

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

в материаловедении электронных компонентов

МММЭК-2024

Материалы VI Международной конференции



ФЕДЕРАЛЬНЫЙ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
Информатика
и Управление
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК



НИИМЭ
НИИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ
ЭЛЕКТРОНИКИ

ПЕРСПЕКТИВНЫЕ
МАТЕРИАЛЫ
И ЭЛЕМЕНТАРНАЯ БАЗА
ИНФОРМАЦИОННЫХ
И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ
СИСТЕМ

21-23 октября 2024г. г. Москва Россия

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Вычислительный центр Федерального исследовательского центра
«Информатика и управление» РАН
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
факультет вычислительной математики и кибернетики
Научный совет РАН «Фундаментальные проблемы элементной базы
информационно-вычислительных и управляющих систем и материалов для их создания»
Консорциум «Перспективные материалы и элементная база информационных
и вычислительных систем»

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
в материаловедении электронных компонентов
МММЭК–2024**

Материалы VI международной конференции

21–23 октября 2024 г., Москва

**MATHEMATICAL MODELING
in materials science of electronic components
ICM3SEC–2024**

Proceedings of the international conference

October 21–23, 2024 Moscow, Russia



МОСКВА – 2024

УДК 519.6.517.958.533.6
ББК 22.2.2218
М34



<https://elibrary.ru/hsywnj>

Ответственный редактор:

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

Математическое моделирование в материаловедении электрон-
М34 **ных компонентов.** МММЭК–2024. 21–23 октября 2024 г., Москва :
Материалы VI Международной конференции. – Москва : МАКС
Пресс, 2024. – 190 с. : ил.

ISBN 978-5-317-07281-0

<https://doi.org/10.29003/m4249.MMMSEC-2024>

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

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

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

УДК 519.6.517.958.533.6

ББК 22.2.2218

Mathematical modeling in materials science of electronic component.
ICM3SEC–2024. October 21–23, 2024, Moscow : Proceedings of the
international conference. – Moscow : MAKS Press, 2024. – 190 p.

ISBN 978-5-317-07281-0

<https://doi.org/10.29003/m4249.MMMSEC-2024>

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 978-5-317-07281-0

© Авторы, 2024

© Оформление. ООО «МАКС Пресс», 2024

ОГЛАВЛЕНИЕ

1. А. Современные проблемы создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов с заданными свойствами, включая применение новых методов и средств анализа больших данных.....	7
<i>Зацаринный А.А., Абгарян К.К.</i> Современные подходы к решению проблемы синтеза новых материалов с заданными свойствами	8
<i>Гаврилов Е.С., Абгарян К.К., Кулешиов И.А., Ереценко А.В.</i> Прототип базы данных по структурам и их свойствам для создания энерго-независимой памяти на основе технологии ReRAM	22
<i>Денисов С.А., Кондрашев В.А.</i> Динамика использования ресурсов ЦКП «Информатика» для решения задач материаловедения.....	27
<i>Денисов С.А., Кондрашев В.А.</i> Подходы к созданию высокопроизводительной вычислительной среды для моделирования ячеек энерго-независимой памяти на ЦКП «Информатика»	30
<i>Денисов С.А., Кондрашев В.А., Зацаринный А.А.</i> Основные направления исследований, проводимые с использованием вычислительных ресурсов ЦКП «Информатика»	34
<i>Сеченых П.А.</i> Проблематика описания и анализа наборов данных для информационного обеспечения ресурсоемких приложений	38
2. В. Проблемы развития материаловедения квантоворазмерных электронных гетероструктур	41
<i>Булах С.С., Чибисов А.Н., Фёдоров А.С.</i> Поведение электронного кубита в 2D слое MoS ₂	42
<i>Образцов К.В., Чибисов А.Н., Фёдоров А.С.</i> Квантово-механическое исследование дырочных кубитов в двумерных слоях германия	45
<i>Прохоренко А.В., Чибисов А.Н., Гниденко А.А., Чибисова М.А., Фёдоров А.С.</i> Предсказательное моделирование новых двумерных аллотропов кремния	49
<i>Савельев В.В., Хазанова С.В.</i> Расчет транспортных характеристик бислоя графена с различным периодом муара.....	52
<i>Турин В.О., Назрицкий И.В., Куреев Д.Д., Андреев П.А., Илюшина Ю.В.</i> Модифицированная цепочка масса-в-массе.....	55

