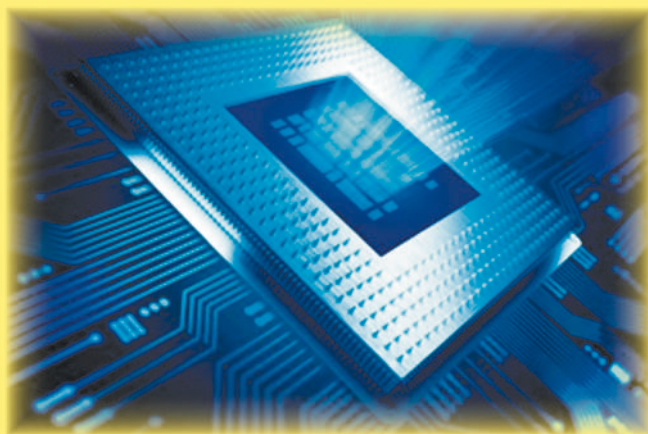


МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

В материаловедении электронных компонентов

МММЭК-2023

Материалы V Международной конференции



ФЕДЕРАЛЬНЫЙ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
Информатика
и Управление
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК



НИИМЭ
НИИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ
ЭЛЕКТРОНИКИ

ПЕРСПЕКТИВНЫЕ
МАТЕРИАЛЫ
И ЭЛЕМЕНТАРНАЯ БАЗА
ИНФОРМАЦИОННЫХ
И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ
СИСТЕМ

23-25 октября 2023г. г.Москва Россия

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Вычислительный центр Федерального исследовательского центра
«Информатика и управление» РАН
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
факультет вычислительной математики и кибернетики
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–2023

Материалы V международной конференции
23–25 октября 2023 г., Москва

MATHEMATICAL MODELING in materials science of electronic components ICM3SEC–2023

Proceedings of the international conference
October 23–25, 2023 Moscow, Russia



МОСКВА – 2023

УДК 519.6.517.958.533.6

ББК 22.2.2218

М34



<https://elibrary.ru/vlrnq>

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–2023. 23–25 октября 2023 г., Москва :
Материалы V Международной конференции. – Москва : МАКС Пресс,
2023. – 172 с. : ил.

ISBN 978-5-317-07069-4

<https://doi.org/10.29003/m3614.978-5-317-07069-4>

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

Для специалистов в области вычислительного материаловедения, прикладной математики, математического моделирования, проектирования и автоматизации изделий нанoeлектроники, 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, нанoeлектроника, 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–2023. October 23–25, 2023, Moscow : Proceedings of the
international conference. – Moscow : MAK S Press, 2023. – 172 p.

ISBN 978-5-317-07069-4

<https://doi.org/10.29003/m3614.978-5-317-07069-4>

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

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

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

Статьи публикуются в авторской редакции.

Использованные изображение получены из открытых источников.

ISBN 978-5-317-07069-4

© Авторы, 2023

© Оформление. ООО «МАКС Пресс», 2023

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

Абгарян К.К. Интеллектуальные информационные системы в микроэлектронике 8

Абгарян К.К., Гаврилов Е.С. Системы автоматизации научных расчетов для многомасштабного моделирования нанокomпозиционных материалов..... 15

Денисов С.А., Зацаринный А.А., Маслов А.Е. Основные направления исследований, проводимых в высокопроизводительной вычислительной среде ЦКП «Информатика» 18

Денисов С.А., Кондрашев В.А. Возможности ЦКП «Информатика» по предоставлению высокопроизводительных вычислительных ресурсов для решения задач материаловедения 22

Денисов С.А., Кондрашев В.А. Опыт ФИЦ ИУ РАН по созданию высокопроизводительной вычислительной инфраструктуры для решения задач материаловедения..... 26

Зацаринный А.А., Абгарян К.К. О проблемах синтеза новых материалов в условиях инновационного развития промышленности..... 30

Зацаринный А.А., Ионенков Ю.С. Некоторые аспекты выбора показателей эффективности центра коллективного пользования «Информатика» при решении задач синтеза новых материалов 38

2. В. Проблемы развития материаловедения квантоворазмерных электронных гетероструктур..... 43

Абгарян К.К., Колбин И.С. Вычисление термического сопротивления на границе Si/SiO₂(α -кварц) 44

Савельев В.В., Хазанова С.В. Влияние эффекта релаксации на транспортные характеристики муарового графена 46

Sobolev N.A. Growing Demand for Computing Power: An Energy Problem in a Green World..... 49

Цысарь К.М., Бажанов Д.И., Абгарян К.К., Киселева Н.Н. Квантовомеханическое моделирование оптических характеристик Eu₂MgSi₂O₇..... 50

3. С. Математическое моделирование в структурном материаловедении (многоуровневые, многомасштабные модели, имитационные модели и т.д.) 55

Абгарян К.К., Журавлев А.А., Морозов А.Ю., Ревизников Д.Л. Моделирование проводимости материалов на основе нанокompозитов..... 56

Абгарян К.К., Журавлев А.А., Ревизников Д.Л. Исследование процесса сегнетоэлектрического переключения в кристаллах оксида гафния и HZO 61

Верезуб Н.А., Простомолотов А.И. Моделирование МГД-воздействия на течение расплава кремния в процессе Чохральского..... 64

Жачук Р.А., Латышев А.В., Coutinho J. Влияние упругих деформаций и структуры поверхности Ge(111) на диффузию атомов Ge 67

Карандашев Я.М., Теплов Г.С. Исследование эффективности использования архитектур U-Net и CycleGAN в расчете фотошаблона для технологии 90-нм методом обратной литографии 70

Лю. Ш., Баринов А.А. Математическое моделирование теплопроводности нанонитей – перспективных компонентов полупроводниковой промышленности 73

Манцурова С.В., Шварц Н.Л. Влияние интенсивности потока Au и ориентации поверхности Si на скорость движения капель золота (Монте-Карло моделирование) 76

Матюшкин И.В. Проблемы синтеза коннекционистских представлений и континуальных моделей среды на примере мемристоров..... 79

Настовьяк А.Г., Шварц Н.Л. Модификация формы вертикальных нанопроволок в процессе отжига 85

Павлишин К.Ю., Абгарян К.К., Журавлев А.А. Применение машиннообученных потенциалов для изучения структурных свойств оксидных систем..... 88

Резник А.А., Резванов А.А., Ганыкина Е.А. Основные свойства ромбоэдрического диоксида гафния: расчёт из первых принципов 93

Романенков А.М., Костиков Ю.А. Моделирование колебаний барабанной перепонки при наличии симметричного кругового дефекта 96

Сеченых П.А. Моделирование кристаллической структуры шпинелей с применением реляционной схемы хранения данных 98

Тельминов О.А., Горнев Е.С. Анализ применения мемристорных кроссбаров в задачах нейросетевой обработки..... 102

Тихонова Е.Д., Горнев Е.С. Разработка модели для коррекции дефектов, повреждающих плавник, в Fin-FET-транзисторах..... 105

<i>Фаттахов А.Ф., Бажанов Д.И.</i> Исследование процесса образования наночастиц никеля вблизи границ дефектов структуры LSNT перовскита.....	108
--	-----

<i>Хвесюк В.И.</i> Новое направление теплофизики – теплофизика наносистем	111
---	-----

<i>Хвесюк В.И., Лю. Ш., Инь Фэй.</i> Расчет теплоемкости двумерного графена с учетом полных дисперсионных соотношений	115
---	-----

4. D. Моделирование размерных, радиационных, поверхностных и других дефектов в полупроводниковой наноэлектронике... 119

<i>Гайнуллин И.К.</i> Моделирование функционирования полупроводниковых приборов с учетом дефектов атомной структуры.....	120
--	-----

<i>Гончаров А.В., Чибисов А.Н.</i> Теоретический анализ дырочных состояний в тонком слое интерфейса Si/Ge/Si.....	123
---	-----

<i>Кобелева С.П., Зуев А.С., Стрельцов Н.А.</i> Минимизация концентрации СТД в CdTe.....	126
--	-----

<i>Окулич Е.В., Окулич В.И., Тетельбаум Д.И., Михайлов А.Н., Гайнуллин И.К.</i> Исследование влияния примесного состава и стехиометрии на структуру проводящего филамента мемристора на основе диоксида кремния методом молекулярной динамики.....	130
--	-----

<i>Верезуб Н.А., Простомолотов А.И.</i> Сопряженное моделирование дефектообразования при выращивании и термообработке бездислокационного монокристаллического кремния.....	133
--	-----

<i>Прохоренко А.В., Гниденко А.А., Чибисов А.Н., Чибисова М.А.</i> Упорядоченное поведение атомов фосфора на поверхности силена: DFT расчеты.....	136
---	-----

5. F. Моделирование структур и свойств композиционных материалов с нанокристаллами, нанокластерами, наноморфными включениями и т.д. 141

<i>Воронова Н.В.</i> Различные подходы при анализе данных с решетки акустоэлектронных датчиков.....	142
---	-----

<i>Зуев С.А., Зуев А.С., Кобелева С.П.</i> Моделирование проводимости тонкопленочных диодов Шоттки на GaAs	146
--	-----

<i>Оксаниченко Ф.В., Резванов А.А., Близнецов В.Н.</i> Моделирование газовой динамики в реакторе индуктивно-связанной плазмы для пластин диаметра 300 мм	150
--	-----

<i>Сенько О.В., Киселева Н.Н., Докукин А.А., Дударев В.А., Кузнецова Ю.О., Дмитриев Л.А.</i> Параметрические и непараметрические методы машинного обучения в задачах прогнозирования параметров кристаллической решётки неорганических соединений.....	153
--	-----

6. Г. Проблемы обеспечения надежности ЭКБ микроэлектроники и систем на ее основе	157
---	------------

<i>Горнев Е.С. Обеспечение надежности современных интегральных микросхем. Насущные проблемы.....</i>	<i>158</i>
--	------------

<i>Зацаринный А.А., Степченков Ю.А., Дьяченко Ю.Г., Хилько Д.В., Орлов Г.А., Дьяченко Д.Ю. Сбоеустойчивые самосинхронные счетчики.....</i>	<i>167</i>
--	------------

1. А

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

ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫЕ ИНФОРМАЦИОННЫЕ СИСТЕМЫ В МИКРОЭЛЕКТРОНИКЕ

Абгарян Каринэ Карленовна,

д.ф.-м.н., главный научный сотрудник,

заведующая отделом¹,

профессор²

kristal83@mail.ru

¹ФИЦ ИУ РАН, г. Москва

²ВМК МГУ, г. Москва

Аннотация. Работа посвящена вопросам, связанным с разработкой интеллектуальных систем в области микроэлектроники. Рассмотрены системы автоматизированного проектирования, применяемые в России и за рубежом. Представлены основные характеристики разрабатываемой интеллектуальной программной системы для создания элементов энерго-независимой памяти.

Ключевые слова: система автоматизированного проектирования, энергонезависимая память, полупроводниковые структуры, интеллектуальная программная система, машинное обучение.

Введение

В настоящее время интеллектуальные системы активно применяются практически во всех сферах жизни человека. Их влияние на уровень и качество жизни людей постоянно увеличивается. Построение и применение интеллектуальных систем, базирующихся на разных технологиях (информационных, сенсорных, нано-, био- и других) предоставляет новые возможности в различных областях жизнедеятельности человека. Сегодня можно сказать, что разработка интеллектуальных систем является одним из основных трендов в цифровой трансформации общества и автоматизации его ключевых процессов.

Интеллектуальные информационные системы

В данное время единого общепринятого определения интеллектуальной системы нет. Так, интеллектуальной информационной системой называют автоматизированную информационную систему, основанную на знаниях, или согласно другим определениям – информационную систему решающую интеллектуальную

задачу, либо использующую методы искусственного интеллекта. Комплекс программных, логико-математических и лингвистических средств для поддержки деятельности человека и поиска информации в режиме диалога на естественном языке также можно отнести к интеллектуальным системам.

Профессор Д.А. Поспелов (ВЦ РАН) – один из основателей научной школы искусственного интеллекта в России, предложил называть систему интеллектуальной [1], если в ней «реализованы основные функции:

- накапливать знания об окружающем систему мире,...;
- пополнять поступившие знаний с помощью логического вывода,...;
- общаться с человеком на языке, максимально приближенном к естественному,...».

Выделим два основных подхода к построению интеллектуальных систем. К первому можно отнести подход, основанный на машинном обучении (ML), ко второму на онтологиях [2]. Сегодня машинное обучение используется повсеместно. Почти все глобальные поисковые системы, такие как Google Search, Bing, Yandex и другие, в которых осуществляется поиск по тексту и изображениям, определяются объекты и люди на изображениях, анализируются тональности, а также в системах автономного вождения и другие основаны на использовании ML. Применение онтологий при создании интеллектуальных систем встречается намного реже. Приведем некоторые известные системы, в основе которых лежат онтологические модели:

- IBM Watson – программа, основана на онтологическом представлении знаний, полученных из энциклопедий и сторонних онтологий, в частности DBPedia, WordNet и Yago [IBM Watson, Sinha, 2016];

- HelathNavigator [HelathNavigator], определяющий возможные состояния здоровья на основе данных симптомов с использованием онтологии болезней и используемый в продукте Microsoft Healthcare Bot [Microsoft Healthcare Bot], который является интегрированным сервисом для определения возможных начальных состояний здоровья и ведения процесса лечения посредством текстового чата человека с ботом;

– программы-ассистенты Microsoft Cortana, Apple Siri, S-Voice и Google Now, использующие онтологии для «понимания» естественного языка, поиска в базе знаний и выбора желаемой реакции (ответ, действие, дополнительные вопросы) [Barbosa, 2017].

В работе [3] профессора Хорошевского В.Ф. (ВЦ РАН ФИЦ ИУ РАН) представлен аналитический обзор подходов, моделей, методов проектирования программного обеспечения (ПО) прикладных систем под управлением онтологий. Отмечается, что оба подхода (на основе онтологий и ML) применимы к решению задач построения интеллектуальных систем на разных этапах. Так, все перечисленные выше системы, на самом деле, в той или иной мере используют оба подхода. Необходимо отметить, что создание и использование методов онтологического моделирования в ходе процесса проектирования ПО могут помочь формализовать данные для машинного обучения. В свою очередь система машинного обучения позволяет автоматически наполнять или адаптировать онтологию для ее дальнейшего, более точного применения к формализации обучающих данных и т.д. На основе проведенного анализа Хорошевский В.Ф. [3] делает вывод о том, что сегодня процесс проектирования ПО постепенно будет переходить «от моделей сборки ПО прикладных систем из крупных функциональных блоков к модели генерации самих блоков из согласованной системы онтологических паттернов их внутренних спецификаций». Хорошевский В.Ф. отмечает, что трендом на сегодня является «использование методов и средств машинного обучения для генерации онтологических моделей проектирования ПО». Таким образом, можно сказать, что объединение этих двух подходов на сегодня является одним из наиболее перспективных направлений развития гибридных интеллектуальных систем.

Системы автоматизированного проектирования в области микроэлектроники

Развитие микроэлектроники неразрывно связано с созданием средств автоматизированного проектирования электронных устройств. Сегодня индустрия средств автоматизированного проектирования электроники (Electronic Design Automation – EDA) – является важнейшей составной частью электронной промышленности.

Так в 2022 году выручка отрасли EDA увеличилась на 12,5–13% и составила более 11,7 млрд долларов. На большую четверку

производителей автоматизированного программного обеспечения Cadence Design System, Synopsys, Ansys и Siemens EDA, в настоящее время приходится более 90% доходов отрасли EDA

Лидером в этой области на сегодня выступают Cadence Design System и Synopsys – крупнейшая компания, работающая в области САПР для проектирования электроники.

На сегодня один из наиболее востребованных пакетных решений под управлением искусственного интеллекта является Synopsys.ai, который используют 9 из 10 крупнейших полупроводниковых компаний, что делает Synopsys одним из первых лидеров в этой области. Разработка Quantum ATK [4] применяется для создания реалистичных сложных структур из новых кристаллических и аморфных материалов, сплавов, интерфейсов и многослойных стеков, моделирования тепловых и механических свойств, диффузионных и поверхностных процессов. Программные решения в QuantumATK позволяют проводить исследования на атомном уровне с использованием нескольких методов моделирования на одной платформе [4] в том числе: теории функционала плотности (DFT) с базисными наборами плоских волн или LCAO, полужемпирические методы, традиционные FF (силовые поля) методы, встроенная база данных 300 потенциалов, и ML FF методы (применяющие силовые поля, основанные на машинном обучении). С применением данных методов стало возможным изучать структурообразование аморфных материалов для новых модулей памяти PCRAM, ReRAM и FeRAM.

В России ряд компаний, разработчиков системного программного обеспечения, объединились в Консорциум «Базис», среди учредителей которого разработчики системного ПО «Аскон», «Скан», Eremex, Omega, Институт инженерной физики и Ассоциация электронного машиностроения. Консорциум отечественных разработчиков направил в 2022 году предложение Минпромторгу выработать стратегию развития российских систем автоматизированного проектирования для электроники.

Актуальность такого предложения связана с необходимостью замещения зарубежных САПР, разработчики которых (Synopsys, и Mentor Graphics) прекратили продажу лицензий в Россию и отказались от обновлений уже приобретенного ПО (программного обеспечения).

Система автоматизированного проектирования ЭКБ для создания ячеек энергонезависимой памяти на основе технологий ReRAM, FeRAM, MRAM. «ПО «СоВа»

В основу разработки положена многомасштабная схема моделирования, предполагающая рассмотрение физических явлений в полупроводниковых структурах и приборах микроэлектроники, начиная с явлений атомарного и молекулярного масштаба и заканчивая характеристиками приборных структур. Применяется оригинальный подход, основанный на теоретико-множественном представлении многомасштабных физико-математических моделей в виде таблиц данных, разного структурного типа [5]. Представлены оригинальные решения, позволяющие автоматизировать процесс компьютерного моделирования и подготовить основу для разработки интеллектуальной программной системы для создания элементов энергонезависимой памяти.

Важным элементом, применяемым для интеллектуализации разрабатываемой программной системы является создание новых вычислительных средств. Они позволяют на базе имеющихся квантово-механических расчетов, применяя алгоритмы машинного обучения, в частности генеративные нейронные сети, проводить скрининг и выявлять новые стабильные полупроводниковых структуры для ячеек энергонезависимой памяти, с целью повышения их надежности и производительности.

ПО «СоВа» строится по принципу многоуровневого ПО. Уровни ПО дифференцируются по временному и пространственному масштабу задач, начиная с атомарного и молекулярного уровня с переходом на уровень веществ, тел, структур с границами раздела, электрических и электрофизических характеристик приборных структур. Для решений на каждом уровне в систему «СоВа» будут подгружаться соответствующие вычислительные модули ПО.

Архитектура ПО «СоВа» предусматривает использование ряда оригинальных отечественных модулей[6], а также модулей в составе зарубежных специализированных ПО. Все они будут объединены под управлением разрабатываемой единой среды проектирования [7]. Разработанная среда исполнения сценариев, предоставит возможность в автоматическом режиме запускать сценарии с заданными входными параметрами, отслеживать их выполнение в целом, и по составным задачам, просматривать входные и выходные данные (результаты расчетов).

В результате реализации ПО «СоВа» предоставит исследователям в области микроэлектроники следующие возможности:

- автоматизировать процессы проектирования программных решений для создания и разработки элементов энергонезависимой памяти на основе технологий ReRAM, MRAM, FeRAM;
- проводить многоуровневые и распараллеленные расчеты в автоматизированном режиме на высокопроизводительных программных комплексах;
- наращивать классы решаемых задач, добавляя новые вычислительные модули и создавая оригинальные расчетные сценарии;
- интегрировать ПО «Сова» с существующими TCAD решениями, обеспечивая при этом информационную совместимость проектирующих и обслуживающих подсистем САПР;
- обеспечивать независимость данных на логическом и физическом уровнях, в том числе:
 - инвариантность к программному обеспечению, а также возможность одновременного использования данных из различных БД различными пользователями;
 - возможность интеграции неоднородных БД для их совместного использования с различными подсистемами САПР;
 - возможность наращивания БД;
 - контролируемую избыточность данных.

Выводы

В докладе рассматриваются актуальные методы и средства компьютерного моделирования, применяемые при создании интеллектуальных информационных систем. Выделены два основных подхода: основанный на машинном обучении (ML) и на онтологиях. Представлены примеры интеллектуальных систем, в том числе, применяемых в области микроэлектроники. Отмечено, что объединение подходов, основанных на машинном обучении и на онтологиях сегодня является одним из наиболее перспективных направлений, используемых при построении гибридных интеллектуальных систем. Рассмотрены вопросы, связанные с созданием среды автоматизированного проектирования элементов энергонезависимой памяти и устройств на их основе. Представлены основные особенности и проектируемые возможности разрабатываемой системы.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 23-91-01012.

Список использованных источников

1. Поспелов Д. А. Представление знаний о времени и пространстве в интеллектуальных системах / Поспелов Д. А. – М. : Наука, 1987.
2. Михайлюк А., Петренко Н. Машинное обучение и онтологии как два подхода к построению интеллектуальных систем//Онтология проектирования. Том 4. 2019.
3. 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.
4. С. Шмидstrup, Т. Маркуссен, Ванкрейвельд, Й. Веллендорф, Й. Шнайдер, Т. Гунст, Б. Вершихель, Д. Стради, А. Хомяков, У. Г. Вей-Хансен, М.-Э. Ли, С. Т. Чилл, Ф. Расмуссен, Г. Пенацци, Ф. Корсетти, А. Оджанпера, К. Йенсен, М. Л. Н. Палсгаард, У. Мартинес, А. Блом, М. Брандбидж и К. Стокбро, «QuantumATK: интегрированная платформа инструментов электронного и атомного моделирования», J. Phys.: Condens. Дело 32, 015901 (2020). arXiv: 1905.02794v2.
5. Абгарян К.К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. – М.: МАКС Пресс. 2017. 284 С. Монография
6. Абгарян К.К., Ревизников Д.Л., Журавлев А.А., Морозов А.Ю., Гаврилов Е.С. Многомасштабное моделирование нейроморфных систем. 2022. МАКС Пресс. – 128 стр.
7. Абгарян К.К., Гаврилов Е.С. Интеграционная платформа для многомасштабного моделирования нейроморфных систем// Информатика и её применение, 2020.Том 14, выпуск 2. С.104–110. DOI: 10.14357/19922264200215

INTELLIGENT PROGRAM SYSTEMS IN MICROELECTRONICS

K.K. Abgaryan^{1,2}

kristal83@mail.ru

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

²The faculty of Computational Mathematics and Cybernetics of Lomonosov Moscow State University (CMC MSU).

Abstract. The work is devoted to issues related to the development of intelligent systems in the field of microelectronics. Computer-aided design systems used in Russia and abroad are considered. The main characteristics of the developed intelligent software system for creating non-volatile memory elements are presented.

Keywords: computer-aided design system, non-volatile memory, semiconductor structures, intelligent software system, machine learning.

СИСТЕМЫ АВТОМАТИЗАЦИИ НАУЧНЫХ РАСЧЕТОВ ДЛЯ МНОГОМАСШТАБНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ НАНОКОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

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

*Гаврилов Евгений Сергеевич,
н.с., к.т.н.¹,
eugavrilov@gmail.com*

¹ФИЦ ИУ РАН, г.Москва

Аннотация. В работе рассматриваются вопросы построения систем автоматизации научных сервисов для многомасштабного моделирования наноконпозиционных материалов. Представленная типовая архитектура и программный инструментарий позволяют с небольшими трудозатратами интегрировать авторский программный модуль или пакет прикладных программ в платформу для многомасштабного моделирования наноконпозиционных материалов. Построенные программные решения могут быть использованы для ускорения и удешевления процессов поиска новых наноконпозиционных материалов с заданными свойствами.

Ключевые слова: многомасштабное моделирование; наноконпозиционные материалы; интеграционная платформа; программный комплекс; распределенная система; автоматизация научных расчетов.

Введение

Решение прикладных задач, связанных с многомасштабным моделированием [1,2] структуры и свойств наноконпозиционных материалов предполагает проведение широкомасштабных вычислительных экспериментов со сложным комбинированием различных инструментальных средств и расчетных модулей. Под расчетным модулем будем понимать программу, реализующую алгоритм расчета структуры или свойства материала, согласно физико-математической модели одного масштабного уровня. Расчетные модули могут быть представлены в виде узкоспециализированных пользовательских программ, скриптов, или программных пакетов для реализации класса задач. Для решения задач многомасштабного моделирования используется комбинация модулей обоих типов, причем количество модулей для сквозного решения одной задачи примерно

от 5 до 7. Для решения классов задач потребуются от десятков до сотен модулей, следовательно, необходимо разработать сервис-ориентированную архитектуру со слабой связностью для быстрой интеграции нового модуля с унифицированным интерфейсом в программный комплекс многомасштабного моделирования.

Сервис расчетного модуля

Для реализации вычислительного модуля в виде сервиса используется подход к проектированию «микросервисная архитектура», который обеспечивает такие ключевые нефункциональные свойства, как слабая связность сервисов, независимость разработки и тестируемость. Также требуется возможность масштабирования и восстановления после сбоев.

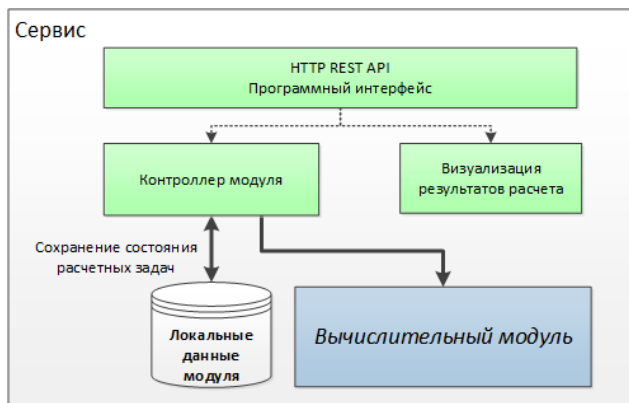


Рис. 1. Архитектура типового сервиса вычислительного модуля

Для повторного использования общей функциональности, она была вынесена в библиотеку-каркас для быстрой реализации новых сервисов в дальнейшем. Хотя использование каркаса не является обязательным, оно сокращает трудозатраты на реализацию новых сервисов с недель до дней.

В основе архитектуры каркаса лежат принципы разделения ответственности между каркасом и сервисом, модульности, инверсии управления, асинхронности потенциально длительных операций и сохранения состояния для восстановления после сбоя или перезагрузки сервиса.

Для некоторых пакетов, например, LAMMPS, которые представляют собственный язык программирования, разработан меха-

низм шаблонизации для быстрой интеграции новых видов молекулярно-динамических расчетов.

Для динамично меняющихся пользовательских скриптов был разработан специальный универсальный сервис, позволяющий запускать скрипты, сконфигурированные напрямую в сценарии пользователем, но с соблюдением всех функциональных и нефункциональных требований к расчетному сервису.

Выводы

В работе представлена типовая архитектура и программный инструментарий которые могут быть использованы при создании систем автоматизации научных расчетов для многомасштабного моделирования нанокomпозиционных материалов.

Предложенные подходы позволяют с небольшими трудозатратами интегрировать авторский программный модуль или пакет прикладных программ для расчетов свойств материалов в платформу многомасштабного моделирования нанокomпозиционных материалов. Построенные программные решения могут быть использованы для ускорения и удешевления процессов поиска новых нанокomпозиционных материалов с заданными свойствами.

Работа выполнена в рамках Крупного научного проекта № 075-15-2020-799 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации 2022–2023 гг.

Список использованных источников

1. Абгарян К. К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. – М.: МАКС Пресс, 2017. 284 с.
2. Абгарян К. К. Информационная технология построения многомасштабных моделей в задачах вычислительного материаловедения // Системы высокой доступности, 2018. Т. 15. № 2. С. 9–15.

AUTOMATION SYSTEMS FOR SCIENTIFIC CALCULATIONS FOR MULTISCALE MODELING OF COMPOSITE MATERIALS

K.K. Abgaryan, E.S. Gavrilov

Abstract. The paper deals with the issues of building automation systems for scientific services for multi-scale modeling of nanocomposite materials. The presented methods, typical architecture and software tools make it possible to integrate the author's software module or application software package into

a platform for multi-scale modeling of nanocomposite materials with little effort. The constructed software solutions can be used to speed up and reduce the cost of searching for new nanocomposite materials with desired properties.

Key words: multiscale modeling; composite materials; integration platform; software package; distributed system; automation of scientific calculations.

УДК 004.051

<https://doi.org/10.29003/m3576.MMMSEC-2023/18-22>

ОСНОВНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЙ, ПРОВОДИМЫХ В ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНОЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ СРЕДЕ ЦКП «ИНФОРМАТИКА»

*Денисов Сергей Анатольевич,
начальник ЦКП «Информатика»¹,
SDenisov@frccsc.ru*

*Зацаринный Александр Алексеевич,
д.т.н., профессор, главный научный сотрудник¹,
AZatsarinny@ipiran.ru*

*Маслов Алексей Евгеньевич,
главный специалист¹,
AMaslov@frccsc.ru*

¹*Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление»
Российской академии наук (ФИЦ ИУ РАН), г. Москва*

Аннотация. В работе представлены основные направления фундаментальных и прикладных исследований, проводимых с использованием высокопроизводительных вычислительных ресурсов вычислительной среды ЦКП «Информатика».

Ключевые слова: высокопроизводительный вычислительный комплекс, гибридная архитектура, индивидуальная среда моделирования, система математического моделирования.

В условиях возрастающей потребности в проведении компьютерных вычислений, требующих высокопроизводительных вычислительных ресурсов, при проведении фундаментальных и прикладных исследованиях, в том числе междисциплинарных исследований в области материаловедения [1, 2], Центр коллективного пользования «Высокопроизводительные вычисления и большие данные» (ЦКП «Информатика») [3] успешно обеспечивает

потребности научных коллективов ФИЦ ИУ РАН и внешних пользователей в высокопроизводительных вычислительных ресурсах. ЦКП располагает необходимыми ресурсами для решения широкого спектра исследовательских и прикладных задач на различных вычислительных архитектурах [4].

В настоящее время ЦКП предоставляет услуги по проведению экспериментальных исследований по целому ряду актуальных научных направлений, включая синтез новых материалов с заданными свойствами. Основные из них:

- моделирование сложных физических и технических систем, например, моделирования нейроморфных систем основу которых составляют мемристорные элементы [5];

- моделирование структурных свойств кристаллических материалов;

- моделирование механик разреженного газа и высокоскоростной аэродинамики, расчет аэродинамических характеристик, например, разработка метода дискретных скоростей для решения кинетического уравнения с модельным интегралом столкновений Бхатнагара–Гросса–Крука на примере расчета расширения осесимметричного факела в газ низкого давления за счет испарения с твердой поверхности под действием наносекундного лазерного импульса [6];

- моделирование химических реакций, квантово-механические и молекулярно-механические расчеты взаимодействий между атомами в молекуле, например, исследование реакции нуклеофильного замещения уридина, катализируемой бактериальными уридинфосфорилазами гибридными методами квантовомеханических и молекулярномеханических расчётов [7];

- молекулярная динамика, моделирование физико-химических процессов взаимодействия молекул, например, расчеты свободной энергии взаимодействия широко специфичной пиримидиннуклеозидфосфорилазы с потенциальными ингибиторами методами молекулярного моделирования комплексов белок–лиганд [8];

- разработка теоретико-вероятностных и статистических методов моделирования;

- разработка методов и информационных технологий системного анализа и управления в условиях неопределенности и риска, моделирование социальных, экономических и экологических процессов, например, исследование эффективности использования

рекуррентных нейронных сетей LSTM для свечных данных и индикатора технического анализа для большого числа наиболее распространенных валютных пар за длительный период времени с целью построения автоматических торговых стратегий [9];

- разработка методов и программных средств накопления и обработки больших данных;

- извлечение знаний и анализ текстов, например, определение депрессивности у пользователя социальной сети на основе интеллектуального анализа публикуемых текстовых сообщений и информации со страницы профиля пользователя [10];

- разработка методов, активной одновременной локализации и картографирования, на основе модели прогнозирующего интегрального пути, применяемых к реальному беспилотному транспортному средству, функционирующему в сложной производственной среде [11];

- машинное обучение, глубокое машинное обучение, разработка моделей искусственных нейронных сетей, например, разработка алгоритмов управления автономным транспортным средством в режиме реального времени с учетом статических и динамических ограничений [12].

В последнее время ЦКП активно используется для проведения экспериментальных исследований в интересах решения задач анализа уязвимостей искусственных нейронных сетей, а также изысканию методов повышения их устойчивости в условиях различных случайных и преднамеренных воздействий, в частности, задачи распознавания путем использования точек Харриса в качестве дополнительных признаков на изображениях.

При решении подобных задач активно применяются различные системы математического моделирования. В высокопроизводительной среде ЦКП исследователи при решении своих научных задач имеют возможность выполнять практические расчеты с применением следующих систем моделирования: Ansys, Intel oneAPI, Gromacs, Matlab, Orca, Pytorch, Tensorflow, Keras, Quantum Espresso как в фоновом (пакетном), так и в интерактивном режимах. Кроме того, имеется возможность интеграции других систем математического моделирования в высокопроизводительную вычислительную среду ЦКП.

Список использованных источников

1. 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). Москва: МАКС Пресс.
2. A.A. Zatsarinnyy. 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”.
3. ЦКП «Информатика» // [Электронный ресурс] – <http://www.frccsc.ru/ckp> (дата обращения 19.09.2023).
4. 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). Москва: МАКС Пресс.
5. Абгарян К.К., Гаврилов Е.С. Интеграционная платформа для многомасштабного моделирования нейроморфных систем // Информатика и её применение, 14(2), 2020.
6. Titarev V.A., Morozov A.A. Arbitrary Lagrangian-Eulerian discrete velocity method with application to laser-induced plume expansion // Applied Mathematics and Computation, 2022, v. 429, p. 127241.
7. П.А. Эйстрих-Геллер, С.В. Рубинский, В.Р. Самыгина, А.А. Лашков Исследование гибридными км/мм-методами реакции нуклеофильного замещения уридина, катализируемой бактериальными уридинфосфорилазами // Сборник тезисов докладов Седьмой Междисциплинарной конференции «Молекулярные и Биологические аспекты Химии, Фармацевтики и Фармакологии», 2021.
8. П.А. Эйстрих-геллер, С.В. Рубинский, В.Р. Самыгина, А. А. Лашков Расчеты свободной энергии взаимодействия широкоспецифичной пиримидиннуклеозидфосфорилазы с потенциальными ингибиторами // Биоорганическая химия, том 48, № 6, 2022.
9. Горшенин А. К., Гусейнова Е. И. Повышение доходности торговли на FOREX с помощью LSTM-идентификации свечных паттернов и индикатора тиковых объемов // Информатика и ее применения, 2021, т. 16, выпуск 3.
10. Ignatiev N., Smirnov I. and Stankevich M. Predicting Depression with Text, Image, and Profile Data from Social Media // Proceedings of the 11th International Conference on Pattern Recognition Applications and Methods (ICPRAM 2022), 2022, p. 753–760.
11. Дарьина А.Н., Прокопьев И.В. Пример использования метода aslam-mpri для мобильных роботов // Вопросы теории безопасности и устойчивости систем, 23, 2021.
12. Дарьина А.Н., Прокопьев И.В. Метод активной одновременной локализации и картографирования на основе модели прогнозирующего интегрального пути для мобильных роботов // Нейрокомпьютеры: разработка, применение, 23 (6), 2021.

THE MAIN DIRECTIONS OF RESEARCH CONDUCTED
IN THE SHARED RESEARCH FACILITIES
«HIGH PERFORMANCE COMPUTING AND BIG DATA»
(CKP «INFORMATICS»)

S.A. Denisov, A.A. Zatsarinny, A.E. Maslov

Abstract. The paper presents the main directions of fundamental and applied research carried out using high-performance computing resources of the computing environment of the CKP «Informatics».

Keywords: high-performance computing cluster, hybrid architecture, individual modeling environment, mathematical modeling system.

УДК 004.051

<https://doi.org/10.29003/m3577.MMMSEC-2023/22-26>

ВОЗМОЖНОСТИ ЦКП «ИНФОРМАТИКА»
ПО ПРЕДОСТАВЛЕНИЮ
ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ РЕСУРСОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ
ЗАДАЧ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ

*Денисов Сергей Анатольевич,
начальник ЦКП «Информатика»¹,
SDenisov@frccsc.ru*

*Кондрашев Вадим Адольфович,
к.т.н., заместитель директора¹,
VKondrashev@frccsc.ru*

¹Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление»
Российской академии наук (ФИЦ ИУ РАН), г. Москва

Аннотация. В работе рассматриваются подходы по предоставлению высокопроизводительных вычислительных ресурсов ЦКП «Информатика» для работы с системами математического моделирования при решении актуальных задач материаловедения. Представлена оценка среднего времени выполнения вычислительных экспериментов в высокопроизводительной вычислительной среде с применением системы моделирования Quantum Espresso.

Ключевые слова: высокопроизводительный вычислительный комплекс, гибридная архитектура, графический ускоритель, индивидуальная среда моделирования, контейнер, система математического моделирования.

Введение

Специализированные программные системы моделирования предъявляют высокие требования к вычислительным ресурсам и применяются в вычислительных комплексах, которые обладают высокой производительностью и позволяют решать задачи за приемлемое время с достаточной точностью. В настоящее время в качестве таких вычислительных комплексов выступают суперкомпьютеры, крупные вычислительные комплексы коллективного использования (центры коллективного пользования), вычислительные комплексы предприятий и научных коллективов.

Следует отметить, что требования к вычислительным ресурсам, предъявляемым со стороны программных систем моделирования, являются комплексными и включают требования к аппаратным ресурсам, необходимым для выполнения расчетов, и требования к способам предоставления доступа пользователей к программной системе моделирования в вычислительной среде высокопроизводительного вычислительного комплекса [1].

