении между длинами свободного пробега и размерами твёрдых тел. Поэтому новое направление не может использовать феноменологические законы, типа закона Фурье. Оно должно применять методы статистической физики, учитывающей микроскопическое строение веществ. Однако, статистическая физика этого направления также отличается от классической статистической физики. Классическая теплофизика изучает безграничные системы, теплофизика наноструктур обязана учитывать границы. Появляются принципиально новые задачи и совершенно новые методы их решения и, соответственно, новые результаты. Примеры. Первое – так называемый баллистический режим переноса тепла, когда частоты взаимодействий переносчиков тепла с границами, например, наноплёнок значительно больше, чем друг с другом. Новая задача, в рамках которой необходимо учитывать шероховатости границ. Другие задачи, хорошо известные в электронике, – размерное квантование акустических фононов, приводящее к изменению энергетического спектра фононов в наноструктурах.

2. Несмотря на наличие многих очень важных и интересных результатов, в целом, состояние разработки этого нового направления теплофизики далеко от завершения, если учитывать, что главной задачей является обеспечение высокого уровня предсказательной достоверности теории.

3. Важным достижением нынешнего века было завершение создания методов расчёта теплопроводности твёрдых тел «из первых принципов», то есть без привлечения «подгоночных» параметров [1]. Но использование этой теории к наноструктурам пока не имеет хороших результатов, так как не решены граничные проблемы. Отдельно следует сказать о методах расчёта теплопроводности графеновых нанолент, которые могут стать основой углеродной наноэлектроники. Методы развиты с учётом граничных условий [2]. Отстаёт эксперимент – отсутствуют данные для сравнения.

Графен имеет большие преимущества по сравнению с кремнием или арсенидом галлия: на порядок более высокая теплопроводность и на несколько порядков более высокая подвижность электронов.

4. Изучение теплового состояния транзисторов. Пока это только транзисторы на кремнии относительно больших размеров [3, 4]. Развиваются самосогласованные методы с учётом ряда процессов. Это трёхмерные распределения электрического поля и температур внутри транзистора, динамика движущихся в этом поле электронов, включая процессы генерации и удаления тепла и оптических фононов. В процессе исследований обнаружено образование так называемых «горячих пятен», вблизи стока транзистора. В этой области возникает пик электрического поля, порядка 50 кВ/см. Температура в пятне достигает 700К. Пока неясно, как охлаждать это пятно. Интересно, что в этих условиях обнаружился новый переноса тепла – так называемая нелокальная теплопроводность, когда электроны получают энергию в зоне пика электрического поля, а передают её в отдалённых от этого пика микрообъёмах. Это связано с тем, что ширина пика заметно меньше средних длин свободных пробегов электронов.

5. Внимательно и теоретически, и экспериментально изучаются контактные тепловые сопротивления (сопротивления Капицы) [5,6]. Таких контактов огромное количество в электронных схемах, и они играют важную роль в переносе тепла внутри электронных схем. Существует большая литература по переносу тепла в периодиче-

ских многослойных системах, состоящих из слоёв различных материалов, так называемых сверхрешёток. Здесь следует отметить два прорыва. Во-первых, обнаружение когерентного переноса тепла [7]. Он обнаружен при достаточно тонких слоях материалов и приводит к повышенному переносу тепла. Во-вторых, наша группа создала более свершенный метод расчёта переноса тепла в таких системах. Это позволило в десять раз и более (с 30К до 300К) расширить температурный диапазон, в котором обеспечивается хорошее согласие теории и эксперимента [8, 9].

Список использованных источников

1. Mingo N. et al. Length – Scale Dependent Phonon Interactions Springer NY 2014, pp 137–174.
2. Hu J., Ruan X. and Chen Y.P. Nano Lett. 2009 Vol. 9, 2730.
3. Ravela K. et al. IEEE Transections of Electron Devices 2008 Vol. 55, № 6.
4. Rowlette J.E. and Goodson K.E. IEEE Transections of Electron Devices 2008. Vol. 55, № 6.
5. Chen J. Rev. Mod. Phys. 2022 Vol. 94, 025002.
6. Swartz E.T. and Pohl R.O. Rev. Mod. Phys., 1989. Vol. 61. P. 605.
7. Luckyanova M.N. et al. Science 2012. Vol. 338, Issue 6109. P. 936–939.
8. Liu B., Khvesyuk V.I. Int. J. Heat Mass Transfer, 2020. Vol. 159, 120117.
9. Liu B., Guo Y., Khvesyuk V.I., Barinov A.A. and Wang M. Nano Res. 2022. Vol. 15. pp. 9492–9497.

THERMAL PHYSICS FOR NANO ELECTRONICS

V.I. Khvesyuk

Abstract. In this work is shown that investigation of phenomena heat transport in nanostructures needs development fundamentally new direction of thermal physics – thermal physics of nanostructures.

Keywords: electronics, thermal physics of nanostructures, statistical physics.

ДЛИНЫ СВОБОДНЫХ ПРОБЕГОВ ФОНОНОВ В НАНОПЛЁНКАХ

Хвесюк Владимир Иванович,

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

Чжэн Цзяюэ,

магистр, zhengjiayue959@gmail.com

Баринов Александр Алексеевич,

инженер, barinov@bmstu.ru, +7 (985) 950-88-67

МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва

Аннотация. В работе впервые представлены метод и результаты расчётов длин свободных пробегов фононов в наноплёнках с учётом шероховатостей поверхностей плёнок. Принципиальная важность таких расчётов заключается в необходимости этих данных для определения теплопроводности.

Ключевые слова: фононы, наноплёнки, длина пробега, эффективная теплопроводность.

Введение

Для наноструктурированных полупроводниковых материалов характерный размер сравним со средней длиной свободного пробега. В это время закон теплопроводности Фурье уже неприменим, и на процесс теплопроводности фононов легко влияют граничные и межфазные эффекты [1–3]. В данной работе основное внимание уделяется влиянию шероховатости поверхности нанопленки и геометрических свойств пленки на длину свободного пробега фононов в нанопленке, и впервые предложен расчетный метод определения свободного пробега фононов в наноплёнках

1. Модель шероховатости и рассеяние фононов

Сначала сформулируем модель наноплёнки с шероховатой границей (рис. 1). Вводится двумерная система координат xOy , ось Ox – вдоль плёнки, ось Oy – поперёк плёнки. Под нижней и верхней границами плёнки будем понимать средние линии (плоскости) шероховатостей. Расстояние между ними равно h . Ось Ox совпадает

ет со средней линией нижней шероховатой границей. Изучается динамика взаимодействия фононов с элементами шероховатостей, имеющими различные углы наклона φ относительно средней линии нижней шероховатой границы. Принимается, что любой фонон взаимодействует с любым элементом шероховатой поверхности в точке пересечения этого элемента со средней линией нижней шероховатой границы.

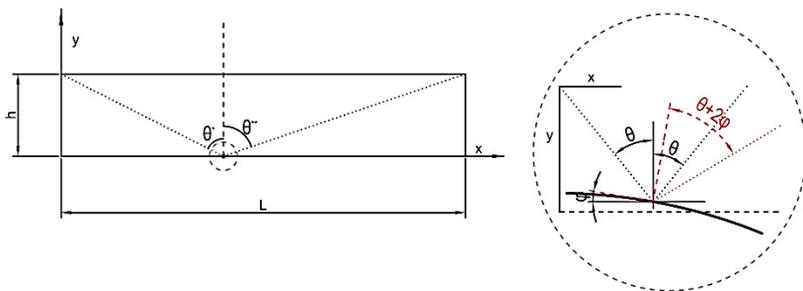


Рис. 1. Модель шероховатости и рассеяние фононов

Теплопроводность твёрдых неметаллических тел согласно кинетической теории записывается следующим образом:

$$k_{\alpha} = \frac{1}{3} \sum_{qs} C_{qs} v_{qs} l_{qs} \cdot \quad (1)$$

Здесь суммирование ведётся по типам фононов s и волновым векторам \mathbf{q} , C – теплоёмкость, v – групповая скорость фононов, l – длина пробега, α – направление, в котором распространяется тепловой поток.

2. Длина свободного пробега

Длина пробега фонона между нижней и верхней границами плёнки определяется по формуле:

$$l_{ph}(\theta, x, \varphi) = \frac{h}{\cos(-\theta \pm 2\varphi)}, \quad (2)$$

$$\theta = \theta(x, x') = \tan^{-1}\left(\frac{x' - x}{h}\right). \quad (3)$$

Здесь θ – угол падения относительно нормали к средней линии шероховатости, φ – угол наклона неровности относительно средней линии шероховатости нижней границы плёнки, x – точка падения фонона на нижнюю поверхность плёнки, x' – точка излучения фононов верхней границей плёнки.

Затем последовательно проводится интегрирование по x и по θ :

$$\begin{aligned} \langle l_{ph} \rangle_{\theta} (x, \varphi) &= \\ &= \frac{h}{\theta^{**} - \theta^* - 4\varphi} \int_{\frac{\pi}{2} - \theta^{**} + 2\varphi}^{\frac{\pi}{2} - \theta^* - 2\varphi} \frac{hd\theta}{\cos(-\theta \pm 2\varphi)} = \frac{h}{\theta^{**} - \theta^* - 4\varphi} \left\{ \ln \left| \tan \left(\frac{\frac{\pi}{2} - \theta^* - 2\varphi}{2} \right) \right| - \ln \left| \tan \left(\frac{\frac{\pi}{2} - \theta^{**} + 2\varphi}{2} \right) \right| \right\} \end{aligned} \quad (4)$$

$$\langle \langle l_{ph} \rangle_{\theta} \rangle_x (\varphi) = \frac{1}{L} \int_0^L \langle l_{ph} \rangle_{\theta} (x, \varphi) dx, \quad (5)$$

где θ^* и θ^{**} – это минимальный угол наклона, излучаемый торцом плёнки, $\theta^* = \tan^{-1}(-x/h)$, $\theta^{**} = \tan^{-1}[(L-x)/h]$.

Находим среднее значение угла φ и соответствующее ему значение $\gamma' = 0.051$.

$$\langle \varphi \rangle = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} w(\varphi) \cdot \varphi d\varphi. \quad (6)$$

Когда $|\varphi| \geq 0.5$, получаем $w(\varphi) = 0$, поэтому интеграл для φ должен быть $[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$.

$$\langle \langle \langle l_{ph} \rangle_{\theta} \rangle_x \rangle_{\varphi, \gamma'} = \int_{-1/2}^{1/2} w(\gamma', \varphi) \cdot \langle \langle l_{ph} \rangle_{\theta} \rangle_x (\varphi) d\varphi. \quad (7)$$

Здесь $w(\varphi) = (\gamma\sqrt{2\pi})^{-1} \exp(-0.5\varphi^2\gamma^{-2}) \cos^{-2}(\varphi)$; γ – среднеквадратичный градиент наклона профиля, равный отношению среднеквадратичной шероховатости σ и длины корреляции l : $\gamma = \sigma/l$; рассмотрена атомарно гладкая поверхность $1.7 \leq \gamma \cdot 10^2 \leq 8.5$.

3. Результаты расчета и вывод

В данной работе впервые предложен вычислительный метод расчета свободного пробега в тонкой пленке и сформулирована модель тонкой пленки с шероховатой поверхностью. По результатам расчетов (рис. 2) можно сделать следующий вывод: с увеличением толщины и длины пленки, длина свободного пробега будет увеличиваться.

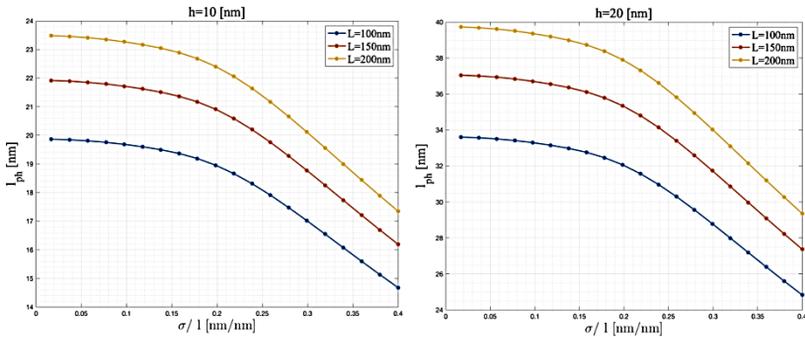


Рис. 2 Длины свободных пробегов как функция σ / l .

Список использованных источников

1. Barinov A.A., et al. Phys. Atom. Nucl., 2020. Vol. 83. P. 1538–1548.
2. Liu B., et al. Int. J. Mech. Sci. 2022. Vol. 218. P.10699.
3. Barinov A.A., Liu B., Khvesyuk V.I. J. Phys.: Conf. Ser., 2022. Vol. 2150. N. 012021.

MEAN FREE PATHS OF PHONONS IN NANOFILMS

V.I. Khvesyuk, J. Zheng, A.A. Barinov

Abstract. This work presents the new method and results of calculations of the mean free paths of phonons in nanofilms, considering the roughness of the surfaces of the films. Such calculations are extremely necessary to determine the thermal conductivity.

Keywords: phonons, nanofilms, mean free paths, effective thermal conductivity.

КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАГНИТООПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ОДНОМЕРНЫХ ПРОВОДОВ ОКСИДОВ КОБАЛЬТА НА ПОВЕРХНОСТИ ПЛАТИНЫ

Цысарь Ксения Михайловна,

к.ф.-м.н., доцент¹, smelova_k_m@mail.ru

Бажанов Дмитрий Игоревич,

к.ф.-м.н., доцент^{1, 2, 3}, dima@kintechlab.com

Смелова Екатерина Михайловна,

к.ф.-м.н., ассистент¹, smelova_e_m@mail.ru

¹МГУ имени М.В.Ломоносова, г. Москва

²ФИЦ ИУ РАН, г. Москва

³МАИ, г. Москва

Аннотация. В работе выполнено квантово-механическое моделирование магнитооптических свойств одномерных нанопроводов оксида кобальта, сформированных на ступенчатой поверхности платины. Расчеты показали взаимосвязь между оптическими характеристиками поверхностных оксидных кобальтовых нанопроводов и их магнитными свойствами.