3. С. Математическое моделирование в структурном материаловедении (многоуровневые, многомасштабные модели, имитационные модели и т.д.)	61
<i>Абгарян К.К.</i> Компьютерное моделирование работы ячеек энергонезависимой памяти на основе технологии ReRAM	62
<i>Баринов А.А., Хвесьюк В.И.</i> О проблемах расчета эффективной теплопроводности многослойных структур и контактного термического сопротивления интерфейсов	69
<i>Жачук Р.А., Coutinho José.</i> Роль фононной энтропии в формировании структуры 7×7 на поверхности Si(111).....	72
<i>Инь Фэй, Лю Шисян, Хвесьюк В.И.</i> Определение вероятности зеркального отражения упругих волн от шероховатой поверхности	75
<i>Костиков В.А., Довнарнович А.Д., Нефедов О.А., Аветисов И.Х.</i> Численное моделирование теплового узла установки для выращивания монокристаллов теллурида кадмия методом VGF с введением аксиальных низкочастотных вибраций.....	78
<i>Локтионов И.А., Бажанов Д.И.</i> Влияние взаимодействия дзалошинского-мория на магнитную динамику атомных димеров на нитридизированной поверхности меди.....	81
<i>Лю Шисян, Хвесьюк В.И.</i> Расчет взаимодействия фононов в графене с учётом анизотропии атомарной решётки	85
<i>Манцурова С.В., Шварц Н.Л.</i> Монте-Карло моделирование начальных этапов роста планарных нанопроволок GaAs с использованием пленок SiO _x	88
<i>Матюшкин И.В.</i> Трёх-масштабность моделирования и язык К-систем: на примере датчика УФ-излучения на основе наностержней из оксида цинка.....	91
<i>Везуб Н.А., Простомолотов А.И.</i> Математическое моделирование газодинамики и переноса примесей при выращивании монокристаллов кремния на установке РЕДМЕТ-90М	94
<i>Свирин Д.В., Бажанов Д.И.</i> Получение аналитической функции потенциала межатомного взаимодействия методами машинного обучения	98
<i>Тихонова Е.Д., Горнев Е.С.</i> Разработка модели для оптимизации амплитуды неровности края линии в процессе двойной литографии ..	102
<i>Фаттахов А.Ф., Бажанов Д.И.</i> Исследование из первых принципов процесса сегрегации примесей никеля в структуре LSNT перовскита	105
<i>Чжан Гэ, Лю Шисян, Хвесьюк В.И.</i> Расчет фононных колебаний в кремниевых нанопленках с помощью метода динамики решетки.....	108

4. D. Моделирование размерных, радиационных, поверхностных и других дефектов в полупроводниковой наноэлектронике... 113

Стрельцов Н.А., Кобелева С.П., Юрчук С.Ю. Расчет состава равновесной паровой фазы при испарении халькогенидов кадмия и цинка в ограниченный объем 114

Чибисов А.Н., Смотрова Д.М., Анураг Сривастава. Квантово-механическое моделирование атомной и электронной структуры фаз $\text{Re}_6\text{Se}_8\text{Cl}_2$ 117

Эль Занин А.Р., Борознин С.В. Квантово-химическое моделирование поверхностного модифицирования углеродной нанотрубки типа «кресло» оксидом кобальта 122

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

Бусыгин А.Н., Габдулин Б.Х., Удовиченко С.Ю. Шулаев Н.А., Писарев А.Д., Ибрагим А.Х.А. Нестационарная модель массопереноса зарядов в самосогласованном электрическом поле для определения влияния температуры на электрофизические свойства металлооксидного мемристора 128

Журавлев А.А., Абгарян К.К., Ревизников Д.Л. Моделирование ионной динамики в ReRAM элементах 131

Курьянов А.О., Теплов Г.С., Федотов М.И. Моделирование селектора ReRAM на основе туннельного диода 134

Морозов А.Ю., Абгарян К.К., Ревизников Д.Л. Двухэтапный метод построения компактных моделей элементов ReRAM..... 137

Щербаков В.С. Аспекты физического моделирования магниторезистивной памяти STT-MRAM на базе ячейки МТП с туннельным барьером MgO..... 141