Подходы к предоставлению вычислительных ресурсов

В центре коллективного пользования «Высокопроизводительные вычисления и большие данные» (ЦКП «Информатика») [2] реализованы и успешно предлагаются пользователям следующие технологии предоставления доступа к программным системам моделирования в среде высокопроизводительного вычислительного комплекса:

- доступ пользователей к системе моделирования, централизовано установленной на комплексе (прямой доступ);
- организация для пользователя индивидуальной среды моделирования;
- доступ пользователей к системе моделирования через облачный сервис.

Прямой доступ к системе моделирования заключается в предоставлении пользователям непосредственного доступа к пользовательскому интерфейсу системы моделирования, установленной на вычислительных серверах. Данный подход имеет ряд ограничений, влияющих на работу с системой моделирования в вычислительной среде высокопроизводительного вычислительного комплекса, которые могут быть преодолены созданием индивидуальной среды

моделирования [3,4] путем создания и запуска виртуального контейнера с установленной системой моделирования.

Доступ к системе моделирования через облачный сервис позволяет работать с системой моделирования через web-браузер. Пользователям предоставляется доступ к личному кабинету через web-интерфейс, в котором пользователь осуществляет навигацию, выбор и выполнение управляющих воздействий, позволяющих работать с системой моделирования и запускать задания в среде высокопроизводительного вычислительного комплекса.

Вычислительная среда ЦКП находится под управлением системы организации вычислительного процесса Slurm Workload Manager, реализующей пакетное и интерактивное выполнение вычислительных заданий. Пользователи ЦКП для решения актуальных задач материаловедения имеют возможность использовать программные системы моделирования Ansys [5] и Quantum Espresso [6].

Система моделирования Ansys установлена на вычислительного сервера комплекса и доступна в пакетном и интерактивном режимах выполнения через сервер доступа пользователей, а также для интерактивного выполнения через сервис доступа.

Система моделирования Quantum Espresso установлена на вычислительного сервера комплекса, а также в специализированный докер контейнер, что позволяет использовать ее в пакетном и интерактивном режимах выполнения через сервер доступа пользователей и индивидуальной среде моделирования.

На примере системы Quantum Espresso было показано, что производительность выполнения расчетных задач зависит от качества внешних библиотек и технологий распараллеливания вычислительных заданий, установленных в вычислительной среде. Среднее время выполнения вычислительных экспериментов в вычислительной среде ЦКП с применением системы моделирования Quantum Espresso 7.1 в различных режимах и конфигурациях приведено в таблице.

Кол-во узлов / параллельных потоков	Прямой доступ к системе моделирования		Индивидуальная среда моделирования
	QE 7.1 + OpenMPI	QE 7.1 + IntelMPI	Nvidia docker QE 7.1
1 / 96	163 сек	140 сек	100 сек
2 / 192	152 сек	135 сек	—
4 / 384	78 сек	168 сек	—

Результаты использования Quantum Espresso 7.1 показывают, что в рамках одного вычислительного узла выполнение расчетов в индивидуальной среде моделирования является наиболее производительным, поскольку предустановленный Nvidia докер контейнер содержит оптимизированные и взаимосвязанные библиотеки в том числе для работы с графическими ускорителями Nvidia. При расчетах с задействованием нескольких вычислительных узлов лучшие результаты показала технология распараллеливания IntelMPI.

Выводы

На примере использования специализированной программной системы Quantum Espresso для математического моделирования в задачах материаловедения показано, что многообразие технологий доступа к вычислительным ресурсам коллективного пользования позволяет пользователям высокопроизводительных комплексов сократить время моделирования, учитывая особенности различных режимов и конфигураций комплекса.

Список использованных источников

1. 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. Т. 49. № 8. С. 600–602.
2. ЦКП «Информатика» // [Электронный ресурс] – <http://www.frccsc.ru/ckp> (дата обращения 19.09.2023).
3. 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). Москва: МАКС Пресс.
4. 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, vol. 49(8), p. 580–583.
5. Ansys // [Электронный ресурс] – <https://www.ansys.com/> (дата обращения 19.07.2022).
6. Quantum Espresso // [Электронный ресурс] – <https://www.quantum-espresso.org/> (дата обращения 19.09.2023).

CAPABILITIES OF THE SHARED RESEARCH FACILITIES «HIGH PERFORMANCE COMPUTING AND BIG DATA» (СКР «INFORMATICS») FOR PROVIDING HIGH-PERFORMANCE COMPUTING RESOURCES FOR SOLVING MATERIALS SCIENCE PROBLEMS

S.A. Denisov, V.A. Kondrashev

Abstract. The paper discusses approaches to providing high-performance computing resources of the CKP «Informatics» for working with mathematical modeling systems when solving current problems in materials science. An estimate of the average execution time of computational experiments in a high-performance computing environment using the Quantum Espresso simulation system is presented.

Keywords: high-performance computing cluster, hybrid architecture, graphics accelerator, individual modeling environment, container, mathematical modeling system.

УДК 004.051

<https://doi.org/10.29003/m3578.MMMSEC-2023/26-30>

ОПЫТ ФИЦ ИУ РАН ПО СОЗДАНИЮ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНОЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ИНФРАСТРУКТУРЫ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ

*Денисов Сергей Анатольевич,
начальник ЦКП «Информатика»¹,
SDenisov@frccsc.ru*

*Кондрашев Вадим Адольфович,
к.т.н., заместитель директора¹,
VKondrashev@frccsc.ru*

¹Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление»
Российской академии наук (ФИЦ ИУ РАН), г. Москва

Аннотация. В работе представлен опыт поэтапного развития высокопроизводительной вычислительной инфраструктуры ФИЦ ИУ РАН, которое позволило коллективу сотрудников Центра использовать современные технологии математического моделирования и организации вычислительного процесса на высокопроизводительных многоузловых гибридных вычислительных установках, проводить исследования на современном научно-техническом уровне.

Ключевые слова: высокопроизводительный вычислительный комплекс, гибридная архитектура, графический ускоритель, индивидуальная среда моделирования, контейнер, система математического моделирования.

Введение

Современные тенденции развития фундаментальной и прикладной науки, в том числе в области материаловедения, демонстри-

руют возрастающую потребность в проведении компьютерных вычислений, требующих высокопроизводительных вычислительных ресурсов. В свою очередь потребности научных коллективов, промышленных предприятий, коммерческих фирм в высокопроизводительных вычислительных ресурсах создают предпосылки использования существующих или создания собственных высокопроизводительных вычислительных инструментов.

Этапы создания высокопроизводительной вычислительной инфраструктуры

Учитывая потребности научных коллективов в производительных вычислительных ресурсах, ФИЦ ИУ РАН при модернизации серверной инфраструктуры в 2016 году начал создавать в Центре обработки данных (ЦОД) комплекс гибридных вычислительных серверов коллективного пользования для математического моделирования и решения расчетных задач.

На начальном этапе развития производительной вычислительной инфраструктуры центра была принята парадигма решения вычислительных задач на нескольких серверах с многоядерными производительными центральными процессорами, большим объемом памяти и графическими ускорителями среднего класса. Это позволило одновременно нескольким коллективам разрабатывать математические модели, применяя современные вычислительные технологии.

Следующим шагом наращивания мощности производительного вычислительного комплекса стало его оснащение несколькими серверами с производительными графическим тензор картами с включением их в сеть InfiniBand EDR. В 2018 году в состав вычислительных средств ЦОД были введены два гибридных высокопроизводительных вычислительных комплекса архитектуры IBM Power 9 (два сервера с четырьмя GPU Nvidia V100 SXM2 NVLink) и архитектуры Intel Xeon Platinum (два сервера с восьмью GPU Nvidia V100 SXM2).

Такая конфигурация вычислительных средств обеспечила успешное решение многопоточных расчетных задач в рамках одного вычислительного сервера, а также многопроцессных (параллельных) расчетных задач на нескольких вычислительных узлах, объединенных высокопроизводительной низколатентной сетью

InfiniBand. Это позволило при решении задач математического моделирования использовать современные технологии распараллеливания вычислений и выполнения производительных векторных вычислений в том числе в области машинного обучения.

Стало возможным использовать специализированные программные системы математического моделирования для различных сфер научной деятельности, ориентированные на высокопроизводительные вычисления, в том числе в сфере материаловедения (например, VASP, Quantum Espresso и др.).

Одновременно с задачами математического моделирования на вычислительном комплексе создавалась система организации вычислительного процесса и предоставление коллективного доступа к вычислительным ресурсам [1, 2, 3]. Объем и производительность вычислительных ресурсов ЦОД, а также система организации вычислительного процесса позволили обеспечить потребности в высокопроизводительных вычислительных ресурсах научных коллективов ФИЦ ИУ РАН и предоставили возможность привлекать внешних пользователей для проведения междисциплинарных исследований и тестирования вычислительной среды ЦОД.

Приобретенный опыт коллективного использования вычислительных ресурсов гибридного высокопроизводительного комплекса позволил в конце 2019 года создать Центр коллективного пользования «Высокопроизводительные вычисления и большие данные» (ЦКП «Информатика») как структурное подразделение ФИЦ ИУ РАН [4]. ЦКП зарегистрирован на портале «Научно-технологической инфраструктуры Российской Федерации» [5] и участвует в ежегодном мониторинге результативности деятельности, а также в информационно-аналитической системе РНФ как объект инфраструктуры (ОИ).

На настоящий момент в единой вычислительной среде ЦКП, находящейся под управлением системы организации вычислительного процесса Slurm Workload Manager, функционируют три гибридных высокопроизводительных вычислительных комплекса (всего 9 узлов в сети InfiniBand EDR, в том числе 4 узла с GPU Nvidia V100 и 5 узлов с GPU Nvidia A100), три высокопроизводительных вычислительных комплекса (всего 29 узлов в сети InfiniBand EDR, в том числе 6 узлов архитектуры ARM8), система хранения данных суммарной емкостью 1 Пбайт.

Выводы

Поэтапное создание высокопроизводительной вычислительной инфраструктуры ФИЦ ИУ РАН позволило создать современный ЦКП, который по номенклатуре технических средств, программного обеспечения и технологий, системотехнических решений по организации вычислительного процесса и предоставлению сервисов позволяет решать задачи с использованием современных вычислительных технологий, применяемым в аналогичных инфраструктурах отечественных и зарубежных центров обработки данных, суперкомпьютеров и облачных платформ. ЦКП располагает необходимыми ресурсами для решения широкого спектра задач на различных вычислительных архитектурах, в том числе актуальных задач материаловедения, машинного обучения и искусственного интеллекта. Сотрудники ЦКП обладают необходимыми компетенциями по организации вычислительного процесса для коллективного доступа к ресурсам многоузлового высокопроизводительного гибридного вычислительного комплекса.

Список использованных источников

1. Волович К.И., Денисов С.А. Подходы к организации вычислительного процесса гибридного высокопроизводительного комплекса для решения задач материаловедения // В сборнике: Информатика: проблемы, методы, технологии. Материалы XX Международной научно-методической конференции. Под редакцией А.А. Зацаринного, Д.Н. Борисова. 2020. С. 368–377.
2. 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). Москва: МАКС Пресс.
3. A.A. Zatsarinnyy. 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”.
4. ЦКП «Информатика» // [Электронный ресурс] – <http://www.frcsc.ru/ckp> (дата обращения 19.09.2023).
5. Портал «Научно-технологической инфраструктуры Российской Федерации» // [Электронный ресурс] – <http://ckp-rf.ru/ckp/675918/> (дата обращения 19.09.2023).

EXPERIENCE OF FRC CSC RAS IN CREATION OF HIGH-PERFORMANCE COMPUTING INFRASTRUCTURE FOR SOLVING MATERIALS SCIENCE PROBLEMS

S.A. Denisov, V.A. Kondrashev

Abstract. The paper presents the experience of the stage-by-stage development of high-performance computing infrastructure of the Federal Research Center Computer Science and Control of the Russian Academy of Sciences (FRC CSC RAS), which allowed the center's team to use modern technologies of mathematical modeling and organization of the computing process on high-performance multi-node hybrid computing clusters, and conduct research at the modern scientific and technical level.

Keywords: high-performance computing cluster, hybrid architecture, graphics accelerator, individual modeling environment, container, mathematical modeling system.

<https://doi.org/10.29003/m3579.MMMSEC-2023/30-38>

О ПРОБЛЕМАХ СИНТЕЗА НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ В УСЛОВИЯХ 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 работе рассматриваются проблемы синтеза новых материалов в современных условиях. Отмечено, что сегодня это важнейшая стратегическая задача инновационного развития промышленности России. Сформулированы факторы, определяющие актуальность этой задачи. Дан краткий анализ состояния российской микроэлектроники. Показана значимость методов математического моделирования и необходимость развития инновационных подходов в области синтеза новых материалов. В работе отмечено, что для дальнейшего развития методов и средств математического моделирования требуется отечественная высокопроизводительная среда для научных исследований, обладающая комфортным пользовательским интерфейсом, гибкостью в настройке ресурсов, высокой производительностью и надежностью.

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

Введение

В Послании Президента Федеральному собранию 21 февраля 2023 г. отмечено, что в условиях беспрецедентно масштабных экономических и финансовых санкций Запада против России обеспечено устойчивое состояние экономики и, что важно, системы управления. Так, вместо ожидавшегося в 2022 году спада валового внутреннего продукта на 20–25 % он снизился только на 2,1 % [1]. Более того, в 2023 году Всемирный банк включил Россию на 5-е место (1-е место в Европе) [2].

Вместе с тем, нельзя не признать, что 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. Ключевой проблемой становится обеспечение технологического суверенитета страны в области микроэлектроники на основе создания полнофункциональной микроэлектронной отрасли. Для успешного решения этой проблемы необходима системная концентрация всех видов ресурсов, включая научные и образовательные. Не секрет при этом, что состояние российской науки оставляет желать лучшего. Так, по уровню публикационной активности она находится на 8-м месте (3,5% публикаций), по уровню патентной активности на 11-м месте, а по уровню финансирования – на 34-м месте в мире (примерно 1% от ВВП) [3].

На заседании Совета по науке и образованию 8 февраля 2023 г. Президент РФ обратил внимание на формирование целостной системы планирования и управления научно-технологическим развитием [4]. Приняты принципиальные шаги в этом направлении.

Одним из важнейших наукоёмких научных направлений, которое определено в рамках первого приоритета Стратегии научно-технологического развития, является проблематика синтеза новых материалов с заданными свойствами на основе математического моделирования. Эта проблематика очень сложная, наукоёмкая, многоаспектная и поэтому требует всестороннего обсуждения в научном сообществе [5, 6, 7]. Существенный вклад в ее развитие вносят регулярные Международные конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК), которые, начиная с 2019 года, организуют ФИЦ ИУ РАН совместно с НИИМЭ.

В этом году состоялась юбилейная, пятая, конференция. И в этой связи, представляется целесообразным системно взглянуть на направления работ, которые были представлены и обсуждены на конференциях МММЭК-2022.

1. Факторы, определяющие значимость проблематики синтеза новых материалов

В докладах конференции достаточно детально и обоснованно представлены факторы, определяющие значимость проблематики синтеза новых материалов с заданными свойствами на основе математического моделирования высокопроизводительных вычислений. К ним следует отнести [8, 9, 10]:

- Синтез новых материалов с заданными свойствами как стратегически важное направление инновационного развития в рамках программы цифровой экономики;
- Успешное решение задач синтеза новых материалов как основа прорывных технологий для создания отечественной импортонезависимой электронной компонентной базы.
- Новые материалы – кардинальное решение проблемы обеспечения информационной безопасности компьютерных систем различного назначения, прежде всего в интересах государственного управления, обороны, безопасности и правопорядка.
- Требования создания перспективных комплексов вооружения и военной техники на отечественной электронной компонентной базе могут быть выполнены только за счет создания новых комплектующих элементов и материалов, а также технологий их получения.
- Разработанный научно-методический аппарат требует адекватной поддержки в виде высокопроизводительной гибкой исследовательской инфраструктуры.
- Создание современной исследовательской инфраструктуры должно стать мощным толчком для развития различных отраслей российской науки, которая находится в условиях концептуального перехода к новой парадигме в научных исследованиях, основанной на анализе накопленных больших данных в конкретных предметных областях.
- Необходимость создания высокопроизводительной исследовательской инфраструктуры является стимулом кардинального реформирования системы подготовки специалистов.

- Новым фактором становится интенсивное внедрение технологий искусственного интеллекта, которые могут существенно повлиять на все процессы создания новых материалов – от научных исследований до производственных процессов.

Необходимо отметить, что роль этих факторов не только сохраняется, но и усиливается. Другими словами, современные факторы, определяемые потребностями цифровой трансформации общества, определяют актуальность представления вычислительных систем для научных исследований в виде высокопроизводительной цифровой платформы.

2. Состояние российской микроэлектроники и пути выхода из кризиса

В докладах и выступлениях на конференциях большое внимание уделено не только анализу состояния микроэлектроники России, но предложениям по восстановлению этой отрасли [6, 11, 12].

Перечислим целый ряд проблем и барьеров, которых необходимо преодолеть для восстановления российской. Основные из них:

- Воссоздание научных школ проектирования микроэлектронной техники;
- Накопление знаний с учетом мирового опыта
- Создание конкурирующих научно-производственных и производственных групп
- Организация производства с необходимой мощностью
- Изыскание необходимого финансирования всего жизненного цикла микроэлектронной техники, включая фундаментальные научные исследования;
- Поиск заинтересованных инвесторов
- Обоснование новых логистических цепочек взаимодействия предприятий как внутри России, так и с другими странами (с учетом санкционных ограничений);

Особо отметим необходимость принципиального решения вопроса о прямом финансировании фундаментальных исследований в области микроэлектроники как со стороны государства, так и со стороны бизнеса. Речь идет об актуальных направлениях исследований компонентной базы на новых физических принципах, вклю-

чая, например, многоэлементные структуры на основе сверхпроводящих квантовых битов (кубитов), элементную базу на квантовых эффектах, углеродной электронике (на графене, на углеродных нанотрубках, на алмазе), органической электронике, интегрированной радиофотонике.

Ключевым должно стать создание в РФ нового микроэлектронного производства для перехода на новый качественный уровень технологии 28 нм и его дальнейшее развитие до технологического уровня 7 нм. Для этого необходима системная постановка работ по разработке технологий создания микроэлектронной компонентной базы, в том числе для аппаратуры военного и двойного назначения. Микроэлектроника должна быть обозначена на государственном уровне как базовая для всего комплекса высокотехнологичных отраслей.

Понимание таких подходов к модернизации этого направления в рамках общих целей развития страны в новых геополитических и экономических условиях должно обеспечить мобилизацию и сплоченность научного сообщества перед лицом реальных глобальных угроз. Особую значимость для нашей страны представляет собой проблема консолидации интеллектуальной элиты, решение которой необходимо для обеспечения сплоченности российского общества перед лицом глобальных угроз для национальной и глобальной безопасности. Определенный оптимизм вызывают в связи с этим заявления нового Президента РАН академика Г.Я. Красникова на заседании президиума РАН 2.11.2022 о реанимации 6-й подпрограммы фундаментальных научных исследований [11].

3. Математическое моделирование структуры и свойств наноматериалов и систем на их основе

Основные направления научных исследований, связанные с разработкой новых модельных представлений, методов и алгоритмов, применяемых в области математического моделирования структур и свойств наноматериалов, а также систем на их основе, были рассмотрены на IV Международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов»(МММЭК-2022). Наиболее интересные результаты, представленные на конференции по следующим направлениям.

Первое. Моделирование работы многоуровневых элементов памяти для компьютеров следующего поколения.

Второе. Математическое моделирование в структурном материаловедении.

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

Четвертое. Проблемы развития материаловедения квантово-размерных электронных гетероструктур.

В докладе коллег из Германии, Белоруссии и Португалии, были представлены результаты исследований магнитных свойств искусственно выращенных структур ферромолибдата стронция(SFMO), применяемых в многофункциональных микроэлектронных устройствах[13].

4. О развитии высокопроизводительных вычислений

Как показывает анализ мирового опыта [14], основными тенденциями являются использование гибридных вычислительных архитектур, организация вычислений в территориально распределенных вычислительных комплексах; виртуализация вычислительных сред и миграция вычислительной среды к источнику данных за счет использования технологий виртуализации и контейнеризации.

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 [15–19].

На базе платформы зарегистрирован центр коллективного пользования (ЦКП) «Информатика», на котором успешно решается целый ряд разнообразных задач, включая задачи синтеза материалов с заданными свойствами. Вместе с тем, ЦКП по своим характеристикам (15 узлов, 536 ядер, 26 графических ускорителей, 0,225 PFlops) уступает не только отечественным суперкомпьютерам, но и последним из TOP-500 (Китайский суперкомпьютер Inspur TS10000, 34 400 ядер и GPU, 3.0 PFlops).

В этой связи необходимо упомянуть о торжественном открытии 1 сентября 2023 г. нового суперкомпьютера «МГУ-270» в МГУ имени М.В. Ломоносова (на факультете ВМК). Архитектура суперкомпьютера «МГУ-270» сочетает в себе центральные процессоры (CPU), графические процессоры (GPU) и нейронные процессоры (NPU). Его вычислительная мощность достигает 400 петафлопс по операциям искусственного интеллекта. Суперкомпьютер стал результатом сотрудничества МГУ с ведущими российскими и зарубежными компаниями и организациями (Росатом, Роскосмос, Сбербанк, Intel, Nvidia, Huawei и другие) [20].

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

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 23-91-01012.

Литература

1. Послание Президента Федеральному собранию, 21 февраля 2023, <http://www.kremlin.ru/events/president/transcripts/statements/70565>
2. Рейтинг Всемирного банка <https://www.dp.ru/a/2023/08/04/vsemirnij-bank-vkljuchil-rossiju>
3. Наука. Технологии. Инновации: 2023: краткий статистический сборник / В.В. Власова, Л.М. Гохберг, К.А. Дитковский и др.; Нац. исслед. ун-т «Высшая школа экономики». – М.: НИУ ВШЭ, 2023. – 102 С. – 300 экз. – ISBN 978-5-7598-27
4. Заседание Совета по науке и образованию 8 февраля 2023 г. Москва, Кремль <http://www.kremlin.ru/events/president/transcripts/deliberations/70473>
5. Абгарян К.К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. – М.: МАКС Пресс. 2017. 284 с.
6. Зацаринный А.А., Абгарян К.К. Синтез новых материалов как приоритетное направление инновационного развития промышленности // Материалы 4-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК-2022). Москва: МАКС Пресс. С. 8–14.
7. 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. С. 47–54.

8. 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). Москва: МАКС Пресс. С. 8–11.

9. 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. Т. 49. № 8. С. 600–602.

10. Зацаринный А.А., Абгарян К.К. Актуальные проблемы создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках цифровой трансформации общества // Материалы 2-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК-2020). Москва: МАКС Пресс. С. 3–13.

11. Г.Я. Красников на Президиуме РАН, 2.11.2022. <https://youtu.be/GQB8kP575Xo>

12. Зацаринный А.А., Абгарян К.К. Синтез новых материалов как приоритетное направление инновационного развития промышленности// Материалы 4-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК-2022). Москва: МАКС Пресс. С. 8–14.

13. G. Suchanek, N. Kalanda, M. Yarmolich, E. Artiukh, G. Gerlach, N. Sobolev. Magnetization of magnetically inhomogeneous $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ nanoparticles //Proceedings of the 4th international conference “Mathematical modeling in materials science of electronic components” (ICM3SEC-2022). Moscow: MAKS Press. P. 58.

14. Тельминов О.А., Горнев Е.С. Анализ элементной базы и схмотехнических решений для нейроморфных вычислений на мемристорных кроссбарах // Материалы 4-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК-2022). Москва: МАКС Пресс. С. 156–159.

15. Волович К.И., Денисов С.А., Кондрашев В.А. Управление вычислительными заданиями высокопроизводительного вычислительного комплекса при решении задач материаловедения // Материалы 4-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК-2022). Москва: МАКС Пресс. С. 24–29.

16. Абгарян К.К. Проектирование программных систем для моделирования в материаловедении электронных компонентов // Материалы 4-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК-2022). Москва: МАКС Пресс. С. 62–68.

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

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

19. A.A. Zatsarinnyy. 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”.

20. В МГУ появился мощный суперкомпьютер для работы с ИИ. 1.09.2023 <https://www.gazeta.ru/tech/2023/09/01/17518010.shtml>

ON PROBLEMS OF SYNTHESIS OF NEW MATERIALS IN CONDITIONS OF INNOVATIVE INDUSTRY DEVELOPMENT

A.A. Zatsarinny, K.K. Abgaryan

Abstract. The work examines the problems of the synthesis of new materials in modern conditions. It is noted that today this is the most important strategic task of innovative development of Russian industry. The factors determining the relevance of this task are formulated. A brief analysis of the state of Russian microelectronics is given. The importance of mathematical modeling methods and the need to develop innovative approaches in the field of synthesis of new materials are shown. The paper notes that for the further development of methods and means of mathematical modeling, a domestic high-performance environment for scientific research is required, with a comfortable user interface, flexibility in setting up resources, high performance and reliability.

Keywords: digital transformation, synthesis of new materials, new materials, multi-scale modeling, high-performance research infrastructure.

УДК 004.051

<https://doi.org/10.29003/m3580.MMMSEC-2023/38-41>

НЕКОТОРЫЕ АСПЕКТЫ ВЫБОРА ПОКАЗАТЕЛЕЙ ЭФФЕКТИВНОСТИ ЦЕНТРА КОЛЛЕКТИВНОГО ПОЛЬЗОВАНИЯ «ИНФОРМАТИКА» ПРИ РЕШЕНИИ ЗАДАЧ СИНТЕЗА НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ

Зацаринный Александр Алексеевич,

д.т.н., профессор, главный научный сотрудник¹,

AZatsarinny@ipiran.ru

Ионенков Юрий Сергеевич,

к.т.н., старший научный сотрудник¹,

Ulonenkov@ipiran.ru

¹*ФИЦ ИУ РАН, г. Москва*

Аннотация. В работе рассмотрен вопрос выбора показателей эффективности функционирования центра коллективного пользования (ЦКП) «Информатика». Отмечены особенности выбора показателей эффективности ЦКП при решении задач синтеза новых материалов.

Ключевые слова: центр коллективного пользования, эффективность, показатель, производительность.

Введение

Основной задачей ЦКП является обеспечение широкого спектра научных исследований с использованием имеющейся у организации материально-технической базы, в том числе, в интересах третьих лиц. Весьма актуальной задачей является оценка качества функционирования ЦКП. Руководящие документы определяют минимальный перечень показателей для этой цели, который является общим для всех видов ЦКП [1]. С учетом целевой направленности использования ЦКП, используемых ресурсов для оценки деятельности ЦКП требуются более полные перечни показателей, включающие, наряду с обязательными, дополнительные, специфические для каждого ЦКП и конкретного вида его деятельности показатели.

Методический подход к выбору показателей эффективности ЦКП «Информатика» при решении задач синтеза новых материалов

Общая характеристика ЦКП «Информатика», представляющего собой гибридный высокопроизводительный вычислительный комплекс, включая основные характеристики его научного оборудования, организацию работы и возможности представлена в публикациях [2–5].

ЦКП «Информатика» используется при решении задач синтеза новых материалов, которые требуют больших объемов вычислительных ресурсов. При этом применяются индивидуальные среды исполнения на основе технологий виртуализации, что позволяет предоставить пользователю полностью готовую среду для выполнения расчетов.

В этом плане особое значение приобретает первоочередной учет и выбор технических показателей эффективности ЦКП, которые характеризуют возможности вычислительного комплекса по созданию среды виртуализации (пиковая производительность вычислительной системы, реальная производительность вычислительной системы на специализированных тестах, загрузка оборудования прикладными задачами, эффективность программного кода – показатели производительности компонентов алгоритма (процедур и циклов).

Анализ особенностей ЦКП «Информатика», в том числе при решении задач синтеза новых материалов, позволяет выделить три

группы показателей, характеризующих различные стороны деятельности ЦКП [5].

Показатели развития позволяют оценить соответствие структуры ЦКП его задачам, число пользователей, численность и квалификацию сотрудников ЦКП, эргономические характеристики, наличие нормативной и технической документации.

Показатели деятельности характеризуют следующие технические и технологические возможности ЦКП (пиковая производительность, реальная производительность, производительность на специализированных тестах; характеристики системы хранения данных; временные характеристики работы ЦКП; время загрузки ЦКП; время работы ЦКП в интересах третьих лиц.

К показателям оценки результативности могут быть отнесены: число выполненных научных исследований; число публикаций о результатах исследований, подготовленных с помощью ЦКП; стоимость выполненных работ и услуг; использование оборудования ЦКП.

Общая эффективность ЦКП определяется следующим образом: на основе частных показателей рассчитываются три обобщенных показателя, характеризующих приведенные выше стороны функционирования ЦКП и интегральный показатель, показывающий эффективность ЦКП в целом.

Выводы

Изложенные в статье методические подходы позволяют оценить эффективность применения ЦКП «Информатика» для научных исследований, а также его вклад в обеспечение научных исследований при решении задач синтеза новых материалов. Предложен расширенный по сравнению с определенными нормативными документами перечень показателей эффективности ЦКП, включая обобщенные и частные показатели, учитывающие его развитие, деятельность и итоги работы.

Список использованных источников

1. Постановление Правительства РФ от 17 мая 2016 г. № 429 «О требованиях к центрам коллективного пользования научным оборудованием и уникальным научным установкам, которые созданы и (или) функционирование которых обеспечивается с привлечением бюджетных средств, и правилах их функционирования». <https://base.garant.ru/71402960/>

2. Центр коллективного пользования «Информатика». URL: <http://www.frccsc.ru/ckp>

3. Волович К.И., Денисов С.А., Мальковский С.И. Формирование индивидуальной среды моделирования в гибридном высокопроизводительном вычислительном комплексе // Материалы I международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. МММЭК-2019». М.: МАКС Пресс, 2019. С. 21–24.

4. Волович К.И. Оценка загрузки гибридного вычислительного комплекса при выполнении задач моделирования в материаловедении // Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. МММЭК-2020. 19–20 октября 2020 г., Москва: Материалы II Международной конференции. – Москва: МАКС Пресс, 2020. – С. 30–33.

5. 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. М.: Радиотехника, 2020, № 2. С. 44–51.

SOME ASPECTS OF THE CHOICE OF PERFORMANCE INDICATORS OF THE CENTER FOR COLLECTIVE USE “INFORMATICS” WHEN SOLVING PROBLEMS OF SYNTHESIS OF NEW MATERIALS

A.A. Zatsarinny, Yu.S. Ionenkov

Abstract. The paper considers the issue of the choice of indicators of the effectiveness of the functioning of the center for collective use (CCU) «Informatics». The peculiarities of the choice of CCU efficiency indicators in solving problems of synthesis of new materials are noted.

Keywords: center for collective use, efficiency, indicator, productivity.

2. В

ПРОБЛЕМЫ РАЗВИТИЯ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ КВАНТОВОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР

ВЫЧИСЛЕНИЕ ТЕРМИЧЕСКОГО СОПРОТИВЛЕНИЯ НА ГРАНИЦЕ Si/SiO₂(α -кварц)

Абгарян Каринэ Карленовна¹,

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

e-mail: kristal83@mail.ru

Колбин Илья Сергеевич¹

к.ф.-м.н., н.с. ФИЦ ИУ РАН,

e-mail: iskolbin@gmail.com

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

Аннотация. В работе представлен результат расчета термического сопротивления (сопротивлением Капицы) для интерфейса Si/SiO₂(α -кварц) с использованием моделей акустического и диффузного несоответствия. Полученные результаты верифицировались по данным из опубликованных статей, что позволило в целом судить об адекватности использованных моделей.

Ключевые слова: термическое сопротивление (сопротивление Капицы), тепловые процессы, наномасштабные уровни, метод молекулярной динамики, интерфейс.

Производительность современных микроэлектронных устройств во многом ограничена увеличением тепловыделения при росте частотных характеристик проектируемых систем, при этом дальнейшая миниатюризация во многом усугубляет данную проблему. Это делает актуальным проведение исследований, связанных с моделированием тепловых процессов на микро- и наномасштабах [1]. Важно отметить, что при рассмотрении устройств на таких масштабах существенно ограничивается эффективность классических подходов, основанных на законе Фурье, т.к. режим теплопереноса становится в основном баллистическим, что требует учета квантово-механических свойств материалов [1, 2].

В случае моделирования теплопереноса в устройствах с характерным размером сопоставимым с длиной свободного пробега носителя тепла (в случае полупроводников и диэлектриков основными носителями являются фононы, квазичастицы-кванты колебательного движения атомов кристаллов), основные изменения

теплового потока происходят на границах сред, а не в самих материалах. Скачкообразное изменение температуры на этих границах (на интерфейсах) определяется интерфейсным термическим сопротивлением (сопротивлением Капицы) [3]. Расчет данной величины представляет большой научный и практический интерес, т.к. позволяет точно моделировать тепловые процессы, в частности, в полупроводниковых устройствах. В настоящей работе сделан расчет для интерфейса Si/SiO₂(α -кварц), подобная граница возникает, например, при использовании технологии кремний на изоляторе.

Точный расчет интерфейсного сопротивления представляется сложной задачей, однако в ряде случаев удовлетворительных результатов можно добиться с использованием достаточно простых методов, а именно моделей акустического и диффузного несоответствия, АММ и ДММ, соответственно [4]. В работе были проведены расчеты с использованием данных моделей для термического сопротивления на границе Si/ α -кварц для температур в интервале 292–846К. В результате вычислений было получено, что термическое сопротивление сильно зависит от направления теплового потока, сопротивление Капицы при направлении теплового потока от кремния к α -кварцу более чем на порядок выше, чем в обратном направлении на всем интервале температур. Полученные в ходе расчетов термического сопротивления на границе Si/ α -кварц результаты сравнивались с данными аналогичных расчетов с использованием методов молекулярной динамики при 300К [5], где было получено значение 4.27×10^{-9} м²К/Вт. В настоящей работе значение термического сопротивления составляет 5.75×10^{-9} м²К/Вт для АММ, 6.16×10^{-9} м²К/Вт для ДММ, что позволяет в целом судить об адекватности использованных моделей.

Список литературы

1. Хвесьюк В.И., Скрыбин А.С. Теплопроводность наноструктур. Теплофизика высоких температур, том 55, н. 3. С. 446–471 (2017). 10.7868/S0040364417030127.
2. Абгарян К.К., Колбин И.С. Вычисление эффективного коэффициента теплопроводности сверхрешетки на основе кинетического уравнения Больцмана с использованием первопринципных расчетов. Известия ВУЗов: материалы электронной техники, том 22, н. 3, с. 190–196 (2019). 10.17073/1609-3577-2019-3-190-196.
3. Kapitza P. // J. Phys. USSR. 1941. V. 4. P. 181–210.
4. Swartz, Eric T. and Robert O. Pohl. Thermal boundary resistance. *Reviews of Modern Physics* 61 (1989): 605–668.

5. Deng, Shichen & Xiao, Chengdi & Yuan, Jiale & Ma, Dengke & Li, Junhui & Yang, Nuo & He, Hu. (2019). Thermal Boundary Resistance Measurement and Analysis Across SiC/SiO₂ Interface.

CALCULATION OF THERMAL RESISTANCE AT THE BOUNDARY

K.K. Abgaryan, I.S. Kolbin

Abstract. This paper presents the result of calculating the thermal resistance (Kapitza resistance) for the Si/SiO₂(α -quartz) interface using acoustic and diffuse misfit models. The results obtained were verified using data from published articles, which made it possible to generally judge the adequacy of the models used.

Key words: thermal resistance (Kapitsa resistance), thermal processes, nanoscale levels, molecular dynamics method, interface.

УДК 538.91

<https://doi.org/10.29003/m3582.MMMSEC-2023/46-49>

ВЛИЯНИЕ ЭФФЕКТА РЕЛАКСАЦИИ НА ТРАНСПОРТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МУАРОВОГО ГРАФЕНА

Савельев Владислав Владимирович,

аспирант, 2 год¹,

savelevvladv@mail.ru

Хазанова Софья Владиславовна,

к.ф.-м.н., доцент¹,

khazanova@phys.unn.ru,

¹ННГУ им. Н.И. Лобачевского

Аннотация. Вследствие смещения двух графеновых слоев на некоторый угол друг относительно друга в структуре возникают участки с различным типом кристаллографической упаковки (АА- и АВ-упаковка). При этом внешне данная структура имеет геометрический узор, напоминающий «муар», а в энергетическом спектре это проявляется как чередование щелевых и бесщелевых областей. Пространственный период изменения энергетических параметров составляет величину порядка десяти нанометров, следовательно, области могут рассматриваться как некая сверхрешётка. Кроме того, на границах участков с различной упаковкой происходит т.н. релаксация, влияющая на размеры областей и энергетическую структуру в них. В данной работе численно исследуется

влияние угла разориентации слоев, параметра энергетической щели и влияние релаксации на транспортные характеристики слоев.

Ключевые слова: графен, двумерные материалы, твистроника, релаксация, матрица переноса.

Введение

Основными требованиями, предъявляемыми к современным электронным устройствам, являются миниатюризация, быстродействие и низкое энергопотребление, поэтому элементная база таких устройств все чаще основывается на двумерных материалах, обладающих высокой подвижностью носителей заряда и рядом уникальных электрофизических свойств. Кроме того, создание структур пониженной размерности позволяет использовать квантовые эффекты, такие как дискретизация спектра, туннелирование, осцилляции проводимости в магнитном поле. Одним из таких материалов является графен (монослой атомов углерода), существенным недостатком которого является отсутствие запрещённой зоны, необходимой для управления электронным транспортом приборов. Отсюда вытекает актуальность поиска щелевых модификаций графена, другими словами, создания структур, в которых графен становится узкощелевым полупроводником. Создание требуемых энергетических свойств для однослойного графена возможно с помощью легирования или воздействия подложки. Другой способ модифицировать графен связан с созданием структур из нескольких слоёв, развёрнутых относительно друг друга, что открывает новый раздел электроники – твистронику [1]. Управление характеристиками подобных структур может осуществляться путем смещения слоёв относительно друг друга.

