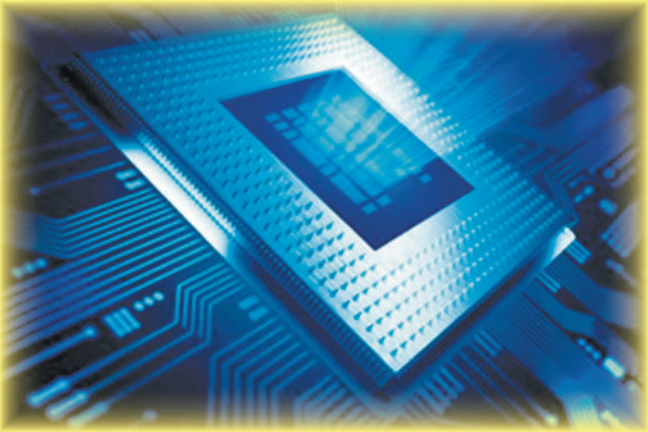
# МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

## в материаловедении электронных компонентов

# ММЭК-2025

Материалы VII Международной конференции



20–22 октября 2025г. г.Москва Россия

ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР Информатика и Управление РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

МГУ ВМК

НИИМЭ НИИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ

ПЕРСПЕКТИВНЫЕ МАТЕРИАЛЫ И ЭЛЕМЕНТНАЯ БАЗА ИНФОРМАЦИОННЫХ И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ

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–2025

Материалы VII международной конференции

*20–22 октября 2025 г., Москва*

# MATHEMATICAL MODELING
## in materials science of electronic components
## ICM3SEC–2025

Proceedings of the international conference

*October 20–22, 2025 Moscow, Russia*

МАКС ПРЕСС

МОСКВА – 2025

УДК 519.6.517.958.533.6
ББК 22.2.2218
М34

https://elibrary.ru/sacyio

Ответственный редактор:

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

М34 **Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов**. МММЭК–2025. 20–22 октября 2025 г., Москва : Материалы VII Международной конференции. – Москва : МАКС Пресс, 2025. – 182 с. : ил.

ISBN 978-5-317-07463-0

https://doi.org/10.29003/m4760.MMMSEC-2025

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

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

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

УДК 519.6.517.958.533.6
ББК 22.2.2218

**Mathematical modeling in materials science of electronic component.** ICM3SEC–2025. October 20–22, 2025, Moscow : Proceedings of the international conference. – Moscow : MAKS Press, 2025. – 182 p.

ISBN 978-5-317-07463-0

https://doi.org/10.29003/m4760.MMMSEC-2025

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 изображения получены из открытых источников.*

ISBN 978-5-317-07463-0

© Авторы, 2025
© Оформление. ООО «МАКС Пресс», 2025

# 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**

*Денисов С.А.* Об одном подходе к оценке производительности высокопроизводительных вычислительных комплексов в задачах материаловедения ..... 8

*Денисов С.А.* Подходы к оценке загруженности высокопроизводительных вычислительных комплексов на примере ЦКП «Информатика» ..... 12

*Денисов С.А., Зацаринный А.А., Кондрашев В.А.* Система критериев оценки политик обслуживания заданий в высокопроизводительном вычислительном комплексе ..... 18

*Зацаринный А.А., Абгарян К.К.* О задачах и методах математического моделирования для решения задач синтеза новых материалов в условиях современных вызовов ..... 23

*Абгарян К.К., Гаврилов Е.С., Колбин И.С., Кулешов И.А., Мочалова Ю.Д.* Пользовательский интерфейс системы автоматизированного проектирования ЭКБ для создания ячеек энергонезависимой памяти на основе технологий ReRAM, FeRAM, MRAM (ПО «CoBA») .... 32

*Левенец М.Е., Чибисов А.Н.* Ускорение поиска энергитически стабильной кристаллической структуры с помощью машинного обучения на примере обёмных и монослойных кремния, оксида цинка и оксида алюминия ..... 37

*Сеченых П.А.* Семантические аспекты и проблематика анализа предметно-ориентированного контента из множественных источников ..... 40

**2. В. Квантовые технологии. Проблемы квантового моделирования ..... 45**

*Голышев И.К., Богданова Н.А., Шарапов А.А., Богданов Ю.И.* Моделирование томографии оптических квантовых состояний с использованием алгоритма максимального правдоподобия ..... 46

*Кулешов И.А., Бажанов Д.И.* Применение сверточных архитектур в моделировании нейросетевых квантовых состояний для задач оптимизации ..... 48

*Савельев В.В., Хазанова С.В.* Численное исследование влияния неоднородностей на оптические характеристики муарового графена ... 51

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

*Абгарян К.К.* Интеграционные подходы для решения задач вычислительного материаловедения ... 56

*Горохов С.А., Резник А.А., Резванов А.А.* Моделирование диффузии примеси меди в гексагональном рутении из первых принципов ... 62

*Дун Иминь, Лю Шисян, Хвесюк В.И.* Обзор и перспективы исследований теплоёмкости наноструктур ... 66

*Захаров Ю.А., Ефремов А.М.* Моделирование влияния управляющих параметров на пространственное распределение плазмы в реакторе плазмохимического травления ... 69

*Зубов Д.Н., Яковлев В.Б.* Моделирование влияния локальной геометрии слоя резиста на процессы рассеяния электронного луча ... 71

*Инь Фэй, Лю Шисян, Хвесюк В.И.* Усовершенствованная модель отражения фононов от периодически шероховатых поверхностей и её применение к расчёту теплопроводности ... 74

*Кадыров А.Д., Резник А.А., Резванов А.А.* Молекулярное моделирование динамики поляризации орторомбического оксида гафния ... 78

*Косякова А.В., Хвесюк В.И.* Определение теплоёмкости квантовых точек с использованием линейного и нелинейного дисперсионных соотношений ... 81

*Лю Шисян, Баринов А.А., Хвесюк В.И.* Исследование теплофизических свойств наноструктур с помощью нейро-эволюционного потенциала ... 84

*Оксаниченко Ф.В., Ефремов А.М.* Моделирование и оптимизация плазмохимического травления поликремния в смеси $HBr/Cl_2/Ar$ с использованием методов машинного обучения ... 87

*Петрова А.Ю., Сафин А.Р., Кравченко О.В.* Расчёт спектра спиновых волн в тонкой антиферромагнитной плёнке ... 90

*Резник А.А., Бажанов Д.И.* Первопринципные расчеты энергетических барьеров миграции разнозаряженных кислородных вакансий в оксидах гафния и циркония ... 94

*Свирин Д.В., Бажанов Д.И.* Получение аналитической функции потенциала межатомного взаимодействия методами машинного обучения ... 97

*Тельминов О.А.* Подход к проектированию нейросетевой системы управления колесной платформой с клонированием поведения и оптимизацией аппаратной части ..... 101

*Чикин М.И., Баринов А.А.* Анализ границ применимости различных моделей для расчета теплофизических свойств тонких плёнок .... 103

**4. D. Моделирование размерных, радиационных, поверхностных и других дефектов в полупроводниковой наноэлектронике ..... 107**

*Булах С.С., Чибисов А.Н., Фёдоров А.С.* Влияние дефектов в виде вакансий серы на электронную структуру монослоя $MoS_2$ ..... 108

*Верезуб Н.А., Простомолотов А.И.* Влияние газодинамики в процессе Чохральского на дефектообразование в монокристаллах кремния ..... 111

*Кобелева С.П.* О возможности уточнения моделей дефектообразования в CdTe по измерению состава равновесной паровой фазы..... 114

*Образцов К.В., Чибисов А.Н., Сривастава А.* Квантово-механическое исследование электронных и спиновых свойств силигена ..... 117

*Чибисов А.Н., Смотрова Д.Н., Сривастава А.* DFT-предсказание стабильных двумерных модификаций $RE_3SE_4CL$ ..... 121

**5. E. Моделирование работы многоуровневых элементов памяти для компьютеров следующего поколения ..... 127**

*Абгарян К.К., Петров А.В., Бажанов Д.И., Каланда Н.А.* Влияние магнитной анизотропии на переключательную динамику в ячейках памяти MRAM на основе FeCoB/MgO ..... 128

*Журавлев А.А., Абгарян К.К., Ревизников Д.Л., Итальянцев А.Г.* Двухмасштабная модель элемента энергонезависимой памяти FeRAM ..... 133

*Козлов А.К., Ганыкина Е.А., Резванов А.А.* Реализация физико-математической модели элемента хранения резистивного переключения на основе $HfO_2$ в САПР TCAD ..... 137

*Морозов А.Ю., Абгарян К.К., Ревизников Д.Л.* Двухэтапный алгоритм параметрической идентификации компактной модели элементов энергонезависимой памяти MRAM ..... 140

*Павлишин К.Ю., Абгарян К.К., Бажанов Д.И., Журавлев А.А., Ревизников Д.Л.* Атомистическое моделирование работы элементов энергонезависимой памяти на основе технологии FeRAM ..... 147

*Рындин Е.А., Андреева Н.В., Петухов А.Е.* Моделирование вклада граничных эффектов в электрофизические свойства мемристивных композиций с тонкими сегнетоэлектрическими пленками..... 150

**6. F. Моделирование структур и свойств конструкционных материалов для производств изделий ЭКБ, включая композиционные материалы с нанокристаллами, нанокластерами, наноаморфными включениями и т.д. ..... 155**

*Исмаилов Н.Э.* Применение методов математического моделирования при определении структурных параметров и свойств изделий из полимерных композиционных материалов ..... 156

*Казанцева В.Д., Журавлев А.А., Абгарян К.К.* Разработка алгоритма для автоматического построения полимерных структур на основе SMILES-формулы с использованием молекулярной динамики ... 159

*Мочалова Ю.Д.* Ускоренный подбор последовательностей укладки многослойных полимерных композиционных материалов с помощью теории-ориентированных моделей машинного обучения ..... 162

**7. G. Проблемы обеспечения надежности ЭКБ микроэлектроники и систем на ее основе..... 167**

*Сергеев В.А., Тельминов О.А.* Спайковые нейронные сети для решения задачи стабилизации обратного маятника..... 168

**8. H. Методы математического моделирования в фотонике .... 171**

*Кобелев В.А., Тельминов О.А.* Многомасштабный нейросетевой поиск для ориентации по карте местности..... 172

*Панфилов А.С., Хазанова С.В., Бобров А.И., Горшков А.П.* Численный расчет электрооптических свойств AIIIBV гетероструктр для создания фотонных интегральных схем ..... 175

*Сиксин В.В., Трунов Д.Н.* Особенности моделирования источника нейтронов (КИНК) для протонных ускорителей и применение плазмонных наночастиц золота в комбинированных видах протонной и нейтронной терапии ..... 178

# 1. А

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

https://doi.org/10.29003/m4761.MMMSEC-2025/8-12

# ОБ ОДНОМ ПОДХОДЕ К ОЦЕНКЕ ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ В ЗАДАЧАХ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ

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

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

**Аннотация.** В работе рассматривается подход к оценке производительности высокопроизводительного вычислительного комплекса. Предлагается последовательный переход от расчета теоретической максимальной производительности к комплексной оценке реальной производительности вычислительной системы. При этом применяются как классические синтетические тесты, так и перспективные подходы, такие как глубокое профилирование. Предлагаемый подход позволяет получить исчерпывающее представление о реальной производительности и возможностях высокопроизводительной вычислительной системы.

Работа выполнена с использованием инфраструктуры Центра коллективного пользования «Высокопроизводительные вычисления и большие данные» (ЦКП «Информатика») ФИЦ ИУ РАН (г. Москва) [1, 2].

**Ключевые слова:** высокопроизводительный вычислительный комплекс, гибридная архитектура, графический ускоритель, производительность.

Современные высокопроизводительные вычислительные комплексы строятся на основе гибридных архитектур, где центральные процессоры вычислительных узлов работают в тандеме с ускорителями вычислений, на которые возлагается основная вычислительная нагрузка, а сами вычислительные узлы объединяются в единый комплекс высокоскоростной сетью обмена данными [3, 4].

Традиционные подходы к оценке производительности таких сложных систем, основанные на единичных метриках, измеряемых количеством операций с плавающей запятой в секунду, слабо отражают возможности системы эффективно решать реальные прикладные и научные задачи.

Актуальной проблемой становится разработка комплексного подхода, который бы позволил не только измерить, но и интерпретировать производительность современного высокопроизводительного вычислительного комплекса в контексте его целевого использования.

В статье предлагается подход, основанный на поэтапной оценке производительности высокопроизводительного вычислительного комплекса.

На первом этапе оценивается теоретическая максимальная производительность (ТМП), которая определяется заявленными производителями показателями производительности компонент, входящих в состав системы, с учетом архитектурных особенностей вычислительной системы.

ТМП предлагается определять по формуле:

$$\mathrm{Tpeak} = \sum_{1}^{n}((\mathrm{Freq} \times \mathrm{Nops} \times \mathrm{Ncores} \times \mathrm{Ncpus}) + (\mathrm{Tgpupeak} \times \mathrm{Ngpus})),$$

где:

n — количество вычислительных узлов системы;

Freq — рабочая частота центрального процессора;

Nops — количество операций за такт;

Ncores — количество ядер центрального процессора;

Ncpus — количество центральных процессоров в вычислительном узле;

Tgpupeak — пиковая производительность одного ускорителя вычислений;

Ngpus — количество ускорителей вычислений в вычислительном узле.

ТМП вычислительной системы представляет собой некий идеализированный сценарий, недостижимый на практике. Реальная производительность системы (РПС) будет всегда ниже ТМП из-за наличия таких факторов, как задержки доступа к памяти, накладные расходы на коммуникации между компонентами, несовершенство программного кода и др.

На втором этапе проводится тестирование аппаратного обеспечения вычислительной системы с целью выявления компонент, которые работают в нештатных режимах и тем самым являются факторами снижения РПС. Устранение причин работы выявленных компонент в нештатных режимах позволяет повысить РПС. Например, с помощью инструментов мониторинга таких как

программное обеспечение NVIDIA DCGM и утилита nvtop, можно убедиться в том, что все ускорители вычислений работают на штатных частотах, не перегреваются и показывают ожидаемую пропускную способность памяти. Тесты вроде STREAM Benchmark позволяют измерить производительность подсистемы оперативной памяти, что критически важно для многих вычислительных задач. Тесты OSU Micro-Benchmarks [5] позволяют измерить задержки и пропускную способность сети обмена данными, а специализированные тесты NCCL Tests [6] оценивают скорость коллективных операций между ускорителями вычислений, что особенно важно для задач машинного обучения.

На третьем этапе оценивается РПС на основе применения как стандартизированных синтетических тестов, которые позволяют сравнить тестируемую систему с аналогами (например, тест HPL, нагружающий вычислительную систему задачами линейной алгебры и являющийся основой для составления рейтинга TOP500), так и ряда прикладных тестов, представляющие собой реальные приложений из различных научных областей (например, тест MLPerf HPC, который замеряет время обучения современных нейронных сетей и является эталоном для оценки производительности вычислительных систем, ориентированных на решение задач искусственного интеллекта). Именно на этом этапе определяется, с какими целевыми нагрузками и насколько эффективно функционирует вычислительная система.

Для задач материаловедения существует целый ряд прикладных тестов, которые позволяют оценить, насколько хорошо вычислительная система справляется с реальными рабочими нагрузками этой области. Такие тесты измеряют ключевые показатели (метрики) — время расчета одной итерации, время до получения результата и масштабируемость на большом количестве ядер. Широко известными являются сводные наборы тестов от Standard Performance Evaluation Corporation (SPEC) [7].

На четвертом этапе, когда РПС измерена, выполняется глубокая оптимизация процесса выполнения приложения, что чего применяются инструменты профилирования, такие как NVIDIA Nsight Systems и Nsight Compute. С их помощью строится временная диаграмма выполнения приложения, позволяющая идентифицировать и сгладить узкие места, например, обнаружить, что ускорители вычислений простаивают в ожидании данных от

центрального процессора, или что межпроцессорные коммуникации занимают большую часть времени.

Этот анализ помогает, во-первых, еще приблизить РПС к ТМП вычислительной системы, а во-вторых, выработать практические рекомендации для пользователей вычислительной системы по оформлению вычислительных заданий.

## Выводы

Расчет производительности высокопроизводительного вычислительного комплекса это сложный, многоэтапный процесс, начинающийся с теоретических расчетов и завершающийся глубоким профилированием приложений. Представленный подход позволяет получить объективные данные для сравнения с другими системами, понять реальную эффективность комплекса при решении конкретных научных или инженерных задач, а также подчеркивает важность не только выбора современного мощного вычислительного оборудования, но и его профессиональной настройки и адаптации программного обеспечения.

Дальнейшее развитие методов оценки производительности высокопроизводительных вычислительных комплексов будет связано с интеграцией метрик энергоэффективности и адаптацией к новым классам задач.

## Список использованных источников


1. ЦКП «Информатика» // [Электронный ресурс] — http://www.frccsc.ru/ckp
2. Денисов С.А., Кондрашев В.А. Возможности ЦКП «Информатика» по предоставлению высокопроизводительных вычислительных ресурсов для решения задач материаловедения // В сборнике Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Материалы V международной конференции, 2023, с. 22–25.
3. Денисов С.А., Кондрашев В.А. Опыт ФИЦ ИУ РАН по созданию высокопроизводительной вычислительной инфраструктуры для решения задач материаловедения // В сборнике: Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Материалы V международной конференции, 2023, с. 26–30.
4. Денисов С.А., Кондрашев В.А. Подходы к созданию высокопроизводительной вычислительной среды для моделирования ячеек энергонезависимой памяти на ЦКП «Информатика» // В сборнике: Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Материалы VI международной конференции, 2024, с. 30–34.
5. OSU Micro-Benchmarks // [Электронный ресурс] — https://mvapich.cse.ohio-state.edu/benchmarks
6. NCCL Tests // [Электронный ресурс] — https://github.com/NVIDIA/nccl-tests
7. SPECaccel // [Электронный ресурс] — https://www.spec.org/accel2023/

# ABOUT ONE APPROACH TO ASSESSING THE PERFORMANCE OF HIGH-PERFORMANCE COMPUTING SYSTEMS IN MATERIALS SCIENCE PROBLEMS

***S.A. Denisov***

**Abstract.** The paper examines an approach to assessing the performance of a high-performance computing system. It proposes a sequential transition from calculating theoretical maximum performance to a comprehensive assessment of the actual performance of a computing system. This approach utilizes both classic synthetic benchmarks and advanced approaches such as deep profiling. The proposed approach provides a comprehensive understanding of the actual performance and capabilities of a high-performance computing system.

**Keywords:** high-performance computing cluster, hybrid architecture, graphics accelerator, performance.

https://doi.org/10.29003/m4762.MMMSEC-2025/12-17

# ПОДХОДЫ К ОЦЕНКЕ ЗАГРУЖЕННОСТИ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ НА ПРИМЕРЕ ЦКП «ИНФОРМАТИКА»

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

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

**Аннотация.** Рассмотрен подход к оценке загруженности высокопроизводительного вычислительного комплекса. Дано организационно-техническое представление вычислительного комплекса в виде совокупности взаимосвязанных уровней. Предлагается выразить загруженность вычислительного комплекса в виде совокупности показателей, характеризующих каждый из уровней представления вычислительной системы. Предлагаемый подход позволяет получить представление о реальной загруженности высокопроизводительной вычислительной системы.

Работа выполнена с использованием инфраструктуры Центра коллективного пользования «Высокопроизводительные вычисления и большие данные» (ЦКП «Информатика») ФИЦ ИУ РАН (г. Москва) [1, 2].

**Ключевые слова:** высокопроизводительный вычислительный комплекс, гибридная архитектура, графический ускоритель, производительность.

Современные высокопроизводительные вычислительные комплексы с гибридной архитектурой, в которых центральные процессоры работают совместно с ускорителями вычислений, являются основой для решения задач в области искусственного интеллекта, анализа больших данных, математического моделирования, включая задачи материаловедения. Эффективное использование таких гибридных систем представляет собой сложную задачу. Одним из аспектов ее решения является разработка и применение комплексных методов оценки загруженности вычислительной системы.

Высокопроизводительную вычислительную систему можно представить в виде совокупности нескольких взаимосвязанных уровней:

– аппаратный уровень (вычислительный узел и его компоненты — ядра центрального процессора, оперативная память, ускоритель вычислений, сетевые адаптеры системы высокоскоростного обмена данными);

– энергетический уровень (совокупная потребляемая мощность вычислительного комплекса или отдельных узлов);

– уровень системы управления вычислительными заданиями, объединяющей вычислительные узлы в единый вычислительный комплекс;

– уровень системного и прикладного программного обеспечения (операционная система, различные библиотеки и фреймворки, системы разработки и математического моделирования), определяющий направления и специфику применения вычислительного комплекса;

– уровень вычислительных заданий пользователя (например, исполняемый программный код, входные данные для системы моделирования).

Первые три из обозначенных уровней обладают набором показателей, по которым можно оценить загруженность вычислительной системы, последние два уровня в той или иной степени влияют на загруженность вычислительной системы.

Традиционный подход определения загруженности вычислительной системы включает сбор, обобщение и анализ метрик (данных) об уровне загруженности (утилизации) центральных процессоров, оперативной памяти, ускорителей вычислений, сетевых адаптеров системы высокоскоростного обмена данными, получаемых на уровне операционной системы вычислительного узла.

Такие метрики, как правило, выражаются относительными показателями (часто в процентном соотношении).

Применение данного подхода позволяет определить уровень загруженности узлов вычислительной системы, равномерность распределения загрузки вычислительных узлов, сделать выводы об уровне загрузки вычислительной системы в целом, а также выявить вычислительные узлы, работающие в режимах близких к перегрузке. Вместе с тем, данный подход определения загруженности вычислительной системы не является полностью объективным, так как нулевой уровень загруженности вычислительного узла по причине его простоя во время выполнения вычислительных заданий, связанного, например, с неоптимальными настройками системы управления вычислительными заданиями, или «зависанием» программного кода, исполняемом в виде вычислительного задания пользователя, будет негативно влиять на уровень интегральной загруженности вычислительной системы [3].

Схожим с вышеописанным подходом является подход, связанный с измерением потребляемой мощности вычислительными узлами относительно уровней их минимального и максимального энергопотребления, так как потребляемая мощность вычислительной системы в целом или отдельных ее узлов напрямую коррелирует с их вычислительной активностью. Данный подход, обладая теми же положительными свойствами, также не является полностью объективным по следующим причинам:

– простои вычислительного узла негативно влияют на уровень интегральной загруженности вычислительной системы;

– высокое энергопотребление может быть связано не только с выполнением вычислительной нагрузки, но и с активной работой встроенной системы охлаждения (вентиляторов) в попытках не допустить перегрева вычислительного узла по причинам, не связанным с вычислительными нагрузками, например, повышение температуры окружающей среды, связанной со сбоями климатических систем [4].

На уровне системы управления вычислительными заданиями подход к определению загруженности выглядит иначе. Здесь на первый план выходят такие показатели, как среднее время ожидания в очереди и длина очереди заданий. Их рост прямо свидетельствует о том, что спрос на вычислительные ресурсы стабильно

превышает возможности вычислительной системы [5, 6]. Данный подход позволяет объективно оценить уровень загруженности вычислительной системы, но при этом важным показателем является эффективность системы управления вычислительными заданиями — способность минимизировать фрагментацию ресурсов, «упаковывая» вычислительные задания на узлы таким образом, чтобы сократить время их простоя [7]. Необходимо настроить систему управления вычислительными заданиями с учетом специфики прикладных нагрузок (задач), решаемых на вычислительной системе [8, 9].

В ЦКП «Информатика» наряду с вышеописанными подходами применяется подход определения загруженности вычислительного комплекса по времени выполнения заданий на основе ретроспективного анализа выполненных вычислительных заданий.

На рисунке 1 показан принцип, положенный в основу предлагаемого подхода. По каждому вычислительному узлу все выполненные вычислительные задания распределяются по временной оси, задающей интервал времени за который будет определяться уровень загруженности системы, как правило календарный год. Каждое выполненное вычислительное задание имеет длительность, определяемую временем начала и завершения выполнения. Проекции длительностей выполнения вычислительных заданий на временную ось определяют интервалы времени, когда на вычислительном узле выполнялось хотя бы одно вычислительное задание.

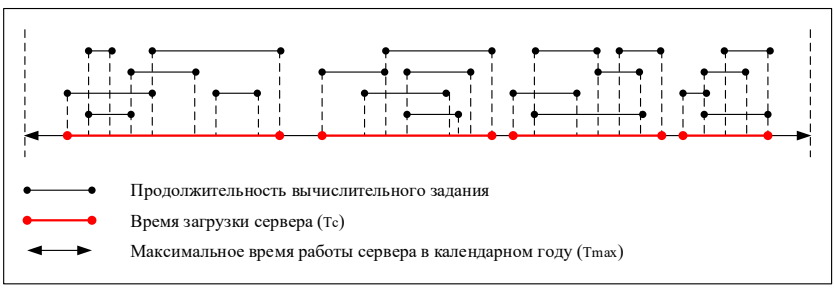



Рисунок 1 — Распределение выполненных вычислительных заданий по временной оси

Тогда интегральная загрузка вычислительного комплекса определяется по формуле:

$$З_{цкп} = \frac{\sum_1^m \frac{\sum T_c}{T_{max}}}{m} * 100\%$$

где

m — количество серверов;

Tc — время работы сервера в календарном году;

Tmax — максимальное время работы сервера в календарном году;

Зцкп — загрузка ЦКП.

Данный подход позволяет оценить загруженность вычислительного комплекса с учетом фактических простоев вычислительных узлов, вызванных особенностями исполнения и «зависанием» программного кода, исполняемом в виде вычислительного задания пользователя, а также оценить загруженность вычислительного комплекса в интересах сторонних организаций, являющихся внешними пользователями по отношению к пользователям организации, на основе которой функционирует центр коллективного пользования.

## Выводы

Совокупность представленных в работе подходов позволяет сформировать комплексный подход к оценке загруженности, который позволяет представить и оценить загруженность высокопроизводительной вычислительной системы в виде системы показателей.

Подход к оценке загруженности на основе времени выполнения вычислительных заданий, применяемый в ЦКП «Информатика» позволяет оценить уровень загруженности центра коллективного пользования с точки зрения потока вычислительных заданий.

## Список использованных источников

1. ЦКП «Информатика» // [Электронный ресурс] — http://www.frccsc.ru/ckp

2. Денисов С.А., Кондрашев В.А. Возможности ЦКП «Информатика» по предоставлению высокопроизводительных вычислительных ресурсов для решения задач материаловедения // В сборнике Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Материалы V международной конференции, 2023, с. 22–25.

3. Bhatele, A., et al. Understanding the Impact of Load Imbalance on HPC Application Performance // International Journal of High Performance Computing Applications, vol. 35, no. 4, 2021, pp. 321–337.

4. Лебедев А.А., Соколов А.В. Энергоэффективность и мониторинг нагрузки в современных суперкомпьютерных системах // Информационные технологии и вычислительные системы, 2023, № 2, с. 67–79.

5. Денисов С.А., Кондрашев В.А. Формирование параметров управления очередями заданий в высокопроизводительном комплексе // Труды 4-й Международной конференции «Современные сетевые технологии», ВМК МГУ, 2022, с. 93–97.

6. Волович К.И., Денисов С.А., Кондрашев В.А. Управление вычислительными заданиями высокопроизводительного вычислительного комплекса при решении задач материаловедения // В сборнике: Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Материалы IV международной конференции, 2022, с. 24–30.

7. Гергель, В.П., Лазарев, А.А., Сидоров, И.А. Адаптивное управление ресурсами суперкомпьютерных систем на основе анализа профиля прикладных задач // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. Серия: Математическое моделирование и оптимальное управление, № 3, с. 88–97.

8. Денисов С.А., Кондрашев В.А., Зацаринный А.А. Основные направления исследований, проводимые с использованием вычислительных ресурсов ЦКП «Информатика» // В сборнике: Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Материалы VI международной конференции, 2024, с. 34–37.

9. Денисов С.А., Кондрашев В.А. Динамика использования ресурсов ЦКП «Информатика» для решения задач материаловедения // В сборнике: Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Материалы VI международной конференции, 2024, с. 27–30.

# APPROACHES TO ASSESSING THE WORKLOAD OF HIGH-PERFORMANCE COMPUTING SYSTEMS AT THE SHARED RESEARCH FACILITIES «HIGH PERFORMANCE COMPUTING AND BIG DATA» (CKP «INFORMATICS»)

***S.A. Denisov***

**Abstract.** An approach to assessing the workload of a high-performance computing system is considered. An organizational and technical representation of the computing system is presented as a set of interconnected levels. It is proposed to express the computing system's workload as a set of indicators characterizing each of the computing system's representation levels. The proposed approach allows one to gain insight into the actual workload of a high-performance computing system.

**Keywords:** high-performance computing cluster, hybrid architecture, graphics accelerator, perfomance.

https://doi.org/10.29003/m4763.MMMSEC-2025/18-22

# СИСТЕМА КРИТЕРИЕВ ОЦЕНКИ ПОЛИТИК ОБСЛУЖИВАНИЯ ЗАДАНИЙ В ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНОМ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОМ КОМПЛЕКСЕ

***Денисов Сергей Анатольевич,***
*начальник ЦКП «Информатика»* [1],
*SDenisov@frccsc.ru*
***Зацаринный Александр Алексеевич,***
*д.т.н., профессор, главный научный сотрудник* [1],
*AZatsarinny@frccsc.ru*
***Кондрашев Вадим Адольфович,***
*к.т.н., заместитель директора* [1],
*VKondrashev@frccsc.ru*

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

**Аннотация.** Рассмотрен подход к оценке эффективности политик обслуживания вычислительных заданий в высокопроизводительном вычислительном комплексе. Предложена комплексная система, которая включает четыре группы взаимодополняющих критериев: скорость выполнения заданий, общая производительность и использование ресурсов, справедливость распределения ресурсов и адаптивность к динамическим изменениям вычислительной нагрузки. Предложенный подход позволяет более сбалансированно оценивать и выбирать политики обслуживания в зависимости от целей применения высокопроизводительной вычислительной системы.

Работа выполнена с использованием инфраструктуры Центра коллективного пользования «Высокопроизводительные вычисления и большие данные» (ЦКП «Информатика») ФИЦ ИУ РАН (г. Москва) [1, 2].

**Ключевые слова:** вычислительные ресурсы, гибридный высокопроизводительный вычислительный комплекс, гибридная архитектура, система управления вычислительными заданиями, очередь заданий.

Развитие классических подходов к определению рациональной дисциплины обслуживания заданий в многомашинных комплексах получило импульс в 70-х гг. прошлого столетия в связи с интенсивным внедрением автоматизированных систем в различных отраслях промышленности [3]. Появление гибридных высокопроизводительных вычислительных систем с гибридной архитекту-

рой, а также облачных технологий потребовало совершенствования классических подходов. Достаточно упомянуть работы [4, 5, 6, 7]. Так, для обслуживания разнообразных типов вычислительных нагрузок (параллельные, интерактивные, пакетные) разрабатываются политики обслуживания вычислительных заданий (QoS, Quality of Service) [8].

Создание единой политики, эффективно обслуживающей все типы нагрузок, представляет собой нетривиальную задачу. Это связано с фундаментальными различиями в предъявляемых ими требованиях: интерактивные задачи чувствительны к задержкам, пакетные — к общему времени выполнения, а параллельные — к координации распределённых ресурсов и минимизации коммуникационных накладных расходов. В связи с этим, как правило, разрабатываются отдельные или гибридные политики для каждого типа нагрузки [9]. Существующие подходы включают политики на основе приоритетов, справедливого распределения и динамического перераспределения ресурсов, а также адаптивные стратегии, использующие методы машинного обучения.

Эффективность политики обслуживания определяется не только ее способностью максимизировать общую производительность системы, т.е. выполнить наибольшее количество вычислительных заданий за временной интервал, но и ее способностью поддерживать баланс между конкурирующими целями, такими как: обеспечение справедливого распределения вычислительных ресурсов между пользователями, минимизация времени ожидания вычислительного задания в очереди, максимизация загрузки вычислительных ресурсов, поддержка приоритетных приложений.

Оценка эффективности политик обслуживания вычислительных заданий является актуальной задачей и требует комплексного подхода. Для оценки эффективности политик обслуживания предлагается использовать систему взаимодополняющих критериев, которая позволит объективно выполнить такую оценку, в виде следующих четырех групп.

Первая группа критериев характеризует скорость выполнения вычислительных заданий высокопроизводительной системой. Основным критерием в этой группе является среднее время выполнения задания, определяющее интервал времени от момента поступления вычислительного задания в систему управления вычислительными заданиями до его завершения. Еще одним важным

критерием является среднее время ожидания в очереди, которое особенно критично для интерактивных видов вычислительных нагрузок. Наиболее эффективной считается такая политика обслуживания, которая минимизирует эти показатели.

Вторая группа критериев характеризует общую производительность и эффективность использования вычислительной системы в целом. Центральным критерием этой группы является общая пропускная способность вычислительной системы, определяемая как количество заданий, выполненных за единицу времени. Высокая пропускная способность свидетельствует о способности системы обслуживать большое число пользователей и/или вычислительных заданий. Не менее важным является критерий — коэффициент использования вычислительных ресурсов, который определяет, какая доля ресурсов (процессоров, ускорителей вычислений, памяти) была задействована полезной работой, а не простаивала. Эффективная политика обслуживания стремится максимизировать оба этих показателя, избегая ситуаций, когда высокоприоритетные задания малого объема приводят к фрагментации ресурсов и простоям вычислительной системы.

Третья группа содержит критерии, оценивающие справедливость и баланс распределения ресурсов между пользователями (вычислительными заданиями пользователей). Критерий справедливости определяется в контексте обеспечения получения каждым вычислительным заданием своей «справедливой доли» вычислительных ресурсов в соответствии с заданными правилами, например, квотами или приоритетами. Количественно этот критерий может быть оценён с помощью индекса Джини: значение, близкое к нулю, указывает на равномерное распределение ресурсов, тогда как значение, близкое к единице, — на высокую неравномерность.

Четвертая группа критериев учитывает способность вычислительной системы адаптироваться к динамически меняющейся рабочей нагрузке. Ключевым является критерий устойчивости к пиковым нагрузкам, который оценивает способность сохранять приемлемые значения показателей времени ожидания в очереди и пропускной способность вычислительной системы при резком всплеске количества поступающих заданий. Эффективная политика обслуживания должна демонстрировать устойчивость к таким ситуациям. Дополнительным критерием, оценивающим вычислительные и временные затраты самой системы управления

вычислительными заданиями на принятие решений, является критерий эффективности планирования ресурсов. Слишком сложные алгоритмы и политики обслуживания вычислительных заданий могут стать узким местом вычислительной системы.

Важно отметить, что указанные критерии зачастую конфликтуют между собой: например, максимизация пропускной способности может ухудшить справедливость, а строгая приоритезация может снизить общую загрузку. Поэтому при сравнении политик необходимо учитывать компромиссы и, при необходимости, применять нормализованные или взвешенные показатели.

## Выводы

Разработка и оценка политик обслуживания вычислительных заданий в высокопроизводительных системах требуют многогранного подхода, учитывающего как технические, так и пользовательские аспекты. Предложена комплексная система критериев, применение которой позволяет выявлять сильные и слабые стороны различных политик и принимать обоснованные решения по их применению и адаптации. С учетом возникающих компромиссов между критериями рекомендуется применять нормализованные или взвешенные показатели, отражающие специфику конкретной вычислительной среды. В перспективе дальнейшие исследования могут быть направлены на разработку адаптивных политик, а также на интеграцию методов машинного обучения для прогнозирования и оптимизации распределения ресурсов в реальном времени.

## Список использованных источников


1. ЦКП «Информатика» // [Электронный ресурс] — http://www.frccsc.ru/ckp
2. Денисов С.А., Кондрашев В.А. Возможности ЦКП «Информатика» по предоставлению высокопроизводительных вычислительных ресурсов для решения задач материаловедения // В сборнике Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Материалы V международной конференции, 2023, с. 22–25.
3. Липаев В.В., Яшков С.Ф. Эффективность методов организации вычислительного процесса в АСУ // Москва, Статистика, 1975.
4. Шабанов Б.М. Выбор вычислительной системы для решения научных задач // Программные продукты и системы. Тверь 2012. № 4. С. 1.
5. Клинов М.С., Лапшина С.Ю., Телегин П.Н., Шабанов Б.М. Особенности использования многоядерных процессоров в научных вычислениях // Вестник Уфимского государственного авиационного технического университета. 2012. Т. 16. № 6 (51). С. 25–31.

6. Якобовский М.В., Бондаренко А.А., Выродов А.В., Григорьев С.К., Корнилина М.А., Плотников А.И., Поляков С.В., Попов И.В., Пузырьков Д.В., Суков С.А. Облачный сервис для решения многомасштабных задач нанотехнологии на кластерах и суперкомпьютерах // Известия ЮФУ. Технические науки. 2016. № 12 (185)

7. ФИЦ ИУ РАН. Отчет о научно-исследовательской работе «Сервис-У». «Исследование вопросов управления результатами научно-исследовательской деятельности организаций, подведомственных ФАНО России, и научными сервисами сети ЦКП ФАНО. 2016. Инв. 991 от 2.02.2017 г.

8. Зацаринный А.А., Волович К.И., Денисов С.А., Ионенков Ю.С., Кондрашев В.А. Методические подходы к оценке эффективности центра коллективного пользования «Информатика» при решении задач синтеза новых материалов // В сборнике: Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Материалы II международной конференции, 2020, с. 38–42.

9. Денисов С.А., Кондрашев В.А. Формирование параметров управления очередями заданий в высокопроизводительном комплексе // Труды 4-й Международной конференции «Современные сетевые технологии», ВМК МГУ, 2022, с. 93–97.

# A SYSTEM OF CRITERIA FOR EVALUATING JOB SERVICING POLICIES IN A HIGH-PERFORMANCE COMPUTING SYSTEM

***S.A. Denisov, A.A. Zatsarinny, V.A. Kondrashev***

**Abstract.** An approach to evaluating the effectiveness of job scheduling policies in a high-performance computing (HPC) system is considered. A comprehensive evaluation framework is proposed, comprising four groups of complementary criteria: job execution speed, overall performance and resource utilization, fairness in resource allocation, and adaptability to dynamic changes in computational workload. The proposed approach enables a more balanced assessment and selection of scheduling policies based on the specific objectives of the HPC system's operation.

**Keywords:** computing resources, hybrid high-performance computing system, hybrid architecture, computational task management system, job queue.

https://doi.org/10.29003/m4764.MMMSEC-2025/23-32

# О ЗАДАЧАХ И МЕТОДАХ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ СИНТЕЗА НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ В УСЛОВИЯХ СОВРЕМЕННЫХ ВЫЗОВОВ

***Зацаринный Александр Алексеевич,***
*д.т.н., г.н.с., руководитель отделения ФИЦ ИУ РАН*[1]*,*
*e-mail: alex250451@mail.ru*
***Абгарян Каринэ Карленовна,***
*д.ф.-м.н., г.н.с., зав. отделом ФИЦ ИУ РАН*[1]*,*
*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 статье рассматриваются современные проблемы математического моделирования синтеза новых материалов в условиях современных вызовов. В настоящее время в мире ускоренными темпами ведется разработка и внедрение новых материалов с заданными свойствами в различных областях промышленности. Актуальность этой важнейшей стратегической задачи инновационного развития России возрастает. Развитие отечественных материалов и электронной компонентной базы очень необходимо для производства доверенных российских программно-аппаратных изделий как широкого, так и специального назначения. Показана значимость методов математического моделирования в области синтеза новых материалов. Выделены 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. Показано, что для дальнейшего развития методов и средств математического моделирования требуется отечественная высокопроизводительная среда для научных исследований.

**Ключевые слова:** математическое моделирование, синтез новых материалов, материалы с заданными свойствами, многомасштабное моделирование, высокопроизводительная исследовательская инфраструктура.

## Введение

На пленарном заседании Форума «Микроэлектроника 2025» (Сочи, Федеральная территория «Сириус») с участием представителей государственной власти, ведущих промышленных и производственных компаний, высших учебных заведений и крупных

бизнес-структур глава правительства М.В. Мишустин подчеркнул важность развития российской электронной промышленности, как одной из ключевых отраслей современной экономики, от развития которой во многом зависят обороноспособность и безопасность нашей страны, её индустриальный и научный потенциал, состояние инфраструктуры, финансового сектора, качество жизни граждан. При этом он особо отметил необходимость развития научных исследований в этой отрасли и уже достигнутые результаты [1].

Так, на стенде «Научное оборудование» были представлены современный и гибкий инструмент для точного анализа силовых полупроводников — параметрический анализатор силовых полупроводниковых приборов Techmize TH521, прецизионный СВЧ-позиционер A-501, СВЧ зонды серии Sky, DC зонды Eoulu, полупроводниковые материалы и линейка продуктов для разработчиков СВЧ-аппаратуры (электромеханические переключатели и аттенюаторы, волноводные компоненты миллиметрового диапазона).

Нельзя не отметить также серьезное продвижение в области фотолитографии, которая является одним из ключевых процессов микроэлектронного производства. Так, на Форуме «Микроэлектроника 2025» был продемонстрирован первый отечественный фотолитограф с разрешением 350 нанометров, разработанный Зеленоградским нанотехнологическим центром. Анонсированы начало серийного производства, а также следующая разработка фотолитографа с разрешением 130 нанометров, который будет стоить на 40–60% дешевле зарубежных аналогов [2]. Интересно, что тем самым подтверждены ранее продекларированные результаты [3, 4].