6. F. Моделирование структур и свойств композиционных материалов с нанокристаллами, нанокластерами, наноморфными включениями и т.д. 145

Волокитин А.В., Панин Е.А. Моделирование эволюции микроструктуры медной проволоки при деформировании новым совмещенным способом 146

Волокитина И.Е., Панин Е.А. Моделирование эволюции микроструктуры прутков из углеродистой стали при деформировании новым комбинированным способом..... 149

Мартиросян М.Д. Приложение гамма-распределения к моделированию двухточечного изгиба многослойного стержня 152

7. Г. Проблемы обеспечения надежности ЭКБ микроэлектроники и систем на ее основе 155

Гуров К.О. Повышение стойкости электронных компонентов в системе индуктивного энергообеспечения имплантируемых медицинских приборов..... 156

Данилов А.А. Повышение стойкости электронных компонентов в системе индуктивного энергообеспечения имплантируемых медицинских приборов..... 159

Миндубаев Э.А. Применение цифровых двойников для повышения надёжности имплантируемых микроэлектронных систем 162

Плеханов Л.П. Проблемы создания синтезатора самосинхронных схем по синхронному описанию 165

Тельминов О.А. Особенности архитектур нейро- и нейроморфных процессоров 168

Хилько Д.В., Орлов Г.А., Григорьев А.А., Анполонов Г.С. Метод десинхронизации для синтеза самосинхронных схем..... 170

8. Н. Методы математического моделирования в фотонике 175

Панфилов А.С., Хазанова С.В., Бобров А.И., Гориков А.П., Нежданов А.В. Расчет вариации показателя преломления в GE/SIGE гетероструктурах для создания оптических модуляторов..... 176

Савельев М.С., Василевский П.Н., Герасименко А.Ю., Толбин А.Ю. Оценка нелинейно-оптического отклика пента(хлор)цикло-трифосфазензамещенных монофталоцианинов Zn, Cu и Co на основе корреляционных моделей..... 178

Саенко А.В., Жейц В.В., Билык Г.Е., Смирнов В.А. Моделирование фотоэлектрических характеристик солнечных элементов на основе гетероперехода ZnO/CuO..... 186

1. А

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

СОВРЕМЕННЫЕ ПОДХОДЫ К РЕШЕНИЮ ПРОБЛЕМЫ СИНТЕЗА НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ С ЗАДАНЫМИ СВОЙСТВАМИ

*Зацаринный Александр Алексеевич¹,
д.т.н., г.н.с., руководитель отделения ФИЦ ИУ РАН,
e-mail: alex250451@mail.ru*

*Абгарян Каринэ Карленовна^{1,2},
д.ф.-м.н., главный научный сотрудник,
зав. отделом ФИЦ ИУ РАН,
e-mail: kristal83@mail.ru*

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

Аннотация. В статье рассматриваются современные подходы к решению задач, связанных с синтезом новых материалов. Отмечена актуальность этой важнейшей стратегической задачи инновационного развития в современных условиях. Новые материалы с заданными свойствами крайне необходимы для производства надежных российских программно-аппаратных изделий как широкого, так и специального назначения. Показана значимость разработки методов математического моделирования и программных решений на их основе для развития инновационных подходов в области синтеза новых материалов. Отмечено, что для дальнейшего развития требуется отечественная высокопроизводительная среда для научных исследований, обладающая комфортным пользовательским интерфейсом, гибкостью в настройке ресурсов, высокой производительностью и надежностью.

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

Введение

Важнейшими событиями в этом году явились 300-летие создания Российской академии наук [1] и утверждение Президентом России новой Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации, разработанной в соответствии с поручением Президента на заседании Совета по науке и образованию 8 февраля 2023 г. [2].

В Стратегии определены цель и основные задачи научно-технологического развития Российской Федерации, уточнены

приоритеты развития (их стало 9) [3]. В Послании Президента Федеральному собранию 28 февраля 2024 г. [4] отмечено, что в условиях масштабных экономических и финансовых санкций Запада против России обеспечено устойчивое состояние экономики и системы управления. Вместо ожидавшегося спада в 2023 году российская экономика показала рост (по разным оценкам – на 2,5–3,0%) и вышла на пятое место в мире [5].