Ключевые слова: квантово-механическое моделирование, магнитооптические свойства, одномерные оксиды, нанопровода.

Введение

В настоящее время взаимодействие электромагнитного (ЭМ) поля с низкоразмерными структурами представляет особый интерес для различных областей нанопотоники и спинтроники [1]. Наиболее востребованным направлением является исследование взаимодействия ЭМ поля с магнитными металлическими наноструктурами, обладающими несколькими состояниями магнитного упорядочения. Возможность контроля и изменения магнитного состояния нанобъекта по средством электромагнитного излучения активно исследуется с целью создания принципиально новых устройств хранения и передачи информации.

Моделирование магнитооптических свойств

В данной работе проведено квантово-механическое исследование магнитооптических свойств оксидного нанопровода Co, расту-

щего на ступени вицинальной поверхности Pt(111). Теоретическое исследование проведено с помощью квантово-механического кода VASP [2]. Данный программный код предназначен для работы в среде параллельного программирования для класса многопроцессорных задач, что значительно сокращает расчетное время при исследовании сложных соединений и кристаллических структур. Так как в квантово-механических расчетах не используются подгоночные параметры, результаты исследований обладают высокой расчетной точностью. Исследование магнитных свойств нанопроводов оксида Со обнаружило существование в них двух состояний намагниченности: антиферромагнитного и ферромагнитного. В зависимости от структуры поверхности Pt подложки, типа ступени вицинальной поверхности и степени окисления поверхности платины атомное строение и электронная структура кобальтового провода изменяются, как результат меняются и его магнитные свойства. В том числе, нами обнаружено изменение магнитного порядка, соответствующего основному состоянию провода, в зависимости от степени окисления поверхности платиновой подложки. В зависимости от степени окисления поверхности платины провод оксида кобальта в основном состоянии будет либо ферромагнитным, либо антиферромагнитным. Наши квантово-механические расчеты оптических характеристик нанопроводов оксида Со, таких как спектры преломления и отражения, выявили зависимость оптических свойств нанопроводов от состояния их магнитного упорядочения. Нами обнаружено отличие спектров отражения и преломления для ферромагнитного и антиферромагнитного состояния нанопровода оксида Со на поверхности платины.

Выводы

В работе выполнено квантово-механическое моделирование магнитооптических свойств нанопроводов оксида кобальта на поверхности ступенчатой поверхности платины. Расчеты обнаружили сильную зависимость оптических характеристик нанопроводов оксида кобальта от их магнитных свойств.

Результаты получены с использованием услуг Центров коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса» НИЦ «Курчатовский институт» и «Межведомственный суперкомпьютерный центр Российской академии наук» МСЦ РАН.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. López-Ortega A. , et al. “Enhanced magnetic modulation of light polarization exploiting hybridization with multipolar dark plasmons in magnetoplasmonic nanocavities” *Light Sci Appl* 2020, 9, 49 URL <https://doi.org/10.1021/nl404054v>
2. Kresse G. and J. Furthmuller, “Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis se” *Phys. Rev. B*, 1996 54,11169. URL [10.1103/PhysRevB.54.11169](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.11169)

QUANTUM-MECHANICAL SIMULATION OF THE MAGNETO-OPTICAL PROPERTIES OF ONE-DIMENSIONAL COBALT OXIDE NANOWIRE ON THE PLATINUM SURFACE

K.M. Tsysar, D.I. Bazhanov, E.M. Smelova

Abstract. Quantum-mechanical modeling of the magneto-optical properties of one-dimensional cobalt oxide nanowires formed on a stepped surface of platinum has been performed. Calculations have shown the relationship between the optical characteristics of surface cobalt oxide nanowires and their magnetic properties.

Keywords: quantum mechanical simulation, magneto-optical properties, one-dimensional oxides, nanowires.

4. D

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

ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЕ В БЕЗДИСЛОКАЦИОННЫХ МОНОКРИСТАЛЛАХ КРЕМНИЯ

Простомолотов Анатолий Иванович,

*д.т.н., доцент, ведущий научный сотрудник¹,
aprosto@inbox.ru, +7 (495) 434-41-53*

Верезуб Наталия Анатольевна,

*к.ф.-м.н., доцент, старший научный сотрудник¹,
verezub@ipmnet.ru, +7 (495) 434-41-53*

¹ИПМех РАН, г.Москва

Аннотация. Обсуждаются физические представления о процессах дефектообразования в бездислокационных монокристаллах кремния. Рассматриваются математические модели этих процессов для различных температурных диапазонов, реализуемых при их выращивании. Вблизи температуры кристаллизации подробно рассматриваются процессы быстрой рекомбинации и переноса собственных точечных дефектов (вакансий и межузельных атомов кремния), результаты расчетов которых верифицируются экспериментальными данными карты времени жизни носителей в монокристалле кремния диаметром 150 мм, выращенном методом Чохральского.

Ключевые слова: монокристалл, кремний, СТД, рекомбинация, моделирование.

Введение

К началу 1980-х годов накопилось достаточно много экспериментальных данных о дефектах, названных D-дефектами, образующимися из избыточных вакансий при выращивании монокристаллов методом зонной плавки с очень большими скоростями вытягивания V_p . Они нашли отражение в фундаментальной статье В.В. Воронкова [1], в которой предложена физическая концепция взаимодействия «собственных точечных дефектов» – СТД (вакансий- v и межузельных атомов- i кремния) применительно к процессу выращивания монокристаллического бездислокационного кремния. Расчеты в [1] проведены на основе одномерной стационарной модели v - i -рекомбинации. Данные об осевом температурном градиенте в кристалле G считаются известными и задаются как аналитически, так и из эксперимента. Они позволяют оценить тип и распределение остаточных СТД-концентраций в растущем кристал-

ле при заданной скорости вытягивания V_p в зависимости от величины $\square = V_p/G$. Значительная остаточная концентрация вакансий возникает, если скорость роста превышает критическую скорость $(V_p)_{crit} = \square_{crit} \times G$ и она увеличивается при возрастании $V_p/(V_p)_{crit}$. Концентрация межузельных атомов при $V_p < (V_p)_{crit}$ является убывающей функцией от $V_p/(V_p)_{crit}$. Концентрации STD дефектов (вакансий при $V_p \gg (V_p)_{crit}$ и межузельных атомов при $V_p \ll (V_p)_{crit}$) оцениваются величиной $\sim 10^{14} \text{ см}^{-3}$.

Математическая модель и результаты расчетов

Аннигиляция вакансий и межузельных атомов вблизи ФК в значительной степени определяет их последующую миграцию и распределение в кристалле. Скорость аннигиляции равна разности между скоростями прямой реакции рекомбинации и обратной реакции термической генерации пар STD. Скорость реакции рекомбинации пропорциональна произведению концентраций взаимодействующих STD. Скорость обратной реакции связана со скоростью прямой реакции законом действующих масс. Таким образом, скорость аннигиляции записывается в виде: $\omega = K_{iv}(C_v C_i - C_{ve} C_{ie})$, где K_{iv} – коэффициент скорости реакции (коэффициент рекомбинации). Концентрации $C_v(r, z, t)$ – вакансий и $C_i(r, z, t)$ – межузельных атомов удовлетворяют диффузионно-рекомбинационным уравнениям:

$$\frac{\partial C_v}{\partial t} = \text{div}(D_v \nabla C_v) - V_p \frac{\partial C_v}{\partial z} - K_{iv}(C_v C_i - C_{ve} C_{ie}),$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \text{div}(D_i \nabla C_i) - V_p \frac{\partial C_i}{\partial z} - K_{iv}(C_v C_i - C_{ve} C_{ie}).$$

Коэффициенты диффузии (D_v, D_i) и равновесные концентрации вакансий и межузельных атомов (C_{ve}, C_{ie}) удобно задавать с использованием их значений в точке плавления (T_m) следующим образом:

$$D_v(T) = D_{vm} \exp \exp \left(-\frac{E_{vD}}{kT} + \frac{E_{vD}}{kT_m} \right), D_i(T) = D_{im} \exp \exp \left(-\frac{E_{iD}}{kT} + \frac{E_{iD}}{kT_m} \right),$$

$$C_{ve}(T) = C_{vm} \exp \exp \left(-\frac{E_v}{kT} + \frac{E_v}{kT_m} \right), C_{ie}(T) = C_{im} \exp \exp \left(-\frac{E_i}{kT} + \frac{E_i}{kT_m} \right).$$

Индекс m соответствует значению данной величины при температуре плавления (кристаллизации) T_m . Коэффициент рекомбинации записывается в виде:

$$K_{iv} = A_{iv}(D_v + D_i) \exp \exp \left(-\frac{E_{rec}}{kT} \right),$$

где $A_{iv} = 4\pi r_{cap}$ (r_{cap} – радиус, E_{rec} – энергия рекомбинации). Здесь величины E_{vD}, E_{iD} – энергии активации для диффузии, а E_v, E_i –

энергии образования дефектов. В формулах использованы константы: температура плавления кремния $T_m = 1683$ К и постоянная Больцмана $k = 8.625 \times 10^{-5}$ эВ/К. В данном случае требуется задать 9 параметров. Параметра рекомбинации E_{rec} не превышает 1.5 эВ, а радиус рекомбинации r_{cap} равен 3.0×10^{-8} см. Для процесса выращивания монокристаллов кремния диаметром 150 мм из тигля диаметром 18 дюймов выполнено сравнение с экспериментальным кристаллом, выращенным и затем исследованным на наличие микродефектов. Данные для сравнения представлены на Рис. 1: профиль скорости вытягивания (а), расчетные изолинии C_{IV} после v - i -рекомбинации (б), и экспериментальная картина микродефектов (в), здесь L_S – % доля выращенного кристалла. Сравнение показывает, что конфигурация переходов от вакансионной к межузельной моде по данным карты времени жизни соответствует аналогичным переходам на расчетной картине изолиний. Эти переходы вызваны значительным уменьшением V_p от начала процесса до 50%-й стадии и, соответственно, уменьшением параметра l_a до значений, меньших l_{crit} , соответствующих переходу от вакансионного к межузельному ростовому режиму.

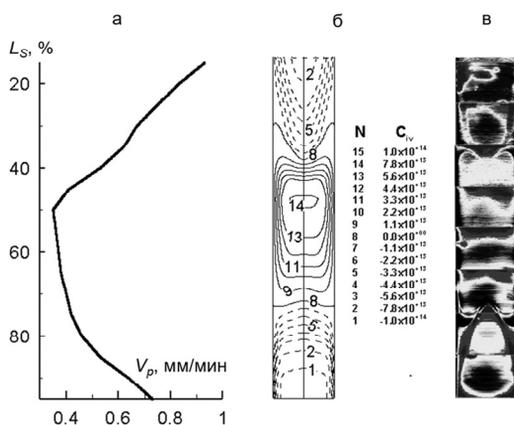


Рис. 1.

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

Список использованных источников

[1] Voronkov V.V. The mechanism of swirl defects formation in silicon // J. Crystal Growth. 1982. V. 59. P. 625–643.

DEFECT FORMATION IN DISLOCATION-FREE SILICON SINGLE CRYSTALS

N.A. Verezub, A.I. Prostomolotov

Abstract. The physical concepts of defect formation processes in dislocation-free silicon single crystals are discussed. Mathematical models of these processes are considered for various temperature ranges realized during their growth. Near the crystallization temperature, the processes of fast recombination and transfer of intrinsic point defects (vacancies and interstitial silicon atoms) are considered in detail, the calculation results of which are verified by the experimental data of the carrier lifetime map in a silicon single crystal 150 mm in diameter grown by Czochralski method.

Key words: single crystal, silicon, IPD defects, recombination, modeling.

УДК 004.3:004.9

<https://doi.org/10.29003/m3092.MMMSEC-2022/135-138>

СТРУКТУРА СОБСТВЕННЫХ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В CdTe

*Кобелева Светлана Петровна,
к.ф.-м.н., доцент, kob@misis.ru*

НИТУ «МИСИС», г. Москва

Аннотация. В работе анализируются имеющиеся на настоящий момент данные по составу и константам квазихимических реакций образования СТД в CdTe. Приведены расчеты конгруэнтно испаряющихся составов и границ области гомогенности соединения в различных моделях. Показано, что наиболее удовлетворительное согласие с имеющимися экспериментальными данными имеет модель, учитывающая помимо заряженных дефектов Френкеля по обеим подрешеткам и нейтральный дефект типа антиструктурного теллура или дивакансии кадмия.

Ключевые слова: собственные точечные дефекты, CdTe, константы квазихимических реакций, область гомогенности.

Введение

CdTe является одним из наиболее востребованных материалов в группе широкозонных соединений A_2B_6 . Собственные точечные дефекты (СТД) в этих материалах играют определяющую роль в формировании как электрических, так и оптических свойств. На CdTe приходится наибольшее число работ, изучающих состав и термодинамические свойства СТД. Это единственный материал из

группы, в котором в состав дефектов включены практически все возможные дефекты, включая дефекты Френкеля по обеим подрешеткам, антиструктурные дефекты и комплексы дефектов. Обзор теоретических и экспериментальных работ по моделям дефектообразования в этом материале на 2009 г. представлен в [1]. На настоящий момент нет общего для всех авторов представления ни о составе, ни о энергетических характеристиках СТД. На границе области гомогенности избыток компонента, определенного по анализу состава равновесной паровой фазы, т. е. включая как заряженные, так и электрически нейтральные СТД, превышает концентрацию свободных носителей заряда (СНЗ) практически на два порядка. Существует два подхода к объяснению этого различия. В [2] на основе измерения температурной зависимости парциальных давлений компонентов равновесной паровой фазы было показано, что в конгруэнтно испаряющихся составах необходимо учитывать нейтральный дефект, концентрация которого пропорциональна P_{Cd}^{-2} . Такая зависимость характерна для антиструктурного дефекта Te_{Cd} . Второй подход основан также на рассмотрении Te_{Cd} со стороны избытка теллура, но как донорного центра, компенсирующего акцепторный центр V_{Cd} [3]. Целью работы было сравнение имеющихся моделей с новыми или не учтенными ранее экспериментальными данными.