Важно, что интенсивное развитие микроэлектроники осуществляется, несмотря на жесткое санкционное давление Запада, во многом за счет научной составляющей, в рамках которой выполняются исследования по синтезу новых материалов на основе математического моделирования.

В статье рассматриваются проблемные вопросы математического моделирования синтеза новых материалов в условиях современных вызовов.

## 1. Актуальность проблемы развития математического моделирования для синтеза новых материалов

В условиях санкционного давления со стороны западных компаний в России предпринимаются интенсивные усилия по созданию целого ряда новых материалов, которые необходимы для

производства доверенных российских программно-аппаратных изделий как широкого, так и специального назначения. Одним из важнейших направлений в рамках первого приоритета новой Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации является развитие передовых технологий синтеза новых материалов с заданными свойствами на основе математического моделирования [5]. Эта проблематика очень сложная, наукоемкая, многоаспектная и требует, с одной стороны, всестороннего обсуждения в научном сообществе, а с другой, — организационной и финансовой мощной государственной поддержки.

Факторы, определяющие актуальность развития синтеза новых материалов как инновационного направления, во многом связаны с вектором развития отечественной электронной промышленности. Отметим основные из них [6–10]:

– новые материалы с заданными свойствами являются основой инновационного развития в рамках цифровой трансформации;

– синтез новых материалов требует новых прорывных технологий для создания отечественной импортонезависимой электронной компонентной базы;

– новые отечественные материалы с заданными свойствами обеспечивают условия для кардинального решения проблемы обеспечения информационной безопасности компьютерных систем различного назначения, прежде всего в интересах государственного управления, обороны, безопасности и правопорядка;

– острая потребность создания перспективных комплексов вооружения и военной техники на отечественной электронной компонентной базе за счет создания новых комплектующих элементов и материалов, а также технологий их получения;

– необходимость развития современной исследовательской инфраструктуры с использованием высокопроизводительных вычислительных средств.

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

Успешное решение приведенных проблем возможно на основе развития современных научно-методических инструментов, которые требуют адекватной поддержки в виде высокопроизводительной исследовательской инфраструктуры.

Роль приведенных факторов не только сохраняется, но и постоянно возрастает. При этом для восстановления российской микроэлектроники необходимо преодоление целого ряда проблем и барьеров. Основные из них приведены в [4].

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, включая, 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.

Представляется, что для преодоления приведенных выше барьеров в России необходимо предусматривать комплекс мероприятий, включая исследования, разработку технологий, реализующих их микроэлектронных изделий, необходимого технологического оборудования и расходных материалов, научно-производственной базы, в том числе серийных заводов, а также подготовку высококвалифицированных специалистов в области радиоэлектроники. Кроме того, отметим необходимость развития отечественных программных средств для разработки и оптимизации полупроводниковых приборов, а также технологий их производства с использованием средств автоматизированного проектирования. 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.

Важно, что комплекс мероприятий по исследованиям системотехнических вопросов создания современной электронно-компо-

нентной базы проводится в рамках 6-й подпрограммы фундаментальных научных исследований.

## 2. Задачи математического моделирования в области синтеза новых материалов

Вместе с тем, для дальнейшего развития работ по созданию доверенных отечественных российских программно-аппаратных изделий на основе математического моделирования необходимы постановка и решение целого спектра функциональных задач. Остановимся на основных из них [4, 11, 12].

Первая группа задач связана со сбором, классификацией и систематизацией наборов входных данных для математического моделирования синтеза новых материалов. Основные подходы к их решению представлены в [11, 12].

Вторая группа задач направлена на моделирование работы ячеек энергонезависимой памяти для нейроморфных систем, которые способны обеспечивать долговременное хранение информации даже в условиях нарушения электропитания [12]. Успешное решение таких задач имеет особое значение для автоматизированных систем, используемых в специальных условиях.

Третья группа включает моделирование различных компонентов материалов, а также процессов их создания, включая моделирование:

– размерных, радиационных, поверхностных и других эффектов в полупроводниковой наноэлектронике;

– структур и свойств композиционных материалов с нанокристаллами, нанокластерами, наноаморфными включениями.

Отдельная группа задач, требующая моделирования — изыскание структурных решений, обеспечивающих заданную надежность электронных компонентов.

## 3. Основные подходы и методы математического моделирования

Современная электронно-компонентная база, включая материалы с заданными свойствами, характеризуется многофункциональностью, высокой степенью адаптации к требованиям заказчика и условиям применения в конкретных изделиях, а также способностью к сравнительно оперативной реконфигурации.

Главная проблема в том, как построить модель, адекватно отражающую функционирование реальной системы.

Общие подходы к моделированию сложных объектов предполагают гибкое использование аналитического, имитационного и натурного моделирования на различных стадиях создания объектов, включая применение виртуальных технологий моделирования и цифровых двойников [13].

Так, на ранних стадиях разработки (обоснования требований, системного облика, состава и основных системотехнических решений — в рамках НИР) основными являются методы аналитического моделирования; на стадиях проектирования — методы аналитического моделирования должны дополняться методами имитационного моделирования, а на стадиях изготовления опытного образца и проведения испытаний преобладают методы натурного моделирования, дополняемые имитационным и аналитическим моделированием; по существу — методы комплексного моделирования [13].

В рамках опытной эксплуатации и применения ИУС важную роль играют все виды моделей.

Тенденция развития комплексного моделирования приобретает высокую актуальность на перспективу с учетом появления высокопроизводительных вычислительных центров (суперкомпьютеров).

Одним из подходов к реализации комплексного моделирования являются методы построения многомасштабных вычислительных моделей для исследования процессов и явлений, характеризующихся широким спектром пространственных и временных масштабов [11,12]. Основные условия для постановки и успешного проведения фундаментальных и прикладных исследований по разработке методов комплексного моделирования для синтеза материалов отражены в работе [14]:

## 4. Развитие высокопроизводительной среды для моделирования

Успешное решение задач в области синтеза новых материалов с заданными свойствами невозможно без применения методов математического моделирования с использованием высокопроизводительной исследовательской инфраструктуры, обладающей комфортным пользовательским интерфейсом, гибкостью в настройке ресурсов, высокой производительностью и надежностью [15]. Принципиально, что необходима доверенная отечественная высокопроизводительная среда для научных исследований.

Развитие исследовательской инфраструктуры осуществляется в развитых зарубежных странах на основе долгосрочных про-

грамм. Так, в марте 2023 г. Китайская академия наук приняла долгосрочную дорожную карту развития больших исследовательских инфраструктур до 2050 года, которая охватывает более 50 крупных инфраструктурных исследовательских объектов [16].

Как показывает анализ мирового опыта, 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 [15, 16, 18].

С учетом указанных тенденций для повышения эффективности проведения экспериментальных исследований в ФИЦ ИУ РАН создана и развивается 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 [15,17].

На базе платформы зарегистрирован центр коллективного пользования (ЦКП) «Информатика», на котором успешно решается целый ряд задач, включая задачи синтеза материалов с заданными свойствами [17,19].

## Заключение

– Новые материалы являются важнейшим компонентом успешного развития различных отраслей российской промышленности, включая оборонную сферу.

– Создание отечественной электронной компонентный базы становится стратегической задачей в условиях современных угроз и вызовов.

– Синтез новых материалов на основе методов многомасштабного моделирования — сложная наукоемкая задача.

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

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

– Для решения назревших проблем необходима системная постановка работ по созданию технологий создания микроэлектронной компонентной базы для аппаратуры военного и двойного назначения.

– Международные конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК) вносят достойный вклад в развитие научной составляющей проблемы синтеза новых материалов в России.

## Литература


1. Российский Форум «Микроэлектроника» — ведущая межотраслевая коммуникационная площадка России, https://spegroup.ru/news/itogi_uchastiya_v_forume_mikroelektronika_2025/
2. Первый отечественный литограф, https://www.netall.ru/economy/news/1503062.html
3. Зеленоградские компании договорились совместно разрабатывать фотолитограф, https://www.netall.ru/economy/news/1400764.html
4. Зацаринный А.А., Абгарян К.К. Современные подходы к решению проблемы синтеза новых материалов с заданными свойствами// Материалы 6-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК-2024). Москва: МАКС Пресс. С. 8–22.
5. О Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации. Утверждена Указом Президента РФ от 28.02.2024 г. № 145, http://publication.pravo.gov.ru/document/0001202402280003?ysclid=ltjwa4m3to687779932
6. 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.
7. 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.
8. 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.
9. 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.
10. Зацаринный А.А., Абгарян К.К. Об актуальности проблемы синтеза новых материалов в условиях инновационного развития промышленности. Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2023;26(4). https://doi.org/10.17073/1609-3577j.met202307.560

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

12. Абгарян К.К., Ревизников Д.Л., Журавлев А.А., Морозов А.Ю., Гаврилов Е.С. Многомасштабное моделирование нейроморфных систем. 2022. МАКС Пресс. — 128 с.

13. Зацаринный А.А. Об актуальности комплексного моделирования процессов создания информационно-управляющих систем. — В сб.: «Информатика: проблемы, методы, технологии» (IPMT-2025). Воронеж, 2025. С. 750–755.

14. Зацаринный А.А., Иванов К.В. Ключевые проблемы развития технологий искусственного интеллекта в интересах обеспечения военной безопасности государства. — В сб. «80-летие Великой Победы: исторический опыт и современные проблемы военной безопасности России»: 10-я Международная межведомственная научно-практическая конференция научного отделения № 10 РАРАН (Москва, 20 марта 2025 года): материалы конференции: в 3 т. / Москва: Изд. МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2025, с. 43–52.

15. 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”

16. Развитие крупных исследовательских инфраструктур в Китае: дорожная карта до 2050 года (Китайская академия наук) 2011-е издание, автор: Хэшенг Чен (редактор), https://www.amazon.com/Large-Research-Infrastructures-Development-China/dp/3642193676?ysclid=m1x874z1k1142490168

17. ЦКП «Информатика» // [Электронный ресурс] — http://www.frccsc.ru/ckp (дата обращения 19.09.2023)

18. Денисов С.А., Кондрашев В.А., Зацаринный А.А. Основные направления исследований с использованием вычислительных ресурсов ЦКП «Информатика» // Материалы 6-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК-2024). Москва: МАКС Пресс, с. 34–37.

19. Денисов С.А., Кондрашев В.А. Подходы к созданию высокопроизводительных вычислительной среды для моделирования ячеек энергонезависимой памяти на ЦКП «Информатика» // Материалы 6-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК-2024). Москва: МАКС Пресс, с. 30–33.

# ON THE PROBLEMS AND METHODS OF MATHEMATICAL MODELING FOR SOLVING PROBLEMS OF SYNTHESIS OF NEW MATERIALS IN THE CONTEXT OF MODERN CHALLENGES

***A.A. Zatsarinny, K.K. Abgaryan***

**Abstract.** This article examines contemporary issues in mathematical modeling for the synthesis of new materials in the face of modern challenges. Currently, the development and implementation of new materials with tailored properties in various industrial sectors is accelerating worldwide. This crucial strategic objective for Russia's innovative development is becoming increasingly important. The development of domestic materials and electronic components is essential for the production of trusted Russian hardware and software products for both general and specialized applications. The importance

of mathematical modeling methods in the synthesis of new materials is demonstrated. The main areas of research related to the development of new model representations, methods, and algorithms applied in the field of mathematical modeling of the structures and properties of nanomaterials, as well as systems based on them, are highlighted. It is demonstrated that further development of mathematical modeling methods and tools requires a domestic, high-performance research environment.

**Keywords:** mathematical modeling, synthesis of new materials, materials with specified properties, multiscale modeling, high-performance research infrastructure.

УДК 004.3:004.9
https://doi.org/10.29003/m4765.MMMSEC-2025/32-37

# ПОЛЬЗОВАТЕЛЬСКИЙ ИНТЕРФЕЙС СИСТЕМЫ АВТОМАТИЗИРОВАННОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ ЭКБ ДЛЯ СОЗДАНИЯ ЯЧЕЕК ЭНЕРГОНЕЗАВИСИМОЙ ПАМЯТИ НА ОСНОВЕ ТЕХНОЛОГИЙ ReRAM, FeRAM, MRAM (ПО «CoBa»)

***Абгарян Каринэ Карленовна,***
*д.ф.-м.н., заведующая отделом[1], профессор[2],*
*kristal83@mail.ru*
***Гаврилов Евгений Сергеевич,***
*к.т.н., научный сотрудник[1],*
*eugavrilov@gmail.com*
***Колбин Илья Сергеевич,***
*к.ф.-м.н., научный сотрудник[1],*
*iskolbin@gmail.com*
***Кулешов Игорь Александрович,***
*инженер-исследователь[1], аспирант[2],*
*alpkuleshov@gmail.com*
***Мочалова Юлия Дмитриевна,***
*математик[1],*
*juliamochalova96@gmail.com*

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

**Аннотация:** В работе рассмотрены основные компоненты пользовательского интерфейса системы автоматизированного проектирования ячеек энергонезависимой памяти на основе технологий ReRAM, MRAM, FeRAM (ПО «CoBa»), в которой реализована многомасштабная схема моделирования. Данная система предназначена для проведения исследова-

ний в области моделирования свойств материалов и моделей ячеек энергонезависимой памяти ReRAM, MRAM, FeRAM.

**Ключевые слова:** пользовательский интерфейс, система многомасштабного моделирования, энергонезависимая память, ReRAM, FeRAM, MRAM.

## Введение

Для разработки высокопроизводительной вычислительной техники нового поколения необходимо создать альтернативную энергонезависимую память способную хранить данные при отсутствии питания, с высокой плотностью записи, низкой потребляемой мощностью, высокой надежностью и высокой скоростью переключения. К перспективным можно отнести элементы памяти, базирующиеся на технологиях ReRAM, FeRAM, MRAM. Каждая из данных технологий обладает своим набором особенностей, однако в целом, построенные на них элементы памяти обладают рядом преимуществ, по сравнению с традиционной памятью на архитектуре фон Неймана, в том числе энергоэффективностью, компактностью, долговечностью хранения и другими. Программные средства системы автоматизированного проектирования ЭКБ для создания ячеек энергонезависимой памяти на основе технологий ReRAM, FeRAM, MRAM (ПО «CoBa») позволяют ускорить и удешевить процесс создания подобных устройств. Для взаимодействия пользователя с построенными в ПО «CoBa» программными решениями был разработан пользовательский интерфейс, способам разработки и функциональным особенностям которого посвящена данная работа.

## Построение пользовательского интерфейса

ПО «CoBa» построена по принципу специализированного многоуровневого ПО, в котором реализована многомасштабная схема компьютерного моделирования [1–3]. В состав пользовательского интерфейса входят десять расчетных модулей для моделирования на квантово-механическом уровне (для материалов), наномасштабном уровне (для моделей устройств), а также расчетные модули для полуэмпирических моделей в режимах обучения на экспериментальных данных и результатах вычислительных экспериментов. Пользовательский интерфейс системы представляет собой веб-приложение с подходом SPA (Single Page Application, одностраничное приложение), реализованным на библиотеке React [4],

с помощью языка программирования TypeScript [5]. Данные технологии (с открытым исходным кодом) были выбраны в качестве базовых в связи с имеющейся обширной экосистемой готовых решения для ряда задач, удобством и относительной простотой использования.

На рисунке 1 представлена приветственная страница ПО «СоВа».

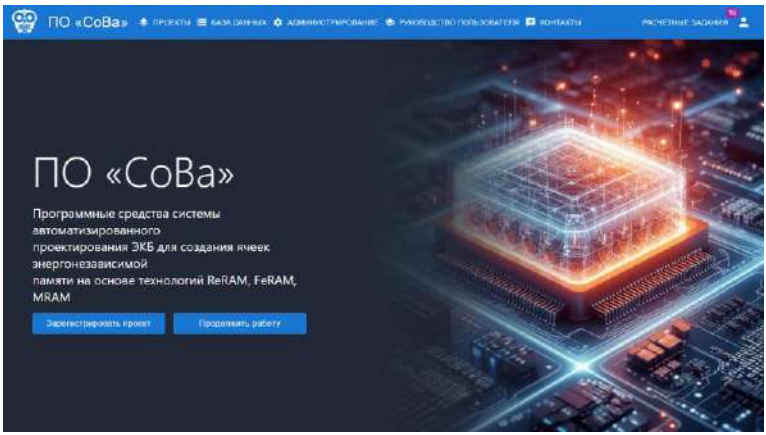



Рисунок 1 — Приветственная страница ПО «СоВа»

После авторизации пользователь попадает на основной экран, где он может создать новый проект, посмотреть существующие, открыть базу данных, панель администрирования пользователей системы, менеджер текущих расчётных заданий или ознакомиться с руководством пользователя.

Ядром системы являются теоретические и полуэмпирические модели, реализованные в виде программных модулей, с помощью которых производится построение многомасштабных моделей ячеек энергонезависимой памяти на трех технологиях (ReRAM, FeRAM, MRAM).

Пользовательский интерфейс прототипа ориентирован на ученого-исследователя (теоретика или экспериментатора) и предназначен для моделирования одного из поддерживаемых видов энергонезависимой памяти (ReRAM, MRAM или FeRAM). Моделирование производится посредством запуска одного из интегрированных в интерфейс расчетных сценариев. Сценарии моделирования делятся на два типа:

1. Теоретическое моделирование позволяет рассчитать свойства материалов от атомного (квантово-механического) уровня, а затем «собрать» модель устройства на наномасштабном уровне и рассчитать вольт-амперную характеристику модели, варьируя различные параметры.

2. Полуэмпирическое моделирование дает возможность построить обученную модель, получив параметры модели устройства из имеющихся экспериментальных данных и проверить модель в других режимах работы.

### Работа с проектами

Основным объектом интерфейса является Проект — рабочее пространство, агрегация логически связанных экспериментов. К проекту привязаны исследуемый вид энергонезависимой памяти, код, описание и права доступа (ACL). В рамках проекта запускаются расчетные задания по сценариям, перечень которых зависит от выбранного вида памяти.

### Работа с расчетными заданиями

Для выполнения расчетного задания необходимо выбрать рассматриваемый тип памяти, требуемую модель и запустить вычисления, предварительно задав необходимые входные данные, часть из которых можно получить из базы данных, а также из расчётных заданий с другого масштабного уровня. Результатом работы являются выходные данные используемых моделей, а также графическая и табличная визуализация значимых процессов и величин. Формы ввода-вывода расчётных заданий подчинены единому шаблону, что упрощает понимание пользователем и ускоряет модификацию пользовательского интерфейса при добавлении новых моделей.

Интерфейс расчетного задания напрямую зависит от выбранного сценария, но имеет общую логику:

– На первом шаге предлагается загрузить данные из базы данных, скопировать из другого задания или задать полностью вручную.

– На втором и дальнейших шагах задаются материалы, структура устройства, параметры запуска расчетных модулей.

– На предпоследнем шаге выбирается вычислительный ресурс для выполнения расчета и запускается расчет.

– После завершения расчета становится доступен последний шаг с результатами расчета.

При успешном завершении расчета есть возможность продолжить расчет в сценарии следующего масштабного уровня, а также сохранить результаты в общую базу данных, чтобы они стали доступны всем пользователям системы за рамками текущего проекта.

## Выводы

В работе представлены основные блоки пользовательского интерфейса ПО «CoBa», описан процесс формирования расчетных заданий для проведения многомасштабного моделирования ячеек энергонезависимой памяти на технологиях ReRAM, FeRAM, MRAM. Разработанная система предназначена для ученого-исследователя, работающего в области моделирования свойств материалов и моделей ячеек энергонезависимой памяти ReRAM, MRAM, FeRAM. Представленное программное обеспечение может быть использовано для создания новых элементов ЭКБ микроэлектроники.

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

*Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 23-91-01012.*

## Список использованных источников

1. Абгарян К.К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. — М.: МАКС Пресс. 2017. 284 с.
2. 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.
3. Абгарян К.К., Ревизников Д.Л.., Журавлев А.А., Морозов А.Ю., Гаврилов Е.С. Многомасштабное моделирование нейроморфных систем — 128 стр., ав. Монография // Москва, 2022, издательство ООО «МАКС Пресс», ISBN 978-5-317-06886-8.
4. React. The library for web and native user interfaces. URL: https://18.react.dev/ (дата обращения 1.10.2025).
5. TypeScript. JavaScript With Syntax For Types. URL: https://www.typescriptlang.org/ (дата обращения 1.10.2025).

USER INTERFACE OF THE AUTOMATED DESIGN SYSTEM FOR ELECTRONIC COMPONENTS FOR CREATING NON-VOLATILE MEMORY CELLS BASED ON ReRAM, FeRAM, AND MRAM TECHNOLOGIES (OWL SOFTWARE)

***K.K. Abgaryan, E.S. Gavrilov, I.S. Kolbin, I.A. Kuleshov, Y.D. Mochalova***

**Abstract:** This paper examines the main components of the user interface of a system for the automated design of non-volatile memory cells based on ReRAM, MRAM, and FeRAM technologies (SoVa software), which implements a multiscale modeling scheme. This system is designed for research in the field of material properties and cell models for ReRAM, MRAM, and FeRAM non-volatile memory.

**Keywords:** user interface, multiscale modeling system, non-volatile memory, ReRAM, FeRAM, MRAM.

УДК 004.896
https://doi.org/10.29003/m4766.MMMSEC-2025/37-40

# УСКОРЕНИЕ ПОИСКА ЭНЕРГИТИЧЕСКИ СТАБИЛЬНОЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ С ПОМОЩЬЮ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ НА ПРИМЕРЕ ОБЁМНЫХ И МОНОСЛОЙНЫХ КРЕМНИЯ, ОКСИДА ЦИНКА И ОКСИДА АЛЮМИНИЯ

***Левенец Михаил Евгеньевич,***
*аспирант, инженер[1],*
*personal@mlevenets.ru*
***Чибисов Андрей Николаевич,***
*д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник[1],*
*andreichibisov@yandex.ru*

*[1]ВЦ ДВО РАН, г. Хабаровск*

**Аннотация.** В работе рассматривается подход ускоренного поиска энергетически стабильной структуры с помощью случайного поиска и MLIP (Machine-Learning Interatomic Potential) Mattersim.

**Ключевые слова:** машинное обучение, оптимальная кристаллическая структура, межатомный потенциал, случайный поиск, двумерная структура.

## Введение

Одной из ключевых проблем материаловедения является поиск энергетически стабильной структуры по заданным характеристикам (состав элементарной ячейки, давление и т.п.). В простейшем

случае можно считать, что фиксированное количество разных атомов требуется расположить в ячейке объёмного или монослойного кристалла. На практике проблема часто решается с помощью сочетания некоторого алгоритма глобальной оптимизации и предиктора энергии и локального оптимизатора, которыми могут выступать случайный поиск и DFT-пакет VASP [1–3]. Однако часто Ab initio расчёты с помощью DFT требуют значительных вычислительных ресурсов, особенно для большого количества атомов в ячейке, когда количество требующих обработки структур превышает 1000. В таком случае поиск может занять дни и недели. Тем не менее, современные глубокие межатомные потенциалы на основе машинного обучения обладают перспективой значительно ускорить поиск. В нашей работе мы исследуем эффективность применения MLIP Mattersim [4] в сочетании со случайным поиском в данной задаче на примере объёмных и монослойных Si, $Al_2O_3$ и ZnO.

## Метод поиска

Для поиска позиций атомов, доставляющих глобальный минимум энергии, в работе используется случайный поиск, реализованный с помощью пакета Pyxtal [5] для Python. С помощью Pyxtal для каждой применимой пространственной группы (от 1 до 230 для 3D и от 1 до 80 для 2D структур соответственно) генерируются структуры со случайным позиционированием атомов в рамках применимых позиций Вайкоффа для данной группы.

Каждая из структур в последствии релаксируется (приводится к локальному минимуму энергии) с помощью алгоритма FIRE (fast inertial relaxation engine) [6] и Mattersim как вычислителя ASE (Atomic Simulation Environment), а затем формируется рейтинг структур с наименьшей энергией для сравнения.

Подобные вычисления были проведены в условиях без внешнего давления с заданным составом для объёмных структур: $Si_8$, $Al_{12}O_{18}$ и $Zn_2O_2$, а также $Si_2$, $Al_2O_3$ и ZnO для монослойных. Для каждой применимой пространственной группы было сгенерировано 10 структур вне зависимости от композиционной сложности.

## Результаты и выводы

В работе произведена оценка применения современного глубокого межатомного потенциала Mattersim для ускорения поиска энергетически стабильной кристаллической структуры и приведены результаты на примере 3D и 2D подзадач для $Al_2O_3$, ZnO и Si.

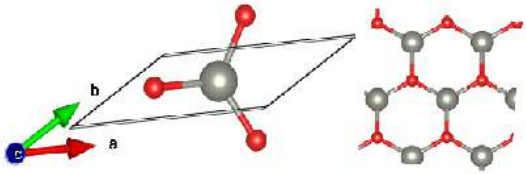



Рисунок 1 — корректно обнаруженная оптимальная структура ZnO

В сочетании с алгоритмом случайного поиска на основе Pyxtal, удалось получить корректные (в соответствии с литературой и материаловедческими базами) предсказания для всех объёмных структур, а также для Si (рисунок 1) и ZnO в случае двумерных, кроме монослойного оксида алюминия (рисунок 2). Последнее иллюстрирует необходимость адаптации традицонно обучаемых на объёмных структурах потенциалов к задачам в области двумерных структур.

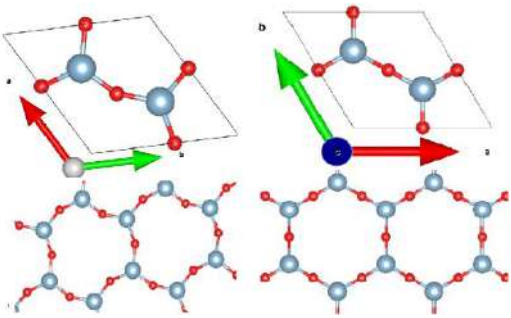



Рисунок 2 — некорректно обнаруженная (слева) и эталонная (справа) структуры $Al_2O_3$

Данные результаты позволяют заключить, что современные глубокие межатомные потенциалы в значительной степени пригодны и имеют перспективы развития и для ускорения поиска стабильных структур.

## Список использованных источников

1. Kresse G., Hafner J. Ab initio molecular dynamics for liquid metals // Physical Review B. 1993. Vol. 47, No. 1. P. 558–561. — DOI: 10.1103/PhysRevB.47.558.

2. Kresse G., Furthmüller J. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set // Computational Materials Science. 1996. Vol. 6, No. 1. P. 15–50. — DOI: 10.1016/0927-0256 (96)00008-0.

3. Kresse G., Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // Physical Review B. 1996. Vol. 54, No. 16. P. 11169–11186. — DOI: 10.1103/PhysRevB.54.11169.

4. Yang H., Hu C., Zhou Y. et al. MatterSim: a deep learning atomistic model across elements, temperatures and pressures // arXiv (preprint). 2024. — DOI: 10.48550/arXiv.2405.04967.

5. Scott F., Kevin P., Dean S., Qiang Z. PyXtal: a Python Library for Crystal Structure Generation and Symmetry Analysis // arXiv (preprint). 2020. — DOI: 10.48550/arXiv.1911.11123

6. Bitzek, E., et al. “Structural Relaxation Made Simple” // Phys. Rev. Lett., Vol. 97, P. 170201, 2006.

## ACCELERATING THE SEARCH FOR AN ENERGETICALLY STABLE CRYSTAL STRUCTURE USING MACHINE LEARNING ON THE EXAMPLES OF BULK AND MONOLAYER SILICON, ZINC OXIDE, AND ALUMINUM OXIDE

***M.E. Levenets, A.N. Chibisov***

**Abstract.** The paper explores the approach of accelerated search for an energetically stable crystal structure using random search and Deep MLIP (Machine-Learning Interatomic Potential) Mattersim.

**Keywords:** machine learning, optimal crystal structure, interatomic potential, random search, two-dimensional structure.

УДК 004.6
https://doi.org/10.29003/m4767.MMMSEC-2025/40-43

# СЕМАНТИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ И ПРОБЛЕМАТИКА АНАЛИЗА ПРЕДМЕТНО-ОРИЕНТИРОВАННОГО КОНТЕНТА ИЗ МНОЖЕСТВЕННЫХ ИСТОЧНИКОВ

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

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

**Аннотация.** В работе рассматриваются вопросы содержательного анализа и внутренней структуризации информационного контента внешних источников данных по критериям и требованиями экспертов-исследователей в процессе их работы со средствами информационной поддержки ресурсоемких приложений.

**Ключевые слова:** семантические требования, анализ данных, структуризация информационного контента, спецификация данных.

Подбор достоверной, тематически сфокусированной, максимально полной и всесторонне проанализированной информации для эксперта-исследователя в предметной области является неотъемлемой составляющей любого вычислительного эксперимента.

Если с задачей контекстного поиска в глобальной сети достаточно хорошо справляются стандартные поисковые программные инструменты с элементами искусственного интеллекта (в частности, Google©, Яндекс© и др.), то фильтрация и анализ найденного избыточного информационного объема — задача исследователя, а сохранение наиболее интересного и важного контента в различных видах и форматах практически полностью ложится на специалиста в предметной области.

Попытка обратить внимание на эту проблему и попытаться частично облегчить и систематизировать кропотливую работу исследователей предпринималась автором в разработке архитектуры инструментальной сервисной поддержки контура ресурсоемких расчетов ряда прикладных задач кристаллографии [1]. При этом акцент был перенесен с функциональных возможностей информационной поддержки (этапов подготовки данных, сопровождения расчетов и интерпретации результатов) в область требований, поиска, анализа, структуризации и каталогизации различных источников данных, необходимых исследователю для построения тематической подборки: уточнения математической модели, подбора и проверки начальных данных, сопоставления и анализа результатов, а также других параметров, представленных авторами публикаций. Такая подборка могла бы претендовать на полноту и достоверность информационного контента рассматриваемой задачи в предметной области.

Основная сложность при таком подходе состоит в том, что источники (справочники, обзоры, научные публикации и т.д.), имеют различный формат, отличаются плотностью фактического материала, не раскрывают всех параметров и свойств исследований и представляют результаты обобщенных выводов или принципиальные графические иллюстрации без деталей и условий, при которых они получены.

Все это делает актуальным попытку создания в рамках системы информационной поддержки [2], сервисной компоненты, обеспечивающей хранение, анализ, структуризацию, сопоставление и апробацию накопленного поисковыми машинами разнородного и разноформатного информационного контента из различных

внешних источников данных [1]. Очевидно, что количественное накопление материала не обеспечивает в должной мере главную задачу — обеспечение достоверности данных, используемых в расчетах, поэтому в основу архитектуры сервиса предполагается включить требования семантической детализации и смыслового контроля фильтруемого информационного контента, призванные обеспечить логическую целостность и ранжирование контекстной подборки по критериям, заданным исследователями.

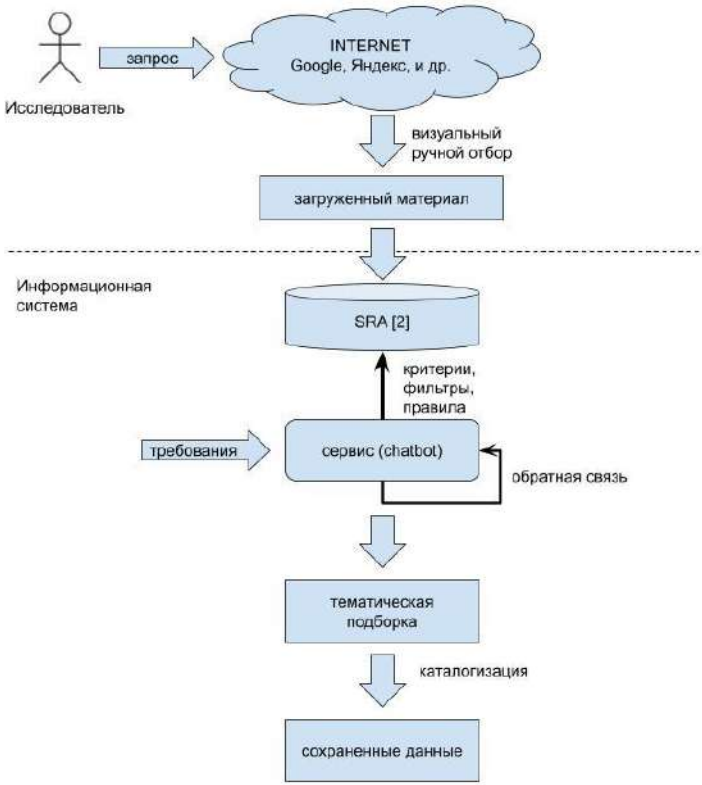



Рис. 1 — Сценарий взаимодействия с сервисом

Этот процесс может быть реализован с помощью автоматизированных сервисов (например, внутренних chatbot систем), обученных на сценариях и требованиях самих исследователей (персонализированной логики в построении последовательности вопросов-ответов как в условиях масштабного анализа, так и концентрированного погружения в ограниченной тематике). При этом

сервис должен быть полезным помощником исследователя: не навязывать какие-либо решения и не выдавать категоричные заключения. Главная роль в анализе и последующей каталогизации информации из внешних источников по-прежнему остается за исследователем, который может управлять сценариями общения посредством явных или неявных оценок (обратной связи в обучении сервиса) и контролировать параметры семантического анализа в виде выбора уровня фильтрации информационного контента.

Один из возможных сценариев, иллюстрирующий возможности семантической обработки информации из внешних источников, формирования и сохранения тематической подборки контента, представлен на рис. 1.

Реализация сервиса предполагает использование open-source платформы (например, Botpress©), которая является полностью контролируемой, хорошо интегрируется в контур системы информационной поддержки приложений, не требует программирования, обладает возможностью создания сложных сценариев по критериям и требованиям исследователей, а также масштабируется с учетом накопления информационного контента в тематической области.

## Список использованных источников


1. Сеченых П.А. Методология комплексного подхода к анализу, структуризации и агрегации данных на базе требований ресурсоемких приложений // Программная инженерия. 2024. Том 15, № 11. С. 600–608. DOI: 10.17587/prin.15.600-608.
2. Сеченых П.А. Глубинная спецификация структурных свойств кристаллических соединений в системе информационной поддержки задач материаловедения // Системы высокой доступности. 2023. Т. 19. № 4. С. 51−62. DOI: https://doi.org/10.18127/j20729472-202304-04.


# SEMANTIC ASPECTS AND PROBLEMS OF ANALYZING DOMAIN-SPECIFIC CONTENT FROM MULTIPLE SOURCES


***Sechenykh P.A.***



**Abstract.** The paper examines the issues of meaningful analysis and internal structuring of the information content of external data sources according to the criteria and requirements of expert researchers in the process of their work with information support tools for resource-intensive applications.



**Keywords:** semantic requirements, data analysis, structuring of information content, data specification.

# 2. B

# КВАНТОВЫЕ ТЕХНОЛОГИИ. ПРОБЛЕМЫ КВАНТОВОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

УДК 530.145
https://doi.org/10.29003/m4768.MMMSEC-2025/46-48

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ТОМОГРАФИИ ОПТИЧЕСКИХ КВАНТОВЫХ СОСТОЯНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АЛГОРИТМА МАКСИМАЛЬНОГО ПРАВДОПОДОБИЯ

***Голышев Иван Константинович***[1, 2, 3],
*i.k.golyshev@gmail.com*
***Богданова Надежда Александровна***[2, 3]
***Шарапов Андрей Анатольевич***[1, 4]
***Богданов Юрий Иванович***[1, 2, 3, 4]

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

[2]*Национальный исследовательский университет «МИЭТ», г. Москва, г. Зеленоград*

[3]*НИЦ «Курчатовский институт» — ФТИАН им. К.А. Валиева, г. Москва*

[4]*Московский Физико-технический институт, Московская область, г. Долгопрудный*

**Аннотация.** В настоящем исследовании на основе корневого подхода и градиентного метода разработан итерационный алгоритм для нахождения экстремума функции правдоподобия в задачах реконструкции оптических квантовых состояний с помощью совокупности взаимнодополнительных квантовых измерений.

**Ключевые слова:** квантовая томография, оптические квантовые состояния, метод максимального правдоподобия, корневой подход, итерационный алгоритм.

## Введение

В настоящем докладе представлена итерационная процедура реконструкции оптических квантовых состояний с помощью совокупности взаимно- дополнительных квантовых измерений [1]. Томография квантовых состояний может быть целиком построена на решении уравнения правдоподобия [2]. Мы показываем, что решение уравнения правдоподобия эквивалентно поиску максимума логарифмического правдоподобия непосредственно с использованием градиента.

## Моделирование томографии оптических квантовых состояний

Метод максимального правдоподобия состоит в нахождении такой матрицы плотности квантового состояния, которая обеспечивала бы максимум функции правдоподобия. В случае оптиче-

ских квантовых информационных технологий протокол квантовых измерений часто сводится к совокупности взаимно — дополнительных пуассоновских распределений вероятностей [2]. Из необходимого условия экстремума логарифмического правдоподобия следует уравнение правдоподобия, решение которого позволяет реконструировать матрицу плотности произвольного квантового состояния. При реконструкции квантовых состояний использовалась процедура дополнения произвольного смешанного квантового состояния до чистого.

В нашей работе решение уравнения правдоподобия осуществлялось двумя способами — с помощью метода простых итераций и на основе метода градиентного подъема. При решении методом простых итераций вводится параметр регуляризации, который не меняет самого уравнения, но существенно влияет на скорость сходимости итерационной процедуры. В градиентном методе рассматривается линейное приближение — малая вариация вектора состояния порождает малую вариацию логарифмического правдоподобия, при этом компоненты вариации аргумента берутся пропорциональными компонентам самого градиента. Показана эквивалентность итерационных алгоритмов.

Рассмотрено универсальное распределение точности, которое наряду с характеристиками точности протокола квантовых измерений может быть найдено теоретически до проведения самих измерений с использованием матрицы полной информации, являющейся квантовым обобщением классической матрицы информации Фишера.

## Выводы

Нами разработан общий алгоритм максимального правдоподобия для статистического восстановления матриц плотности произвольных квантовых состояний при помощи корневого подхода и градиентного метода. Выполнена оптимизация процедуры квантовых измерений на основе исследования зависимости числа итераций, необходимых для нахождения решения, от итерационного параметра. Представлены матрица полной информации и универсальное статистическое распределение, описывающее точность восстановления квантовых состояний.

*Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных и поисковых научных исследований в области электронных технологий.*

## Список использованных источников

1. Богданов Ю.И., Н.А. Богданова, В.Ф. Лукичев / Введение в квантовые информационные технологии. Москва: Техносфера, 2025. — 468 с.

2. Богданов Ю.И. Унифицированный метод статистического восстановления квантовых состояний, основанный на процедуре очищения // ЖЭТФ. 2009. Т. 135. Вып.6. С. 1068–1078.


## SIMULATION OF OPTICAL QUANTUM STATES TOMOGRAPHY USING THE MAXIMUM LIKELIHOOD ALGORITHM


***I.K. Golyshev, N.A. Bogdanova, A.A. Sharapov, Yu.I. Bogdanov***



**Abstract.** In this study, the iterative algorithm based on the root approach and the gradient method for finding the extremum of the likelihood function in problems of optical quantum states reconstruction using a set of mutually complementary quantum measurements was developed.



**Keywords:** quantum tomography, optical quantum states, maximum likelihood estimation, root approach, iterative algorithm.



УДК 519.688:004.032.26
https://doi.org/10.29003/m4769.MMMSEC-2025/48-51


# ПРИМЕНЕНИЕ СВЕРТОЧНЫХ АРХИТЕКТУР В МОДЕЛИРОВАНИИ НЕЙРОСЕТЕВЫХ КВАНТОВЫХ СОСТОЯНИЙ ДЛЯ ЗАДАЧ ОПТИМИЗАЦИИ


***Кулешов Игорь Александрович,***
*аспирант[1], инженер-исследователь [2],*
*i.a.kul-science@ya.ru*
***Бажанов Дмитрий Игоревич,***
*к.ф.-м.н., доцент[1], старший научный сотрудник[2],*
*dima@kintechlabs.com*

[1] *МГУ, г. Москва*

[2] *ФИЦ ИУ РАН, г.Москва*



**Аннотация.** Рассматриваются подходы к построению нейросетевых квантовых состояний для решения задач комбинаторной оптимизации. Показаны преимущества применения свёрточных архитектур при моделировании задачи.



**Ключевые слова:** нейросетевые квантовые состояния; NQS; модель Изинга; задача MaxCut; комбинаторная оптимизация; свёрточные нейронные сети; графовые данные.

## Введение

Задачи комбинаторной оптимизации занимают важное место в различных областях науки и техники, поскольку их постановки часто возникают при анализе и проектировании сложных систем. Классическим примером таких задач является задача поиска максимального разреза (MaxCut) в графе, заключающаяся в разбиении множества вершин на две группы так, чтобы число рёбер между ними было максимальным. MaxCut относится к классу NP-трудных задач [1], что определяет необходимость разработки эффективных приближённых методов её решения.

## Приближение волновой функции искусственной нейронной сетью

Модель Изинга позволяет формализовать задачу MaxCut в виде минимизации соответствующего гамильтониана, что делает возможным применение методов вариационного Монте-Карло. Одним из современных подходов, активно развивающихся в последние годы, является использование нейросетевых квантовых состояний [2] (NQS, Neural-network Quantum States) для приближённого нахождения основного состояния гамильтониана модели Изинга [3]. В рамках метода NQS аппроксимация волновой функции квантовой системы осуществляется с помощью параметризованной нейронной сети, что позволяет применять методы стохастической оптимизации и упомянутых выше методов вариационного Монте-Карло.