При этом немаловажную роль в обеспечении стабильного функционирования российской экономики в сложнейших условиях сыграли процессы, связанные с интенсивным развитием информационных технологий [6]. Новая стратегия учитывает это обстоятельство: первый приоритет, определяющий, по существу, процессы цифровой трансформации, в основном остался без изменений, при этом появились новые акценты в виде интеллектуальных производственных решений и высокопроизводительных вычислительных систем.

Президент России В.В. Путин в Приветствии X Российскому форуму «Микроэлектроника 2024» отметил, что электронная промышленность — одна из ключевых, стратегических 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 [7].

В настоящей работе рассматриваются проблемные вопросы развития технологий создания новых материалов, а также применения высокопроизводительных вычислительных средств для моделирования.

1. Актуальность проблемы синтеза новых материалов

Одним из важнейших направлений в рамках этого приоритета является развитие передовых технологий синтеза новых материалов с заданными свойствами на основе математического моделирования. Эта проблематика очень сложная, наукоемкая, многоаспектная и требует, с одной стороны, всестороннего обсуждения в научном сообществе, а с другой, мощной государственной поддержки.

Обозначенный В.В. Путиным вектор развития отечественной электронной промышленности [4, 7], а по существу – ее возрождения, обусловлен целым рядом объективных факторов. Отметим основные из них [8, 9, 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.

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

Для восстановления российской микроэлектроники необходимо решить целый ряд задач, связанных с:

- воссозданием научных школ проектирования микроэлектронной техники и подготовкой высококвалифицированных специалистов в области радиоэлектроники;
- накоплением знаний с учетом мирового опыта;
- развитием отечественных программных средств для разработки и оптимизации полупроводниковых приборов, а также

технологий их производства с использованием средств автоматизированного проектирования;

- изысканием необходимого прямого финансирования всего жизненного цикла микроэлектронной техники, включая фундаментальные научные исследования;

- созданием конкурирующих научно-производственных и производственных групп

- организацией производства с необходимой мощностью;

- поиском заинтересованных инвесторов;

- обоснованием новых логистических цепочек взаимодействия предприятий как внутри России, так и с другими странами (с учетом санкционных ограничений).

Комплексное решение поставленных задач позволит не только создать необходимый набор аналогов существующих материалов и ЭКБ, но и даст возможность выйти на уровень обеспечения полного технологически независимого отечественного жизненного цикла создания материалов с требуемыми свойствами. Именно такой подход позволит придать широко используемому понятию «импортозамещение» новое, более актуальное, содержание, а именно – «импортонезависимость».

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 данного 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.

Определенный оптимизм вызывает в связи с этим комплекс мероприятий в рамках 6-й подпрограммы фундаментальных научных исследований, финансирование которой открыто с 2024 года.

В год 300-летия образования Российской академии наук необходимо отметить огромный вклад в развитие фундаментальных теоретических основ в области физики и химии. Следует вспом-

нить достижения российских и советских ученых в области химии и физики, удостоенных Нобелевской премии [17]. Среди них выдающиеся ученые – Л.Д. Ландау, П.Л. Капица, Ж.И. Алфёров, Андрей Гейм и Константин Новосёлов. Их открытия мирового уровня и многие другие научные результаты, полученные российскими учеными являются основой синтеза новых материалов в различных отраслях производства.

Некоторые позитивные тренды в обеспечении импортонезависимости в области ЭКБ

Разработка материалов с новыми свойствами для разных областей применения — одно из приоритетных направлений Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации по ряду направлений. В условиях жестких санкций 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. В этом направлении уже достигнуты значимые научно-практические результаты. Достаточно привести некоторые из них.

Микросхемы. В начале 2024 года Минпромторг заключил с МИЭТом и Зеленоградским инновационно-технологическим центром (ЗИТЦ) контракты на выполнение опытно-конструкторских работ (ОКР) по созданию технологий и установок для выпуска микросхем с топологией в диапазоне 250–65 нанометров со сроком окончания в 2026 году [11]. ЗИТЦ предстоит разработать и изготовить опытные образцы установок лазерного устранения дефектов и контроля координат топологических элементов и критических размеров структур на фотошаблонах для производства интегральных схем с топологическими нормами 90–65 нм. Главное то, что произведенная по таким нормам продукция будет являться отечественной, независимой от экспорта, и при этом востребованной применительно ко многим областям, в которых высокая норма не является критически необходимой.