Расчет концентраций СТД

Концентрации СТД рассчитывали на основе метода квазихимических реакций (КХР). В этом методе концентрации дефектов выражают через константы соответствующих квазихимических реакций, парциальные давления компонентов паровой фазы и для заряженных дефектов – через концентрации свободных носителей зарядов. С учетом уравнения электронейтральности для m дефектов имеется $m+1$ уравнений и $m+2$ неизвестных. Парциальные давления компонентов паровой фазы хорошо известны [1], поэтому рассчитывают концентрации дефектов в зависимости от парциального давления компонента, в данной работе – парциального давления кадмия. Экспериментальные данные по зависимости отклонения от стехиометрии и концентрации СНЗ при 973 К взяты из [4]. Расчеты показали, что на стороне избытка теллура хорошее согласие с экспериментальными данными наблюдается у модели, учитывающей нейтральный дефект типа Te_{Cd} . Однако при этом этот дефект до-

норного типа и нейтральным он будет только в случае, если его энергетический уровень лежит ниже уровня Ферми (F). В дырочном материале с концентрацией дырок порядка 10^{17} см^{-3} при 973 К $E_C - F = 0,69 \text{ эВ}$, а теоретические оценки положения даже второго ионизационного уровня Te_{Cd} находятся на уровне 0,4 от дна зоны проводимости и во всех компенсационных моделях этот дефект рассматривается как двукратно ионизированный донор. Вместе с тем, в [5] было показано, что на обеих границах области гомогенности параметр решетки CdTe уменьшается, поэтому авторы предложили т. н. модель вакансионных пор. В [3] на основании теоретических расчетов было предложено рассматривать нейтральный дефект $Te_{Cd} - V_{Cd}$, но его концентрация на границе области гомогенности со стороны избытка теллура на 3 порядка меньше отклонения от стехиометрии. Дивакансия в расчетах не учитывалась, вместе с тем концентрация дивакансии также, как и концентрация антиструктурного дефекта, пропорциональна P_{Cd}^{-2} . Со стороны избытка кадмия также необходимо учитывать дефект нейтрального типа. Таковым также может быть дивакансия теллура.

Выводы

В работе выполнены расчеты зависимости концентраций STD, отклонения от стехиометрии и концентрации СНЗ в CdTe при 973 К. Показано, что со стороны избытка теллура отклонение от стехиометрии контролируется нейтральным дефектом типа Te_{Cd} или дивакансии кадмия. Экспериментальные данные по зависимости параметра решетки CdTe от отклонения от стехиометрии свидетельствуют в пользу вакансионной модели.

Список использованных источников

1. Triboulet R. Siffert P. CdTe and Related Compounds // Elsevier Science BV, 2010.
2. Медведев С.А., и др. Собственные точечные дефекты в нелегированном CdTe // Кристаллография, 28, 1983, с. 556-561.
3. Berding M. Annealing conditions for intrinsic CdTe // Appl. Phys. Lett., 74, 1999, p. 552–554.
4. Аветисов И.Х. Фазовые равновесия в системах А(II)В(VI) // Высокочистые вещества, Научный мир, Москва, 2018. с. 704–753.
5. Медведев С.А. и др. О природе точечных дефектов в нелегированном CdTe // Неорг. Материалы. , 9(3), 1973, с. 356–359.

STRUCTURE OF INTRINSIC POINT DEFECTS IN CDTE

S.P. Kobeleva

Abstract. The currently available data on the composition and constants of quasi-chemical reactions of IPD formation in CdTe are analyzed. Calculations of congruently evaporating compositions and boundaries of the compound homogeneity region in various models are presented. It is shown that the model that takes into account, in addition to charged Frenkel defects in both sublattices, also a neutral defect such as antisite tellurium or cadmium divacancies has the most satisfactory agreement with the available experimental data.

Key words: intrinsic point defects, CdTe, constants of quasi-chemical reactions, homogeneity region.

УДК 004.9

<https://doi.org/10.29003/m3093.MMMSEC-2022/138-140>

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ЛЕГИРОВАННОГО БОРОМ В-GA₂O₃

Окулич Евгения Викторовна,

младший научный сотрудник¹, eokulich@nifti.unn.ru

Окулич Виктор Иванович,

к.ф.-м.н., доцент², victorokulich@mail.ru

Тетельбаум Давид Исаакович,

д.ф.-м.н., профессор¹, tetelbaum@phys.unn.ru

¹*Нижегородский государственный университет*

им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород

²*НИУ филиал РАНХиГС, Нижний Новгород*

Аннотация. В работе представлены результаты расчётов методом DFT энергетических характеристик возможных конфигураций атома бора, внедрённого в Ga₂O₃ методом ионной имплантации. Получены результаты для разных типов междоузлий, проведена оценка энергетических барьеров диффузии В по междоузельным каналам.

Ключевые слова: оксид галлия, бор, ионная имплантация, DFT расчёты, междоузлия, междоузельные каналы, энергия миграции.

Введение

Ионная имплантация бора в Ga₂O₃ представляет интерес в связи с проблемой модификации свойств данного полупроводника для расширения диапазона вариации его эксплуатационных свойств путем изовалентного замещения атомов галлия. Если замещение ато-

мами алюминия, а также индия изучалось достаточно подробно, то в случае наиболее легкого из элементов 3-ей группы элемента – бора, данные весьма ограничены.

Исследование модификации свойств бета-Ga₂O₃ ионами В⁺ представляется достаточно актуальной задачей. При этом наряду с экспериментальными методами исследования электрофизических свойств Ga₂O₃, легированного В⁺ методом ионной имплантации, представляет интерес оценка возможных конфигураций расположения атомов В в решётке оксида галлия, а также оценка энергетических барьеров при его возможном перемещении.

Метод расчета

С этой целью были проведены расчёты энергии двух типов: первый – для кластера из 80 атомов Ga₂O₃ и одного атома В; второй – для кластера из 79 атомов Ga₂O₃ с вакансией Ga и одного атома В. Для проведения исследования был выбран метод DFT, который достаточно успешно использовался ранее для расчёта энергетических параметров вакансии Ga [1] и энергетических характеристик процесса диффузии ряда примесей [2] в этом материале. Расчёты проводились с использованием программного пакета Quantum Espresso [3] и псевдопотенциала UltraSoft (US) с энергией отсечки 25 Ry.

Расчеты энергии кристаллического кластера β-Ga₂O₃ при вариации позиций единичного атома бора в решетке были проведены для трёх типов междоузлий. Определены координаты равновесных положений атома В в этих междоузлиях, как в бездефектном кристалле, так и с вакансией Ga. Результаты показали, что В не замещает атом Ga в решётке, как ожидалось до начала исследования. При этом степень смещения атома В от этого положения различна для разных междоузлий.

Полученные результаты позволили определить вероятный вектор диффузии В⁺ по междоузельным каналам и оценить соответствующие энергетические барьеры, значения которых варьируются в пределах (1.5–3) эВ.

Выводы

Проведённые расчёты позволили получить модельное представление возможных конфигурациях внедрённого атома В в решётку β-Ga₂O₃ и оценить энергетические характеристики возможной диффузии. Полученные результаты могут быть использованы при интерпретации поведения В в экспериментах по его ионной имплантации в этот материал и постимплантационного отжига.

Исследование поддержано в рамках гранта БРИКС РФФИ (19-57-80011).

Список использованных источников

1. Kyrtsos A. et al. Migration mechanisms and diffusion barriers of vacancies in Ga₂O₃ // Physical Review. 2017. В 95. P. 245202.
2. Sharma R. et al. Diffusion of dopants and impurities in β -Ga₂O₃ // J. Vac. Sci. Technol. 2021. А 39. P. 060801.
3. <https://www.quantum-espresso.org/>

QUANTUM-CHEMICAL CALCULATION OF THE ENERGY CHARACTERISTICS OF BORON-DOPED B-GA₂O₃

E.V. Okulich, V.I. Okulich, D.I. Tetelbaum

Abstract. The paper presents the results of calculations by the DFT method of the energy characteristics of possible configurations of the boron atom embedded in Ga₂O₃ using ion implantation. The results for different types of interstitials are obtained, and the energy barriers of diffusion B along interstitial channels are estimated.

Key words: gallium oxide, boron, ion implantation, DFT calculations, interstitials, interstitial channels, migration energy.

УДК 004.3:004.9

<https://doi.org/10.29003/m3094.MMMSEC-2022/140-143>

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАЧАЛЬНОГО ЭТАПА ОТЖИГА ДИОКСИДА КРЕМНИЯ, ОБЛУЧЕННОГО ИОНАМИ Si⁺

Окулич Евгения Викторовна,

младший научный сотрудник¹,

eokulich@nifti.unn.ru

Окулич Виктор Иванович,

к.ф.-м.н., доцент², victorokulich@mail.ru

Тетельбаум Давид Исаакович,

д.ф.-м.н., профессор¹, tetelbaum@phys.unn.ru

Михайлов Алексей Николаевич,

к.ф.-м.н., заведующий лабораторией¹, mian@nifti.unn.ru

¹ Нижегородский государственный университет
им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород

² НИУ филиал РАНХиГС, Нижний Новгород

Аннотация. В работе выполнено молекулярно-динамическое моделирование процессов самоотжига филаментных структур в мемристорах на основе пленок α - SiO_2 , подвергнутых облучению ионами Si^+ .

Ключевые слова: SiO_2 , ионная имплантация, мемристор, дефектность, молекулярная динамика, самоотжиг, кластеризация, стохастичность.

Введение

Выяснение природы стохастичности характеристик мемристивных структур на основе тонких пленок оксидов является актуальной задачей. Сформировалось устойчивое мнение об определяющем влиянии на характеристики мемристоров дефектов рабочего слоя [1, 2]. Однако природа этих дефектов остается малоизученной.

Поскольку установлено, что в зоне проводящего канала – филамента (5–20 нм) – температура в проводящем состоянии может достигать более 1000 К [3], то можно предполагать наличие процесса самоотжига дефектных структур в этой области.

В настоящей работе представлены результаты моделирования этого процесса для мемристоров на основе пленок аморфного SiO_2 .

В работе [4] было обнаружено положительное влияние ионного облучения на параметры резистивного переключения в структурах на основе пленок оксида кремния, поэтому моделирование проводилось именно для легированных ионами Si^+ пленок.

Метод расчета

Начальной задачей моделирования было создание структуры (размером $60 \times 60 \times 60 \text{ \AA}^3$), насыщенной атомами кремния за счет облучения ионами Si^+ с заданной дозой на определённой глубине, а также содержащей дефекты, созданные ими. Подразумевается, что такая структура представляет из себя область филамента. Расчет числа дефектов производился в программе SRIM. При этом глубина аморфного $\text{SiO}_{1.7}$ задавалась равной 20 нм, дозы составили $1 \cdot 10^{15}$ и $1 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$, энергия внедряемых ионов Si^+ – 20 кэВ. Соответствующее число вакансий атомов Si и O создавалось их случайным удалением, а междоузельные атомы – их случайным внедрением при выполнении того условия, что расстояние между двумя атомами не должно было быть меньше суммы атомных радиусов соответствующих соседей. Процессы атомной перестройки при самоотжиге моделировались методом молекулярной динамики с использованием пакета LAMMPS при температуре 1500 К.

Координаты атомов кластеров периодически фиксировались, общее время расчета составляло ~ 100 нс. Проводилась оценка структурных характеристик моделируемого объема с использованием специально написанного комплекса программ. Это позволило наблюдать эволюцию числа, взаимного расположения скоплений атомов кремния, размеров кластерных образований и основных структурных единиц аморфного диоксида кремния типа Si-O₄. В рамках исследований рассчитывались радиальные функции распределения (РФР) атомов как отмеченных образований, так и моделируемого объема в целом, а также углы между связями.

Результаты и обсуждение

Была получена нормированная РФР связей Si-Si для моделируемого фрагмента до имплантации (исходное состояние), после имплантации и после отжига при 1500 К в течение 100 нс. Для исходного состояния положение пика ($R = 3.19 \text{ \AA}$) примерно соответствует литературному значению для термических пленок SiO₂. После имплантации этот пик сохраняется, уменьшаясь по высоте и площади и становясь резко асимметричным. Появляется второй пик при $R = 2.38 \text{ \AA}$, что связано с введением дополнительных атомов кремния.

Отжиг приводит к образованию микрокластеров Si, приближающихся по структуре к кристаллическому кремнию, для которого $R_{\text{Si-Si}} = 2.34 \text{ \AA}$ и валентный угол равен $\sim 109^\circ$.

Изменение положения пика для SiO₂ (2.9 \AA) после отжига может быть связано с остаточными дефектами. Предполагается, что из-за последних более плотная структура оксида становится энергетически выгоднее.

Заключение

Показана возможность существенной перестройки за короткое время структуры аморфного SiO₂ в области филамента, приводящей к образованию микрокластеров Si, что является следствием эволюцией постимплантационных дефектов. Можно предположить, что эти процессы могут обуславливать стохастичность вольт-амперных характеристик мемристоров, их шумовые характеристики и, в конечном счёте, деградацию мемристора.