Традиционно для аппроксимации волновой функции в модели NQS используется ограниченная машина Больцмана [4] (RBM). Такая архитектура хорошо зарекомендовала себя при моделировании систем с простой структурой взаимодействий. Однако при работе с задачами на графах общего вида, характерных для комбинаторной оптимизации, возникает важная проблема: классическая RBM не учитывает специфическую топологию графа, которая определяет структуру взаимодействий между вершинами.

Особый интерес в данном контексте представляет использование свёрточных архитектур для обработки графовых данных в модели NQS. Свёрточные операции позволяют агрегировать информацию о соседних вершинах при формировании признаков каждой вершины, что делает архитектуру модели более чувствительной к структуре исходного графа. Перспективным направлением является применение таких архитектур для повышения качества

аппроксимации энергии основного состояния и ускорения сходимости вариационного алгоритм.

В ходе работы были получены улучшения как в точности решения такого рода задач на графах, так и в повышении стабильности сходимости данного метода. Известно, что задача поиска максимального разреза графа и поиска основного состояния системы эквивалентны [1, 5], поэтому ниже приведен пример улучшения точности решения для одного из графов набора GSet [6] (G1) в терминах энергии системы.

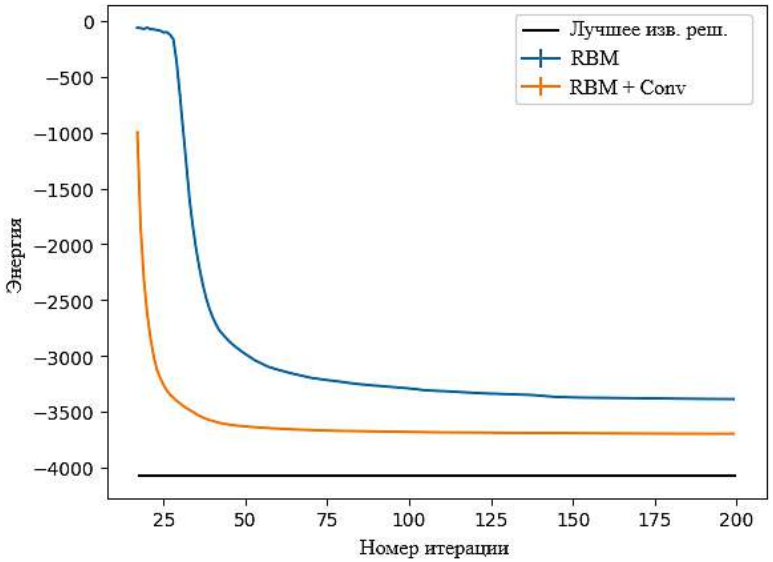



Рисунок 1 — Пример улучшения точности решения для графа G1 [6]

## Выводы

Полученные результаты подтверждают, что внедрение графовых свёрток в модель нейросетевых квантовых состояний представляет собой перспективное направление для повышения эффективности методов комбинаторной оптимизации на основе вариационного Монте-Карло.

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

*Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда № 23-91-01012.*

## Список использованных источников

1. Lucas A. Ising formulations of many NP problems // Frontiers in physics. — 2014. — Т. 2. — С. 5.
2. Carleo G., Troyer M. Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks // Science. — 2017. — Т. 355. — № 6325. — С. 602–606.
3. Shi H. Q., Sun X. Y., Zeng D. F. Neural-network quantum state of transverse-field Ising model // Communications in Theoretical Physics. — 2019. — Т. 71. — № 11. — С. 1379.
4. Vicentini F. et al. NETKET 3: Machine learning toolbox for many-body quantum systems // SciPost Physics Codebases. — 2022. — С. 007.
5. Sinchenko S., Bazhanov D. The deep learning and statistical physics applications to the problems of combinatorial optimization // arXiv preprint arXiv:1911.10680. — 2019.
6. Graph dataset. URL: https://web.stanford.edu/~yyye/yyye/Gset/


## APPLICATION OF CONVOLUTIONAL ARCHITECTURES IN MODELING NEURAL NETWORK QUANTUM STATES FOR OPTIMIZATION TASKS


***I.A. Kuleshov, D.I. Bazhanov***



**Abstract.** This work considers approaches to constructing neural network quantum states for solving combinatorial optimization problems. The advantages of using convolutional architectures in modeling the problem are demonstrated.



**Keywords:** neural network quantum states, NQS, Ising model, MaxCut problem, combinatorial optimization, convolutional neural networks (CNNs), graph data.



УДК 538.91
https://doi.org/10.29003/m4770.MMMSEC-2025/51-54


# ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ НЕОДНОРОДНОСТЕЙ НА ОПТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МУАРОВОГО ГРАФЕНА


***Савельев Владислав Владимирович,***
*аспирант, 4 год*[1],
*savelevvladv@mail.ru*
***Хазанова Софья Владиславовна,***
*к.ф.-м.н., доцент* [1],
*khazanova@phys.unn.ru*

[1] *ННГУ 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 (AA- и AB-упаковка).

Внешне данная структура имеет геометрический узор, напоминающий «муар», при этом оптические и энергетические параметры варьируются в соответствии с чередованием областей. Пространственный период изменения параметров составляет величину порядка десяти нанометров, следовательно, области могут рассматриваться как сверхрешётка. В данной работе численно исследуется влияние дефектов или неоднородностей в направления распространения волн на оптические характеристики слоев.

**Ключевые слова:** графен, двумерные материалы, твистроника, матрица переноса, показатель преломления.

## 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. С этой точки зрения особую привлекательность получили различные Ван-дер-Ваальсовы структуры. Одним из материалов для их создания является графен (монослой атомов углерода), недостатком которого является отсутствие запрещенной зоны. Возможность управления энергетическими и оптическими свойствами однослойного графена осуществляется 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 как путем изменения угла разориентации, так и приложением перпендикулярного электрического поля. Различные упаковки графена отличаются оптическими параметрами, в частности, показателем преломления. Чередование областей с различными показателями преломления приводит к появлению разрешенных и запрещенных зон в области энергий оптического диапазона, что позволяет рассматривать его как природный двумерный фотонный кристалл [2]. Уникальные свойства подобных графеновых структур позволяют интегрировать их в структуры сенсоров, детекторов и оптических фильтров [3]. В то же время

наличие неоднородностей и дефектов различного происхождения приводит к существенным изменениям спектров. Возможность моделирования и прогнозирования оптических спектров позволяет эффективнее создавать приборы с требуемыми свойствами и управлять их характеристиками.

## Расчёт оптических характеристик

В двуслойном графене с различным углом разориентации слоев возникают периодично расположенные области (т.н. AA- и AB-упаковки), при этом появляется узор, напоминающий муаровый, где размеры областей зависят от угла разориентации. Можно подобрать угол таким образом, что пространственный период изменения параметров будет иметь порядок десяти нанометров. Известно, что AA-упакованные области имеют полуметаллические свойства, характеризуются высокой плотностью состояний и обеспечивают конфайнмент электронов, в то время как AB-упакованные имеют полупроводниковые свойства. Показатели преломления также имеют периодический характер, причем в области малых энергий показатель преломления AB-упаковки выше, а в области высоких — ниже показателя преломления AA-упаковки [4]. Поскольку фаза графена с AA-упаковкой метастабильна, чередование различных упаковок делает структуру более стабильной и дает более широкие возможности для создания устройств на их основе. Кроме того, в ряде работ указывается, что при малых значениях угла разориентации скорость Ферми в графеновых муаровых слоях уменьшается [1]. Таким образом, требуется детальное рассмотрение результата действия этих процессов на параметры каждой конкретной структуры.

В качестве исследуемых структур рассматривается двуслойный графен, слои которого смещены друг относительно друга на некоторый угол. В данной работе для структур с различным периодом «муара» численным методом матрицы переноса и теории оптического прохождения плоских волн рассчитывается оптический коэффициент отражения при различных углах разориентации слоев. Исследуется влияние угла разориентации, протяженности дефектов и направления распространения волн на оптические характеристики структур.

## Выводы

Неоднородность в виде нескольких подряд идущих барьеров приводит к появлению дополнительной моды в запрещенной зоне, а учет немонотонности зависимости показателя преломления от энергии приводит к снижению выраженности запрещенной зоны и возможности появления дополнительных мод в запрещенной зоне.

## 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. Sunku S.S., G.X. Ni, B.Y. Jiang, and others // Photonic Crystals for Nano-Light in Moiré Graphene Superlattices // Science, 2018, vol. 362, p. 1153–1156.
3. Vogl Michael, Martin Rodriguez-Vega and Gregory A. Fiete // Floquet engineering of interlayer couplings: Tuning the magic angle of twisted bilayer graphene at the exit of a waveguide // PHYSICAL REVIEW B, 2020, vol. 101, p. 241408(R).
4. Kumar A., V Manjuladevi, Raj Gupta // Refractive index of graphene AA and AB stacked bilayers under the influence of relative planar twisting // J. Phys. Condens. Matter., 2021, vol. 34, p. 015302.


# TRANSPORT CHARACTERISTICS CALCULATION OF GRAPHENE BILAYER WITH DIFFERENT MOIRE PERIODS


***V.V. Saveliev, S.V. Khazanova***



**Abstract.** Due to two graphene layers displacement by a certain angle relative to each other, different types regions of crystallographic packing (AA and AB packing) arise in the structure. Externally, this structure has a geometric pattern reminiscent of “moiré,” with the optical and energy parameters varying according to the regions alternation. The spatial period of parameter variation is on the order of ten nanometers, therefore, we can be considered the structure as a quantum-size superlattice. This paper numerically investigates the influence of defects or inhomogeneities in the wave propagation direction on the structure optical characteristics.



**Keywords:** graphene, two-dimensional materials, twistronics, transfer matrix, refractive index.

# 3. С

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

https://doi.org/10.29003/m4771.MMMSEC-2025/56-51

# ИНТЕГРАЦИОННЫЕ ПОДХОДЫ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ

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

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

**Аннотация:** В работе рассматриваются современные методы математического моделирования и программные разработки, применяемые для решения задач вычислительного материаловедения. Представлены существующие решения, основанные на интеграции многомасштабного моделирования и машинного обучения, а также перспективные программные разработки, которые применяются в области моделирования ЭКБ микроэлектроники и в области создания новых композиционных материалов с заданными свойствами.

**Ключевые слова:** интеграционные подходы, методы многомасштабного моделирования, машинное обучение, электронная компонентная база (ЭКБ) микроэлектроники, вычислительное материаловедение, композиционные материалы, новые материалы.

## Введение

В большинстве случаев в вычислительном материаловедении решаются задачи, в которых необходимо рассматривать явления несопоставимых пространственных и/или временных масштабов и учитывать все факторы, играющие в них ключевые роли. К таким задачам относятся, в частности, разработка новых элементов электронной компонентной базы (ЭКБ) современной микроэлектроники, создание новых композиционных материалов и другие. Существенное влияние на время проектирования и разработки, а также стоимость изготовления нового изделия или материала оказывает количество итераций, необходимых для обеспечения соответствия создаваемого устройства техническому заданию или нового материала заданным свойствам. Технологии многомасштабного компьютерного моделирования позволяют в рамках вычислительного эксперимента рассмотреть множество возможных вариантов, учесть основные факторы влияния с разных масштабных уровней, при этом не требуя проведения натурных экспериментов. Данная технология позволяет определить оптимальные

параметры, необходимые для производства новых устройств и материалов, что в свою очередь дает возможность существенно сократить затраты и время на их разработку и производство, а также повысить надежность в ходе эксплуатации [1–3].

В настоящее время, для решения задач вычислительного материаловедения активно развиваются интеграционные подходы, при разработке которых, в ходе многомасштабного моделирования формируется взаимосвязь между различными моделями и методами, применяемыми на разных уровнях иерархии макроструктуры, для сквозного моделирования всех процессов, определяющих микроструктурные изменения в материалах и их свойствах.

## Применение интеграционных подходов в моделировании композиционных материалов

При моделировании структурных особенностей и свойств композиционных материалов в настоящее время широко применяются средства автоматизированного проектирования. Такие программные пакеты как ANSYS [4], Comsol Multiphysics [5], Simcenter Femap [6] и другие, позволяют изучать строение и изменение свойств новых композиционных материалов в зависимости от модификаций в их химическом составе и структуре.

Сочетание интеграционных подходов, основанных на применении многомасштабного моделирования и инструментов машинного обучения открывает новые возможности при построении гибридных решений и на сегодня является одним из перспективных трендов. Представленная в работе [7] интеграционная платформа многомасштабного моделирования с использованием машинного обучения (цифровой двойник), предназначена для обнаружения повреждений в пьезоэлектрических композитных конструкциях. В ее основе лежит представление о том, что развитие повреждений в пьезоэлектрических композитах — это многомасштабный процесс. Согласно построенной модели повреждения композитных конструкциях зарождаются и начинают расти на микроскопическом уровне, а затем разрастаются до больших размеров, превращаясь в макроскопические дефекты на макроуровне, приводящие к потере электромеханических свойств. Представленная в работе интеграционная платформа реализует двухэтапный вычислительный процесс, объединяющий многомасштабное мультифизическое моделирование с инструментами машинного обучения (ML)

для выявления прогрессирующего разрушения пьезоэлектрической композитной структуры с помощью измерения электрических сигналов в нескольких точках на поверхности.

## Применение интеграционных подходов в моделировании элементов ЭКБ микроэлектроники

В ходе проектирования и оптимизации полупроводниковых приборов, интегральных схем и технологий их производства в качестве средств автоматизированного проектирования на сегодня широко используются TCAD (Technology Computer-Aided Design) [8]. Наиболее распространенными являются САПР компаний Synopsys, Silvaco, Cadence, Siemens, Mentor Graphics. Для моделирования оптоэлектронных устройств и приборов чаще всего используются такие программные продукты как Crosslight Software и Apollo Photonics. Наибольшую популярность из перечисленных ранее, на сегодня получила система Sentaurus TCAD фирмы Synopsys [8,9] (США). Данные системы дают возможность устанавливать связи между характеристиками приборов, технологиями изготовления и параметрами конструкции, не используя дорогостоящие экспериментальные исследования, основанные на их физической реализации [8,9], а также функционирование микроэлектронных приборов и интегральных схем, а также следить за изменением их свойств при различных режимах работы и при разных внешних воздействиях.

Примером программной реализации таких подходов может служить пакет Materials Studio [10] — интегрированная среда для компьютерного моделирования, в которой используются методы квантово-механического, молекулярно-динамического, статистического и другие инструменты. Данное программное обеспечение предоставляет возможность анализировать материалы при различных размерах частиц и масштабах времени для более точного прогнозирования их свойств.

В ходе проектирования элементов ЭКБ микроэлектроники применяются программные системы, которые зачастую опираются на классические модели физических явлений, такие как модели дрейфа-диффузии, гидродинамические модели, методы Монте-Карло служащие для описания динамики электронов и ионов в устройствах, и модели поля, описывающие силы, определяющие динамику. При этом осуществляется согласование

моделей динамики и полевых моделей, что позволяет учесть их взаимовлияние. В ряде систем имеется возможность атомистического моделирования и учета квантовых эффектов, применяя квантово-механические представления (шредингеровские, квантово-кинетические модели). Интеграционные подходы реализованы в TCAD Synopsys [9], в который входит QuantumATK — программное обеспечение для атомистического моделирования, которое на сегодня является одним из наиболее востребованных на рынке продуктов. Данный программный пакет предоставляет пользователям возможность проводить многомасштабное моделирование материалов, интегрируя множество методов моделирования, начиная от ab initio DFT и заканчивая полуэмпирическим и классическим анализом силовых полей, в простую в использовании платформу. Благодаря возможностям, которые дает исследователям проведение многомасштабных расчетов, удается более детально изучить и понять проходящие в наноструктурах процессы, а в ходе активного взаимодействия физического и вычислительного экспериментов выявить доминирующие механизмы.

При проектировании систем энергонезависимой памяти необходимо учесть комплекс разномасштабных взаимосвязанных процессов с высокой степенью детализации, что делает использование имеющихся программных продуктов крайне затруднительным. Так, при моделировании переключательный динамики ReRAM элементов, принципиальной является взаимосвязь процессов генерации/рекомбинации кислородных вакансий, транспорта ионов под действием электрического поля, взаимодействия ионов с электродами, туннелирования электронов, нагрева элемента вследствие протекания электрического тока и другие. Анализ новых подходов к моделированию при решении задач проектирования наносистем приведен, в частности, в работах [3, 11, 12].

В разработанной в ФИЦ ИУ РАН по заказу АО НИИМЭ системе автоматизированного проектирования ЭКБ для создания ячеек энергонезависимой памяти на основе технологий ReRAM, FeRAM, MRAM (ПО «CoBa»), работающих на разных физических принципах, реализован интеграционный подход в рамках которого, в ходе многомасштабного моделирования была сформирована взаимосвязь между различными моделями и методами, применяемыми на разных уровнях иерархии. Проведение теоретического моделирования для элементов энергонезависимой памяти

на основе технологий ReRAM, FeRAM, MRAM, ПО «CoBa» дает возможность рассчитать структурные характеристики и свойства материалов соответствующих элементов хранения, начиная с атомного (квантово-механического) уровня, а затем «собрать» модель устройства на наномасштабном уровне и рассчитать вольт-амперные характеристики модели, варьируя различные параметры. При проведении полуэмпирического моделирования ПО «CoBa» предоставляет возможность построить обученную модель, получив параметры модели устройства из имеющихся экспериментальных данных и проверить модель в других режимах работы. Результаты вычислительных и натурных экспериментов, данные о материалах, входящих в состав элементов энергонезависимой памяти ReRAM, FeRAM, MRAM, модели и лучшие расчетные проекты содержатся в базах данных по элементам хранения. В разработке находятся многоуровневая аналитическая база данных, а также программа для сбора и хранения результатов вычислительных экспериментов, данных лабораторных исследований и других источников, необходимых для создания элементов энергонезависимой памяти на основе технологий ReRAM, FeRAM, MRAM. Инструменты машинного обучения, включая символьную регрессию на основе генетических алгоритмов и искусственные нейронные сети, будут применятся при реализации блока решения обратных оптимизационных задач.

## Выводы

В работе рассмотрены интеграционные подходы, применяемые для решения задач вычислительного материаловедения, на примерах моделирования элементов ЭКБ микроэлектроники и развития повреждений в композиционных материалах. Представленные подходы на практике могут найти применение в разных областях (инженерия, медицина и других), в том числе при создании нейроморфных систем для построения более точных и адаптивных моделей.

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

*Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 23-91-01012.*

## Список использованных источников


6. Абгарян К.К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. — М.: МАКС Пресс. 2017. 284 с.
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.
8. Абгарян К.К., Ревизников Д.Л., Журавлев А.А., Морозов А.Ю., Гаврилов Е.С. Многомасштабное моделирование нейроморфных систем — 128 стр., ав. Монография // Москва, 2022, издательство ООО «МАКС Пресс», ISBN 978-5-317-06886-8.
9. www.ansys.com
10. www.comsol.com
11. https://www.cad-is.ru/femap
12. Ghosh, S., Dan, S. & Tarafder, P. Machine learning-enabled multiscale modeling platform for damage sensing digital twin in piezoelectric composite structures. *Sci Rep* 15, 6631 (2025). https://doi.org/10.1038/s41598-025-91196-5
13. Индрюшенок В.И., Певцов Е.Ф. Основы приборно-технологического моделирования в Sentaurus TCAD / — М.: Московский технологический университет (МИРЭА). Учебное пособие. 2018. — 140 с.
14. Сайт компании Synopsys // URL: https://www.synopsys.com/content/dam/synopsys/silicon/datasheets/sentaurus_ ds.pdf
15. www.3ds.com/products-services/biovia/products/molecular-modeling-simulation/biovia-materials-studio/
16. Рабаи Ж.М. Цифровые интегральные схемы. Методология проектирования (Digital Integrated Circuits) // Пер. с англ. и редакция А.В. Назаренко. Авторы: Жан М. Рабаи, Ананта Чандракасан, Боривож Николич. 2-е изд. М.: ООО «И.Д. Вильямс», — 2016. — 912 с.
17. Вонг Б.П. Миттал А., Старр Г. Нано-КМОП-схемы и проектирование на физическом уровне // М.: Техносфера, 2014. — 432 с.: ил.


# INTEGRATION APPROACHES TO SOLVING PROBLEMS OF COMPUTATIONAL MATERIALS SCIENCE


***K.K. Abgaryan***



**Abstract.** This paper examines modern mathematical modeling methods and software developments used to solve computational materials science problems. It presents existing solutions based on the integration of multiscale modeling and machine learning, as well as promising software developments used in the modeling of microelectronic components and the creation of new composite materials with specified properties.



**Keywords:** integrated approaches, multiscale modeling methods, machine learning, microelectronic components, computational materials science, composite materials, new materials.

УДК 544.034.24
https://doi.org/10.29003/m4772.MMMSEC-2025/62-65

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФФУЗИИ ПРИМЕСИ МЕДИ В ГЕКСАГОНАЛЬНОМ РУТЕНИИ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

***Горохов Сергей Александрович,***
*инженер-технолог[1],*
*sgorohov@niime.ru*
***Резник Александр Анатольевич,***
*научный сотрудник[1],*
*alreznik@niime.ru*
***Резванов Аскар Анварович,***
*к.ф.-м.н., начальник лаборатории[1],*
*rezvanov@niime.ru*

*[1] АО «НИИМЭ», г.Зеленоград*

**Аннотация.** В данной работе выполнено исследование диффузии примеси меди в объёме гексагонального рутения методом теории функционала плотности. Влияние температурного расширения объёма решётки рутения учтено в квазигармоническом приближении.

**Ключевые слова:** диффузия примеси, коэффициент диффузии, теория функционала плотности, квазигармоническое приближение, рутений, медь.

## Введение

Одним из основных трендов современной полупроводниковой микроэлектронной промышленности является постоянное уменьшение минимальных размеров элементов [1]. В частности, из-за сужения ширины медных проводников в системе металлизации и уменьшения расстояния между ними активно исследуются новые материалы для диффузионных барьерных и адгезионных слоев для Cu. Металлический рутений и его соединения рассматриваются в качестве перспективных материалов для этого применения. Ru сочетает высокие барьерные свойства, предотвращающие диффузию меди, и хорошую адгезию к Cu [2].

В последние годы проведено значительное количество исследований по разработке диффузионных барьеров на основе Ru. Однако используемые методы осаждения позволяют получать только поликристаллические плёнки Ru, в которых ожидается диффузия Cu по границам зёрен. Следовательно, такие экспериментальные

исследования не предоставляют информации о скорости диффузии Cu в гексагональном (ГПУ) монокристаллическом Ru. В данной работе проведено исследование диффузии примеси меди в объёме ГПУ Ru с использованием подхода теории функционала плотности (DFT).

## Метод расчета

Для расчёта коэффициентов диффузии меди по вакансионному механизму в ГПУ Ru в зависимости от температуры была применена модель «8-ми частот» Гейта [3]. Согласно этому подходу, существует восемь различных частот скачков, соответствующих обменам позициями примеси Cu и ближайших атомов Ru с соседней вакансией. Каждая из этих частот была рассчитана на основе уравнения Эйринга:

$$w = \frac{kT}{h} \exp\left( -\frac{G_{TS}^{*} - G_{IS}}{kT} \right), \tag{1}$$

где $G_{TS}^{*}$ — свободная энергия переходного состояния (седловая точка на пути диффузии), $G_{IS}$ — свободная энергия начального состояния, $h$ — постоянная Планка, $k$ — постоянная Больцмана, $T$ — абсолютная температура. Полученный набор частот прыжков позволяет вычислить корреляционный фактор $f$ и коэффициенты диффузии:

$$D_{\parallel} = \frac{3}{4} C_2 c^2 f_{Az} w_A , \tag{2}$$

$$D_{\perp} = \frac{1}{2} C_2 a^2 (3 f_{Bx} w_B + f_{Ax} w_A) . \tag{3}$$

Здесь $C_2$ — концентрация вакансий, $a$ и $c$ — параметры решётки ГПУ Ru, $wA$ и $wB$ — частоты прыжков примеси в соседнюю вакансию в пределах базальной плоскостями и между двумя плоскостями соответственно. Для учёта теплового расширения решётки рутения предварительно было применено квазигармоническое приближение (QHA). На основании этих результатов были получены четыре параметра решетки, соответствующие температурам 300, 600, 900 и 1200 К, для которых коэффициенты диффузии были рассчитаны в соответствии с уравнениями (2) и (3).

## Результаты

Значения коэффициентов диффузии, полученные для различных температур, обработаны с помощью линейной аппроксимации зависимости $\ln(D)$ от $1/T$ для определения эффективного предэкспоненциального множителя $D_0$ и энергии активации $Q$ в уравнении Аррениуса:

$$D = D_0 \exp(-Q / kT). \quad (4)$$

На рисунке 1 представлены графики Аррениуса для коэффициентов диффузии меди в ГПУ Ru по вакансионному механизму вдоль базальной плоскости и между соседними плоскостями, а также доступные экспериментальные данные. Видно, что скорость диффузии вдоль базальной плоскости немного выше, чем между плоскостями, при высоких температурах, но становится ниже при уменьшении температуры. Диффузия Cu в ГПУ Ru оказывается медленнее, чем в объёмном TiN [4] или TaN, которые в настоящее время используются в качестве диффузионных барьерных слоёв.

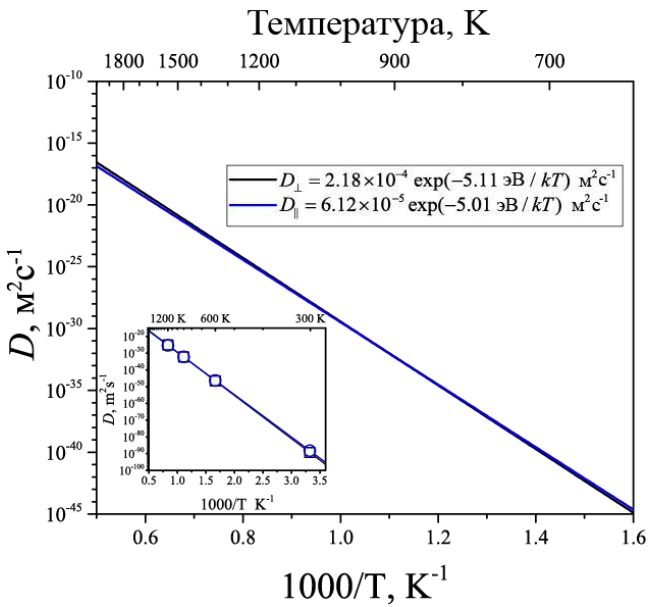



Рисунок 1 — Графики Аррениуса рассчитанных коэффициентов диффузии меди в ГПУ Ru в базальной плоскости и между соседними плоскостями

## Выводы

Проведено исследование диффузии примеси меди в ГПУ Ru из первых принципов. Получены графики Аррениуса для диффузии по вакансионному механизму вдоль базальной плоскости и между соседними плоскостями. Результаты подтверждают отличные барьерные свойства Ru против диффузии Cu и возможность использования Ru в качестве перспективного материала для замены современных диффузионных барьерных технологий.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-91-06002, https://rscf.ru/project/23-91-06002/.*

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

## Список использованных источников

1. Красников Г.Я., Орлов О.М. Отличительные особенности и проблемы КМОП-технологии при уменьшении проектной нормы до уровня 0.18 мкм и меньше // Российские нанотехнологии. — 2008. — Т. 3. — №. 7-8. — С. 124–128.
2. Валеев А.С., Красников Г.Я. Технология изготовления внутрикристальных и межкристальных межсоединений современных СБИС (обзор, концепция развития) // Микроэлектроника. — 2015. — Т. 44. — №. 3. — С. 180–201.
4. Ghate P.B. Screened interaction model for impurity diffusion in zinc // Physical Review. — 1964. — Т. 133. — №. 4A. — С. A1167.
3. Горохов С.А., Резванов А.А., Резник А.А. Энергетические барьеры миграции точечных дефектов в TiN из первых принципов // Электронная техника. Серия 3: Микроэлектроника. — 2023. — № 3(191). — С. 5–13.

# FIRST-PRINCIPLES CALCULATION OF COPPER IMPURITY DIFFUSION IN HEXAGONAL RUTHENIUM

***S.A. Gorokhov, A.A. Reznik, A.A. Rezvanov***

**Abstract.** In this work, we performed a density functional theory study of Cu impurity diffusion in bulk hexagonal Ru. The effect of temperature-dependent expansion of the ruthenium lattice volume is taken into account within the quasi-harmonic approximation.

**Keywords:** impurity diffusion, diffusion coefficient, density functional theory, quasi-harmonic approximation, ruthenium, copper.

УДК 538.9
https://doi.org/10.29003/m4773.MMMSEC-2025/66-68

# ОБЗОР И ПЕРСПЕКТИВЫ ИССЛЕДОВАНИЙ ТЕПЛОЁМКОСТИ НАНОСТРУКТУР

***Дун Иминь,***
*магистр,*
*mingegg@mail.ru*
***Лю Шисян,***
*аспирант,*
*lyu@bmstu.ru*
***Хвесюк Владимир Иванович,***
*д.т.н., профессор,*
*khvesyuk@bmstu.ru*

*МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва*

**Аннотация.** В данном обзоре проанализированы модели для расчета теплоемкости наноструктур, включая классическую модель Дебая, дискретную модель Макнамары, а также более точные вычислительные подходы — теорию функционала плотности (DFT) и машинно-обученные потенциалы.

**Ключевые слова:** теплоёмкость, наноструктуры, модель Дебая, теория функционала плотности, фононы, машинно-обученные потенциалы.

## Введение

В данном обзоре систематизируются современные подходы к расчету теплоёмкости наноструктур. Анализируются ограничения классической модели Дебая и рассматриваются перспективные методы расчётов, включая подходы на основе первых принципов и машинно-обученных потенциал. Особое внимание уделяется сравнительному анализу возможностей различных методик прогнозирования теплофизических свойств наноструктур.

## Исследование теплоёмкости наноструктур

В модели Дебая рассматривается твердое тело как непрерывная упругая среда, а также вводится частоту среза (дебаевская частота), что позволяетс успешно предсказывать кубическую зависимость ($C_v \propto T^3$) низкотемпературной теплоемкости объемных материалов от температуры. Но для наноструктур (таких как тонкие пленки, нанонити, наночастицы), размеры которых в одном или нескольких направлениях сравнимы с длиной волны, плот-

ность фононных состояний в ограниченных направлениях становится дискретной. В этом случае подход с итегрированием по непрерывному спектру состояний фононов становится недействительным, необходимо возвращаться к суммированию по дискретным модам.

Модель Макнамары использует дискретное суммирование и позволяет учитывать размерный эффект [1]:

$$\overline{c_v}(T) = \frac{3\bar{R}}{(2\pi)^3 n_a}\left(\frac{\hbar v_a}{k_B T}\right)^2 \sum_{k_x}\sum_{k_y}\sum_{k_z} \frac{k^2 e^{\frac{\hbar v_a k}{k_B T}}}{\left(e^{\frac{\hbar v_a k}{k_B T}} - 1\right)^2} \Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z\,;$$

где $\hbar$ — постоянная Планка ($h$), деленная на $2\pi$; $v_a$ — средняя акустическая скорость для трех мод. Так для пленок модели приводит к зависимости $C_v \propto T^2$, а для нанонитей — $C_v \propto T$, т.е. наблюдается эффект «подавления» мод. Модель наглядна, но также, как и у Дебая, в ней используется линейный спектр, а границы рассматриваются гладкими (идеализированными).

Для преодоления ограничений аналитических моделей в вычислительном материаловедении применяется комбинированный метод динамики решетки и расчетов из первых принципов (*ab initio*), свободный от эмпирических параметров. Сначала с помощью теории функционала плотности (DFT) вычисляются межатомные силы и силовые константы, затем определяются дискреные фононные спектры $\omega(k)$ через решение задачи на собственные значения динамической матрицы. Теплоемкость вычисляется посредством общего выражения из физики тведого тела:

$$C_v(T) = \int_0^{\omega_{max}} \hbar\omega \frac{\partial f_{BE}(\omega, T)}{\partial T} \mathrm{DOS}(\omega) d\omega\,;$$

где $f_{BE}(\omega, T)$ — функция распределения Бозе – Эйнштейна; $\mathrm{DOS}(\omega) = \sum_{q,s} \delta(\omega - \omega_{q,s})/V$ — плотность состояний, полученная по статистике дискретных фононных спектров. Данный подход позволяет проводить расчет для сложных кристаллических структур, учитывать нелинейные эффекты, оптические ветви фононов и квантовое ограничение. Однако, при этом требуются значительные вычислительные ресурсы.

В последние годы машинно-обученные потенциалы, такие как нейро-эфолюционные потенциалы (NEP), показали значительную эффективность перед традиционными методами. Так работа [2] успешно объединила точность расчетов из первых принципов

с эффективностью эмпирических потенциалов и предложила новый подход для изучения теплофизических свойств для наноструктур. С расширением баз данных теплофизических свойств веществ и оптимизацией алгоритмов по анализу больших массивов данных у таких методов появляются все шансы вытеснить DFT и стать основным инструментом для изучения теплопроводности и теплоёмкости наноструктур.

## Выводы

Модель Макнамара для тел с ограниченной геометрией позволяет эффективно провести оценку теплоемкости наноструктур простой морфологии без учета дисперсии. Теория функционала плотности (DFT) предлагает высокую точность расчета, однако при переходе от макроскопических объектов к наноструктурам, учет квантово-размерного эффекта требует больших вычислительных затрат. Развитие машинно-обученных потенциалов позволяет объединить точность DFT и эффективность модели Макнамара, в перспективе вытесняя DFT в качестве основного инструмента для расчета теплофизических свойств наноструткур с учетым квантово-размерных эффектов и сложной морфологии.

*Работа выполнена при поддержке гранта Китайского совета по стипендиям (№ 202406290035).*

## Список использованных источников

1. McNamara A.J., Lee B.J., Zhang Z.M. Quantum Size Effect on the Lattice Specific Heat of Nanostructures // Nanoscale and Microscale Thermophys. Eng., 2010. Vol. 14, no. 1, pp. 1–20. DOI: 10.1080/15567260903468612.
2. Liu S. et al. Temperature dependence of specific heat capacity of nanostructures via neuroevolution machine-learned potential // J. Appl. Phys., 2025. Vol. 138, no. 10, 104301. DOI: 10.1063/5.0284002.

# REVIEW AND PROSPECTS OF RESEARCH ON THE HEAT CAPACITY OF NANOSTRUCTURES

***Y. Dong, S. Liu, V.I. Khesyuk***

**Abstract.** This review examines models for calculating the heat capacity of nanostructures, covering the classical Debye model, McNamara's discrete model, as well as more accurate approaches such as density functional theory (DFT) and machine-learned potentials.

**Keywords:** heat capacity, nanostructures, Debye model, density functional theory, phonons, machine-learned potentials.

УДК 537.525
https://doi.org/10.29003/m4774.MMMSEC-2025/69-71

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ УПРАВЛЯЮЩИХ ПАРАМЕТРОВ НА ПРОСТРАНСТВЕННОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПЛАЗМЫ В РЕАКТОРЕ ПЛАЗМОХИМИЧЕСКОГО ТРАВЛЕНИЯ

***Захаров Юрий Алексеевич,***
*младший научный сотрудник*[1, 2],
*yzakharow@gmail.com*
***Ефремов Александр Михайлович,***
*д-р хим. наук, профессор*[2]

[1]*МФТИ (НИУ), г. Москва*

[2]*АО «НИИМЭ», г. Зеленоград*

**Аннотация.** Разработана самосогласованная двумерная модель индуктивно-связанной плазмы $Ar/Cl_2$. Исследовано влияние параметров разряда — мощности, давления и состава газовой смеси — на пространственные распределения температуры электронов, концентраций заряженных частиц и атомов хлора. Результаты моделирования согласуются с экспериментальными данными.

**Ключевые слова:** плазмохимическое травление, индуктивно-связанная плазма, пространственная неоднородность.

## Введение

Плазменные процессы, такие как осаждение и травление в реакторах индуктивно-связанной плазмы (13,56 МГц), являются ключевыми в микроэлектронике. Их основное преимущество — возможность независимого управления потоками активных частиц и энергией ионов. Однако обеспечение высокой равномерности обработки осложняется пространственной неоднородностью концентраций активных частиц, вызванной неоднородностью электромагнитного поля и гетерогенной рекомбинацией.

Оптимизация технологических режимов требует комплексного подхода из-за многофакторной взаимосвязи управляющих параметров. Значительного прогресса можно достичь с помощью компьютерного моделировании и создания «цифрового двойника» реактора для проведения виртуальных экспериментов.

## Моделирование плазмы в реакторе

Разработана двумерная модель индуктивно-связанной плазмы $Ar/Cl_2$ в планарном реакторе. Моделирование в COMSOL 6.2 проводилось с целью исследования состава смеси, мощности, давления и расхода газа. Верификация проведена сравнением с экспериментальными данными [1].

Рост давления увеличивает неоднородность плазмы, снижая концентрацию электронов от оси к стенкам вследствие уменьшения длины свободного пробега и коэффициента диффузии. Температура электронов снижается из-за роста частоты столкновений и энергетических потерь. Увеличение расхода газа дает аналогичный эффект, но преимущественно в пристеночной области.

Повышение мощности слабо влияет на пространственное распределение, но увеличивает абсолютные значения температуры и концентрации электронов благодаря росту скорости ионизации и степени диссоциации $Cl_2$. Рост доли аргона снижает однородность плазмы и концентрацию электронов из-за изменения механизма диффузии и более высокого потенциала ионизации Ar. Данные тенденции согласуются с аналитическими исследованиями характера поведения плазмы в данных условиях [2].

## Выводы

В заключение отметим, что все отмеченные нами тенденции хорошо согласуются с результатами экспериментов или расчетов других авторов. Это свидетельствует в пользу адекватности разработанной модели и определяет ее применимость для последующей оптимизации конструкции реактора и исследования других газовых смесей, необходимых в производстве [3].

## Список использованных источников

1. Efremov A.M., Lee J., Kwon K.-H. A comparative study of $CF_4$, $Cl_2$ and HBr + Ar inductively coupled plasmas for dry etching applications // Thin Solid Films. 2017. V. 629. P. 39–48. DOI: 10.1016/j.tsf.2017.03.035.

2. Lieberman M.A., Lichtenberg A.J. Principles of Plasma Discharges and Materials Processing. — Hoboken: John Wiley & Sons, 2005.

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

MODELING THE EFFECT OF CONTROL PARAMETERS ON SPATIAL PLASMA DISTRIBUTION IN A PLASMA ETCHING REACTOR

***Y. Zakharov, A. Efremov***

**Abstract.** A self-consistent two-dimensional model of an $Ar/Cl_2$ inductively coupled plasma has been developed. The influence of discharge parameters — power, pressure, and gas mixture composition — on the spatial distributions of electron temperature, charged particle concentrations, and chlorine atoms has been investigated. The simulation results are in good agreement with experimental data.

**Keywords:** plasma etching, inductively coupled plasma, spatial non-uniformity.

УДК 004.02
https://doi.org/10.29003/m4775.MMMSEC-2025/71-74

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЛОКАЛЬНОЙ ГЕОМЕТРИИ СЛОЯ РЕЗИСТА НА ПРОЦЕССЫ РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОННОГО ЛУЧА

***Зубов Дмитрий Николаевич,***
*ведущий инженер[1],*
*zubov_dn@mail.ru*
***Яковлев Виктор Борисович,***
*д.ф.-м.н., профессор[1],*
*yakvb@mail.ru*

*[1]ИНМЭ РАН, г. Москва*

**Аннотация.** В данной работе описываются некоторые результаты численного моделирования передачи энергии электронов для процесса электронно-лучевой литографии. Рассмотрено влияние фактора массопереноса, выражающегося в изменении локальной геометрии слоя резиста в ходе экспонирования, на вид функций рассеяния как один из главных показателей потенциального пространственного разрешение процесса литографии.

**Ключевые слова:** электронно-лучевая литография, метод Монте-Карло, металлорганические резисты.

## Введение

Электронно-лучевая литография является важным способом создания различных микро- и наноструктур, как для исследовательских задач (МЭМС, НЭМС, микрофлюидика, фотоника и др.),

так и при производстве изделий микроэлектроники (изготовление фотошаблонов). Развитие данных областей ставит новые задачи в области материаловедения и литографии, и в частности разработка новых резистивных материалов. Среди перспективных направлений развития в области литографического материаловедения являются гибридные (металлорганические) резисты. Данный тип резистов является сравнительно новым и гораздо менее изученным. В силу специфики свойств данного типа резистов, возникают вопросы связанные с моделированием их поведения под действием электронного луча, связанные с возможностью протекания процессов массопереноса как результат образования летучих веществ из материала резиста. Подобная задача актуальна и для т.н. самопроявляющихся
резистов, а также для процессов криолитографии.

## Постановка задачи

В рамках данной работы рассматривается модельная задача о виде функции рассеяния энергии электронов луча, в объеме материала, в зависимости от начальной заданной геометрии слоя материала. Данный вопрос является одной из сторон проблемы моделирования резистов металлоорганической. Особенность таких резистов связана с возможностью протекания химических реакции, под действием электронного луча, при которых часть образующихся веществ уходит из слоя экспонированного резиста. При этом полная задача моделирования таких резистов должная включать в себя решение нескольких вопросов, а именно: 1) Учет кинетики химических реакций и процессов массопереноса (для толстых слоев резиста); 2) Учет изменения локального состава и рассеивающих характеристик, измененного материала; 3) Учет изменения локальной геометрии слоя резиста, под действием электронного луча. В рамках данной работы показаны результаты рассмотрения роли последнего из перечисленных факторов.