Расчёт транспортных характеристик

В двуслойном графене с различным углом разориентации появляются периодически расположенные области (т.н. АА- и АВ-упаковки), при этом свойства графена периодически меняются и возникает узор, напоминающий муаровый. Так появляется сверхпериод в геометрии данных слоев, а вследствие этого и в энергетической структуре, размеры областей и, соответственно, параметр сверхпериода зависят от угла разориентации. Можно подобрать углы таким образом, что пространственный период изменения энергетических параметров будет иметь порядок десяти нанометров. АА-упакованные области имеют полуметаллические свойства, характери-

зуются высокой плотностью состояний и обеспечивают конфайнмент электронов, в то время как АВ-упакованные имеют полупроводниковые свойства. 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 ряде работ указывается что в некотором диапазоне угла разориентации скорость Ферми в графеновых муаровых слоях может уменьшаться [1]. С другой стороны, эффекты релаксации, усиливающие резкость границ и меняющие размеры областей с различными упаковками, приводят в результате к увеличению скорости Ферми и усложнению зонной структуры [2]. Для каждой конкретной структуры требуется детальное рассмотрение результата действия этих процессов на параметры.

В качестве исследуемых структур рассматривается двуслойный графен после релаксации, слои которого повернуты друг относительно друга на некоторый угол. В данной работе для структур с различным сверхпериодом численным методом матрицы переноса рассчитываются коэффициенты прохождения, затем на их основе получаются вольтамперные характеристики. Исследуется влияние угла разориентации слоёв, силы межслойного взаимодействия и параметра релаксации в двуслойном графене на транспортные характеристики структуры.

Выводы

Определены значения углов, начиная с которых зависимость транспортных характеристик двуслойного муарового графена от энергии становится немонотонной. Выявлены параметры, при которых вольтамперные характеристики двуслойного муарового графена имеют область отрицательной дифференциальной проводимости.

Список использованных источников

1. Rozhkov A.V. et al, Electronic properties of graphene-based bilayer systems // Physics Reports, 2016. Vol. 648, pp. 1–104.
2. Nguyen N.T. Nam and Mikito Koshino, Lattice relaxation and energy band modulation in twisted bilayer graphene // PRB, 2017. Vol. 96, pp. 075311.

TRANSPORT CHARACTERISTICS OF MOIRE GRAPHENE WITH RELAXATION EFFECTS

V.V. Saveliev, S.V. Khazanova

Abstract. Due to the two graphene layers displacement at a certain angle relative to each other the different types regions of crystallographic (AA- and

AB-packages) appears in the structure. At the same time, this structure has a geometric pattern looks like a “moiré” and their energy spectrum has alternation of the energy gap and gapless regions. The spatial period of the energy changing parameters is about ten nanometers order, therefore, the regions can be considered as a superlattice. In addition, at the areas boundaries, the relaxation occurs, which affects the region size and the energy structure in them. In this work, we numerically study the layers disorientation angle influence, the energy gap parameter, and the relaxation effects on the transport characteristics.

Key words: graphene, two-dimensional materials, twistronics, relaxation, transfer matrix

<https://doi.org/10.29003/m3583.MMMSEC-2023/49-50>

GROWING DEMAND FOR COMPUTING POWER: AN ENERGY PROBLEM IN A GREEN WORLD

Nikolai A. Sobolev^{1,2}
sobolev@ua.pt

¹Departamento de Física and i3N, Universidade de Aveiro, Portugal

²Laboratory of Functional Low-Dimensional Structures, National University of Science and Technology “MISiS”, 119049 Moscow, Russia

Intensive fossil energy consumption, combined with territorial dynamics that tend to concentrate the population in urban areas, poses strong energy challenges to the development of future cities.

The main advantage of energy carriers such as fossil oil, gas, and coal is their high energy density (12,000 Wh/kg in the case of gasoline vs. the current energy density of a car battery of about 250–300 Wh/kg). However, the resulting drawbacks are colossal, and the rate at which renewable energy has grown has been outpaced by ever-growing energy demand. Enormous CO₂ emissions mainly originate from the mobility sector and industries.

Surprisingly or not, the rapidly growing demand for computing power also causes a serious energy problem. Until 2012, computing power demand doubled every 24 months; recently this has shortened to approx. every 2 months. Computing power explains 49–94% of the performance improvements in such domains as weather prediction, protein folding, and oil exploration. But an **exponential** increase in computing power is needed to get **linear** improvements in these outcomes. The increasing demand for computing power vastly outpaces improvements made through Moore’s law scaling. The exponential increase since 2011 in the costs of training AI models is clearly unsustainable. Machine

learning is on track to consume all the energy being supplied, a model that is costly, inefficient, and unsustainable. The cost of powering / cooling a server is now comparable to the purchase cost of the server hardware. Data centres consumed $\sim 8\text{--}10\%$ of US electricity in 2019.

To eliminate the use of fossil energy carriers, new alternatives are needed that satisfy some requirements:

- high energy density,
- no CO_2 emissions, and
- greater energy efficiencies

as the main rules in the new energy models.

In this talk, I'll analyse the efficiency and applicability of different energy technologies and describe the most promising energy harvesting techniques, including my results in the area.

УДК 004.3:004.9

<https://doi.org/10.29003/m3584.MMMSEC-2023/50-54>

КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК $\text{Eu}_2\text{MgSi}_2\text{O}_7$

Цысарь Ксения Михайловна,

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

Бажанов Дмитрий Игоревич,

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

Абгарян Каринэ Карленовна,

*д.ф.-м.н., г.н.с.²,
kristal83@mail.ru*

Киселева Надежда Николаевна,

*д.х.н., заведующая лабораторией³
kis@imet.ac.ru*

¹МГУ имени М.В. Ломоносова, г. Москва

²ФИЦ ИУ РАН, г. Москва

³ИМЕТ РАН, г. Москва

Аннотация. В работе выполнено квантово-механическое моделирование оптических свойств пиросиликата европия $\text{Eu}_2\text{MgSi}_2\text{O}_7$. Были рассчитаны спектры преломления и поглощения $\text{Eu}_2\text{MgSi}_2\text{O}_7$, а также

изучена плотность состояний системы. Расчеты показали взаимосвязь между оптическими характеристиками пиросиликата европия и его электронной структурой.

Ключевые слова: квантово-механическое моделирование, оптические свойства, пиросиликат европия, плотность состояний.

Введение

Пиросиликаты редкоземельных элементов (РЗЭ) находят применение как детекторы ионизирующего излучения, а также эффективно используются для генерации второй гармоники [1]. Структуры пиросиликатов РЗЭ характеризуются большим разнообразием и зависят от типа РЗЭ и температуры синтеза [2, 3]. Поскольку не все пиросиликаты РЗЭ были синтезированы в виде совершенных монокристаллов, а многие пиросиликаты могут быть синтезированы с различными пространственными группами симметрии [2, 3], а также с различающейся структурой межатомных связей при одинаковом химическом составе соединения, точный анализ влияния их структуры на оптические характеристики затруднен и определение связи между кристаллической структурой и возможными оптическими характеристиками и свойствами электронной структуры является важной задачей физики РЗЭ. Спектроскопия комбинационного рассеяния света (КРС) позволяет дополнить информацию о строении материалов, однако, обратная задача – предсказание возможных оптических свойств пиросиликатов РЗЭ, по информации о строении их кристаллической решетки представляется возможным только с использованием квантово-механических методов вычислений. Кроме того, данные методы обладают высокой степенью достоверности и точности, так как не используют подгоночные параметры.

В этой связи целью настоящей работы являлось получение информации о влиянии структуры ячейки на электронную структуру пиросиликатов РЗЭ на примере пиросиликата европия $\text{Eu}_2\text{MgSi}_2\text{O}_7$ с помощью метода квантово-механического моделирования, а также изучение взаимосвязи между особенностями электронной структуры $\text{Eu}_2\text{MgSi}_2\text{O}_7$ и его оптическими характеристиками.

Моделирование оптических свойств

В данной работе проведено квантово-механическое исследование оптических свойств и свойств электронной структуры пиросиликата европия $\text{Eu}_2\text{MgSi}_2\text{O}_7$. Теоретическое исследование проведено с помощью квантово-механического кода VASP [4]. 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.

Исследование электронной структуры пиросиликата европия $\text{Eu}_2\text{MgSi}_2\text{O}_7$ позволило определить ширину запрещенной зоны 4,9 эВ, которая согласуется с результатами экспериментальных работ [5]. Внутри запрещенной зоны пиросиликата европия $\text{Eu}_2\text{MgSi}_2\text{O}_7$ обнаружено появление острого уединенного пика f -состояний, расположенного вблизи дна зоны проводимости пиросиликата. Именно появление этого пика оказывает основное влияние на характеристические особенности спектров преломления n и поглощения k пиросиликата европия $\text{Eu}_2\text{MgSi}_2\text{O}_7$. Наши квантово-механические расчеты оптических характеристик пиросиликата европия $\text{Eu}_2\text{MgSi}_2\text{O}_7$ выявили зависимость оптических свойств нанопроводов от электронной структуры системы, которая в свою очередь сильно зависит от кристаллической структуры соединения. В результате проведенного исследования нами обнаружена анизотропия оптических свойств пиросиликата и различие показателей преломления в плоскости падения $n_{\parallel}$ и в перпендикулярном направлении $n_{\perp}$. Кроме того, в низкочастотной области в спектре показателя преломления n нами обнаружены сингулярности, которые могут быть связаны с появлением уединенного пика f -состояний европия. Положение данного пика вблизи уровня Ферми приводит к появлению электронной электропроводности у пиросиликата европия за счет перехода электронов между f -состояниями европия внутри запрещенной зоны и d -состояниями европия, расположенными на дне зоны проводимости. В данном случае уединенный f -пик европия выполняет роль «донора» в энергетической структуре пиросиликата европия. Возникновение в структуре спектра электронной электропроводности приводит к появлению у пиросиликата европия металлических свойств, в том числе обнаруженная нами в спектре

преломления сингулярность может быть связана с разрешением межзонных переходов в зону проводимости, по аналогии с металлическими системами в низкочастотной области спектра. При этом следует отметить, что положение уединенного f -пика европия является чувствительным к перестройкам атомной структуры и к изменению группы симметрии кристаллической решетки.

Выводы

В работе выполнено квантово-механическое моделирование оптических свойств пиросиликата европия $\text{Eu}_2\text{MgSi}_2\text{O}_7$. Расчеты обнаружили сильную зависимость оптических характеристик пиросиликата $\text{Eu}_2\text{MgSi}_2\text{O}_7$ от электронной структуры, которая в свою очередь определяется строением кристаллической решетки пиросиликата европия.

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. Liang F., Kang L., Lin Z., Wu Y., Chen C., “Analysis and prediction of mid-IR nonlinear optical metal sulfides with diamond-like structures”, *Coordination Chemistry Reviews*, **2017**, 333, 57-70, URL <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2016.11.012>.
2. Kiselyova N.N., Dudarev V.A., Ryazanov V.V., Sen'ko O.V., Dokukin A.A. “Computer-Aided Design of Compounds with Crystal Structure of Melilites”, *Inorganic Materials: Applied Research*, **2020**, 11(4), 787-794.
3. N.N. Kiselyova. “Prediction of Formation of AB_3X_3 ($\text{X} = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$)”, *Inorg. Mater.*, **2009**, 45(10), 1077-1080
4. Kresse G. and J. Furthmuller, “Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set” *Phys. Rev. B*, **1996** 54, 11169. URL 10.1103/PhysRevB.54.11169
5. Hölsä J. et al. “Synchrotron Radiation Study of the $\text{M}_2\text{MgSi}_2\text{O}_7\text{:Eu}^{2+}$ Persistent Luminescence Materials” *ECS Transactions* **2008** 6 (27), 1-10 DOI: 10.1149/1.2938743

QUANTUM-MECHANICAL SIMULATION OF THE OPTICAL PROPERTIES OF $\text{Eu}_2\text{MgSi}_2\text{O}_7$

K.M. Tsysar, D.I. Bazhanov, K.K. Abgaryan, N.N. Kiselyova

Abstract. The work performed quantum mechanical modeling of the optical properties of europium pyrosilicate $\text{Eu}_2\text{MgSi}_2\text{O}_7$. The refractive and absorption spectra of $\text{Eu}_2\text{MgSi}_2\text{O}_7$ were calculated, and the density of states of the system was constructed. Calculations have shown the relationship between the optical characteristics of europium pyrosilicate and its electronic structure.

3. С

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

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОВОДИМОСТИ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ НАНОКОМПОЗИТОВ

Абгарян Каринэ Карленовна,

*д.ф.-м.н., доцент, главный научный сотрудник,
заведующая отделом¹,
kristal83@mail.ru*

Журавлев Андрей Андреевич,

младший научный сотрудник¹, zhuravlyow.andrei@yandex.ru

Морозов Александр Юрьевич,

*к.ф.-м.н., научный сотрудник¹,
morozov@infway.ru*

Ревизников Дмитрий Леонидович,

*д.ф.-м.н., профессор, ведущий научный сотрудник¹,
reviznikov@mai.ru*

¹ФИЦ ИУ РАН, г. Москва

Аннотация. В работе выполняется построение гибридной нейросетевой математической модели электрической проводимости нанокompозитного материала $(\text{Co-Fe-B})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ по экспериментальным данным.

Ключевые слова: нанокompозит, $(\text{Co-Fe-B})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$, аппроксимация, ВАХ, гибридная нейросетевая модель электрической проводимости, уравнение дрейфа-диффузии.

Введение

В работе рассматриваются вопросы моделирования проводящих свойств нанокompозита $(\text{Co-Fe-B})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ [1]. Обычно изменение проводящих свойств происходит из-за перемещения ионов в сверхтонком диэлектрическом слое под воздействием электрического поля. В случае оксидов часто говорят о перемещении вакансий кислорода и образовании/разрушении проводящих филаментов. Такие процессы часто описываются динамическими системами, где параметр состояния соответствует положению границы между областями с низкой и высокой концентрацией вакансий кислорода, толщине проводящего слоя или непроводящего барьера, где возникает туннельный ток электронов.

Зачастую существующие математические модели не в полной мере воспроизводят экспериментальные данные. В связи с этим предлагается гибридная математическая модель, основанная на уравнении дрейфа-диффузии [2] в сочетании с нейронной сетью прямого распространения для аппроксимации зависимости тока от напряжения и переменной состояния.

Гибридная математическая модель

Уравнение дрейфа-диффузии для концентрации частиц $n(x, t)$ записывается в виде [4]:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial U(x, V)}{\partial x} n \right] + D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}, \quad (1)$$

где D – коэффициент диффузии, $x \in [0, L]$ – координата частицы, L – толщина оксидного слоя, V – напряжение на электродах, $U(x, V)$ – потенциал.

Потенциал имеет вид $U(x, V) = \Phi(x) - Vx/L$, где $\Phi(x)$ – периодическая составляющая потенциала, имеющая амплитуду E_a , которая может быть получена с использованием квантово-механического и молекулярно-динамического моделирования [3].

Уравнение (1) при наклонном периодическом потенциале можно заменить уравнением дрейфа-диффузии с эффективными коэффициентами:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D_{eff} \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} - v_{eff} \frac{\partial n}{\partial x}, \quad (2)$$

где $v_{eff} = \frac{2l}{\tau_{kr}} \sinh \frac{F(V)l}{2\theta}$ – эффективный коэффициент дрейфа,

$D_{eff} = \frac{l^2}{\tau_{kr}} \cosh \frac{F(V)l}{2\theta}$ – эффективный коэффициент диффузии,

$\tau_{kr} = \tau_0 \exp \frac{E_a}{\theta}$ – время Крамерса, l – период периодической составляющей $\Phi(x)$ потенциала. Уравнение (2) дополняется

начальным условием $n(x, 0) = f(x)$ и краевыми условиями $n(0, t) = n_L$ и $n(L, t) = n_R$.

Нормированный размер легированной области $w(t)$ (переменная состояния) определяется следующим образом:

$$w(t) = \frac{1}{L} \arg \min_x |n(x, t) - n_{th}|,$$

где n_{th} – заданный порог.

Зависимость протекающего тока I от w и V можно записать через закон Ома:

$$I(w, V) = \frac{V}{R_m(w)}, \quad (3)$$

где $R_m(w) = wR_{on} + (1 - w)R_{off}$ – текущее электрическое сопротивление материала, R_{on} и R_{off} – минимальное и максимальное сопротивление.

Однако приведенная выше зависимость тока от переменной состояния и напряжения (3) не всегда удовлетворительно аппроксимирует экспериментальные данные работе [3] эта проблема решается с использованием интервального подхода. В настоящей работе вместо (3) предлагается использовать нейронную сеть с одним скрытым слоем, которая записывается следующим образом:

$$I(w, V) = a + \sum_{i=1}^N \frac{b_i}{1 + \exp(-c_i w - d_i V - e_i)}, \quad (4)$$

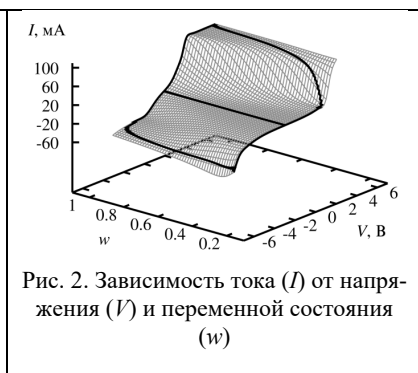
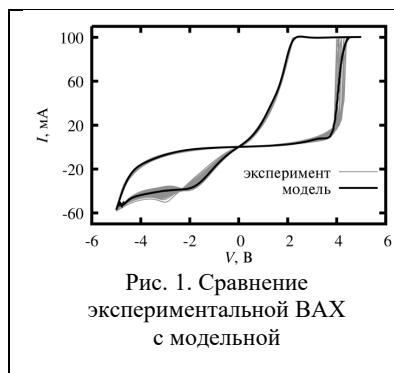
где a , b_i , c_i , d_i , e_i , $i = 1, \dots, N$ – весовые коэффициенты. На $I(w, V)$ дополнительно накладывается условие $I(w, 0) = 0$. Как правило, экспериментальные данные в пространстве $I \times w \times V$ образуют замкнутую кривую, и желательно, чтобы функция $I(w, V)$ в области, ограниченной этой кривой, была монотонной.

Построение модели осуществляется в два этапа. На первом этапе задаются L , l , E_a , τ_0 , θ , n_R , n_L , n_{th} и зависимость $V(t)$ в соответствии с экспериментом. Далее численно решается уравнение (2), в результате чего определяется $w(t)$. На втором этапе

с экспериментальными данными, которые обычно представлены в виде таблицы $t_k : V(t_k) : I(t_k)$, $k = 1, \dots, N_{exp}$, где N_{exp} — количество экспериментальных точек, сопоставляется $w(t_k)$, и выполняется обучение нейронной сети — подбор весовых коэффициентов в уравнении (4).

Результаты

Выполняется построение модели электрической проводимости нанокompозита $(\text{Co-Fe-B})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ ($x \approx 8$) в соответствии с экспериментальными данными, приведенными в работе [1]. Значения параметров, при которых производилось численное решение уравнения (2): $L = 10$ нм, $l = 2.7$ нм, $E_a = 0.6$ эВ, $\tau_0 = 0.1215$ с, $\theta = 0.026$ эВ, $n_R = 0.25$, $n_L = 1.0$, $n_{th} = 0.35$. Количество нейронов в скрытом слое нейронной сети $N = 10$. Обучение осуществлялось с помощью открытой программной библиотеки TensorFlow. На рис. 1 продемонстрировано сопоставление исходной экспериментальной вольтамперной характеристики (ВАХ) (серый цвет) с модельной ВАХ (черный цвет). На рис. 2. показана полученная модельная поверхность (серый цвет) в пространстве $I \times w \times V$ и модельная кривая, соответствующая эксперименту (черный цвет).



Наблюдается хорошее согласование результатов моделирования с экспериментальными данными. Таким образом, построена гибридная математическая модель электрической проводимости нанокompозита $(\text{Co-Fe-B})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ ($x \approx 8$).

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 2 3-91-01012

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Martyshev M.N., Emelyanov A.V., Demin, V.A. et al. Multifilamentary Character of Anticorrelated Capacitive and Resistive Switching in Memristive Structures Based on $(\text{Co-Fe-B})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ Nanocomposite // Phys. Rev. Applied. 2020. V.14, № 3. 034016 DOI:10.1103/PhysRevApplied.14.034016.

2. Agudov N.V., Safonov A.V., Krichigin A.V. et al. Nonstationary distributions and relaxation times in a stochastic model of memristor // Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment. 2020. V.2020, 024003, DOI:10.1088/1742-5468/ab684a.

3. Абгарян К.К., Ревизников Д.Л., Журавлёв А.А., Морозов А.Ю., Гаврилов Е.С. Многомасштабное моделирование нейроморфных систем. М.: Изд-во МАКС Пресс, 2022. – 120 с.

SIMULATION OF CONDUCTIVITY OF MATERIALS BASED ON NANOCOMPOSITES

*K.K.Abgaryan¹, A.A. Zhuravlev¹,
A.Yu. Morozov¹, D. L. Reviznikov¹*

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

Abstract. The work involves constructing a hybrid neural network simulation model of the electrical conductivity of a $(\text{Co-Fe-B})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ nanocomposite based on experimental data.

Keywords: nanocomposite, $(\text{Co-Fe-B})_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$, approximation, current-voltage characteristic, hybrid neural network model of electrical conductivity, drift-diffusion equation.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ В КРИСТАЛЛАХ ОКСИДА ГАФНИЯ И HZO

Абгарян Каринэ Карленовна,

*д.ф.-м.н., доцент, главный научный сотрудник,
заведующая отделом¹,
kristal83@mail.ru*

Журавлев Андрей Андреевич,

*младший научный сотрудник¹,
zhuravlyow.andrei@gmail.com*

Ревизников Дмитрий Леонидович,

*д.ф.-м.н., профессор, ведущий научный сотрудник¹,
reviznikov@mail.ru*

¹ФИЦ ИУ РАН, г. Москва

Аннотация. работа посвящена изучению процесса сегнетоэлектрического переключения в кристаллах оксида гафния и HZO с использованием методов квантовой механики.

Ключевые слова: сегнетоэлектрики, оксид гафния, HZO, квантовомеханическое моделирование, поляризация.

Введение

Сегнетоэлектрики – это материалы, способные сохранять спонтанную поляризацию в отсутствие внешнего электрического поля, а также изменять её при его приложении. Данное свойство позволяет использовать сегнетоэлектрики в качестве основы для элементов энергонезависимой памяти. Выгода от их применения, в отличие от ряда современных технологий, заключается в высокой скорости и малых напряжениях, требуемых для переключения элемента из одного состояния в другое, что позволяет говорить об их большей энергоэффективности по сравнению с другими вариантами. Одним из известных сегнетоэлектрических материалов является оксид гафния, который в орторомбической фазе проявляет требуемые свойства, однако орторомбическая фаза не является наиболее устойчивой фазой для оксида гафния и склонна со временем разрушаться. Для поддержания работоспособности плёнок из оксида гафния используют различные примеси, например

цирконий, слои которого можно растить попеременно со слоями гафния, что даёт слоистую структуру из гафния, циркония и кислорода: HZO.

Моделирование оксида гафния и HZO

Исследование проводилось методами квантовой механики с использованием пакета Quantum ESPRESSO. Для этого в Quantum ESPRESSO была заложена структура орторомбического оксида гафния и проведена релаксация, затем, чтобы выявить направление движения атомов, было проведено моделирование приложения напряжения к структуре оксида гафния в приближении современной теории поляризации, что позволило обнаружить возможный путь перестройки кристаллической структуры. После обнаружения финального состояния оксида была проведена его дополнительная релаксация в отсутствие напряжения и осуществлена идентификация наиболее выгодного пути между этими состояниями с помощью метода эластичной ленты [1]. Затем в полученных состояниях были вычислены величины поляризации с использованием фаз Берри [2]. На рисунках 1 и 2 представлены результаты проведенных расчётов, а на рисунке 3 показано перемещение атомов в процессе переключения. Аналогичные расчёты были произведены для HZO.

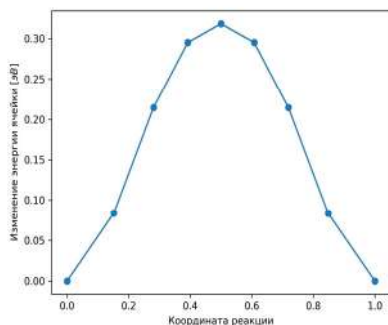


Рис. 1. Энергетический профиль перехода HfO_2

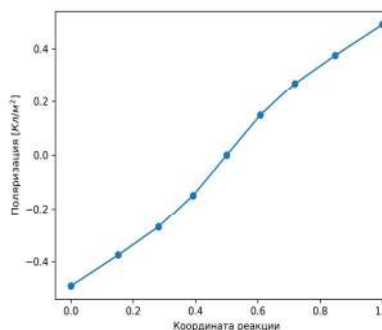


Рис. 2. Изменение поляризации в процессе трансформации HfO_2

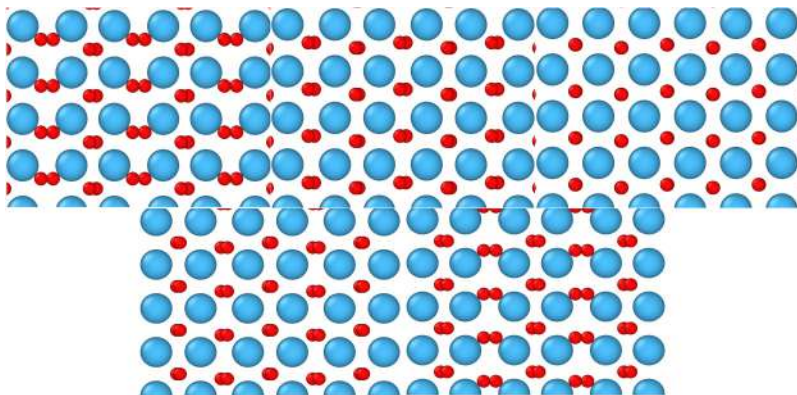


Рис. 3. Процесс сегнетоэлектрического переключения
в кристалле оксида гафния

Выводы

В работе проведено моделирование процессов сегнетоэлектрического переключения оксида гафния и HZO. Полученные результаты несколько отличаются от наблюдаемых в экспериментах, что, наиболее вероятно, связано с тем, что в моделировании участвуют бесконечные идеальные кристаллы, тогда как в экспериментах орторомбическая фаза занимает не весь элемент и может содержать дефекты, а кроме того, могут проявляться краевые эффекты на стыках с электродами.

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

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 23-91-01012

Список использованных источников

1. Henkelman G., Uberuaga B.P., Jónsson H., A climbing image nudged elastic band method for finding saddle points and minimum energy paths // The Journal of Chemical Physics, 2000, vol. 113, no. 22, pp. 9901–9904. DOI: 10.1063/1.1329672
2. Resta R., Polarization as a Berry Phase // Europhysics News, 1997, vol. 28, no. 1, pp. 18-20. DOI: 10.1007/s00770-997-0018-4

STUDY OF FERROELECTRIC SWITCHING PROCESS IN HAFNIUM OXIDE AND HZO CRYSTALS

K.K.Abgaryan¹, A.A. Zhuravlev¹, D. L. Reviznikov¹

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

Abstract. paper is dedicated to study of ferroelectric switching process in hafnium oxide and HZO crystals using quantum mechanical methods.

Key words: ferroelectrics, hafnium oxide, HZO, quantum mechanical simulation, polarization.

УДК 548.55

<https://doi.org/10.29003/m3587.MMMSEC-2023/64-67>

МОДЕЛИРОВАНИЕ МГД-ВОЗДЕЙСТВИЯ НА ТЕЧЕНИЕ РАСПЛАВА КРЕМНИЯ В ПРОЦЕССЕ ЧОХРАЛЬСКОГО

Верезуб Наталия Анатольевна,

*к.ф.-м.н., старший научный сотрудник¹,
verezub@ipmnet.ru*

Простомолотов Анатолий Иванович,

*д.т.н., доцент, ведущий научный сотрудник¹,
aprosto@inbox.ru*

¹ИПМех РАН, г. Москва

Аннотация. Обсуждается применение вращающегося магнитного поля (ВМП) в технологии выращивания кристаллов полупроводников из расплава методом Чохральского, в том числе рассматриваются и применяются для верификации результатов данной работы известные данные физического моделирования течений электропроводящего раствора КОН в цилиндрическом тигле в ВМП. Рассматривается математическая модель гидродинамических процессов применительно к выращиванию монокристаллов кремния диаметром 100 мм на установке Редмет-30, оснащенной ВМП-магнитом. Приводятся результаты теста расчетного профиля азимутальной скорости с данными измерений в растворе КОН. В виде диаграммы устойчивости обобщаются результаты параметрических исследований устойчивости течений расплава в зависимости от частоты и величины индукции ВМП.

Ключевые слова: рост кристалла, магнитная гидродинамика, моделирование.

Введение

Конструктивная реализация трехфазного магнитогидродинамического (МГД)-вращателя состоит в горизонтальном размещении относительно тигля трех катушек со сдвигом в горизонтальном направлении под углом 120° , подводимая мощность и частота тока в обмотке катушек могут варьироваться. В простейшем случае катушки соединяются трехфазным автотрансформатором, работающим на уровне сетевой частоты 50 Гц. Согласно обзору [1], в технологических экспериментах с МГД-вращателем обнаружены три характерных структуры полосчатой примесной неоднородности в выращенных кристаллах: 1 – малые значения питающего магниты тока не приводят к искажению хаотической структуры полос; 2 – средние значения тока приводят к их упорядочению; 3 – большие значения тока приводят к появлению на поверхности слитка периодически расположенных микрополос с большим расстоянием между ними, чем при малых и средних значениях тока (50 вместо 70 мк). При более высоких скоростях вращения кристалла и действии МГД-вращателя в последнем режиме возможно получение плоского фронта кристаллизации при отсутствии промежуточных полос и межполосных участков. В [2] проведены измерения скорости вращения расплава в ВМП.

Моделирование воздействия МГД-вращателя

Предполагается, что определяющую роль играют гидродинамические процессы в расплаве. Движение расплава кремния описывается уравнениями Навье-Стокса для вязкой несжимаемой жидкости, которые решаются совместно с уравнением переноса тепла. Периодическое изменение магнитной индукции от МГД-вращателя предполагается по следующей формуле: $B^{(\phi)} = B_0(z)\cos(\omega_0 t + \phi_0)$, что характеризуется следующими безразмерными параметрами: $Ha = R_s B_0 \sigma^{1/2} (\nu\rho)^{-1/2}$ – числом Гартмана и $Re_R = \omega_0 R_s^2 / \nu$ – магнитным числом Рейнольдса, где: σ – электропроводность кремния, B_0 – амплитуда изменения магнитного поля и ω_0 – его угловая частота. При этом в уравнения Навье-Стокса для радиальной и осевой компонент скорости (u , w) и момента азимутальной скорости (M) соответственно добавляются соответствующие компоненты объемной силы в виде следующих слагаемых:

$$F_B^u = \frac{-0.5Ha^2 u}{Re} B_0(z)^2, \quad F_B^w = \frac{Ha^2 w}{Re} B_0(z)^2, \quad F_B^M = \frac{0.5Ha^2}{Re} \left(\frac{Re_R r}{Re} - \frac{M}{r} \right) B_0(z)^2.$$

Рассмотрены результаты математического моделирования применительно к устройству для электромагнитного вращения при выращивании кристаллов кремния на установке Редмет-30: радиусы кристалла – $R_s = 5$ см и тигля – $R_c = 13.5$ см, высота расплава – $H = 15.5$ см. Обнаружено, что осевая пространственная ВМП неоднородность приводит к изменению структуры течения. Отмечается смещение максимума в распределении азимутальной компоненты скорости к боковой стенке тигля с увеличением чисел Na и Re_R . В зависимости от их значений в расплаве реализуются стационарные и колебательные режимы течения. При ВМП воздействии расплав вращается в направлении вращения магнитного поля, исключение составляет его слой вблизи боковой стенки тигля, где возникает вертикальный каскад вихрей. Возможная неустойчивость структуры течения в ВМП обусловлена торможением вынужденного движения в пограничном пристеночном слое, причем область неустойчивости меридионального движения сосредоточена вблизи боковой стенки тигля. При увеличении Na и Re_R отмечается рост максимального значения момента азимутальной скорости и смещение положения ее максимума к боковой стенке.

Выводы

Построенная диаграмма устойчивости течений включает известные асимптотические решения для малых и больших значений числа Гартмана, которые подтверждают расчетные результаты данной работы. Рекомендуются оптимальные параметры ВМП для промышленного процесса выращивания монокристаллов кремния по методу Чохральского.

Работа выполнена по теме госзадания ИПМех РАН (№ 123021700045-7).

Список использованных источников

1. Шашков Ю.М. Методы выращивания монокристаллов и пленок материалов твердотельной электроники // Итоги науки и техники. Электроника. М.: ВИНТИ, 1988. Т. 18. С. 184–216.
2. Архипова Л.В., Кескюла В.Ф., Кильк А.О. Экспериментальное определение скорости вращения расплава во вращающемся магнитном поле // Тр. Таллинского политехнического института. Таллин: ТПИ. 1983. № 655. С. 18–25.

SIMULATION OF MHD-INFLUENCE ON SILICON MELT FLOW IN CZOCHRALSKI PROCESS

N.A. Vererzub, A.I. Prostomolotov

Abstract. The applications of rotating magnetic field (RMF) in semiconductor crystals growth technology from a melt by Czochralski method are discussed, including the known data of physical modeling of an electrically conductive KOH solution flows in a cylindrical crucible under RMF are considered and verified. Mathematical model of hydrodynamic processes is considered in relation to silicon single crystal growth in 100 mm diameter on Redmet-30 furnace equipped by RMF-magnet. The test results of calculated azimuth velocity profile with the measured data in KOH solution are presented. The results of parametric studies of melt flows stability in depending on the frequency and magnitude of RMF induction are summarized in the stability diagram.

Key words: crystal growth, magnetic hydrodynamics, modeling.

УДК 004.94

<https://doi.org/10.29003/m3588.MMMSEC-2023/67-69>

ВЛИЯНИЕ УПРУГИХ ДЕФОРМАЦИЙ И СТРУКТУРЫ ПОВЕРХНОСТИ Ge(111) НА ДИФФУЗИЮ АТОМОВ Ge

Жачук Руслан Анатольевич,

*к.ф.-м.н., старший научный сотрудник¹,
zhachuk@gmail.com, +7 (952) 911-44-50*

Латышев Александр Васильевич,

*д.ф.-м.н., академик РАН¹,
latyshev@isp.nsc.ru,*

Coutinho José,

*PhD, principal researcher²,
jose.coutinho@ua.pt*

¹ ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13, Россия

² Department of Physics & I3N, University of Aveiro, Campus Santiago, 3810-193 Aveiro, Portugal

Аннотация. С помощью расчетов на основе теории функционала плотности исследовано влияние упругих деформаций и структуры поверхности Ge(111) на диффузию адсорбированных атомов Ge. Из полученных данных следует, что скорости диффузии Ge на поверхностях Ge(111) со структурами 5×5 и 7×7 должны быть близкими. Установлено,

что сравнимые скорости диффузии на поверхностях со структурами 5×5 и 7×7 объясняются идентичным локальным расположением атомов этих структур. Кроме того, было найдено, что диффузионный барьер на упруго-сжатой поверхности Ge(111) значительно выше, чем на недеформированной поверхности. Увеличение диффузионного барьера на деформированной поверхности Ge(111) объясняется усилением связей в димерах при сжатии поверхности, что приводит к ослаблению связи между адатомом Ge и димером.

Ключевые слова: германий, поверхность, структура, диффузия, теория функционала плотности.

Структуры 5×5 и 7×7 формируются не только на поверхностях Si(111), но и на поверхностях упруго-сжатых слоев Ge, выращенных на Si(111). Атомная структура 5×5 и 7×7 определена достаточно давно и описывается DAS-моделью (dimer-adatom-stacking fault) [1]. DAS-модель является общепризнанной [2] и служит основой для исследований, относящихся к поверхностям Si(111) и Ge(111) [3, 4].

Отправной точкой данного исследования послужили экспериментальные результаты сканирующей туннельной микроскопии [5], из которых следовало, что: (1) скорость диффузии адатомов Ge по поверхности Ge(111) со структурами 5×5 и 7×7 практически одинакова; (2) диффузионный барьер на упруго-сжатой поверхности со структурой 7×7 выше, чем на полностью релаксированной. Так как широко распространено мнение, что скорость диффузии адатомов по поверхности кристалла должна зависеть от структуры поверхности и, кроме того, известно, что диффузионные барьеры на поверхностях металлов уменьшаются при сжатии поверхности, то такие данные требуют объяснений.

С помощью расчетов на основе теории функционала плотности с применением программного пакета SIESTA были построены поверхности потенциальной энергии для адсорбированного атома Ge на релаксированной и упруго-сжатой поверхностях Ge(111) со структурами 5×5 и 7×7 . В результате расчетов было найдено, что действительно, поверхности Ge(111) со структурами 5×5 и 7×7 обладают одинаковыми диффузионными барьерами и это следует из их одинаковой локальной атомной структуры. Также найдено, что диффузионный барьер на упруго-сжатой поверхности Ge(111) значительно выше, чем на поверхности без деформации. Механизм этого явления состоит в усилении ковалентных связей в димерах

структур 5×5 и 7×7 при сжатии поверхности, что приводит к ослаблению связей между диффундирующим атомом Ge и атомом димера.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 19-72-30023) и опубликована в [6].