Работа поддержана Правительством Российской Федерации (контракт № 075-15-2019-871 (2)) и выполнена в рамках реализации программы стратегического академического лидерства «Приоритет-2030» (Н-466-99_2021-2023).

Список использованных источников

1. Mikhaylov A.N. et al. Stochastic resonance in a metal-oxide memristive device // Chaos, Solitons & Fractals, V. 144, 110723 (2021).
2. Guseinov D.V. et al. Filamentary model of bipolar resistive switching in capacitor-like memristive nanostructures on the basis of yttria-stabilised zirconia // International Journal of Nanotechnology, V. 14(7/8), 604 (2017).
3. Ma Y. et al. Formation of the Conducting Filament in TaOx-Resistive Switching Devices by Thermal-Gradient-Induced Cation Accumulation// ACS Applied Materials and Interfaces, V. 10(27), 23187 (2018).
4. Okulich E.V. et al. Impact of Oxygen Vacancies on the Formation and Structure of Filaments in SiO₂-Based Memristors// Technical Physics Letters, V. 46, 19 (2020).

MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF THE INITIAL STAGE OF ANNEALING OF SILICON DIOXIDE IRRADIATED WITH Si⁺ IONS

E.V. Okulich, V.I. Okulich, D.I. Tetelbaum, A.N. Mikhaylov

Abstract. In this work, molecular dynamics modeling of the processes of self-annealing of filament structures in memristors based on a-SiO₂ films irradiated with Si⁺ ions has been performed.

Key words: SiO₂, ion implantation, memristor, imperfection, molecular dynamics, self-annealing, clustering, stochasticity.

УДК 537.9:004.94

<https://doi.org/10.29003/m3095.MMMSEC-2022/143-146>

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ ПРИ АДСОРБЦИИ ДВУХ АТОМОВ ФОСФОРА НА ПОВЕРХНОСТИ СИЛИЦЕНА

Прохоренко Анастасия Валерьевна,

научный сотрудник¹, aiprva@pni.edu.ru

Гниденко Антон Александрович,

к.ф.-м.н., научный сотрудник^{1,2}, agnidenko@mail.ru

Чибисов Андрей Николаевич,

к.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник^{1,3}, andreichibisov@yandex.ru

Чибисова Мария Анатольевна,

к.ф.-м.н., научный сотрудник^{1,3}, omariya2003@yandex.ru

¹ТОГУ, г. Хабаровск

²ХФИЦ ФГБУН ИМ ДВО РАН, г. Хабаровск

³ВЦ ДВО РАН, г. Хабаровск

Аннотация. С помощью квантово-механических расчётов определены энергии связи силицена, с адсорбированными на его поверхности атомами фосфора. Выявлено наиболее выгодное взаиморасположение атомов фосфора на поверхности силицена. Изучено изменение заряда и локального магнитного момента на атомах фосфора в зависимости от задаваемых конфигураций.

Ключевые слова: теория функционала плотности, метод псевдопотенциала, силицен, фосфор, адсорбция.

Введение

Наличие уникальных электрических, механических и химических свойств у графена зародили интерес к исследованию его аналогов, одним из которых является силицен. В отличие от графена, он обладает более сильным спин-орбитальным взаимодействием [1], что позволяет наблюдать спиновый эффект Холла при не слишком низких температурах [2]. Также к особенностям относятся механически регулируемая запрещённая зона [3] и металлическая фаза с долинообразной поляризацией [4]. Проведённые эксперименты [5–9] показывают возможности внедрения в современную электронику наноразмерных материалов [10]. 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.

Результаты расчетов и их анализ

Для проведения квантово-механических вычислений использовался пакет программ Quantum Espresso [11], основанный на теории функционала плотности и методе псевдопотенциала. Расчёты выполнялись с учётом спин-орбитального неколлинеарного взаимодействия. Полнорелятивистские псевдопотенциалы для кремния и фосфора были выбраны из библиотеки программы Quantum Espresso [12]. Энергия обрезания базиса плоских волн составила 476 эВ. Расчёты Si:P структур проводились с однородной сеткой k-точек $3 \times 3 \times 1$, построенной по схеме Монкхорста-Пэка. Анализ величин зарядов на атомах выполнялся с использованием метода разбиения Бейдера.

В одной из наших работ [13] была изучена адсорбция одиночного атома фосфора на поверхности силицена в некоторых ключевых положениях и было выявлено наиболее энергетически выгодное

состояние. Фосфор располагался над верхним атомом кремния (Hill) и энергия связи системы составила -3.84 эВ. Так же был смоделирован случай замещения (энергия связи равна -3.34 эВ).

В данной работе рассматривается адсорбция атома фосфора на силициновую поверхность. В-первом варианте уже содержащую один замещающий атом фосфора (Рис 1а), а во-втором один адсорбированный (Рис 1б).

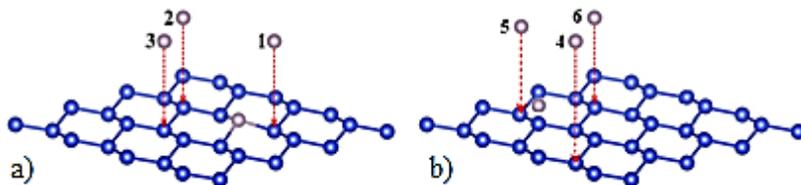


Рис. 1. Варианты расположения адсорбированного атома Р рядом с а) замещающим; б) адсорбирующим

Во 2-ом и 3-ем случае в области адсорбции второго атома фосфора происходят смещения в расположениях соседних атомов кремния, аналогичные рассмотренным ранее положениям Hill и Valley; энергии связи при этом становятся ниже, самым выгодным оказывается положение Hill (-4.17 эВ). В случае двух адсорбирующих атомов, по величинам энергий связи можно выделить конфигурацию 5 как самую выгодную (-4.23 эВ), расположение второго атома фосфора рядом с первым уменьшает его энергию связи в конфигурации 4, а в конфигурации 6 приводит к самопроизвольному смещению от уже имеющегося адсорбированного атома. Заряда на атомах фосфора несущественно отклоняется от рассмотренных ранее случаев одиночного замещения или абсорбции атома фосфора на силиcene. Локальные магнитные моменты на атомах фосфора не выражены.

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. Liu, C.C., Jiang, H., Yao, Y. Low-energy effective Hamiltonian involving spin-orbit coupling in silicene and two-dimensional germanium and tin // Physical Review B, 2011. Vol. 84, p. 195430.

2. Liu, C.C., Feng, W., Yao, Y. Quantum Spin Hall Effect in Silicene and Two-Dimensional Germanium // *Physical Review Letters*, 2011. Vol. 107, p. 076802.
3. Topsakal, M., Ciraci, S. Elastic and plastic deformation of graphene, silicene, and boron ni-tride honeycomb nanoribbons under uniaxial tension: A first-principles density-functional theory study // *Physical Review B*, 2010. Vol. 81, p. 024107.
4. Ezawa, W. Valley-Polarized Metals and Quantum Anomalous Hall Effect in Silicene // *Physical Review Letters*, 2012. Vol. 109, p. 055502.
5. Padova, P.D., Quaresima, C. et al. Evidence of graphene-like electronic signature in silicene nanoribbons // *Physical Review Letters*, 2010. Vol. 96, p. 261905.
6. Padova, P.D., Leandri, C. et al. Burning Match Oxidation Process of Silicon Nanowires Screened at the Atomic Scale // *Nano Letters*, 2008. Vol. 8, p. 2299.
7. Vogt, P., Padova, P.D. et al. Silicene: Compelling Experimental Evidence for Graphenelike Two-Dimensional Silicon // *Physical Review Letters*, 2012. Vol. 108, p. 155501.
8. Lin, C.-L., Arafune, R. et al. Structure of silicene grown on Ag (111) // *Applied Physics Express*, 2012 – V. 5, p. 045802.
9. 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. Vol. 24, p. 172001.
10. Fleurence, A., Friedlein, R. et al. Experimental Evidence for Epitaxial Silicene on Diboride Thin Films // *Physical Review Letters*, 2012. Vol. 108, p. 245501.
11. 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. Vol. 21, p. 395502.
12. Dal Corso, A. Pseudopotentials Periodic Table: From H to Pu. *Computational Materials Science*, 2014. Vol. 95, pp. 337–350.
13. Прохоренко А.В., Гниденко А.А., Чибисов А.Н., Чибисова М.А. Ab-initio расчет влияния положения адсорбции на перераспределение намагниченности в силлицене, легированном фосфором / А.В. Прохоренко, А.А. Гниденко, А.Н. Чибисов, М.А. Чибисова / III Международная конференция «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. МММЭК–2021» – 2021 – С. 124-127.

QUANTUM-MECHANICAL STUDY OF THE SUBSTITUTION AND ADSORPTION OF P ATOMS ON SILICENE

A.V. Prokhorenko, A.A. Gnidenko, A.N. Chibisov, M.A. Chibisova

Abstract. Using quantum mechanical calculations, the binding energies of silicene with phosphorus atoms adsorbed on its surface was determined. The most favorable mutual arrangement of phosphorus atoms on the surface of silicene has been revealed. The change in the charge and local magnetic moment on phosphorus atoms depending on the specified configurations has been studied.

Key words: density functional theory, pseudopotential method, silicene, phosphorus, adsorption.

5. Е

**МОДЕЛИРОВАНИЕ РАБОТЫ
МНОГОУРОВНЕВЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ПАМЯТИ
ДЛЯ КОМПЬЮТЕРОВ СЛЕДУЮЩЕГО
ПОКОЛЕНИЯ**

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕЗИСТИВНОГО ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ В HfO_2 -МЕМРИСТОРАХ

Ганыкина Екатерина Андреевна,

научный сотрудник¹, аспирант², eganykina@niime.ru

Резванов Аскар Анварович,

к.ф.-м.н., начальник лаборатории^{1,2}, arezvanov@niime.ru

Зюзин Сергей Сергеевич,

инженер-технолог 2 кат.¹, аспирант², szuzin@niime.ru

Горнев Евгений Сергеевич,

*член-корреспондент РАН, д.т.н, профессор,
начальник управления РПТН¹, egornev@niime.ru*

¹АО НИИМЭ, г. Зеленоград

²МФТИ (НИУ), г. Долгопрудный

Аннотация. В работе выполнено компьютерное моделирование образования и разрыва проводящего филамента в мемристоре на основе оксида гафния двумя различными методами: методом конечных элементов и кинетическим методом Монте-Карло.

Ключевые слова: мемристор, резистивное переключение, филамент.

Введение

В течение последнего десятилетия происходит активное изучение особенностей функционирования резистивной памяти ввиду её главных достоинств: высокой масштабируемости, низкого энергопотребления, высокой скорости переключения [1]. При рассмотрении ячеек памяти с использованием оксида гафния в качестве активного слоя придерживаются концепции образования и разрыва проводящего филамента, состоящего из положительно заряженных кислородных вакансий. Однако данные процессы имеют стохастический характер, что приводит к необходимости создания динамической модели мемристора, способной детально описывать резистивное переключение.

Моделирование

В данной работе были рассмотрены два способа моделирования процессов, происходящих при резистивном переключении. В первом случае образование и разрыв проводящего филамента объясня-

ются миграцией вакансий кислорода, вызванной локальным электрическим полем и температурой [2]. Поэтому требуется самосогласованное решение трех дифференциальных уравнений в частных производных: уравнение диффузии кислородных вакансий, уравнение теплопроводности и уравнение непрерывности. При этом надо отметить, что электрическая проводимость и коэффициент теплопроводности активного слоя зависят от концентрации вакансий.

При втором подходе моделирование начинается с задания начального распределения кислородных вакансий в активном слое, причем в каждый отдельно взятый момент времени распределение вакансий определяет механизм проводимости. Так, при низкой концентрации кислородных вакансий происходит прямое туннелирование электронов между электродами и туннелирование электронов между вакансиями. Вероятности данных процессов определяются с помощью квазиклассического приближения.

Протекающий через структуру ток может быть рассчитан с использованием механизма туннелирования через ловушки (TAT, trap-assisted tunneling) [3]. Однако при увеличении концентрации кислородных вакансий нельзя пренебрегать сильным взаимодействием между соседними вакансиями, что приводит к смене используемого механизма проводимости с TAT на дрейфовый [3].

Моделирование прекращается при достижении некоторого заранее заданного тока. В каждом цикле уравнения Пуассона и непрерывности решаются самосогласованно. Рассчитанный по одному из вышеупомянутых механизмов ток используется для вычисления локальной температуры по уравнению теплопроводности. Далее, используя полученные локальные потенциал и температуру, с помощью кинетического метода Монте-Карло определяется, какой из процессов – генерация, рекомбинация или диффузия – произойдет на следующем этапе.

Выводы

В работе выполнено моделирование резистивного переключения в мемристоре на основе оксида гафния двумя различными методами: методом конечных элементов и кинетическим методом Монте-Карло.

Список использованных источников

1. Красников Г.Я., Зайцев Н.А., Красников А.Г. Современное состояние разработок в области энергонезависимой памяти // Нано- и микросистемная техника. 2015. № 4 (177). С. 60–64.

2. 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.

3. Abbaspour E. et al. KMC simulation of the electroforming, set and reset processes in redox-based resistive switching devices // IEEE transactions on nanotechnology. – 2018. – Т. 17. – №. 6. – С. 1181–1188.

COMPUTER SIMULATION OF RESISTIVE SWITCHING IN HFO₂ MEMRISTORS

E.A. Ganykina, A.A. Rezvanov, S.S. Zyuzin, E.S. Gornev

Abstract. The paper presents computer simulation of the formation and rupture of a conductive filament in a hafnium oxide-based memristor using two different approaches: the finite element method and the kinetic Monte Carlo method.

Key words: memristor, resistive switching, filament.