Моделирование рассеяния электронного луча производилось численно методом Монте-Карло, с использованием пакета программ Nebula (версия 1.0.2), доступного в виде исходных кодов. Задание и расчет геометрических моделей, а также обработка промежуточных результатов производилась с использованием оригинальных программ. Задание состава и расчет свойств материалов производилось с использованием программного пакета cstool —

являющегося частью программного пакета симулятора Nebula, а также с использованием программного пакета elsepa/elscata. В качестве модели резиста был выбран материал с плотностью 1,87 г/см$^3$, и элементным составом: C (31,4 % мас.), H (2,9 % мас.), N (3,4 % мас.), O (60,1 % мас.), Al (2,2 % мас.). Выбор данного состава и параметров производился исходя из среднего состава некоторых известных металлполимерных комплексов.

В качестве модельных вариантов геометрии использовался однородные по толщине слои указанного выше резиста на кремниевой подложке (до 250 нм) — в качестве референсного случая, а также слои этого же резиста с одиночной прямолинейной канавкой различными параметрами глубины и ширины профиля в виде функции нормального распределения. Плотность потока первичных электронов луча задавалась во всех случаях в виде функции от координат на плоскости, с нормальным распределением вдоль координаты, задающей также глубину профиля внешней (на границе с вакуумом) поверхности резиста.

В качестве основного результата было найдено, что наличие в слое резиста углубления с шириной сопоставимой или большей, чем ширина распределения плотности тока по сечению электронного луча, приводит к достаточно существенному изменению характеристик функции рассеяния — до десятков процентов по абсолютной величине плотности диссипации энергии электронами для наиболее интересных с практической точки зрения случаях. Данные изменения наблюдаются в первую очередь на ближнем и среднем расстоянии (до десятков и первых сотен нанометров) от центральной линии формируемого профиля резиста. Т.к. данная область является определяющей с точки зрения процессов субмикронной и нанолитографии, можно говорить о наличии для рассматриваемых резистов характерной особенности в процессах рассеяния электронов. С практической точки зрения, полученные результаты позволяют говорить о возможности достижения существенного эффекта самолокализации воздействия электронного луча для рассматриваемых типов резистов.

## Выводы

В работе выполнено численное моделирование процессов экспонирования модельных слоев резиста для процесса электронно-лучевой литографии с учетом различной локальной геометрии слоя. Полученные результаты позволяют говорить о существенной

роли рассмотренного фактора на пространственные характеристики функций рассеяния энергии электронами луча.

## Список использованных источников

1. Van Kessel L. et al. — Nebula: Monte Carlo simulator of electron-matter i nteraction // SoftwareX. — 2020. — Vol. 12. — No.100605. — P. 6.

## SIMULATION OF A LOCAL GEOMETRY OF RESISTS ON ELECTRON BEAM SCATTERING

***D.N. Zubov, V.B. Yakovlev***

**Abstract.** In this work, some results of numerical modeling of electron beam scattering in resists layers are presented. The main issue addressed in this paper is influence of resist layer local thickness changing, during e-beam exposition.

**Keywords:** e-beam lithography, Monte-Carlo modeling, geometry factor, self-developing resists.

УДК 536.2.01, 536.21
https://doi.org/10.29003/m4776.MMMSEC-2025/74-77

# УСОВЕРШЕНСТВОВАННАЯ МОДЕЛЬ ОТРАЖЕНИЯ ФОНОНОВ ОТ ПЕРИОДИЧЕСКИ ШЕРОХОВАТЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ И ЕЁ ПРИМЕНЕНИЕ К РАСЧЁТУ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

***Инь Фэй,***
*аспирант,*
*Yinfei0426@outlook.com*
***Лю Шисян,***
*аспирант*
*lyu@bmsstu.ru*
***Хвесюк Владимир Иванович,***
*д.т.н., профессор,*
*khvesyuk@bmstu.ru*

*МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва*

**Аннотация.** В работе представлена обновлённая модель для описания взаимодействия фононов с периодически шероховатой границей образца, в которой учтена фазовая интерференция и локальный наклон поверхности. Введенные поправки позволяют оценить вероятность зеркального отражения в зависимости от длины волны, амплитуды и периода шероховатости, а также угла падения.

**Ключевые слова:** модель зеркального отражения, волна, теплопроводность, шероховатость, моделирование методом Монте-Карло.

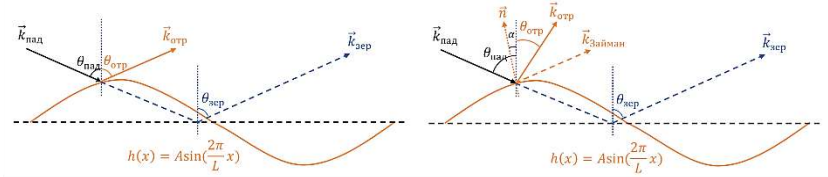
## Введение

Шероховатость границ существенно влияет на теплоперенос в наноструктурах и определяет соотношение между зеркальным и диффузным отражением фононов [1]. Для количественного описания влияния шероховатости на рассеяние на границе введен параметр зеркального отражения: Займан [2] связал параметр его с средне-квадратично шероховатостью $\sigma_{rms}$, а Соффер [3] учёл углы падения. Классическая модель Займана–Соффера базируются на допущении о нулевой длине корреляции $l_{cor}$ («периода» шероховатости) и не учитывают особенности морфологии поверхности (в частности, структурированность поверхности). Хотя последующие работы [4] показали зависимость $p$ от $\sigma_{rms}$ и $l_{cor}$, во многих исследованиях параметр зеркального отражения $p$ по-прежнему рассматривается как константа.

Результаты экспериментов [5] выявили немонотонную зависимость теплопроводности от амплитуды шероховатости, обусловленную волновой интерференцией, что не учитывают корпускулярные модели. В связи с этим классическая модель Займан–Соффера неприменима к периодическим структурам (т.е. при конечной длине корреляции). В данной работе предлагается усовершенствованная модель, основанная на синусоидальном профиле поверхности, учёте фазовой интерференции и локального наклона поверхности. Величина теплопроводности получена путем дальнейшего интегрированная методом Монте-Карло.

## Методика расчета

Профиль поверхности задаётся синусоидальной функцией $h(x) = A\sin(2\pi x/L)$ , где $A$ — амплитуда, а $L$ — длина корреляции (период шероховатости), в данном исследовании периодом шероховатости. Классическая модель Займана – Соффера учитывает только амплитуду, игнорируя влияние периода. При явном учёте периода необходимо рассматривать локальный наклон поверхности. Так относительно локальной нормали угол отражения равен углу падения, но относительно вертикальной оси он изменяется в зависимости от координаты (см. рис. 1а).




(а) (б)

Рисунок 1 — (а) расширенная модель Займана – Соффера, основанная на периодически шероховатой границе; (б) обновлённая всеобъемлющая модель, учитывающая как период, так и амплитуду шероховатости

Обновлённая модель учитывает как фазовый сдвиг $\Delta\varphi(x) = 4\pi h(x)\cos\theta/\lambda$ , так и отклонение направления отражённой волны (см. рис. 1б). Вероятность зеркального отражения вычисляется как

$$p = |A_{ког}|^2 = \left|\frac{1}{L}\int_0^L e^{i\Delta\varphi}\, e^{i(\vec{k}_{отр}(x)-\vec{k}_{зер})\cdot\vec{r}(x)}\right|^2 \qquad (1)$$

где $A_{ког}$ — когерентная амплитуда отражения, $\vec{k}_{отр}(x)$ — отражённый волновой вектор, $\vec{k}_{зер}$ — волновой вектор, отраженный зеркально; $\vec{r}(x)$ — локальная координата профиля поверхности. Таким образом, модель описывает не только фазовый сдвиг, но и характер отклонения отражённой волны. Кроме того, при определенных условиях поверхность может блокировать отражение, если угол падения меньше локального угла наклона.

Для оценки влияния параметра зеркального отражения $p$ не теплопроводность применяется интегрирование методом Монте-Карло. Так при взаимодействии с границей фонон отражается зеркально с вероятностью $p$ либо диффузно с вероятностью $1-p$. Это позволяет напрямую связать морфологию периодической шероховатости с теплопроводностью наноструктур [6].

## Выводы

В работе представлена усовершенствованная модель отражения фононов от периодически шероховатых поверхностей, учитывающая фазовую интерференцию и локальный наклон поверхности. Показано, что рост амплитуды шероховатости подавляет зеркальное отражение, а при коротких длинах волн проявляются интерференционные колебания. Предложенная модель может

служить альтернативой модели Займана-Соффера для расчётов теплопроводности наноструктур с периодическими шероховатыми поверхностями.

## Список использованных источников


1. Maurer L., Mei S., Knezevic I. Rayleigh Waves, Surface Disorder, and Phonon Localization in Nanostructures // Phys. Rev. B, 2016. Vol. 94, no. 4, 045312.
2. Ziman J.M. Electrons and Phonons: The Theory of Transport Phenomena in Solids. Oxford: Oxford University Press, 2001. 554 p.
3. Soffer S.B. Statistical Model for the Size Effect in Electrical Conduction // Journal of Appl. Phys., 1967. Vol. 38, no. 4, pp. 1710–1715.
4. Liu S., et al. Quantifying Particle and Wave Effects in Phonon Transport of Pillared Graphene Nanoribbons // Int. J. Therm. Sci., 2025. Vol. 217, 110067.
5. Chen H., et al. Rough Boundary Effect in Thermal Transport: A Lorentz Gas Model // Phys. Rev. E, 2018. Vol. 98, no. 3, 032131.
6. Yin F., et al. An Enhanced Framework for Wave Reflection from a Periodically Rough Boundary // Physica B: Condens. Mat., 2025. Vol. 667, 417743.


# AN IMPROVED MODEL OF PHONON REFLECTION FROM PERIODICALLY ROUGH SURFACES AND ITS APPLICATION TO THERMAL CONDUCTIVITY CALCULATION


***F. Yin, S. Liu, V.I. Khesyuk***



**Abstract.** The paper presents an updated model for describing specular reflection from a periodically rough boundary , which takes into account phase interference and the local slope of the surface. The introduced assumptions allow us to estimate the probability of specular reflection depending on the wavelength, amplitude and period of the roughness, as well as the angle of incidence.



**Keywords:** specular reflection model, wave, thermal conductivity, roughness, Monte Carlo simulation.

УДК 539.21+537.226.4:004.852
https://doi.org/10.29003/m4777.MMMSEC-2025/78-80

# МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ПОЛЯРИЗАЦИИ ОРТОРОМБИЧЕСКОГО ОКСИДА ГАФНИЯ

***Кадыров Артур Дамирович,***
*студент[1], младший научный сотрудник[2],*
*akadyrov@niime.ru*
***Резник Александр Анатольевич,***
*аспирант[1], научный сотрудник[2],*
*alreznik@niime.ru*
***Резванов Аскар Анварович,***
*к.ф.-м.н., начальник лаборатории[2],*
*arezvanov@niime.ru*

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

**Аннотация.** В работе выполняется обучение межатомного CoreShell потенциала для молекулярной динамики на основе DFT расчетов для оксида гафния, с последующим моделированием процесса динамики поляризации функционального слоя FeRAM с помощью полученного потенциала.

**Ключевые слова:** молекулярная динамика, DFT, обучение потенциала, FeRAM.

## Введение

Одна из проблем развития сегнетоэлектрической энергонезависимой памяти (FeRAM) — интеграция в существующую КМОП технологию. Поэтому исследуются различные материалы, у которых не возникает проблем с интеграцией, масштабированием, и которые имеют большое значение остаточной поляризации. Одним из таких материалов является легированный оксид гафния, в частности — цирконием [1]. Кроме того, актуальна задача моделирования контакта функционального слоя FeRAM и ReRAM с различными электродами, например, с нитридом титана, ввиду сильного влияния границы раздела на характеристики элемента хранения. Поэтому, в качестве первого приближения, а также верификации способа, проводится расчет динамики поляризации чистого орторомбического оксид гафния без примесей. После чего, в дальнейшем планируется последующее усложнение модели с добавлением легирующих атомов, а также самого контакта. Для

моделирования выбран метод молекулярной динамики, потому что он позволяет рассматривать системы с большим числом атомов, что дает возможность более прецизионно контролировать концентрацию легирующей примеси, а также не так сложен в вычислительном плане, как квантово-механический подход.

## Обучение межатомного потенциала для молекулярной динамики

Для молекулярной динамики использовался программный пакет «LAMMPS» [2]. При этом для работы молекулярной динамики необходим межатомный потенциал для конкретного соединения. Однако электрические свойство довольно сложно описать, так как молекулярная динамика не работает с электронами напрямую, поэтому используется модель потенциала — CoreShell [3], которая позволяет ввести в рассмотрение электроны. Однако остается вопрос обучения такого потенциала, подбора параметров для оксида гафния.

При этом, обучение должно осуществляться на некотором датасете (набор различных конфигураций кристаллической структуры с рассчитанной потенциальной энергией). Для создания набора таких данных использовались первопринципные расчеты в Quantum ESPRESSO [4]. В качестве псевдопотенциала выбран тот, который максимально точно повторяет экспериментальные данные кристаллической решетки $Hf_{0.5}Zr_{0.5}O_2$ (HZO).

После чего потенциал был обучен благодаря реализованной программе на языке «C++», с использованием обратного распространения ошибки для градиентного спуска с алгоритмом адаптивной оценки момента (ADAM), совмещенного с методом Нелдера-Мида для решения проблемы разного масштаба параметров потенциала.

Впоследствии на основе полученного потенциала был получен гистерезис поляризации от электрической напряженности для оксида гафния.

## Выводы

Был обучен межатомный потенциал CoreShell для оксида гафния на основе DFT вычислений, с помощью программы на языке C++, использующую алгоритмы градиентного спуска и Нелдера-Мида. А также молекулярное моделирование динамики поляриза-

ции функционального слоя FeRAM на основе оксида гафния, с помощью обученного потенциала.

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

*Исследование выполнено в рамках гранта Российского научного фонда №23-91-06003.*

## Список использованных источников

1. Islamov D.R. et al. Identification of the nature of traps involved in the field cycling of $Hf_{0.5}Zr_{0.5}O_2$-based ferroelectric thin films // Acta Materialia, 2019. Vol. 166, pp. 47–55.
2. Thompson A.P. et al. LAMMPS-a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales // Computer Physics Communications, 2022. Vol. 271, p. 108171.
3. Mitchell P.J., Fincham D. Shell model simulations by adiabatic dynamics // Journal of Physics: Condensed Matter, 1993. Vol. 5, no. 8, p. 1031.
4. Giannozzi P. et al. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials // Journal of physics: Condensed matter, 2009. Vol. 21, no. 39(395502).

# MOLECULAR MODELING OF THE POLARIZATION DYNAMICS OF A FERAM MEMORY CELL BASED ON HAFNIUM OXIDE

***A.D. Kadyrov, A.A. Reznik, A.A Rezvanov***

**Abstract.** The paper provides training of the interatomic CoreShell potential for molecular dynamics based on DFT calculations for hafnium oxide, followed by modeling the process of dynamic polarization of the FeRAM cell using the obtained potential.

**Keywords:** molecular Dynamics, DFT, training potential, FeRAM.

УДК 538.9
https://doi.org/10.29003/m4778.MMMSEC-2025/81-83

# ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕПЛОЁМКОСТИ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЛИНЕЙНОГО И НЕЛИНЕЙНОГО ДИСПЕРСИОННЫХ СООТНОШЕНИЙ

***Косякова Александра Васильевна,***
*студент,*
*lessandrakas@gmail.com*
***Хвесюк Владимир Иванович,***
*д.т.н., профессор,*
*khvesyuk@bmstu.ru*

*МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва*

**Аннотация.** В работе проведен анализ результатов расчёта теплоёмкости квантовых точек с использованием модели Дебая (линейной дисперсии) и нелинейного дисперсионного соотношения в области температур от 2 до 300 К. Подтверждено существенное влияние морфологии квантовой точки на теплоемкость.

**Ключевые слова:** квантовые точки, дисперсионное соотношение, модель Дебая.

## Введение

Для моделирования процесса теплопереноса в твёрдотельных наноструктурах можно выделить два диаметрально противоположных подхода, получивших наиболее широкое распространение. Первый — метод теории упругих волн, подразумевает линейную зависимость частоты колебаний упругих волн ω от волнового вектора k, что позволяет существенно упростить расчёт. Второй — метод теории функционала плотности (DFT) — статистическая теория, в рамках которой используется нелинейное дисперсионное соотношение, что позволяет получить значительно более точные результаты, однако требует более сложных расчётов и существенных вычислительных мощностей.

В реальных структурах дисперсия существенно нелинейная, причем это особенно заметно именно в коротковолновом диапазоне (в области больших значений волнового вектора k). Более того, для квантовых точек это играет ключевую роль, т.к. ввиду наличия размерного ограничения наблюдается дискретизация энергий фононов и разрешенных частот, поскольку между атомами решётки должно укладываться целое число полуволн.

## Анализ результатов расчета

Во-первых, проведён расчёт теплоёмкости квантовой точки кремния размера 20×20×20 атомов (рис. 1), в основе которого лежит суммирование вкладов всех допустимых мод с использованием линейной и нелинейной модели дисперсии [1]. Для линейного дисперсионного соотношения были проведены расчёты с использованием одномодовой модели (средней групповой скорости), так и с учётом двумодовой модели (разных значений групповых скоростей для продольных и поперечных волн). Было выявлено, что расхождение между значениями теплоемкости увеличивается с уменьшением температуры.

Во-вторых, анализ зависимости теплоемкости от температуры для квантовых точек с размерами 10×10×10 и 30×30×30 атомов (рис. 2) показал, что с ростом числа атомов (т.е. с ростом характерного размера квантовой точки) наблюдается стремление значений теплоемкости к значению для макроскопического тела. Результаты согласуются с известным фактом об уменьшении роли квантово-размерных эффектов с увеличением размеров наноструктуры.

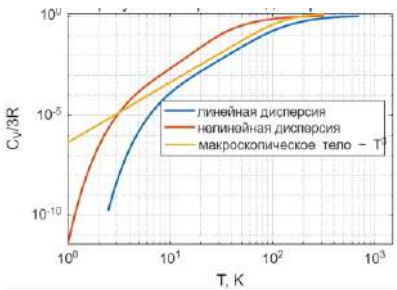



Рисунок 1 — Теплоёмкость квантовой точки кремния 20×20×20 при использовании разных дисперсионных соотношений

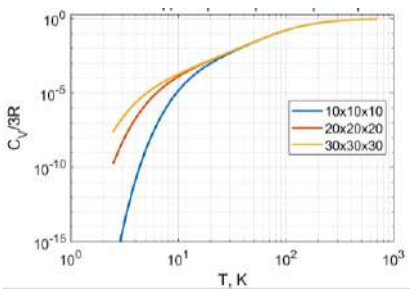



Рисунок 2 — Теплоёмкость квантовых точек разного размера с использованием линейного дисперсионного соотношения

Также, согласно рис. 2, при температурах менее 140 К наблюдается существенное (более 25%) расхождение между теплоемкостями различных квантовых точек. Данное явление объясняется учётом граничных условий, так как из-за конечности размера квантовой точки максимально допустимая длина волны фононов (минимальная частота) оказывается значительно выше, чем в макроскопическом теле. Следовательно, при низких температурах, где

основной вклад в теплоёмкость приходится на низкочастотные моды, значение теплоемкости для квантовых точек должно оказываться значительно меньше, чем для макроскопического тела [2]. Однако в [3] установлено возникновение дополнительных колебательных мод с низкими частотами на свободной границе квантовой точки, что значительно увеличивает теплоёмкость по сравнению с макроскопическим телом.

Модель теории упругих волн не может учесть наличие колебаний на границах точки, что приводит к более низким значениям теплоёмкости и соответствует так называемым «фиксированным» границам. Например, наличию подложки или матрицы, где располагается квантовая точка. Однако, теория функционала плотности позволяет учесть эти колебания, что соответствует случаю свободной границы. С увеличением размеров структуры влияние данных колебаний значительно снижается, что приводит к зависимости теплоёмкости от температуры, аналогичной макроскопическому телу.

## Выводы

Теплоемкость квантовых точек по модели линейной и нелинейной дисперсий без учета кванто-размерных ограничений дают достаточно точный результат в области температур 200–300 К. Однако при меньших температурах следует учитывать влияние размеров и конфигурации квантовых точек, поскольку это оказывает значительное влияние на теплоемкость.

## Список использованной литературы

1. Mitin V.V., Sementsov D.I., Vagidov N.Z. Quantum mechanics for nanostructures. — Cambridge : Cambridge University Press, 2010. 482 p.

2. Ilic D.I., et al. Phonon Contribution in Thermodynamic Properties of Single Quantum Dot // Acta Physica Polonica A, 2019. V. 136, N. 1. P. 49–54.

3. Ren S.F., Cheng W. Calculations of surface effects on phonon modes and Raman intensities of Ge quantum dots // Phys. Rev. B, 2002. N. 66. P. 205328.

# DETERMINING THE HEAT CAPACITY OF QUANTUM DOTS USING LINEAR AND NONLINEAR DISPERSION RELATIONS

***A.V. Kosyakova, V.I. Khvesyuk***

**Abstract.** The work is devoted to the analysis of calculation of the heat capacity of quantum dots using the Debye model (linear dispersion) and the nonlinear dispersion relation in the temperature range from 2 to 300 K. The significant influence of the morphology of a quantum dot on the heat capacity is confirmed.

**Keywords:** quantum dots, dispersion relation, Debye model.

УДК 536.2.01, 536.21
https://doi.org/10.29003/m4779.MMMSEC-2025/84-86

# ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НАНОСТРУКТУР С ПОМОЩЬЮ НЕЙРО-ЭВОЛЮЦИОННОГО ПОТЕНЦИАЛА

***Лю Шисян, аспирант,***
*lyu@bmstu.ru*
***Баринов Александр Алексеевич,***
*к.т.н., доцент*
*barinov@bmstu.ru*
***Хвесюк Владимир Иванович,***
*д.т.н., профессор,*
*khvesyuk@bmstu.ru*

*МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва*

**Аннотация.** В работе показаны ключевые особенности и преимущества применения нейро-эволюционного потенциала (NEP) для исследования теплофизических свойств кремниевых наноструктур. NEP обеспечивает точный и эффективный расчёт теплоёмкости и фонон-фононного взаимодействия напрямую для наноструктур, что позволяет корректно реализовать подход, основанный на решении транспортного уравнения Больцмана.

**Ключевые слова:** нейро-эволюционный потенциал, теплоёмкость, фононное рассеяние, теплопроводность, молекулярная динамика.

## Введение

Теория функционала плотности (DFT) сегодня является одним из самых точных инструментов для атомного моделирования. Однако её высокая вычислительная стоимость ограничивает применение в системах с большим числом атомов. В противоположность этому, эмпирические потенциалы обеспечивают высокую скорость, но страдают от низкой точности из-за ограниченности функциональных форм и малого числа параметров.

В последние годы интенсивно развиваются машинно-обученные межатомные потенциалы, сочетающие точность *ab initio* методов с эффективностью эмпирических моделей. Среди них нейро-эволюционный потенциал (NEP) [1], основанный на стратегиях нейроэволюции, продемонстрировал высокую эффективность, в том числе в задачах теплопереноса, благодаря оптимальному сочетанию точности и производительности. NEP обучается

на данных DFT, что позволяет достигать близкой к *ab initio* точности при вычислительных затратах, сравнимых с эмпирическими подходами, и тем самым моделировать процессы от нанометрового до микрометрового масштаба.

Недавно созданный универсальный потенциал NEP-89 («большая атомная модель») [2] охватывает 89 элементов и их неорганические и органические соединения, будучи обученным на обширном и разнообразном наборе данных. Благодаря универсальности NEP-89 может заменить множество специализированных потенциалов и стать важным инструментом для исследования теплопереноса.

## Моделирование и результаты

Во-первых, проведены расчёты кристаллической динамики трёх типов кремниевых наноструктур — тонких плёнок, нанопроволок и квантовых точек — с использованием модели NEP для кремния, заранее обученной на данных DFT-расчета. Проанализирована зависимость удельной теплоёмкости от размеров и температуры в низко- и среднетемпературной области [3]. Впервые выявлена зависимость локального показателя степени $n$ от температуры в соотношении $C_v \sim T^{n(T)}$. Существенное сокращение требуемых вычислительных ресурсов для проведения расчетов теплоемкости с использованием NEP открывает новые возможности для моделирования наноструктурированных материалов любой морфологии и размера.

Во-вторых, на основе NEP-потенциала рассчитаны ангармонические свойства наноструктур, в частности трёхмерные силовые константы, которые необходимы для определения времени релаксации при фонон-фононных процессах. В отличие от предыдущих работ, ограничивавшихся расчётами времен релаксации для объёмных материалов с последующей корректировкой граничных эффектов по правилу Маттиссена, в данном исследовании времена релаксации получены непосредственно для самих наноструктур, что позволяет более точно реализовать BTE-подход для наноструктурированных систем. Высокая эффективность NEP открывает принципиально новые возможности для учета квантово-размерного эффекта для моделирования фононного транспорта в наносистемах.

В-третьих, универсальный потенциал NEP-89, обученный на обширном и разнообразном наборе данных, оказывается эффек-

тивным инструментом при моделировании сложных систем, описание которых традиционными эмпирическими моделями часто выполняется недостаточно корректно (в частности, из-за неполноты данных/параметров при описании системы). К таким объектам относятся аморфные материалы и сверхрешётки. В рамках молекулярно-динамических расчётов использование GPU-распараллеливания позволяет напрямую вычислять теплопроводность. При этом NEP-89 позволяет формировать поверхность потенциальной энергии атомных колебаний, что обеспечивает сочетание высокой эффективности с точностью, близкой к *ab initio* методам. Также отметим, что при моделировании в низкотемпературной области были введены квантовые поправки, что позволило преодолеть ограничения классической молекулярной динамики и обеспечить достоверное описание процессов теплопереноса.

## Выводы

Применение нейро-эволюционного потенциала (NEP) для наноплёнок, нанопроволок и квантовых точек из кремния открывает возможность проводить расчет тепловых свойств (гармонических и ангармонических) с эффективностью, на порядки превосходящей традиционные методы расчета.

## Список использованных источников

1. Fan Z. et al. Neuroevolution machine learning potentials: Combining high accuracy and low cost in atomistic simulations and application to heat transport. Phys. Rev. B, 2021. Vol. 104, no. 10, p. 104309. DOI: 10.1103/PhysRevB.104.104309

2. Liang T. et al. NEP89: Universal neuroevolution potential for inorganic and organic materials across 89 elements. ArXiv, 2025. DOI: 10.48550/arXiv.2504.21286

3. Liu S. et al. Temperature dependence of specific heat capacity of nanostructures via neuroevolution machine-learned potential // J. Appl. Phys., 2025. Vol. 138, no. 10, p. 104301. DOI: 10.1063/5.0284002.

# STUDY OF THERMOPHYSICAL PROPERTIES OF NANOSTRUCTURES USING THE NEUROEVOLUTION POTENTIAL

***S. Liu, A.A. Barinov, V.I. Khesyuk***

**Abstract.** This work demonstrates the application of the neuroevolution potential (NEP) for studying the thermophysical properties of Silicon nanostructures. NEP provides accurate and efficient calculations of heat capacity and phonon scattering directly for nanostructures, enabling a more consistent implementation of the Boltzmann transport equation approach.

**Keywords:** neuroevolution potential, heat capacity, phonon scattering, thermal conductivity, molecular dynamics.

УДК 533.922, 533.924, 533.932
https://doi.org/10.29003/m4780.MMMSEC-2025/87-90

# МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ ПЛАЗМОХИМИЧЕСКОГО ТРАВЛЕНИЯ ПОЛИКРЕМНИЯ В СМЕСИ HBR/CL$_2$/AR С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

***Оксаниченко Федор Владимирович,***
*младший научный сотрудник*[1, 2],
*foksanichenko@niime.ru*
***Ефремов Александр Михайлович,***
*д-р хим. наук, профессор, руководитель лаборатории*[2],
*aefremov@niime.ru*

[1] *Московский физико-технический институт, Москва, Россия*

[2] *АО «НИИМЭ», Зеленоград, Россия*

**Аннотация.** Предложена модель машинного обучения (ML), основанная на сочетании полиномиальной регрессии и четырехэтапной предварительной обработки профиля травления, позволяющая прогнозировать форму профиля на основе набора управляющих параметров. Описана методика формирования оптимального набора данных для обучения, а также сгенерирован датасет с использованием физико-химической модели травления поликремния в плазме смеси HBr/Cl2/Ar. Проведено исследование зависимостей параметров профиля травления от управляющих параметров процесса.

**Ключевые слова:** индуктивно-связанная плазма, плазмохимическое травление, моделирование ПХТ, машинное обучение, цифровой двойник.

## Введение

В настоящее время, одной из ключевых операций, используемых при производстве интегральных микросхем (ИМС) в индустрии микроэлектроники является «сухая» (без использования жидкостных реагентов) отчистка и структурирование поверхности кремниевых пластин и функциональных слоёв различной природы [1]. Основным инструментом здесь является плазмохимическое травление (ПХТ). В частности, для формирования поликремниевого затвора МДП-транзистора используют ПХТ в смеси HBr/Cl$_2$/Ar.

Большое количество управляющих параметров ПХТ (давление, вкладываемая мощность, состав смеси и др.) обуславливает сложность поиска оптимального режима технологического

процесса эмпирическим путем. Определенный прогресс может быть достигнут при использовании физико-химических моделей ПХТ [2,3,4], которые, однако, отличаются сложностью математического аппарата и высокими временными затратами на один вариант расчета. Целью нашей работы являлось создание модели машинного обучения (ML), которая на основе результатов физико-химической модели позволит определять вид профиля травления при различных комбинациях управляющих параметров ПХТ.

## Моделирование плазмохимического травления

В рамках нашей работы использовалась физико-химическая модель, представляющая комбинацию двух взаимосвязанных модулей — «плазма» и «поверхность». Для определения параметров и состава плазмы была разработана 0-мерная самосогласованная модель, основанная на совместном решении уравнений химической кинетики, уравнения квазинейтральности и уравнения баланса вкладываемой мощности. При построении алгоритма модели использовалась общепринятая для индукционных разрядов низкого давления система допущений: а) Максвелловская функции распределения электронов по энергиям; б) режим реактора идеального смешения (РИС); и в) квазистационарное приближение. Входными параметрами модуля «плазма» являлись вкладываемая мощность ($W$) и мольные доли компонентов смеси ($y_{Ar}, y_{Cl_2}$) при постоянном давлении, а выходными — потоки химически и энергетически активных частиц. Для расчёта профиля травления использовалась модель клеточного автомата [4]. При взаимодействии активных частиц плазмы с поверхностью поликремния учитывались химическое травление по спонтанному и ионно-стимулированному механизмам, физическое распыление и переосаждение продуктов реакции. Детальное описание модулей приведено в нашей предыдущей работе [2]. В качестве входных параметров выступали потоки частиц, передаваемые из модуля «плазма», величина отрицательного смещения ($U$) на обрабатываемой поверхности и время процесса ($T$). Верификация модуля «плазма» была проведена при сравнении результатов расчёта данными зондовой диагностики плазмы. Корректность модуля «поверхность» подтверждалась сравнением экспериментальных и расчетных скоростей травления поликремния для 20 различных комбинаций начальных параметров.

## Генерация датасета и обучение ML-модели

С помощью вышеописанной физической модели был сгенерирован датасет, состоящий более чем из $10^6$ экспериментов — пар: управляющие параметры + результирующий профиль. Для генерации датасета использовалась комбинация сеточного семплирования (для повышения точности модели в краевых ситуациях) и рандомного семплирования (для уменьшения общего числа вызовов функции и повышения качества датасета).

Для предсказания формы профиля проводилась 4-ступенчатая подготовка данных. Построение ломанной линии профиля, усреднение кривой профиля для устранения шумов, параметризация профиля по декартовым координатам, дискретизация получившихся функций (по 200 точек на каждую из них), преобразование получившихся точек в совмещённый вектор длины 400 (XY). Вышеописанное преобразование обратимо, что позволит восстанавливать форму профиля по результатам работы модели.

Для предсказания вектора XY использовался метод полиномиальной регрессии, заключающийся в добавлении к линейным членам $(y_{Ar}, y_{Cl_2}, W, T, U)$ полиномиальные члены вида $W \cdot T$, $U^2$, $W \cdot y_{Ar} \cdot T$, степень которых не превышает заданную. В качестве ошибки использовалось среднеквадратичное отклонение, которое показывал ошибку определения профиля в нанометрах.

*Работа выполнена при поддержке гранта РНФ «Атом-О» № 23-91-06002.*

## Список использованных источников

1. Красников Г.Я. Конструктивно-технологические особенности субмикронных МОП транзисторов – Москва: ТЕХНОСФЕРА, 2011.

2. Оксаниченко Ф.В., Ефремов А.М. Исследование параметров плазмы и кинетики реактивно-ионного травления поликремния в смеси $Cl_2$/Ar // Наноиндустрия, 2025. — Т. 18. — №. S11. — P. 835–847.

3. Chung. S.-Y. et al. Spatially averaged global model of HBr/$Cl_2$ inductively coupled plasma discharges. // Physics of Plasma, 2024. Vol. 31, no. 5, pp. 053502.

4. Mahorowala A., Sawin H. Etching of polysilicon in inductively coupled $Cl_2$ and HBr discharges. II. Simulation of profile evolution using cellular representation of feature composition and Monte Carlo computation of flux and surface kinetics // J. Vac. Sci. Technol. 2002. B, 20, pp. 1064.

MODELING AND OPTIMIZATION OF PLASMOCHEMICAL ETCHING OF POLYSILICON IN AN HBR/$CL_2$/AR MIXTURE USING MACHINE LEARNING METHODS

***F. Oksanichenko, A. Efremov***

**Abstract.** A machine learning model based on a combination of polynomial regression and four-stage preprocessing of the etching profile has been proposed, which makes it possible to predict the shape of the etching profile based on a set of control parameters. A method for forming an optimal data set for training the model described above was described and a dataset is generated based on it using a complex model of polysilicon etching in plasma of an HBr/$Cl_2$/Ar mixture. The ML model was trained, and study of the dependence of profile parameters on control parameters was carried out.

**Keywords:** inductively coupled plasma, plasma chemical etching, PE modeling, machine learning, digital twin.

УДК 537.611.45
https://doi.org/10.29003/m4781.MMMSEC-2025/90-93

# РАСЧЁТ СПЕКТРА СПИНОВЫХ ВОЛН В ТОНКОЙ АНТИФЕРРОМАГНИТНОЙ ПЛЁНКЕ

***Петрова Анастасия Юрьевна***,
*младший научный сотрудник*[1,2],
*nastya_mitrofanova_2000@mail.ru*
***Сафин Ансар Ризаевич***,
*д.ф.-м.н., доцент*[1,3],
*arsafin@gmail.com*
***Кравченко Олег Викторович***,
*научный сотрудник*[4],
*okravchenko@frccsc.ru*

[1] *ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН, г. Москва*
[2] *МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва*
[3] *МЭИ (ТУ), г. Москва*
[4] *ФИЦ ИУ РАН, г. Москва*

**Аннотация.** В рамках проведённого исследования получены аналитические выражения для дисперсионных соотношений спиновых волн, распространяющихся в антиферромагнитной плёнке. Полученные выражения позволяют определять резонансные частоты в зависимости от волнового вектора и параметры магнитной системы. Для верификации аналитической модели выполнено сравнение с результатами численного моделирования, показавшее их согласие.

**Ключевые слова:** спиновая волна, антиферромагнитная плёнка, магнитостатическое приближение, $\sigma$-модель.

## Введение

Спиновые волны (СВ) рассматриваются в качестве перспективной платформы для создания устройств передачи и обработки информации следующего поколения, что обусловлено их потенциально низким энергопотреблением и возможностью миниатюризации. В начале XXI века было установлено, что антиферромагнетики (АФМ) обладают рядом преимуществ по сравнению с ферромагнетиками, такими как существенно более высокие резонансные частоты и устойчивость к внешним магнитным полям. Это стимулировало значительный интерес к исследованию динамики СВ в АФМ, однако теоретическое описание их спектра остаётся сложной и актуальной задачей. Целью настоящей работы является расчёт дисперсионных соотношений и определение спектра объёмных (толщинных) мод спиновых волн, распространяющихся в плёнке антиферромагнетика со скошенной анизотропией.

## Методы исследования

Спиновая динамика в АФМ плёнке толщины $d$ без учёта затухания описывается $\sigma$–моделью, полученной из уравнений Ландау – Лифшица для намагниченностей $M_{1,2}$ двух подрешёток АФМ

$$l \times \left[\frac{d^2 l}{dt^2} - 2\gamma \left[\frac{dl}{dt}, H_{\text{eff}}\right) - \gamma \left[l, \frac{dH_{\text{eff}}}{dt}\right) - \omega_{\text{ex}}\omega_{\text{s}} A_{\text{ex}}^2 \Delta l + \frac{\partial W_0\left(H_{0,\text{ex,e,h,DMI,d}}\right)}{\partial l}\right) = 0, \tag{1}$$

$$H_{\text{eff}} = H_0 + [H_{\text{DMI}}, l) + H_{\text{d}},$$

где вектор Нееля $l = (M_1 - M_2)/(2M_{\text{s}})$, $W_0$ зависит от внешнего постоянного поля, полей обмена, анизотропии, взаимодействия Дзялошинского – Мория и размагничивания, частоты $\omega_{\text{ex,e,h,DMI,0,d}} = \gamma H_{\text{ex,e,h,DMI,0,d}}$, $\gamma$ — гиромагнитное отношение, $\omega_{\text{s}} = \gamma M_{\text{s}}$, $M_{\text{s}} = |M)$ — намагниченность насыщения, и $A_{\text{ex}}$ — константа неоднородного обмена.

Метод, предложенный в работе Калиникоса [1], основан на аппарате тензорных функций Грина, что сопряжено со значительной математической сложностью. Подход, представленный Ивановым [2], в рамках данной задачи приводит к необходимости решения системы уравнений с матрицей $8 \times 8$, что также является

вычислительно сложным. В связи с этим, в качестве базового был избран метод Стампса [3], предложенный для исследования распространения СВ в ферромагнетиках без учёта неоднородного обмена. Запишем граничные условия и уравнения магнитостатики

$$\begin{cases} \left.\dfrac{d\delta l_y}{dz}\right|_{z=\pm d/2} = 0, \\ \left.\dfrac{d\delta l_z}{dz}\right|_{z=\pm d/2} = 0; \end{cases} \qquad \begin{cases} \left.\psi^{\text{in}}\right|_{z=\pm d/2} = \left.\psi^{\text{ext}}\right|_{z=\pm d/2}, \\ \left.B_z^{\text{in}}\right|_{z=\pm d/2} = \left.B_z^{\text{ext}}\right|_{z=\pm d/2}; \end{cases} \tag{2}$$

$$divB^{\text{in}} = div(H_{\text{d}} + M_{\text{s}}m) = 0, \qquad rotH_{\text{d}} = 0, \tag{3}$$

где $m = m(l)$. Вектор Нееля вектора и дипольное поле запишем в виде $l = l_0 + \delta l(t, r, z)$, где $\delta l_y = \delta l_{y_1} cos(qz) + \delta l_{y_2} sin(qz)$. Аналогично для $\delta l_z, \delta h_{x,y,z}$.

## Результаты

Линеаризуем систему (1) и подставим найденные выражения $\delta l_{y,z}$ в $m(l)$. Первое уравнение из (3) будет уравнением для $q = q_{\text{BW}} + iq_{\text{SW}}$. Из первой системы граничных условий (2) найдём ограничения, накладываемые на $q$, а именно $q_{\text{BW}} = 2\pi\, n/d - iq_{\text{SW}}$. Применяя это выражение, найдём аналитические зависимости для частоты ферромагнитной моды из линеаризованной системы (1)

$$\omega_{\text{FM}_n} = \sqrt{\omega_0(\omega_0 + \omega_{\text{DMI}}) + \omega_{\text{ex}}\omega_{\text{e}} + \omega_{\text{ex}}\omega_{\text{s}}A_{\text{ex}}^2(k^2 + (2\pi\, n/d)^2)} \tag{4}$$

Учёт второй системы (2) приведёт к дисперсионному отношению

$$\frac{2q}{k}(1 + \mu_{zz})cos(qd) + \left[-\frac{q^2}{k^2}(1 + \mu_{zz})^2 + 1 - \mu_a^2\right) sin(qd) = 0, \tag{5}$$

где $\mu_{a,zz} = \mu_{a,zz}(\omega, q, k)$.

На рис. 1 представлен спектр толщинных мод для СВ в плёнке гематита для $d = 200$ нм, построенный по аналитической формуле (4) и с помощью численного решения уравнения (5). Расчёты: поиск корней $q$ алгебраического уравнения и численного решения уравнения (5) осуществлялись в системе компьютерной математики Mathematica. Для численного решения уравнения (5) применялся метод Ньютона с заданной абсолютной точностью в 5 единиц искомой величины, в качестве начальной точки для $n = \overline{1,6}$ была задана частота 0.3 ТГц.