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Takayanagi K., Y. Tanishiro, S. Takahashi, M. Takahashi. Structure analysis of Si(111)- 7×7 reconstructed surface by transmission electron diffraction // Surf. Sci. 164, 367 (1985). DOI: 10.1016/0039-6028(85)90753-8
2. Zhachuk R. A., J. Coutinho. Comment on “Experimental evidence for a new two-dimensional honeycomb phase of silicon: a missing link in the chemistry and physics of silicon surfaces?” // J. Phys. Chem. C. 126, 866 (2022). DOI: 10.1021/acs.jpcc.1c04561
3. Zhachuk R., S. Teys, J. Coutinho. Strain-induced structure transformations on Si(111) and Ge(111) surfaces: a combined density-functional and scanning tunneling microscopy study // J. Chem. Phys. 138, 224702 (2013). DOI: 10.1063/1.4808356
4. Zhachuk R., B. Olshanetsky, J. Coutinho, S. Pereira. Electronic effects in the formation of apparently noisy scanning tunneling microscopy images of Sr on Si(111)- 7×7 // Phys. Rev. B 81, 165424 (2010). DOI: 10.1103/PhysRevB.81.165424
5. Cherepanov V., B. Voigtländer. Influence of material, surface reconstruction, and strain on diffusion at the Ge(111) surface // Phys. Rev. B 69, 125331 (2004). DOI: 10.1103/PhysRevB.69.125331
6. Zhachuk R. A., A. V. Latyshev, J. Coutinho. Impact of strain and surface reconstruction on long-range diffusion of Ge atoms on Ge(111) surface // Phys. Rev. B 107, 245305 (2023). DOI: 10.1103/PhysRevB.107.245305

IMPACT OF STRAIN AND SURFACE RECONSTRUCTION ON LONG-RANGE DIFFUSION OF Ge ATOMS ON Ge(111) SURFACE

R.A. Zhachuk, A.V. Latyshev, J. Coutinho

Abstract. We investigate the effect of surface reconstruction and strain on diffusion of adsorbed Ge atoms on Ge(111)- 5×5 and Ge(111)- 7×7 surfaces by means of first-principles calculations. The results show that Ge diffusion rates on 5×5 and 7×7 reconstructed Ge(111) surfaces should be similar. Comparable diffusion rates on 5×5 and 7×7 reconstructed surfaces are explained by the identical local atomic arrangements of these structures. Conversely, the diffusion barrier on a compressively strained Ge(111) surface is considerably higher than that on a strain-free surface. The increase of the migration barrier on a strained surface is explained by dimer bond strengthening upon surface compression, along with a weakening of bonds between the adsorbed Ge and dimer atoms.

Keywords: germanium, surface, structure, diffusion, density functional theory.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ АРХИТЕКТУР U-Net И CycleGAN В РАСЧЕТЕ ФОТОШАБЛОНА ДЛЯ ТЕХНОЛОГИИ 90-нм МЕТОДОМ ОБРАТНОЙ ЛИТОГРАФИИ

Карандашев Яков Михайлович,

к.ф.-м.н., старший научный сотрудник^{2, 4},

karandashev@niisi.ras.ru

Теплов Георгий Сергеевич,

к.ф.-м.н., начальник лаборатории^{1, 3},

gteplov@niime.ru

¹АО НИИМЭ, г. Москва

²НИИСИ РАН, г. Москва

³МФТИ, г. Москва

²РУДН, г. Москва

Аннотация. В работе выполняется сравнение результатов расчёта фотошаблона, применяемого для получения затворов транзисторов по технологии 90 нм. Расчет выполнен нейронными сетями с архитектурой U-Net и CycleGAN. В качестве набора данных для обучения использовались структуры, которые были сгенерированы с помощью моделей обратной литографии, применяемых в промышленном производстве. Архитектура CycleGAN продемонстрировала способность генерировать топологию, стилистически совпадающую с результатами применения ИЛТ с опцией MRC.

Ключевые слова: U-Net, CycleGAN, ML-OPC, OPC, вычислительная фотолитография, AI EDA.

Введение

Технический прогресс последних двух десятилетий в области снижения минимальной топологической нормы технологий микроэлектроники привел к усложнению процесса расчета [1]. Увеличение мощностей вычислительных средств последних десятилетий позволяет улучшать применяемые для расчетов модели. Одним из методов повышения эффективности является упрощение моделей за счет увеличения количества подстановочных коэффициентов и уменьшения вычисляемых параметров для ускорения процесса вычислений. Применение технологий искусственного интеллекта лежит в рамках указанного подхода и позволяет

достичь ускорения расчета для технологии OPC [2] и для технологии ИЛТ [3].

Исследование эффективности в расчетах фотошаблона

В работе проведено сравнение возможностей искусственного интеллекта, реализованного на базе глубоких свёрточных нейронных сетей и генерирующих нейронных сетей, в решении задачи расчета маски. Архитектура свёрточной нейронной сети была реализована на базе архитектуры U-Net [4]. Архитектура генерирующей нейронной сети использовала архитектуру CycleGAN [5].

Набор данных для обучения был получен с применением промышленных OPC-моделей для технологии 90 нм уровня формирования затворов транзисторов, которые отличаются высокой вычислительной емкостью в сравнении с другими уровнями технологии. Из набора данных были удалены вспомогательные фигуры для улучшения качества разрешающей способности (SRAF) фотолитографии. Расчет объектов набора данных осуществлен по технологии ИЛТ с применением опции MRC. Общий объем набора данных содержит 1536 сгенерированных случайных топологических фигур размером не более 3.84 мкм на 3.84 мкм и соответствующие им расчеты для генерации фотошаблона.

В результате обучения сетей время расчета топологии фигуры классическим методом составило 1 с, для U-Net составило 7 мс, для CycleGAN составило 8 мс. Результат расчета UNet обладает характерной ошибкой (скруглением на углах структур) в отличие от результата расчета с применением CycleGAN. Примеры расчетов фигур показаны на рисунке 1.

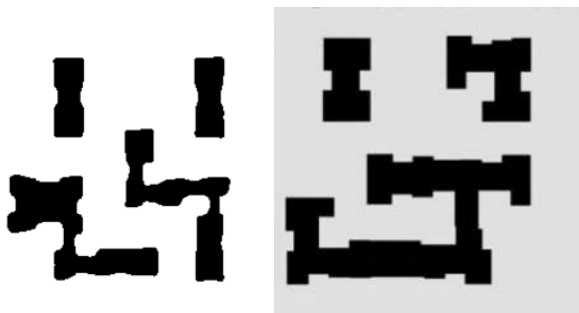


Рис. 1. Результат расчета U-Net (слева), результат расчета CycleGAN (справа)

Выводы

Архитектура CycleGAN продемонстрировала способность генерировать топологию, стилистически совпадающую с результатами применения ИЛТ с опцией MRC. Результат расчёта с применением CycleGAN требует дальнейшего исследования на основе метрики EPE путем сравнения с результатом классического расчёта методом ИЛТ.

Список использованных источников

1. Spence C., Goad S. Computational requirements for OPC //Design for Manufacturability through Design-Process Integration III. – SPIE, 2009. – Т. 7275. – С. 230–238.
2. Matsunawa T., Yu B., Pan D. Z. Optical proximity correction with hierarchical bayes model //Optical Microlithography XXVIII. – SPIE, 2015. – Т. 9426. – С. 238–247.
3. Ma X. et al. Model-driven convolution neural network for inverse lithography //Optics Express. – 2018. – Т. 26. – №. 25. – С. 32565–32584.
4. Ronneberger O., Fischer P., Brox T. U-net: Convolutional networks for biomedical image segmentation //Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention–MICCAI 2015: 18th International Conference, Munich, Germany, October 5-9, 2015, Proceedings, Part III 18. – Springer International Publishing, 2015. – С. 234–241.
5. Zhu J. Y. et al. Unpaired image-to-image translation using cycle-consistent adversarial networks //Proceedings of the IEEE international conference on computer vision. – 2017. – С. 2223–2232.

INVESTIGATION OF THE EFFICIENCY OF USING U-Net AND CycleGAN ARCHITECTURES IN INVERSE LITHOGRAPHY-BASED 90-nm PHOTOMASK GENERATION

I.M. Karandashev, G.S. Teplov

Abstract. The article compares the results of calculating a photomask used for the manufacture of transistor gates using 90 nm technology. The calculation is performed by neural networks with UNet and CycleGAN architecture. The training dataset used structures that were generated using inverse lithography models used in industrial manufacturing. The CycleGAN architecture has demonstrated the ability to generate topologies that stylistically match the results of ИЛТ with the MRC option.

Keywords: UNet, CycleGAN, ML-OPC, OPC, computational photolithography, AI EDA.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ НАНОНИТЕЙ – ПЕРСПЕКТИВНЫХ КОМПОНЕНТОВ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ

Лю Шисян,

аспирант,

sxliu98@bmstu.ru

Баринов Александр Алексеевич,

к.т.н., доцент,

barinov@bmstu.ru

МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва

Аннотация. В работе рассматривается теплопроводность перспективных компонентов полупроводниковой промышленности – нанонитей. Предложена математическая модель, учитывающая влияние диаметра, шероховатости поверхности, а также температуры на теплопроводность нанонитей. Верификация модели проведена на основе сравнения с известными экспериментальными данными.

Ключевые слова: теплопроводность, размерный эффект, плотность состояний, нанонить, шероховатость.

Введение

Нанонити являются широко распространенным объектом научных исследований и опытных разработок в области полупроводниковой промышленности, оптоэлектроники и пр. в связи с их уникальными свойствами. Так экспериментальные исследования показали, что теплопроводность кремниевых (Si) нанонитей примерно на два порядка ниже, чем у массивных образцов [1]. Выделим следующие факторы, определяющие уникальные свойства нанонитей. Во-первых, влияние квантового размерного эффекта на дисперсию фононов, которое определяет набор возможных состояний фононного газа в низкоразмерных структурах, качественно отличающееся от массивного твердого тела. Во-вторых, наличие размерного эффекта, когда диффузию фононов определяет именно рассеяние на границе образца, а не внутренние процессы взаимодействия. В-третьих, это морфология поверхности нанонитей, т.е. учет шероховатости границ реального образца.

Изложение модели расчета теплопроводности приведем на примере кремниевых нанонитей. Начнем с учета квантового размерного эффекта для плотности состояний фононов в нанонитях. На основе модели упругой среды разработан программный код [2] для расчета дисперсионных соотношений $\omega_i(k)$ фононов в нанонитях кремния (рис. 1) и построены плотности состояний для различных диаметров нанонитей (рис. 2), которые можно выразить как интеграл по первой зоне Бриллюэна.

$$\text{DOS}(\omega) = \frac{1}{8\pi^3} \int_{\text{BZ}} \delta(\omega_i(k) - \omega) d^3k \quad (1)$$

где $\delta(x)$ – дельта-функция Дирака. Из рис. 2 видно, что при увеличении диаметра нанонитей, их DOS стремится к DOS для массивного образца (3D).

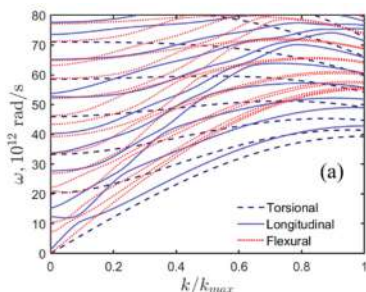


Рис. 1. Дисперсионные соотношения в кремниевых нанонитях диаметром 2.7 нм

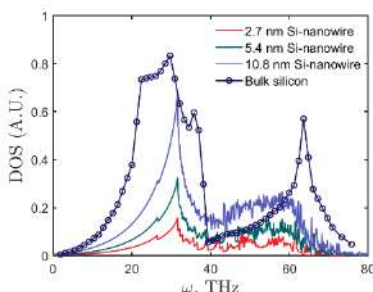


Рис. 2. Функция плотности состояний в нанонитях кремния и массивном образце

Широко используемым методом учета размерного эффекта при расчете теплопроводности нитей является кинетическая модель Фукса–Зондхаймера [2]. Решая транспортное уравнение Больцмана (без внешних сил и источников) в приближении времени релаксации, можно получить общее выражение для теплопроводности:

$$\kappa = \frac{1}{3} \sum_s \int_{\omega_{\min,s}}^{\omega_{\max,s}} \hbar \omega \frac{d\bar{n}(\omega, T)}{dT} \cdot \text{DOS}(\omega) \cdot v^2 \tau \cdot F(\text{Kn}, p) d\omega \quad (2)$$

где s обозначает суммирование по различным поляризациям (LA и двум LA) фононов. $\bar{n}$ – равновесное распределение Бозе–Эйнштейна. Вклад во время релаксации τ вносят: фонон-фононное взаимодействие τ_{ph} , рассеяние на дефектах τ_{imp} и на границах

$\tau_b : \tau^{-1} = \tau_{ph}^{-1} + \tau_{imp}^{-1} + \tau_b^{-1}$, которые подробно описаны в работе [3].

Функция $F(Kn, p)$ [3] непосредственно учитывает размерный эффект и показывает, во сколько раз длина свободного пробега фононов в нанонитях меньше, чем у массивного образца.

Учет морфологии поверхности образца в (2) проводится через параметр зеркального отражения p , который напрямую связан со среднеквадратичной шероховатостью σ [3]:

$$p(k, \sigma, \theta) = \exp(-4k^2 \sigma^2 \cos^2 \theta) \quad (3)$$

где k – волновое число фонона, θ – угол отражения фонона от шероховатой границы.

На основании представленной модели проведен расчет теплопроводности кремниевых нанонитей. На рис. 3(а) видно, что при температуре 300 К по мере увеличения диаметра нанонитей теплопроводность постепенно стремится к теплопроводности массивного кремния. На рис. 3(б) представлена характерная зависимость теплопроводности нанонитей кремния от температуры. Результаты расчет на рис. 3(а) и 3(б) хорошо согласуются с экспериментальными данными [2].

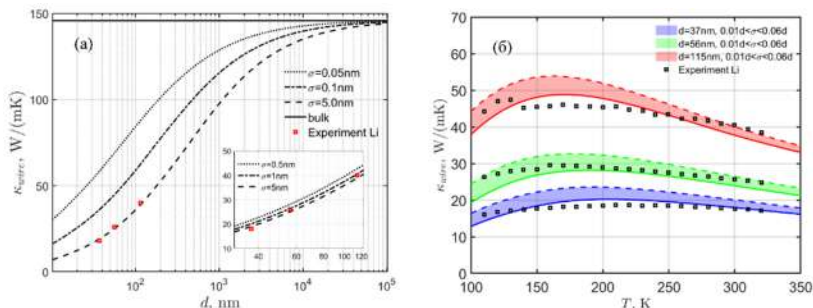


Рис. 3. Теплопроводность кремниевых нанонитей: (а) в зависимости от диаметра при 300К для разных σ : 0.05, 0.1 и 5 нм; (б) от температуры для диаметров 37, 56 и 115 нм. Заливка соответствует диапазону шероховатости: $0.01d < \sigma < 0.06d$.

Выводы

Разработана математическая модель для расчета теплопроводности кремниевых нанонитей в зависимости от их диаметра, шероховатости поверхности и температуры. Сравнение с известными экспериментальными данными показало хорошую предсказательную силу модели.

Список использованных источников

1. Li D. et al. Thermal conductivity of individual silicon nanowires // Appl. Phys. Lett. 2003. Vol. 83, no. 14, pp. 2934–2936.
2. Лю Ш., Баринов А. А. Расчет теплопроводности кремниевых нанонитей с учетом граничных эффектов // Материалы РНКТ-8. 2022. Т. 2, С. 287–290.
3. Лю Ш., Баринов А. А. Свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ № 2023617833 РФ. Программа для решения дисперсионных соотношений в нитях.

MATHEMATICAL MODELING OF THERMAL CONDUCTIVITY IN NANOWIRES – PROSPECTIVE COMPONENTS OF THE SEMICONDUCTOR INDUSTRY

S. Liu, A.A. Barinov

Abstract. The paper considers the thermal conductivity of prospective components of the semiconductor industry – nanowires. We introduce a mathematical model that takes into account the influence of diameter, surface roughness, and temperature on the thermal conductivity of nanowires. Verification of the model was carried out due to comparison with known experimental data.

Key words: thermal conductivity, size effect, density of states, nanowires, roughness.

УДК 51-73: 519.245: 538.971

<https://doi.org/10.29003/m3591.MMMSEC-2023/76-79>

ВЛИЯНИЕ ИНТЕНСИВНОСТИ ПОТОКА Au И ОРИЕНТАЦИИ ПОВЕРХНОСТИ Si НА СКОРОСТЬ ДВИЖЕНИЯ КАПЕЛЬ ЗОЛОТА (МОНТЕ-КАРЛО МОДЕЛИРОВАНИЕ)

Маничурова Снежана Викторовна,

студент^{1,2},

SnegKyd@mail.ru

Шварц Наталия Львовна,

к.ф.-м.н., доцент¹, старший научный сотрудник²

nataly.shwartz@gmail.com

¹Новосибирский государственный технический университет,
Новосибирск, Россия

²Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН,
Новосибирск, Россия

Аннотация. В работе выполнено моделирование движения золотых капель по поверхностям Si(111) и Si(011) при осаждении Au методом

Монте-Карло. Проанализированы зависимости скорости движения капля Au-Si от интенсивности потока золота на поверхность кремния.

Ключевые слова: золото, кремний, Монте-Карло, моделирование.

Введение

Капли расплава золота часто применяются в роли катализаторов роста полупроводниковых нанопроволок по механизму пар-жидкость-кристалл. В экспериментальных работах по осаждению золота на поверхность кремния было обнаружено движение каплей при температурах выше температуры эвтектики системы Au-Si в диапазоне 630–900 К [1]. В недавней работе [2] мы проанализировали движение каплей на поверхностях кремния с различной ориентацией (111), (011), (311) с помощью кинетической решеточной Монте-Карло модели. Было показано, что причиной направленного движения каплей являются асимметрия ямки травления под каплей и растворение подложки для поддержания равновесной концентрации расплава Au-Si. В [3] проанализировано влияние температуры на морфологию поверхности Si(111) при осаждении золота. В настоящей работе мы исследовали зависимость скорости движения каплей золота на поверхностях Si (111) и (011) от потока Au.

Монте-Карло моделирование

Моделирование системы Au-Si проводилось в программном пакете SilSim3D, основанном на кинетической решеточной Монте-Карло модели [4]. При моделировании осаждения золота на поверхность кремния рассматривалась 3-компонентная система, состоящая из кремния в твердом состоянии, кремния в расплаве и золота. Элементарные процессы модели включают в себя адсорбцию атомов золота, поверхностную диффузию всех частиц, растворение кремния в золоте, диффузию растворённого кремния в объёме капли и его кристаллизацию на границе раздела капля – подложка. Вероятность каждого процесса определяется экспоненциальной зависимостью от его энергии активации. Подробное описание модели и параметров представлено в [2].

На поверхность кремния с ориентацией (111) и (011) осаждалось золото с разной интенсивностью потока. На рис.1 представлены зависимости скорости движения каплей золота по vicинальной поверхности Si(111) и по поверхности Si(011) при постоянной температуре. На рисунке видно, что скорость движения каплей по

поверхности Si(111) не зависит от скорости осаждения золота. Поступление Au в каплю в единицу времени определяется плотностью потока золота F и площадью диффузионного сбора $S \sim \lambda^2$, где $\lambda \sim \sqrt{(I/F)}$: $I = F\lambda^2$. Таким образом, с изменением потока меняется плотность капель, а приток золота I в каждую каплю остается постоянным. Это приводит к независимости размера и, следовательно, скорости капли от интенсивности потока Au.

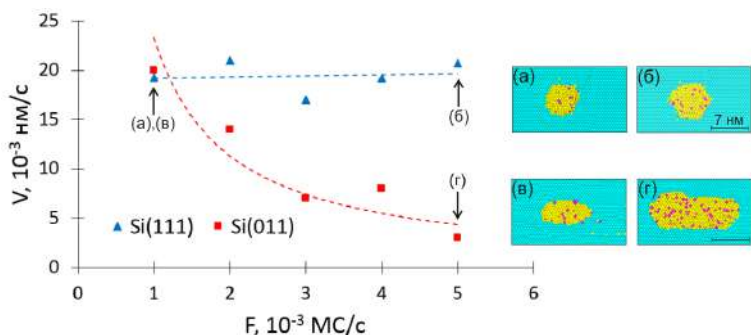


Рис. 1. Зависимость средней скорости движения капель Au по вицинальной поверхности Si(111) и по поверхности Si(011) от потока золота F при $T=800$ К:

На вставках фрагменты модельной поверхности (111) (а, б) и (011) (в, г) с каплями в один момент времени при потоках: $F=10^{-3}$ MC/c (а) и (в), $F=5 \cdot 10^{-3}$ MC/c (б) и (г).

Варьирование интенсивности потока золота на поверхность Si(011) приводит к заметному изменению скорости. На такой поверхности капли способны двигаться в двух противоположных направлениях [2]. В процессе движения капли сливаются друг с другом. Плотность капель на поверхности становится меньше, чем исходная, определяемая интенсивностью потока, а размер капель увеличивается. Скорость движения капель уменьшается, так как ямка травления под каплей большего размера глубже и требуется пройти меньшее расстояние, для поддержания равновесной концентрации кремния в капле.

Выводы

С помощью Монте-Карло моделирования получены зависимости средней скорости движения капель Au-Si от скорости осаждения золота. Показано, что скорость капель на вицинальной поверхности Si(111) не зависит от интенсивности потока Au, а на

поверхности Si(011) уменьшается с увеличением скорости осаждения золота.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (проект № 0242-2021-00008).

Список использованных источников

1. Curiotto S. et al., Surface-dependent scenarios for dissolution-driven motion of growing droplets // Sci. Rep., 2017, Vol. 7 (1), P. 902.
2. Mantsurova S.V. et al., Effect of silicon surface orientation on the Au droplet motion // Surfaces and Interfaces, 2023, Vol. 41, P. 103193.
3. Mantsurova S. V. et al., Temperature Influence on the Si(111) Surface Relief Evolution During Au Deposition // 2023 IEEE 24th International Conference of Young Professionals in Electron Devices and Materials (EDM), Novosibirsk, Russian Federation, 2023, pp. 10–13.
4. Карпов А.Н. и др. Решеточная модель Монте-Карло для изучения процессов формирования наноструктур // Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии, 2014, 15, 388.

EFFECT OF Au FLUX INTENSITY AND Si SURFACE ORIENTATION ON GOLD DROPLET MOVEMENT (MONTE CARLO SIMULATION)

S.V. Mantsurova, N.L. Shwartz

Abstract. In this work, simulation of droplet motion over Si(111) and Si(011) surfaces during gold deposition has been carried out. The dependences of Au-Si droplet velocity on the gold flux are analyzed.

Key words: gold, silicon, Monte Carlo, simulation.

УДК 004.3:004.9

<https://doi.org/10.29003/m3592.MMMSEC-2023/79-84>

ПРОБЛЕМЫ СИНТЕЗА КОННЕКЦИОНИСТСКИХ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ И КONTИНУАЛЬНЫХ МОДЕЛЕЙ СРЕДЫ НА ПРИМЕРЕ МЕМРИСТОРОВ.

Матюшкин Игорь Валерьевич,

к.ф.-м.н., в.н.с.^{1, 2},

imatyushkin@niime.ru

¹АО НИИМЭ, г.Москва, Зеленоград

²НИУ МИЭТ, г. Москва

Аннотация. Обсуждаются способы взаимодополнения локальных параметров К-системы и интегральных характеристик среды, в которую

она погружена. Примером задачи служит расчет проводимости области филамента мемристора.

Ключевые слова: мемристор, К-система, коннекционизм, методы моделирования.

Введение

Объективное основание рассматриваемой проблемы кроется в разделении материи на вещество и поле, причем само вещество представляется сеткой атомных остовов, связанных условно химическими связями, внутри которой перемещаются, например, под действием внешнего поля, подвижные электроны. Сущность проблемы возникла из внутренних потребностей математического моделирования и абстрактного понятия К-системы [1]. Сходная задача возникает при моделировании поведения колоний бактерий, тьюрмитов и реализации муравьиных алгоритмов, хемотаксиса. Указанные объекты служат примерами мультиагентных систем, характеризуются динамичной перестройкой связей. Для К-систем материаловедения реализуется жесткость связей, а диалектика непрерывное $\leftrightarrow$ дискретное перетекает в диалектику локальное $\leftrightarrow$ глобальное (Например, зарядовое состояние системы ловушек внутри филамента мемристора влияет на подвижность носителей заряда и протекание тока). Укажем на возможность применения концепта К-системы при моделировании электрофизики полимеров, в частности, фоторезистов с химическим усилением при их засветке, при этом реакционный центр полимера [2, 3] представляется узлом К-системы. В этой связи обратим внимание на базовые установки модели Гила-Пфистера (W.Gill, G. Pfister) [2].

Инкорпорация свойств среды в формальные параметры К-системы

Перечислим [1] базовые сущности в определении К-системы, это: множество E элементов, однородных по своему строению; коннектом K , т.е. множество попарных связей элементов (ребра графа); множество S потенциальных состояний элемента; множество Q возможных сигналов, которые ассоциированы с ребрами; алгоритм действия A , в соответствии с которым элемент генерирует сигнал на основе своего состояния, также изменяя его, и входных сигналов; функция искажения B , отражающая разницу между сгенерированным и принятым сигналами; линейно упорядоченное множество T моментов или интервалов на оси времени. К-система

$\langle E, S, K, Q, \mathcal{A}, B \rangle$ обладает чертами большой системы, однородности и параметризуемости. Заметим, что входной сигнал, имея в виду фон-Неймановскую интерпретацию клеточного автомата, может и, в каком-то смысле, должен нести информацию о состоянии элемента.

Рассмотрим, как применить абстракцию К-системы, для задачи о проводимости мемристивной МДМ-структуры. В области филамента диффузионно-ионные процессы под действием поля обычно приводят к образованию кислородных вакансий, и, соответственно, ловушечных уровней (одного или нескольких) в запрещенной зоне. В самом примитивном случае Одна такая ловушка есть денотат элемента К-системы и может находиться в состоянии «0», «1» или «2» по числу пойманных электронов. Часто возникает кластер вакансий размера $\sim 3 \div 5 \text{ \AA}$, область нарушенной стехиометрии и единая дискретная особенность электронной структуры аморфизированного тела, и тогда мощность множества состояний больше $3 \leq |S| \leq 12$. Эти области разделены средой, а критерием попарной связности выступает пространственная близость. Два физических механизма связи это дрейф электронов в зоне проводимости и квантовомеханическое туннелирование. В роли сигнала выступает число и энергетический спектр перемещенных электронов. Вероятность туннелирования зависит от профиля потенциального барьера на дистанции между областями, исходных уровней ловушек и внешнего поля. Здесь имеется скрытое противоречие с формализмом алгоритма действия. Оно не чувствуется, если К-система базируется на сети Петри, когда сигнал представлен фишками, если К-система опирается на модель формального нейрона, в явном виде не вводится состояние нейрона, если берется клеточный автомат (КА), как решётка конечных автоматов, причем тогда сигналы банально дублируют состояния соседей. Покажем (1) эту подмену в локальной функции перехода, т.е. алгоритме действия, для полутоталистичного КА (Здесь даны строчными буквами элементы множеств, элемент генерирующий действие (центральный) мы не индексируем снизу, как его соседей, а верхний индекс указывает на момент актуализации состояния):

$$s^{t+1} := \mathcal{A}(s^t, \Sigma q_i^t) \quad q_i^t \triangleq s_i^t \quad q_i^t \triangleq w_i s_i^t \quad q_i^t \triangleq w_i(s_i^t - s^t) \quad t \in T \quad (1)$$

Слева направо указаны три варианта подмены: наивный, с весами (возможность обучения КА) и отражающий физику, например, закон Фика, если в весах учесть коэффициент диффузии. По

аналогии с автоматом Мили алгоритм действия должен обновить выходные сигналы для элемента с n входами и m выходами

$$q_j^{t+1} := \mathcal{A}(s^t, q_1^t, \dots, q_n^t) \quad i \in \overline{1, n} \quad j \in \overline{1, m} \quad q_j^{t+1} := \mathcal{A}(s^{t+1}, q_1^t, \dots, q_n^{t+1}) \quad (2)$$

Слева в (2) дан синхронный вариант, подходящий для материало-ведения, а вариант справа есть экзотика асинхронности, полезная в попытке ввести вероятные переходы. Формулы (1&2) должны применяться одновременно, отражая единство алгоритма действия и физического процесса. Суть противоречия в том, элемент при генерации сигнала формально не «знает» текущего состояния соседа и недостаточно знать свое состояние. Законы переноса включают градиенты физической величины, например, потенциала в законе Ома (Кирхгофа). Два энергетических параметра есть и в расчете, в ВКБ приближении, проницаемости барьера (3):

$$\begin{aligned} s_{1,2} &\stackrel{\text{def}}{=} \phi_{1,2} & J &= \sigma \frac{\phi_2 - \phi_1}{d_{21}} & w_{12} &= w_{21} \\ q_j &\stackrel{\text{def}}{=} J & J &= w_{12} N_1 = w_{21} N_2 & w_{21} &\sim \exp\left(\frac{-4\pi}{\hbar} \int_1^2 \sqrt{2n(W - U(x))} dx\right) \end{aligned} \quad (3)$$

Заметим, хотя обозначения в (3) стандартны, W энергия электрона, d_{21} это длина переноса из элемента 1 в элемент 2. J – плотность тока, N переменная состояния, хранимое элементом число электронов. Проводимость среды σ и вероятность перескока между ловушками w , которые зависят от рассеяния на фононах, определяют интенсивность сигнала и зависят от среды. Указанное противоречие чувствуется для схмотехнических реализаций спайковых нейронных сетей, когда из биофизики берется понятие мембранного потенциала.

Рассмотрим для данного примера семантику функции искажения $Q \xrightarrow{B} Q$. Очевидно здесь ведущая роль принадлежит среде. Если рассматривать механизм ТАТ (trap assisted tunneling), то рассеяние энергии электрона можно учесть либо в алгоритме действия, либо в функции искажения. Высокоэнергетические (горячие) электроны, ускоренные полем, могут покинуть область филамента геометрически или энергетически, попав с уровня ловушки в ансамбль электронов зоны проводимости. Процессы рекомбинации-генерации носителей заряда имеют вторичное значение для сигнала, но нужно учитывать при изменении состояния элемента. Простой пример: было эмитировано 3 электрона, а целевой элемент принял 2 или 4.

Влияние К-системы на параметры среды.

В качестве примера приведем Первое уравнение Максвелла (Пуассона), в правой части которого стоит артефакт К-системы. Вместе с материальным соотношением, связывающее индукцию $\mathbf{D}$ и напряженность поля $\mathbf{E}$

$$\nabla * \vec{D} = \rho \quad \vec{D} = \varepsilon(r) \varepsilon_0 \vec{E} \quad (4)$$

В (4) мы показали пространственную зависимость диэлектрической проницаемости. Как и для вектора поляризации, представление об этих величинах носит эмпирическо-макроскопический характер, хотя для объемов порядка 10^3 нм^3 сам их смысл, не только числовые значения, весьма неясен (с учётом квантовой механики). Помимо локальных характеристик, среда обладает интегральными, статистическими характеристиками: подвижность μ , теплопроводность.

Под средой мы, для целей моделирования, понимаем (5) коротеж непрерывных $\langle \beta \rangle$ функций, определенных на границах $\partial\Omega$ (краевые условия, прежде всего для электрического поля) и внутри объема Ω за вычетом точек, занятых К-системой. Эти точки получают статус узлов интерполяции, как это делается в методе конечных элементов. Технически можно интегрировать эти функции по объему для получения параметров среды (например, сопротивление мемристора), но влияние К-системы более сложное.

$$\beta = \beta(\vec{r}), \vec{r} \in \Omega \cup \Omega_k \quad \vec{r}_k \in \Omega_k \quad 3\bar{\beta} \stackrel{\text{def}}{=} \int \beta(\vec{r}) d\Omega \quad (5)$$

Примером такого сложного влияния выступает правило Матиссена для электропроводности сплавов. Под этим углом зрения можно посмотреть на зависимость коэффициента диффузии от концентрации вакансий в кристалле. Ни одна из известных формул не учитывает порядка расположения вакансий. Модель дипольных ловушек [2,3] даёт нам чуть более простой пример влияния на подвижность. В (5) r_k координаты элементов К-системы, а Ω_k – ассоциированные с ними окрестности-шары малого радиуса, условно равному размеру диполя в 2–3 атомных связи.

В действительности мы разбили мезо- или микросистему на две подсистемы, взаимодействие которых необходимо реализовать в единой модели. Для мемристора интегральное сопротивление определяется пулом электронов в зоне проводимости и пулом электронов на ловушках. Мы оставили в стороне соотношение быстрых и медленных процессов, например, переконфигуриро-

вание К-системы при ионном дрейфе и росте филамента или электроформовке.

Выводы

В работе сделана попытка показать возможность применения концепции К-системы к моделированию наноструктурированных материалов.

Работа выполнена при поддержке Национального центра физики и математики, направление № 9.

Список использованных источников

1. Матюшкин И.В., Тельминов О.А. Формально-философские вопросы коннекционизма и актуальные проблемы разработки нейроморфных систем // Электронная техника. Серия 3: Микроэлектроника. – 2022. – № 2(185). – С. 49–59.
2. Gill W.B. Drift mobilities in amorphous charge transfer complexes of trinitrofluorenone and poly n vinylcarbazole. Journal of Applied Physics 43, 5033(1972).
3. Serdouk F. et al. Solutions of q-deformed multiple-trapping model for charge carrier transport from time-of-flight transient photo-current in amorphous semiconductors // Revista Mexicana de Física (2020) v.66 (5) pp. 43–655 <https://doi.org/10.31349/RevMexFis.66.643>

PROBLEMS OF SYNTHESIS OF CONNECTIONIST REPRESENTATIONS AND CONTINUUM MODELS OF THE ENVIRONS ON THE EXAMPLE OF MEMRISTORS

I.V. Matyushkin

Abstract. The ways of complementarity of the local parameters of the C-system and the integral characteristics of the environs in which it is embedded are discussed an example of the problem is the calculation of the conductivity of the memristor filament region.

Key words: memristor, C-system, connectionism, methods of modeling.

МОДИФИКАЦИЯ ФОРМЫ ВЕРТИКАЛЬНЫХ НАНОПРОВОЛОК В ПРОЦЕССЕ ОТЖИГА

Настовьяк Алла Георгиевна,

*к.ф.-м.н., доцент², научный сотрудник¹,
alla@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. В работе выполнен численный расчет изменения формы вертикальных нанопроволок за счет реадсорбции вещества, испаряемого с соседних проволок и подложки.

Ключевые слова: нанопроволоки, отжиг, реадсорбция.

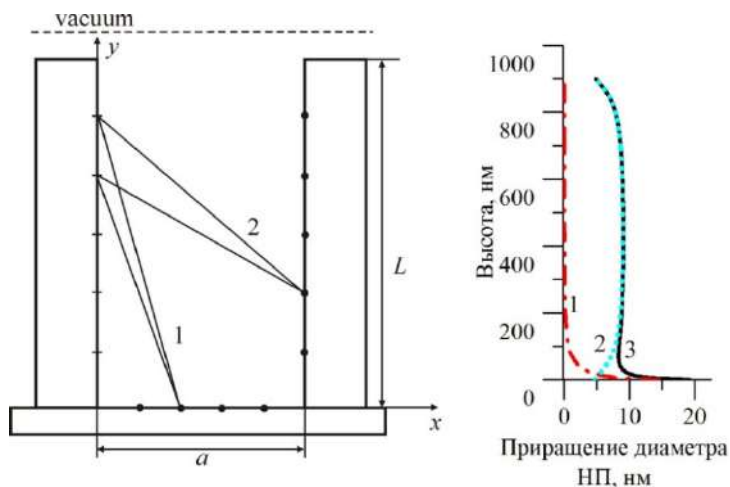
Введение

Полупроводниковые нанопроволоки (НП) являются перспективными объектами для реализации на их основе современных наноэлектронных приборов. Одним из способов получения вертикальных нанопроволок является рост по механизму пар-жидкость-кристалл. Таким способом можно получить массивы НП диаметром несколько десятков нм. Однако, для наблюдения квантово-размерных эффектов в НП их диаметр должен быть еще меньше, поэтому для утонения НП был предложен их послеростовой отжиг [1-3]. В процессе отжига исходно цилиндрические НП приобретают более сложную форму – утоняются в верхней части и, иногда, локально у основания. Целью настоящей работы является объяснение сложного профиля НП после их отжига на основе анализа численного расчета.

Моделирование реадсорбции на боковой поверхности НП

Для анализа процесса испарения в данной работе использовались две модели: модель Кнудсена-Ламберта и модель испарения из точечного источника. Рассматривался двумерный случай. На

гладкой подложке на расстоянии a друг от друга были расположены две проволоки высотой L (Рис.). Рассматривалось испарение с подложки (1) и боковой стенки одной из НП (2). Часть испаряющегося материала удалялась в вакуум, часть реадсорбировалась на подложку и соседнюю НП. В качестве приемника испаряемого вещества была рассмотрена вторая НП. Был проведен расчет количества вещества θ , реадсорбированного в единицу времени на боковую стенку НП с поверхности подложки и с боковой поверхности соседней НП. В результате реадсорбции диаметр рассматриваемой НП увеличивался неоднородно вдоль оси. На рисунке приведено приращение диаметра НП вдоль ее длины для нанопроволок высотой 900 нм расположенных на расстоянии a равном 70 нм. Расчет проводился с использованием модели испарения из набора точечных источников.