УДК 004.3:004.9

<https://doi.org/10.29003/m3097.MMMSEC-2022/150-156>

ИММИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АНАЛОГОВОЙ ИМПУЛЬСНОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ НА ОСНОВЕ МЕМРИСТИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Морозов Александр Юрьевич,

к.ф.-м.н., н.с., morozov@infway.ru,

Абгарян Каринэ Карленовна,

д.ф.-м.н., г.н.с., зав. отделом, kristal83@mail.ru,

Ревизников Дмитрий Леонидович,

д.ф.-м.н., профессор, в.н.с., reviznikov@mai.ru,

ФИЦ ИУ РАН, г. Москва

Аннотация. Работа посвящена вопросам имитационного моделирования аналоговой импульсной нейронной сети на основе мемристивных элементов в рамках задачи распознавания образов. Рассматривается набор изображений размера 128 на 128 пикселей, что приводит к имитационной модели, включающей более 80 тысяч дифференциальных уравнений, и обуславливает необходимость распараллеливания вычислений.

Ключевые слова: импульсная нейронная сеть, STDP, распознавание, мемристор, оксид гафния, интервальная модель, ВАХ, параллельные вычисления, OpenMP.

Введение

Искусственные нейронные сети используются во многих областях современной жизни и позволяют решать актуальные, важные и практически значимые задачи, которые зачастую не поддаются решению с помощью классических подходов. Для ускорения работы нейросетевых алгоритмов ведутся разработки специальных процессоров, основанных на принципах действия человеческого мозга и представляющих собой аппаратную реализацию импульсных (спайковых) нейронных сетей.

Ранее авторами настоящей работы была разработана математическая модель аналоговой импульсной нейронной сети основанной на мемристивных элементах с методом самообучения Spike Timing Dependent Plasticity (STDP) [1–3]. Каждый синапс представляет собой мемристор, который описывается с помощью дифференциального уравнения относительно переменной состояния, характеризующей уровень проводимости элемента. Имитационное моделирование позволяет определить оптимальные настройки нейроморфной структуры. При большом количестве синапсов имитационное моделирование сети становится затруднительным из-за растущих вычислительных затрат. Для оптимизации расчетов процесс интегрирования дифференциальных уравнений распараллеливается с помощью технологии OpenMP.

Интервальная математическая модель мемристора

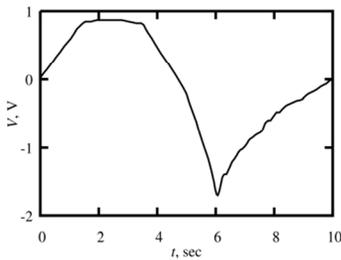
Согласно экспериментальным данным, характер функционирования мемристоров является стохастическим, о чем свидетельствует разброс в вольт-амперных характеристиках в процессе переключения между высокоомным и низкоомным состояниями. Для учета этой особенности применяется модель мемристора с интервальными параметрами, которая дает ограничения сверху и снизу на интересующие величины, и заключает экспериментальные кривые в коридоры.

Рассматривается модификация модели мемристора, представленной в [4]:

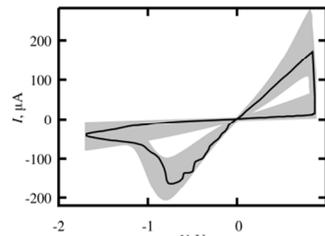
$$\frac{dx(t)}{dt} = a \cdot V(t)^s \begin{cases} 1 - (1 - x(t))^p, & V(t) \leq -V_{thr}, \\ 0, & -V_{thr} < V(t) \leq V_{thr}, \\ 1 - x(t)^p, & V > V_{thr}, \end{cases} \quad (1)$$

$$I(t) = x(t)^n \beta \sinh(\alpha_M V(t)) + \chi [\exp(\gamma V(t)) - 1] + \delta, p = \\ = 2 \text{round} \left[b(|V(t)| + c)^{-1} \right], R(t) = V(t)/I(t),$$

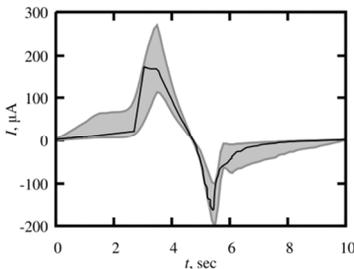
где x – переменная состояния; $a \in [1.000, 1.119]$ В⁻⁵ – постоянная, определяемая свойствами материала; $s = 5$ – нечетное целое число; $I(t)$, $V(t)$, $R(t)$ – текущие значения тока, напряжения и сопротивления; $V_{thr} = 0.4$ В – пороговое значение напряжения активации; $n = 9$, $\beta = 9 \cdot 10^{-5}$ В, $\chi = 1.5 \cdot 10^{-4}$ В, $\alpha_M \in [1.674, 2.114]$ В⁻¹, $\gamma \in [-0.019, 0.415]$ В⁻¹, $\delta \in [-0.011, 1.464]$ мкА – подгоночные параметры в выражении для тока; round – функция получения целочисленного результата; $b = 15$ В, $c = 2$ В – подгоночные коэффициенты основного уравнения. Данные значения параметров получены с помощью подхода описанного в работе [5] для наилучшего воспроизведения экспериментальных данных по мемристору на основе оксида гафния [4]. На рис. 1а показана зависимость напряжения от времени $V(t)$, на рис. 1б черной кривой представлена экспериментальная вольтамперная характеристика (ВАХ) и на рис. 1в – восстановленная по $V(t)$ и ВАХ зависимость тока от времени. Серым цветом показаны полученные модельные интервальные оценки.



(а)



(б)



(в)

Рис. 1. Результаты моделирования:

- (а) – исходная зависимость напряжения от времени;
- (б) – экспериментальная и модельная ВАХ;
- (в) – экспериментальная и модельная зависимость тока от времени

При дальнейшем моделировании работы всей аналоговой самообучающейся импульсной нейронной сети, каждую эпоху обучения параметры мемристоров задаются случайным образом из подобранных интервалов.

Математическая модель нейронной сети

Математическая модель сети для распознавания пяти изображений размером 128 на 128 пикселей задается следующими соотношениями в соответствии с работой [1]:

$$\frac{dx_{i,j}}{dt} = \begin{cases} F_X(x_{i,j}, V_{te}^j - V_{int}^j), V_g^i(t) > 0, \\ 0, V_g^i(t) = 0, \end{cases} \quad \frac{d\tau_j}{dt} = 1 - \delta(V_{int}^j - V_{th})\tau_j,$$

$$\frac{dV_{int}^j}{dt} = \frac{1}{C_{int}} \left[\sum_{\substack{i=1 \\ V_g^i(t) > 0}}^n \frac{\hat{V}_{te}^j - V_{int}^j}{R_{i,j}} - \frac{V_{int}^j}{R_{int}} \right] - \max_{i=1,m} \left[\theta(V_{int}^i - V_{th}) \hat{\alpha}_{i,j} \right] \delta \left(\prod_{i=1}^m (V_{int}^i - V_{th}) \right) V_{int}^j,$$

$$V_{te}^j = \begin{cases} V_{te}^+, \tau_j \leq \tau_s, \\ V_{te}^-, \frac{\tau_r}{2} < \tau_j \leq \frac{\tau_r}{2} + \tau_s, \\ V_{te}^0, \tau_r < \tau_j, \\ 0, \tau_s < \tau_j \leq \frac{\tau_r}{2} \vee \frac{\tau_r}{2} + \tau_s < \tau_j \leq \tau_r, \end{cases} \quad V_{out}^j = \begin{cases} V_{out}^+, \tau_j \leq \tau_{out}, \\ 0, \tau_{out} < \tau_j, \end{cases}$$

$$\hat{\alpha}_{i,j} = 1 - \alpha(1 - \delta_{ij}), \hat{V}_{te}^j = \max(0, \min(V_{te}^j, V_{te}^0)),$$

$$x_{i,j}(0) = \text{random}[0,1], V_{int}^j(0) = 0, \tau_j(0) > \max(\tau_r, \tau_{out}),$$

$$i = 1, \dots, 128 \times 128, j = 1, \dots, 5,$$

где V_g^i – текущее значение напряжения на i -м входе нейронной сети; V_{te}^j – текущее значение напряжения в обратной связи j -го нейрона; V_{out}^j – текущее значение напряжения на выходе j -го нейрона; τ_j – время, прошедшее после последней активации j -го нейрона; V_{int}^j – напряжение на конденсаторе j -го нейрона; R_{int} , C_{int} – значения сопротивления и емкости у нейронов; V_{te}^+ , V_{te}^- , V_{te}^0 – значения амплитуды импульсов обратной связи и значение напряжения по

умолчанию; V_{out}^+ – амплитуда выходного импульса; V_{th} – уровень напряжения активации нейрона; $R_{i,j}$ – значение сопротивления мемристора i -го синапса j -го нейрона; $x_{i,j}$ – состояние мемристора i -го синапса j -го нейрона; τ_r – длительность сигнала в обратной связи после активации нейрона; τ_s – длительность одного импульса в сигнале обратной связи, $2\tau_s < \tau_r$; τ_{out} – длительность одного импульса на выходе сети; α – коэффициент подавления; δ_{ij} – символ Кронекера; $\delta(x)$ – дельта-функция; $\theta(x)$ – функция Хэвисайда; зависимости F_x и $R_{i,j}$ определяются в соответствии с моделью мемристора.

В процессе имитационного моделирования подобны следующие значения параметров: $R_{int} = 10.9$ Ом, $C_{int} = 4.1$ мФ, $V_{te}^+ = 1.55$ В, $V_{te}^- = -1.6$ В, $V_{te}^0 = 10$ мВ, $V_{out}^+ = 2$ В, $V_{th} = 2.5$ мВ, $\tau_r = 15$ мс, $\tau_s = 1$ мс, $\tau_{out} = 1$ мс, $\alpha = 0.1$.

Отметим, что общее количество дифференциальных уравнений в модели составляет 81930 ($128 \times 128 \times 5 + 5 + 5$), что обуславливает необходимость распараллеливания вычислений.

Результаты

Рассматривается задача распознавания изображений представленных на рис. 2 [6]. Вычисления производились на процессоре Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2620. На рис. 3 показан процесс адаптации синаптических весов к распознаваемым образцам. Цвет соответствует значению переменной состояния соответствующего мемристора: чем темнее, тем проводимость больше; чем светлее, тем меньше.

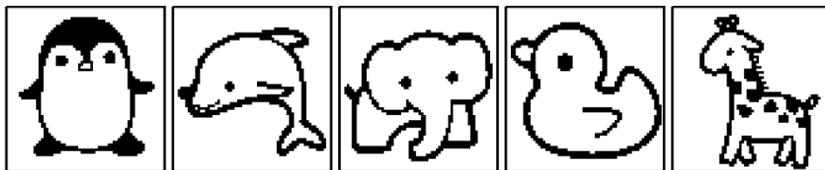


Рис. 2. Распознаваемые изображения

Соответствие переменных состояний распознаваемым образцам говорит о том, что сеть успешно обучилась и запомнила заданные изображения. За счет распараллеливания удалось получить более чем шестикратное ускорение вычислений.

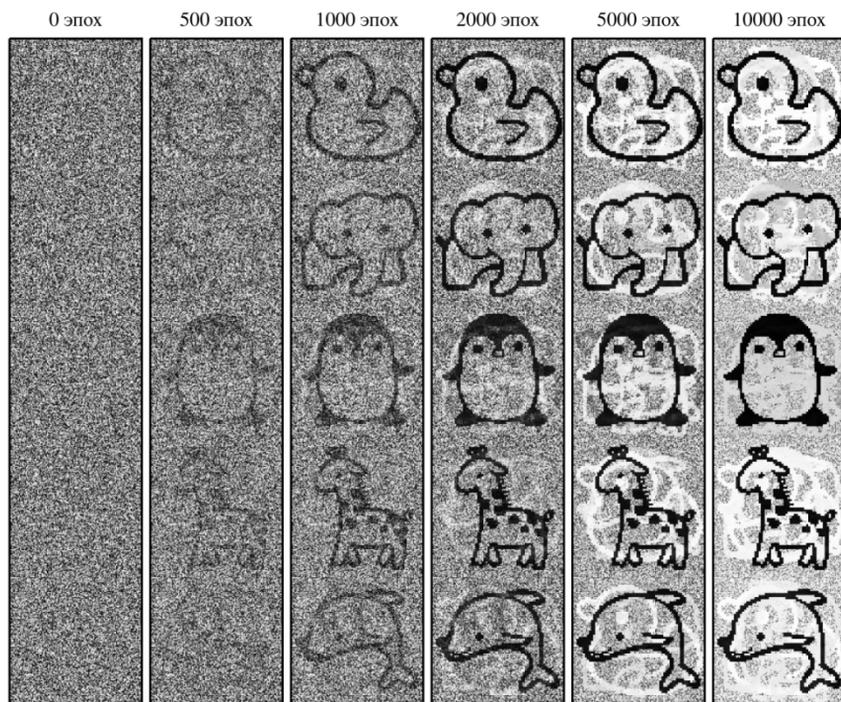


Рис. 3. Изменение состояний мемристоров в процессе обучения

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-29-03051 мк. Параллельные вычисления проводились на высокопроизводительных ресурсах ФИЦ ИУ РАН.

Список использованных источников

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

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. Т. 23. № 3. С. 186–195. DOI: 10.17073/1609-3577-2020-3-186-195.

3. Морозов А.Ю., Абгарян К.К., Ревизников Д.Л. Математическое моделирование аналоговой самообучающейся нейронной сети на основе мемристивных элементов с учетом стохастической динамики переключения // *Российские нанотехнологии*. 2021. Т. 16. № 6, С. 76–86. DOI: 10.1134/S1992722321060157

4. Mladenov V. Analysis of Memory Matrices with HfO2 Memristors in a PSpice Environment // *Electronics*. 2019. V. 8. No. 4, 383, p. 16. DOI: 10.3390/electronics 8040383.