Еще один госконтракт Минпромторг заключил с Научно-исследовательским институтом молекулярной электроники (НИИМЭ) на разработку и освоение серийного производства микросхем. Планируется, что эти микросхемы должны стать заменой интегральных схем американской корпорации Intel (Altera) [12].

Фоторезист. Значимым результатом является получение специалистами НИИМЭ опытного образца отечественного фоторезиста, полимерного светочувствительного материала, необходимого для одной из ключевых операций в микроэлектронном производстве [13]. Разрабатываемые микросхемы будут применяться в бортовых цифровых вычислительных системах авиационной и космической техники, в том числе в качестве замены зарубежных программируемых логических интегральных схем (ПЛИС). Прямые отечественные аналоги такого продукта сейчас отсутствуют, ближайшим зарубежным аналогом является микросхема ПЛИС 5CEFA9 от Intel (Altera), которая, по данным из открытых источников, была выпущена еще в 2011 году по технологии 28 нанометров [13].

Фотолитография. Фотолитография — это ключевая операция в микроэлектронике, а фотолитограф предназначен для формирования структуры микросхемы на кремниевой пластине, покрытой слоем фоторезиста. Наместились существенные сдвиги в области создания отечественной фотолитографии. На форуме «Микроэлектроника» в научно-технологическом университете «Сириус» в Сочи зеленоградские компании «Микрон» и Нанотехнологический центр (АО «ЗНТЦ») подписали соглашение о сотрудничестве в освоении технологий и производстве отечественного фотолитографического оборудования с нормами 350–90 нанометров [7, 14]. По словам руководителя АО «ЗНТЦ» Анатолия Ковалева, сегодня в мире меньше десяти стран, способных произвести фотолитограф, поскольку эта задача «требует мощнейшего научного потенциала» [21]. Он отметил, что фотолитографическое оборудование разрабатывается АО «ЗНТЦ» совместно с белорусским ОАО «Планар», а в рамках сотрудничества с «Микроном» планируются совместные исследования, экспериментальные работы и тестирование этого оборудования. Чипы, которые будут выпускаться с помощью разрабатываемого оборудования, используются в силовой электронике, автоэлектронике и промышленных системах.

Синтез материалов для фотонных суперкомпьютеров. Ученые из Тюменского государственного университета первыми в мире смогли получить в промышленном объеме целый ряд уникальных химических соединений [15]. Новые химические соединения, ставшие основой для синтезированных материалов, открывают возможность для разработки и создания фотонных

суперкомпьютеров, а также солнечных батарей нового поколения. Основа новой технологии – сложные сульфиды, вещества, наделенные ярко выраженными полупроводниковыми свойствами. Секрет успеха кроется в новой методике синтеза редких соединений. Полупроводниковые системы с элементами на сложных сульфидах могут быть применены в различных экстремальных устройствах, например, при исследовании извержений вулканов или в космосе, при непосредственном воздействии солнечного излучения, так как материалы выдерживают до 1300 градусов по Цельсию.

В перспективе – создание подводных солнечных батарей для применения на глубине до 50 метров. Это становится возможным благодаря поглощению сульфидами зеленого и желтого спектров из видимого солнечного света, что позволяет их применять под водой.

Новые материалы для солнечных батарей. Новый тип материалов для одного из элементов солнечных батарей предложили специалисты Уральского федерального университета и Института органического синтеза Уральского Отделения РАН [16]. Солнечная энергетика сейчас привлекает большое внимание ученых и инвесторов, поскольку традиционные ресурсы для получения энергии — уголь, нефть и газ — исчерпаемы. Найденные соединения позволяют заметно сократить расходы на производство солнечных батарей. В основе предложенной технологии лежит использование солнечных полупроводниковых элементов, улавливающих фотоны и превращающих их энергию в электричество.