Из рисунка видно, что чем дальше от подложки, тем меньше приращение диаметра за счет реадсорбционного потока вещества с подложки (кривая 1). Начиная с высоты 200 нм осаждение на боковой поверхности НП за счет реадсорбции с подложки отсутствует. Количество вещества, реадсорбированного с боковой поверхности соседней НП (кривая 2) максимально в центральной части НП и убывает в направлении верхнего и нижнего края. В области верхнего края часть испаряемого вещества уходит в вакуум, а в области нижнего края – на подложку, что приводит к уменьшению реадсорбированной дозы в этих областях. Сумма вещества, адсорбированного на боковую поверхность НП за счет испарения

с подложки и с соседней НП, дает результирующий профиль НП (кривая 3). От соотношения вкладов кривых 1 и 2 зависит результирующая форма НП. Если преобладает реадсорбция с подложки, то НП расширяется книзу. Если преобладает реадсорбция с соседней НП, то формируется перешеек, отделяющий верхнюю часть кристалла от пьедестала. Причем положение перешейка будет тем ближе к подложке, чем меньше вклад реадсорбции с подложки.

Аналогичным образом был рассмотрен процесс испарения в соответствии с законом Кнудсена-Ламберта. Согласно ему, испарение вещества происходит неравномерно во всех направлениях – количество испаренного вещества пропорционально косинусу угла между направлением испарения и нормалью к поверхности. Как и в случае сферически симметричных источников, профиль НП, полученный в расчете по закону Кнудсена-Ламберта, имеет перешеек, однако, расположен он точно у основания НП. Такое положение перешейка связано с нулевым испаряемым потоком с подложки в сторону нанопроволоки.

Моделирование показало, что профиль нанопроволок, формирующийся в процессе отжига, зависит от геометрических параметров системы (высоты нанопроволок и расстояния между ними) и скоростей испарения материала с поверхности подложки и боковых стенок нанопроволок.

Выводы

Рассмотрено изменение формы нанопроволоки из-за реадсорбции на нее материала с соседних НП и поверхности подложки. Показано, что реадсорбционный поток с соседней проволоки приводит к утолщению НП в средней части, а с поверхности подложки – к формированию пьедестала у основания. Преобладание первого потока над вторым приводит к формированию узкого перешейка в нижней части НП.

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

Список использованных источников

1. Ilkiv I. et al. Thermal Decomposition of GaAs Nanowires // *Nanotechnology*, 2020. Vol. 31, p. 055701.
2. Loitsch B. et al. Tunable Quantum Confinement in Ultrathin, Optically Active Semiconductor Nanowires Via Reverse-Reaction Growth // *Advanced Materials*, 2015. Vol. 27, pp. 2195–2202.

VERTICAL NANOWIRE SHAPE MODIFICATION DURING THE ANNEALING PROCESS

A.G. Nastovjak, N.L. Shwartz

Abstract. In this work, the numerical calculation of vertical nanowire shape modification due to the readsorption of material evaporated from the neighbor nanowires and from the substrate was fulfilled.

Key words: nanowires, annealing, readsorption.

<https://doi.org/10.29003/m3594.MMMSEC-2023/88-92>

ПРИМЕНЕНИЕ МАШИННООБУЧЕННЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ СТРУКТУРНЫХ СВОЙСТВ ОКСИДНЫХ СИСТЕМ

Павлишин Кирилл Юрьевич,
аспирант¹,

kirill1999super15@gmail.com

Абгарян Каринэ Карленовна,

д.ф.-м.н., доцент, профессор¹, главный научный сотрудник,
заведующий отделом²,

kristal83@mail.ru

Журавлев Андрей Андреевич,

старший преподаватель¹, младший научный сотрудник²,
zhuravlyow.andrei@gmail.com

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
факультет Вычислительной математики и кибернетики

²Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление»
Российской академии наук (ФИЦ ИУ РАН), г. Москва

Аннотация. В данной работе исследуются структурные свойства оксида гафния (HfO_2) в его орторомбической, моноклинной и тетрагональной фазах с использованием потенциалов машинного обучения (MLP) в сочетании с методом проталкиваемой эластичной ленты (NEB). HfO_2 является перспективным материалом для электронных устройств, в частности мемристоров, благодаря своей высокой диэлектрической проницаемости и совместимости с комплементарной технологией металл-оксид-

полупроводник (CMOS). В работе сравниваются три различных MLP (NNP, SNAP, qSNAP) и выбирается qSNAP как наиболее эффективная модель для прогнозирования энергий и сил. Используя NEB в связке с машиннообученными потенциалами, рассчитывается энергетический профиль и траектория перехода между двумя стабильными положениями HfO_2 в орторомбической фазе, что позволяет получить представление о его стабильности и износостойкости. Полученные результаты дают ценную информацию для проектирования электронных компонентов, особенно мемристоров, и могут привести к повышению производительности, надежности и энергоэффективности устройств.

Ключевые слова: оксид гафния (HfO_2), машиннообученные потенциалы (MLP), метод проталкиваемой эластичной ленты (NEB), мемристоры, структурные свойства, электронные компоненты, стабильность, износостойкость, энергоэффективность.

Введение

В последние десятилетия в материаловедении и инженерии произошел значительный прогресс, который привёл к открытию новых материалов с уникальными свойствами. Один из таких классов материалов, оксидные системы, привлек значительное внимание благодаря их разнообразному применению в электронике, катализе и накопителях энергии. Оксид гафния (HfO_2) стал многообещающим материалом для электронных устройств, особенно мемристоров, благодаря своей высокой диэлектрической проницаемости и совместимости с технологией CMOS. Однако понимание структурных свойств HfO_2 и энергетических барьеров имеет решающее значение для оптимизации работы мемристора. HfO_2 может иметь различную кристаллическую структуру, которая влияет на свойства мемристора. В этом исследовании используются машиннообученные потенциалы (MLP) в сочетании с методом проталкиваемой эластичной ленты (NEB) для эффективного исследования структурных свойств HfO_2 . MLP предлагают более быструю альтернативу вычислениям по теории функционала плотности (DFT), что делает их подходящими для сложных систем. Это исследование направлено на то, чтобы внести вклад в моделирование оксидных материалов для электронных компонентов с акцентом на мемристоры, и демонстрирует потенциал MLP в различных технологических приложениях [1, 2].

Применение машиннообученных потенциалов вместе с методом проталкиваемой эластичной ленты для изучения структурных свойств HfO_2

Данные для обучения машиннообученных потенциалов были собраны для HfO_2 в его орторомбической, моноклинной и тетрагональной фазах. С использованием программного пакета Quantum Espresso были сгенерированы два набора обучающих данных: данные для деформированных структур и данные, полученные из моделирования молекулярной динамики. Расчеты для деформированных структур включали осмысленные и случайные линейные деформации, в то время как моделирование молекулярной динамики проводилось при различных температурах. Эти данные были обработаны для создания подходящих обучающих наборов для MLP.

Потенциалы с машинным обучением (MLP) обеспечивают эффективный способ прогнозирования энергий и взаимодействий на основе положения атомов. MLP требуют справочных данных из квантово-механических расчетов или экспериментов и обучаются минимизировать расхождение между прогнозируемыми и эталонными энергиями или силами. MLP могут фиксировать сложные атомные взаимодействия более точно, чем традиционные потенциалы. Deskрипторы и ядра являются важными компонентами MLP, позволяющими им представлять входные данные и количественно оценивать сходство между атомарными конфигурациями [3].

Метод проталкиваемой эластичной ленты (NEB) используется для изучения структурных переходов, включая химические реакции и фазовые переходы. NEB соединяет начальную и конечную конфигурации серией промежуточных изображений. Этот метод связывает атомы эластичной лентой, чтобы найти путь с наименьшей энергией, помогая идентифицировать энергетические барьеры и переходные состояния [4]. Расчеты NEB традиционно основаны на теории функционала плотности (DFT), но в этом исследовании для расчета энергий и сил вдоль траектории используются машиннообученные потенциалы.

Выбор машиннообученного потенциала, а именно NNP, SNAP и qSNAP, основан на их эффективности в прогнозировании энергий и сил для HfO_2 во всех трех фазах. qSNAP определен как наиболее эффективный потенциал для решения поставленной задачи с учетом показателей качества и анализа ошибок.

Алгоритм NEB применяется с 15 промежуточными изображениями и параметрами пружины, установленными в значение 0,5. Используя результаты работы алгоритма, проанализирован энергетический профиль перехода между двумя устойчивыми состояниями HfO_2 в орторомбической фазе, выявляющий немодальный энергетический ландшафт с высоким энергетическим барьером, равным 0,527. Это указывает на стабильность и износостойкость материала, которые необходимы для электронных компонентов, таких как мемристоры.

Моделирование динамики перехода между двумя устойчивыми состояниями системы иллюстрирует поведение системы во время перехода, демонстрируя стабильные атомные связи между атомами гафния (Hf) и кислорода (O).

Траектории атомов кислорода вдоль траектории движения эластичной ленты показывают предпочтительный путь перехода между двумя устойчивыми состояниями системы и местоположение переходного состояния, характеризующегося точкой с наивысшей энергией, которая обозначает энергетический барьер, который необходимо преодолеть, чтобы произошел переход. Понимание энергетического барьера и процесса перехода имеет важное значение для повышения надежности и долговечности электронных устройств.

Выводы

В этой работе были успешно исследованы структурные свойства HfO_2 с использованием машиннообученных потенциалов и метода NEB. qSNAP была выбрана как наиболее эффективная модель машиннообученного потенциала. Анализ энергетического профиля и траектории перехода из одного устойчивого состояния в другое в орторомбической фазе HfO_2 демонстрирует его стабильность и износостойкость, необходимые для электронных компонентов, таких как мемристоры. Это исследование способствует комплексному пониманию оксидных материалов. Будущие исследования будут сосредоточены на фазовых переходах и их влиянии на производительность электронных устройств.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 23-91-01012

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Ying Zhang, Ge-Qi Mao, Xiaolong Zhao, Yu Li, Meiyun Zhang, Zuheng Wu, Wei Wu, Huajun Sun, Yizhong Guo, Lihua Wang, Xumeng Zhang, Qi Liu, Hangbing Lv, Kan-Hao Xue, Guangwei Xu, Xiangshui Miao, Shibing Long, Ming Liu. Evolution of the conductive filament system in HfO_2 -based memristors observed by direct atomic-scale imaging. *Nature Communications* 12, Article number: 7232, 2021.
2. Valeri Mladenov. Analysis of Memory Matrices with HfO_2 Memristors in a PSpice Environment. *Electronics* 8(4):383, 2019.
3. Zuo, Y.; Chen, C.; Li, X.; Deng, Z.; Chen, Y.; Behler, J.; Csa'nyi, G.; Shapeev, A. V.; Thompson, A. P.; Wood, M. A.; Ong, S. P. Performance and Cost Assessment of Machine Learning Interatomic Potentials. *J. Phys. Chem. A*, 124 (4), 731–745, 2020.
4. Hannes Jonsson, Greg Mills, Karsten W. Jacobsen. Nudged elastic band method for finding minimum energy paths of transitions. *Classical and Quantum Dynamics in Condensed Phase Simulations* (pp.385-404), 1998.

APPLICATION OF MACHINE-TRAINED POTENTIALS TO RESEARCH INTO STRUCTURAL PROPERTIES OF OXIDE SYSTEMS

K.Y. Pavlishin, K.K. Abgaryan, A.A. Zhuravlev

Abstract. In this paper, the structural properties of hafnium oxide (HfO_2) in its orthorhombic, monoclinic and tetragonal phases are investigated using machine learning potentials (MLP) in combination with the nudged elastic band (NEB) method. HfO_2 is a promising material for electronic devices, in particular memristors, due to its high dielectric constant and compatibility with complementary metal-oxide-semiconductor (CMOS) technology. The paper compares three different MLPs (NNP, SNAP, qSNAP) and selects qSNAP as the most effective model for predicting energies and forces. Using NEB in conjunction with machine-trained potentials, the energy profile and the trajectory of the transition between two stable positions of HfO_2 in the orthorhombic phase are calculated, which allows us to get an idea of its stability and wear resistance. The results obtained provide valuable information for the design of electronic components, especially memristors, and can lead to improved performance, reliability and energy efficiency of devices.

Keywords: hafnium oxide (HfO_2), machine-trained potentials (MLP), nudged elastic band (NEB) method, memristors, structural properties, electronic components, stability, wear resistance, energy efficiency.

ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА РОМБОЭДРИЧЕСКОГО ДИОКСИДА ГАФНИЯ: РАСЧЁТ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

Резник Александр Анатольевич,

аспирант¹, научный сотрудник²,

reznik.aa@phystech.edu

Резванов Аскар Анварович,

к.ф.-м.н., начальник лаборатории²,

arezvanov@niime.ru

Ганыкина Екатерина Андреевна,

научный сотрудник², eganykina@niime.ru

¹МФТИ (НИУ), г. Москва

²АО «НИИМЭ», г. Зеленоград

Аннотация. Определены физические свойства ромбоэдрического диоксида гафния в R3 структурной модификации, такие как остаточная поляризация, диэлектрическая проницаемость и механические свойства.

Ключевые слова: диоксид гафния, расчёт из первых принципов, остаточная поляризация, диэлектрическая проницаемость, механические свойства.

Введение

Тонкие пленки на основе диоксида гафния (HfO_2), в настоящее время активно исследуются на предмет внедрения в новые виды энергонезависимой памяти [1], такие как резистивная (ReRAM) [2, 3] и сегнетоэлектрическая (FeRAM) [4] память с произвольным доступом. Основными преимуществами таких тонких пленок является их совместимость с КМОП-технологией и возможность формирования ультратонких функциональных слоев.

В настоящее время, для создания элементов хранения ReRAM и FeRAM, используется моноклинный HfO_2 (m- HfO_2) с пространственной группой $P2_1/c$ и орторомбический HfO_2 (f- HfO_2) с пространственной группой $Pca2_1$, соответственно. Однако, в 2018 г. была обнаружена ромбоэдрическая структурная модификация HfO_2 (r- HfO_2) с пространственными группами R3 и R3m [5]. Особенностями r- HfO_2 является эффект остаточной поляризации, что потенциально может найти свое применение в FeRAM и возможность стабилизировать эту фазу при помощи кислородных вакансий,

что в перспективе можно использовать для формирования функционального слоя ReRAM [6]. В связи с этим, появляется потребность в изучении свойств этих соединений и в этой работе будут изучены структурные, электрофизические, оптические и механические свойства $r\text{-HfO}_2$ с пространственной группой R3.

Методы и результаты

Расчеты из первых принципов примитивной ячейки $r\text{-HfO}_2$ с пространственной группой R3 (№160) проводились в программном пакете Quantum ESPRESSO [7]. Первоначальные данные о структуре были взяты из работы [5]. Использовались псевдопотенциалы из базы [8] с обменно-корреляционным функционалом PBEsol и PBE. Валентными электронами для атомов гафния являлись $4f^{14}$, $5s^2$, $5p^6$, $5d^2$, $6s^2$, а для атомов кислорода $2s^2$, $2p^4$. Кинетическая энергия плоских волн составляла 3400 эВ, интегрирование по зоне Бриллюэна проводилось по сетке Монкхорста-Пака размера $6 \times 6 \times 4$. Релаксация ячейки проводилась до тех пор, пока межатомные силы не становились меньше $2.57 \cdot 10^6$ эВ/см и разница энергий основных состояний между последовательными итерациями не становилась меньше $1.36 \cdot 10^{-4}$ эВ.

В результате проведенного моделирования были рассчитаны некоторые свойства $r\text{-HfO}_2$, которые представлены в таблице 1 ниже.

Таблица 1

Физические свойства ромбоэдрического диоксида гафния

Параметр		Значение
Объём	$V, \text{\AA}^3$	397.52
Поляризация	$P_z, \text{мкКл/см}^2$	31.78
Диэлектрическая проницаемость	ε_1	5.11
	ε_2	20.05
Объёмный модуль упругости	$B, \text{ГПа}$	230.38
Модуль Юнга	$E, \text{ГПа}$	274.52

Выводы

Полученные результаты свидетельствуют о том, что $r\text{-HfO}_2$ обладает меньшей остаточной поляризацией, модулем Юнга и диэлектрической проницаемостью, но большим объёмным модулем упругости по сравнению с $f\text{-HfO}_2$.

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).

Список используемых источников

1. Красников Г.Я., Зайцев Н.А., Красников А.Г. Современное состояние разработок в области энергонезависимой памяти // Нано- и микросистемная техника, 2015. № 4, с. 60–64.
2. Ганыкина Е.А., Резванов А.А., Горнев Е.С. Физическая модель резистивного переключения в ReRAM-структурах на основе оксида гафния // Наноиндустрия, 2022. Т. 15, №. S8-2, с. 537–540.
3. Ganykina E.A., Rezvanov A.A., Gornev Y.S. Investigation of conductive filament growth and rupture in ReRAM structures based on hafnium oxide // International Conference on Micro-and Nano-Electronics 2021. – SPIE, 2022. Vol. 12157, pp. 89–94.
4. Volodina N. et al. Ferroelectric $\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ Thin Films Crystallized by Pulsed Laser Annealing //physica status solidi (RRL)–Rapid Research Letters. 2021. Т. 15. no. 5. pp. 2100082.
5. Wei Y. et al. A rhombohedral ferroelectric phase in epitaxially strained $\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ thin films //Nature materials, 2018. Vol. 17, no. 12, pp. 1095–1100.
6. Kaiser N. et al. Crystal and Electronic Structure of Oxygen Vacancy Stabilized Rhombohedral Hafnium Oxide //ACS Applied Electronic Materials, 2023. Vol. 5, no. 2, pp. 754–763.
7. Giannozzi P. et al. Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO //Journal of physics: Condensed matter, 2017. Vol. 29. no. 46. p. 465901
8. Van Setten M. J. et al. The PseudoDojo: Training and grading a 85 element optimized norm-conserving pseudopotential table //Computer Physics Communications, 2018. Vol. 226, pp. 39–54.

MAIN PROPERTIES OF RHOMBOHEDRAL HAFNIUM DIOXIDE: CALCULATION FROM FIRST PRINCIPLES

A.A. Reznik, A.A. Rezvanov, E.A. Ganykina

Abstract. The physical properties of rhombohedral hafnium dioxide in R3 structural modification, such as residual polarization, permittivity and its dependence on frequency, mechanical properties are determined.

Keywords: hafnium dioxide, first principles calculation, remnant polarization, permittivity, mechanical properties.

МОДЕЛИРОВАНИЕ КОЛЕБАНИЙ БАРАБАННОЙ ПЕРЕПОНКИ ПРИ НАЛИЧИИ СИММЕТРИЧНОГО КРУГОВОГО ДЕФЕКТА

Романенков Александр Михайлович,

к.т.н., научный сотрудник^{1, 2},

romanaleks@gmail.com

Костиков Юрий Александрович,

к.ф.-м.н., доцент, заведующий кафедрой 916 МАИ²,

jkostikov@mail.ru

¹ФИЦ ИУ РАН, г. Москва

²МАИ, г. Москва

Аннотация. В работе рассмотрена начально-краевая задача для гиперболического уравнения второго порядка. Эта задача в двумерном случае может рассматриваться как математическая модель колебаний барабанной перепонки млекопитающих. Для случая наличия дефекта круговое перепонки построены модельные решения в виде рядов Фурье по собственным функциям соответствующей задачи Штурма–Лиувилля. Рассмотрены различные примеры.

Ключевые слова: гиперболическое уравнение, моделирование колебаний барабанной перепонки.

Введение

В работе [1] рассматривается модельная задача о колебании барабанной перепонки при наличии внешнего давления. Особенностью исследуемой модели является использование обыкновенного неоднородного дифференциального уравнения второго порядка с постоянными коэффициентами, в котором искомая функция является амплитудой колебаний, зависящей от времени. Стоит отметить, что колебания разных точек могут быть различны. В этом случае следует вводить пространственную координату и рассматривать модельное уравнение с переменными коэффициентами. Рассмотрение барабанной перепонки как круглой мембраны приводит к начально-краевой задаче для двумерного уравнения гиперболического типа. В работе [2] возникает задача о колебаниях круглой мембраны, которую можно рассматривать как математическую модель колебаний улитки внутреннего уха человека.

Моделирование колебаний барабанной перепонки

Рассмотрим начально-краевую задачу для дифференциального уравнения в частных производных:

$$\alpha^2(t)u_{tt} + 2\beta(t)u_t + \gamma^2(t)u = u_{rr} + \frac{1}{r}u_r, \quad (1)$$

$$u|_{r=R_0} = v(t), u|_{r=R_1} = 0, \quad (2)$$

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

где $\alpha(t), \beta(t), \gamma(t)$ – заданные функции от времени, которые определяются из биомеханических свойств перепонки, $u = u(r, t)$ – искомая функция, $r = \sqrt{x^2 + y^2}$. В данном случае R_1 – радиус мембраны, R_0 – радиус отверстия в мембране. Краевые условия (2) отражают тот факт, что мембрана закреплена по внешнему краю, а на внутренней границе задан некоторый режим, который зависит только от временной переменной. В работе выполняется сведение задачи (1, 2, 3) к задаче с тривиальными краевыми условиями, что позволяет использовать метод разделения переменных и получить представление решения в виде функционального ряда. Рассмотрены вопросы качественного описания колебаний приведены иллюстрации.

Выводы

В работе рассмотрена модельная задача о колебаниях круглой барабанной перепонки уха млекопитающего при наличии круглого дефекта. Для нестационарного граничного условия получены решения соответствующей краевой задачи в виде функционального ряда Фурье.

Список использованных источников

1. Anthony E. Iyoho; Kevin Ho, MS; Philemon Chan. The Development of a Tympanic Membrane Model and Probabilistic Dose-Response Risk Assessment of Rupture Because of Blast. MILITARY MEDICINE, 185, S1:234, 2020
2. Кезик В.И. Вынужденные осесимметричные колебания круглой мембраны, являющейся элементом акустической колебательной системы. Электронный журнал «Техническая акустика» <http://www.ejta.org> 2013, 9

PATTERN OF OSCILLATIONS OF THE TYPICAL EARDRUM IN THE PRESENCE OF A SYMMETRICAL CIRCULAR DEFECT

A.M. Romanenkov, Y.A. Kostikov

Abstract. The paper considers an initial boundary value problem for a second-order hyperbolic equation. This problem in a two-dimensional case can be

considered as a mathematical model of vibrations of the mammalian eardrum. For the case of a circular membrane defect, model solutions were constructed in the form of Fourier series based on the eigenfunctions of the corresponding Sturm-Liouville problem. Various examples are considered.

Key words: hyperbolic equation, modeling of tympanic membrane vibrations.

УДК 004.94

<https://doi.org/10.29003/m3597.MMMSEC-2023/98-101>

МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ШПИНЕЛЕЙ С ПРИМЕНЕНИЕМ РЕЛЯЦИОННОЙ СХЕМЫ ХРАНЕНИЯ ДАННЫХ

Сеченых Полина Алексеевна,

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

¹ *Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление»
Российской академии наук, г. Москва*

² *Московский Авиационный институт, г. Москва*

Аннотация. В работе представлен расчёт метрических параметров кристаллических соединений с заданной химической формулой и пространственной группой симметрии. В ходе моделирования применялась разработанная реляционная модель хранения входных и выходных данных. Рассмотрены соединения, реализованные в структурном типе «шпинель».

Ключевые слова: доменная модель, кристаллографические данные, реляционная схема хранения, структура шпинели.

Введение

Решение задачи подбора кристаллической структуры с заданной химической формулой, обладающей требуемыми свойствами, на сегодня является одной из наиболее востребованных в области материаловедения. Для её решения первоначально необходимо решить прямую задачу, связанную с определением взаимосвязей между кристаллической структурой с заданной химической формулой и соответствующими ей свойствами. При этом, расчёт структурных характеристик кристаллических материалов является нетривиальной задачей, особенно в случае многокомпонентных структур. В данной работе рассмотрены вопросы расчёта метрических параметров кристаллических структур с использованием

реляционной модели хранения входных и выходных данных вычислительного эксперимента.

Анализ предметной области

Необходимость хранения, анализа, сопоставления, поиска, агрегации и фильтрации значительных объёмов разнообразных кристаллографических данных, необходимых для работы различных материаловедческих приложений, делает актуальным не только их сбор, но и подробное описание. Наглядным и конструктивным механизмом описания является доменная модель [1], которая позволяет декомпозировать данные в множества по разнообразным критериям, промаркировать множества по их назначению, а также сопоставить им операции обработки, и указать необходимые ограничения. Это позволяет при проведении расчётов получить не только результаты вычислений, но и параметры обратной связи для дальнейшего управления вычислительным процессом. В частности, для задач расчёта метрических параметров кристаллических структур [2, 3] требуется детальное описание следующих объектов данных и алгоритмов их обработки:

- химические формулы веществ;
- пространственные группы симметрии [4];
- метрические параметры элементарной ячейки рассматриваемого кристаллохимического соединения (плотность упаковки, постоянные кристаллической решётки, координаты атомов, входящих в элементарную ячейку).

На основе построенной доменной модели была разработана реляционная схема хранения данных, необходимых для проведения расчётов структурных характеристик соединений с периодической кристаллической структурой.

Расчёт метрических параметров

В разработанной реляционной схеме хранения данных можно выделить два основных логических блока: данные, необходимые для проведения расчёта (справочная кристаллографическая информация и информация о химическом составе), и данные, полученные в результате вычислений. Выбранный подход позволяет агрегировать результат расчёта с исходными данными.

Для решения задачи, связанной с расчётом метрических параметров кристаллических структур, применялась программная ре-

лизация алгоритма имитации отжига [5] на языке программирования С# [6]. В данной работе были рассмотрены соединения, кристаллическая решётка которых реализуется в структурном типе «шпинель» (пространственная группа симметрии $Fd\bar{3}m$).

Радиусы атомов химических элементов были взяты из [7].

Основные результаты вычислений приведены в таблице 1.

Таблица 1

Структурные характеристики

Формула	Плотность упаковки	a (выч.), Å	a (таб.), Å	погрешность
MgAl ₂ O ₄	0.561	8.011	8.081	0.0087
FeAl ₂ O ₄	0.539	8.149	8.15	0.0001
ZnAl ₂ O ₄	0.549	8.08	8.0848	0.0006
MgFe ₂ O ₄	0.563	8.011	8.38	0.0440
NiFe ₂ O ₄	0.571	7.964	8.339	0.0450
MgCr ₂ O ₄	0.553	8.011	8.333	0.0386
FeCr ₂ O ₄	0.531	8.149	8.377	0.0272
FeV ₂ O ₄	0.559	8.149	8.454	0.0361
ZnMn ₂ O ₄	0.558	8.08	8.5	0.0494
MgGa ₂ O ₄	0.578	8.011	8.286	0.0332
ZnGa ₂ O ₄	0.566	8.08	8.33	0.0300

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

Выводы

В работе на основе построенной доменной модели была разработана реляционная схема хранения данных, необходимых для проведения расчётов структурных характеристик соединений с периодической кристаллической структурой. Выполнено моделирование соединений с кристаллической структурой типа «шпинель», использующее в качестве входных параметров расчёта, информацию, хранящуюся в разработанной базе данных. Такой подход даёт возможность сохранять и результаты расчёта, и входные параметры, соответствующие этим результатам. Полученные значения метрических параметров близки к опубликованным ранее данным.

В дальнейшем планируется расширить разработанную схему хранения данных, что позволит хранить результаты расчёта отдельных свойств соответствующих структурных классов кристаллических соединений. Такой подход позволит перейти к решению прямой задачи подбора структур с заданными свойствами.

Список использованных источников

1. НОУ ИНТУИТ [Электронный ресурс]. URL: <https://intuit.ru/studies/courses/611/467/lecture/28793?page=8#keyword161> (дата обращения 29.08.2023)
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
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 2021г. Москва: МАКС Пресс. – 2021. – С. 86–88. – <https://doi.org/10.29003/m2479.MMMSEC-2021/86-88>.
4. Hahn T. International Tables for Crystallography. Vol. A. // Springer, 2005 – 911 с.
5. Metropolis N., Ulam S. The Monte Carlo Method. Journal of the American Statistical Association, Vol. 44, No. 247 (Sep., 1949), pp. 335–341.
6. Документация по C# [Электронный ресурс]. URL: <https://docs.microsoft.com/ru-ru/dotnet/csharp/> (дата обращения 2.11.2022)
7. Хьюи Дж. Неорганическая химия. Строение вещества и реакционная способность. – Пер. с англ. /Под ред. Б.Д.Степина, Р.А.Лидина. – М.: Химия, 1987. – 696 с.
8. База данных ИМЕТ РАН им. А.А. Байкова [Электронный ресурс]. URL: <https://imet-db.ru/> (дата обращения 2.09.2023).

MODELING THE CRYSTAL STRUCTURE OF SPINELS USING A RELATIONAL DATA MODEL

Sechenykh P.A.

Abstract. The work presents the calculation of the metric parameters of crystalline compounds with a given chemical formula and space symmetry group. During the simulation, the developed relational model for storing input and output data was used. Compounds realized in the “spinel” structural type are considered.

Keywords: domain model, crystallographic data, relational data model, spinel structure.

АНАЛИЗ ПРИМЕНЕНИЯ МЕМРИСТОРНЫХ КРОССБАРОВ В ЗАДАЧАХ НЕЙРОСЕТЕВОЙ ОБРАБОТКИ

Тельминов Олег Александрович,

к.т.н., начальник отдела перспективных исследований¹,

otelminov@niime.ru

Горнев Евгений Сергеевич,

член-корреспондент РАН, профессор, заместитель руководителя

приоритетного технологического направления

«Электронные технологии»¹,

egornev@niime.ru

¹АО «НИИМЭ», г. Москва

Аннотация. рассмотрены варианты практических приложений, решаемых с помощью нейросетевой обработки на мемристорных кроссбарах; варианты схемотехнических и конструктивных решений таких кроссбаров, а также способы и результаты моделирования эксплуатационных характеристик мемристора на основе нитрида кремния.

Ключевые слова: векторно-матричное умножение, нейронные сети, мемристор и мемристорный кроссбар.

Введение

Мемристорный кроссбар является матрицей, в узлах которой размещены мемристоры. Такие элементы позволяют удерживать записанное в них состояние – значение сопротивления, а при подаче напряжения пропускать ток, обратно пропорциональный этому значению. Токи от мемристоров в одном столбце, подключенных к вертикальному проводнику, суммируются. Таким образом реализуется умножение вектора входных напряжений на матрицу заранее записанных значений в мемристоры. Векторно-матричное умножение является основной операцией для нейросетевых вычислений.

Однако при реализации мемристорных кроссбаров возникает ряд ограничений. Во-первых, размерность кроссбара в передовых мировых разработках не превышает 1024 по каждой стороне. Увеличение размерности в основном сдерживается наличием паразитных токов, протекающих через соседние узлы кроссбара.

Применение селектора – транзисторного ключа, работающего в паре с мемристором, в полной мере не решает проблему таких токов. Дополнительные ограничения вносят и основные эксплуатационные характеристики мемристоров, связанные с разрядностью хранимых значений, ресурсом по количеству циклов переключения, временем удержания резистивного состояния и рядом других.

Анализ вариантов практических приложений

Синаптические веса в нейронных сетях, имитируемые значениями сопротивлений мемристоров, должны быть настроены в процессе обучения нейросети. Такой процесс может быть выполнен либо предварительно «с учителем», либо непосредственно в процессе работы – «с подкреплением». Традиционно нейросети ввиду своего большого размера вычисляются на процессоре существенно меньшего размера пофрагментно с соответствующей реконfigurацией весовых коэффициентов. С учетом ограничений по ресурсу переключений и разрядности мемристоров предложены варианты использования кроссбаров на их основе.

Схемотехнические и конструктивные варианты реализации мемристорных кроссбаров

Управление мемристорным кроссбаром осуществляется с помощью управляющей схемы, выполненной по технологии КМОП [1]. В случае, когда при изготовлении мемристоров применяются материалы и технологические процессы, совместимые с КМОП-технологией, возможна монолитная интеграция. В остальных случаях кроссбар и управляющая схемы изготавливаются на независимых кристаллах, которые впоследствии интегрируются путем размещения рядом или друг на друге и размещаются в корпусе. Рассмотрены схемотехнические аспекты таких решений.

Результаты моделирования эксплуатационных характеристик мемристора на основе нитрида кремния

Рассмотрены подходы и результаты моделирования мемристора на основе нитрида кремния [2] – материала, совместимого с КМОП-технологией, и позволяющего выполнить монолитную интеграцию на едином кристалле с управляющей схемой. Выполнена

аппроксимация вольт-амперных характеристик с определением закона распределения, а также расчет времени удержания резистивного состояния при повышенной температуре.

Выводы

Выполнен анализ вариантов применения мемристорных матриц для реализации операции векторно-матричного умножения на мемристивных кроссбарах под управлением схемы, выполненной по КМОП-технологии, рассмотрены схемотехнические и конструктивные варианты реализации таких вычислителей, приведены результаты моделирования варианта реализации мемристоров на нитриде кремния.

Список использованных источников

1. Красников Г.Я., Горнев Е.С., Матюшкин И.В. Общая теория технологии и микроэлектроника: Электронная техника. Серия 3: Микроэлектроника. 2017. № 1 (165). С. 51–69.
2. О.А. Тельминов, Д.С. Мизгинов, С.И. Янович, Д.А. Жевненко, Ф.П. Мещанинов, Е.С. Горнев. Анализ применимости тонкопленочных мемристоров на Si₃N₄ в нейровычислителях с длительным хранением весов. Перспективные системы и задачи управления: материалы XVIII Всероссийской научно-практической конференции и XIV молодежной школы-семинара «Управление и обработка информации в технических системах». – Таганрог: ООО Издательство «Лукоморье». С. 206–211.

ANALYSIS OF THE USE OF MEMRISTOR CROSSBARS IN NEURAL NETWORK PROCESSING TASKS

O.A. Telminov, E.S. Gornev

Abstract. variants of practical applications solved using neural network processing on memristor crossbars are considered; variants of circuit and design solutions of such crossbars, as well as methods and results of modeling the operational characteristics of a memristor based on silicon nitride.

Key words: vector matrix multiplication, neural networks, memristor and memristor crossbar.

РАЗРАБОТКА МОДЕЛИ ДЛЯ КОРРЕКЦИИ ДЕФЕКТОВ, ПОВРЕЖДАЮЩИХ ПЛАВНИК, В Fin-FET-ТРАНЗИСТОРАХ

Тихонова Елена Дмитриевна,
студент¹, научный сотрудник²,
etikhonova@niime.ru

Горнев Евгений Сергеевич,
член-корреспондент РАН, д.т.н, профессор¹,
начальник управления РПТН²,
egornev@niime.ru

¹МФТИ (НИУ), г. Долгопрудный

²АО «НИИМЭ», г. Москва

Аннотация. В работе представлено исследование дефектов, повреждающих плавник, и способов их устранения. Была выявлена первопричина исследуемых повреждений и представлена коррекционная модель для уменьшения значения параметров, влияющих на дефектность плавника.

Ключевые слова: фотолитография; разрешающая способность; самосовмещённое двойное паттернирование; моделирование, Fin-FET-транзисторы.

Введение

Последние годы промышленность микроэлектроники претерпевает небывалое развитие. Активно создаются и развиваются передовые методы улучшения разрешения изображения (Resolution Enhancement Techniques, RET) [1], которые позволяют преодолеть предел разрешающей способности и перейти к технологическим нормам 28 нм и менее. Ключевую роль в этом процессе сыграло самосовмещённое двойное паттернирование (Self-Aligned Double Patterning, SADP) [2].

Данный метод часто используется при создании Fin-FET-транзисторов, в частности при конструировании плавников [3]. При этом накладываются определенные требования к конструкции плавника, в связи с чем возникает необходимость использования вспомогательного метода подрезания [2]. В настоящей работе мы исследовали, какие дефекты способны образовываться после получения необходимого рисунка в процессе самосовмещённого

двойного паттернирования, как их исправить и каким образом возможно улучшить качество мониторинга и контроля данного фотолитографического процесса.

Исследование и разработка модели для коррекции дефектов в Fin-слоях

Используемый технологический процесс полностью описан в наших предыдущих исследованиях [2, 4]. Чтобы обеспечить контролируемое и точное травление, необходимо задействовать несколько составляющих элементов: скорость травления, анизотропию, селективность между жёсткой маской и материалом, на который наносится рисунок, а также низлежащим под этим слоем материалом. Однородность учитывается после достижения селективности.

В данной работе после реализации метода подрезания в процессе самосовмещённого двойного паттернирования были обнаружены дефекты, повреждающие плавник (рис. 1 а-б). Их количество растёт с увеличением радиуса пластины, а физическая характеристика профиля показывает случайное распределение дефектов. Поскольку плавник работает как канал, по которому движутся носители тока, то такое повреждение неизбежно влияет на производительность устройств.

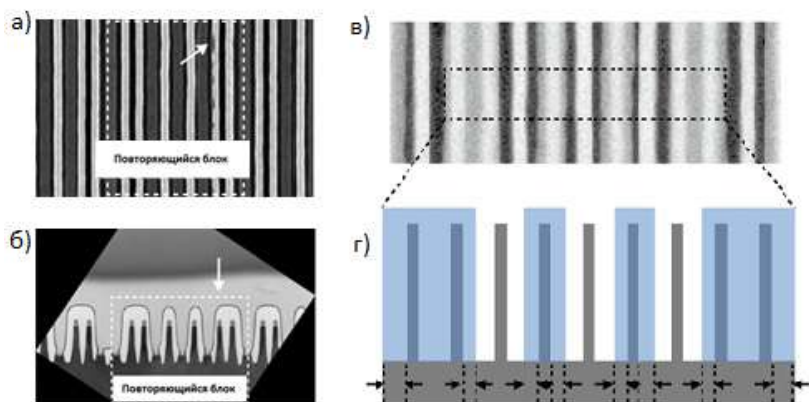


Рис. 1. Повреждения плавника, полученные с помощью СЭМ (а) и ПЭМ-изображений (б); СЭМ-изображение выделенного блока (в); разность между расстоянием от краёв линий до краёв SOC (г)

Чтобы предотвратить данный тип дефектов, необходимо выяснить их первопричину, т.е. необходимо определить, какие характеристики значительно влияют на недостаточное покрытие SOC. Для этого мы рассмотрели, как меняется центр тяжести Fin-слоя и низлежащего под ним; как варьируется погрешность шага между двумя соседними линиями; и какова разность между расстоянием от краёв слоя SOC до линий (рис. 1 в-г).