5. Морозов А.Ю., Ревизников Д.Л. Интервальный подход к решению задач параметрической идентификации динамических систем // Дифференциальные уравнения. 2022. Т. 58. № 7. С. 962–976. DOI: 10.31857/S0374064122070081.

6. Фотохостинг Pinterest // URL: <https://ru.pinterest.com/pin/351912463120005/> (дата обращения: 02.09.2022).

SIMULATION MODELING OF AN ANALOGUE SPIKING NEURAL NETWORK BASED ON MEMRISTIC ELEMENTS USING PARALLEL TECHNOLOGIES

A.Y. Morozov, K.K. Abgaryan, D.L. Reviznikov

Abstract. The paper deals with the issues of simulation modeling of an analog spiking neural network based on memristive elements within the framework of the problem of recognizing a set of five images of 128 by 128 pixels in size, which involves solving more than 80 thousand differential equations.

Key words: spiking neural network, STDP, recognition, memristor, hafnium oxide, interval model, VAC, parallel computing, OpenMP.

УДК 004.383.8:621.382

<https://doi.org/10.29003/m3098.MMMSEC-2022/156-159>

АНАЛИЗ ЭЛЕМЕНТНОЙ БАЗЫ И СХЕМОТЕХНИЧЕСКИХ РЕШЕНИЙ ДЛЯ НЕЙРОМОРФНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ НА МЕМРИСТОРНЫХ КРОССБАРАХ

Тельминов Олег Александрович,

*к.т.н., начальник лаборатории¹,
otelminov@niime.ru, +7 (495) 229-74-97*

Горнев Евгений Сергеевич,

*член-корреспондент РАН, профессор, заместитель руководителя
приоритетного технологического направления¹,
egornev@niime.ru, +7 (495) 229-55-70*

¹АО «НИИМЭ», г. Москва

Аннотация. рассмотрены варианты схемотехнических решений для аналоговых матрично-векторных вычислений на кроссбарах, в узлах которых установлены мемристоры – двухполюсники с программируемым значением сопротивления.

Ключевые слова: аналоговые нейроморфные вычисления, матрично-векторное умножение, нейронные сети.

Введение

Нейронные сети и их аппаратная реализация в настоящее время являются основным драйвером развития искусственного интеллекта (ИИ). Второе направление ИИ – логический вывод, однако для него используются классические компьютеры. Нейросетевые вычисления в своей основе содержат матрично-векторные операции, суть которых сводится к попарному перемножению элементов с последующим накоплением произведений. Классические центральные процессоры (CPU) не способны эффективно вычислять такие операции в базисе энергоэффективность – быстродействие – площадь на кристалле, в связи с чем предлагаются и реализуются новые специализированные вычислители [1].

В основе нейронной сети лежит нейрон, в котором последовательно выполняются операции попарного умножения, суммирования и применение нелинейной функции активации. Нероны реализуются в соответствии с моделями работы человеческого мозга, разработанные нейробиологами. К настоящему моменту развиваются две ветви нейросетевых решений – коммерчески успешное на основе классической формальной модели нейрона и стремительно развивающееся на уровне научных разработок нейроморфной модели, т.е. наиболее соответствующей действительности с точки зрения нейробиологов.

Первая ветвь подразумевает использование сопроцессоров на архитектуре фон Неймана со статической памятью SRAM и динамической памятью DRAM. Более новые нейроускорители содержат более эффективные алгоритмы реализации векторно-матричных умножений, например, для разреженных матриц. Фундаментальным ограничением таких решений является слишком медленный обмен данными между процессором и оперативной памятью, однако такие нейроускорители занимают львиную долю рынка, а компании-производители имеют высокую прибыль.

Во второй ветви – нейроморфном подходе, – главенствует спайковая модель нейрона. В ней сигналы между нейронами кодируются импульсами (спайками) и передаются только при необходимости, в то время как в формальной модели поддерживаются логические уровни на протяжении всего процессорного такта. Кроме того, спайковая модель реализуется на цифровых, цифро-аналоговых и аналоговых процессорах. В свою очередь аналоговые вычислители не требуют тактирования, что существенно сокращает энергопотребление и время получения результата.

Аналоговые нейроморфные (спайковые) вычисления реализуются с помощью кроссбаров, в узлах которых размещены мемристоры в паре с селекторами для корректной адресации первых. Для управления работой мемристоров, а именно записи в них требуемого значения проводимости, подачи входных данных, векторно-матричных вычислений, применения функции активации и интерпретации результата используются рассматриваемые ниже элементная база и схемотехнические решения.

Аналоговая элементная база формирования входных воздействий, векторно-матричных вычислений, функции активации и обработки выходных сигналов

Мемристоры имеют несколько режимов работы. Сразу после изготовления обычно требуется инициализация – процедура формовки, выполняющаяся путем подачи напряжения с достаточно высоким значением V_{forming} . В результате мемристор переходит в состояние низкого значения сопротивления (LRS). Для перевода мемристора в состояние высокого значения сопротивления (HRS) необходимо подать пониженное напряжение V_{reset} , в то время как переход из HRS в LRS происходит при подаче напряжения V_{set} . Все переходы происходят по петлям гистерезиса с ограничением тока потребления (current compliance).

После установки мемристора в необходимое состояние, соответствующее весовому коэффициенту синапса нейросети, в работе электрической схемы кроссбара используется его проводимость. Подавая на входы размещенных в столбце кроссбара мемристоров напряжения в соответствии с амплитудами входных сигналов происходит их взвешивание пропорционально проводимостям мемристоров и последующее суммирование вытекающих из столбца токов. Затем происходит применение функции активации с переводом токового сигнала в напряжение для последующей обработки.

К аналоговой элементной базе, обеспечивающей непосредственную работу с токами и напряжениями без применения помехоустойчивого кодирования или представления информации относятся такие приборы как операционные усилители и компараторы, для сопряжения с цифровыми схемами – аналого-цифровые и цифро-аналоговые преобразователи.

Схемотехнические решения для мемристорного кроссбара

При работе кроссбара возникают различные паразитные токи и токи утечки, связанные протеканием токов по соседним проводни-

кам. Их наличие ограничивает масштабирование кроссбара несколькими десятками столбцов и строк, что является недостаточным для обработки полноценных нейросетей.

Рассматриваются различные схемотехнические решения, обеспечивающие работу мемристорных кроссбаров в режиме переключения мемристоров в состояние с заданным сопротивлением, а также подготовку входных сигналов, вычисления функций активации и преобразования результатов вычисления.

Выводы

Выполнен анализ и классификация элементной базы и схемотехнических решений на ее основе для реализации операции векторно-матричного умножения на мемристивных кроссбарах с целью подготовки к интегральному исполнению управляющей схемы, выполненной по КМОП-технологии [2], и матрицы мемристоров.

Исследование выполнено в рамках научной программы Национального центра физики и математики (проект «Искусственный интеллект и большие данные в технических, промышленных, природных и социальных системах»).

Список использованных источников

1. 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.
2. 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.

ANALYSIS OF THE ELEMENT BASE AND CIRCUIT DESIGN FOR NEUROMORPHIC COMPUTING ON MEMRISTOR CROSSBARS

O.A. Telminov, E.S. Gornev

Abstract. The variants of circuit solutions for analog matrix-vector calculations on crossbars with memristors – bipolar with programmable value of resistance installed in their nodes are considered.

Key words: analog neuromorphic computations, matrix-vector multiplication, neural networks.

6. F

**МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУР
И СВОЙСТВ КОМПОЗИЦИОННЫХ
МАТЕРИАЛОВ С НАНОКРИСТАЛЛАМИ,
НАНОКЛАСТЕРАМИ, НАНОАМОРФНЫМИ
ВКЛЮЧЕНИЯМИ И Т.Д.**

СИНТЕЗ МИКРОУРОВНЕВЫХ СТРУКТУР КОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Братухин И.Ю.

генеральный директор², bratukhinIY@signal-spb.ru

Крячко Александр Федотович,

д.т.н., профессор, заведующий кафедрой¹, alex_k34.ru@mail.ru

Шакин Олег Васильевич,

д.т.н., профессор¹, oshakin@mai.ru

Ревунов Глеб Михайлович,

аспирант¹, revunprank@gmail.com

¹СПбГУАП, г. Санкт-Петербург

²АО «НПП «Сигнал», г. Санкт-Петербург

Аннотация. В работе рассмотрены особенности требований к свойствам экранирующих материалов. Также выполнено моделирование никель-цинковых радиопоглощающих ферритов с целью повышения эксплуатационных характеристик.

Ключевые слова: синтез, РПМ, композитные материалы, феррит, экранирование.

Введение

Задача моделирования микроструктур может быть решена на основе использования методов Монте-Карло для построения топологических особенностей или определения составляющих характеристик в соответствии с некоторым стохастическим распределением внутри элементарных объемов функциональных материалов в виде достаточно большого количества регулярных ячеек. Этот подход дает возможность устранить основную проблему реализации, заключающуюся в необходимости использования значительной памяти вычислительной машины и выполнения большого количества вычислений, благодаря довольно простой доменной декомпозиции, что может быть эффективно реализовано с помощью технологий параллельных и распределённых вычислений.

Моделирование радиопоглощающих материалов

Важнейшим параметром, описывающим радиопоглощающие свойства, является коэффициент отражения. На основании анализа данных выявлено, что коэффициент отражения является структуро-

чувствительным параметром и влиять на него можно с помощью изменения размеров зерна феррита. Для достижения этой цели в настоящей работе были использованы два технологических приема – спекание в присутствии жидкой фазы (при легировании оксидом висмута) и дошихтовка крупнозернистой фракцией (КЗФ) готового феррита того же состава [1].

При определенной степени контакта между частицами начинается припекание и они теряют свою структурную обособленность. Зерно в этом случае растет за счет относительно медленного процесса диффузии отдельных атомов через жидкую фазу. С повышением температуры обжига вследствие испарения и частичного вытекания жидкой фазы становится возможным непосредственный контакт между зернами, что приводит к началу типичной межзеренной собирательной рекристаллизации, характеризующейся более быстрым ростом кристаллов [2].

Для отображения его изменения в широком диапазоне частот были построены частотные зависимости коэффициента отражения рассматриваемых четырех партий образцов (рис. 1).

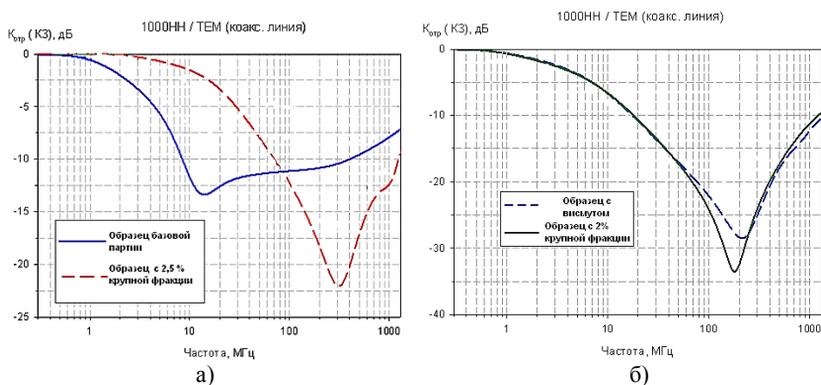


Рис. 1. Измерения коэффициента отражения на металлической пластине (режим «КЗ») образцов Ni-Zn феррита, содержащего 2% оксида висмута и 2% крупной фракции измельченного феррита

Выводы

Таким образом анализ характеристик коэффициентов отражения показал, что наилучшими эксплуатационными свойствами обладают образцы, у которых размер зерна наибольший, то есть легированные висмутом и приготовленные с добавкой 2% крупнозернистой фракции. Образцы базовой партии имеют недостаточное поглощение электромагнитной энергии во всем частотном диапа-

зоне, точка экстремума соответствующей кривой -13 дБ. Недостатком образцов партии, содержащей 2,5% крупнозернистой фракции, является недостаточное поглощение до 50 МГц, по модулю не превышающее 10 дБ.

Список использованных источников

1. Бибииков С.Б., Титов А.Н., Черепанов А.К. Синтез материала с заданным коэффициентом отражения в широком диапазоне частот и углов падения. Труды XV Международной научно-технической конференции «Радиолокация, навигация, связь», 2009, г. Воронеж. Изд. НПФ «Саквоее» (ISBN 978-5-904259-01-3). С. 1578–1584.

2. Кузнецов П.А., Зворыгин Р.Г., Бибииков С.Б. Исследование на атомно-силовом микроскопе кинетики кристаллизации нанокристаллического сплава Fe-Cu-Nb-Si-B и создание на его основе систем электромагнитной защиты. *Металлы*, 2005, № 6, 25–31.

SYNTHESIS OF MICRO-LEVEL STRUCTURES OF COMPOSITE MATERIALS

I.Y. Bratukhin, A.F. Kryachko, O.V. Shakin, G.M. Revunov

Abstract. The paper considers the features of the requirements for the properties of shielding materials. Modeling of nickel-zinc radio-absorbing ferrites was also performed in order to improve performance.

Key words: synthesis, RAM, composite materials, ferrite, shielding.