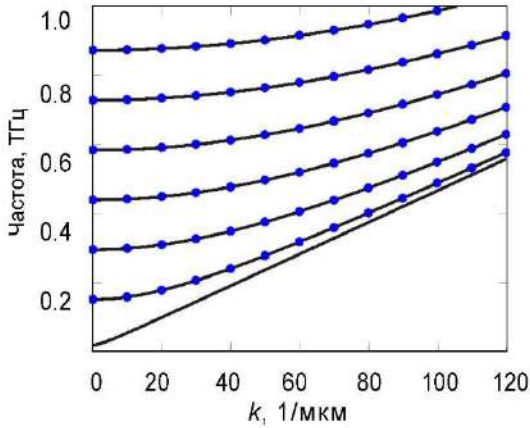



Рисунок 1 — Сравнение аналитических и численных спектров

*Работа выполнена в рамках государственного задания Института радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН.*

## Список использованных источников.

1. Kalinikos B.A., Slavin A.N. Theory of dipole-exchange spin wave spectrum for ferromagnetic films with mixed exchange boundary conditions // Journal of Physics C: Solid State Physics, 1986, Vol. 19, no. 35, P. 7013.
2. Иванов Б.А., Лапченко В.Ф., Сукстанский А.Л. Поверхностные спиновые волны в антиферромагнетиках // Физика твердого тела, 1985, Т. 27, № 1, С. 173–180.
3. Stamps R., Camley R. Bulk and surface spin waves in thin-film antiferromagnets // Journal of applied physics, 1984, Vol. 56, no. 12, P. 3497–3502.

# CALCULATION OF THE SPIN WAVE SPECTRUM IN A THIN ANTIFERROMAGNETIC FILM

***A.Y. Petrova, O.V. Kravchenko, A.R. Safin***

**Abstract.** In this work, we obtain analytical expressions for dispersion relations and a formula for the frequencies of spin waves propagating in an antiferromagnetic film. A comparison of the numerical and analytical results is provided.

**Keywords:** spin wave, antiferromagnetic film, magnetostatic approximation, $\sigma$-model.

УДК 539.182+539.186.3
https://doi.org/10.29003/m4782.MMMSEC-2025/94-96

# ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ РАСЧЕТЫ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ БАРЬЕРОВ МИГРАЦИИ РАЗНОЗАРЯЖЕННЫХ КИСЛОРОДНЫХ ВАКАНСИЙ В ОКСИДАХ ГАФНИЯ И ЦИРКОНИЯ

***Резник Александр Анатольевич,***
*аспирант[1], научный сотрудник[2],*
*reznik.aa@phystech.edu*
***Бажанов Дмитрий Игоревич,***
*к.ф.-м.н., старший научный сотрудник[3], доцент[4]*
*dima@kintechlabs.com*

*[1]МФТИ (НИУ), г. Долгопрудный*
*[2]АО «НИИМЭ», г. Зеленоград, г. Москва*
*[3]ФИЦ ИУ РАН, г. Москва*
*[4]МГУ имени М.В. Ломоносова, г. Москва*

**Аннотация.** Рассчитываются энергии активации для моноклинных оксидов гафния и циркония в случае различного значения заряда кислородных вакансий, а также в зависимости от значения координационного числа атомов кислорода.

**Ключевые слова:** теория функционала плотности, метод эластичной ленты, энергия активации, оксид гафния, оксид циркония.

## Введение

Для теоретического описания механизма резистивного переключения в резистивной энергонезависимой памяти (ReRAM) используются различные модели. Так, согласно модели Дирнейли [1], кислородные вакансии ($V_O$) играют решающую роль в изменении сопротивления оксидного слоя. Резистивное переключение тесно связано с наличием и определенным распределением $V_O$, которые образуют в объёме материала проводящую нить (филамент). Образование филамента носит случайный характер, поэтому одним из наиболее эффективных подходов к описанию такого стохастического характера является кинетический метод Монте-Карло вместе с теорией переходных состояний [2]. Однако в этом формализме необходимы значения энергии активации ($E_a$) $V_O$ в различных геометрических и зарядовых состояниях исследуемого материала. Оксид гафния ($HfO_2$) и оксид циркония ($ZrO_2$) в моноклинной сингонии являются одними из самых удобных

материалов для изучения резистивного переключения, так как моноклинная сингония является самой стабильной и легкодоступной с точки зрения практической реализации у данных оксидов. Некоторые расчеты энергии активации для $V_O$ в m-$HfO_2$ и m-$ZrO_2$ уже были выполнены другими исследователями, но до сих нет полной картины о зависимостях $E_a$ от значения координационного числа атомов кислорода, расстояния миграции атомов и зарядового окружения вакансии. В связи с этим, в данной работе на основе расчетов из первых принципов производится попытка расширить понимание атомарных процессов при образовании филамента в оксидах переходных металлов.

## Детали расчета

Квантово-механические расчеты выполнялись в программном комплексе Quantum ESPRESSO [3]. Элементарные ячейки m-$HfO_2$ и m-$ZrO_2$ (пространственная группа $P2_1/c$, № 14) были прецизионно отрелаксированы для достижения минимальных межатомных сил (менее $1{\cdot}10^{-5}$ Ry/Bohr = $2.57{\cdot}10^{-4}$ эВ/Å) и минимального внутреннего давления (менее 0.002 ГПа). Использование псевдопотециала типа PAW (англ. *Projector Augmented Wave*) с видом обменно-корреляционной энергии PBE (англ. *Perdew-Burke-Ernzerhof*) позволило получить параметры решетки наиболее близкие к экспериментальным синхротронным данным [4]. Энергия отсечки составляла 100 Ry (1360 эВ), размерность сетки Монкхорста-Пака составляла 3×3×3. Расчет $E_a$ осуществлялся методом NEB (англ. *Nudged Elastic Band*) для суперячеек, содержащих 96 атомов и в которых был удален один атом кислорода для получения $V_O$. Между начальной и конечной позициями $V_O$ рассчитывалось 9 промежуточных состояний (изображений). Рассматривались пути миграции $V_O$ как в пределах одного координационного числа кислорода (3C-3C и 4C-4C), так и между разными координационными числами (3C-4C), а также в нейтральном и положительно заряженном состоянии. Расчет энергии активации завершался при достижении критерия ошибки по энергии менее 0.05 эВ/Å.

## Результаты

Результаты расчетов показали, что с увеличением величины заряда $V_O$ происходит уменьшение значения $E_a$. Это объясняется тем, что положительно заряженная область кислородной вакансии

начинает отталкивать положительно заряженные атомы гафния вследствие Кулоновского взаимодействия. Соответственно, мигрирующему атому кислорода нужно затрачивать меньше энергии на отталкивание атомов гафния. Рассчитанные значения $E_a$ для $HfO_2$ лежат в диапазоне от 0.07 до 3.38 эВ, а для $ZrO_2$ от 0.08 до 2.40 эВ. Стоит отметить, что в случае нейтральной и однократно положительно заряженной $V_O$ энергетический барьер у $ZrO_2$ меньше, чем у $HfO_2$, что объясняется большим ионным радиусом атомов циркония по сравнению с атомами гафния, соответственно, межатомное расстояние также больше, что приводит к уменьшению величины барьера.

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

*Исследование выполнено за счёт грантов Российского научного фонда №23-91-06003 и №23-91-01012.*

## Список использованных источников

1. Dearnaley G., Stoneham A.M., Morgan D.V. Electrical phenomena in amorphous oxide films // Reports on Progress in Physics,1970. Vol. 33, no. 3, p. 1129.

2. Zyuzin S.S. et al. Computer Modeling of Plasma-Enhanced Atomic Layer Deposition of $HfO_2$ and $ZrO_2$ // Russian Microelectronics, 2023. Vol. 52, no. Suppl 1, pp. S184–S193.

3. Giannozzi P. et al. Quantum ESPRESSO toward the exascale // The Journal of Chemical Physics, 2020. Vol. 152, no. 15.

4. Pathak S. et al. Crystal structure of monoclinic hafnia ($HfO_2$) revisited with synchrotron X-ray, neutron diffraction and first-principles calculations // Crystal Structure Communications, 2020. Vol. 76, no. 11, pp. 1034–1042.

# *AB INITIO* CALCULATIONS OF ENERGY BARRIERS FOR MIGRATION OF DIFFERENTLY CHARGED OXYGEN VACANCIES IN HAFNIUM AND ZIRCONIUM OXIDES

***A.A. Reznik, D.I. Bazhanov***

**Abstract.** The activation energies for monoclinic oxides of hafnium and zirconium are calculated in the case of different charge values of oxygen vacancies, as well as depending on the value of the coordination number of oxygen atoms.

**Keywords:** density functional theory, Nudged Elastic Band, activation energy, hafnium oxide, zirconium oxide.

УДК 519.688:004.032.26
https://doi.org/10.29003/m4783.MMMSEC-2025/97-100

# ПОЛУЧЕНИЕ АНАЛИТИЧЕСКОЙ ФУНКЦИИ ПОТЕНЦИАЛА МЕЖАТОМНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕТОДАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

***Свирин Денис Витальевич[1],***
*магистр*
*v.s.denis@yandex.ru*
***Бажанов Дмитрий Игоревич,***
*к.ф.-м.н., доцент[1], старший научный сотрудник[2],*
*dima@kintechlabs.com*

[1] *МГУ имени М.В. Ломоносова, г. Москва*
[2] *ФИЦ ИУ РАН, г. Москва*

**Аннотация.** В данной работе исследуется возможность применения машинного обучения для получения функции межатомного потенциала взаимодействия в аналитическом виде.

**Ключевые слова:** межатомный потенциал, машинное обучение, символьная регрессия, теория функционала плотности.

## Введение

Наиболее точное представление о потенциальной энергии получается из квантово-механических вычислений, однако точное решение уравнения Шредингера для реальных систем недостижимо, поэтому необходимо использовать численные методы для поиска приближенного решения. На сегодняшний день наиболее популярным подходом является теория функционала плотности, которая сочетает скорость и эффективность. Однако этот подход плохо масштабируется и неприменим для больших систем. С ростом интереса к машинному обучению, оно стало применяться и в этой области. В настоящее время существует множество решений использующих алгоритмы машинного обучения, но имеющих различные идеи: в MTP (Moment Tensor Potentials) считается, что можно представить потенциал как линейную комбинацию базисных полиномиальных функций [1]; message-passing networks представляют собой граф имитирующий исследуемую систему [2]; высокоразмерные нейронные потенциалы (High-Dimensional Neural Network Potentials) — комбинация нейросетей аппроксимирующих атомное взаимодействие [3]; Gaussian Approximation Potentials (GAP) используют регрессию гауссовского процесса для

моделирования потенциала [4]. Однако и такие методы не лишены недостатков, например, проблемы с интерпретируемостью и необходимостью в большой тренировочной выборке.

## Символьная регрессия

Один из интересных подходов машинного обучения позволяющий получить интерпретируемый результат — символьная регрессия [1, 2]. Данный алгоритм позволяет получить аналитическую формулу, описывающую предоставленные (тренировочные) данные. Его работа основывается на генетическом программировании.

Данный алгоритм работает итерационно. На каждой итерации создается набор функций, далее идет преобразование данных функций (мутация и скрещивание (рис. 1)) и получение новых, после этого отбираются N функций, которые наиболее точно описывают тренировочные данные.

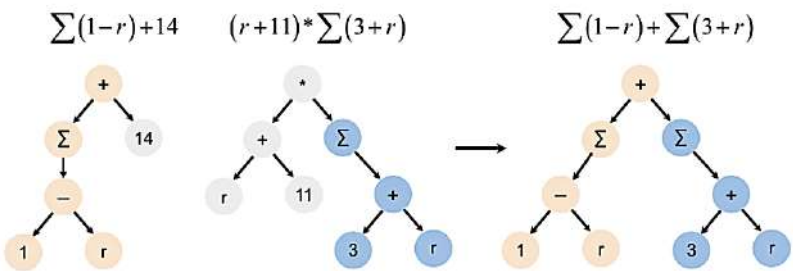



Рисунок 1 — Пример функций и их возможного преобразования (скрещивание)

В данном случае регрессия будет искать функции вида:

$$E_i = \sum_j E^r(r_{ij}) \cdot f(r_{ij}, z) - G(\sum_j E^b(r_{ij} \cdot g(r_{ij}, z))$$

*$E_i$ — полная энергия атома $i$; $E^b, E^r$ — функции энергии притяжения и отталкивания для потенциала RGL; $g(r,z), f(r,z)$ — доп. функции, $r_{ij}$ — расстояние между атомами $i$ и $j$, $z$ — координационное число, $G$ -функция дескриптор.*

Данная форма была основана на потенциале RGL [3]. Так как RGL сам по себе способен описывать различные системы, то его

модификация с помощью функций $f(r,z)$ и $g(r,z), G(\sum_r g(r,z))$ поможет сократить сложность модели и задаст вектор развития функций. Более того, использование модификации позволит ускорить время обучения. Так же в функции модификации появился дополнительный параметр $z$, отвечающий за локальное окружение атома. Такая комбинация помогает алгоритму различать атомные окружения, например, такие конфигурации как атом в объеме и атом на поверхности.

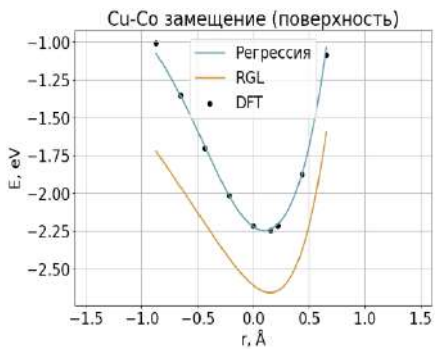
Так как RGL адаптирован для описания объемных свойств системы, он не показывает хорошего качества на низкоразмерных системах (адатом, димер на поверхности, …). Поэтому в качестве тренировочной базы были выбраны следующие системы: колебания примеси Co в кубической решётке (ГЦК, FCC) *Cu*, адатом *Co* на поверхности *Cu001 и* колебания примеси Co на поверхности *Cu001*. Для формирования тренировочной базы, с помощью DFT, были получены группы значений $(r, E)$ для данных трех конфигураций.

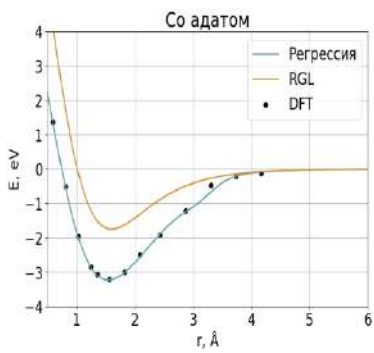
## Выводы

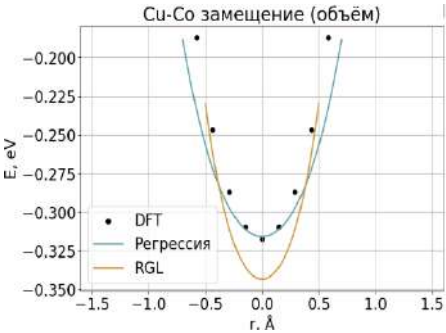
В работе удалось получить аналитическую форму межатомного потенциала:

$$E_i = \sum E^r(r_{ij}) \cdot \left(\frac{-1.79}{r_{ij}} + r_{ij}\right)^{\frac{18.31}{z}+0.02r_{ij}} - G\left(\left(\sum E^b(r_{ij}) \cdot 1.69 r_{ij}\left(\frac{r_{ij}}{z+0.40} + 0.14\right)\right)^2\right)$$

$$G(s) = s(s+s^2)^{s(0.05^{s^2-0.33})}$$






Данная модификация помогла существенно улучшить качество модели при работе с приведенными конфигурациями. Внедрение дескрипторной функции $G$ дало модели большие описательные способности, чем в классическом подходе RGL, где $G(s) = \sqrt{s}$.

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

*Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда № 23-91-01012.*

## Список использованных источников

1. Shapeev A. Moment tensor potentials: A class of systematically improvable interatomic potentials // Multiscale Model. Simul. 14(3), 1153–1173 (2016)/
2. Schütt K.T. et al. SchNet — A deep learning architecture for molecules and materials // J. Chem. Phys. 148(24), 241722 (2018)/
3. Behler J. et al. Generalized Neural-Network Representation of High-Dimensional Potential-Energy Surfaces // Phys. Rev. Lett. 98, 146401 (2007)/
4. Bartók Albert P. et al. Gaussian approximation potentials: A brief tutorial introduction // Machine Learning and Quantum Mechanics, 2015, Vol. 15, no. 16, pp. 1051–1057.
5. Cranmer M. Interpretable Machine Learning for Science with PySR and SymbolicRegression.jl // arXiv:2305.01582 [astro-ph.IM]
6. Mueller T. et al. Fast, accurate, and transferable many-body interatomic potentials by symbolic regression // npj Computational Materials, 5, 2019.
7. Rosato V. et al. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // PHYSICAL REVIEW B, v 48, 1, 1993.

# GENERATING ANALYTICAL FUNCTION FOR INTERATOMIC POTENTIAL USING MACHINE LEARNING APPROACH

***D.V. Svirin, D.I. Bazhanov***

**Abstract.** In this work, machine learning method is used to generate interatomic potential in analytical form.

**Keywords:** Machine Learning, Symbolic Regression, DFT, Interatomic potential.

УДК 681.5:004.032.26
https://doi.org/10.29003/m4784.MMMSEC-2025/101-103

# ПОДХОД К ПРОЕКТИРОВАНИЮ НЕЙРОСЕТЕВОЙ СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ КОЛЕСНОЙ ПЛАТФОРМОЙ С КЛОНИРОВАНИЕМ ПОВЕДЕНИЯ И ОПТИМИЗАЦИЕЙ АППАРАТНОЙ ЧАСТИ

***Тельминов Олег Александрович,***
*к.т.н., начальник отдела[1],*
*otelminov@niime.ru*

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

**Аннотация.** В работе рассмотрены вопросы построения системы управления колесной платформой с клонированием поведения посредством нейросетей и вариантами их аппаратной реализации.

**Ключевые слова:** системы управления, клонирование поведения, нейропроцессоры, нейроморфные процессоры.

## Проблема исследования и актуальность

Классический подход к описанию работы систем управления мобильными роботами заключается поэтапном построении алгоритмов, например, снизу вверх. На нижнем уровне иерархии применяются ПИД-регуляторы (пропорциональные, интегральные, дифференциальные), на верхнем — модельного прогнозирующего управления MPC (model predictive control). Параметры таких и аналогичных регуляторов и оптимизаторов зависят от моделей и состояния физических объектов.

Нейросетевые алгоритмы с применением клонирования поведения (behavior cloning) путем наблюдения за мобильным роботом, управляемым оператором или функционирующей моделью позволяют выполнить предобучение управлению при различных параметрах движения и окружения. Дообучение нейросети в процессе эксплуатации позволит системе управления адаптироваться к новым условиям. Такой подход имеет преимущества перед традиционным в случае усложнения окружения мобильного робота при работе с разнородными объектами интереса, включением в сцену соратников, соперников, применения такого робота в различных условиях окружающей среды. В связи с этим тема работы является актуальной.

## Новизна

По критерию «модель нейрона» нейросети делятся на классические формальные нейросети и активно развивающиеся спайковые нейросети. При работе формальных нейросетей используются непрерывные сигналы, в связи с чем они эффективно применяются для массированных матричных вычислений. Спайковые нейросети по своей природе работают с импульсными сигналами, разреженными во времени. Благодаря этому достигается высокая энергоэффективность вычислений для событийной обработки.

Новизной работы является совокупность предложений, сквозным образом связывающая клонирование поведения на уровне нейросетей до их аппаратной реализации [1] с учетом сокращения времени передачи данных и переключения контекста. В качестве примера мобильного робота используется колесная платформа, что является развитием имеющегося задела [2, 3, 4].

## Цель и задачи

Целью работы является нахождение способов восприятия требуемого поведения системой управления колесной платформой и вариантов их последующей аппаратной реализации. Поставленная цель может быть достигнута решением следующих задач: (1) обеспечение самостоятельной постановки задания системы управления колесной платформы самой себе с учетом текущей и прогнозной обстановки; (2) формирование стека взаимодействующих алгоритмов, включая нейросетевые, на всех уровнях иерархии управления исполнительными устройствами; (3) сокращение временных задержек работы с памятью при исполнении стека обученных нейросетей (инференсе) и их возможном дообучении; (4) повышение прозрачности и объяснимости функционирования системы управления колесной платформой.

## Содержание доклада и перспективы

В работе рассматриваются существующие решения и даются предложения по выполнению поставленных задач. В дальнейшем планируется их детальная проработка с переходом на прототипирование механической и аппаратной части.

## Список использованных источников

1. Красников Г.Я., Горнев Е.С., Матюшкин И.В. Общая теория технологий и микроэлектроника. М.: ТЕХНОСФЕРА, 2020.

2. Тельминов, О.А. Концепция многоагентной нейроподобной когнитивной системы управления мобильным робототехническим комплексом // VI Международная конференция по нейронным сетям и нейротехнологиям (NeuroNT'2025). Сборник докладов. Санкт-Петербург. 4–5 мая 2025 г. — СПб.: СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2025. — С. 122–126.

3. Тельминов, О.А. Особенности нейроподобной реализации многоагентного управления роботом в распределенных системах // XVIII Всероссийская мультиконференция по проблемам управления (МКПУ–2025): материалы мультиконференции (Тула, 15–20 сентября 2025 г.): в 4 т. Т. 2. Управление в распределенных и сетевых системах (УРСС — 2025) / под ред. академика РАН И.А. Каляева. — Тула: Изд-во ТулГУ, 2025. — С. 296–299.

4. Тельминов, О.А. Варианты нейроподобной реализации многоагентного управления роботом // Российский форум «Микроэлектроника 2025» 11-я Научная конференция «ЭКБ и микроэлектронные модули». Сборник тезисов. Научно-технологический университет «Сириус», 21–27 сентября 2025 г. М.: ТЕХНОСФЕРА, 2025. — С. 706.

## AN APPROACH TO NEURAL NETWORK DESIGN WHEELED TROLLEY CONTROL SYSTEMS WITH CLONING BEHAVIOR AND HARDWARE OPTIMIZATION

***O.A. Telminov***

**Abstract.** The paper considers the issues of building a wheeled cart control system with behavior cloning through neural networks and their hardware implementation options.

**Keywords:** control systems, behavior cloning, neuroprocessors, neuromorphic processors.

УДК 538.9
https://doi.org/10.29003/m4785.MMMSEC-2025/103-106

# АНАЛИЗ ГРАНИЦ ПРИМЕНИМОСТИ РАЗЛИЧНЫХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ РАСЧЕТА ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ТОНКИХ ПЛЁНОК

***Чикин Матвей Иванович,***
*студент,*
*mr.matvey.chikin@mail.ru*
***Баринов Александр Алексеевич,***
*к.т.н., доцент,*
*barinov@bmstu.ru*

*МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва*

**Аннотация.** В работе проводится систематизация и сравнительный анализ наиболее широко распространенных моделей и подходов для расчета теплоёмкости тонких пленок. В качестве примера рассмотрены

пленки кремния толщиной от 1 нм и до 100 мкм и диапазоне температур от 10 К до 600 К.

*Ключевые слова:* теплоёмкость, дисперсионное соотношение, размерный и квантово-размерный эффекты.

## Введение

Одной из актуальных задач в электронике является моделирование процессов теплопереноса в тонких плёнках, состоящих из полупроводниковых материалов. Здесь рассматриваются материалы, в которых ключевым переносчиком тепла являются фононы. При определении теплофизических свойств материалов остро стоит проблема выбора достоверной методики расчёта. Анализ работ по расчету теплоемкости тонких пленок показал, что существует множество различных допущений и вариантов моделей расчета. В данной работе приведена попытка систематизировать и проанализировать наиболее широко распространенные модели и подходы (допущения) для расчета теплоёмкости тонких пленок (на примере кремния.

## Результаты расчета моделей для расчета теплоемкости пленок кремния

Для систематизации моделей расчета теплоемкости тонких пленок выделены два ключевых признака: модель дисперсии (включая учет квантово-размерного эффекта) и метод учета суммирования по спектру состояний (включая учет размерного эффекта). Авторами предложена следующая схема, представленная на рис. 1, где слева направо идет усложнение моделей от классической модели Дебая для массивного тела до наиболее полной модели, включающей учет размерного и квантово-размерного эффектов. В соответствии со схемой (рис. 1) с использованием различных моделей и допущений проведены комплексные расчеты теплоемкости пленок кремния толщиной от 1 нм и до 100 мкм и диапазоне температур от 10 К до 600 К. Далее представлены основные выводы из проведенного анализа.

Результаты расчета теплоемкости пленок с учетом классического размерного эффекта и линейной дисперсии показали, что влияние размера существенно лишь при температурах во много ниже температуры Дебая и увеличивается с уменьшением размера пленок. Так при толщине пленки кремния в 3 слоя теплоемкость неотличима от макроскопического образца при 40 К и выше, а при толщинах в 10 слоев — при 20 К и выше, 30 слоев — 5К.

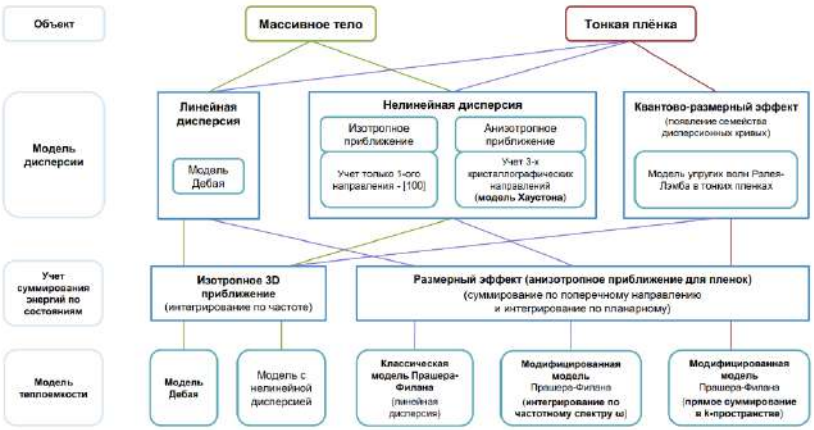



Рисунок 1 — Схема взаимосвязи различных подходов к расчету теплоемкости твердых тел: от макроскопических (массивное тело) до тонких пленок

При учете лишь квантово-размерного эффекта (на примере дисперсии волн Рэлея – Лэмба) и интегрировании в изотропном 3D приближении показал отсутствие влияния толщины пленки на теплоемкость, что соответствует нивелированию квантово-размерного эффекта при температурах выше 10 К. Это связано с тем, что определяющее влияние на результат оказывает именно применение изотропной модели, справедливой лишь для массивного образца. Однако, для структур низкой размерности применение таких моделей приводит к ошибочным выводам.

Использование одновременно нелинейных моделей дисперсии и размерного эффекта при расчете теплоемкости пленок приводит к тому, что размер структуры влияет на теплоемкость и при существенно больших температурах, чем модель с линейной дисперсией. Так, применение модели Рэлея – Лэмба показывает, что размерный эффект оказывает существенное влияние на теплоемкость пленки толщиной в 30 слоев вплоть до 50 К. Однако, применение для тонкой пленки нелинейной дисперсии макроскопического образца показывает расхождение с теплоемкостью Дебая и при существенно больших температурах вплоть до 200 К. Более того, применение методики интегрирования по частоте с использованием функции плотности состояний (DOS по методу Хаустона или DFT) показывает существенное расхождение с другими моделями, что связано со сложностью учета разрешенных состояний при

использовании DOS. Таким образом наблюдается существенное влияние дисперсии на теплоемкость пленки, поэтому необходимо обоснованно подходить к выбору модели дисперсии.

## Выводы

Результаты расчета теплоемкости тонких пленок толщиной от 1 нм и до 100 мкм и диапазоне температур от 10 К до 600 К на примере кремния показал, что определяющие влияние на теплоемкость оказывает именно выбор модели дисперсионных соотношений (квантово-размерный эффект) при одновременном учете размерного эффекта. Так при рассмотрении пленок кремния толщиной 30 атомных слоев наблюдается отличие теплоёмкости от макроскопического тела при при температурах порядка температуры Дебая. А при раздельном учете либо размерного эффекта, либо квантово-размерного эффекта отличие в теплоемкостях проявляется лишь при температурах во много меньше температуры Дебая.

## Список использованных источников

1. Barinov A.A., et al. Updated Model for Thermal Conductivity Calculation of Thin Films of Silicon and Germanium // Phys. Atom. Nucl., 2020. Vol. 83, iss. 10, pp. 1538–1548.
2. Kittel Ch. Introduction to Solid State Physics. 8th ed. John Wiley & Sons, 2005. 700 p.

# ANALYSIS OF VARIOUS MODELS FOR CALCULATING THE THERMOPHYSICAL PROPERTIES OF THIN FILMS

***M.I. Chikin, A.A. Barinov***

**Abstract.** The work is devoted to the analysis of calculations of dispersion relations and heat capacity of Silicon nanofilms with a thickness from 1 nm to 10 nm, in order to identify the role and scope of the size and quantum-size effects, depending on the complexity of the chosen models (assumptions).

**Keywords:** heat capacity, dispersion relation, size and quantum-size effects.

# 4. D

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

УДК 537.9:004.94
https://doi.org/10.29003/m4786.MMMSEC-2025/108-110

# ВЛИЯНИЕ ДЕФЕКТОВ В ВИДЕ ВАКАНСИЙ СЕРЫ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ МОНОСЛОЯ $MoS_2$

***Булах Святослав Сергеевич,***
*аспирант, младший научный сотрудник[1],*
*bulakh-svyatoslav@mail.ru*
***Чибисов Андрей Николаевич,***
*д.ф.-м.н., профессор, ведущий научный сотрудник[1]*
***Фёдоров Александр Семёнович,***
*д.ф.-м.н., профессор, ведущий научный сотрудник[2]*

[1] *Вычислительный центр ДВО РАН, г. Хабаровск*
[2] *Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, ФИЦ КНЦ СО РАН*

**Аннотация.** В данной работе проводился анализ изменения электронной структуры монослоя дисульфида молибдена ($MoS_2$) в зависимости от наличия дефектов в виде вакансии серы. А также перспектива использования дефектных структур для создания электронного кубита.

**Ключевые слова:** дисульфид молибдена, вакансия, теория функционала плотности, кубит.

## Введение

Ввиду повышенного интереса к созданию наномерных полупроводниковых элементов, а также к проектированию вычислительных элементов на основе квантовых эффектов, высокую популярность для исследований приобрели двумерные материалы. Помимо графена имеется большое количество двумерных материалов, имеющих потенциал для исследований, в частности группа дихалькогенидов переходных металлов [1]. Из этой группы можно выделить дисульфид молибдена ($MoS_2$), как один из наиболее перспективных вариантов. В двумерном варианте обладает прямой запрещённой зоны в монослойной форме (~1,8 эВ), высокой подвижности носителей заряда и уникальной комбинации механической прочности и химической стабильности [2].

Исследования проводились при помощи теории функционала плоскости (DFT) — это метод квантовой механики, используемый для описания электронных систем, таких как атомы, молекулы и твердые тела. Главная идея DFT заключается в том, что вся информация о системе электронов содержится в их электронной плотности, которая представляет собой распределение вероятности обнаружить электрон в определенном объеме пространства [3–5].

## Результаты расчёта и их анализ

Для анализа зонной структуры рассмотрены несколько систем при переходе от элементарного $MoS_2$ к монослою и далее к системам с вакансиями серы. В таблице 1 приведены основные параметры: ширина запрещённой зоны, характер перехода (прямой/косвенный), значения краёв валентной зоны и зоны проводимости, а также изменение положение уровня Ферми.

*Таблица 1*

**Изменение зонной структуры $MoS_2$**

| Структура | $MoS_2$ элементарный | $MoS_2$ монослой | 1 вакансия | 2 вакансии |
|---|---|---|---|---|
| Характер перехода | Непрямой | Прямой | Прямой | Непрямой |
| Ширина запрещенной зона (эВ) | 1,7009 | 1,6957 | 1,1444 | 0,6425 |
| Уровень валентной зоны (эВ) | -1,5898 | -1,5892 | -1,6637 | -1,6182 |
| Уровень зоны проводимости (эВ) | 0,1111 | 0,1065 | -0,5193 | -0,9757 |
| Энергия Ферми (эВ) | -1,4403 | -1,376 | -1,3762 | -1,3349 |

При образовании монослоя зонная структура приобрела прямой вид, что соответствует литературным данным, а также величина близка к литературе. Образование одной вакансии серы уменьшает запрещенную зону до 1.14 эВ, сохраняя прямой вид, при этом зона проводимости смещается вниз, что указывает на формирование локальных дефектных состояний в запрещенной зоне. При появлении второй вакансии в системе запрещенная зона уменьшается до 0.64 эВ. Дефектные состояния начинают доминировать, уровень Ферми смещается вверх (-1,33 эВ), что указывает на тенденцию к n-типовому поведению

Таким образом, вакансии серы значительно влияют на изменения электронных свойств. Одиночная создает дефектные уровни, а две формируют дефектные полосы, сужают и изменяют характер запрещенной зоны.

## Выводы

Анализ зонной структуры показал, что переход к монослою приводит трансформирует запрещенную зону в прямую, тогда как наличие вакансий серы вызывает последовательное сужение зоны.

В случае одной вакансии ширина запрещённой зоны уменьшается до ~1.14 эВ при сохранении прямого перехода, две вакансии приводят к ещё более сильному сужению (до ~0.64 эВ) и изменению перехода на косвенный. При этом формируются дефектные уровни в запрещённой зоне, что отражается в смещении уровня Ферми и указывает на тенденцию к n-типовому поведению. Таким образом, серные вакансии значительно изменяют электронные свойства $MoS_2$, а управление их концентрацией и конфигурацией может служить инструментом настройки характеристик материала для применения в электронике и квантовых устройствах.

## Список использованных источников


1. Spin-defect qubits in two-dimensional transition metal dichalcogenides operating at telecom wavelengths / Y. Lee [et al.] // Nature Communications. — 2022. — Vol. 13. — P. 7501.
2. Single-layer MoS2 transistors / A. Radisavljevic B.and Radenovic [et al.] // Nature Nanotechnology. — 2011. — No. 6. — P. 147–150.
3. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous Electron Gas // Phys. Rev. — 1964. — Vol. 136. — B864–B871.
4. Parr R. G., Weitao Y. Density-Functional Theory of Atoms and Molecules. — Oxford UniversityPress, 1995.
5. Kohn W., Sham L.J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects //Phys. Rev. — 1965. — Vol. 140. — A1133–A1138.


# THE INFLUENCE OF SULFUR VACANCY DEFECTS ON THE MODIFICATION OF QUANTUM MECHANICAL PROPERTIES AND BAND STRUCTURE OF MONOLAYER $MOS_2$


***S.S. Bulakh, A.N. Chibisov, A.S. Fedorov***



**Abstract.** This study analyzes the changes in the electronic structure of a monolayer molybdenum disulfide ($MoS_2$) in relation to the presence of defects in the form of sulfur vacancies. The work also explores the potential use of defect-induced structures for the development of electronic qubits.



**Keywords:** molybdenum disulfide, vacancy, density functional theory, qubit.

УДК 548.55
https://doi.org/10.29003/m4787.MMMSEC-2025/111-114

# ВЛИЯНИЕ ГАЗОДИНАМИКИ В ПРОЦЕССЕ ЧОХРАЛЬСКОГО НА ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЕ В МОНОКРИСТАЛЛАХ КРЕМНИЯ

***Верезуб Наталия Анатольевна,***
*к.ф.-м.н., старший научный сотрудник[1],*
*verezub@ipmnet.ru*
***Простомолотов Анатолий Иванович,***
*д.т.н., доцент, ведущий научный сотрудник[1],*
*aprosto@inbox.ru*

[1] *ИПМех РАН, г. Москва*

**Аннотация.** Ростовой процесс происходит в условиях прокачки аргона в разреженной атмосфере теплового узла. Высокотемпературный нагрев обеспечивает плавление расплава кремния в тигле и его кристаллизацию путем вытягивания монокристалла по Чохральскому. Математическая модель учитывает в сопряжении процессы теплообмена и переноса моноокиси кремния. Рассматривается воздействие околокристального экрана на осевое распределение температуры в выращиваемом монокристалле, которое при условии его бездислокационности характеризует тип образующихся собственных точечных дефектов.

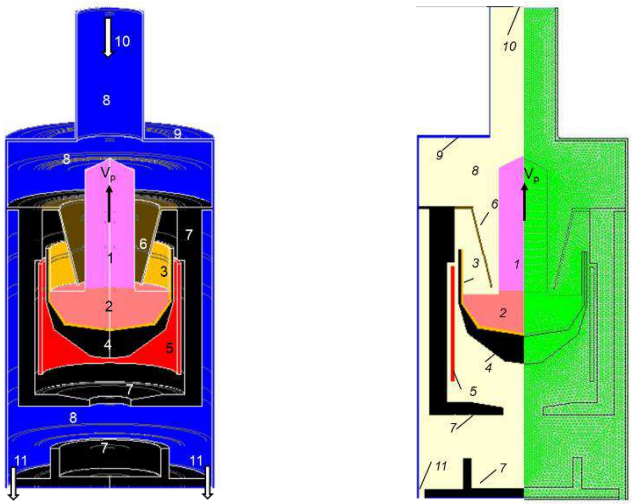
**Ключевые слова:** рост кристалла, кремний, газодинамика, примесь, моделирование.

## Введение

В данной работе основное внимание уделяется роли околокристального экрана (ОК-экрана) на процессы механики, имеющие место в тепловом узле и определяющие качество выращиваемого монокристаллического кремния. Дизайн и расположение этого экрана можно видеть на рис. 1а и 1б, где приведена схема теплового узла отечественной большегрузной установки *Редмет-90М* для выращивания монокристаллов кремния диаметром 200 мм и длиной до 1.5 м методом Чохральского. Данная схема является основой для сопряженного математического моделирования ряда процессов механики в тепловом узле: гидро-газодинамики, переноса тепла и примесей, формирования напряженного состояния растущего монокристалла, которые влияют на возникновение дефектов кристаллической структуры и его электрофизическое свойства.

## Математическая модель и результаты расчетов

Рассмотрим математическую постановку задачи для изучения роли ОК-экрана в процессе Чохральского применительно к модели установки *Редмет-90М*, показанной на Рис. 1а и 1б, где приведены модельные изображения ростовой камеры *Редмет-90М*: а) трехмерный вид и б) осесимметричный вид с расчетной сеткой. Методический подход основан на сопряженном математическом моделировании процессов гидродинамики расплава, теплопереноса, кристаллизации и газодинамики [1]. Для расчетов применяется программный комплекс *Crystmo/Marc*. Решение проводится итерационно в 2 шага. На первом шаге рассчитывается сопряженный теплообмен в системе кристалл-расплав и в твердых частях ростовой камеры с учетом теплового излучения. На втором шаге решались уравнения газодинамики и тепломассообмена. В виду того, что учет течения газа изменял тепловой баланс в ростовой камере, рассчитанный на первом этапе, то для достижения теплового баланса осуществлялся корректировочный пересчет радиационно-кондуктивного теплообмена в ростовой камере.




*а* *б*

Рисунок 1 — Модельные изображения ростовой камеры *Редмет-90М*: а) трехмерный вид и б) осесимметричный вид с расчетной сеткой. Здесь: 1 — вытягиваемый со скоростью $V_p$ монокристалл, 2 — расплав, 3 — тигель, 4 — подставка тигля, 5 — нагреватель, 6 — ОК-экран, 7 — боковой и донные экраны, 8 — внутренность и 9 — оболочка камеры, отверстия 10 — для втекания и 11 — для вытекания газа

В данной работе проанализировано применение ОК-экрана в виде простейшей конструкции — конической поверхности, обращенной меньшим основанием вниз. Применение такого типа ОК-экрана рассмотрено для отечественной большегрузной установки *Редмет-90М*, позволяющей выращивать монокристаллические слитки кремния диаметром 200 мм. Показано, что ОК-экран оказывает значительное влияние на газодинамику аргона в разреженной атмосфере ростовой камеры: при отсутствии этого экрана от основного течения газа отделяется вихрь в области между кристаллом и боковой стенкой тигля, а при наличии этого экрана поток газа полностью обтекает кристалл и ускоряется в области сужения конической поверхности экрана. Отмечается, что такое изменение газового потока значительно увеличивает осевой градиент температуры на фронте кристаллизации выращиваемого кристалла. Изменением угла конусности можно влиять на скорость газа в конусном сужении экрана и тем самым надлежащим образом изменять осевой градиент температуры на фронте кристаллизации с целью влияния на концентрацию собственных точечных дефектов, усиливая или ослабляя определенный тип дефектов (вакансионных пор или агломератов межузельных атомов). Также отмечается, что наличие ОК-экрана существенно изменяет направление переноса моноокиси кремния от поверхности расплава. При отсутствии этого экрана, обусловливающем возникновение вихря в области между боковыми поверхностями кристалла и тигля, транспорт моноокиси кремния ограничивается размерами этой области. В тоже время наличие этого экрана дает возможность транспорта моноокиси кремния по направлению газового потока в нижнюю часть ростовой камеры. Показано, что важное влияние ОК-экран оказывает на режим образования дефектов в выращиваемом бездислокационном монокристаллическом слитке.

*Работа выполнена по теме госзадания (№ госрегистрации 124013000674-0).*

## Список использованных источников

1. Prostomolotov A.I., Verezub N.A. Mechanics of crystalline materials production processes. 2025. Moscow: NUST MISiS publishing house, 528 p. DOI: 10.61726/8938.2025.84.83.001.