Исходя из полученных результатов, обнаружили, что дефект повреждения плавника вызван комплексным действием параметров системы: точностью наложения слоёв друг на друга, погрешностью шага и заниженным показателем расстояния между краем линии и слоем SOC. Для корректировки модели построили карту распределения дефектов и на её основе воспользовались аппроксимацией первого и третьего порядка. В результате, получили улучшение стандартного отклонения и среднего значения смещения вышеперечисленных параметров.

Выводы

По итогам проделанной работы выяснили, что ключевой причиной дефектов плавника является неравномерное покрытие SOC, причём использование коррекционной модели позволяет минимизировать влияние данных дефектов на конструкцию плавника.

Список использованных источников

1. Красников Г. Я. Возможности микроэлектронных технологий с топологическими размерами менее 5 нм // Наноиндустрия. 2020. Т. 13. № S5-1(102). С. 13–19.
2. Тихонова Е. Д. Моделирование профиля фоторезиста в процессе самосовмещенного двойного паттернирования с учетом коррекции проблемы горячих точек / Е. Д. Тихонова // Наноиндустрия. – 2022. – Т. 15, № S8-2(113). – С. 602–604.
3. Баранов Г. В. Физические особенности и конструкции низкоразмерных транзисторных структур / Г. В. Баранов, А. Г. Итальянцев, Г. Я. Красников // Микроэлектроника-2015. Интегральные схемы и микроэлектронные модули: проектирование, производство и применение: сборник докладов Международной конференции, Алушта, Крым, 28 сентября – 03 2015 года. – Алушта, Крым: Рекламно-издательский центр «ТЕХНОСФЕРА», 2016. – С. 538–541.
4. 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.

DEVELOPMENT OF THE CORRECTION MODEL FOR DEFECTS DAMAGING THE FIN IN FIN-FET TRANSISTORS

E.D. Tikhonova, Y.S. Gornev

Abstract. The paper presents a study of defects that can damage the Fin and the ways to eliminate them. The root cause of the studied damage was identified and a correction model was presented to reduce the value of parameters affecting the defectiveness of the Fin.

Key words: photolithography; resolution; self-aligned double patterning; simulation, Fin-FET transistors.

<https://doi.org/10.29003/m3600.MMMSEC-2023/108-111>

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОБРАЗОВАНИЯ НАНОЧАСТИЦ НИКЕЛЯ ВБЛИЗИ ГРАНИЦ ДЕФЕКТОВ СТРУКТУРЫ LSNT ПЕРОВСКИТА

Фаттахов Азат Фарвазович,

студент¹,

fattahovazat@yandex.ru

Бажанов Дмитрий Игоревич,

к.ф.-м.н., старший преподаватель^{1,2},

dima@kintechlab.com

¹МГУ имени М.В. Ломоносова, г. Москва

²ФИЦ ИУ РАН, г. Москва

Аннотация. В работе исследуется сегрегация примесей никеля вблизи границ дефектов структуры перовскита $La_{0.2}Sr_{0.7}Ni_{0.1}Ti_{0.9}O_{2.9}$ (LSNT). Рассматриваются такие дефекты решетки, как TiO-терминированная поверхность (001), TiO-терминированная противофазная граница и ядро дислокации. Для расчетов энергий структур используются пакеты классической и первопринципной молекулярной динамики. В результате расчетов обнаружено, что примеси никеля имеют тенденцию к сегрегации и кластеризации на границах структурных дефектов. Полученные результаты находятся в согласии с экспериментальными наблюдениями.

Ключевые слова: перовскит, LSNT, сегрегация, противофазные границы, теория функционала плотности.

Введение

В работе исследуется соединение на основе титаната стронция $La_{0.2}Sr_{0.7}Ni_{0.1}Ti_{0.9}O_{2.9}$ (LSNT). Данный материал используется для изготовления электродов для твердооксидных топливных элементов и интересен тем, что в нем наблюдается сегрегация частиц никеля из кристаллического массива к поверхности электрода и формирование каталитических кластеров [1]. В результате возрастает интенсивность химических реакций окисления в топливном элементе. Предполагается, что процесс сегрегации обусловлен наличием структурных дефектов перовскита (кислородные вакансии, дислокации, антифазные границы и др.), которые приводят к активной кластеризации примесных атомов никеля вблизи границ дефектов структуры. Особое внимание в работе уделено ядру дислокации, модель которого была предложена на основе экспериментальных данных электронной микроскопии (STEM) [2]. Целью работы является исследование сегрегации примесей никеля вблизи данных структурных дефектов в соединении LSNT.

Методы исследования

Процесс сегрегации рассматривается в направлении TiO-терминированной поверхности (001), TiO-терминированной антифазной границы и к дислокационному ядру, формирование которых наблюдается в эксперименте [2]. Для исследования проводятся расчеты полной энергии структур. Затем рассчитывается энергия сегрегации, которая определяется как:

$$E_{seg} = E_{Defect} - E_{Bulk},$$

где E_{Defect} – полная энергия системы с примесным атомом на границе дефекта, E_{Bulk} – полная энергия системы с примесным атомом в объеме. По величине энергии сегрегации можно судить о выгодности процесса. Расчет энергии системы в рамках теории функционала плотности проводится путем решения уравнений Кона–Шэма по формуле:

$$E_{полн} = \sum_i \varepsilon_i - \frac{1}{2} \int \frac{n(r)n(r')}{|r - r'|} dr' dr + E_{xc}[n] - \int v_{xc}(n)n(r)dr,$$

где ε_i – действительные собственные значения гамильтониана Кона – Шэма, $v_{xc}(r)$ – функциональная производная, E_{xc} – обменно-корреляционная энергия.

Для исследования сегрегации и кластеризации на ядре дислокации возникает необходимость использования большой модельной ячейки, что приводит к значительному увеличению времени расчетов в рамках теории функционала плотности. В связи с этим для ядра дислокации был применен метод классической молекулярной динамики. Были рассчитаны диффузионные пути примесных атомов при их сегрегации и кластеризации. Для этих целей использовался программный пакет LAMMPS [3] и потенциал, предложенный Pedone [4].

Выводы

Была проведена серия расчетов энергий структуры LSNT методами классической и первопринципной молекулярной динамики при различных конфигурациях примесей никеля. Полученные результаты свидетельствуют о том, что энергетически выгоден процесс сегрегации примесных атомов к поверхности, противофазной границе и ядру дислокации. Дополнительные расчеты с несколькими примесными атомами показывают, что также выгодна кластеризация примесей на границах дефектов. Кроме того, в ходе расчетов было установлено, что процесс сегрегации примесей тесно связан с перераспределением зарядов атомов вблизи дефектов структуры. Таким образом, обнаружена тенденция к сегрегации и кластеризации примесей никеля на границах дефектов исследуемой структуры. Полученные результаты согласуются с данными экспериментальных наблюдений.

Список использованных источников

1. Kim, K. J. et al. Facet-dependent in situ growth of nanoparticles in epitaxial thin films: the role of interfacial energy // J. Am. Chem. Soc. 141, 7509–7517, 2019.
2. Han H. et al., Anti-phase boundary accelerated exsolution of nanoparticles in non-stoichiometric perovskite thin films // Nat. Commun. 2022. V. 13. P. 6682.
3. URL: <https://lammps.org>
4. Pedone A. et al. A New Self-Consistent Empirical Interatomic Potential Model for Oxides, Silicates, and Silica-Based Glasses // J. Phys. Chem. B 2006, 110, 11780.

INVESTIGATION OF THE FORMATION OF NICKEL NANOPARTICLES NEAR THE BOUNDARIES OF DEFECTS IN THE STRUCTURE OF LSNT PEROVSKITE

A.F. Fattakhov, D.I. Bazhanov

Abstract. In this paper, we investigate the segregation of nickel impurities 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). Lattice defects such as TiO-terminated surface (001), TiO-terminated antiphase boundary and dislocation core are considered. Packages of classical and first-principle molecular dynamics are used to calculate the energies of structures. As a result, it was found that nickel impurities tend to segregate at the boundaries of structural defects. The results obtained are in agreement with experimental observations.

Keywords: perovskite, LSNT, segregation, antiphase boundaries, density functional theory.

УДК 536.1

<https://doi.org/10.29003/m3601.MMMSEC-2023/111-114>

НОВОЕ НАПРАВЛЕНИЕ ТЕПЛОФИЗИКИ – ТЕПЛОФИЗИКА НАНОСИСТЕМ

Хвесюк Владимир Иванович,

д.т.н., профессор,

khvesyuk@bmstu.ru

МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва

Аннотация. В работе представлены важные особенности развивающегося в настоящее время нового направления теплофизики, изучающего перенос тепла в пределах расстояний от нанометров до микрометров. Показано, что это требует развития принципиально новых методов анализа тепловых процессов, отсутствующих в рамках классической теплофизики.

Ключевые слова: статистическая физика, физика фононов, нанотеплофизика.

Теплофизика наносистем (нанотеплофизика) – направление теплофизики, изучающее термодинамические свойства и процессы переноса тепла: а) в твёрдых телах, характерные размеры которых порядка, меньше или существенно меньше, чем длины свободного пробега переносчиков тепла в макроскопических объектах соответствующих материалов l_{∞} , а также б) лучистый перенос тепла в микро- и нанозазорах и в) теплообмен в наножидкостях. Наножидкостями называются жидкости, в которых в виде взвесей содержатся твёрдые наночастицы.

Здесь всё внимание уделяется переносу тепла в твёрдых телах, размеры которых – от нано- до микрометров. Из определения новой теплофизики следует кардинальное её отличие от классиче-

ской макроскопической теплофизики: отношение длин свободного пробега l_{∞} к размеру тела L , то есть параметр Кнудсена $Kn = l_{\infty}/L$: классика $Kn \ll 1$ (диффузионный перенос тепла), нано от $Kn \geq 1$ до $Kn \gg 1$. Это приводит к тому, что в новом направлении теплофизики не выполняется закон Фурье $\mathbf{q} = -k\nabla T$ – основа для расчётов переноса тепла в твёрдых телах. Эту ситуацию часто называют «недиффузионная» или «не – Фурье теплопроводность» [1]. В расчётах переноса тепла в наноструктурах необходимо использовать статистическую и кинетическую теорию, адаптированную для описания наноструктур. Следствием этого является необходимость создания принципиально нового направления теплофизики, что в настоящее время и происходит. Ниже приведена систематизация причин, с которыми связана необходимость разработки новых подходов.

1. Неприменимость закона Фурье ставит под вопрос использование понятия «теплопроводность». В связи с этим используется термин «эффективная теплопроводность» [1]. Эта величина отличается от классической теплопроводности. Причина – в рамках нового направления длина свободного пробега переносчиков тепла зависит от размеров и формы твёрдых тел, а теплопроводность напрямую зависит от длины свободного пробега и направления теплового потока. Поэтому она оказывается анизотропной для монокристаллических образцов. В свою очередь, методы моделирования теплообмена зависят от этих факторов.

2. Классическая статистика не учитывает границы тел. Статистика наносистем, как правило, должна учитывать наличие границ тел, и их шероховатость [1,2]. Здесь два фактора. Во-первых, взаимодействия фононов с границами. Существует баллистический режим переноса тепла в тонких плёнках, когда учитываются взаимодействия фононов только с границами. Во-вторых, явление «quantum confinement». Размеры объектов порядка 10^{-9} м сравнимы с длинами волн переносчиков тепла. Это ведёт к тому, что функции распределения фононов (и электронов) существенно отличаются от равновесной. Это необходимо учитывать.

3. Необходимость моделирования процессов взаимодействия в фононном газе [2]. Для полупроводников и диэлектриков переносчиками тепла являются кванты упругих волн – фононы, безмассовые квазичастицы, аналоги фотонов, но, в отличие от них,

вступающие во взаимодействие друг с другом. Эти взаимодействия существенно отличаются от взаимодействий атомов в рамках классической статистики. Если атомы классических разреженных газов испытывают парные столкновения, то фононы взаимодействуют по три или четыре квазичастицы. Это означает существенное отличие функции распределения фононов от равновесной (Бозе). Второе – существует, по крайней мере, два разных типа фононов, которые надо учитывать в отдельности. Третье – фононы вступают, как в упругие, так и в неупругие взаимодействия. Наконец, необходимо учитывать взаимодействия фононов с примесями и дефектами решётки.

4. Отдельная и очень сложная проблема – определение свойств фононного газа [2]. Это – так называемые дисперсионные соотношения. Сложность связана с тем, что они определяются из анализа колебаний атомарных решёток. Здесь две задачи. Во-первых, взаимодействия атомов друг с другом. Атомы рассматриваются, как состоящие из ядра, окружённого электронной оболочкой плюс, отдельно, газ относительно свободных валентных электронов. В отличие от классики, где принимается, что между атомами действуют центральные силы, здесь взаимодействие значительно сложнее. В связи с этим была создана теория функционала плотности, разработчик которой, Вальтер Кон, получил нобелевскую премию. Во-вторых, из-за необходимости учёта формы атомарной решётки, задача решается для большого числа атомов одновременно. Также необходим учёт анизотропии атомарных решёток.

5. Многообразие объектов, отсутствующих в классической теплофизике, для каждого из которых требуется разработка индивидуальных подходов к описанию и методик расчета. Например, наличие контактной поверхности между двумя телами – задача об определении проводимости Капицы. Эта проблема решается с 1952 года И.М. Халатниковым и др., но только в последнее время начинает принимать завершающие формы [3]. Другой пример – перенос тепла в сверхрешётках, состоящих из тонких слоёв разных материалов. Эта задача интересна тем, что для неё существуют когерентный и некогерентный режимы переноса тепла [3]. Обратим внимание, что когерентный режим был предсказан в 1956 году С.В. Рытовым.

Ещё один пример – перенос тепла в графеновых нанолентах. Это полупроводники, типичные представители наноструктур, обладающие уникальными свойствами – необыкновенно высокими

значениями подвижности электронов, за что А. Гейм, К. Новосёлов получили нобелевскую премию, а также высокой теплопроводностью. Особенность переноса тепла в графеновых нанолентах заключается в том, что к двум различным фононам, характерным для макроскопических тел, добавляется третья квазичастица другой природы, обеспечивающая высокую теплопроводность.

В заключение отметим, что главная задача, которая стоит при создании наноэлектроники – эффективное удаление тепла из электронных цепей. В связи с этим важное значение имеет разработка принципиально новых теплоносителей. К ним относятся теплоносители с управляемыми значениями температур фазовых переходов. Такие системы позволяют обеспечить сброс очень больших тепловых потоков.

Список использованных источников

1. Khvesyuk V.I., Skryabin A.S. High Temp. 2017. Vol. 55. № 3. P. 428–450
2. Barinov A.A., et al. Phys. Atom. Nucl., 2020. Vol. 83. Issue. 10, pp. 1538–1548.
3. Liu B. et al. Nano Res. 2022. Vol. 15, pp. 9492–9497.

NEW FIELD OF THERMOPHYSICS – THERMOPHYSICS OF NANOSYSTEMS

V.I. Khvesyuk

Abstract. The paper presents important features of new direction of thermophysics, studying heat transfer within distances from nanometers to micrometers. It is shown that this direction requires the development of principal new methods of thermal processes analysis.

Keywords: statistical physics, physics of phonon, thermophysics of nanosystems.

РАСЧЕТ ТЕПЛОЕМКОСТИ ДВУМЕРНОГО ГРАФЕНА С УЧЕТОМ ПОЛНЫХ ДИСПЕРСИОННЫХ СООТНОШЕНИЙ

Хвесьюк Владимир Иванович,

д.т.н., профессор,

khvesyuk@bmstu.ru

Лю Шисян,

аспирант,

sxliu98@gmail.com

Инь Фэй,

магистрант,

yinfei0426@outlook.com

МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва

Аннотация. В работе предложен эффективный метод расчета теплоемкости двумерного графена. В основе – определение полных дисперсионных соотношений фононов с использованием модели силовых постоянных. Результаты расчета показали хорошее согласие с экспериментальными данными.

Ключевые слова: динамика решетки, графен, дисперсионные соотношения, плотность состояний, теплоёмкость.

Введение

Графен, помимо замечательных электронных свойств, является одним из материалов с самыми высокими зарегистрированными значениями теплопроводности [1]. Высокая теплопроводность делает графен перспективным кандидатом для терморегулирования в нанoeлектронных схемах.

В данной работе мы использовали модель силовых констант четвертого ближайшего соседа (4NNFC) [1] и недавно предложенную модель силовых констант пятого ближайшего соседа (5NNFC), чтобы получить полное соотношение дисперсии фононов вдоль главных кристаллографических направлений. Далее проводим расчет плотности фононных состояний с помощью статистических методов. И в заключение определяется теплоемкость графена с помощью классического распределения Бозе–

Эйнштейна. Надежность модели проверена путем сравнения с экспериментальными данными.

Математическая модель

Согласно законам динамики решетки в гармоническом приближении уравнение движения атома имеет вид:

$$M\ddot{\mathbf{u}}_n = -\sum_m \Phi(\mathbf{R}_n, \mathbf{R}_m) \cdot \mathbf{u}_m \quad (1)$$

где M – масса составляющего атома, $\Phi(\mathbf{R}_n, \mathbf{R}_m)$ – тензор силовых постоянных 3×3 , связывающий атомы n и m .

Благодаря периодичности решетки можно искать решение типа Блоховских волн:

$$\mathbf{u}_n^q(t) = \mathbf{A} \exp[i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R} - \omega t)] \quad (2)$$

где $\mathbf{A}$ – амплитуда моды, ω – частота, $\mathbf{q}$ – волновой вектор. Подставив уравнение (2) в уравнение (1), мы получаем:

$$D(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{A} = \omega^2 \mathbf{A} \quad (3)$$

где $D(\mathbf{q})$ – динамическая матрица. Для упрощения задачи рассматриваются только взаимодействия четырех ближайших атомов (4NNFC) и пяти ближайших атомов (5NNFC). Полученные дисперсионные кривые показаны на рисунке 1.

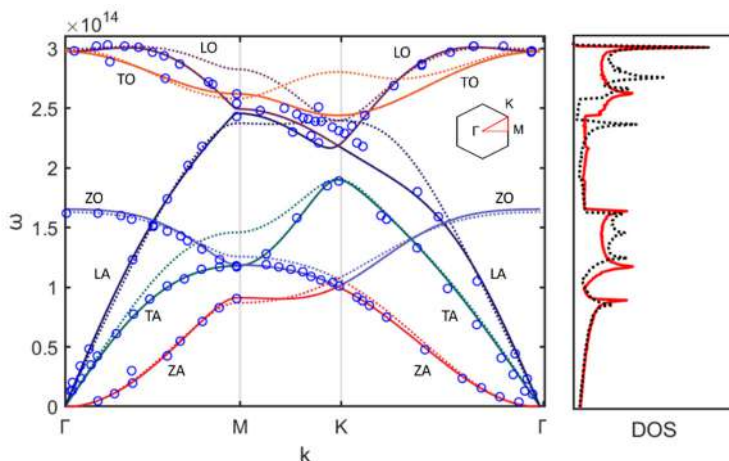


Рис. 1. Полные дисперсионные кривые графена:
Пунктирная линия – модель 4NNFC [1], сплошная линия – 5NNFC,
кружки – эксперимент [2]

С помощью статистической обработки дисперсионных соотношений (3) рассчитывается плотность состояний, DOS, см. рис. 1. Затем определяется теплоемкость графена путем «суммирования» возможных состояний фононов согласно выражению:

$$C_v(T) = \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\partial \bar{n}(\omega, T)}{\partial T} \cdot \hbar \omega \cdot \text{DOS}(\omega) d\omega \quad (4)$$

где $\bar{n}$ – равновесное распределение Бозе-Эйнштейна. На рис. 2 представлен расчет теплоемкости графена (4) в диапазоне температур от 0 до 2000 К. Видно, что обе модели, 4NNFC и 5NNFC, показывают хорошее согласие с экспериментальными данными [3].

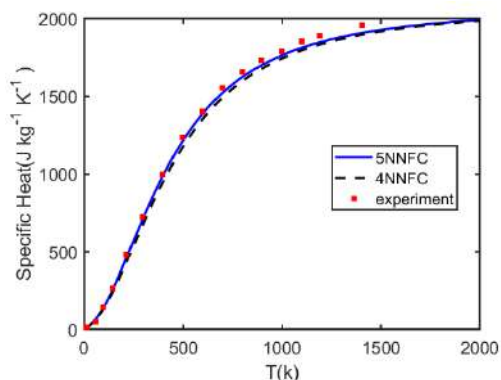


Рис. 2
Теплоемкость графена
в зависимости
от температуры:
Пунктирная линия – расчет
по модели 4NNFC [1],
сплошная линия – 5NNFC,
точки – эксперимент [3]

Выводы

Разработана математическая модель для расчета теплоемкости графена с использованием полных дисперсионных соотношений, полученных на основе модели силовых констант 4-х и 5-ти ближайших соседей. Результаты расчета хорошо согласуются с экспериментальными данными, поэтому предложенная модель может быть рекомендована для определения теплоемкости графена в диапазоне температур от 0 до 2000 К..

Список использованных источников

1. Saito R. et al. Physical properties of carbon nanotubes. Repr. London: Imperial College Press, 2012. 259 p.
2. Mohr M. et al. Phonon dispersion of graphite by inelastic x-ray scattering // Phys. Rev. B. 2007. Vol. 76, № 3. P. 035439.

3. Mann S. et al. Thermodynamic properties of pure and doped (B, N) graphene // RSC Adv. 2016. Vol. 6, № 15. P. 12158–12168.

CALCULATION OF HEAT CAPACITY OF TWO-DIMENSIONAL GRAPHENE CONSIDERING THE FULL DISPERSION RELATION

V.I. Khvesyuk, S. Liu, F. Yin

Abstract. In this work, an effective method for calculating the heat capacity of two-dimensional graphene is proposed. It is based on the full dispersion relations of phonons prepared using the force constant model. The results showed good agreement with the experimental data.

Key words: lattice dynamics, graphene, dispersion relation, density of states, heat capacity.

4. D

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

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПРИБОРОВ С УЧЕТОМ ДЕФЕКТОВ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ

Гайнуллин Иван Камилевич,

д.ф.-м.н., доцент,

Ivan.Gainullin@physics.msu.ru

1 Физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, г. Москва

Аннотация. Целью работ являлась оригинальная реализация и апробация современных численных методов исследования электрофизических характеристик полупроводниковых приборов. Был разработан программный код для моделирования функционирования полупроводниковых приборов с помощью диффузионно-дрейфовой модели (размеры >90 нм) и баллистического электронного транспорта в нанотранзисторах (размеры ~ 10 нм) с учетом дефектов атомной структуры.

Ключевые слова: полупроводниковые приборы, моделирование, диффузионно-дрейфовая модель, метод конечных элементов, баллистический транспорт.

Введение

Микроэлектронная отрасль является одной из определяющих в формировании технологического суверенитета РФ. Компьютерное моделирование является важной составляющей развития микроэлектроники, т.к. за счет уменьшения количества пробных итераций на эмпирический подбор оптимальных параметров и конфигураций, позволяет на 30% сократить затраты на разработку новых полупроводниковых приборов и интегральных схем (электронно-компонентной базы – ЭКБ) и отработку технологических процессов изготовления ЭКБ. Базовые физические принципы моделирования ЭКБ известны достаточно хорошо, они реализованы в известных программных продуктах. Однако, в текущих условиях, доступ отечественных предприятий к их использованию существенно ограничен. Это обуславливает актуальность создания отечественных решений для моделирования ЭКБ.

Моделирование функционирования отдельного транзистора с помощью диффузионно-дрейфовой модели

Для моделирования характеристик отдельного транзистора был разработан оригинальный программный код решения уравнений диффузионно-дрейфовой модели [1] методом конечных элементов [2]. Была проведена качественная верификация разработанного программного кода на примере полевого транзистора, геометрическая структура которого показана на рис. 1. Из рисунка видно, что при нулевом напряжении на затворе, канал между истоком и стоком закрыт, а ток практически отсутствует. При увеличении напряжения на затворе увеличивается концентрация носителей заряда между истоком и стоком, т.е. канал открывается, что приводит к росту тока.

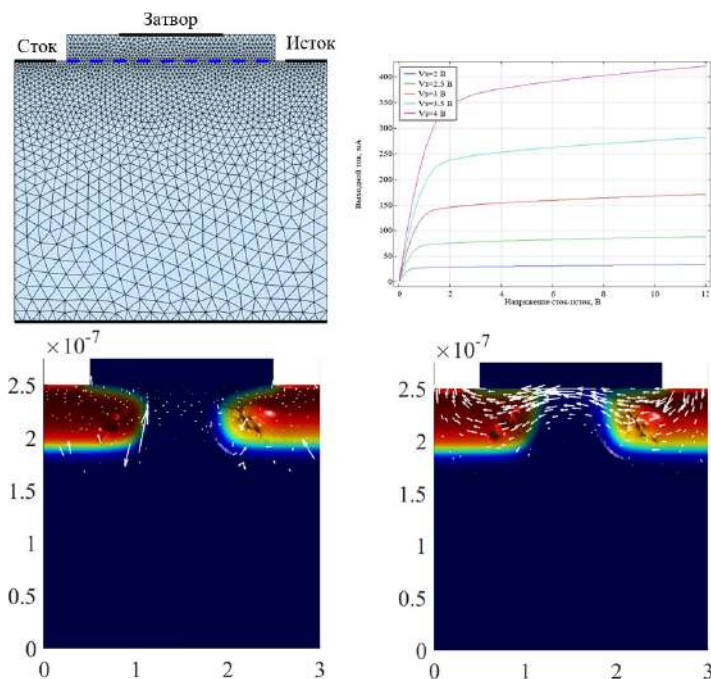


Рис. 1. Сверху – геометрическая модель, включая сетку разбиения на конечные элементы, и выходные ВАХ модельного полевого транзистора. Снизу – распределение электронной плотности и электронного тока для моделируемого транзистора в закрытом (слева) и открытом (справа) состояниях

Моделирование ВАХ полевого нанотранзистора с учетом атомных дефектов его кристаллической структуры

При топологических размерах транзистора порядка десятков нанометров значимую роль начинают играть квантовые эффекты. Электронный транспорт в этом случае имеет баллистический характер и моделируется методом неравновесных функций Грина [3]. Докладчиком был разработан программный код, позволяющий учитывать атомную структуру полупроводника. Проводящий кристалл Si описывается псевдопотенциалом, полученным с помощью теории функционала плотности. Было проведено две серии расчетов. В первом случае расчеты проводились для кристалла кремния с идеальной структурой, а во втором в середине канала искусственным образом была удалена часть атомов кремния. Расчет показал, что ВАХ нанотранзистора с идеальной и дефектной кристаллической структурой существенно отличаются друг от друга. Даже удаление относительно небольшого числа атомов ведет к существенной деградации ВАХ. Это объясняется тем, что при удалении атомов полностью или частично блокируются некоторые каналы проводимости.

Выводы

Для моделирования функционирования отдельных полупроводниковых приборов с топологическими размерами 90 нм и выше разработан оригинальный трехмерный программный код решения уравнений диффузионно-дрейфовой модели методом конечных элементов. Для создания перспективных устройств с топологическими размерами десятки нанометров актуально моделировать баллистический электронный транспорт. Для этого разработан оригинальный программный код, реализующий трехмерную методику расчета баллистического электронного транспорта с учетом атомной структуры на основе метода неравновесных функций Грина.

Список использованных источников

1. Scharfetter D. L., Gummel D. L. Large signal analysis of a silicon Read diode oscillator // IEEE Transaction on Electron Devices. 1969. Vol. ED-16, P. 64.
2. Bortolossi A. 3D finite element drift diffusion simulation of semiconductor devices: диссертация, 2014.
3. Datta S. Quantum transport: atom to transistor. Cambridge University Press, 2005.

SIMULATION OF SEMICONDUCTOR DEVICES FUNCTIONING TAKING INTO ACCOUNT DEFECTS IN ATOMIC STRUCTURE

I.K. Gainullin

Abstract. The purpose of the work was the original implementation and testing of modern numerical methods for studying the electrophysical characteristics of semiconductor devices. A software code was developed for simulating the operation of semiconductor devices using a diffusion-drift model (dimensions >90 nm) and of ballistic electron transport in nanotransistors (dimensions ~ 10 nm), taking into account defects in the atomic structure.

Key words: TCAD, semiconductor devices, drift-diffusion model, finite element method, ballistic transport.

УДК 537.9:004.94

<https://doi.org/10.29003/m3604.MMMSEC-2023/123-126>

ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ДЫРОЧНЫХ СОСТОЯНИЙ В ТОНКОМ СЛОЕ ИНТЕРФЕЙСА Si/Ge/Si

Гончаров Алексей Васильевич,

к.т.н., научный сотрудник¹,

008809@pnu.edu.ru

Чибисов Андрей Николаевич,

д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник^{1,2}

¹ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет»,
г. Хабаровск

²ФГБУН Вычислительный центр Дальневосточного отделения
Российской академии наук, г. Хабаровск

Аннотация. посредством ab-initio расчетов произведено моделирование структуры интерфейса Si/Ge/Si типа hut-wire, установлено изменение пространственных и объемных характеристик германиевой структуры в составе интерфейса по сравнению с обособленной структурой объемного германия типа hut-wire. Изучена локализация дырочных состояний в обеих структурах при наличии 1 дырки.

Ключевые слова: ab-initio, теория функционала плотности, метод псевдопотенциала, германий, кремний, hut-wire.

Введение

Одной из актуальных задач в области развития науки и техники на сегодня является построение квантового компьютера. Ключевым

элементом квантового компьютера является кубит – вычислительный элемент могущий занимать состояние суперпозиции между положениями 0 и 1. На текущий момент наибольшее распространение в практике получили сверхпроводящие кубиты на базе кремния [1]. В качестве альтернативой технологии сверхпроводящим кубитам выступают спиновые кубиты на базе германия, благодаря сильному спин-орбитальному взаимодействию дырочных состояний [2]. Среди всех германиевых структур наибольший интерес представляют структуры типа *hut-wire*, за счет сочетания проявления квантовых размерных эффектов характерных как для двумерных наноструктур, так и для одномерных, что приводит к большей стабильности дырочных состояний [3].

Результаты расчетов и их анализ

Моделирование структур производилось с помощью программы *Vesta Crystallography* [4], релаксация структур с помощью *ab-initio* расчета производилась с помощью программного пакета *Quantum Espresso* [5]. При моделировании интерфейса Si/Ge в расчетах использовались неэмпирические сохраняющие норму псевдопотенциалы *Perdew-Zunger* (PZ) для кремния [6] и для германия [7], основанные на параметризации приближения локальной плотности. При релаксации атомных структур элементарных ячеек, интерфейса кремния и германия всем атомам предоставлялась полная свобода. Для интерфейса Si/Ge был взят набор $1 \times 4 \times 1$. Энергия обрезания плоских волн составляла 680 эВ. Значения межатомных сил, после структурной релаксации, не превышали 0,17 эВ/Å.

На рис. 1, а представлена ранее полученная структура отдельного слоя германия $P2/m$ направления (105) [8] и распределение разности зарядовой плотности в данной структуре при наличии одной дырки по сравнению со структурой где дырки отсутствуют, аналогично для полученного в данной работе интерфейса, представленного на рис.1, б. Желтым цветом обозначены состояния, соответствующие увеличению зарядовой плотности, бирюзовым цветом – состояния соответствующие уменьшению зарядовой плотности при образовании дырки в структуре.

Как видно из рисунка, для обеих структур характерно, при наличии в структуре дырки, перераспределение дырочных состояний с периодичностью $2a$ состояния. При этом для отдельного слоя германия (рис. 1, а), дырочные состояния перераспределяются из объема структуры к поверхности.

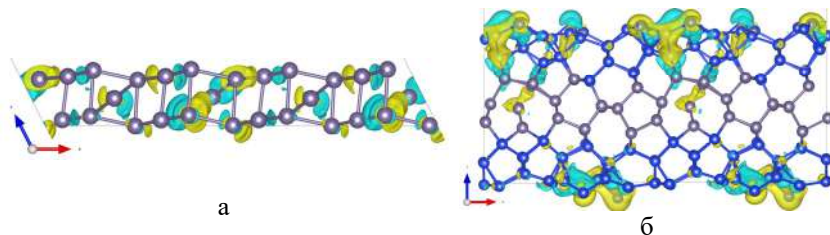


Рис. 1. Распределение разности зарядовой плотности в структурах: а) изначальная, релаксированная структура отдельного слоя германия P2/m с направлением (105); б) отрелаксированная структура кремний-германиевого интерфейса

В случае с кремний-германиевым интерфейсом (рис. 1, б) также наблюдается перераспределение дырочных состояний схожего характера. Также было установлено, что изменяется среднее межатомное расстояние вдоль оси *a*: для отдельного германиевого слоя конфигурации P2/m составляет 2,67 Å, для ячейки с германием внутри кремния P1 этот показатель составляет 3,38 Å. Среднее межатомное расстояние вдоль оси *b* для ячейки отдельного слоя германия конфигурации P1 составляет 4,34 Å, для структуры с германием внутри кремния – 3,94 Å.

Выводы

В работе выполнено *ab-initio* моделирование интерфейса Si/Ge/Si интерфейса и произведено сравнение объемных характеристик полученной модели с отдельным слоем Ge, установлено что вдоль направления *a* происходит удлинение на 26,3%, вдоль оси *b* происходит сжатие на 9%, также происходит реконфигурация дырочных состояний с периодом $2a$.

Работа выполнялась в рамках Государственного задания на выполнение НИР Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № 0818-2020-0005) с использованием ресурсов ЦКП «Центр обработки и хранения научных данных ДВО РАН».

Список использованных источников

1. Supercomputing Frontiers and Innovations, 2018. Modelling of Quantum Qubit Behaviour for Future Quantum Computers. 5(3).
2. Nano Lett. 2020, 20, 7, 5201–5206.
3. Scappucci, G., Kloeffer, C., Zwanenburg, F.A. et al. The germanium quantum information route. Nat Rev Mater 6, 926–943 (2021). <https://doi.org/10.1038/s41578-020-00262-z>

4. K. Momma and F. Izumi, "VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data," J. Appl. Crystallogr., 44, 1272-1276 (2011).
5. 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.
6. Von Barth, U. and Car, R., "Ground State Properties of Bulk Si as a Test of the Langreth–Perdew–Mehl Scheme for Exchange and Correlation," unpublished work, IBM (Thomas J. Watson Research Center, New York 1982
7. Gonze X., Stumpf R., Scheffer M. Analysis of separable potentials // Phys. Rev. B. – 1991. – V. 44, No 16. – P. 8503–8513
8. Chibisov, A.; Aleshin, M.; Chibisova, M. DFT Analysis of Hole Qubits Spin State in Germanium Thin Layer. Nanomaterials 2022, 12, 2244. <https://doi.org/10.3390/nano12132244>

THEORETICAL ANALYSIS OF HOLE STATES IN A THIN LAYER OF THE INTERFACE Si/Ge/Si

A.V. Goncharov, A.N. Chibisov

Abstract. The structure of Si/Ge/Si interface of hut-wire type is modeled by means of ab-initio calculations, the change of spatial and volume characteristics of germanium structure as a part of the interface in comparison with the isolated structure of bulk germanium of hut-wire type is established. Localization of hole states in both structures in the presence of 1 hole has been studied.

Keywords: ab-initio, density functional theory, pseudopotential method, germanium, silicon, hut-wire.

УДК 004.3:004.9

<https://doi.org/10.29003/m3605.MMMSEC-2023/126-129>

МИНИМИЗАЦИЯ КОНЦЕНТРАЦИИ СТД В CdTe

Кобелева Светлана Петровна,

к.ф.-м.н., доцент, kob@misis.ru

Зуев Алексей Сергеевич,

аспирант, as.zuev2@yandex.ru,

Стрельцов Никита Алексеевич,

студент, streltsov.nikita@gmail.com

НИТУ МИСИС, г.Москва

Аннотация. В работе рассчитаны концентрации СТД в пределах области гомогенности при температуре 900 К. В расчетах учитывали нейтральный антиструктурные дефекты Te_{Cd} и Cd_{Te} , что позволило по-

лучить хорошее соответствие с экспериментальными данными зависимости отклонения от стехиометрии от парциального давления кадмия в паровой фазе. Показано, что конгруэнтно испаряющийся состав имеет минимальные концентрации СТД и свободных носителей заряда, что делает их предпочтительными для создания детекторов ионизирующих излучений на основе CdTe.

Ключевые слова: CdTe, область гомогенности, собственные точечные дефекты, отклонение от стехиометрии.

Введение

CdTe является одним из самых востребованных соединений группы широкозонных полупроводников A₂B₆. В первую очередь это материал для детекторов ионизирующих излучений [1]. Это связано с теоретической возможностью получения высокоомного материала, т. к. при ширине запрещенной зоны 1,5 эВ при комнатной температуре собственная концентрация электронов n_i порядка 10^6 см^{-3} и можно ожидать мегаомных величин удельного электросопротивления (УЭС). Однако это не получается в силу того, что собственные точечные дефекты в этих соединениях электрически активны. Так, монокристаллы, выращенные методом Бриджмена, имеют дырочный тип проводимости с концентрацией дырок p до 10^{17} см^{-3} и УЭС всего лишь единицы Ом см. Поэтому в массовом производстве в кристаллы при выращивании вносят компенсирующую примесь хлора, что и позволяет выращивать соединение с сопротивлением, достаточным для создания детекторов. Однако материалы, выращенные методом [2] без введения дополнительных примесей, имеют при комнатной температуре УЭС порядка 10^8 Ом см^{-3} [3]. Это связано тем, что такая технология синтеза и очистки позволяет получать конгруэнтно испаряющееся соединение (Рмин) при температурах 620–660 С, состав которых близок к соединению в области перехода от дырочной к электронной проводимости [5]. В каком то смысле проблему получения высокоомных монокристаллов можно считать решенной. Однако это составы с большой концентрацией СТД и хлора. Для детекторов важной характеристикой качества является также произведение подвижности μ на рекомбинационное время жизни τ . Оба параметра очень сильно зависят от концентрации ионов и глубоких рекомбинационных центров и они растут с уменьшением концентраций СТД. В работе анализируется общая концентрация дефектов

в пределах области гомогенности при температуре 900 К для определения параметров технологических процессов, которые позволят получить максимальные значения μ .