УДК 534-16

<https://doi.org/10.29003/m3100.MMMSEC-2022/164-167>

МОДЕЛИРОВАНИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СВОЙСТВ ГИДРИРОВАННЫХ АЛМАЗОПОДОБНЫХ НАНОПЛЕНОК

Иванченко Геннадий Сергеевич,

к.ф.-м.н., доцент, genaivanchenko@volsu.ru

Тен Анастасия Валерьевна,

к.ф.-м.н., доцент, ten.anastasia@volsu.ru

Бутенко Мария Анатольевна,

к.ф.-м.н., доцент, maria_butenko@volsu.ru

Кузьмин Николай Михайлович,

к.ф.-м.н., доцент, nikolay.kuzmin@volsu.ru

Волгоградский государственный университет, г. Волгоград

Аннотация. В данной работе проводится расчет колебательного спектра диамана [1] в рамках формализма Гамильтона. Геометрическая модель

диамана представлена в виде двухслойного графена [2], но каждый С-атом имеет sp^3 -гибридизацию внешних электронных орбиталей. Атомы углерода одной из подрешеток графена ковалентно связаны с атомами второго слоя графена, а к атомам второй подрешетки ковалентно присоединены внешние атомы водорода. Элементарная ячейка диамана содержит два атома углерода и один атом водорода. При построении модели была учтена деформация графеновой плоскости в результате присоединения к ней атомов водорода и изменение гибридизации внешних электронных орбиталей атомов углерода с sp^2 на sp^3 . Взаимодействие между атомами водорода не учитывалось.

Ключевые слова: графен, диаман, нанолента, элементарная ячейка, колебательный спектр, дисперсионное уравнение.

Введение

Со времен открытия многочисленные работы были посвящены изучению наноразмерных материалов на основе углерода [1], и это связано с их уникальными свойствами и возможностью применения в различных областях науки и техники. Графен, предсказанный теоретически более полувека назад и полученный экспериментально в 2005 году [2], обладает высокой электропроводностью, теплопроводностью, гидрофобностью и так далее. Поэтому различные модификации на основе графена [4–6], сам графен [4], биграфен с возможными примесями, диаман [5] также привлекают внимание ученых.

Все вышесказанное говорит о том, что изучение колебательных свойств гидрированных алмазоподобных нанопленок является актуальным.

Моделирование колебательных свойств диамана

Расчет фононного спектра диамана был проведен на основе классического и квантового подходов. Рассмотрение основано на гамильтоновом подходе, но параметры модельного гамильтониана были получены с помощью квантово-химических расчетов. Элементарная ячейка диамана (см. рис. 1) содержит три атома (два атома углерода и один атом водорода). Буквы А, В обозначают атомы углерода графеновых подрешеток, а буквы С обозначают атомы водорода, расположенные выше и ниже слой графена, соответственно (см. рис. 2).

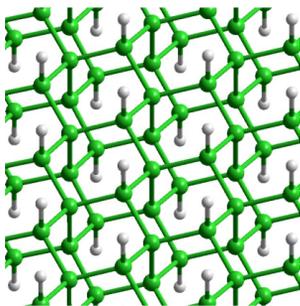


Рис 1. Структура диамана

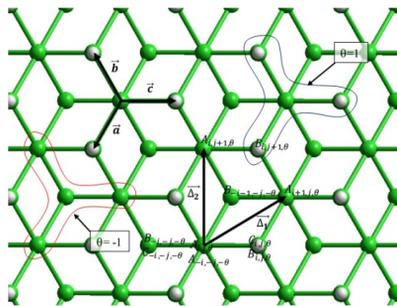


Рис. 2. Геометрическая модель диамана

Выводы

В работе выполнен расчет фононного спектра графеноподобной структуры диаман для различного вида расположения слоев графена между собой. Разработанная модель, позволяет получить набор из двух уравнений третьей степени относительно квадрата частоты. Уравнения просты благодаря выбору элементарной ячейки из трех атомов одного слоя и введению системы координат, учитывающей нечетную симметрию слоев.

Список использованных источников

1. Chernozatonskii L.A., Sorokin P.B., Kvashnin A.G. and Kvashnin D.G. Diamond-like C₂H nanolayer, diamane: Simulation of the structure and properties // JETP Letters, 2009. Vol. 90, no 2, pp. 144–148.
2. Novoselov K.S et al. Erasing electron mass // Nature, 2005. Vol. 438, pp. 197–200.
3. Конобеева Н.Н. Влияние атомно-молекулярного строения на туннельные характеристики в углеродных наноструктурах Математическая физика и компьютерное моделирование, 2017. Т. 20 (6), С. 63–71.
4. Иванченко Г.С. и др. Фононные свойства гидрированных углеродных нанопленок // Инженерный вестник Дона. 2021. №10. ivdon.ru/ru/magazine/archive/n10y2021/7248.
5. Чернозатонский Л.А., Демин В.А. Алмазо-подобные пленки из нескольких свернутых графенов, 2022 // Письма в журнал теоретической и экспериментальной физики. Вып.115, № 3, С. 184–189.
6. Иванченко Г.С., Лебедев Н.Г. Фононный спектр двухслойных углеродных // Физика твердого тела. 2006. Т. 48. Вып. 12. С. 2223–2227.

THE MODELING OF VIBRATION PROPERTIES IN THE HYDROGENATED DIAMOND-LIKE NANOFLEAKS

G.S. Ivanchenko, A.V. Ten, M.A. Butenko, N.M. Kuzmin

Abstract. In this paper, the vibrational spectrum of diamane [1] is calculated within the framework of Hamilton's formalism. The geometric model of the diamane is represented as a two-layer graphene, but each C-atom has an sp^3 hybridization of external electronic orbitals. The carbon atoms of one of the graphene sublattices are covalently bound to the atoms of the second graphene layer, and the outer hydrogen atoms are covalently attached to the atoms of the second sublattice. A diamane unit cell contains two carbon atoms and one hydrogen atom. When constructing the model, the deformation of the graphene plane as a result of the hydrogen atoms addition to it and the change in the hybridization of the external electronic orbitals of carbon atoms from sp^2 to sp^3 were taken into account. The interaction between hydrogen atoms was not taken into account.

Key words: graphene, diamane, nanofilms, elementary cell, phonon spectrum, the dispersion equation.

УДК 621.382

<https://doi.org/10.29003/m3101.MMMSEC-2022/167-170>

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ НОВЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ В ПРОЦЕССЕ САМОСОВМЕЩЕННОГО ДВОЙНОГО ПАТТЕРНИРОВАНИЯ

Тихонова Елена Дмитриевна,
студент¹, научный сотрудник²,
etikhonova@niime.ru, +7 (910) 447-02-96

Горнев Евгений Сергеевич,
член-корреспондент РАН, д.т.н, профессор¹,
начальник управления РПТН², egornev@niime.ru, +7 (903) 969-60-97

¹МФТИ (НИУ), г. Долгопрудный

²АО «НИИМЭ», г. Москва

Аннотация. В работе представлено исследование структурных параметров новых композиционных материалов в качестве жёстких масок в процессе самосовмещённого мультипаттернирования. Было выявлено, что плёнка с использованием оксида титана обладает наилучшими характеристиками свойствами для процесса мультипаттернирования.

Ключевые слова: разрешающая способность, самосовмещённый метод мультипаттернирования, композиционные материалы, математическое моделирование.

Введение

Для освоения новых технологических норм при производстве сверхбольших интегральных схем необходимо, в первую очередь,

улучшать разрешающую способность фотолитографического процесса [1]. В связи с этим требуется использование передовых методов повышения разрешения изображения. Одним из ключевых способов достижения данной задачи является использование новых материалов.

В данной работе рассматриваются структурные параметры тонкоплёночных слоёв из композиционных материалов, с целью определить композиции, которые могли бы быть задействованы в качестве жёстких масок в передовых методах фотолитографии, в частности для самосовмещённого двойного и четырёхкратного паттернирования [2]. Основные требования к маскам: высокая селективность по отношению к близлежащим слоям, минимальная шероховатость поверхности плёнок и низкая степень загрязнения технологических инструментов.

Исследование структурных параметров композиционных материалов

В качестве объектов исследования были выбраны плёнки на основе оксидов титана, гафния, алюминия, циркония и вольфрама, смешанных в разных пропорциях. Содержание оксидов металлов в итоговых композициях в процентном соотношении варьировалось от 20% до 90% в зависимости от металлического элемента, химической структуры и условий обработки [3]. В результате, структурные параметры были изучены у 15 различных композиционных жёстких масок. С процессом литографии в итоге оказались совместимы только 8 вариаций (табл. 1).

Таблица 1

Основные характеристические свойства плёнок из новых материалов

Материалы	Условия сушки	Относительная скорость травления в CF_4	Относительная скорость травления в O_2	Диэлектрическая постоянная
TiOx-1	250°C/60с	1.50	0.46	7.2
	300°C/60с	1.24	0.22	6.8
TiOx-2	250°C/60с	2.10	0.50	11.2
	300°C/60с	1.60	0.30	10.4
ZrOx-1	250°C/120с	0.68	14.04	4.6
	300°C/120с	0.39	7.32	4.1
	350°C/120с	0.21	1.55	3.7

ZrOx-2	250°C/120с	0.34	4.46	4.2
	300°C/120с	0.23	1.29	3.8
	350°C/120с	0.10	0	3.4
ZrOx-3	250°C/60с	0.45	2.66	5.1
	300°C/60с	0.37	1.00	4.5
HfOx-1	250°C/60с	0.30	0.83	5.2
	300°C/60с	0.21	0.50	6.2
WOx-1	350°C/120с	2.85	0.51	3.4
AlOx-1	350°C/60с	0.61	11	2.8

Данные композиции были опробованы на тестовом технологическом маршруте в ПАО «МИКРОН» и не вызвали серьёзного металлического загрязнения технологических инструментов. Затем у данных композиционных материалов на ACM Solver Pro было исследовано состояние поверхности плёнок по величине среднеквадратичного отклонения высоты неровностей поверхности пленок. Было обнаружено, что лучшими кандидатами являются плёнки с использованием оксида титана TiOx-2, гафния HfOx-1 и циркония ZrOx-3.

Исходя из полученных результатов, с помощью программного обеспечения Prolith от разработчика KLA был промоделирован процесс самосовмещённого двойного паттернирования линий затвора с использованием трёх вышеперечисленных композиционных материалов в качестве жёстких масок. Было выявлено, что с помощью TiOx-2 в качестве жёсткой маски удаётся получить линии с наилучшим профилем.

Выводы

По итогам проделанной работы, было показано, что плёнки на основе новых композиционных материалов могут стать перспективными аналогами жёстких масок зарубежных производителей, причём лучше всех продемонстрировала себя плёнка на основе TiOx-2.

Список использованных источников

1. Красников Г.Я. Отличительные особенности и проблемы КМОП-технологии при уменьшении проектной нормы до уровня 0.18 мкм и меньше / Г.Я. Красников, О. М. Орлов // Российские нанотехнологии. – 2008. – Т. 3. – № 7–8. – С. 124–128.

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. Тихонова Е.Д. Применение оксидов металлов титана, гафния, алюминия, циркония и вольфрама в качестве жестких масок в процессе фотолитографии / Е.Д. Тихонова // Перспективные материалы науки, технологий и производства: Сборник научных статей Международной научно-практической конференции. – С. 312–315.

INVESTIGATION OF NEW COMPOSITE MATERIALS IN THE PROCESS OF SELF-ALIGNED DOUBLE PATTERNING

E.D. Tikhonova, Y.S. Gornev

Abstract. The paper presents a study of the structural parameters of new composite materials as hard masks in the process of self-aligned multipatterning. It was found that the film with titanium oxide had the best characteristic properties for the multipatterning process.

Key words: resolution self-aligned multipatterning (SAMP), composite materials, mathematical simulation.

<https://doi.org/10.29003/m3102.MMMSEC-2022/170-174>

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ВАКАНСИЙ НА ПРОЦЕСС СЕГРЕГАЦИИ ПРИМЕСИ НИКЕЛЯ ВБЛИЗИ ГРАНИЦ ДЕФЕКТОВ СТРУКТУРЫ LSNT ПЕРОВСКИТА МЕТОДОМ ПЕРВОПРИНЦИПНОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Фаттахов А.Ф.¹, Бажанов Д.И.¹⁻³

E-mail: fattahovazat@yandex.ru

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 *ФИЦ ИУ РАН, ул. Вавилова, д.44, кор.2, Москва 119333, Россия.*

Аннотация. В работе исследуется сегрегация примесей никеля в присутствии кислородных вакансий 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). Рассматриваются такие дефекты решетки, как TiO-терминированная поверхность (001) и TiO-термини-

рованная противофазная граница. Используется пакет первопринципной молекулярной динамики для проведения квантово-механических расчетов энергий. В результате обнаружено, что как для поверхности, так и для антифазной границы примесные частицы Ni имеют тенденцию к сегрегации на границах структурных дефектов. При этом кислородные вакансии усиливают процесс сегрегации. Эти результаты подтверждают экспериментальные наблюдения.

Ключевые слова: перовскит, сегрегация, кластер, вакансия, LST и LSNT материалы, антифазные границы, теория функционала плотности.

Введение

Перовскиты, класс оксидов металлов со структурой ABO_3 , где 'A' и 'B' это два катиона, а 'O' – кислород, широко используются в качестве электродных материалов для твердооксидных топливных элементов. Большой интерес вызывают 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]), из-за их высокой электронной проводимости, превосходной химической стабильности при окислительно-восстановительных реакциях и стойкости к коксованию.

В результате экспериментальных исследований было обнаружено, что в соединении $La_{0.2}Sr_{0.7}Ni_{0.1}Ti_{0.9}O_{2.9}$ примесные атомы Ni сегрегируют в 'B' – подрешетке из кристаллического массива в направлении поверхности перовскита, формируя на ней кластеры. Как следствие, в результате сегрегации и кластеризации никеля возрастает каталитическая активность и электрохимические характеристики соединения [1].

Предполагается, что процесс сегрегации обусловлен наличием структурных дефектов перовскита (кислородные вакансии, дислокации, антифазные границы (APB) и др.), которые приводят к активной кластеризации атомов Ni вблизи границ дефектов структуры.