Материал со световыми «антеннами». Ученые Института химии Дальневосточного отделения РАН (ИХ ДВО РАН) совместно со специалистами Дальневосточного Федерального университета (ДВФУ) разработали новые материалы на основе ионов европия со световыми «антеннами» [17]. Некоторые из них можно применять для увеличения КПД солнечных панелей, другие — использовать в виде добавок к функциональным покрытиям, что позволяет визуально наблюдать места наибольшего механического напряжения материала при нагрузках. Эти результаты получены коллективом лаборатории светотрансформирующих материалов ИХ ДВО РАН при участии лаборатории электронного строения и квантово-химического моделирования ДВФУ. Благодаря плодотворному сотрудничеству коллективов этих коллективов удастся прогнозировать свойства новых материалов. В дальнейшем ученые планируют добавить к соединениям редкоземельных элементов пе-

редходные металлы (например, цинк) для получения гетерометаллических комплексов. Эти результаты – пример эффективного сотрудничества ученых академического института и государственного университета.

Новый композитный двумерный материал. Ученые из ФИЦ «Красноярский научный центр СО РАН» совместно с Сибирским федеральным университетом синтезировали новый многофункциональный композитный двумерный материал на основе природного минерала точилинита, который состоит из чередующихся слоев сульфида железа и гидроксида магния, связанных за счет электрических зарядов, и образует чешуевидные наночастицы [18]. Этот материал может применяться в нанофотонике, оптоэлектронике, использоваться в качестве сорбентов, электродов и наноантенн. Двумерные материалы, включая отмеченный Нобелевской премией графен, имеют толщину всего в один атом и обладают уникальными свойствами, которые могут привести к созданию новых устройств и технологий с улучшенными характеристиками. Такие материалы открывают новые возможности как для научных исследований, так и для практического внедрения в различных областях техники.

Новый композитный материал на основе соединений металлов и хлора. Учёные из Института проблем машиноведения (ИПМаш) РАН в Санкт-Петербурге и Уфимского университета науки и технологий провели успешное моделирование перспективных двумерных хлоридов металлов, включая никель, ванадий, цинк, кадмий, марганец, железо и магний, а также тройной нитрид цинка для изучения возможности их синтеза и реальных свойств [19]. Исследователи оценили устойчивость этих материалов к механическим и температурным воздействиям и пришли к выводу, что они обладают высокой целостностью и устойчивы к дефектам. Для синтеза нового материала применялось компьютерное моделирование на основе теории функционала плотности с использованием суперкомпьютера. Учёным удалось создать математические модели материалов, максимально приближенные к физическим объектам. Эти очень трудоёмкие процессы требуют мощных вычислительных ресурсов, но позволяют получить высокоточные результаты. Материалы, предсказанные с помощью такого моделирования, впоследствии успешно синтезируются и в будущем могут стать основой для новых промышленных композитов при

создании изделий микроэлектроники, миниатюрных высокопроизводительных устройств, оптоэлектронных приложений.

Таким образом, российские ученые только за последние годы достигли существенных научных результатов в области синтеза новых композитных материалов с заданными свойствами, которые должны найти применение в промышленности при создании передовой отечественной микроэлектроники. Эти результаты создают реальную основу для преодоления накопленных проблем в этой области, которые привели к отставанию России от развитых зарубежных стран [20,21].

2. Современная высокопроизводительная среда для моделирования

Успешное решение задач в области синтеза новых материалов с заданными свойствами невозможно без применения методов математического моделирования с использованием высокопроизводительной исследовательской инфраструктуры [22–25].

В марте 2023 г. власти Китая объявили о масштабных мерах по развитию сферы исследований и разработок [26]. Китайская академия наук приняла дорожную карту развития больших исследовательских инфраструктур до 2050 года, которая охватывает более 50 крупных инфраструктурных исследовательских объектов [27].

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 [28, 29].

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 [29,30].

На базе платформы зарегистрирован центр коллективного пользования (ЦКП) [31] «Информатика», на котором успешно решается целый ряд задач, связанных с реализацией многомасштабных математических моделей, построенных для проведения

исследований для создания новых материалов с заданными свойствами в области структурного материаловедения [24, 32, 33]. Отметим экспериментальные исследования по моделированию сложных физических и технических систем. К ним относятся исследования по разработке отечественной системы автоматизированного проектирования для создания ячеек энергонезависимой памяти в области материаловедения [32, 33],

Наряду с научными коллективами ФИЦ ИУ РАН ЦКП используется коллективами и других организаций в рамках решения задач по проектированию отечественной электронной компонентной базы в области микроэлектроники (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, НИИМЭ и др.). Важно, что ЦКП предоставляет возможность практической отработки знаний, полученных в ходе обучения, студентам базовых кафедр в МГУ имени М.В. Ломоносова, Высшей школы экономики (ВШЭ) и Российского университета дружбы народов (РУДН).