Расчеты концентраций СТД

Расчеты проводили в рамках метода квазихимических реакций. В [4] для объяснения расхождения на два порядка величин $n(p)$ и максимальных отклонений от стехиометрии δ введен нейтральный антиструктурный дефект, что позволяет согласовать новые литературные данные по зависимости δ от P_{Cd} на стороне избытка теллура, но на стороне избытка кадмия ни одна из известных моделей СТД не дала хорошего согласия с экспериментом [5]. Поэтому в данной работе мы учитываем антиструктурный дефект Cd_{Te} также и на стороне избытка кадмия. На основании известных данных о величинах максимальных равновесных парциальных давлений кадмия и δ рассчитана константа равновесия при 900 К, $K_{Cd_{Te}} = \frac{[Cd_{Te}]}{P_{Cd}^2} = 3,46 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3} \text{ Па}^{-2}$, концентрации СТД, δ и суммарная концентрация СТД в пределах области гомогенности. Введение кадмия на место теллура практически не изменяет концентрации СТД и взаимное расположение трех характерных составов внутри области гомогенности: конгруэнтно испаряющихся составов (состав $R_{мин}$), области собственной проводимости при температуре 900 К ($n=p=n_i$) и области минимального отклонения от стехиометрии (переход от избытка теллура к избытку кадмия), что связано с сильной зависимостью концентрации этого дефекта от P_{Cd} и нахождением характерных точек в области избытка теллура. Минимальная концентрация суммы дефектов 10^{16} см^{-3} лежит в области $\delta = (1-2) \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ в области избытка кадмия, но она слабо растет до $(2-3) \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ при переходе к составам $R_{мин}$, технологически предпочтительным. Составам $R_{мин}$ соответствует и на два порядка уменьшенное по сравнению со значением на избытке теллура, реализуемым при выращивании монокристаллов по методу Бриджмена.

Выводы

Проведенные в работе расчеты концентрации СТД в модели, учитывающей антиструктурные дефекты с обеих сторон области гомогенности $CdTe$, позволяют сделать вывод, что общая кон-

центрация дефектов в области технологически выгодных составов Рмин также находится в области минимума как и концентрация свободных носителей заряда, что позволяет сделать вывод о том, что кристаллы, выращенные из паровой фазы в условиях Рмин при температуре, близкой к 900 К, будут иметь наиболее подходящие параметры для создания на основе такого материала детекторов ионизирующих излучений.

Список использованных источников

1. Triboulet R., Siffert P. CdTe and Related Compounds // Elsevier Science BV, 2010.
2. Медведев С., Клевков Ю. Способ получения высокочистых кристаллических соединений и устройство для его осуществления А2В6, А2В5 и А4В6 // Патент РФ № 234014.20.12., 1999.
3. Bagaev V. et al. Compensation Effect in Undoped Polycrystalline CdTe Synthesized under Nonequilibrium Conditions // P S S, 2011, Vol. 53, no. 8, pp. 1554–1563.
4. Кобелева С. Влияние СТД на процессы испарения халькогенидов кадмия и цинка // дисс. канд. физ.-мат. наук, Москва, МИСиС, 1982.
5. Кобелева С. Структура собственных точечных дефектов в CdTe // Материалы IV конференции МММЭК202224–26 октября 2022 г., Москва, с. 135–137.

MINIMIZING CONCENTRATION OF NATIVE POINT DEFECTS IN CDTE

S.P. Kobeleva, A.S. Zuev, N.A. Streltsov

Abstract. In this work, the native point defects concentration was calculated within the homogeneity region at a temperature of 900 K. We took into account the neutral antistructural defects Te_{Cd} and Cd_{Te} . In this case, a good agreement with experimental data is achieved

Key words: CdTe, homogeneity region, native point defects, deviation from stoichiometry.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПРИМЕСНОГО СОСТАВА И СТЕХИОМЕТРИИ НА СТРУКТУРУ ПРОВОДЯЩЕГО ФИЛАМЕНТА МЕМРИСТОРА НА ОСНОВЕ ДИОКСИДА КРЕМНИЯ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

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

Гайнуллин Иван Камилевич,

к.ф.-м.н., доцент³, ivan.gainullin@physics.msu.ru

¹ ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород

² НИУ филиал РАНХиГС, Нижний Новгород

³ МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва

Аннотация. В работе выполнено молекулярно-динамическое моделирование процессов самоотжига филаментных структур в мемристорах на основе пленок α - SiO_2 разной стехиометрии, в том числе подвергнутых ионному облучению.

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

Введение

В последние годы исследование явления резистивного переключения в мемристорах на основе неорганических материалов перешло в фазу практического применения в изделиях микроэлектроники [1]. При этом для одного из основных материалов этой сферы, для которого существует хорошо апробированные технологии – аморфных плёнок SiO_2 – остаются нерешёнными многие вопросы о природе мемристивного переключения, причинах нестабильности и деградации мемристоров на этой основе. В частности, по одной из версий, основными агентами мемристивного эффекта в плёнках диоксида кремния являются вакансии кислорода и их дрейф из и в зону филамента [2], причём наиболее ярко этот

эффект проявляется для плёнок со стехиометрией $\text{SiO}_{1.7}$, а по другой – нанокластеры из междоузельных атомов кремния [3]. Также сообщалось о положительном влиянии на качество мемристора на основе сильно нестехиометрического оксида $\text{SiO}_{1.1}$ [4] и облучения ионами Si^+ и Xe^+ .

Явление мемристивного переключения может сопровождаться глубокой перестройкой атомной структуры аморфного оксида в области филамента, поскольку в проводящем состоянии локальная температура может достигать 1000°C . Поэтому этот процесс может быть назван самоотжигом оксида. Для выяснения эволюции структуры филамента в мемристоре на основе аморфного диоксида кремния было проведено моделирование указанного явления методом молекулярной динамики процессов для следующих вариантов:

- Отжиг после облучения ионами Si^+ с учётом создания при этом вакансий и междоузельных атомов; аналогично при облучении ионами Xe^+ .
- Отжиг сильно нестехиометрического аморфного $\text{SiO}_{1.1}$ с учётом дрейфа атомов кислорода из зоны (соответственно вакансий в зону) филамента.

Метод расчета

Моделирование проводилось на кластере аморфного оксида кремния размером $60 \times 60 \times 60 \text{ \AA}^3$ со структурой, соответствующей описанным выше вариантам. Для создания структуры, насыщенной атомами кремния и дефектами за счет облучения ионами Si^+ , использовались результаты расчета SRIM. Параметры облучения: для Si^+ – доза $1 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$, энергия 20 кэВ; для Xe^+ – доза 10^{13} см^{-2} , энергия 5 кэВ. Процессы атомной перестройки при самоотжиге моделировались методом молекулярной динамики с использованием пакета LAMMPS при температуре 1500 К с использованием потенциала Терсоф. Общее время расчета составляло ~ 100 нс. Проводилась оценка структурных характеристик моделируемого объёма 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-O_4 . В рамках исследований рассчитывались радиальные функции распределения (РФР), строились графики функций распределения углов между связями, что позволило сделать выводы о качественных изменениях структуры моделируемого кластера.

Результаты и обсуждение

Полученные результаты показали, что структура моделируемого участка филамента претерпевает существенные изменения. Облучение ионами кремния приводит к образованию достаточно больших (в наномасштабе) микрокластеров Si, приближающихся по структуре к кристаллическому кремнию, для которого $R_{\text{Si-Si}} = 2.34 \text{ \AA}$ и валентный угол $\sim 109^\circ$, чего не наблюдалось при облучении ионами Xe^+ и для $\text{SiO}_{1.1}$. При этом для $\text{SiO}_{1.1}$ наблюдается образование специфических порообразных дефектов, экранируемых атомами Si. Однако уход атомов кислорода из зоны филамента приводит к заметному росту кластеров из атомов кремния.

Результаты моделирования свидетельствуют о сложных процессах перестройки структуры филамента в ходе переключения из/в проводящее состояние за достаточно короткое время для исследуемого материала. При этом, как атомы Si, так и вакансии кислорода влияют на характеристики переключения. Также проведённый компьютерный эксперимент подтвердил возможность управления параметрами мемристора путем ионной имплантации примесных атомов.

Работа выполнена в рамках государственного задания (№ FSWR-2022-0009).

Список использованных источников

1. Mehonic A. et al. Memristors – From In-Memory Computing, Deep Learning Acceleration, and Spiking Neural Networks to the Future of Neuromorphic and Bio-Inspired Computing // Advanced Intelligent Systems, 2000085 (2020).
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. Omura Y.. Potential of Silicon Oxide Films for Low-Cost and High-Performance Resistive Switching Devices // ECS Transactions, 111 (1), 123 (2023).
4. Gismatulin A.A. et al. Electronic structure and charge transport mechanism in a forming-free SiOx – based memristor // Nanotechnology, 31, 505704 (2020).

STUDY OF THE EFFECT OF IMPURITY COMPOSITION AND STOICHIOMETRY ON THE STRUCTURE OF A CONDUCTING FILAMENT OF A SILICON DIOXIDE MEMRISTOR BY THE METHOD OF MOLECULAR DYNAMICS

*E.V. Okulich, V.I. Okulich, D.I. Tetelbaum, A.N. Mikhaylov,
I.K. Gainullin*

Abstract. In this work, molecular dynamics modeling of the processes of self-annealing of filament structures in memristors based on a-SiO₂ films of different stoichiometry and subjected to ion irradiation was performed.

Key words: SiO₂, ion implantation, memristor, imperfection, molecular dynamics, self-annealing, clustering, stochasticity.

УДК 548.55

<https://doi.org/10.29003/m3607.MMMSEC-2023/133-136>

СОПРЯЖЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЯ ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ И ТЕРМООБРАБОТКЕ БЕЗДИСЛОКАЦИОННОГО МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КРЕМНИЯ

Верезуб Наталия Анатольевна,

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

verezub@ipmnet.ru

Простомолотов Анатолий Иванович,

д.т.н., доцент, ведущий научный сотрудник¹,

aprosto@inbox.ru

¹*ИИПМех РАН, г. Москва*

Аннотация. Рассматривается комплекс вопросов, связанных с оптимизацией процесса выращивания монокристаллов кремния методом Чохральского и процесса быстрой высокотемпературной обработки (БТО) вырезаемых пластин из этих монокристаллов. Для оптимизации температурного поля в выращиваемом монокристалле в тепловом узле монтируются специальные конструкции теплового экрана. Тепловая оптимизация конструкции такого теплового узла осуществляется на основе интегрированной тепловой математической модели. Дефектообразование рассчитывается на основе диффузионно-рекомбинационного приближения для вакансий и межузельных атомов кремния. Для процесса БТО рассчитываются профили концентрации вакансий, плотности и размер вакансионных кластеров по толщине пластины.

Ключевые слова: рост кристалла, термообработка, дефекты, моделирование.

Введение

Для метода Чохральского вопросы влияния различных сборок теплового экрана на температурное поле в растущем монокристалле кремния являются актуальными. Этому посвящен ряд

патентов ведущих фирм-производителей монокристаллического кремния. Их важность особенно актуальна для выращивания бездислокационных монокристаллов кремния большого диаметра с контролируемой природой, размером и распределением первичных ростовых микродефектов. Для теплового узла отечественной установки Редмет-90М предложена специальная конструкция теплового экрана с его водяным охлаждением [1]. В данной работе рассмотрена тепловая оптимизация конструкции этого теплового узла на основе интегрированной математической модели с использованием комплекса программ Crystmo/Marc. При моделировании дефектообразования во время выращивания монокристалла и при БТО пластин кремния для расчета концентраций вакансий и межузельных атомов кремния применялась диффузионно-рекомбинационная модель, которая была дополнена расчетом образования вакансионных кластеров в соответствии с моделью.

Моделирование тепловых процессов

Фрагмент расчетной модели Редмет-90М с такого типа экранами приведен на рис. 1.

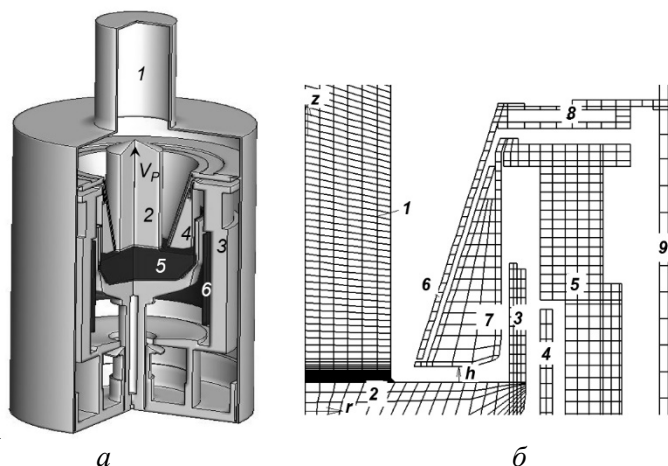


Рис. 1. Схема установки Редмет-90М (а):

1 – корпус; 2 – кристалл; 3 – боковой экран; 4 – околористалльный экран; 5 – расплав; 6 – нагреватель; фрагмент расчетной модели ТУ с околористалльным тепловым экраном (б): 1 – кристалл; 2 – расплав; 3 – тигель; 4 – нагреватель; 5 – боковой экран; 6 ÷ 8 – сборка околористалльного экрана; 9 – водоохлаждаемая стенка камеры; h – удаление экрана от поверхности расплава

Расчет основан на сопряжении глобальной радиационно-кондуктивной модели для всего объема теплового узла с трехмерной гидродинамической моделью для расплава в приближении Навье–Стокса–Буссинеска. В анализе конвективного движения расплава учитывается вынужденная конвекция от вращения кристалла и тигля и тепловая гравитационная конвекция, их параметрами являются гидродинамические критерии. Моделирование процессов дефектообразования

Дефектообразование рассчитывается на основе диффузионно-рекомбинационного приближения для вакансий и межузельных атомов кремния. Для процесса БТО рассчитываются профили концентрации вакансий, плотности и размер вакансионных кластеров по толщине пластины. Рассматриваемая задача касается анализа возможности получения бездефектного слоя в пластинах бездислокационного монокристаллического кремния при БТО. Предполагается возможность эффективного воздействия на профиль распределения плотности кислородных преципитатов по толщине путем управления аналогичными профилями распределения вакансий и межузельных атомов. Анализируются экспериментальные зависимости суммарной плотности дефектов по толщине пластины для образцов, подвергшихся БТО и последующим термообработкам, полученные разными методами и профиль плотности вакансионных кластеров, рассчитанный в данной работе. Установлено, что распределение расчетной плотности вакансионных кластеров достаточно хорошо соответствует экспериментальным данным в приповерхностном слое.

Выводы

Применительно к установке Редмет-90М показана эффективность влияния на тепловое поле и дефектообразование специальной сборки теплового экрана. Сделаны практически значимые оценки скорости вращения тигля и позиции теплового экрана. Результаты расчетов вакансионной кинетики и агломерации при БТО позволили выбрать оптимальный термический режим, обеспечивающий резкое снижение плотности вакансионных кластеров вблизи поверхности пластины, которые подтверждены экспериментальными данными.

Работа выполнена по теме госзадания ИПМех РАН (№ 123021700045-7).

Список использованных источников

1. Простомолотов А.И., Вереzub Н.А. Механика процессов получения кристаллических материалов. 2023. Изд. Дом НИТУ «МИСиС» Москва, 568 с.

CONJUGATED MODELING OF DEFECT FORMATION DURING GROWTH AND HEAT ANNEALING OF DISLOCATION-FREE SILICON SINGLE CRYSTALS

N.A. Vererzub, A.I. Prostomolotov

Abstract. The optimization of Czochralski silicon single crystal growth and the rapid thermal annealing (RTA) of cut wafers from these crystals are considered. Special thermal shields are mounted in hot zone for optimization of temperature field in growing single crystal. Thermal optimization of such hot zone is carried out on the basis of an integrated thermal mathematical model. Defect formation is calculated on basis of the diffusion-recombination approximation for vacancies and interstitial silicon atoms. The RTA profiles of vacancy concentrations, densities, sizes of vacancy clusters are calculated along wafer's thickness.

Key words: crystal growth, thermal annealing, defects, modeling.

УДК 537.9:004.94

<https://doi.org/10.29003/m3608.MMMSEC-2023/136-140>

УПОРЯДОЧЕННОЕ ПОВЕДЕНИЕ АТОМОВ ФОСФОРА НА ПОВЕРХНОСТИ СИЛИЦЕНА: DFT РАСЧЕТЫ

Прохоренко Анастасия Валерьевна,

научный сотрудник^{1,3},

aitrva@pni.edu.ru

Гниденко Антон Александрович,

к.ф.-м.н., научный сотрудник^{1,2},

Чибисов Андрей Николаевич,

д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник^{1,3},

Чибисова Мария Анатольевна,

к.ф.-м.н., научный сотрудник^{1,3}

¹Тихоокеанский государственный университет, г. Хабаровск

²ХФИЦ ФГБУН Институт материаловедения ДВО РАН, г. Хабаровск

³Вычислительный центр ДВО РАН, г. Хабаровск

Аннотация. В данной работе с помощью квантово-механических расчётов исследовано поведение атомов фосфора на поверхности дву-

мерного слоя кремния (силицена). Нами детально проанализировано изменение значений энергии связи в случаях адсорбции/замещения одного и двух атомов фосфора на поверхности силицена. Определены энергии активации диффузии в случае одиночной и двухатомной адсорбции.

Ключевые слова: теория функционала плотности, метод псевдопотенциала, силицен, фосфор, адсорбция.

Введение

В современной нанoeлектронике одной из важных задач является создание квантовых вычислителей. Схема проектирования таких вычислителей на основе твёрдотельной фазы кремния с внедрёнными атомами фосфора впервые была предложена Кейном [1]. Силицен может рассматриваться как основа для получения таких квантовых вычислителей так как обладает спин-орбитальным взаимодействием, которое позволяет наблюдать спиновый эффект Холла при не слишком низких температурах [2]. К его уникальным свойствам также относятся настройка таких свойств, как механически регулируемая запрещённая зона и металлическая фаза с долиннообразной поляризацией.

Результаты расчёта и их анализ

Квантово-механические вычисления производились с использованием пакета программ Quantum Espresso. При проведении расчётов учитывалось спин-орбитальное неколлинеарное взаимодействие. Энергия обрезания базиса плоских волн составила 476 эВ. Структуры рассчитывались с однородной сеткой k -точек $3 \times 3 \times 1$, построенной по схеме Монкхорста–Пэка.

Нами была исследована адсорбция одного и двух атомов фосфора на поверхности силицена. В случае одиночной адсорбции наиболее выгодным положением является тот случай, когда фосфор находится над верхним атомом кремния *Hill* (энергия связи составляет -3.84 эВ) (рис. 1a). При рассмотрении различных вариантов адсорбции двух атомов фосфора на силиценовой структуре, энергетически выгодным выступает конфигурация, где первый атом фосфора располагался над верхним атомом кремния *Hill*, второй – напротив над нижним *Valley* (энергия связи равна -4.23 эВ) (рис. 1b).

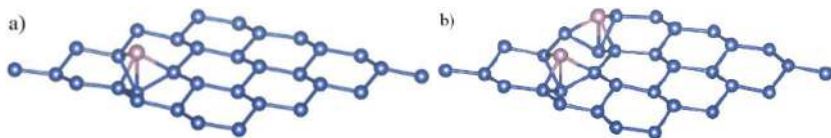


Рис. 1. Энергетически выгодные отрелаксированные конфигурации при адсорбции:
а) одного атома фосфора; б) двух атомов фосфора

Для исследования перемещения атома фосфора по поверхности силицена использовался метод Nudged Elastic Band (NEB). В первом случае рассматривалось перемещение одного атома фосфора из положения *Hill* через гексагональное кольцо в следующую позицию *Hill* (энергия активации составила 1.32 эВ), данный барьер соответствует переходу через положение близкое к *Hollow* (рис. 2а). Кроме этого, был рассмотрен путь, соединяющий два ближайших положения *Hill*, включающий промежуточную позицию *Valley* (энергия активации уменьшается до 0.90 эВ) (рис. 2б).

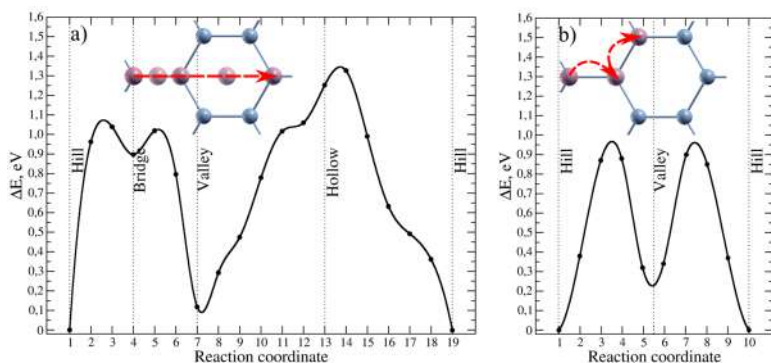


Рис. 2. Профиль энергии при движении атома фосфора по поверхности силицена:

- а) из *Hill* через гексагональное кольцо в следующую позицию *Hill*;
- б) из положения *Hill* в ближайшее *Hill*

Также была определена энергии активации диффузии второго адсорбированного атома фосфора. Был выполнен NEB расчет с двумя образами: начальная и конечная конфигурация (рис. 3а). Второй путь был получен при NEB расчете включающем, помимо начального и конечного, промежуточное положение – димер P2 (рис. 3б).

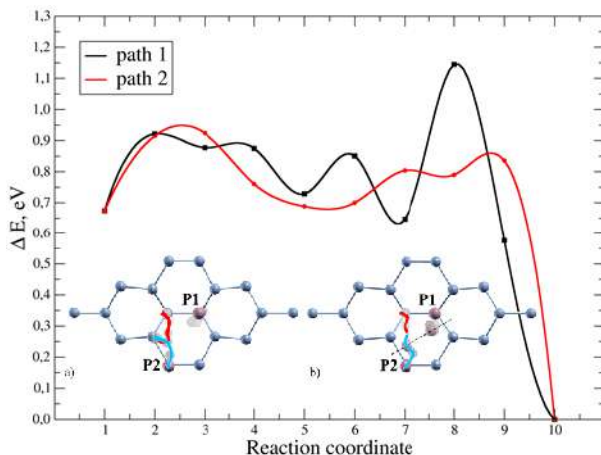


Рис. 3. Профиль энергии для двух путей:

- а) с формированием промежуточного состояния *Hill* над атомом Si;
- б) с сохранением димера P2 в большинстве промежуточных шагов

По профилям энергии (рис. 3) можно сделать вывод о приоритете второго варианта, при этом в большинстве промежуточных шагов сохраняется связь между атомами фосфора в димере P2, ее длина составляет 2.25 Å. Энергия активации диффузии в данном направлении составляет 0.47 эВ для первого пути и 0.25 эВ – для второго. Обратное направление движения имеет соответственно активационные барьеры 1.14 и 0.92 эВ, что сопоставимо с диффузией одиночного атома фосфора по короткому пути *Hill-Valley-Hill*.

Работа выполнялась в соответствии с Государственным заданием на выполнение НИР от Минобрнауки РФ (проект № 0818-2020-0005).

Список использованных источников

1. Kane, B.E. A silicon-based nuclear spin quantum computer // *Nature*, 1998. Vol. 393, p. 133.
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.

ORDERED BEHAVIOR OF PHOSPHORUS ATOMS ON THE SURFACE OF SILICENE: DFT CALCULATIONS

A.V. Prokhorenko, A.A. Gnidenko, A.N. Chibisov, M.A. Chibisova

Abstract. in this study, we employed quantum mechanical calculations to investigate the behavior of phosphorus atoms on the surface of a 2D silicon, known as silicene. We conducted a detailed analysis of the changes in binding energy for the adsorption or substitution of one or two phosphorus atoms on the silicene surface. Additionally, we determined the activation energies for diffusion in the cases of single and diatomic adsorption.

Key words: density functional theory, pseudopotential method, silicene, phosphorus, adsorption.

5. F

**МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУР
И СВОЙСТВ КОМПОЗИЦИОННЫХ
МАТЕРИАЛОВ С НАНОКРИСТАЛЛАМИ,
НАНОКЛАСТЕРАМИ, НАНОАМОРФНЫМИ
ВКЛЮЧЕНИЯМИ И Т.Д.**

РАЗЛИЧНЫЕ ПОДХОДЫ ПРИ АНАЛИЗЕ ДАННЫХ С РЕШЕТКИ АКУСТОЭЛЕКТРОННЫХ ДАТЧИКОВ

*Воронова Наталья Владимировна,
к.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник,
navoronova@niime.ru*

¹АО «НИИМЭ», г. Москва

Аннотация. работа посвящена представлению и сравнению различных подходов при анализе данных, полученных с акустоэлектронных датчиков, входящих в системы «электронный нос» и «электронный язык».

Ключевые слова: нейросетевой анализ, датчики жидкости и газов, акустоэлектронные волны, распознавание.

Введение

Измерение и оценка чувств, связанных с человеком, стали общепринятым методом сенсорных исследований, а также практического проектирования систем измерения и управления. Концепция «электронного носа» и «электронного языка» сегодня используется в качестве аналитического инструмента в промышленности, медицине, пищевой отрасли и в быту. Коммерциализация электронного носа началась в 1993 году, когда его концепция получила широкое признание в качестве эффективного инструмента для обнаружения и оценки запахов. «Электронный язык» и «электронный нос» состоят из набора сенсоров; системы подачи тестируемого вещества, которая переключает эталонный и испытуемый образцы; метод анализа сигналов; и презентационный блок.

В настоящей работе был применен метод нейросетевого анализа в качестве метода анализа сигналов, полученных с решетки акустоэлектронных датчиков. Проведено сравнение нейросетевого метода и ранее используемого метода, основанного на анализе полярных гистограмм.

В последнее время широкое распространение получают биологические сенсоры, основанные на различных принципах. Это означает, что искусственные сенсорные системы, связанные с человеком, могут стать повседневными инструментами для оценки нашего личного состояния и состояния окружающей среды.

Методы анализа выходных данных

В экспериментах использовались «электронный язык» и «электронный нос» основанные на акустоэлектронных принципах [1]. Схематическое изображение единичного акустоэлектронного сенсорного элемента (датчика) приведено на рис. 1. Совокупность подобных элементов общим числом в несколько десятков формирует активную часть «электронного языка». Требуемое отличие датчиков между собой обеспечивается распространением акустических волн по разным направлениям одной анизотропной пластины и отличием акустических мод в каждом направлении распространения друг от друга.

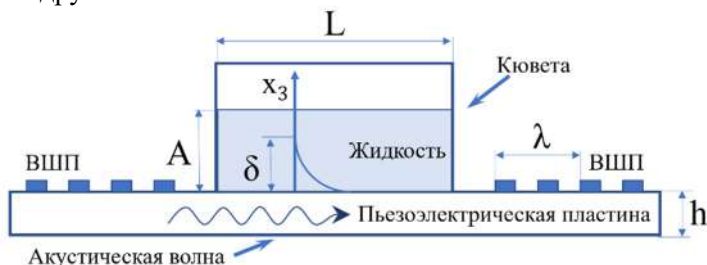


Рис. 1. Схематическое изображение единичного акустоэлектронного сенсорного элемента, содержащего пьезоэлектрическую пластину, встречно-штыревые преобразователи (ВШП), кювету для тестируемой жидкости: L – длина кюветы, δ – глубина проникновения волны в жидкость, A – высота жидкостного слоя, λ – длина волны, равная периоду ВШП

Выходные сигналы со всех датчиков подвергаются последующему анализу и классификация вкуса и запаха. Это происходит по алгоритму, представленному на рис. 2. Он включает в себя снятие сигнала с датчика, обработку измерений, извлечение параметров, определение класса запаха или вкуса и окончательную классификацию [2].

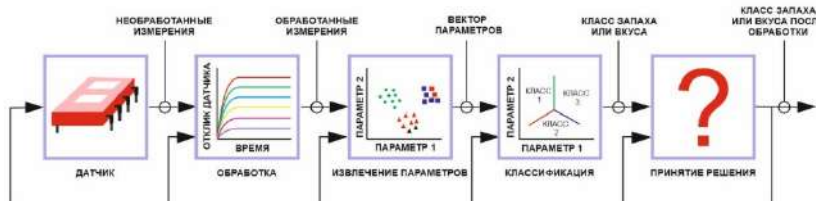


Рис. 2. Алгоритм определения класса запаха или вкуса с помощью нейросетевого анализа

В данной работе извлечение параметров выполняется с помощью линейных преобразований, таких как principal component analysis (PCA). PCA позволяет найти проекции с максимальной дисперсией и является наиболее распространенным методом линейного извлечения параметров. Суть расчетов сводится вычислению собственных векторов и собственных значений ковариационной матрицы исходных данных или к сингулярному разложению матрицы данных. Однако он не является оптимальным для классификации, поскольку не учитывает идентичность (метку класса метки) примеров в базе данных. PCA лучше работает с проекцией, содержащей высоковариационный случайный шум, в то время как linear discriminant analysis (LDA) лучше справляется с проекцией, содержащей тонкую, но, возможно, важную дискриминационную информацию. Поэтому LDA более подходит для целей классификации.

Для примера в качестве тестируемых использовались 5 жидкостей, отвечающих за 5 базовых вкусов – сладкий, соленый, кислый, горький и умами [3]. Ниже для примера представлены результаты обработки выходных сигналов датчиков на базовые вкусы, полученные с помощью полярных гистограмм (рис. 3) и с применением нейросетевой модели (рис. 4).

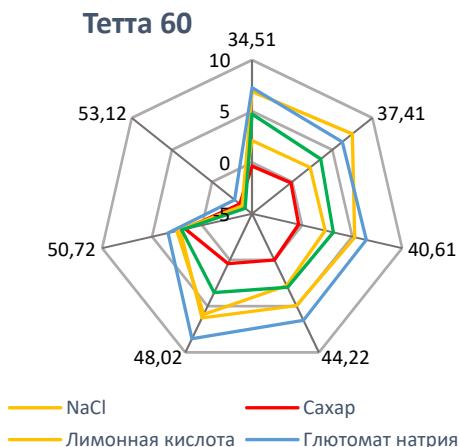


Рис. 3. Гистограмма акустических откликов ΔS_{12} водных растворов 5-ти базовых жидкостей с концентрацией 0.9%, измеренные в одном из направлений пластины $128^\circ\text{Y-LiNbO}_3$ с нормированной толщиной $h/\lambda = 2.5$ (h – толщина, λ – длина волны. По углу отложена частота акустической волны, распространяющейся в этом направлении в МГц, по радиусу – ее акустический отклик ΔS_{12}

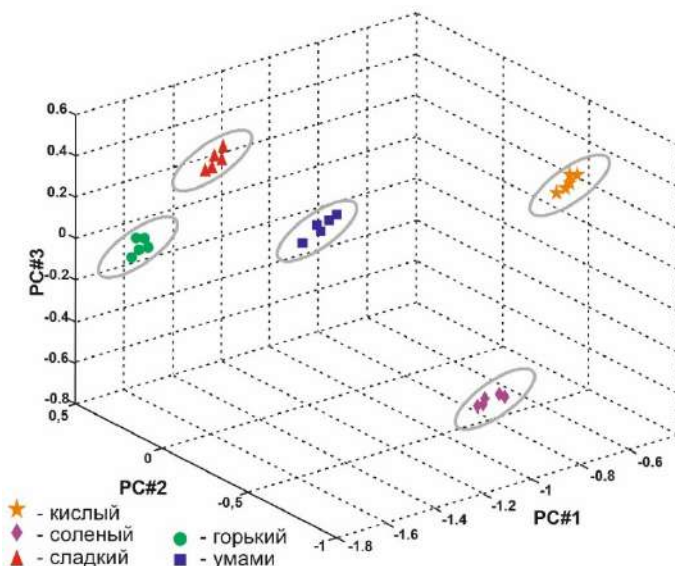


Рис. 4. 3D PCA анализ растворов 5-ти базовых жидкостей (кислый, соленый, сладкий, горький, умами) с концентрацией 0.9%

Выводы

Из рисунков 3 и 4 видно, что различные вкусы жидкости хорошо различимы между собой при одном и другом методе обработки данных, но в данном случае были специально взяты диаметрально противоположные вкусы. На полярной гистограмме рис.3, что фигуры идентичны, а отличаются лишь площадью и немного формой, именно по значению площадей и идентифицируют жидкость данным методом. На рис. 4 видим также хорошее отличие одного вкуса от другого. Поэтому целью дальнейших работ в этом направлении будет проведение моделирования линейного отклика нормальной акустоэлектронной волны, основанном на методе приближения и дальнейшая классификация жидких сред или запахов более близких по составу. Поскольку классификация предполагает своим условием наличие критериев [4], то и нашей следующей задачей также является поиск подходящих критериев.

Список использованных источников

1. Ballantine D.S., White R.M., Martin S.J., Ricco A.J., Zellers E.T., Frye G.C., Wohltjen H. Acoustic Wave Sensors. Academic Press: San Diego, USA. – 1997.

2. S.L. Jacesko, T. Ji, J.K. Abraham, V.K. Varadan, J.W. Gardner, design of a micro fluidic cell using microstereo lithography for electronic tongue applications, in: Proceedings of the SPIE, vol. 5055, 2003, pp. 147–153.

3. B.Holmes. Flavor. The science of our most neglected sense. Independent Publishers Since. W.W.Norton&Company, New York/London. Б.Холмс. Вкус., 346, 2022.

4. Красников Г.Я., Горнев Е.С., Матюшкин И.В. Общая теория технологии и микроэлектроника: часть 2. Вопросы метода и классификации. Электронная техника. Серия 3: Микроэлектроника. – 2017. – №. 3. – С. 16–41.

DIFFERENT APPROACHES FOR DATA ANALYSIS IN ACOUSTELECTRONIC SENSORS ARRAY

N.V. Voronova

Abstract. The work is devoted to the presentation and comparison of various approaches proving data analysis measured from acoustoelectronic sensors integrated with each other in “electronic nose” and “electronic tongue” systems.

Key words: neural network analysis, liquid and gas sensors, acoustoelectronic waves, recognition.

<https://doi.org/10.29003/m3610.MMMSEC-2023/146-150>

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОВОДИМОСТИ ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ ДИОДОВ ШОТТКИ НА GaAs

Зуев Сергей Александрович,

к.т.н., доцент¹,

sazuev@yandex.ru

Зуев Алексей Сергеевич,

аспирант²,

as.zuev2@yandex.ru

Кобелева Светлана Петровна,

к.ф.-м.н., доцент²,

kob@misis.ru

¹ ФГАОУ ВО «КФУ им. В.И. Вернадского»

² НИТУ «МИСИС», г. Москва

Аннотация. В работе проводилось исследование зависимости электрических характеристик тонкопленочных структур с барьером Шоттки на основе GaAs методами численного моделирования с использованием метода Монте-Карло в кинетическом приближении с учетом основных механизмов рассеяния.

Ключевые слова: барьер Шоттки, тонкопленочные структуры, распределение потенциала, тип рассеяния.

Введение

Особенный интерес в изучении омических контактов и барьеров Шоттки представляет исследование проводимости тонкопленочной диодной структуры с барьером Шоттки, поскольку поле барьера в области полупроводника распространяется на расстояния, сравнимые с толщиной пленок современных приборов.

Целью работы являлось изучение влияния геометрии контакта, уровней и профилей легирования на электрические характеристики структур с барьером Шоттки на основе GaAs методами компьютерного моделирования.

Методика моделирования

Классические методы моделирования не позволяют осуществлять исследование контактов в напряженных режимах работы. Для описания процессов, в том числе пробоя, в короткоканальных приборах необходимо исследовать специфику рассеяния и разогрева носителей заряда, возможность перехода транзистора в баллистический режим переноса зарядов, перенапряженные токовые и тепловые условия работы, что является актуальным для развития существующих моделей.

При моделировании короткоканальных приборов целесообразно использовать кинетическое приближение [1], в рамках которого процессы токопереноса в кристалле транзистора описываются с учетом рассеяний и сложной зонной структуры арсенида галлия. Для учета процессов теплопереноса используется система уравнений Больцмана и Пуассона, данная система дополняется уравнением теплопроводности, связанным через источники тепловыделения с уравнением Больцмана, которое описывает обмен энергией между газом свободных носителей заряда и кристаллической решеткой. При моделировании учитываются следующие механизмы рассеяния: на оптических и акустических фононах, на ионах примесей, на дислокациях и электрон-электронное.

Электроды определяют граничные условия. Процессы переноса носителей через контакт металл-полупроводник, включая барьер Шоттки, описываются методом макрочастиц в рамках модели и могут уточняться, используя ВАХ реальных контактов.