Целью работы является исследование сегрегации примесей Ni в соединении $La_{0.2}Sr_{0.7}Ni_{0.1}Ti_{0.9}O_{2.9}$ (LSNT) при наличии кислородных вакансий и проверка предположения о том, что вакансии увеличивают интенсивность сегрегации к структурным дефектам.

Метод исследования

При исследовании использовался пакет VASP [2] для выполнения квантово-механических вычислений на примере модельной ячейки со стехиометрией $La_{0.5}Sr_{0.5}TiO_3$ (LST).

Процесс сегрегации рассматривается в направлении TiO-терминированной поверхности LST(001) и к TiO-терминированной анти-

фазной границе (Рис. 1), поскольку формирование именно таких поверхностей и границ наблюдается в эксперименте.

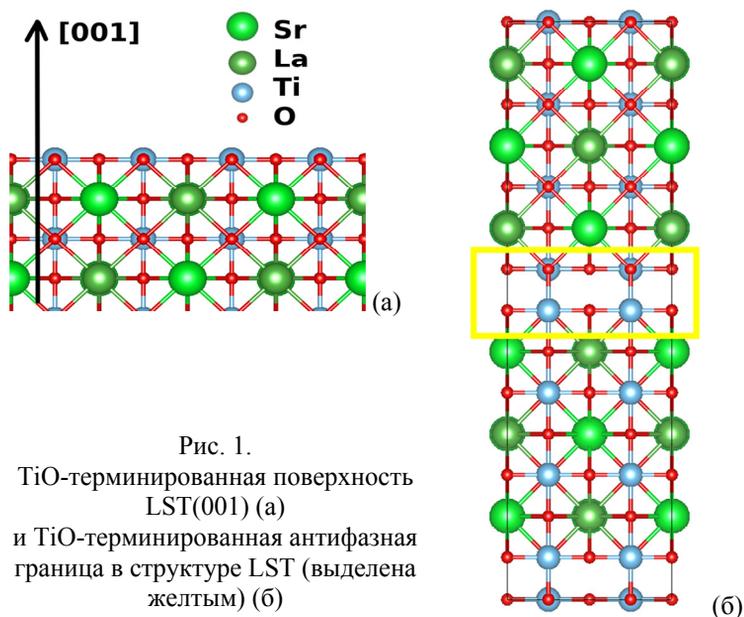


Рис. 1.
TiO-терминированная поверхность
LST(001) (а)
и TiO-терминированная антифазная
граница в структуре LST (выделена
желтым) (б)

Чтобы исследовать влияние вакансий на процесс сегрегации, сравниваются два механизма сегрегации в направлении к TiO-терминированной поверхности и антифазной границе: сегрегация кислородных вакансий и Ni по отдельности и сегрегация Ni вместе с кислородной вакансией. О выгодности процесса можно судить по величине разности полной энергии между конечной и начальной конфигурацией.

Расчет полной энергии системы проводится в рамках теории функционала плотности, через решение уравнений Кона–Шэма по формуле:

$$E_{\text{полн}} = \sum_i \varepsilon_i - \frac{1}{2} \int \frac{n(r)n(r')}{|r-r'|} dr' dr + E_{xc}[n] - \int v_{xc}(n)n(r)dr, \quad [3]$$

где ε_i – действительные собственные значения гамильтониана Кона–Шэма, $v_{xc}(r)$ – функциональная производная, E_{xc} – обменно-корреляционная энергия.

Результаты

Для TiO-терминированной поверхности была проведена серия расчетов: когда примесь Ni образует дефектную пару с кислородной вакансией ($Ni-Vac$) и когда они находятся на расстоянии внутри кристаллического массива и на поверхности.

Полученные значения энергий сегрегации на TiO-терминированную поверхность показывают, что энергетически выгодны следующие процессы: 1) образование дефектной пары $Ni-Vac$ внутри кристалла, 2) образование пары $Ni-Vac$ на поверхности, 3) сегрегация димера $Ni-Vac$ к поверхности и 4) сегрегация как Ni , так и вакансии по отдельности на поверхность.

Для антифазной границы выгодны процессы образования пары $Ni-Vac$ внутри объема, формирование этой пары на антифазной границе и сегрегация этой пары к границе.

Таким образом, обнаружена тенденция к сегрегации примесей Ni к границам структурных дефектов перовскита LST. Причем для TiO-терминированной антифазной границы преобладает процесс, при котором сначала происходит формирование дефектных пар, а затем их сегрегация к АРВ, причем вакансии усиливают этот процесс. Тем самым, кислородные вакансии способствуют кластеризации атомов Ni и образованию каталитических частиц на поверхности.

Заключение

В работе были проведены расчеты энергий при разных расположениях примеси Ni и кислородных вакансий. Из полученных значений энергий следует, что никель имеет тенденцию к сегрегации, как на открытой TiO-терминированной поверхности LST(001), так и вблизи антифазной границы, образованной этими поверхностями. Также обнаружено, что наличие кислородных вакансий способствует более интенсивной сегрегации. Полученные результаты согласуются с данными экспериментальных наблюдений.

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. Lundqvist S., N. M. Теория неоднородного электронного газа. Москва: Мир2, 1987. 86 уравнений Кона–Шэма. 175.

**INVESTIGATION OF THE EFFECT OF VACANCIES
ON THE PROCESS OF NICKEL IMPURITY SEGREGATION
NEAR THE BOUNDARIES OF DEFECTS IN THE STRUCTURE
OF IN LSNT PEROVSKITE BY THE METHOD OF AB INITIO
MOLECULAR DYNAMICS**

A.F. Fattakhov, D.I. Bazhanov

Abstract. In this paper, we investigate the segregation of Ni impurities in the presence of oxygen vacancies near the boundaries of defects in the structure of perovskite $La_{0.2}Sr_{0.7}Ni_{0.1}Ti_{0.9}O_{2.9}$ (LSNT), using the example of a model cell with stoichiometry $La_{0.5}Sr_{0.5}TiO_3$ (LST). Lattice defects such as TiO-terminated surface (001) and TiO-terminated antiphase boundary are considered. The VASP package is used to perform quantum mechanical calculations of energies. As a result, it was found that Ni impurity particles tend to segregate at the boundaries of defects for both the surface and the antiphase boundary. Besides, oxygen vacancies enhance the process of segregation. These results confirm experimental observations.

Key words: perovskite, segregation, cluster, vacancy, cation, LST and LSNT materials, antiphase boundaries, density functional theory.

7. G

**ПРОБЛЕМЫ ОБЕСПЕЧЕНИЯ
НАДЕЖНОСТИ ЭКБ МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ
И СИСТЕМ НА ЕЕ ОСНОВЕ**

ОТКАЗОУСТОЙЧИВЫЕ САМОСИНХРОННЫЕ СХЕМЫ

Зацаринный Александр Алексеевич,

д.т.н., г.н.с.¹, AZatsarinny@ipiran.ru, +7(499) 137-60-31

Степченков Юрий Афанасьевич,

к.т.н., руководитель отдела¹,

YStepchenkov@ipiran.ru +7(495) 671-15-20

Дьяченко Юрий Георгиевич,

к.т.н., с.н.с.¹, diaura@mai.ru, +7(499) 135-20-43

Рождественский Юрий Владимирович,

к.т.н., в.н.с.¹, YRogdest@ipiran.ru, +7(499) 135-20-43

Плеханов Леонид Петрович,

к.т.н., с.н.с.¹, lplekhanov@inbox.ru, +7(499) 135-20-43

¹ФИЦ ИУ РАН, г. Москва

Аннотация. Статья исследует проблему создания отказоустойчивых самосинхронных (СС) схем. Использование избыточного СС-кодирования и двухфазной дисциплины работы обеспечивает более высокую сбоеустойчивость СС-схем в сравнении с синхронными аналогами. Использование дублирования канала обработки данных вместо традиционного для синхронных схем троирования позволяет сократить избыточность СС-схем в отказоустойчивом исполнении и обеспечивает более высокий уровень надежности в сравнении с синхронными аналогами.

Ключевые слова: самосинхронные схемы, логический сбой, отказ, во-тирование, парафазный сигнал, индикация.

Введение

Парирование отказа в синхронных схемах обеспечивается с помощью сбоеустойчивых кодов или одновременной обработки входных данных несколькими параллельными идентичными устройствами с последующим вотированием правильного результата [1].

Самосинхронные (СС) цифровые схемы обладают более высокой естественной устойчивостью к логическим сбоям [2], чем их синхронные аналоги, благодаря изначальной аппаратной избыточности, двухфазному режиму работы и индицированию завершения переключения схемы в каждую текущую фазу.

Детектирование отказа в СС-схеме

СС-схемы используют избыточное, обычно парафазное, кодирование информации. Отказ в СС-схеме означает «залипание» одной или обеих компонент парафазного сигнала в фиксированном значении. Оно обнаруживается индикаторной подсхемой, поскольку при надлежащей реализации топологии СС-схемы некорректное рабочее состояние схемы не может появиться из-за сбоя или отказа.

Основное преимущество СС-схем является функциональная корректность их работы при любых задержках формирования и распространения внутренних и выходных сигналов. Однако, это свойство затрудняет задачу обнаружения отказа, так как задержки срабатывания элементов и схемы оказываются не регламентированными.

Варианты отказоустойчивых СС-схем

Самое простое решение – дублирование СС-схемы [3]. Дублированная СС-схема парирует первый отказ в любом из дублированных каналов и гарантирует детектирование не более двух отказов, останавливая обработку данных при выявлении второго отказа. Для обеспечения устойчивости к N последовательным отказам, каждый из которых воспринимается и детектируется как однократный отказ, ее нужно дополнить $(N-1)$ резервными каналами.

Синхронная схема, устойчивая к N отказам, может быть реализована схемой вотирования « $(N+1)$ -из- $(2 \cdot N+1)$ » (вариант С-1) или схемой вотирования «2-из-3» с $(N-1)$ резервными каналами (вариант С-2). Сравнение аппаратных затрат вариантов отказоустойчивых синхронных и СС-схем, приведенных к аппаратным затратам синхронного варианта С-1, показано на рисунке. Здесь учтено соотношение аппаратных затрат СС и синхронных реализаций типовых цифровых схем как 2,4.

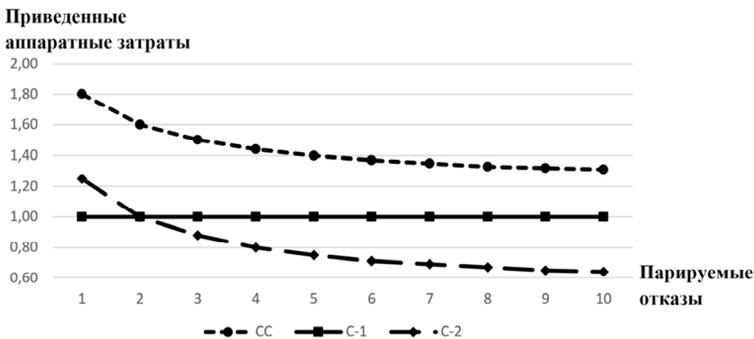


Рисунок. Аппаратные затраты СС и синхронных вариантов (С-1 и С-2)

Выводы

1. Вотируемые синхронные схемы (N-из-M) маскируют часто повторяющиеся одиночные сбои и множественные одновременные сбои, но не гарантированно.

2. Топологические методы способны сократить число типов сбоев в СС-схемах. В частности, сделать нереализуемыми сбой типа «переключение парафазного сигнала из корректного рабочего состояния в инверсное рабочее состояние».

3. Дублированная СС-схема обладает устойчивостью к множественным логическим сбоям и однократным отказам, но при этом необходим таймер, работающий от внешнего синхросигнала.

4. При увеличении степени защищенности, т.е. числа отказов, парируемых отказоустойчивой схемой, ее СС-реализация становится менее избыточной в сравнении с традиционным синхронным решением.

Список использованных источников

1. Song W., and Zhang G. Fault-tolerant asynchronous circuits / In book: Asynchronous on-chip networks and fault-tolerant techniques. 2022. 58 p. <https://doi.org/10.1201/9781003284789-5>.

2. 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.

3. Зацаринный А.А., Степченков Ю.А., Дьяченко Ю.Г., Рождественский Ю.В. Сравнение сбоеустойчивых синхронных и самосинхронных схем / МММЭК–2021. Москва: МАКС Пресс, 2021. С. 154-156. <https://doi.org/10.29003/m2498.MMMSEC-2021/154-156>.

FAULT-TOLERANT SELT-TIMED CIRCUITS

*A.A. Zatsarinny, Yu.A. Stepchenkov, Yu.G. Diachenko,
Yu.V. Rogdestvenski, L.P. Plekhanov*

Abstract. The article considers the problem of developing synchronous and self-timed (ST) circuits that are tolerant to faults. Redundant ST coding and two-phase discipline ensures that ST circuits are more tolerant to the faults than synchronous counterparts. Duplicating ST channels instead of tripling reduces redundancy of the fault-tolerant ST circuits and retains their reliability level compared to synchronous counterparts.

Keywords: self-timed circuits, soft error, fault, voting, dual-rail signal, indication.

Научное издание
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
в материаловедении электронных компонентов
МММЭК–2022
24–26 октября 2022 г., Москва
Материалы IV Международной конференции

Подготовка оригинал-макета
Издательство «МАКС Пресс»
Главный редактор: *Е. М. Бугачева*
Компьютерная верстка: *Н. С. Давыдова*
Обложка: *А. В. Кононова*

Подписано в печать 22.10.2022 г.
Формат 60х90 1/16. Усл. печ. л. 11,25.
Тираж 300 (1–100) экз. Изд. № 142.

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»
109316, г. Москва, Волгоградский проспект, д. 42,
корп. 5, эт. 1, пом. I, ком. 6.3-23Н