INFLUENCE OF GAS DYNAMICS IN THE CZOCHRALSKI PROCESS ON DEFECT FORMATION IN SILICON SINGLE CRYSTALS

***N.A. Verezub, A.I. Prostomolotov***

**Abstract.** The growth process occurs under argon flow pumping in the rarefied atmosphere of growth camera. High-temperature heating ensures silicon melting in crucible and silicon ingot crystallization by Czochralski pulling from a melt. The mathematical model considers the conjugation of heat exchange and silicon monoxide transfer processes. The effect of surrounding crystal shield on axial temperature distribution in growing single crystal is considered for dislocation-free single crystals, which characterizes the spice of forming intrinsic point defects.

**Keywords:** crystal growth, silicon, gas dynamics, impurity, modeling.

УДК 004.3:004.9
https://doi.org/10.29003/m4788.MMMSEC-2025/114-117

# О ВОЗМОЖНОСТИ УТОЧНЕНИЯ МОДЕЛЕЙ ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЯ В CdTe ПО ИЗМЕРЕНИЮ СОСТАВА РАВНОВЕСНОЙ ПАРОВОЙ ФАЗЫ

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

*Университет науки и технологии МИСИС, г. Москва*

**Аннотация.** Для уточнения моделей дефектообразования в халькогенидах кадмия и цинка предлагается использовать номограммы, отражающие зависимость отклонения от стехиометрии от температуры для различных значений отношения парциальных давлений компонентов. Расчеты ожидаемого состава равновесной паровой фазы проводят численным методом на основе решения уравнения электронейтральности и уравнения материального баланса при испарении соединения в замкнутый объем. На примере достаточно хорошо известной системы СТД в CdTe показано, что при испарении конгруэнтно испаряющегося состава в области температур выше температуры конгруэнтного испарения, номограммы, рассчитанные по модели Крегера с преимущественно заряженными дефектами и модели, включающей нейтральные дефекты типа антиструктурного теллура на месте кадмия или дивакансии кадмия, заметно отличаются. На основе анализа экспериментальных данных показано, что наиболее удовлетворительное согласие с экспериментом имеется у второй модели.

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

## Введение

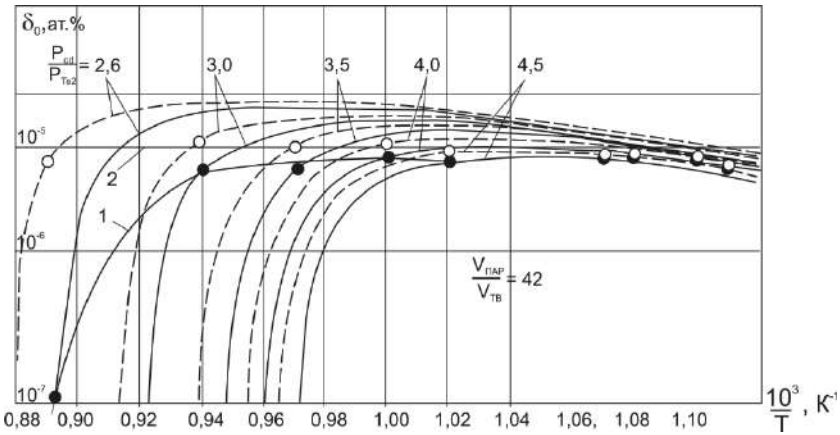
Особенности термодинамики испарения халькогенидов кадмия и цинка позволяют использовать измерения состава равновесной паровой фазы для определения отклонения от стехиометрии δ в материале [1]. Если бы константы образования СТД были точно известны, для определения δ было бы достаточно измерения парциальных давлений при одной температуре T. Однако даже для наиболее изученного материала этой группы — CdTe, однозначно ни состав СТД, ни константы КХР их образования не известны. Вид температурной зависимости состава равновесной паровой фазы зависит от типа СТД в материале, что позволяет использовать метод для уточнения моделей дефектообразования.

## Расчет состава равновесной паровой фазы

Расчеты основаны на методе квазихимических реакций (КХР) образования собственных точечных дефектов (СТД) в соединении. Каждый тип дефекта выражают через парциальное давление паров металла $P_A$, концентрацию свободных электронов n и соответствующую константу КХР. В состоянии термодинамического равновесия концентрации заряженных дефектов связаны уравнением электронейтральности, которое определяется двумя независимыми переменными — $P_A$ и n. При добавлении уравнения материального баланса, связывающего состав паровой фазы с отклонением от стехиометрии материала (δ), получаем систему двух уравнений с двумя независимыми переменными. Параметром в уравнении материального баланса является начальное отклонение от стехиометрии $\delta_0$. Парциальные давления компонентов паровой фазы можно определить в частности по измерению оптической плотности паров [2].

Для анализа применимости различных моделей СТД в работе предлагается анализировать как температурную зависимость отношения парциальных давлений компонентов $\gamma = \frac{P_A}{P_{B_2}}$, так и построенную по результатам расчета номограмму зависимости $\delta_0$ от T при фиксированном значении γ.

На рисунке приведена номограмма для CdTe, рассчитанная для двух моделей дефектообразования — с учетом и без учета нейтрального дефекта типа антиструктурного дефекта $Te_{Cd}$ [3, 4]. Кружками представлены экспериментальные данные. Белые кружки нанесены на расчеты в модели СТД с учетом нейтрального дефекта. Последняя модель дает хорошо сходящиеся результаты, в отличие от модели, рассматривающей только заряженные дефекты.




## Выводы

На примере анализа испарения CdTe показано, что предложенная номограмма может быть успешно использована для анализа моделей СТД в халькогенидах кадмия и цинка.

## Список использованных источников


1. Кобелева С.П. Определение отклонения от стехиометрии в широкозонных полупроводниковых соединениях AIIBVI по составу равновесной паровой фазы // Изв. вузов. МЭТ, 2022. Т. 25, № 2. С. 107–114.

2. Brebric R.F., Strauss A.J. Partial pressures in equilibrium with group IV tellurides. I. Optical absorption method and results for PbTe. Journal of Chemical Physics. 1964; 40: 3230–3235.

3. Кобелева С.П. Влияние собственных точечных дефектов на процессы испарения халькогенидов кадмия и цинка. Дисс. к.ф.-м.н., МИСиС, Москва, 1982 г., 185 с.

4. Медведев С.А., Мартынов В.Н., Кобелева С.П. Собственные точечные дефекты в нелегированном CdTe // Кристаллография. — 1983. — Т. 28, № 3. — С. 556–561.

ON THE POSSIBILITY OF REFINING DEFECT FORMATION MODELS IN CDTE BY MEASURING THE COMPOSITION OF THE EQUILIBRIUM VAPOR PHASE

***S.P. Kobeleva***

**Abstract.** To refine the defect formation models in cadmium and zinc chalcogenides, it is proposed to use nomograms reflecting the temperature dependence of the deviation from stoichiometry for various values of the component partial pressure ratio. Calculations of the expected equilibrium vapor phase composition are performed numerically, based on the solution of the electroneutrality equation and the material balance equation for the evaporation of the compound into a confined space. Using the well-known native defect system in CdTe as an example, it is shown that during the evaporation of a congruently evaporating compound at temperatures above the congruent evaporation temperature, the nomograms calculated using the Kroeger model with predominantly charged defects and the model including neutral defects such as antistructural tellurium in place of cadmium or a cadmium divacancy differ significantly. An analysis of the experimental data shows that the latter model provides the most satisfactory agreement with experiment.

**Keywords:** CdTe, homogeneity region, intrinsic point defects, deviation from stoichiometry.

УДК 537.9:004.94
https://doi.org/10.29003/m4789.MMMSEC-2025/117-121

# КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ И СПИНОВЫХ СВОЙСТВ СИЛИГЕНА

***Образцов Кирилл Владимирович,***
*аспирант, младший научный сотрудник*[1],
*2018102293@pnu.edu.ru*
***Чибисов Андрей Николаевич,***
*д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник*[1],
***Сривастава Анураг,***
*профессор*[2]

[1]*ВЦ ДВО РАН, г. Хабаровск*
[2]*Indian Institute of Information Technology and Management. Gwalior, India*

**Аннотация.** с помощью программного пакета VASP были выполнены исследования электронных свойств силегена (SiGe) с целью возможности применения данного материала для создания квантового транзистора на его основе.

**Ключевые слова:** теория функционала плотности, метод псевдопотенциала, кремний, германий, силиген, кубит.

## Введение

Двухмерные материалы на основе элементов IV группы, в частности кремний и германий, привлекают значительное внимание благодаря высоким электрическим характеристикам и совместимости с современной микроэлектроникой [1–4]. Гетероструктуры SiGe демонстрируют высокую подвижность дырок [5], сильное спин-орбитальное взаимодействие [6, 7], что делает их перспективными для квантовых вычислений, фотоники и спинтроники. Таким образом, цель данной работы — теоретическое исследование электронных и магнитных свойств монослоя силигена (SiGe).

## Результаты расчёта и их анализ

Атомная структура силигена представляет собой гексагональную решётку с постоянными a=b=3.93 Å и межатомным расстоянием Si–Ge равным 2.34 Å. Для изучения электронных свойств материала была использована суперъячейка из 32 атомов, состоящая из 16 атомов кремния и 16 атомов германия (рисунок 1).

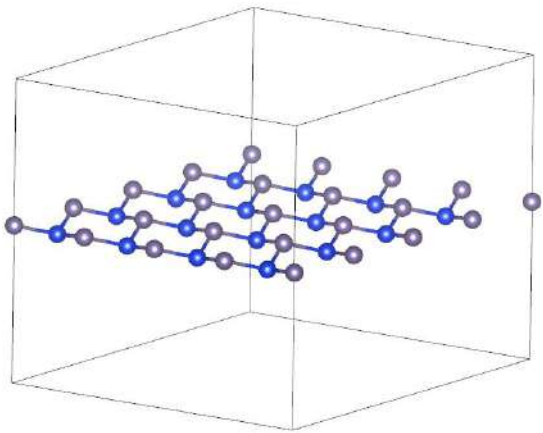


Рисунок 1 — Суперъячейка SiGe

При введении избыточного заряда были рассмотрены два случая: добавление электрона и удаление электрона (создание дырки). В обоих случаях рассчитывались конфигурации со спином «вверх» и «вниз». Сравнение полной энергии (таблица 1) показало,

что наиболее устойчивой является дырочно-допированная система со спином вниз (выигрыш энергии 0.76 мэВ по сравнению с противоположной ориентацией). Это указывает на предпочтительность спин-даун состояния для формирования стабильного кубита.

*Таблица 1*

**Значение полной энергии для каждой системы**

| | **Spin down** | **Spin Up** | **diff** |
|---|---|---|---|
| Full | -154.9086003 | -154.9085999 | 0.0000003 |
| Electron | -157.1607624 | -157.1607649 | 0.0000025 |
| Hole | -151.4538212 | -151.4538209 | 0.0000003 |

Анализ распределения заряда показал, что дырочные и электронные состояния (рисунок 2) локализуются асимметрично: на атомах Ge с одной стороны слоя и на атомах Si — с другой стороны.

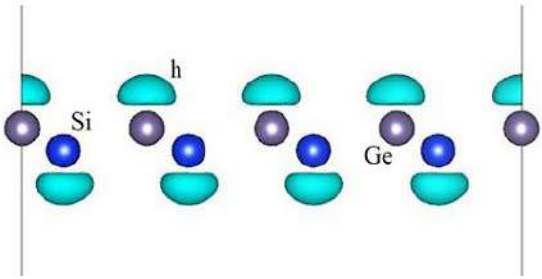



Рисунок 2 — Распределение электронных
и дырочных состояний ан поверхности силигена

Расчёт работы выхода (таблица 2) показал, что для нейтральной системы она зависит от направления спина (4.905 эВ для спина вниз и 4.893 эВ для спина вверх). Для систем с избыточным зарядом работа выхода практически не меняется (4.0 эВ), тогда как для системы с дыркой наблюдается её значительное увеличение до 6.159 эВ.

*Таблица 2*

| | **Spin down** | **Spin up** |
|---|---|---|
| Full | 4.905 | 4.893 |
| Electron | 4 | 4 |
| Hole | 6.159 | 6.159 |

Была построена зонная структура нейтрального силигена (рисунок 3). Определённая ширина запрещённой зоны располага-

ется в пределах значений для чистого кремния и германия, что согласуется с экспериментальными и теоретическими данными для данных материалов. Наличие конечного разрыва в спектре подтверждает возможность использования силигена как основы для квантовых транзисторов и спинтронных устройств.

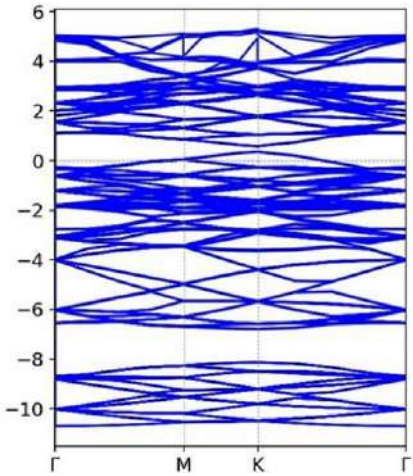



Рисунок 3 — Зонная структура нейтрального силигена

## Выводы

В работе проведено квантово-механическое моделирование двухмерного слоя силигена. Установлено, что наиболее устойчивой является конфигурация с внедрением дырки и спином вниз. Работа выхода чувствительна к ориентации спина только в нейтральной системе, а ширина запрещённой зоны располагается между значениями для кремния и германия. Полученные результаты подчёркивают потенциал силигена для применения в спинтронике и квантовой электронике.

*Расчеты были выполнены в рамках проекта Российского научного фонда № 24-13-20024 и Правительства Хабаровского края (соглашение № 102С/2024 от 31.07.2024 г.).*

## Список использованных источников

1. Molle A. et al. Silicene, silicene derivatives, and their device applications // Chem. Soc. Rev. 2018. Vol. 47. P. 6370–6387.

2. Spencer M.J.S., T. Morishita (Eds.). Silicene. Springer, 2016.

3. Goley P., M. Hudait. Germanium based field-effect transistors: Challenges and opportunities // Materials. 2014. Vol. 7. P. 2301–2339.

4. Rössner B. et al. Scattering mechanisms in high-mobility strained Ge channels // Appl. Phys. Lett. 2004. Vol. 84. P. 3058–3060.

5. Zhang D. et al. Sharp interface of undoped Ge/SiGe quantum well grown by ultrahigh vacuum CVD // Appl. Phys. Lett. 2022. Vol. 121.

6. Chibisov A.N., M.A. Chibisova. Ab initio prediction of noncollinear magnetic states of phosphorus qubit in silicon lattice // J. Phys. Chem. Lett. 2020. Vol. 11. P. 4427–4429.

7. McJunkin T. et al. SiGe quantum wells with oscillating Ge concentrations for quantum dot qubits // Nat. Commun. 2022. Vol. 13. P. 7777.

## QUANTUM-MECHANICAL STUDY OF ELECTRONIC AND SPIN PROPERTIES OF SILIGEN

***K.V. Obrazcov, A.N. Chibisov, A. Srivastava***

**Abstract.** Using the VASP software package, we carried out a study of the electronic properties of silicene (SiGe) with the aim of assessing the potential of this material for the creation of a quantum transistor based on it.

**Keywords:** density functional theory, pseudopotential method, silicon, germanium, silicene, qubit.

УДК 537.9:004.94
https://doi.org/10.29003/m4790.MMMSEC-2025/121-126

## DFT-ПРЕДСКАЗАНИЕ СТАБИЛЬНЫХ ДВУМЕРНЫХ МОДИФИКАЦИЙ $RE_3SE_4CL$

***Чибисов Андрей Николаевич,***
*д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник*[1],
*andreichibisov@yandex.ru*
***Смотрова Дарья Михайловна,***
*магистрант, инженер*[1],
*dsmotrik@mail.ru*
***Сривастава А.,***
*группа передовых материалов CNT Lab, PhD, профессор*[2],

[1] *ВЦ ДВО РАН, г. Хабаровск*
[2] *Индийский институт информационных технологий и управления, Гвалиор, Индия*

**Аннотация.** В работе методами компьютерного моделирования проведен поиск и исследование новых двумерных фаз в системе Re-Se-Cl. С помощью алгоритма CALYPSO предсказаны две новые структуры $Re_3Se_4Cl$. Расчеты методом функционала плотности показали, что обе

фазы являются непрямозонными полупроводниками с узкой запрещенной зоной. Моделирование молекулярной динамики при температуре 300 К подтвердило их термическую стабильность.

**Ключевые слова:** 2D-материалы, наноматериалы, атомная и электронная структура, ширина запрещенной зоны, CALYPSO, молекулярная динамика

## Введение

Проектирование новых духмерных (2D) [1,2] наномтериалов играют ключевую роль в создании новых поколений устройств с уникальными свойствами и функциональными возможностями. Двухмерные (2D) наноматериалы — атомарно тонкие структуры, состоящие из одного или нескольких слоёв атомов. Эти материалы демонстрируют выдающиеся характеристики, такие как высокая анизотропия, механическая прочность, а также регулируемые электронные и оптические свойства. В зависимости от состава и структуры 2D-материалы могут проявлять свойства сверхпроводников, полупроводников или изоляторов, что открывает широкие возможности для их применения в наноэлектронике.

Особую перспективу представляют соединения фазы Шевреля [3–7] ($M_xMo_6E_8$, где M = металл, E = S, Se, Te), которые относятся к классу «суператомных кристаллов», собранных из молекулярных кластеров. В работах [8–10] активно исследуется объемная структура $Re_6Se_8Cl_2$, состоящая из рения, селена и хлора. Этот материал является двумерным аналогом соединений фазы Шевреля и обладает высокой скоростью транспортировки зарядов, что обусловлено его уникальной кластерной организацией. В предыдущих исследованиях [11, 12] было показано, что двумерная форма этого материала демонстрирует улучшенные транспортные характеристики по сравнению с объемной фазой $Re_6Se_8Cl_2$, что делает его особенно перспективным для создания высокоэффективных наноэлектронных компонентов.

В данной работе мы ставили перед собой задачу расширить понимание возможных модификаций в системе Re-Se-Cl. Нас интересовало, какие новые структурные конфигурации могут быть стабилизированы в этой системе и как изменение пространственного расположения атомов (Re, Se, Cl) повлияет на их электронные характеристики, включая ширину запрещенной зоны.

## Методы расчетов

Расчеты атомных структур и электронных свойств проводились с помощью пакета VASP [13, 14]. Использовалось обобщенное градиентное приближение в форме GGA–PBE [15] в псевдопотенциалах PAW [16]. Поиск других структур с атомами Re, Se, Cl производился с помощью метода прогнозирования структур CALYPSO [17], который основан на роевом интеллекте. Далее релаксация полученной структуры производилась при разных наборах k-точек, найденных с использованием гамма схемы.

## Результаты расчетов

Для исследования разнообразия фаз в системе Re–Se–Cl был проведен поиск новых структур с использованием алгоритма CALYPSO. Критерием поиска было задано соотношение атомов Re, Se и Cl — 3:4:1, так же было указано, что атомы должны быть в 2 слоя. В результате была предсказана новая структура (рис. 1) пространственной группы P-1, аналогично полупроводнику $Re_6Se_8Cl_2$.

Параметры элементарной ячейки предсказанной структуры до процедуры релаксации составили a = 4.785, b = 18.749 и c = 20.620 Å, углы α = 90.0, β = 90.0 и γ = 90.0°. После релаксации параметры ячейки получились a = 4.785, b = 18.749 и c = 20.620 Å, углы α = 90.0, β = 90.0 и γ = 90.0°. Важно отметить, что релаксация не привела к значительным изменениям решеточных параметров. Расчеты электронной зонной структуры показывают, что материал является непрямозонным полупроводником (как и $Re_6Se_8Cl_2$) с узкой запрещенной зоной величиной 0.1223 эВ.

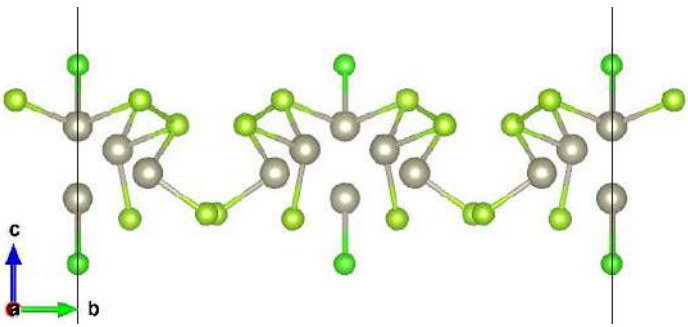



Рисунок 1 — Первая структура, полученная с помощью CALYPSO

Вторая предсказанная структура (рис. 2), аналогично первой, принадлежит пространственной группе P-1. Исходные параметры её элементарной ячейки до релаксации составили: a = 5.443 Å, b = 19.540 Å, c = 22.451 Å, при углах α = β = γ = 90.0°. После релаксации параметры получились a = 5.454 Å, b = 19.578 Å, c = 22.495 Å. Материал является непрямозонным полупроводником с малой шириной запрещенной зоны, составляющей 0.036 эВ.

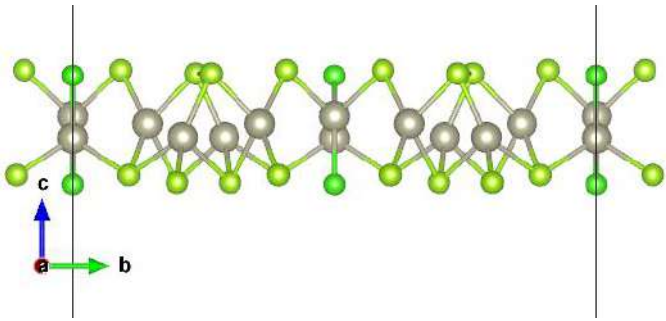



Рисунок 2 — Вторая структура, полученная с помощью CALYPSO

Для оценки термической стабильности предсказанных структур было проведено моделирование методом молекулярной динамики (МД) при температуре 300 K. Длительность расчетов составила 5 пс (5000 шагов). Анализ объединенных графиков энергий и температур показывает, что обе структуры сохраняют свою целостность на протяжении всего времени моделирования и не распадаются. Наблюдается затухание колебаний этих параметров к концу расчетного интервала. При этом амплитуда колебаний энергии и температуры для второй структуры существенно ниже, чем для первой. Этот факт позволяет сделать вывод о ее большей термической стабильности.

## Заключение

В данной работе методами квантово-механического моделирования исследованы структурные и электронные свойства двумерных стриктур, которые являются производными $Re_6Se_8Cl$. Показано, что оба исследуемых материала представляет собой полупроводники с непрямой запрещенной зоной. Результаты моделирования методом молекулярной динамики при комнатной температуре (300 K) в течение 5 пс показали, что двухмерные структуры $Re_3Se_4Cl$ обладают термической стабильностью, но

судя по объединенным графикам энергии и температуры, вторая структура является более стабильной, так как колебания энергии и температуры меньше.

Таким образом, проведенное исследование демонстрирует значительный потенциал двумерных материалов на основе соединений рения, селена и хлора для современных технологических применений. Дальнейшее развитие этого направления может привести к созданию новых функциональных наноматериалов.

## Список использованных источников


1. Nadim, B. Two-dimensional nanomaterials: A critical review of recent progress, properties, applications, and future directions // URL: https://www.sciencedirect.com/science/art icle/abs/pii/S1359835X22005437
2. Lee, K. Optical Spectroscopy of Two-Dimensional Superatomic Semiconductors and Magnetic Materials. — COLUMBIA UNIVERSITY, 2019. — 132 p.
3. Leduc, L., Perrin, A., Sergent, M. Structure Du Dichlorure et Oetaseleniure d'Hexarhenium, Re6Se8Cl2: Compose Bidimensionnel a Clusters Octaedriques Re6 // Acta Crystallogr., Sect. C: Cryst. Struct. Commun. — 1983. — Vol. 39. — P. 1503−1506.
4. Burdett, J.K.; Lin, J.H. The Structures of Chevrel Phases // Inorg. Chem. — 1982. — Vol. 21, No. 1. — P. 5−10.
5. Peña, O. Chevrel Phases: Past, Present and Future // Physica C: Superconductivity and its Applications. — 2015. — Vol. 514. — P. 95−112.
6. Telford, E.J., Russell, J.C., Swann, J.R., Fowler, B., Wang, X., Lee, K., Zangiabadi, A., Watanabe, K., Taniguchi, T., Nuckolls, C., Batail, P., Zhu, X., Malen, J.A., Dean, C.R., Roy, X. Doping-Induced Superconductivity in the van der Waals Superatomic Crystal Re6Se8Cl2 // Nano Lett. — 2020. — Vol. 20. — P. 1718−1724.
7. Kim, H., Lee, K., Dismukes, A.H., Choi, B., Roy, X., Zhu, X., Bonn, M. Charge carrier scattering and ultrafast Auger dynamics in two-dimensional superatomic semiconductors // Appl. Phys. Lett. — 2020. — Vol. 116. — Art. No. 201109.
8. Roy, X., Lee, C.-H., Crowther, A.C., Schenck, C.L., Besara, T., Lalancette, R.A., Siegrist, T., Stephens, P.W., Brus, L.E., Kim, P., Steigerwald, M.L., Nuckolls, C. Nanoscale Atoms in Solid-State Chemistry // Science. — 2013. — Vol. 341. — P. 157−160.
9. Turkiewicz, A., Paley, D.W., Besara, T., Elbaz, G., Pinkard, A., Siegrist, T., Roy, X. Assembly of a Neutral and Tetrahedral Framework of Nanoscale Clusters via Linker Ion Metathesis // J. Am. Chem. Soc. — 2014. — Vol. 136. — P. 15873−15876.
10. Zhong, X., Lee, K., Choi, B., Meggiolaro, D., Liu, F., Nuckolls, C., Pasupathy, A., De Angelis, F., Batail, P., Roy, X., Zhu, X. Superatomic Two-Dimensional Semiconductor // Nano Lett. — 2018. — Vol. 18. — P. 1483−1488.
11. Chibisov A.N., Smotrova D.M., Chibisova M.A., Fedorov A.S. Atomic and electronic properties of 2D Chevrel phases: A case study of the superatomic two-dimensional semiconductor Re6Se8Cl2 // Modern Electronic Materials. — 2024. — Vol. 10, No. 3. — P. 153-157. DOI: 10.3897/j.moem.10.3.135986.

12. Чибисов А.Н., Смотрова Д.М., Сривастава А. Квантово-механическое моделирование атомной и электронной структуры фаз Re6Se8Cl2 // VI Международная конференция «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов». — Москва, 2024. — С. 42–45.

13. Kresse, G., Furthmüller, J. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set // Comput. Mater. Sci. — 1996. — Vol. 6. — P. 15–50.

14. Kresse, G., Furthmüller, J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // Phys. Rev. B. — 1996. — Vol. 54. — P. 11169.

15. Kresse, G., Joubert, D. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method // Phys. Rev. B. — 1999. — Vol. 59. — P. 1758.

16. Grimme, S., Ehrlich, S., Goerigk, L. Effect of the damping function in dispersion corrected density functional theory // J. Comput. Chem. — 2011. — Vol. 32. — P. 1456.

17. Wang, Y., Ma, S. CALYPSO: Crystal structure AnaLYsis by Particle Swarm Optimization. — User Manual. — 2012. — URL: http://www.calypso.cn/static/web/documentation/CALYPSO _Manual_English.pdf

## PREDICTION USING THE CALYPSO METHOD AND DFT ANALYSIS OF STABLE TWO-DIMENSIONAL MODIFICATIONS OF $RE_3SE_4CL$

***A.N. Chibisov, D.M. Smotrova, A.Srivastava***

**Abstract.** This work conducted a search and investigation of new two-dimensional phases in the Re-Se-Cl system using computer modeling methods. Two new $Re_3Se_4Cl$ structures were predicted using the CALYPSO algorithm. Density functional theory calculations revealed that both phases are indirect band gap semiconductors with a narrow band gap. Molecular dynamics simulations at 300 K confirmed their thermal stability.

**Keywords:** 2D materials, nanomaterials, atomic and electronic structure, band gap, CALYPSO, molecular dynamics.

# 5. E

# МОДЕЛИРОВАНИЕ РАБОТЫ МНОГОУРОВНЕВЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ПАМЯТИ ДЛЯ КОМПЬЮТЕРОВ СЛЕДУЮЩЕГО ПОКОЛЕНИЯ

УДК 537.6:537.9:681.5
https://doi.org/10.29003/m4791.MMMSEC-2025/128-132

# ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИИ НА ПЕРЕКЛЮЧАТЕЛЬНУЮ ДИНАМИКУ В ЯЧЕЙКАХ ПАМЯТИ MRAM НА ОСНОВЕ FeCoB/MgO

***Абгарян Каринэ Карленовна,***
*д.ф.-м.н., г.н.с., заведующая отделом[1], профессор [2]*
*kristal83@mail.ru*
***Петров Александр Владимирович,***
*к.ф.-м.н., доцент, ст.н.с.[3],*
*petrov@physics.by*
***Бажанов Дмитрий Игоревич,***
*к.ф.-м.н., старший научный сотрудник[1], доцент [2],*
*dima@kintech.ru*
***Каланда Николай Александрович,***
*д.ф.-м.н., доцент, в.н.с.[3],*
*kalanda@physics.by*

[1]*ФИЦ ИУ РАН, г. Москва*
[2]*МГУ, г. Москва*
[3]*ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», г. Минск, Беларусь*

**Аннотация.** В данной работе рассматривается переключательная динамика в магнитных туннельных переходах (МТП) на основе структур FeCoB/MgO, являющихся ключевыми элементами перспективных устройств спинтроники, таких как магниторезистивная память (MRAM) и нейроморфные архитектуры. Проанализированы пути оптимизации параметров посредством контроля интерфейсов, толщины барьера и выбора материалов.

**Ключевые слова:** магнитный туннельный переход, FeCoB/MgO, спинтроника, MRAM, переключательная динамика, перпендикулярная магнитная анизотропия (PMA), обменное взаимодействие, термическая стабильность.

## Введение

Магнитные туннельные переходы (МТП) на основе гетероструктур FeCoB/MgO представляют собой фундаментальную основу для разработки перспективных спинтронных технологий, включающих магниторезистивную память с произвольным доступом (MRAM) и системы для нейроморфных вычислений. Эффективность таких устройств напрямую определяется переключательной динамикой, которая, в свою очередь, зависит от комплекса

факторов: структуры и качества интерфейсов, воздействия внешних полей и, что особенно важно, от характера обменных взаимодействий. Симметричное (Гейзенберговское) и антисимметричное (Дзялошинского – Мория, DMI) обменные взаимодействия оказывают критическое влияние на магнитное упорядочение и кинетику перемагничивания. Материалы на основе FeCoB обладают уникальным сочетанием свойств, таких как низкое магнитное демпфирование и возможность тонкой настройки магнитных характеристик, что позволяет целенаправленно управлять константой обмена ($J$) для оптимизации скорости переключения и стабильности устройства.

В данной работе проводится анализ современных экспериментальных методов исследования и теоретических моделей с акцентом на практическое применение получаемых знаний для конструирования новых поколений устройств спинтроники.

## Переключательная динамика в МТП на основе гетероструктур FeCoB/MgO/FeCoB

### 1. Ключевые параметры и механизмы анизотропии

Переключательная динамика в МТП определяется балансом нескольких ключевых параметров: эффективной перпендикулярной магнитной анизотропии (PMA), обменной жесткости ($A_{ex}$), константы магнитного демпфирования ($\alpha$) и качества границ раздела. Основной источник PMA — интерфейсная магнитная анизотропия (iPMA), возникающая на границе FeCoB/MgO и обусловленная гибридизацией электронных орбиталей ($p_z$-O и $d_z$-металл).

Эффективная анизотропия и термостабильность описываются выражениями:

$$K_{eff} = K_u - 1/2\mu_0 M_s^2, \quad (1)$$

$$H_k = 2K_u/\mu_0 M_s, \quad (2)$$

где $K_u$ — константа анизотропии, $M_s$ — намагниченность насыщения, $\Delta$ — энергетический барьер термостабильности. Высокое значение $K_u$ повышает энергетический барьер термостабильности $\Delta$, но одновременно приводит к росту критической плотности тока переключения $J_c$.

**2. Режимы перемагничивания и пороговые токи**

Баланс анизотропии и обменной энергии определяет механизм перемагничивания:

- Когерентное вращение: Реализуется при высокой однородной анизотропии. Характеризуется высокой скоростью, но требует больших токов/полей.
- Нуклеация и распространение доменных стенок (DW): Преобладает при пониженной или неоднородной анизотропии. Требует меньших $J_c$, но имеет большее время переключения и разброс.

**3. Режимы перемагничивания и пороговые токи**

Баланс между энергией магнитной анизотропии и обменной энергией определяет доминирующий механизм перемагничивания:

- **Когерентное вращение:** Реализуется в случае высокой и однородной анизотропии. Характеризуется высокой скоростью переключения, но требует значительных внешних полей или плотностей тока.
- **Нуклеация и распространение доменных стенок (DW):** Преобладает при пониженной или неоднородной анизотропии. Требует меньших значений $J_c$, но сопровождается большим временем переключения и его разбросом.

Критическая плотность тока в режиме спинового момента (STT) пропорциональна:

$$J_c \propto \alpha M_s t H_k/\eta, \qquad (3)$$

где $H_k$ — поле анизотропии, t — толщина слоя, η — эффективность спинового переноса. Снижение коэффициента затухания α и повышение эффективности η позволяют существенно уменьшить $J_c$.

**4. Влияние обменной жесткости и демпфирования**

Обменная жесткость $A_{ex}$ для FeCoB составляет ~ (1,0–2,0) × $10^{-11}$ Дж/м, оказывает непосредственное влияние на ширину доменной стенки ($\delta \sim \sqrt{A_{ex}/K_{eff}}$) и её подвижность. Высокая $A_{ex}$ способствует быстрому распространению DW.

Коэффициент магнитного демпфирования α (~0,005–0,015) определяет скорость рассеяния энергии магнитной системой. Низкое значение α снижает $J_c$, но может приводить к нежелательным колебаниям намагниченности после завершения переключения.

## 5. Практические рекомендации и параметры для моделирования

Ключевая задача:

- Для обеспечения высокой термостабильности ($\Delta > 60k_BT$) необходимо увеличивать $K_{eff}$ за счет контроля толщины слоя FeCoB и режимов отжига.
- Для снижения порогового тока $J_c$ целесообразно уменьшать $K_{eff}$ и α, а также повышать эффективность спинового переноса η.
- Строгий контроль качества интерфейсов, включая чистоту границ раздела и степень окисления барьерного слоя MgO, является критически важным для достижения высоких значений PMA и туннельного магнитосопротивления (TMR).

*Таблица*

**Характерные параметры структуры FeCoB/MgO для моделирования**

| Параметр | Значение | Примечание |
|---|---|---|
| Состав FeCoB | $Fe_{60}Co_{20}B_{20}$, $Fe_{40}Co_{40}B_{20}$ | Наличие бора снижает $A_{ex}$, но способствует улучшению качества интерфейса |
| Толщина слоя FeCoB | 1,0–1,5 нм | Критический параметр для сохранения перпендикулярной магнитной анизотропии |
| Толщина слоя MgO | 0,8–1,2 нм | Определяет сопротивление области туннельного барьера и величину TMR |
| Константа магнитной анизотропии ($K_u$) | ~ $10^6$ Дж/м$^3$ | Обусловлена преимущественно вкладом интерфейса |
| Обменная жёсткость (A) | ~1,0–2,0×$10^{-11}$ Дж/м | Зависит от химического состава и условий термической обработки |
| Намагниченность насыщения ($M_s$) | 1,2 $10^6$ А/м | |
| α | ~ 0,005–0,015 | Определяется методом ферромагнитного резонанса (FMR) |
| Коэрцитивная сила | 10–100 мТл | Сильно зависит от толщины пленки |
| Температурный диапазон | 10–400 K | |
| Поле намагничивания | до ± 1 Тл | |
| Температура отжига | 300–400° C | Необходима для кристаллизации барьера MgO и улучшения свойств интерфейса |

## Заключение

Проведенное исследование переключательной динамики в структурах FeCoB/MgO демонстрирует необходимость комплексного подхода, учитывающего взаимосвязь магнитных параметров, качества интерфейсов и характера внешних воздействий. Целенаправленная оптимизация константы анизотропии ($K_u$), обменной жесткости ($A_{ex}$) и коэффициента демпфирования ($\alpha$) позволяет эффективно управлять режимом перемагничивания и величиной пороговых токов. Полученные результаты составляют основу для создания энергоэффективных и высокоскоростных устройств спинтроники следующего поколения, таких как MRAM и нейроморфные процессоры.

*Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда № 23-91-01012.*

## Список использованных источников

1. Matthies T. et al. Interlayer and interfacial Dzyaloshinskii — Moriya interaction in magnetic trilayers: first-principles calculations // Physical Review Research, 2024. Vol. 6, p. 043158.
2. McKinnon T., Girt E., Exchange coupling in FeCoB/Ru, Mo/FeCoB trilayer structures // Applied Physics Letters, 2018, Vol. 113, p. 192407.

# EFFECT OF MAGNETIC ANISOTROPY ON SWITCHING DYNAMICS IN FECOB/MGO MRAM MEMORY CELLS

***K.K. Abgaryan, A.V. Petrov, D.I. Bazhanov, N.A. Kalanda***

**Abstract.** This paper examines switching dynamics in magnetic tunnel junctions (MTJ) based on FeCoB/MgO structures, which are key elements of promising spintronic devices such as magnetoresistive random access memory (MRAM) and neuromorphic architectures. Parameter optimization approaches through interface control, barrier thickness, and material selection are analyzed. Further development in this area involves complex interface engineering and the use of multiscale modeling.

**Keywords:** magnetic tunnel junction, FeCoB/MgO, spintronics, MRAM, switching dynamics, perpendicular magnetic anisotropy (PMA), exchange interaction, thermal stability.

УДК 621.3:004.032.26
https://doi.org/10.29003/m4792.MMMSEC-2025/133-137

# ДВУХМАСШТАБНАЯ МОДЕЛЬ ЭЛЕМЕНТА ЭНЕРГОНЕЗАВИСИМОЙ ПАМЯТИ FeRAM

***Журавлев Андрей Андреевич,***
*младший научный сотрудник[1],*
*zhuravlyow.andrei@gmail.com*
***Абгарян Каринэ Карленовна,***
*д.ф.-м.н., профессор, главный научный сотрудник,*
*руководитель отдела[1],*
*kristal83@mail.ru*
***Ревизников Дмитрий Леонидович,***
*д.ф.-м.н., профессор, ведущий научный сотрудник[1],*
*reviznikov@mai.ru*
***Итальянцев Александр Георгиевич,***
*д.ф.-м.н., профессор, заведующий отделом[2]*

*[1]ФИЦ ИУ РАН, г.Москва*

*[2]АО НИИМЭ, г.Москва*

**Аннотация.** В работе рассматриваются вопросы математического моделирования динамики переключения в элементах сегнетоэлектрической памяти на основе оксидов гафния и гафния-циркония. Предложена двухмасштабная модель, включающая квантово-механический расчет на атомарном уровне и термодинамическое описание системы на уровне элемента памяти. Результаты моделирования хорошо согласуются с экспериментальными данными.

**Ключевые слова:** многомасштабное моделирование, энергонезависимая память, FeRAM.

## Математическая модель

Согласно разработанной схеме моделирования выделены два масштабных уровня. Первый уровень — квантово-механический [1, 2]. Рассматривается кристаллическая ячейка заданной фазы. Задаются начальное и конечное состояния ячейки (позиции атомов кислорода для противоположных поляризаций). Осуществляется расчет методом эластичной ленты, в результате чего определяется наиболее выгодный путь между начальным и конечным состояниями, а также промежуточные состояния и соответствующие им уровни энергии. Затем в полученных промежуточных состояниях с использованием фаз Берри вычисляются величины поляризации,

а также осуществляется расчет эффективных Борновских зарядов. В настоящей работе квантово-механические расчеты проводились с использованием открытого программного кода Quantum Espresso.

Информация, полученная из квантово-механического расчета, передается на второй, макроскопический (термодинамический) масштабный уровень, где выполняется моделирование динамики поляризации в элементе FeRAM. Здесь принципиальным является тот факт, что для одноосного сегнетоэлектрика величину энергии можно разложить по степеням единственной компоненты поляризации. В настоящей работе энергия представляется аппроксимационным полиномом четвертой степени относительно смещения атомов $s$. При подаче электрического напряжения на элемент выражение для потенциальной энергии сегнетоэлектрической фазы принимает вид:

$$U = as^2 + bs^4 + qEs,$$

где $E$ — напряженность электрического поля, $q$ — эффективный Борновский заряд.

Ранее нами, на основе квантово-механических расчетов, было показано, что изменение поляризации орторомбического гафния происходит не в отдельной кристаллической ячейке, а столбцами ячеек одномоментно [1]. Это снижает вероятность самопроизвольной смены поляризации вследствие хаотического теплового движения атомов. В этой связи сегнетоэлектрическая фаза элемента FeRAM может быть разделена на домены, характеризующиеся своим состоянием поляризации. Каждый домен может находиться в одном из двух устойчивых состояний, соответствующих локальным минимумам потенциальной энергии. Переходы между состояниями происходят с интенсивностями, определяемыми энергетическими барьерами состояний. Таким образом, можно записать следующие уравнения для вероятностей состояний доменов:

$$\frac{dp_i^1}{dt} = -\beta_i p_i^1 + \gamma_i p_i^2$$

$$\frac{dp_i^2}{dt} = \beta_i p_i^1 - \gamma_i p_i^2$$

Здесь нижние индексы соответствуют номеру домена, а верхние индексы — состоянию домена, $t$ — время, $\beta_i$ — интенсивность

перехода из состояния 1 в состояние 2, $\gamma_i$ — интенсивность обратного перехода.