В результате моделирования находится общая ненормированная функция распределения носителей в активной области прибора $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$. Она позволяет определить все необходимые физические и схемотехнические параметры, такие как плотность электронов проводимости $n(\vec{r}, t)$, плотность токов $\vec{J}(\vec{r}, t)$, плотность $K(\vec{r}, t)$ и поток $\vec{Q}(\vec{r}, t)$ кинетической энергии [2]:

$$\begin{aligned} n(\vec{r}, t) &= \int d^3k \cdot f(\vec{k}, \vec{r}, t), \quad \vec{J}(\vec{r}, t) = e \int d^3k \cdot \vec{v} \cdot f(\vec{k}, \vec{r}, t), \\ K(\vec{r}, t) &= m/2 \cdot \int d^3k \cdot \vec{v}^2 \cdot f(\vec{k}, \vec{r}, t), \\ \vec{Q}(\vec{r}, t) &= m/2 \cdot \int d^3k \cdot \vec{v}^2 \cdot \vec{v} \cdot f(\vec{k}, \vec{r}, t). \end{aligned}$$

Для моделирования инжекции электронов из металла в полупроводник в рамках представленной модели рассчитывается количество и распределение по энергиям электронов в приконтактной области металла, способных за временной шаг модели пересечь границу материалов:

$$n(E) = n_0 \cdot S \cdot f(E) \cdot D(E) \cdot v(E) \cdot \Delta t, \quad N = \int_{E_C}^{\infty} n(E) dE.$$

где $f(E)$ – функция распределения Ферми-Дирака, $D(E)$ – коэффициент прохождения электрона через барьер на границе материалов, который определяется решением квантовомеханической задачи туннелирования электрона через П-образный потенциальный барьер [3]. При этом электроны металла должны попадать в зону проводимости полупроводника с $E > E_C$. N – количество инжектируемых электронов. В случае барьера Шоттки, $E_F < E_C$, поэтому ток инжекции электронов из металла в полупроводник пренебрежимо мал по сравнению с током электронов из полупроводника в металл.

Моделирование проводилось для планарной структуры со следующими параметрами: длина активной области 2 мкм, количество макрочастиц – 40 000; временной шаг dt 10^{-15} с, сетка 1024×256 , концентрации в областях n – 10^{22} м^{-3} и p^+ – $5 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}$, высота барьера Шоттки: -0,51 В, ширина активной области варьировалась в пределах от 0,1 до 2,0 мкм, а напряжение – в пределах от 0 до 2 В.

Результаты моделирования

В результате моделирования было построено семейство вольт-амперных характеристик (ВАХ) диода с различной толщиной активной области (1,5 мкм, 1 мкм, 0,5 мкм, 0,2 мкм и 0,05 мкм).

С уменьшением толщины активного слоя h , ВАХ смещается в сторону меньших токов. При этом напряжение активации диода U_a остается неизменным, равным приблизительно 0,4 В. Разность между величиной потенциального барьера $\varphi = 0,5$ В и U_a объясняется наличием средней кинетической энергией электронной плазмы, равной приблизительно 0,1 В.

Проводимость диода при $U \leq U_a$ практически равна нулю, барьер Шоттки закрыт. В некотором диапазоне напряжений $U_a < U < U_{cr}$ проводимость практически не зависит от напряжения – данный промежуток соответствует линейному участку ВАХ. Дальнейший рост напряжения сопровождается снижением проводимости. Это объясняется связью между проводимостью и подвижностью носителей заряда, при $U_{cr} \approx 1$ В электрическое поле достигает значения, достаточного для перехода электронов Г-долины GaAs в высшие энергетические долины, что приводит к уменьшению их подвижности.

При $h > l$ большим значениям напряжения соответствуют меньшие значения проводимости, а при $h < l$ картина противоположная. Это может быть объяснено тем, что толщины n-области недостаточно для экранирования поля, что приводит к «расплыванию» потенциала и проникновению поля в подложку. В результате падение напряжения в активной области уменьшается, что снижает вероятность перехода электронов Г-долины в высшие долины.

Для проверки этого предположения были изучены распределения потенциала под барьером Шоттки при различной толщине активной области. Если толщина пленки оказывается меньше глубины проникновения поля (порядка 0,27 мкм), поле вытесняется в подложку и барьер не работает в полной мере, что и сказывается на ВАХ.

Выводы

Проводимость полупроводниковой структуры с барьером Шоттки при малой толщине канала h зависит от h и U , с увеличением напряжения проводимость падает.

При $h < 0,27$ мкм поле барьера вытесняется в подложку и характер зависимости проводимости канала меняется – с увеличением напряжения проводимость растет.

Список литературы

1. Хокни Р., Иствуд Д., Численное моделирование методом частиц // М.: Мир, 1987. – 640 с.
2. Asanov E.E., Zuev S.A., Kilessa G.V., Despotuli A.L. and Andreeva A.V. Conductivity of planar GaAs Schottky diode with small thickness of the active region // IEEE 24th International Crimean Conference Microwave & Telecommunication Technology, 2014. pp. 139–140. DOI: 10.1109/CRMICO.2014.6959327.
3. Стриха В.И. Теоретические основы работы контакта металл-полупроводник // Наук. думка, 1974. – 263 с.

SIMULATION OF THE CONDUCTIVITY OF THIN-FILM SCHOTTKY DIODES ON GAAS

S.A. Zuev, A.S. Zuev, S.P. Kobeleva

Abstract. In this paper, the dependence of the electrical characteristics of thin-film structures with a Schottky barrier based on GaAs was studied by numerical simulation methods using the Monte Carlo method in the kinetic approximation, taking into account the main scattering mechanisms.

Keywords: Schottky barrier, thin-film structures, potential distribution, scattering type.

УДК 621.3.049.77

<https://doi.org/10.29003/m3611.MMMSEC-2023/150-152>

МОДЕЛИРОВАНИЕ ГАЗОВОЙ ДИНАМИКИ В РЕАКТОРЕ ИНДУКТИВНО-СВЯЗАННОЙ ПЛАЗМЫ ДЛЯ ПЛАСТИН ДИАМЕТРА 300 мм

Оксаниченко Фёдор Владимирович,

студент^{1, 2},

okssolothedor@gmail.com

Резванов Аскар Анварович,

начальник лаборатории^{1, 2},

arezvanov@niime.ru

Близнецов Владимир Николаевич,

ведущий инженер-технолог²,

twinsvb@gmail.com

¹Московский Физико-Технический институт (НИУ), Долгопрудный, Россия

²АО «НИИ молекулярной электроники», Зеленоград, Россия

Аннотация. В работе выполняется моделирование газовой динамики с использованием программы ComSol для реактора индуктивно-связанной плазмы работающего с пластинами диаметра 300 мм.

Ключевые слова: плазменный реактор, индуктивно-связанная плазма, математическое моделирование газовой динамики, COMSOL, газовая динамика.

Введение

В процессе производства интегральных схем (ИС) одной из ключевых операций является плазмохимическое травление, которое используется для переноса рисунка из фоторезиста в функциональные слои [1]. Сложность формы и малый размер элементов современных ИС приводит к необходимости использования технологии сухого плазменного травления для формирования анизотропного профиля [2]. На сегодняшний день для решения этой цели в нашей стране проектируются ряд реакторов, однако задача моделирования газовой динамики плазмы для предсказания результатов травления до сих пор остаётся открытой. В данной работе мы провели предварительную симуляцию газовых потоков для нового реактора индуктивно-связанной плазмы, изготавливаемого для обработки пластин диаметра 300 мм.

Моделирование газовой динамики

При технологических процессах травления используется низкотемпературная неравновесная плазма. В реакторе индуктивно-связанной плазмы с помощью магнитных полей происходит передача энергии рабочему газу, что приводит к его ионизации. В плазме происходит образование химически активных частиц (радикалов) в результате реакций электронного удара. Благодаря потоку рабочего газа данные частицы переносятся к области, где находится подложка, на которой происходит травление. Очень важными характеристиками данного процесса являются скорость травления и его равномерность по всей поверхности пластины. Симуляция данного процесса в математическом пакете COMSOL Multiphysics позволяет нам проанализировать зависимость данных величин от технических характеристик процесса, таких как расход газа; мощность, передаваемая плазме; давление в камере. Ещё одной немаловажной частью данной работы является изучение химического взаимодействия плазмы с элементами реактора: различные материалы могут существенно повлиять на скорость гетерогенных реакций, а значит на поток и состав, направляющегося

к подложке. На первом этапе необходимо провести расчет газовой динамики в реакторе в зависимости от его геометрии, системы подачи газов и откачки, температуры стола и стенок камеры, что выполнено в данной работе.

Выводы

В работе выполнено построение модели газовой динамики для реактора индуктивно-связанной плазмы, что в последствии поможет оптимизировать технологические процессы, реализуемые на данном типе реактора.

Список использованных источников

1. Красников Г.Я. Конструктивно-технологические особенности субмикронных МОП транзисторов. – Акционерное общество «Рекламно-издательский центр ТЕХНОСФЕРА», 2011. – С. 177.
2. Winters H.F. and J.W. Coburn, Surf. Sci. Rep. 14, 161 (1992).

SIMULATION OF GAS DYNAMICS IN AN INDUCTIVELY COUPLED PLASMA REACTOR FOR PLATES WITH A DIAMETER OF 300 mm

F.V. Oksanichenko, A.A. Rezvanov, V.N. Bliznetsov

Abstract. The paper describes the simulation of gas dynamics using the ComSol program for an inductively coupled plasma reactor operating with 300 mm substrates.

Key words: plasma reactor, inductively coupled plasma, mathematical modeling of gas dynamics, COMSOL, gas dynamics.

ПАРАМЕТРИЧЕСКИЕ И НЕПАРАМЕТРИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ В ЗАДАЧАХ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ПАРАМЕТРОВ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЁТКИ НЕОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Сенько Олег Валентинович,

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

Киселева Надежда Николаевна,

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

Докукин Александр Александрович,

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

Дударев Виктор Анатольевич,

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

Кузнецова Юлия Олеговна,

*инженер-исследователь¹,
jul1998@ya.ru*

Дмитриев Леонид Алексеевич

*студент³,
me@ldmitriev.ru*

¹ИМЕТ РАН, г. Москва

²ФИЦ ИУ РАН, г. Москва

³МГУ имени М.В. Ломоносова, г. Москва

Аннотация. В работе проводится сравнение различных линейных параметрических моделей и ансамблевых методов машинного обучения в задачах прогнозирования параметров кристаллической решётки неорганических соединений.

Ключевые слова: machine learning, inorganic materials for electronics.

Введение

Исследования, проводимые различными группами исследователей, включая также наши работы, убедительно показывают, что методы машинного обучения могут эффективно применяться при

прогнозировании как качественных, так и количественных свойств неорганических соединений. Неорганические соединения описываются с помощью совокупностей значений свойств химических элементов, входящих в их состав. Целью настоящего исследования является сравнение эффективности различных методов прогнозирования.

Методы машинного обучения

Для прогнозирования количественных свойств могут быть использованы линейные параметрические регрессионные модели. К их числу можно отнести стандартную множественную линейную регрессию, использующую метод наименьших квадратов (МНК). Однако стандартная линейная регрессия не может быть построена по данным, когда количество предполагаемых регрессоров сравнимо с количеством объектов в выборках, а также при существовании мультиколлинеарности. Указанные недостатки могут быть преодолены с помощью линейных моделей, использующих МНК в сочетании с регуляризацией по Тихонову. К таким моделям относится гребневая регрессия, модель лассо, а также являющаяся их комбинацией модель эластичной сети. Высокой эффективностью нередко обладают байесовские регрессионные модели, включая байесовскую гребневую линейную регрессию, и регрессия с автоматическим определением релевантности, позволяющие эффективно отбирать признаки.

Наряду с параметрическими линейными методами получили распространение также непараметрические методы машинного обучения, основанные на генерации ансамблей регрессионных деревьев. Наиболее известными из ансамблевых методов являются случайные регрессионные леса и различные реализации градиентного бустинга, включая XGBoost, LightGBM и др. Подробный обзор большинства перечисленных выше технологий можно найти в работе [1].

Нами была разработана модификация метода случайного регрессионного леса, в котором новые деревья добавляются в ансамбль последовательно, исходя одновременно из условия наилучшей аппроксимации связи прогнозируемой переменной с признаками на обучающей выборке и условия достижимости наибольшей дивергенции прогнозов [2], вычисляемых вошедшими в ансамбль деревьями. Такой ансамбль далее будем называть дивергентным регрессионным лесом.

Экспериментальные исследования

Тестирование программ было проведено на примере решения задачи прогнозирования параметра «а» кубической кристаллической решетки халькогенидных шпинелей состава $A^I B^{III} C^{IV} X_4$ (А, В, С – разные химические элементы; X – S или Se). Эти объекты были выбраны из-за уникального сочетания магнитных, оптических и полупроводниковых свойств, которое делает халькогенидные шпинели перспективными материалами для создания магнитооптических элементов памяти и сенсоров. Ранее мы уже пытались решить эту задачу [3] с использованием программ из пакета scikit-learn и одной из программ машинного обучения, разработанных нами ранее [2]. В настоящем исследовании было проведено уточнение результатов на основе применения разработанных нами новых алгоритмов.

В обучающую выборку были включены 34 примера уже полученных шпинелей состава $A^I B^{III} C^{IV} X_4$, для которых был экспериментально определен параметр кристаллической решетки. Признаком описание включало 11 свойств химических элементов А, В, С и X (размерные факторы (ковалентный радиус (по Бокию-Белову), псевдопотенциальный радиус (по Цангеру), ионный радиус (по Шеннону-Превитту), расстояния до внутренних и до валентных электронов (по Шуберту)), а также электроотрицательность (по Полингу), температуры плавления и кипения, энергии ионизации первого, второго и третьего электронов). Всего 44 признака. Выборка для прогнозирования содержала список из 28 халькошпинелей, которые были предсказаны нами с использованием методов машинного обучения [3]. Результаты экспериментов, проведённых с помощью процедуры кросс-валидации в режиме Leave One Out представлены в таблице.

Таблица 1

Результаты экспериментов

Метод	R ²	MAE
Гребневая регрессия	0.932	0.0510
Эластичная сеть	0.936	0.0492
Байесовская гребневая регрессия	0.929	0.0525
Регрессия с автоматическим определением релевантности	0.919	0.0549
Случайный регрессионный лес	0.895	0.059
Градиентный бустинг	0.897	0.055
Дивергентный регрессионный лес	0.909	0.057

Из таблицы видно насколько более высокая эффективность линейных методов, что связано с особенностями задачи.

Работа выполнялась по государственному заданию № 075-01176-23-00, 0063-2019-0003

Список использованных источников

1. Hastie T. et al. The Elements of Statistical Learning Data Mining, Inference, and Prediction. Springer Series in Statistics. N.Y.: Springer, 2009.
2. Senko O.V. et al. New Two-Level Ensemble Method and Its Application to Chemical Compounds Properties Prediction // Lobachevskii Journal of Mathematics, 2023. Vol. 44, no. 1, pp. 188–197.
3. Kiselyova N.N. et al. Predictions of chalcospinel with composition ABX_4 ($X - S$ or Se) // Inorganic Materials: Applied Research, 2021. Vol. 12, no. 2, pp. 328–336.

PARAMETRIC AND NON-PARAMETRIC MACHINE LEARNING METHODS IN TASKS OF PREDICTING THE PARAMETERS OF THE CRYSTAL LATTICE OF INORGANIC COMPOUNDS

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

Abstract. The work compares various linear parametric models and ensemble machine learning methods in problems of predicting crystal lattice parameters of inorganic compounds.

Key-words: machine learning, inorganic materials for electronics

6. G

ПРОБЛЕМЫ ОБЕСПЕЧЕНИЯ НАДЕЖНОСТИ ЭКБ МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ И СИСТЕМ НА ЕЕ ОСНОВЕ

ОБЕСПЕЧЕНИЕ НАДЕЖНОСТИ СОВРЕМЕННЫХ ИНТЕГРАЛЬНЫХ МИКРОСХЕМ. НАСУЩНЫЕ ПРОБЛЕМЫ

*Горнев Е.С.,
член-корреспондент РАН*

Цифровой мир невозможен без полупроводниковых приборов, а производство интегральных схем – базовая отрасль и исходный пункт формирования производственных цепей поставок электроники различных типов и назначения. Сколько бы мы не говорили о «высоких» технологиях и даже нанотехнологиях, но все современные достижения обязаны сейчас и будут обязаны и завтра, и после завтра микроэлектронике и ее технологиям. Микроэлектроника, а точнее элементная база, создаваемая ею, дает возможность просчитать, смоделировать устройство, машину, ситуацию, развитие болезней и, даже, события. В свою очередь, полупроводниковая промышленность, изготавливающая изделия микроэлектроники, в своем развитии опирается на поставщиков оборудования и материалов. Проблемы микроэлектроники имеют отношения ко всему, с чем Россия имеет дело. Для большинства людей полупроводниковые приборы – своего рода невидимки, в крайнем случае, «финтифлюшки», скрытые внутри интеллектуальных динамиков, смартфонов, оборудования центров обработки и хранения данных (ЦОД). Компании, занимающиеся информатикой, цифровизацией присвоили смысл термина «технологии» и большую часть заслуг в развитии цифрового мира. Но все меняется – и в центр внимания снова становятся полупроводниковые приборы.

Мы вступили в новую эпоху информационных технологий – эпоху искусственного интеллекта, ключ к которому – интегральные схемы и новые вычислительные архитектуры. Микроэлектроника, а точнее элементная база, создаваемая ею, дает возможность просчитать, смоделировать устройство, машину, ситуацию, развитие болезней и, даже, события. Возможности прогнозного моделирования или, если хотите, искусственного интеллекта, могут резко увеличить производительность и использовать новые, подобные природоподобные нейронные сети и архитектуры, базирующиеся именно на аппаратном, а не программном обеспечении [1].

В начальный период микроэлектроники разрабатывались одновременно микросхемы и соответствующие технологии. Каждая технология была оригинальной, что было связано с разработкой оригинальных конструкций микросхем и соответствующих технологических методов их реализации. Каждый коллектив разработчиков микросхемы создавал свою технологию, даже в пределах одной серии.

Изменения в технологии и технологической документации, в основном, были связаны с отказами микросхем, последующим анализом отказов и реализацией мероприятий по их устранению. Были изменения в технологии и по инициативе изобретателей и рационализаторов. Конечно, эти изменения проводились по результатам технологических проб с соответствующими испытаниями микросхем. Но говорить о стабильности технологических процессов уже не приходилось.

Определяющим фактором высокого выхода годных микросхем является постоянно надежно и стабильно функционирующее чистое производство с минимальными возможностями привнесения дефектов, наличие которого является необходимым условием промышленной технологии [2].

Критерий промышленной технологии – стабильность, воспроизводимость и определенность технологического процесса. Прецизионность и точность технологических операций соответствует технологическому уровню. В субмикронной технологии воспроизводимость играет определяющую роль [3, 4]. Так как «лобовые» методы получения минимальных размеров и снижения дефектности или исчерпали себя, или же слишком дороги. Повышение воспроизводимости становится всё более эффективным. По мере того как конструкции микросхем становятся все более разнородными, а область их применения расширяется, допустимость отклонений в рамках технологического процесса резко падает.

Процесс не существует сам по себе. Процесс начинается, когда определена цель, сформулированы конкретные требования, указаны временные ограничения, определены затраты и соответствующие ресурсы.

Параметры процесса могут испытывать колебания. Колебания могут быть двух типов: случайные, которые возникают спонтанно и не могут быть устранены, и неслучайные, которые возникают систематически в течение производственного процесса и могут быть

либо устранены, либо сведены к минимуму. Колебания процесса могут привести к изменениям параметров микросхем. Хотя, в пределах погрешности измерений всё может быть в порядке!

По мере усложнения микросхем, придётся учитывать колебания процесса и, соответственно, параметров ИС. Речь идёт об изменчивости процесса, параметров и границах её допустимости. В последние 5 лет этой проблеме стало уделяться много внимания в научных публикациях [5–7].

Причинами изменчивости параметров могут стать разброс параметров критических размеров и совмещения, неровность краев линий топологического изображения, особенности реализации литографического изображения зависимости от топологического рисунка при решении проблем оптической близости, колебания толщин функциональных слоев, оксида и нитрида кремния наряду с шероховатостью поверхности, разброс параметров ионного легирования, шероховатость обратной стороны пластины, влияние шероховатостей, возникших при химико-механической полировке и т.д. Изменчивость параметров может быть обусловлена заданными точностью режимов технологических процессов, точностью технологического и контрольно-измерительного оборудования, средствами, условиями окружающей среды. Более того, все эти факторы наслаиваются друг на друга. Действительно, один конкретный тип отклонений параметров процесса может и не повлиять на функциональность ИС, однако различные отклонения, накапливаясь по всем этапам процесса изготовления, вариантам использования или группам совместно работающих кристаллов ИС, оказывают воздействие на функционирование конечной системы в целом и могут оказаться неприемлемыми.

Проблема изменчивости параметров не ограничивается только производством, она существует по всей цепочке создания микросхемы – от проектирования, материалов, оборудования и производства до окончательного тестирования. Многие из проблем не новы – просто в условиях новых технологий с меньшими топологическими нормами они воспроизводятся на меньшей площади. И некоторые из них могут стать определяющими, тогда как в старых технологиях они игнорировались из-за их незначительного влияния.

Более жесткие допуски, новые области применения и варианты использования увеличивают изменчивость параметров по всей цепочке поставок. То, что раньше было почти исключительно

производственной проблемой, становится проблемой проектирования как ИС, так и конечных электронных систем, а также изготовления этих систем.

Каждое проектное решение создаёт экономический результат, реализуемый фабрикой, на рынке или там и там. Это необходимо для достижения экономического результата проектного решения – повышения производительности и выгоды, легко различимых в процессе создания проектного решения. Проблема заключается в экономических последствиях проектных решений связанных с производительностью продукта и организационной выгодностью, разработка продукта должна поступиться функциональностью продукта и выполняемыми требованиями по отношению к своевременности выхода на рынок и возможностями по производственной производительности. Отсюда обеспечивается детальный технический обмен между производством и разработкой продукта, и неотъемлемой является сильная проектная методология, которая суммирует анализ альтернатив между различными факторами.

Во многих отраслях промышленности применяется проектирование с учётом производственных возможностей, потому что от 70 до 90 процентов общей стоимости продукта определяется до проекта, всегда выделенного в производстве. Для не полупроводниковой промышленности эта практика учит, что граница раздела между проектированием и производством чрезвычайно комплексна, что точные стоимостные модели должны быть возможными для каждой проектной итерации.

Новые источники изменчивости параметров процесса начинают появляться даже без масштабирования – например, при использовании подхода, копирующего работу мозга, т.е. нейроморфного подхода. В случае аналогового подхода можно обеспечить большую энергоэффективность, но для этого необходимо либо устранить изменчивость параметров, либо минимизировать ее. При этом решение проблемы вариаций в одной области может привести к неожиданным результатам по изменчивости параметров в другой. С точки зрения производительности наибольшей проблемой могут стать перекрестные изменения параметров, приводящие к переходу прибора на критический путь, т.е. наиболее длинный путь прохождения сигналов через электронную схему, что обычно вызывает их наибольшие задержки. Для минимизации задержек подключаемость транзисторов можно менять, но при

этом нужно обеспечивать необходимые допуски. Нейроморфные приборы часто представлены интегральными схемами искусственного интеллекта, и здесь перекрестная изменчивость параметров может стать одной из основных проблем, особенно с учетом больших размеров подобных ИС – около 600–700 мм².

Управление производственными достижениями касается каждого аспекта операций полупроводникового производства. Каждый инструмент, каждый исходный материал, каждые внешние условия, каждое течение процесса и каждая маршрутно-технологическая карта должны быть тщательно изучены с точки зрения интенсификации или взаимного влияния, которые могут ограничить производительность, длительность цикла или выход годных на пластине.

Таким образом, организация управления заключается в организации управления обменом информацией между внешней средой, объектом управления и системой управления.

Ключевым в управлении становится понимание того, как информационные данные применяются к конкретному этапу производства, который может включать в себя одну из нескольких сотен операций, и как они влияют на другие операции. Такого рода данные в настоящее время представляют собой скорее желание, чем реальность, – по ряду причин. Прежде всего, необходимо получать данные с новых приборов, которые находятся на первых этапах эксплуатации.

В будущем задача будет заключаться в понимании данных, поступающих от работающих приборов, особенно от различных типов устройств, внутрикристального мониторинга сигналов и данных в широком диапазоне различных случаев применения, а затем в циклическом возврате этих данных по всей цепочке поставок. Все эти данные должны быть сокращены и понятны в контексте того, как они используются [6].

Нужно иметь возможность выявления ошибок по мере их возникновения, а не в конце технологического процесса, т.е. речь идет о более слаженной работе членов группы проектировщиков и осуществления одновременных проверок по значительно большему числу аспектов проекта. Для производительности на уровне продукта худшие показатели имеют значение, так как по ним определяются окончательные спецификации – даже если номинально большая часть кристаллов демонстрирует лучшие параметры.

То есть речь идет о повышении предсказуемости, что обеспечивает возможность дальнейшего масштабирования. На начальных этапах обработки хорошо себя проявляют программы моделирования с ориентацией на ИС (SPICE) и TCAD, но снижение изменчивости параметров должно достигаться за счет лучшей предсказуемости, что вполне реально. Любая ошибка прогнозирования воздействует на изменчивость параметров. Но часть из них может быть исправлена, а непредсказуемые ошибки остаются с конкретной технологией в течение всего ее жизненного цикла. Поэтому уменьшение ошибочности прогнозирования очень ценно.

Именно этот момент благоприятен для начала использования искусственного интеллекта (ИИ) – он способен быстро идентифицировать комбинации (модели) данных, которые могут быть обучены для конкретных целей.

Цель использования ИИ в производственном полупроводниковом оборудовании – обеспечение улучшенной обработки миллиардов бит данных. Инструментальные средства, оснащенные датчиками и актюаторами, собирают данные и реагируют на них – в большинстве систем это происходит автоматически. Растущие возможности ИИ в конечном счете позволят использовать подход, основанный на сформированных выводах, когда полученные данные используются для обучения и формулирования выводов, благодаря чему настройки инструментального средства будут корректироваться на основе области выявленных данных. Все это обеспечивает хорошую наглядность модели.

Инструментальные средства генерируют данные о своей работе и процессе изо дня в день, собирая значимые входные и выходные данные. Поэтому на самом деле нет необходимости понимать динамику перехода от входа к выходу, так как данные добавляются в механизм обучения. В перспективе информация может использоваться в режиме прямой связи для контроля толщины или фазового состояния материала или, при необходимости, для формирования команды на прекращение работы инструментального средства. Такой подход позволяет контролировать не только инструментальное средство, но и качество, а также разброс параметров на пластине.

Кроме того, появляется возможность настройки процессов под требования потребителя, например для изготовления малых партий ИС или специализированных изделий. Надо отметить, что

стандартные математические методы обеспечивают недостаточный уровень оптимизации планирования. Для использования больших объемов генерируемых данных в будущем потребуются планирование, основанное на глубоком стимулированном обучении. Методики глубокого стимулированного обучения создаются на основе уже существующих методик стимулированного обучения (часто используемого в биологии) и сетей (схем) глубокого обучения. При этом методики стимулированного обучения трансформируются под специфические потребности полупроводниковой промышленности.

Рынок микросхем будет становиться все более и более сфокусированным на производстве малого числа заказных проектов. Эти проекты будут фокусировать на рынок специализированные функциональные назначения микросхем, которые не могут быть удовлетворены.

Существует проблема, связанная с применением большого количества разрозненных аппаратно-программных платформ, используемых разработчиками аппаратуры и, соответственно, в определенной мере реализуемая разработчиками микросхем. Так, при анализе элементной базы, применяемой разработчиками РЭА, проведенном Фондом УНИЭТ, обнаружилось, что отечественные аппаратурные предприятия хотели бы использовать практически все созданные за рубежом микропроцессоры или процессоры обработки сигналов. При этом предусматривается воспроизводство зарубежных аналогов по большинству типов ЭКБ ИП с целью обеспечения независимости от зарубежных стран-поставщиков.

Создать аппаратную платформу недостаточно, нужно адаптировать ее к существующей среде, сделать максимально эффективной и комфортной. Распараллеливание проектирования и развитие вычислительных систем в сторону многоточности и многоядерности ставят на повестку дня объединение центров проектирования или по предметному признаку (однотипность микросхем) или на основе одного приборно-технологического базиса (ПТБ), заложенного в основу проекта ИС. Объединение центров (не административное) не только увеличит их мощность пределах отдельно взятого центра, но дает возможность объединения систем проектирования в кластеры и дальнейшую автоматизацию процесса проектирования с повышением его производительности

в пределах кластера. Кроме того, объединение группы центров создает возможности использования пакета ПО с единой лицензией, возможность работать с приложениями на любом сетевом оборудовании, возможность использования оптимизированных и распараллеленных библиотек (в т.ч. математических функций) и возможность создания единых специализированных в пределах кластера тестов для верификации.

В составе такого кластера должен быть центр моделирования процессов и технологий с прикладным и ориентированным на определенную группу микросхем и определенный ПТБ моделированием транзисторов и элементов ИС, интегрирование компонентов ИС, процессов (литографии, формирования структуры), библиотеки топологических элементов под конкретный ПТБ, тепловой анализ, анализ механических напряжений и т.д., вплоть до миграции дефектов в физической структуре микросхемы.

Это моделирование должно в себя включать не только создание алгоритмов работы ИС, но и расчет физических возможностей реализации поставленных задач исходя из конкретного ПТБ.

Полупроводниковая промышленность определила, что технический диалог между проектированием и производственной организацией необходим для минимизации типажности продукта. Тем не менее, экономическое влияние проектных решений на продуктовую производительность и выгодность не выявляется в процессе создания проектных решений. Полупроводниковая промышленность требует более сильного фокусирования на проектирование с учетом возможностей производства.

Всеобъемлющие программы проектирования объективно ограничиваются возможностями производства. Поэтому вызывает вопросы создание разветвленной сети центров проектирования, которые должны сотрудничать со всеми производителями микросхем, которых не много, и между собой по принципу кооперации. И это должно быть одной из основ реализации государственной стратегии развития микроэлектроники.

От центров проектирования аппаратных предприятий не следует ожидать эффективности в проектировании микросхем. К сожалению, системные фирмы не владеют современными технологиями проектирования с использованием программируемых платформ (System-on-chip) на основе IP блоков, что резко уменьшает их возможности активно влиять и снижает уровень разра-

батываемых систем. К тому же, применение импортных IP блоков (даже из «дружественных» государств) дают уязвимость и создают реальную угрозу работоспособности микросхем.

Ключевое – понимание того, как данные применяются к конкретному срезу производства, который может включать в себя один этап многоэтапной операции, и как он влияет на другие этапы. Такого рода межинструментальные, межпроцессные данные в настоящее время представляют собой скорее намеченное направление, чем реальность. В контексте кристалла ИС данных может оказаться слишком много. Основным фактором резкого сокращения их объема станут дешевые средства интеллектуального управления и фильтрации. Если речь пойдет о терабайтах или петабайтах данных, интеллектуальная локальная фильтрация необходима для превращения стяжек данных в ценные интеллектуальные сигналы. Это положение столь же верно для производственного оборудования, как и для кристаллов ИС. Вполне возможно собрать каждый бит данных, исходящий с каждого инструментального средства, а затем интегрировать эту информацию с возможностями встроенных в производственную линию средств метрологии, систематизации контроля дефектов, электрического тестирования. Благодаря этому можно осуществлять полностью функциональное тестирование. Один из серьезных вопросов на сегодня – охват области сбора данных. Зачастую неизвестно, в чем состоят и где возникают проблемы, поэтому требуется большее число выборок и больший объем данных. И здесь есть ряд проблем. Главная из них – проблема больших данных, а именно – получение на их основе структуры и формата, которые можно использовать. Поскольку специалисты имеют дело с огромным количеством данных из большого числа источников с разными форматами, проблема должна решаться в контексте других больших объемов данных, а это, в свою очередь, отнюдь не тривиальная задача.

Литература

1. Manocha, Ajit. The Rebirth of the Semiconductor Industry. SEMI Blog, July 30, 2018: <http://blog.semi.org/technology-trends/the-rebirth-of-the-semiconductor-industry>
2. Горнев Е.С. Обеспечение надежности современных интегральных микросхем. Часть 1: Принципы обеспечения качества и надёжности в промышленной технологии производства ИС, «Электронная техника. Серия 3. Микроэлектроника», вып.3 (179), 2020, сс. 52–68.

3. Горнев Е.С. Промышленная технология микроэлектроники, «Электронная техника. Серия 3. Микроэлектроника», вып.2 (174), 2019, сс. 42–53.
4. Красников Г.Я., Е.С. Горнев, И.В. Матюшкин. Общая теория технологий и микроэлектроника, Техносфера, М, 2020, 434 с.
5. Sperling Ed. Variation Issues Grow Wider And Deeper. Semiconductor Engineering, January 24, 2019: <https://semiengineering.com/variation-issues-grow-wider-and-deeper/>
6. Sperling Ed. Deeper Understanding of Equipment Behavior and Market Needs Will Have Broad Impact Across the Semiconductor Supply Chain. Semiconductor Engineering, February 21, 2019: <https://semiengineering.com/using-sensor-data-to-improve-chip-manufacturing-and-yield/>
7. Sperling Ed. Controlling IC Manufacturing Processes for Yield. Semiconductor Engineering, April 24, 2019: <https://semiengineering.com/controlling-ic-manufacturing-processes-to-boost-yield/>

УДК 621.382:004.052.2

<https://doi.org/10.29003/m3614.MMMSEC-2023/167-170>

СБООУСТОЙЧИВЫЕ САМОСИНХРОННЫЕ СЧЕТЧИКИ

Зацаринный Александр Алексеевич,

д.т.н., г.н.с.¹,

AZatsarinny@ipiran.ru

Степченков Юрий Афанасьевич,

к.т.н., руководитель отдела¹,

YStepchenkov@ipiran.ru

Дьяченко Юрий Георгиевич,

к.т.н., с.н.с.¹,

diaura@mai.ru

Хилько Дмитрий Владимирович,

с.н.с.¹, DKhilko@ipiran.ru

Орлов Георгий Александрович,

м.н.с.¹, orlov.jaja@gmail.com

Дьяченко Денис Юрьевич,

инж.-исследователь¹,

diaden87@gmail.com

¹ФИЦ ИУ РАН, г. Москва

Аннотация. Статья исследует проблему создания сбоеустойчивых самосинхронных (СС) счетчиков. Комбинационные СС-схемы имеют более высокую сбоеустойчивость в сравнении с синхронными аналогами благодаря избыточному кодированию информации и обязательному подтверждению завершения всех инициированных переключений элементов

схемы. Последовательностные СС-схемы, в том числе и счетчики, более чувствительны к сбоям из-за наличия ячеек памяти, состояние которых может измениться под влиянием сбоя и запомниться. Для их сбоеустойчивой реализации используются специальные схемотехнические методы: DICE и Quatro. Статья предлагает варианты СС-счетчика DICE- и Quatro-типа, сравнивает их характеристики и дает рекомендации по реализации сбоеустойчивых СС-счетчиков.

Ключевые слова: самосинхронные схемы, логический сбой, двоичный счетчик, сбоеустойчивость, бифазный сигнал, индикация, DICE, Quatro.

Введение

На современном уровне развития техники требование защищенности от логических сбоев и отказов становится одним из приоритетных. Практика показывает, что логические сбои проявляются на несколько порядков чаще, чем отказы. Поэтому проблема устойчивости цифровых схем к сбоям является наиболее важной и актуальной.

Физический механизм появления сбоя заключается в индуцировании избыточного заряда в теле полупроводника или в сигнальной цепи, вызывающего инверсию логического уровня соответствующей цепи [1]. В схемах с памятью, к числу которых относятся и счетчики, сбой может привести к инверсии хранимого бита информации.

Самосинхронные (СС) цифровые схемы обладают более высокой естественной устойчивостью к логическим сбоям [2–3], чем их синхронные аналоги. Они детектируют большинство логических сбоев, приостанавливая в этом случае свое функционирование. Счетчики составляют многочисленный класс цифровых арифметических устройств. Поэтому разработка методов, делающих СС-счетчики нечувствительными к логическим сбоям, является актуальной задачей. Данная статья посвящена исследованию возможностей и способов построения сбоеустойчивых СС-счетчиков.

Схемотехника самосинхронных счетчиков

Типовая схема одного разряда двоичного СС-счетчика на двух бистабильных ячейках (БЯ) показана на рисунке. Каждая БЯ представляет собой RS-триггер на двух логических элементах. Здесь Т – счетный вход; С – вход СС-сброса; Р – вход СС-установки;

выходов с помощью конвертора дублированных сигналов в унарный сигнал на базе С-элемента Маллера.

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 // Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Сборник тезисов. – Москва: МАКС Пресс, 2021. С. 154–156. <https://doi.org/10.29003/m2498.MMMSEC-2021/154-156>.

FAULT-TOLERANT SELT-TIMED COUNTERS

*A.A. Zatsarinny, Yu.A. Stepchenkov, Yu.G. Diachenko,
D.V. Khilko, G.A. Orlov, D.Y. Diachenko*

Abstract. The article studies the fault-tolerant self-timed (ST) counter design problem. Combinational ST circuits have a higher fault tolerance in comparison with synchronous counterparts due to redundant information coding and mandatory acknowledging of the completion of all initiated circuit cells' switches. Sequential ST circuits, including counters, are more sensitive to failures due to the presence of memory cells, the state of which can change under the influence of a failure and be remembered. For their fault-tolerant implementation, special circuitry methods, namely DICE and Quatro, are used. These approaches significantly reduces the likelihood of a change in the counter bit's state due to a failure. The article proposes DICE-type and Quatro-type ST counter cases, compares their features and gives recommendations for the fault-tolerant ST counter implementation.

Keywords: self-timed circuits, soft error, binary counter, fault tolerance, bi-phase signal, DICE, Quatro.

Научное издание
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
в материаловедении электронных компонентов
МММЭК–2023
23–25 октября 2023 г., Москва
Материалы V 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 20.10.2023 г.
Формат 60х90 1/16. Усл. печ. л. 10,75.
Тираж 300 (1–10) экз. Изд. № 159.

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