Интенсивности переходов определяются выражениями:

$$\beta_i = \nu\ exp\ exp\ (-\frac{\Delta U^1}{\xi_i kT})$$

$$\gamma_i = \nu\ exp\ exp\ (-\frac{\Delta U^2}{\xi_i kT})$$

где $T$ — температура, $k$ — константа Больцмана, $\nu$ — предэкспоненциальный множитель, выражающий частоту атомарных переходов с учетом столбцовой структуры доменов, $\Delta U^1$, $\Delta U^2$ — энергетические барьеры, определяемые по профилю потенциальной энергии. Так как эти барьеры получены для идеального кристалла сегнетоэлектрической фазы, введен в рассмотрение индивидуальный для каждого домена параметр $\xi_i$, учитывающий неидеальность кристаллической структуры. Используется Гамма-распределение доменов по параметру $\xi$:

$$\rho(\xi) = \pi^{-1/2}\xi^{-1/2}\ exp\ exp\ (-\xi)$$

Учитывая, что $p_i^1 + p_i^2 = 1$, уравнения для вероятностей состояний $i$-го домена могут быть сведены к линейному дифференциальному уравнению:

$$\frac{dp_i^1}{dt} = -\beta_i p_i^1 + \gamma_i (1 - p_i^1)$$

Текущее значение поляризации *i-го* домена сегнетоэлектрической фазы выражается следующим образом:

$$P_i(t) = P(U^1)p_i^1(t) + P(U^2)p_i^2(t),$$

где значения поляризации $P(U^1)$, $P(U^2)$ определяются по кривой поляризации, полученной из квантово-механического расчета.

Текущее значение поляризации «паразитной» (не сегнетоэлектрической) фазы определяется исходя из линейной зависимости:

$$P_m(t) = \varepsilon E(t),$$

где $\varepsilon$ — диэлектрическая проницаемость оксида, $E(t)$ — текущее значение напряженности электрического поля.

Итоговое значение поляризации элемента в текущий момент времени вычисляется суммированием поляризаций доменов сегнетоэлектрической фазы с учетом плотности распределения $\rho(\xi)$ и поляризации «паразитной» фазы:

$$P(t) = f \sum_i \rho(\xi_i)\Delta\xi_i P_i(t) + (1-f)P_m(t)$$

где $f$ — доля сегнетоэлектрической фазы в элементе.

Электрический ток в текущий момент времени вычисляется дифференцированием поляризации по времени:

$$I(t) = S\frac{dP}{dt}$$

где $S$ — площадь поперечного сечения элемента FeRAM.

Тестирование модели проводилось на экспериментальных данных АО НИИМЭ по динамике переключения элемента сегнетоэлектрической памяти на основе оксида гафния-циркония. Результаты моделирования хорошо согласуются с экспериментальными данными для всех рассмотренных режимов.

## Заключение

Представлена двухмасштабная модель динамики переключения в элементах энергонезависимой памяти FeRAM на основе оксида гафния и HZO, совмещающая квантово-механический расчет на атомарном уровне и термодинамическое описание системы на уровне элемента памяти. Тестирование показало хорошее согласование результатов моделирования с экспериментальными данными.

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

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 23-91-01012).*

## Список использованных источников

1. Журавлёв А.А., Абгарян К.К., Ревизников Д.Л. Квантово-механическое моделирование переключения поляризации в кристаллах $HfO_2$. Известия вузов. Материалы электронной техники. 2023. Т. 26, № 3, С. 198–203.

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

Материалы V международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов МММЭК–2023», (23–25 октября 2023 г., Москва). — М.: МАКС Пресс, 2023. С. 61–63.

## A TWO-SCALE MODEL OF A FERAM NON-VOLATILE MEMORY ELEMENT

***A.A. Zhuravlev, K.K. Abgaryan, D.L. Reviznikov, A.G. Italyantsev***

**Abstract.** This paper examines the mathematical modeling of switching dynamics in ferroelectric memory elements based on hafnium and hafnium-zirconium oxides. A two-scale model is proposed, including a quantum-mechanical calculation at the atomic level and a thermodynamic description of the system at the memory element level. The modeling results are in good agreement with experimental data.

**Keywords:** compact model, MRAM, STT-MRAM, parametric identification, optimization, approximation, IAC, CoFeB.

УДК 537.312.7
https://doi.org/10.29003/m4793.MMMSEC-2025/137-140

# РЕАЛИЗАЦИЯ ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ЭЛЕМЕНТА ХРАНЕНИЯ РЕЗИСТИВНОГО ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ НА ОСНОВЕ $HfO_2$ В САПР TCAD

***Козлов Алексей Константинович,***
*младший научный сотрудник*[1, 2],
*akozlov@niime.ru*
***Ганыкина Екатерина Андреевна,***
*к.ф.-м.н., научный сотрудник*[1, 2],
*eganykina@niime.ru*
***Резванов Аскар Анварович,***
*к.ф.-м.н., начальник лаборатории*[1, 2],
*arezvanov@niime.ru*

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

**Аннотация.** В данной работе приводится описание и реализация физико-математической модели резистивного переключения филаментарного типа для структур на основе $HfO_2$. Также представлены рассчитанные распределения ключевых параметров элемента хранения ReRAM: концентрация кислородных вакансий, потенциала и температуры в активном слое.

**Ключевые слова:** резистивная память; резистивное переключение; оксид гафния; SENTAURUS TCAD.

## Введение

В настоящее время, при решении современных прикладных задач, требуется исследование альтернативных видов памяти, таких как SCM — storage class memory, основанных на новых физических принципах (MRAM, FeRAM, PCAM, ReRAM), ибо традиционные виды памяти, такие как, SRAM, DRAM и Flash-память, не могут полноценно удовлетворить необходимым параметрам [1]. Резистивная память с произвольным доступом (ReRAM), основанная на явлении скачкообразного изменения сопротивления в зависимости от подаваемого электрического сигнала, [2] является одним из наиболее перспективных вариантов в виду своих основных достоинств, а именно: высокой масштабируемости, высокой скорости перезаписи (~нс), большому сроку хранения информации и низкому энергопотреблению (~10 пДж). В данной работе рассматриваются элементы хранения ReRAM на основе $HfO_2$, так как, во-первых, на их основе ранее уже была продемонстрирована возможность получения ячеек с необходимыми параметрами [3], а во-вторых, оксид гафния повсеместно используется в КМОП производстве [4].

## Физико-математическое описание модели резистивного переключения филаментарного типа

Для реализации модели элемента хранения ReRAM на основе переходных металлов была описана физико-математическая модель резистивного переключения филаментарного типа. Данная физ.-мат. модель описывает явление восстановления и разрыва филамента в функциональном слое, которое в свою очередь определяется эволюцией концентрации катионов вакансий кислорода в активном слое в зависимости от прикладываемого напряжения. Математическая модель данного механизма переключения состоит из системы дифференциальных уравнений в частных производных: кинетическое уравнение (уравнение дрейфа–диффузии), уравнение Лапласа, уравнение теплопроводности. Решением данных уравнений являются распределение вакансий в оксиде, потенциала и температуры:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \nabla \cdot (D\nabla n - vn) \tag{1}$$

$$\nabla \cdot \sigma\nabla\psi = 0, \tag{2}$$

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla \cdot k\nabla \mathrm{T} = J \cdot \mathrm{E} = \sigma |\nabla \psi|^2, \quad (3)$$

где $D$ — коэффициент диффузии вакансий, $\sigma$ — проводимость, $v$ — скорость дрейфа, $C$ — коэффициент теплоемкости, $k$ — коэффициент теплопроводности, $\rho$ — плотность материала [5, 6].

Данная физ.-мат модель реализована на основе САПР SENTAURUS TCAD, позволяющая использовать готовые физические модели или описывать свои с помощью языка Alagator (A Layered Approach to Generating Advanced Technically Oriented Research).

## Выводы

По результатам проведенного моделирования были получены характерные распределения параметров структуры (концентрация вакансий, температуры и потенциала) на основе оксида гафния в зависимости от поданного внешнего напряжения.

*Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда № 23-91-06003, https://rscf.ru/project/23-91-06003/.*

## Литература

1. Красников Г.Я., Орлов О.М., Макеев В.В. Исследование эффекта переключения и транспорта заряда в бесформовочном мемристоре на основе нитрида кремния с разными типами металла верхнего электрода //Электронная техника. Серия 3: Микроэлектроника. 2020. №. 1. С. 42–46
2. Резванов А.А. [и др.]. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПОРИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ В КАЧЕСТВЕ БУФЕРНОГО СЛОЯ В МЕМРИСТОРНЫХ СТРУКТУРАХ //Электронная техника. Серия 3: Микроэлектроника. 2022. № 1. С. 69–86.
3. Govoreanu B. [et al.]. 10×10nm2 Hf/HfOx crossbar resistive RAM with excellent performance, reliability and low-energy operation // International Electron Devices Meeting. 2011. P. 31.6.
4. Егоров К.В. Резистивное переключение в структурах металл-изолятор-металл на основе оксида гафния и оксида тантала, формируемых атомно-слоевым осаждением: дис. … канд. физ.-мат. наук. М., 2019.
5. Lee S.H. [et al.]. Quantitative, dynamic TaOx memristor resistive random access memory model //ACS Applied Electronic Materials. 2020. Т. 2. №. 3. P. 701–709.
6. Kim S. [et al.]. Physical electro-thermal model of resistive switching in bi-layered resistance-change memory //Scientific reports. 2013. Т. 3. №. 1. P. 1680.

# REALIZATION OF A PHYSICAL MATHEMATICAL MODEL OF A $HfO_2$ RESISTIVE SWITCHING IN TCAD

***A.K. Kozlov, E.A. Ganykina, A.A. Rezvanov***

**Abstract.** In this paper, the physical-mathematical model of OxRAM resistive switching based on $HfO_2$ is described and realized. Vital characteristics of resistive memory based on hafnium oxide are gained.

**Keywords:** resistive memory; resistive switching; hafnium oxide; SENTAURUS TCAD.

УДК 621.3:004.032.26
https://doi.org/10.29003/m4794.MMMSEC-2025/140-146

# ДВУХЭТАПНЫЙ АЛГОРИТМ ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ КОМПАКТНОЙ МОДЕЛИ ЭЛЕМЕНТОВ ЭНЕРГОНЕЗАВИСИМОЙ ПАМЯТИ MRAM

***Морозов Александр Юрьевич,***
*д.ф.-м.н., старший научный сотрудник[1],*
*morozov@infway.ru*
***Абгарян Каринэ Карленовна,***
*д.ф.-м.н., доцент, главный научный сотрудник,*
*руководитель отдела[1],*
*kristal83@mail.ru*
***Ревизников Дмитрий Леонидович,***
*д.ф.-м.н., профессор, ведущий научный сотрудник[1],*
*reviznikov@mai.ru*

[1]*ФИЦ ИУ РАН, г. Москва*

**Аннотация.** В работе рассматривается двухэтапный алгоритм параметрической идентификации компактной модели элементов энергонезависимой памяти MRAM по экспериментальным данным, заданным в виде вольтамперных характеристик (ВАХ). На первом этапе из экспериментальных ВАХ извлекаются значения сопротивления элемента в высокопроводящем и низкопроводящем состояниях, значения пороговых напряжений переключения элемента, а также коэффициенты нелинейности в зависимости тока от напряжения. На втором этапе выполняется параметрическая идентификация компактной модели элемента MRAM на основе уравнения Ландау-Лифшица-Гилберта-Слончевского (LLGS) по данным, полученным на первом этапе. На обоих этапах выполняется построение соответствующей целевой функции и её минимизация с помо-

щью метода Хука – Дживса. Тестирование алгоритма проводилось на экспериментальных данных для элементов STT-MRAM на основе CoFeB.

**Ключевые слова:** компактная модель, MRAM, STT-MRAM, параметрическая идентификация, ВАХ, CoFeB.

## Введение

В настоящее время идет активная разработка и внедрение перспективных видов памяти, к которым, в частности относится магниторезистивная память (MRAM), где данные хранятся с помощью магнитных состояний, а не электрических зарядов, как в классической flash-памяти. MRAM обладает более высокой скоростью, износостойкостью и низким энергопотреблением, что является важным для современной вычислительной техники, например, для нейроморфных систем [1, 2]. В связи с этим моделирование работы данных элементов представляется актуальной задачей. В работе рассматривается STT-MRAM (spin-transfer torque MRAM) — вариант магниторезистивной памяти, в котором запись данных осуществляется с помощью переноса спинового момента.

Параметрическая идентификация компактной модели ячейки STT-MRAM выполняется в два этапа. На первом этапе выполняется экстракция данных из экспериментальной вольтамперной характеристики (ВАХ). Здесь определяются такие параметры, как пороговые напряжения, значения сопротивления элемента в низкопроводящем и высокопроводящем состояниях и коэффициенты в выражении для тока. На втором этапе выполняется параметрическая идентификация математической модели элемента памяти под экстрагированные данные на первом этапе. Такой подход позволяет существенно сократить вычислительные затраты, так как уменьшает размерность второй задачи, потому что большая часть экстрагированных параметров входят в явном виде в модель.

## Компактная модель элемента MRAM

Компактная модель основана на представлении элемента MRAM как нелинейной динамической системы относительно осредненного по объему вектора намагниченности активного слоя. Используется макроскопическое уравнение Ландау – Лифшица – Гилберта – Слончевского (LLGS). Правая часть уравнения учитывает вклады магнитной анизотропии, внешнего магнитного поля и переносимого спинового момента:

$$\frac{1}{\tau}\frac{d\mathbf{m}}{dt} = -\gamma\mathbf{m}\times\mathbf{H}_{\text{eff}} - \gamma\alpha\mathbf{m}\times(\mathbf{m}\times\mathbf{H}_{\text{eff}}) + \frac{\gamma}{M_s d}\mathbf{T}_{\text{STT}} + \frac{\gamma\alpha}{M_s d}\mathbf{m}\times\mathbf{T}_{\text{STT}},$$

где $\mathbf{m}$ — единичный вектор намагниченности ($|\mathbf{m}| = 1$), $\gamma$ — гиромагнитное отношение, $\alpha$ — параметр затухания Гилберта, $\mathbf{H}_{\text{eff}}$ — эффективное магнитное поле, $\mathbf{T}_{\text{STT}}$ — спиновый момент (spin-transfer torque), $M_s$ — намагниченность насыщения, $d$ — толщина активного слоя, $\tau$ — масштабный коэффициент времени.

Эффективное магнитное поле $\mathbf{H}_{\text{eff}}$:

$$\mathbf{H}_{\text{eff}} = \mathbf{H}_{\text{ext}} + \mathbf{H}_{\text{ani}},$$

где $\mathbf{H}_{\text{ext}}$ — внешнее магнитное поле, $\mathbf{H}_{\text{ani}}$ — поле одноосной анизотропии.

Поле одноосной анизотропии $\mathbf{H}_{\text{ani}}$:

$$\mathbf{H}_{\text{ani}} = \frac{2K_{\text{eff}}}{M_s}(\mathbf{m}\cdot\mathbf{z})\mathbf{z},$$

где $K_{\text{eff}}$ — плотность энергии анизотропии, $\mathbf{z}$ — единичный вектор анизотропии.

Спиновой момент $\mathbf{T}_{\text{STT}}$:

$$\mathbf{T}_{\text{STT}} = \frac{\hbar}{2q_e}J_e\left(g_\perp(\mathbf{m}\times\mathbf{s}) + g_\square\mathbf{m}\times(\mathbf{m}\times\mathbf{s})\right),$$

где $J_e$ — плотность туннельного тока, $\mathbf{s}$ — единичный вектор намагниченности закрепленного слоя, $g_\perp = \beta\,\text{sign}(J_e)g_\square$ — эффективность спинового переноса в нормальном направлении, $g_\square = p/2\left(1 + p^2(\mathbf{m}\cdot\mathbf{s})\right)$ — эффективность спинового переноса в параллельном направлении, $\beta$ — коэффициент эффективности спинового переноса, $p$ — спиновая поляризация электронов, $\hbar$ — приведённая постоянная Планка, $q_e$ — элементарный электрический заряд.

Плотность туннельного тока $J_e$ рассчитывается по приближенной зависимости:

$$J_e = \mathrm{sign}(E)\cdot\frac{q_e m_e (k_b T)^2}{2\pi^2\hbar^3}\exp\left(-b + q_e\sqrt{\frac{q_e\,|\,E\,|}{4\pi\epsilon_{\mathrm{opt}}}}\Big/k_b T\right),$$

где $E = V/d_{\mathrm{b}}$ — напряженность электрического поля, $V$ — приложенное напряжение, $d_{\mathrm{b}}$ — толщина диэлектрического слоя, $b$ — энергетический барьер, $\epsilon_{\mathrm{opt}}$ — оптическая диэлектрическая проницаемость, $k_b$ — постоянная Больцмана, $m_e$ — масса электрона, $T$ — температура.

Сопротивление элемента $R$:

$$R = \frac{1}{2}\left[R_{\mathrm{off}} + R_{\mathrm{on}} + (\mathbf{m}\cdot\mathbf{s})(R_{\mathrm{off}} - R_{\mathrm{on}})\right],$$

где $R_{\mathrm{on}}$ — электрическое сопротивление элемента в высокоомном состоянии, $R_{\mathrm{off}}$ — электрическое сопротивление элемента в низкоомном состоянии.

**Двухэтапный алгоритм параметрической идентификации**

Пусть $L_{\mathrm{exp}} = \left\{\left(V_{\mathrm{exp}}, C_{\mathrm{exp}}\right)\right\}$ множество точек экспериментальной кривой ВАХ. Зададим ВАХ в виде:

$$L\left(V_p, V_n, R_{on}, R_{off}, k_p, k_n\right) = \begin{array}{l} \left\{(V,C)\,\middle|\,V\in\left[V_{\min}, V_p\right], C := C\left(V, R_{off}, k_p, k_n\right)\right\}\cup \\ \left\{(V_p,C)\,\middle|\,R\in\left[R_{off}, R_{on}\right], C := C\left(V_p, R, k_p, k_n\right)\right\}\cup \\ \left\{(V,C)\,\middle|\,V\in\left[V_p, V_{\max}\right], C := C\left(V, R_{on}, k_p, k_n\right)\right\}\cup \\ \left\{(V,C)\,\middle|\,V\in\left[V_n, V_{\max}\right], C := C\left(V, R_{on}, k_p, k_n\right)\right\}\cup \\ \left\{(V_n,C)\,\middle|\,R\in\left[R_{off}, R_{on}\right], C := C\left(V_n, R, k_p, k_n\right)\right\}\cup \\ \left\{(V,C)\,\middle|\,V\in\left[V_{\min}, V_n\right], C := C\left(V, R_{off}, k_p, k_n\right)\right\}, \end{array}$$

где $V_{\max} = \max\left(V_{\mathrm{exp}}\right)$, $V_{\min} = \min\left(V_{\mathrm{exp}}\right)$ — максимальное и минимальное значение напряжения, $C\left(V, R, k_p, k_n\right) = \dfrac{V}{R} + V^3\begin{cases} k_p, V \ge 0, \\ k_n, V < 0, \end{cases}$ — выражение для тока, $V_p$, $V_n$ — пороговые напряжения, $k_p$, $k_n$ — коэффициенты нелинейности в выражении для тока.

На первом этапе алгоритма определяются параметры $V_p$, $V_n$, $R_{on}$, $R_{off}$, $k_p$ и $k_n$, путем минимизации целевой функции $J_1$ характеризующей расстояние между двумя кривыми $L_{\exp}$ и $L$:

$$J_1\left(V_p, V_n, R_{on}, R_{off}, k_p, k_n\right) = dist\left(L_{\exp}, L\left(V_p, V_n, R_{on}, R_{off}, k_p, k_n\right)\right).$$

На втором этапе алгоритма минимизируется целевая функция $J_2$ характеризующая отклонение пороговых напряжений:

$$J_2\left(\alpha, b, \tau, p\right) = \left(V_p - V_p^*\right)^2 + \left(V_n - V_n^*\right)^2,$$

где $V_p^* = \max\left\{V \middle| s_z^2\left(V\right) = 0\right\}$, $V_n^* = \min\left\{V \middle| s_z^2\left(V\right) = 0\right\}$ — модельные пороговые напряжения, $s_z\left(V\right)$ — компонента $z$ модельного вектора намагниченности $\mathbf{s}$, полученного при заданных параметрах $\alpha$, $b$, $\tau$ и $p$.

Для оптимизации используется метод Хука – Дживса.

## Результаты

Тестирование алгоритма выполнялось на экспериментальных данных для элементов STT-MRAM из работ [3–5]. Приведем результаты параметрической идентификации компактной модели по элементу из статьи [3] со следующей структурой: $Co_2Fe_6B_2$ pinned (1.05 нм) / MgO barrier (1.15 нм) / $Co_2Fe_6B_2$ free (1.0 нм). Используемые параметры: $\gamma = 1.76 \times 10^{11}$ Тл$^{-1}$с$^{-1}$, $M_s = 1300000$ А / м, $d = 1$ нм, $d_{\mathrm{b}} = 1.15$ нм, $K_{\mathrm{eff}} = 40000$ Дж / м$^3$, $\mathbf{m}\left(0\right) = \mathbf{z} = \mathbf{s} = \left(0,0,1\right)^{\mathrm{T}}$, $\mathbf{H}_{\mathrm{ext}} = \left(0,0,0\right)^{\mathrm{T}}$ Тл, $T = 300$ К, $\epsilon_{\mathrm{opt}} = 2.568 \times 10^{-11}$ Ф / м, $\beta = 0.15$. Скорость изменения напряжения предполагалась равной 10 В / мкс. Полученные значения неизвестных параметров после параметрической идентификации: $R_{\mathrm{on}} = 1096.78$ Ом, $R_{\mathrm{off}} = 236.15$ Ом, $k_p = 4.885 \times 10^{-4}$ В$^{-2}$Ом$^{-1}$, $k_n = 0.0$, $\alpha = 0.2714$, $p = 0.795$, $b = 7.519 \times 10^{-20}$ Дж, $\tau = 0.695$, $V_p = 0.7227$ В, $V_n = -0.6318$ В.

На рис. 1 показано сопоставление модельной и экспериментальной ВАХ.

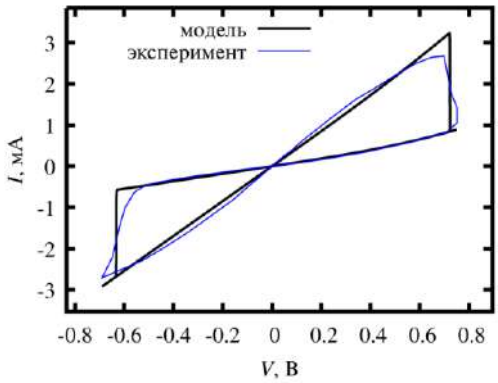



Рис 1. Сравнение модельной ВАХ с экспериментальной ВАХ

Наблюдается удовлетворительное согласование модели с экспериментом.

## Заключение

Представлен двухэтапный алгоритм параметрической идентификации компактной модели элементов энергонезависимой памяти MRAM, в соответствии с которым сначала из экспериментальных данных экстрагируются параметры, под которые далее настраивается модель. Предложенный алгоритм успешно применен к элементу STT-MRAM на основе $Co_2Fe_6B_2$. Расчетная ВАХ соответствует экспериментальной, что демонстрирует эффективность предложенного алгоритма.

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

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 23-91-01012).*

## Список использованных источников

1. Абгарян К.К., Ревизников Д.Л., Журавлев А.А., Морозов А.Ю., Гаврилов Е.С. Многомасштабное моделирование нейроморфных систем. 2022. МАКС Пресс. — 128 стр.

2. Морозов А.Ю., Абгарян К.К., Ревизников Д.Л. Имитационное моделирование аналоговой импульсной нейронной сети на основе мемристорного кроссбара с использованием параллельных вычислительных технологи // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2022. Т. 25. № 4. С. 288–297. DOI: 10.17073/1609-3577-2022-4-288-297.

3. Lee S.E., Baek J.U., Park J.G. Highly Enhanced TMR Ratio and Δ for Double MgO-based p-MTJ Spin-Valves with Top $Co_2Fe_6B_2$ Free Layer by Nanoscale-thick Iron Diffusion-barrier. // Scientific Reports. 2017. 7: 11907. DOI: 10.1038/s41598-017-10967-x.

4. Yazigy N., Postel-Pellerin J., Della Marca V., Terziyan K., Sousa R.C., Canet P., Di Pendina G. Real-Time Switching Dynamics in STT-MRAM // IEEE Journal of the Electron Devices Society. 2022. Vol. 10, pp. 490–494. DOI: 10.1109/JEDS.2022.3185324

5. Moinuddin M.G., Lone A.H., Shringi S., Srinivasan S., Sharma S.K. Low-Current-Density Magnetic Tunnel Junctions for STT-RAM Application Using MgOxN1−x(x=0.57) Tunnel Barrier // IEEE Transactions on Electron Devices. 2020. Vol. 67, No. 1, pp. 125–132. DOI:10.1109/TED.2019.2954131.

# A TWO-STAGE ALGORITHM FOR PARAMETRIC IDENTIFICATION OF A COMPACT MODEL OF MRAM NON-VOLATILE MEMORY ELEMENTS

***A.Yu. Morozov, K.K. Abgaryan, D.L. Reviznikov***

**Abstract.** The paper considers a two-stage algorithm for parametric identification of a compact model of MRAM non-volatile memory elements based on experimental data given in the form of current-voltage characteristics (VACS). At the first stage, the resistance values of the element in the high-conducting and low-conducting states, the values of the threshold voltage of the switching of the element, as well as the nonlinearity coefficients depending on the current and voltage are extracted from the experimental I-V characteristics. At the second stage, the parametric identification of the compact model of the MRAM element is performed based on the Landau-Lifshitz-Hilbert-Slonchevsky (LLGS) equation based on the data obtained at the first stage. At both stages, the construction of the corresponding target function and its minimization using the Hooke-Jives method are performed. The algorithm was tested on experimental data for STT-MRAM elements based on CoFeB.

**Keywords:** compact model, MRAM, STT-MRAM, parametric identification, IAC, CoFeB.

УДК 004.3:004.9
https://doi.org/10.29003/m4795.MMMSEC-2025/147-150

# АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАБОТЫ ЭЛЕМЕНТОВ ЭНЕРГОНЕЗАВИСИМОЙ ПАМЯТИ НА ОСНОВЕ ТЕХНОЛОГИИ FeRAM

***Павлишин Кирилл Юрьевич,***
*аспирант[1],*
*kirill1999super15@gmail.com*
***Абгарян Каринэ Карленовна,***
*д.ф.-м.н., профессор[1], г.н.с., заведующая отделом[2],*
*kristal83@mail.ru*
***Бажанов Дмитрий Игоревич,***
*к.ф.-м.н., доцент[2],с.н.с. [2],*
*dima@kintechlab.com*
***Журавлев Андрей Андреевич,***
*м.н.с.[2],*
*zhuravlyow.andrei@gmail.com*
***Ревизников Дмитрий Леонидович,***
*д.ф.-м.н., профессор[1], в.н.с.[2],*
*reviznikov@inbox.ru*

*[1]МГУ имени М.В. Ломоносова, г. Москва*
*[2]ФИЦ ИУ РАН, г. Москва*

**Аннотация.** Для построения блока теоретического моделирования работы элементов энергонезависимой памяти FeRAM применен атомистический поход. Он базируется на формировании динамической системы, в которой в качестве фазовых переменных выступают смещения атомов. Силы, действующие на атомы, вычисляются на основе эффективного Гамильтониана, компоненты которого рассчитываются с использованием квантово-механического моделирования. В результате атомистического моделирования поляризационной динамики на основе квантово-механического подхода определяется векторное поле поляризации в активном слое элемента FeRAM в различные моменты времени, после чего определяются осредненный вектор поляризации и плотность электрического тока как функции времени.

**Ключевые слова:** математическое моделирование, энергонезависимая память, технология FeRAM, эффективный Гамильтониан, атомистическое моделирование.

В современных микроэлектронных устройствах наблюдается возрастающая потребность в энергонезависимой памяти, способной сочетать высокую скорость работы, долговечность и низкое

энергопотребление. Технология FeRAM отвечает этим требованиям за счёт хранения информации в виде поляризации, которая сохраняется даже при отключении питания, что делает её особенно перспективной для мобильных, встроенных и высокопроизводительных систем. Актуальность разработки элементов памяти на основе FeRAM определяется тем, что традиционные решения, такие как флеш-память и DRAM, не способны одновременно обеспечивать высокую скорость работы, малое энергопотребление и длительный срок службы.

Ключевую роль в развитии FeRAM играет математическое и физическое моделирование, которое позволяет предсказывать динамику поляризации, оптимизировать характеристики памяти и существенно сокращать необходимость проведения дорогостоящих экспериментов. Существуют различные подходы к моделированию ферроэлектрических материалов. Термодинамический подход оперирует макроскопическими величинами, такими как поляризация, напряжения и температура, задавая состояние системы через равновесные параметры. Атомистический подход, напротив, рассматривает динамику смещений отдельных атомов, а силы, действующие на них, вычисляются через эффективный гамильтониан. В настоящей работе выбран именно атомистический подход, позволяющий детально моделировать поляризационную динамику в сегнетоэлектрических элементах памяти.

Эффективный гамильтониан включает ключевые слагаемые, описывающие энергию локальных диполей, ближние и дальнодействующие диполь-дипольные взаимодействия, упругие деформации кристаллической решётки, связь диполей с локальными деформациями, а также взаимодействие с внешним электрическим полем. Параметры модели, такие как упругие константы, коэффициенты связи диполь-деформация, нелинейные коэффициенты, эффективный заряд Борна, эффективная масса диполя, а также коэффициенты короткодействующего взаимодействия, вычисляются из первопринципных квантово-механических расчётов (DFT). Такой подход обеспечивает первопринципное основание модели и позволяет точно воспроизводить реальные физические свойства материала без подбора эмпирических коэффициентов.

Для моделирования динамики поляризации применяется метод молекулярной динамики, где локальные диполи эволюционируют по уравнениям движения, а температура поддерживается с помощью изокинетического термостата для обеспечения заданного

кинетического режима. Программная реализация модели позволяет рассчитывать петли гистерезиса и плотность электрического тока, по которым определяется наличие ферроэлектричности, коэрцитивное поле и энергетические характеристики переключения доменов.

Использование такой модели предоставляет возможность прогнозировать поведение сегнетоэлектрических материалов, оптимизировать характеристики памяти, повышать её долговечность и энергоэффективность, а также ускоряет разработку новых энергонезависимых устройств. На текущем этапе программная реализация модели проверена на многоосных сегнетоэлектриках, таких как BaTiO, что позволяет исследовать фундаментальные механизмы поляризационной динамики и взаимодействий диполей. Параллельно ведётся адаптация модели для современных материалов FeRAM на основе оксидов гафния ($HfO_2$) и гафния-циркония ($HfZrO_2$), что создаёт перспективу её применения для проектирования энергоэффективных и высокопроизводительных микросхем памяти нового поколения.

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

*Работа выполняется при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 23-91-01012).*

## Список использованных источников

1. Progress in computational understanding of ferroelectric mechanisms in $HfO_2$ / Tianyuan Z., Liyang M., Shiqing D., Shi L. // npj Comput Mater. 2024. vol. 10. A. 188.

2. The fundamentals and applications of ferroelectric $HfO_2$ / Schroede U., Park M.H., Mikolajick T., Hwang C.S. // Nat Rev Mater. 2022. vol. 7. P.653–669.

3. Fast molecular-dynamics simulation for ferroelectric thin-film capacitors using a first-principles effective Hamiltonian / Nishimatsu T., Waghmare U.V., Kawazoe Y., Vanderbilt D. // PhysRevB.78.104104. — 2008.

4. Программа для первопринципных расчётов «ABINIT». URL: https://abinit.github.io/abinit_web/

5. Программа для первопринципных расчётов «Quantum Espresso». URL: https://www.quantum-espresso.org/

# ATOMISTIC MODELING OF NON-VOLATILE MEMORY ELEMENTS BASED ON FERAM TECHNOLOGY

***K.Y. Pavlishin, K.K. Abgaryan, D.I. Bazhanov, A.A. Zhuravlev, D.L. Reviznikov***

**Abstract:** An atomistic approach was used to build a block of theoretical modeling of the operation of FeRAM non-volatile memory elements. It is

based on the construction of a dynamic system in which atomic displacements act as phase variables. The forces acting on atoms are calculated based on the effective Hamiltonian, the components of which are calculated using quantum mechanical modeling. As a result of atomistic modeling of polarization dynamics based on a quantum mechanical approach, the polarization vector field in the active layer of the FeRAM element is determined at various time points, after which the averaged polarization vector and the electric current density as a function of time are determined.

**Keywords:** mathematical modeling, non-volatile memory, FeRAM technology, efficient Hamiltonian, atomistic modeling.

УДК 537.312.7, 538.975
https://doi.org/10.29003/m4796.MMMSEC-2025/150-153

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ВКЛАДА ГРАНИЧНЫХ ЭФФЕКТОВ В ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕМРИСТИВНЫХ КОМПОЗИЦИЙ С ТОНКИМИ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИМИ ПЛЕНКАМИ

***Рындин Евгений Адальбертович,***
*д.т.н., доцент, ведущий научный сотрудник НИЛ «Нейроморфная электроника и вычисления в памяти»* [1],
*rynenator@gmail.com*
***Андреева Наталья Владимировна,***
*д.ф.-м.н., доцент, начальник НИЛ «Нейроморфная электроника и вычисления в памяти»* [1],
*nvandr@gmail.com*
***Петухов Анатолий Евгеньевич,***
*ведущий специалист РЦ «Физические методы исследования поверхности» Научного парка СПбГУ* [2],
*anatoliy.petukhov@spbu.ru*

[1] *СПбГЭТУ «ЛЭТИ», г. Санкт-Петербург*
[2] *СПбГУ, г. Санкт-Петербург*

**Аннотация.** Разработана диффузионно-дрейфовая модель мемристивной композиции с тонкой сегнетоэлектрической пленкой титаната бария для проверки гипотезы о формировании и влиянии на электрофизические свойства гетероинтерфейса на границе с верхним электродом в виде тонкого оксидного слоя за счет перераспределения кислородных вакансий и дрейфа ионов кислорода под действием электрического поля.

**Ключевые слова:** сегнетоэлектрический мемристор, тонкие сегнетоэлектрические пленки, гетеропереход, диффузионно-дрейфовая модель.

## Введение

Являясь одним из «классических» high-k сегнетоэлектриков, титанат бария обладает структурой перовскита, которая обеспечивает устройствам на его основе стабильность к внешним воздействиям окружающей среды, что расширяет сферу его применения на область ЭКБ. Залогом успешного применения сегнетоэлектрических (СЭ) пленок титаната бария выступает возможность комбинирования квантово-размерных эффектов, обеспечиваемая современным уровнем развития технологии и лежащая в основе создания перспективных мемристивных нанослоевых композиций, рассматриваемых в качестве кандидата на роль энергонезависимой памяти на новых физических принципах.

Для описания процессов резистивной перестройки сопротивления в рассматриваемых мемристивных композициях была разработана численная модель стационарных процессов в рамках диффузионно-дрейфового приближения.

## Диффузионно-дрейфовая модель СЭ-мемристора

Целью работы является проверка гипотезы о влиянии на электрофизические свойства тонких $BaTiO_3$-пленок граничных эффектов, обусловленных наличием интерфейсных границ контактных систем. Исследуемые в работе $BaTiO_3$-пленки, обогащенные барием, обладают *p*-типом проводимости, обусловленным присутствием $V_{Ti}$–$V_O$ дивакансий [1]. Наряду с $V_{Ti}$–$V_O$ дивакансиями, рассматривается вклад в проводимость кислородных вакансий, а также случайной акцепторной примеси. Рассматривается формирование гетероинтерфейса на границе с верхним кобальтовым электродом в виде тонкого слоя оксида кобальта между СЭ-пленкой и металлическим электродом, за счет дрейфа ионов кислорода под действием электрического поля.

Разработанная диффузионно-дрейфовая модель СЭ-мемристорной гетероструктуры учитывала: изменение толщины оксидного слоя в приконтактной области; дрейфовые и диффузионные составляющие плотности тока; проводимость, обусловленную свободными электронами и дырками, а также прыжковым механизмом транспорта электронов; неподвижность кислородных вакансий и дивакансий $(V_{Ti}–V_O)^{2-}$; присутствие случайных концентраций «мелких» доноров и акцепторов.

С учетом принятых допущений, модель представляет собой систему дифференциальных уравнений в частных производных, включающую уравнение Пуассона и уравнения непрерывности для электронов и дырок. Разработанная методика численного решения предусматривает динамическое изменение координатной сетки в слое оксида кобальта в процессе выполнения расчета для моделирования изменения толщины слоя оксида кобальта при изменении внешнего напряжения. В соответствии с разработанной методикой, уравнения модели и граничные условия были представлены в комбинированном базисе Слотбума. Дискретизация уравнений на координатной сетке выполнялась с использованием метода конечных разностей.

## Выводы

Результаты моделирования исследуемой СЭ-гетероструктуры на основе тонкой $BaTiO_3$-пленки позволяют сделать следующие выводы:

– слой оксида кобальта образует с пленкой титаната бария гетеропереход второго типа;

– увеличение отношения токов и сопротивлений структуры в различных резистивных состояниях на обратной ветви ВАХ и уменьшение данных отношений на прямой ветви, при увеличении вклада поляризационного заряда в контактные разности потенциалов на границах с электродами, свидетельствует о том, что в структуре с нетуннельно-прозрачной СЭ-пленкой изменение направления поляризации приводит к сдвигу ВАХ и не является причиной мемристивного гистерезиса. Мемристивный гистерезис объясняется образованием слоя оксида кобальта и изменением его толщины при изменении направления и напряженности электрического поля в структуре.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации — государственное задание в области научной деятельности FSEE-2025-0005.*

## Список использованных источников

1. Andreeva N., E. Ryndin, A. Petukhov, O. Vilkov, A.A.Al-Saman. Dynamics of Analog Switching Behavior in Thin Polycrystalline Barium Titanate / Advanced Electronic Materials, 2024. 10 (6), 2300806; https://doi.org/10.1002/aelm.202300806

# MODELING THE INTERFACE CONTRIBUTION TO THE ELECTROPHYSICAL PROPERTIES OF MEMRISTIVE COMPOSITIONS WITH THIN FERROELECTRIC FILMS

***E.A. Ryndin, N.V. Andreeva, A.E. Petukhov***

**Abstract.** A drift-diffusion model of a memristive composition with a thin ferroelectric $BaTiO_3$ film has been developed to evaluate the effect of the heterojunction at the interface with the top electrode, formed due to the redistribution of oxygen vacancies and the drift of oxygen ions in electric field, on the electrophysical properties.

**Keywords:** ferroelectric memristor, thin ferroelectric film, heterojunction, drift-diffusion model

# 6. F

# МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУР И СВОЙСТВ КОНСТРУКЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ПРОИЗВОДСТВ ИЗДЕЛИЙ ЭКБ, ВКЛЮЧАЯ КОМПОЗИЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ С НАНОКРИСТАЛЛАМИ, НАНОКЛАСТЕРАМИ, НАНОАМОРФНЫМИ ВКЛЮЧЕНИЯМИ И Т.Д.

УДК 621.794.2: 519.7
https://doi.org/10.29003/m4797.MMMSEC-2025/156-159

# ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРИ ОПРЕДЕЛЕНИИ СТРУКТУРНЫХ ПАРАМЕТРОВ И СВОЙСТВ ИЗДЕЛИЙ ИЗ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

***Исмаилов Ниджат Эльчин оглы,***
*докторант*[1]
*nicatismayilov1994@mail.ru*

[1]*АзТУ, г. Баку*

**Аннотация.** В статье рассматривается применение методов математического моделирования в таких направлениях, как построение моделей среды ПКМ для определения структурных параметров полимерных композитных материалов и изделий из них, а также связанных с ними свойств, выявление закономерностей распространения ультразвуковых волн в этих средах и описание процессов разрушения материалов.

**Ключевые слова:** полимерные композиционные материалы (ПКМ), неразрушающего контроля (НК), моделирование среды, низкочастотный ультразвук.

## Введение

Полимерные композиционные материалы (ПКМ) обладают высокой удельной прочностью, коррозионной и усталостной стойкостью, однако их надёжность зависит от отсутствия внутренних дефектов, возникающих на стадиях проектирования и производства. Для выявления этих дефектов применяются методы неразрушающего контроля, в частности низкочастотный ультразвук, позволяющий анализировать распространение волн и оценивать физико-механические и структурные параметры ПКМ. Использование моделей среды с изотропными, анизотропными и многослойными структурами, включая волны Лэмба, формирует теоретическую основу контроля качества и прогнозирования надёжности изделий из ПКМ.

## Методология исследования

Математическое моделирование процессов деградации полимерных композиционных материалов (ПКМ) является ключевым инструментом неразрушающего контроля. Для описания временной деградации применяются критериальный и кинетический

подходы, при которых функция повреждения ω(t) изменяется от 0 до 1, характеризуя переход материала от исходного состояния к полному разрушению. Долговременная деградация моделируется в два этапа: скрытое образование микротрещин и объединение дефектов в макродефекты, с последующим полным разрушением. Зависимость между напряжением и деформацией при учёте повреждения определяется формулой $\tilde{\varepsilon} = \frac{\tilde{\sigma}}{E(1-\omega(t))}$, а предел деформации через предел прочности — $[\varepsilon] = \frac{[\sigma]}{E(1-\omega)}$. Интегральные уравнения типа Вольтерра с оператором повреждения $B^*$ позволяют определить время начального разрушения $t_0$ для различных форм ядра $B(\tau)$ (постоянное, экспоненциальное, сингулярное), отражая влияние истории нагружений на скорость разрушения [1, 5, 6].

В реальных условиях разрушение ПКМ является сложным и анизотропным, поэтому используется векторный параметр повреждения $\varpi = \sqrt{\omega_1^2 + \omega_2^2}$, проекции которого зависят от главных напряжений $\sigma_i\ (i = 1, 2)$ и удовлетворяют условиям $\varpi(0) = 0, \varpi(t^*) = 1$. Для материалов наследуемого типа с памятью о предыдущих нагружениях применён обобщённый закон Гука, что позволяет определить операторную форму материальных констант [1, 6]:

$$\frac{1}{E^*} = \frac{1}{E}(1 + B^*); \quad \frac{\nu^*}{E^*} = \frac{\nu}{E}(1 + B^*)$$

С помощью дифференциальных и интегральных преобразований вычисляются компоненты вектора повреждения для постоянного и экспоненциального ядра, а модуль повреждения выражается как $\varpi(t) = \sqrt{2}\omega(t)$, обеспечивая математическую основу анализа долговременного разрушения ПКМ под сложными напряжениями [1].

## Выводы

Для материалов с наследуемым повреждением решена задача распределённого разрушения, учитывающая свойства при разных напряжённых состояниях. Критериальный подход с учётом материальных констант и метод матриц 4×4 позволили определить характеристики слоистых сред и применимы для оптимизации управления волнами и повышения эффективности передачи.

## Список использованных источников


1. Hasanov, M., Akhmedov, N., Bashirov, R., Piriev, S., Boiprav, O. & Ismailov, N. (2024). The development of a piezoelectric defect detection device through mathematical modeling applied to polymer composite materials. New Mater Compound A, 8(1), 62–74
2. Bashirov, R.J., Ismayilov, N.E., Huseynov, R.E. & Muradov, N.M. (2024). Quality control methods and models of polymer composite materials. Adv. Phys. Res., 6(2), 90–99
3. Islamov, I., Bashirov, R., & Ismayilov, N. (2023). Modeling of a telecommunication optical waveguide with anisotropic medium. IJ of Microw. Opt. Technol., 18(5), 131–139.
4. Chertishchev, V.Yu. (2020). Development of technologies and means of acoustic impedance control of multilayer honeycomb structures from polymer composite materials: thesis, Cand. Sc. (Tech.). Moscow: Bauman MSTU, 180 (in Russian).
5. Slavin, A.V., Dalin, M.A., Dikov, I.A., Boychuk, A.S. & Chertishchev, V.Yu. (2021). Current trends in development of acoustic non-destructive testing methods in aviation industry (review). Trudy VIAM, 12(106), paper no. 11.
6. Ge, C., Wang, L., Liu, G. & Wang, T. (2018). Enhanced electromagnetic properties of carbon nanotubes and sio2-coated carbonyl iron microwave absorber. J. Alloys Compd., 767, 173–180.
7. Shukla, V. (2019). Review of electromagnetic interference shielding materials fabricated by iron ingredients. Nanoscale Advances, 1(5), 1640–1671.
8. Rotkovich, A.A., Tishkevich, D.I., Bondaruk, A.A., German, S.A., Razanau, I.U., Zubar, T.I. & Trukhanov, A.V. (2023). Epoxy-w composite materials: Microstructure, structure and radiation efficiency. Advanced Physical Research, 5(3), 133–45.
9. Vera-Serna, P., Tenorio-González, F.N., Garrido-Hernández, A., Castro, T.L. & Cetina-Quijano, G.M. (2023). Advantage of pet on polymers in magnetization in composite material with nanometric oxides. New Materials, Compounds and Applications, 7(1), 5–14.
10. X. Yuan, Y. Yang, X. Yan, Y. Zhang, and X, Zhang, “Ultra-compact multichannel optical waveguide crossings designed by a particle swarm optimized method,” Optics Communications, vol. 503, 127458, January 2022.


# APPLICATION OF MATHEMATICAL MODELING METHODS IN DETERMINING THE STRUCTURAL PARAMETERS AND PROPERTIES OF PRODUCTS MADE OF POLYMER COMPOSITE MATERIALS


***N.E. Ismayilov***



**Abstract.** The article discusses the application of mathematical modeling methods in areas such as the development of PCM (polymer composite material) environment models to determine the structural parameters of polymer composite materials and products made from them, as well as their associated

properties, the study of the propagation patterns of ultrasonic waves in these media, and the description of material destruction processes.

**Keywords:** polymer composite materials (PCM), non-destructive testing (NDT), environment modeling, low-frequency ultrasound.

https://doi.org/10.29003/m4798.MMMSEC-2025/159-162

# РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМА ДЛЯ АВТОМАТИЧЕСКОГО ПОСТРОЕНИЯ ПОЛИМЕРНЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ SMILES-ФОРМУЛЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

***Казанцева Варвара Денисовна,***
*инженер-исследователь[1], студент[2],*
*varak0318@gmail.com*
***Журавлев Андрей Андреевич,***
*младший научный сотрудник[1],*
*zhuravlyow.andrei@gmail.com*
***Абгарян Каринэ Карленовна,***
*д.ф.-м.н., главный научный сотрудник,*
*заведующая отделом[1], профессор[2],*
*kristal83@mail.ru*

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

**Аннотация:** В работе выполняется моделирование трёхмерных полимерных структур, построенных на основе входных SMILES-формул, с использованием пакета молекулярной динамики LAMMPS. Разработано программное решение, обеспечивающее автоматическую генерацию модели полимера, подготовку входных файлов, репликацию элементарной ячейки, а также пошаговую компрессию и релаксацию системы. Особое внимание уделено применению метода к проводящим полимерам, используемым в гибкой электронике, биосенсорах и органических электронных устройствах.

**Ключевые слова:** проводящие полимеры, молекулярная динамика, математическое моделирование, многомасштабный подход, проводящий полимер.

## Введение

Проводящие полимеры — это особый класс материалов, которые благодаря своим структурным особенностям, обладают свойствами органических соединений в сочетании с электропроводностью, характерной для металлов и полупроводников. Благодаря

гибкости, лёгкости и возможности тонкой химической модификации, такие материалы находят применение в гибкой электронике, органических транзисторах, биосенсорах и функциональных материалах для оптоэлектронных устройств.

Современное предсказательное моделирование структуры и свойств новых полимерных материалов проводится с использованием многомасштабных подходов, начиная с атомно-кристаллического уровня, переходя на нано, мезо и макроуровни и является важным этапом в проектировании устройств на их основе. Процесс моделирования от SMILES-формулы до физически корректной трёхмерной модели связан с необходимостью применять многомасштабные подходы и требует значительных временных и вычислительных затрат.

В данной работе представлен алгоритм, позволяющий автоматизировать процесс моделирования структурных характеристик и отдельных свойств полимеров начиная со SMILES нотации до их релаксированного состояния.

## Моделирование полимерных структур

В работе выполнено моделирование трёхмерных полимерных цепей на основе SMILES-формул, что позволило получить физически корректные структуры проводящих полимеров. Молекулы формировались в виде периодической элементарной ячейки, которая затем реплицировалась для создания объёмной структуры с учётом пространственного расположения цепей и межмолекулярных взаимодействий.

Для исследования структурных особенностей проводящих полимеров использовалось молекулярно-динамическое моделирование с применением пакета LAMMPS (www.lammps.org) и специально разработанное программное решение, обеспечивающее автоматическую генерацию модели полимера, подготовку входных файлов, репликацию элементарной ячейки, а также пошаговую компрессию и релаксацию рассматриваемой структуры. Система подвергалась пошаговой компрессии и релаксации при контролируемой температуре и давлении, что обеспечивало достижение равновесного состояния, характерного для реального материала. На основе полученных моделей вычислялась плотность, которая была верифицирована по экспериментальным данным, что подтвердило корректность проведенного расчета структуры и упаковки полимерных цепей.

Для тестирования методики были выбраны хорошо изученные проводящие полимеры — полиацетилен, полипиррол и политиофен. Результаты расчётов показали, что предложенный подход позволяет формировать объёмные модели полимеров с физически реалистичной плотностью, что является первым шагом к дальнейшему изучению их свойств.

## Выводы

Разработан метод моделирования трёхмерных полимерных структур на основе SMILES-формул с использованием молекулярной динамики. Алгоритм позволяет получать физически корректные структуры полимерных цепей и оценивать их плотность как показатель структурной упорядоченности.

Тестирование на проводящих полимерах (полиацетилен, полипиррол и политиофен) показало, что метод обеспечивает реалистичные значения плотности рассмотренных структур и может быть использован в ходе многомасштабного моделирования для дальнейшего изучения их функциональных свойств, а также при проектировании микроэлектронных устройств на их основе.

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

## Список использованных источников

1. Wang S., et al. *Properties and applications of conducting polymers: A review*. Journal of Materials Science & Technology, 2024, 136, 145–168. https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1110016824000401
2. Morales-Lara F., et al. *Conducting polymers in biosensors: Recent advances and perspectives*. Applied Sciences, 2020, 10(18), 6614. https://www.mdpi.com/2076-3417/10/18/6614
3. Xia Y., Ouyang J. *Recent advances in conducting polymer nanostructures and their applications in optoelectronic devices*. Advanced Materials, 2021, 33(32), 2107172. https://onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/adma.202107172

# DEVELOPMENT OF AN ALGORITHM FOR THE AUTOMATIC CONSTRUCTION OF POLYMER STRUCTURES BASED ON THE SMILES FORMULA USING MOLECULAR DYNAMICS

***V.D. Kazantseva, A.A. Zhuravlev, K.K. Abgaryan***

**Abstract:** This paper simulates three-dimensional polymer structures constructed from input SMILES formulas using the LAMMPS molecular

dynamics package. A software solution has been developed that automatically generates a polymer model, prepares input files, replicates the unit cell, and performs stepwise compression and relaxation of the system. Particular attention is given to the application of this method to conducting polymers used in flexible electronics, biosensors, and organic electronic devices.

https://doi.org/10.29003/m4799.MMMSEC-2025/162-165

# УСКОРЕННЫЙ ПОДБОР ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ УКЛАДКИ МНОГОСЛОЙНЫХ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ С ПОМОЩЬЮ ТЕОРИИ-ОРИЕНТИРОВАННЫХ МОДЕЛЕЙ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

***Мочалова Юлия Дмитриевна,***
*математик[1],*
*juliamochalova96@gmail.com*

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

**Аннотация.** В работе представлен подход применения машинного обучения для ускорения проектирования последовательностей укладки в многослойных полимерных композиционных материалах. Метод сочетает классические модели (классическая теория ламината — CLT и критерий Хашина) с нейросетевой архитектурой и оптимизацией (генетический алгоритм), что позволяет существенно сократить объём требуемых данных и ускорить процесс поиска оптимальных укладок при сопоставимом качестве решения.

**Ключевые слова:** многослойный композиционный материал; укладка; машинное обучение; критерии Хашина.

## Введение

Однонаправленные композиционные материалы обеспечивают высокую удельную прочность и жесткость, но проектирование многослойных композитов сопряжено с большой размерностью пространства параметров (углы укладки слоёв, симметрия и пр.). Традиционные методы оптимизации, основанные на моделировании методом конечных элементов (FEM) и поиске по всему пространству решений, часто требуют значительных вычислительных ресурсов. Недавние исследования показывают, что гибридные подходы, сочетающие физическую теорию и машинное

обучение, позволяют уменьшить требования к данным и ускорить оптимизацию.

В микроэлектронике применяются композиционные материалы, в которых важны не только механические свойства, но также устойчивость к микроповреждениям. Даже небольшие дефекты или неоптимальная последовательность укладки слоёв могут влиять на жизненный цикл изделия. Полимерные композиционные материалы, используемые в печатных платах, микропакетировании и гибкой электронике, являются многослойными, и для них последовательность слоёв и ориентация волокон влияет на механические (жёсткость, прогиб, прочность) и термомеханические свойства.

Цель работы — применить методы машинного обучения в практической задаче подбора последовательностей укладки однонаправленных композиционных материалов, обеспечивая баланс между точностью предсказаний и вычислительной эффективностью.

## Методология

Подход основан на трёх ключевых компонентах: (1) сбор и структурирование обучающих данных с использованием пакетных продуктов (COMSOL), (2) нейросетевая архитектура и (3) оптимизационный модуль (генетический алгоритм), который ищет оптимальные последовательности укладки по предсказанным индексам разрушения и характеристикам жёсткости.

1. Генерация данных: набор обучающих примеров был получен численным моделированием методом конечных элементов (FEM) для сочетаний углов укладки и параметров материалов в программном продукте COMSOL. Результаты расчетов были предобработаны через CLT, что позволило подготовить входы и целевые переменные для применения нейросетей.

2. Нейросетевая архитектура: модель состоит из двух нейронных сетей, каждая из которых решает узкую инженерную задачу и тем самым вводит физическую структуру в обучаемую модель:

- Сеть 1 — предсказывает in-ply напряжения для каждого слоя по последовательности углов укладки;
- Сеть 2 — на основе in-ply напряжений вычисляет индекс разрушения по критерию Hashin (fiber failure index).

Такой модульный подход уменьшает объём требуемых данных и ускоряет получение новых.

3. Оптимизация: на этапе поиска оптимальной последовательности укладки применяется генетический алгоритм (GA). В экспериментах GA просматривает тысячи комбинаций (в работе использовались 1000 решений на этапе поиска) и находит наборы укладок, минимизирующие индекс разрушения или минимизирующие требуемый модуль при заданной жёсткости.

## Данные и обучение

Нейросеть обучалась на данных из COMSOL, подверженных обработке через CLT; использовались стандартные регрессионные loss-функции (MSE) и валидация на отложенной выборке.

## Ограничения

Текущая реализация ориентирована на симметричную укладку однонаправленных композиционных материалов; перенос на сложные геометрии, несимметричные укладки или многокритериальную оптимизацию потребует дополнительных модификаций.

## Выводы

Предложенный комбинированный подход показал практическую применимость для ускоренного получения последовательностей укладок композиционных материалов: он уменьшает объём FEM-генерируемых данных и обеспечивает значительную экономию времени в решении задачи оптимизации. Дальнейшие шаги — расширение геометрий, интеграция с промышленными CAD/CAE.

## Литература

1. Chung, D. D. L. *Polymer-Matrix Composites for Microelectronics.* Journal of Materials Science: Materials in Electronics, 2016, 27, 4259–4276.

2. Liao, Z.; Qiu, C.; Yang, J.; Yang, J.; Yang, L. Accelerating the Layup Sequences Design of Composite Laminates via Theory-Guided Machine Learning Models. Polymers 2022, 14, 3229. https://doi.org/10.3390/polym14153229

3. Kazemi, M.E.; Shanmugam, L.; Yang, L.; Yang, J. A review on the hybrid titanium composite laminates (HTCLs) with focuses on surface treatments, fabrications, and mechanical properties. Compos. Part A Appl. Sci. Manuf. 2020, 128, 105679.

4. Sacco, C.; Radwan, A.B.; Anderson, A.; Harik, R.; Gregory, E. Machine Learning in Composites Manufacturing: A Case Study of Automated Fiber Placement Inspection. Compos. Struct. 2020, 250, 112514.

5. Zhu, W.; Yang, C.; Huang, B.; Guo, Y.; Xie, L.; Zhang, Y.; Wang, J. Predicting and Optimizing Coupling Effect in Magnetoelectric Multi-Phase Composites Based on Machine Learning Algorithm. Compos. Struct. 2021, 271, 114175.
6. Parandoush, P.; Lin, D. A review on additive manufacturing of polymer-fiber composites. Compos. Struct. 2017, 182, 36–53.

# ACCELERATED DESIGN OF STACKING SEQUENCES FOR MULTILAYER COMPOSITE MATERIALS USING THEORY-GUIDED MACHINE LEARNING MODELS

***Yu.D. Mochalova***

**Abstract.** This work presents a machine learning–based approach for accelerating the design of stacking sequences in multilayer composite materials. The method integrates classical models — the Classical Laminate Theory (CLT) and the Hashin failure criteria — with a neural network architecture and optimization techniques (genetic algorithm). This hybrid approach significantly reduces the required data volume and accelerates the search for optimal stacking configurations while maintaining comparable solution quality.

**Keywords:** multilayer composite material; stacking sequence; machine learning; Hashin criteria.

# 7. G

# ПРОБЛЕМЫ ОБЕСПЕЧЕНИЯ НАДЕЖНОСТИ ЭКБ МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ И СИСТЕМ НА ЕЕ ОСНОВЕ

УДК 681.5.015:004.032.6
https://doi.org/10.29003/m4800.MMMSEC-2025/168-170

# СПАЙКОВЫЕ НЕЙРОННЫЕ СЕТИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ СТАБИЛИЗАЦИИ ОБРАТНОГО МАЯТНИКА

***Сергеев Владимир Алексеевич***
*АО «НИИ молекулярной электроники»[1]*
*sergeev.va@phystech.edu*
***Тельминов Олег Александрович,***
*к.т.н., начальник отдела[1],*
*otelminov@niime.ru*

*[1] АО «НИИМЭ» 124460, Россия, г. Москва, г. Зеленоград, ул. Академика Валиева, д. 6 стр. 1*

**Аннотация.** В статье представлен новый подход к стабилизации обратного маятника, основанный на применении спайковых нейронных сетей (SNN). Создан действующий демонстратор на базе гироскутера и проведено сравнение предложенного метода с классическими искусственными нейронными сетями (ANN). В рамках исследования выполнено моделирование динамики системы, обучение агентов с подкреплением на основе ANN с последующим преобразованием в SNN, а также прямое обучение SNN. Сравнительный анализ проводился по таким критериям, как качество управления, вычислительная сложность и энергоэффективность. Продемонстрировано, что SNN обеспечивают качество управления, аналогичное ANN, но при существенно меньшем энергопотреблении, что открывает перспективы для их применения в энергоограниченных встраиваемых системах и робототехнике.

## Введение

Задача стабилизации обратного маятника является классической проблемой в теории управления и робототехнике. Современные подходы с использованием глубокого обучения с подкреплением (DRL) отлично справляются с решением такой задачи, однако традиционные искусственные нейронные сети (ANN), лежащие в основе DRL-агентов, требуют значительных вычислительных ресурсов и энергозатрат, что затрудняет их развертывание на автономных мобильных устройствах с ограниченной энергоемкостью [1].

## Постановка задачи

Для решения задачи была построена модель обратного маятника на движущейся тележке на физическом движке Unity. Агент DRL был обучен на основе многослойного перцептрона (ANN) с использованием алгоритма PPO [2]. Также был реализован агент на основе SNN, используя метод конвертации обученной ANN [3] и метод прямого обучения [4]. Для оценки качества работы нейросети оценивалось время стабилизации тележки, устойчивость к внешним возмущениям и энергоэффективность.

## Проектирование, обучение и тестирование нейросетей

Обучение ANN производилось с использованием библиотеки TensorFlow с помощью гибридного метода: **Behavior cloning** с последующим дообучением алгоритмом PPO. Моделирование SNN проводилось с помощью библиотеки Brian2 [5].

Для последующего использования модели на реальных устройствах при обучении были реализованы следующие параметры:

- разрешающие способности гироскопа и сонара;
- дискретность выходного напряжения от драйверов моторов;
- шум и случайные скачки показаний датчиков;
- задержка реакции контроллера.

Тестирование качества управления по финальным счетам (scores), тогда как оценка потребления энергии производилась через подсчет количества синаптических операций (ACs) для SNN и операций с плавающей точкой (FLOPs) для ANN. Выигрыш по энергии в симуляции составил почти 2 порядка. Тесты на реальном устройстве показали схожие результаты.

## Заключение

Проведенное исследование подтвердило перспективность применения спайковых нейронных сетей (SNN) в робототехнике. Экспериментально показано, что SNN способны достигать качества управления, сопоставимого с традиционными ANN-агентами, обученными по алгоритму PPO. Ключевым результатом работы является демонстрация существенно более высокой **энергоэффективности** SNN-решений. Это преимущество обусловлено их фундаментальной особенностью — редкой импульсной активностью (спайковыми последовательностями), которая приводит к резкому снижению вычислительной нагрузки по сравнению с ANN. Таким

образом, SNN представляют собой оптимальный выбор для развертывания интеллектуальных агентов управления на автономных мобильных платформах с строго ограниченными энергетическими ресурсами.

В будущем планируется аппаратная верификация на нейроморфных процессорах на различных компонентах и исследование возможности обучения на борту для быстрой адаптации к внешним условиям и износу механизмов.

## Библиографический список


1. Красников Г.Я., Горнев Е.С., Матюшкин И.В. Общая теория технологий и микроэлектроника. — М.: Техносфера, 2020. — 434 с. ISBN 978-5-94836-611-1.
2. Schulman J., Wolski F., Dhariwal P., et al. Proximal Policy Optimization Algorithms // arXiv preprint arXiv:1707.06347. — 2017.
3. Tang G., Kumar N., Yoo R., et al. Deep Reinforcement Learning with Population-Coded Spiking Neural Network for Continuous Control // Proceedings of the 2020 Conference on Robot Learning. — 2020. — P. 2016–2029.
4. Diehl P.U., Neil D., Binas J., et al. Fast-classifying, high-accuracy spiking deep networks through weight and threshold balancing // 2015 International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN). — 2015. — P. 1–8. DOI: 10.1109/IJCNN.2015.7280696.
5. Stimberg M., Brette R., Goodman D.F. Brian 2, an intuitive and efficient neural simulator // eLife. — 2019. — Vol. 8. — e47314. DOI: 10.7554/eLife.47314.


# METHOD AND DEMONSTRATOR OF INVERSE PENDULUM STABILIZATION USING A SPIKING NEURAL NETWORK


***V.A. Sergeev, O.A. Telminov***



**Abstract.** This paper presents a new approach to maintaining an inverted pendulum based on spiking neural networks (SNNs). A working demonstrator based on a hoverboard is created, and the proposed method is compared with classical artificial neural networks (ANNs). The study included modeling the system dynamics, training agents with ANN-based connections and sequentially transforming them into SNNs, and directly training the SNNs. A comparative analysis is conducted based on criteria such as quality control, computational complexity, and energy efficiency. It is demonstrated that SNNs provide control quality comparable to ANNs, but with improved performance and lower power consumption, opening up potential for their application in energy-constrained embedded intelligent systems and robotics.

# 8. Н

# МЕТОДЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В ФОТОНИКЕ

УДК 004.932
https://doi.org/10.29003/m4801.MMMSEC-2025/172-175

# МНОГОМАСШТАБНЫЙ НЕЙРОСЕТЕВОЙ ПОИСК ДЛЯ ОРИЕНТАЦИИ ПО КАРТЕ МЕСТНОСТИ[1]

***Кобелев Виктор Антонович***
*АО «НИИ молекулярной электроники»[1]*
*vkobelev@niime.ru*
***Тельминов Олег Александрович,***
*к.т.н., начальник отдела[1],*
*otelminov@niime.ru*

*[1] АО «НИИМЭ» 124460, Россия, г. Москва, г. Зеленоград, ул. Академика Валиева, д. 6 стр. 1*

**Аннотация.** Предложен алгоритм многомасштабного нейросетевого поиска, который может быть применен, например, для ориентации беспилотного летательного аппарата (БПЛА) по карте местности. Предложенный вариант на основе EfficientNetB0 превосходит классические методы компьютерного зрения, обеспечивая точность локализации 91%. При разработке особое внимание было уделено методам многомасштабного анализа и аугментации данных, приближающих условия работы системы к реальной эксплуатации.

**Ключевые слова:** нейросетевые технологии, беспилотный летательный аппарат, компьютерное зрение, EfficientNet, датасет, многомасштабный поиск.

## Введение

Задача ориентации беспилотного летательного аппарата при отсутствии классических систем навигации (GPS/ГЛОНАСС) требует точного определения местоположения фрагмента в условиях значительного изменения масштаба и ракурса съёмки. Считается, что алгоритмы наподобие поиска по шаблону (template matching) или SIFT (scale-invariant feature transform, алгоритм компьютерного зрения, который инвариантен к изменениям масштаба, поворота, шума и т.д.) должны легко справляться с такой задачей [1]. Но на практике разработчики сталкиваются с серьёзными ограничениями: масштабными искажениями, атмосферными помехами, различиями в цветовых палитрах картографических сервисов и главное — необходимостью высокой точности локализации.

[1] © Кобелев В.А, Тельминов О.А. 2025

## Постановка задачи и формирование DataSet

Целью работы являлась разработка алгоритма определения местоположения БПЛА на цифровой карте местности. Алгоритмдолжен обрабатывать входное изображение фрагмента местности и определять его координаты на целевой карте. В качестве примера размер карты выбран 4352×4352 пикселя.

Входными параметрами системы являются: **I**1 — пиксельное представление фрагмента карты, **I**2 — пиксельное представление целевой карты, M — метаданные о координатах фрагментов целевой карты. В качестве выходных параметров системы используются: D1 — координаты центра фрагмента на целевой карте (x, y), D2 — вероятность совпадения.

Множество примеров для обучения сформировано на основе картографических данных, полученных из открытых источников. Для создания датасета были выполнены следующие действия:

- сборка большой карты размером 4352×4352 из 289 фрагментов;
- создание дополнительных фрагментов с искусственными шумами: атмосферные помехи, размытие, изменение масштаба и разного рода цветовые искажения.

## Проектирование, обучение и тестирование нейросети

В основе системы — сиамская архитектура на EfficientNetB0 для сравнения двух изображений: маленького фрагмента и части большой карты. Сеть учится находить место, где фрагмент лучше всего «подходит» к карте. Для этого она строит «карту совпадений», где яркие точки — вероятные позиции фрагмента. Координаты берём из самой яркой области, а «уверенность» — из её яркости [2–4].

Датасет из участков карт разбит в пропорции 80 на 20 на набор для обучения и валидации нейросетевой модели. Для исключения неоднозначности при работе сети при изменении масштаба и наклона последовательно используются:

- разбиение большой карты на квадраты и последующий их просмотр с небольшим перекрытием;
- проверка на нескольких приближенных и удаленных масштабах;
- незначительное сглаживание случайных ложных пиков в результате.

Обучение проводили в TensorFlow: сначала подстраивали верхнюю часть сети, затем дообучали всю модель. При обучении использовались:

- защита от переобучения с использованием алгоритма ранней остановки;
- приёмы для аугментации датасета: случайное изменение масштаба и поворота, размытие, шум, сжатие JPEG, изменения яркости и цвета;
- добавление похожих, но заведомо неверных участков карты для обучения нейросети способности выявлять подобные фрагменты и исключать их из рассмотрения.

При валидации оценивали: среднюю ошибку по пикселям, долю правильных попаданий в радиус 16–32 пикселей, время и память на обработку одной большой карты.

На тесте из 300 примеров получили среднюю ошибку 18 пикселей и точность 91 % (попадание в радиус 32 пикселей).

По критерию скорости работы предлагаемая система примерно в 5 раз эффективнее классических методов (SIFT/ORB (Oriented FAST and Rotated BRIEF — детектор особых точек)/поиск по шаблону) при сопоставимой или лучшей точности.

## Заключение

В результате исследования был разработан алгоритм многомасштабного нейросетевого поиска для ориентации по карте местности, размером 4352×4352 пикселей. Это позволило ускорить процесс поиска местонахождения по сравнению с готовыми решениями из библиотек OpenCV. Существенно сокращены затраты на ресурсы, а скорость обработки увеличилась в 5 раз по сравнению с классическими методами (SIFT, ORB). Средняя точность позиционирования составила 91 % при ошибке в 18 пикселей, что является приемлемым результатом для дальнейшего применения в навигационных задачах БПЛА. Перспективы работы видятся в использовании более глубоких архитектур и применении методов аугментации, сильнее имитирующих реальные условия полета. В дальнейшем планируется аппаратная реализация на инференс устройствах, основанных на традиционных нейропроцессорах (КМОП-технология [5]) или с применением элементной базы на новых физических принципах.

## Библиографический список

1. Rublee E., Rabaud V., Konolige K., Bradski G. ORB: An Efficient Alternative to SIFT or SURF // Proceedings of the IEEE International Conference on Computer Vision (ICCV). — 2011. — P. 2564–2571. DOI: 10.1109/ICCV.2011.6126544.
2. Поляк Б.Т. Введение в оптимизацию. — М.: Наука, 1983.
3. Koch G., Zemel R., Salakhutdinov R. Siamese Neural Networks for One-shot Image Recognition // ICML Deep Learning Workshop. — 2015.
4. Bertinetto L., Valmadre J., Henriques J.F., Vedaldi A., Torr P.H.S. Fully-Convolutional Siamese Networks for Object Tracking // Computer Vision — ECCV 2016 Workshops. — Cham: Springer, 2016. — P. 850–865. DOI: 10.1007/978-3-319-48881-3_56.
5. Красников Г.Я., Горнев Е.С., Матюшкин И.В. Общая теория технологий и микроэлектроника. — М.: Техносфера, 2020. — 434 с. ISBN 978-5-94836-611-1.


## MULTI-SCALE NEURAL NETWORK SEARCH FOR TERRAIN MAP ORIENTATION


***V.A. Kobelev, O.A. Telminov***



**Abstract.** A multi-scale neural network search system has been developed for navigating an unmanned aerial vehicle using a terrain map. The proposed solution, based on EfficientNet, outperforms classic computer vision methods, achieving 91% localization accuracy. During development, special attention was paid to multi-scale analysis and data augmentation methods, bringing the system's operating conditions closer to real-world use.



**Keywords:** neural network technologies, unmanned aerial vehicle, computer vision, EfficientNet, dataset.

УДК 004.3:004.9
https://doi.org/10.29003/m4802.MMMSEC-2025/175-177


# ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЕТ ЭЛЕКТРООПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ AIIIBV ГЕТЕРОСТРУКТР ДЛЯ СОЗДАНИЯ ФОТОННЫХ ИНТЕГРАЛЬНЫХ СХЕМ


***Панфилов Андрей Сергеевич***
***Хазанова Софья Владиславовна***
***Бобров Александр Игоревич***
***Горшков Алексей Павлович***

*ННГУ им. Лобачевского, г. Нижний Новгород*



**Аннотация.** В работе выполняется электрооптических свойств гетероструктур AIIIBV, в частности поглощения и изменения показателя преломления, которые могут быть использованы для создания фотонных интегральных схем.

**Ключевые слова:** интегральная схема, гетероструктура, арсенид галлия, эффект Штарка.

## Введение

Оптические системы связи обладают рядом преимуществ по сравнению с электронными, среди которых более высокая скорость передачи информации, однонаправленность потока информации, широкополосность и малое затухание сигнала. Амплитуда, фаза, частота и поляризация оптической несущей, а также любая комбинация вышеперечисленного могут быть использованы для кодирования и модуляции информационных сигналов. Для реализации подобных устройств могут быть использованы массивы полупроводниковых квантовых ям на основе материалов III–V. Принцип действия данных устройств основан на вариации коэффициента преломления под воздействием электрического поля, обусловленной квантово-размерным эффектом Штарка.

## Моделирование электрооптических свойств

В данной работе с помощью численного метода на основе конечных разностей было решено уравнение Шредингера [1], получены энергии размерного квантования и огибающие волновые функции для нескольких различных дизайнов гетероструктур. Результаты расчетов демонстрируют заметное перераспределение электронной плотности в системах квантовых ям $In_xGa_{1-x}As/GaAs$, обусловленное квантово-размерным эффектом Штарка. На основе рассчитанных энергий размерного квантования и огибающих волновых функций были получены спектры коэффициента поглощения как результат сложения межзонного и экситонного вкладов поглощения [2]. Расчет энергии связи и боровского радиуса экситона проведен вариационным методом.

Используя полученные спектры поглощения в достаточно широком диапазоне длин волн (900–1800 нм), с помощью соотношения Крамерса-Кронига [3], получены спектры изменения показателя преломления под действием обратного смещения на длине волны 1550 нм.

*Работа выполнена в рамках научной программы Национального центра физики и математики, направление № 1 «Национальный центр исследования архитектур суперкомпьютеров. Этап 2023–2025».*

## Выводы

Результаты расчетов показывают, что штарковский сдвиг более заметен в системах туннельно-связанных квантовых ям (до 25 мэВ) в сравнении. с одиночными квантовыми ямами. Заметное изменение показателя преломления в требуемом диапазоне длин волн (1,55 мкм) позволяет использовать данные гетероструктуры в качестве активной среды для оптических интегральных схем.

## Список использованных источников


1. Nakamura K. et al. Numerical analysis of the absorption and the refractive index change in arbitrary semiconductor quantum-well structures // IEEE journal of quantum electronics — 1992. — Vol. 28.
2. Zolotarev V. V. et al. Enhancement of the refractive index modulation in a modulator based on GaAs/AlGaAs quantum wells // Semiconductor Science Technol. — 2019. — Vol. 34, No. 9. — P. 095005-1–095005-8.
3. Тимофеев В.Б. Оптическая спектроскопия объемных полупроводников и наноструктур: Учебное пособие. — СПб.: Издательство «Лань», 2014. — 512 с.


# NUMERICAL CALCULATION OF ELECTRO-OPTICAL PROPERTIES OF III-V HETEROSTRUCTURES FOR CREATING PHOTONIC INTEGRATED CIRCUITS


***A.S. Panfilov, S.V. Khazanova, A.I. Bobrov, A.P. Gorshkov***



**Abstract.** The paper studies the electro-optical properties of III–V heterostructures, in particular absorption and refractive index changes, which can be used to create photonic integrated circuits.



*Keywords:* integrated circuits, heterostructure, gallium arsenide, Stark effect.

УДК 004.3:004.9
https://doi.org/10.29003/m4803.MMMSEC-2025/178-180

# ОСОБЕННОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ ИСТОЧНИКА НЕЙТРОНОВ (КИНК) ДЛЯ ПРОТОННЫХ УСКОРИТЕЛЕЙ И ПРИМЕНЕНИЕ ПЛАЗМОННЫХ НАНОЧАСТИЦ ЗОЛОТА В КОМБИНИРОВАННЫХ ВИДАХ ПРОТОННОЙ И НЕЙТРОННОЙ ТЕРАПИИ

***В.В. Сиксин*** [1],
*antktech@inbox.ru*
***Д.Н. Трунов***[2]

[1] *Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук, Ленинский просп., д. 53, Москва, 119991, Российская Федерация*
[2] *Институт ядерных исследований РАН, Троицк, 108840 Россия*

**Аннотация.** Для ускорителя «Прометеус» смоделирован компактный источник замедленных нейтронов(КИНК). Описана возможность применения светочувствительных нанопрепататов в виде плазмонных наночастиц золота, для усиления дозообразования в поверхностном слое опухоли.

**Ключевые слова:** компактные источники нейтронов, моделирование программой Geant 4.

## Введение

Конфигурация для моделирования установки компактного источника нейтронов (КИНК) приведена на рис. 1. Для расчетов и изготовления установки КИНК был выбран диапазон энергий ускорителя от 30 до 70 МэВ.

## Моделирование малой установки 40×40 мм

Схема геометрии установки нейтронного источника на ускорителе «Прометеус» для расчета программы Geant-4 приведена на рис. 1. В качестве биологической защиты использован материал В wiki-2 [1]. Итоговая плотность wiki-2 0.6 г/см$^3$.

На рис. 2б приведена схема расположения оборудования на канале на ускорителе «Прометеус» при облучении биологического фантома. Практические измерения на прототипе установки КИНК были проведены на ускорителе «Прометеус» в 2023–2024, результаты которых приведены в работе [2].

На рис. 2б представлена схема общего расположения детекторов на протонном ускорителе для облучения поверхностного слоя мишени 8.

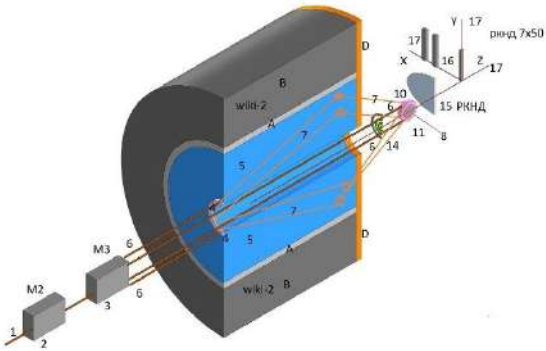
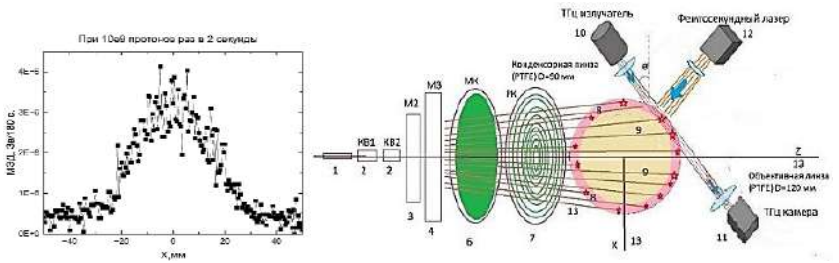



Рисунок 1 — Схема конфигурации установки КИНК
для облучения биологического фантома:

М2, М3 — сканирующие магниты, *4* — нейтронопроизводящая мишень, *5* — водный фантом; *6* — сканирующие споты протонного пучка; *7* — замедленные нейтроны; *8* — внешняя поверхность опухоли; *10* — область мишени (опухоли); *14* — протонная камера РК; *15* — нейтронная камера РКНД; *16* — нейтронная камера — рknд 7x50; *17* — система координат xyz; А — материал отражающий нейтроны внутрь канала; В — материал wiki-2, описанный в работе [1]




а б

Рисунок 2: а — профиль замедленных нейтронов на выходе из КИНК, б — схема облучения поверхности 8 биологического фантома:

*1* — ускоритель, *8* — кольцевая область мишени облучаемая пучком, *9* — внутренняя не облучаемая сканирующим пучком область мишени, в которую вводятся плазмонные наночастицы золота, *10* — Тгц излучатель обеспечивающий во время сеанса подсветку мишени на пропускание, *11* — ТГц камера контролирующая изображение кольцевой зоны облучения мишени на пропускание, *12* — фемтосекундный лазер облучающий внешнюю 8 поверхность биологического фантома

## Схема при облучении биологического фантома с применением плазмонных наночастиц

В биологический фантом 9 вводятся плазмонные наночастицы золота [3], чувствительные к определенным длинам волн и во время эксперимента биологический фантом облучается от импуль-

сного фемтосекундного лазера, что обеспечивает локальный нагрев и последующее разрушение носителей вне и внутри клетки. Средняя локальная температура разрушения носителей около 170 градусов и не является цитотоксичным, для модельных клеток (мезенхимальные стволовые клетки и клетки клеточной карциномы), за счет мгновенного остывания.

## Выводы

В работе выполнено моделирование и разработка нейтронного источника КИНК для применения в комбинированных видах протонной и нейтронной терапии. Первое окно прозрачности при облучении от лазера находится в диапазоне 750–1000 нм, а второе между 1000 и 1700 нм, где поглощение воды минимально и свет может проходить в ткани доходя до опухоли. Предлагаемый комбинированный метод подходит для поверхностных опухолей, облучаемых согласно рисунку 2б на глубину около 5 мм.

## Список использованных источников

1. Сиксин В.В. Патент на изобретение № 2844145 «Композиционный материал для защиты от нейтронного излучения (варианты) и способ его получения». Опубликовано 28.07.2025 Бюл. № 22.

2. Сиксин В.В., Щеголев И.Ю. Формирование смешанного источника эпитепловых нейтронов и сканирующего пучка протонов на КПТ «Прометеус» для лечения опухолей в режиме флэш-терапии. Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2024; 27(4). https://doi.org/10.17073/1609-3577j.met202406.596.

3. Jain P.K. et al. Calculated absorption and scattering properties of gold nanoparticles of different size, shape, and composition: Applications in biological imaging and biomedicine // J. Phys. Chem. B. American Chemical Society , 2006. Vol. 110, № 14. P. 7238–7248.

# FEATURE OF MODELING OF NEUTRON SOURSE (KINK) FOR PROTON ACCELERATORS AND APPLICATION OF GOLD PLASMINIC NANOPARTICLES IN COMBINED TYPES OF PROTON AND NEUTRON THERAPY

***V.V. Siksin, D.N. Trunov***

**Abstract.** For the Prometheus accelerator, a compact source of slow-moving neutrons (KINK) was simulated. The possibility of using light-sensitive nano preparations in the form of gold plasmonic nanoparticles to enhance the dose formation in the surface layer of the tumor is described.

**Keywords:** compact neutron sources, Geant 4 simulation, light-sensitive nanomaterials, and gold plasmonic nanoparticles.

Научное издание

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ**
в материаловедении электронных компонентов
**МММЭК–2025**
20–22 октября 2025 г., Москва
Материалы VII 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 18.10.2025 г.
Формат 60x901/16. Усл.печ.л. 11,375.
Тираж 300 (1–20) экз. Изд. № 134.

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