При решении задач пользователи имеют возможность выполнять расчеты в высокопроизводительной вычислительной среде ЦКП с применением таких систем моделирования как Ansys, Intel oneAPI, Gromacs, Matlab, Orca, Pytorch, Tensorflow, Keras, Quantum Espresso в фоновом (пакетном) и интерактивных режимах [34]. Имеется возможность интеграции других систем математического моделирования в высокопроизводительную вычислительную среду ЦКП.

Конечно же, ЦКП по своим характеристикам уступает не только отечественным суперкомпьютерам, но и последним из TOP-500 (Китайский суперкомпьютер Inspur TS10000, 34 400 ядер и GPU, 3.0 PFlops). И поэтому для решения ресурсоемких задач синтеза материалов необходимы мощные суперкомпьютеры.

В этой связи необходимо упомянуть о новом суперкомпьютере «МГУ-270» в МГУ имени М.В. Ломоносова (на факультете ВМК), который открылся в сентябре 2023 года. Архитектура суперкомпьютера «МГУ-270» сочетает в себе центральные процессоры (CPU), графические процессоры (GPU) и нейронные процессоры (NPU). Его вычислительная мощность достигает 400 петафлопс по операциям искусственного интеллекта [35]. За минувший год факультетом ВМК под руководством академика И.А. Соколова проделана огромная работа по привлечению десятков научных коллективов для решения задач в различных областях науки.

Вместе с тем, как показывает опыт применения ЦКП и суперкомпьютеров, наличие высокопроизводительных вычислительных средств не является достаточным условием успешного решения задач синтеза новых материалов. Необходимо одновременно решать проблемы подготовки кадров высшей квалификации, способных выполнять постановки задач на основе современных математических методов, разрабатывать сложные программные модели, обработку и анализ больших объемов данных (методы искусственного интеллекта, машинного обучения, теории управления, системного анализа). Наряду с этим крайне необходимо совершенствовать технологии доступа к ресурсам суперкомпьютеров с гибридной архитектурой, обеспечивающие эффективное их использование.

Заключение

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

В год 300-летия образования Российской академии наук необходимо отметить огромный вклад российских ученых в развитие фундаментальных теоретических основ.

Необходимо отметить, что на сегодня проблемы, связанные с синтезом новых материалов с заданными свойствами, невозможно решать без применения методов математического моделирования, которые позволяют существенно сэкономить время и финансовые затраты на их получение. Для программной реализации разработанных компьютерных моделей требуется отечественная высокопроизводительная среда, 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. Необходимо признание микроэлектроники базовой отраслью для всего промышленного комплекса.

Создание российской электронной промышленности без опоры на результаты научных исследований, включая фундаментальные, в принципе невозможно.

Международные конференции МММЭК вносят достойный вклад в развитие научной составляющей проблемы синтеза новых материалов в России.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта Мин-ОбрНауки № 075-15-2024-544.

Список использованных источников

1. 300-летие РАН: К истории российской науки. 5.02.2024 <https://sakhalf.ru/300-letie-ran-k-istorii-rossijskoj-nauki/>
2. Заседание Совета по науке и образованию 8 февраля 2023 г. Москва, Кремль <http://www.kremlin.ru/events/president/transcripts/deliberations/70473>
3. 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>
4. Послание Президента Федеральному собранию, 24 февраля 2024 г., <https://dzen.ru/a/ZeBJ3dty9GeXcthO2>
5. Всемирный банк включил Россию в топ-5 экономик мира впереди Германии и всей Европы <https://www.dp.ru/a/2023/08/04/vsemirnij-bank-vkljuchil-rossiju>
6. Итоги 2023 года для ИТ-рынка России: главные тренды и прогнозы на 2024. КРОК, 13 дек 2023 <https://habr.com/ru/companies/croc/news/780442/>
7. Российский форум «Микроэлектроника» – ведущая межотраслевая коммуникационная площадка России, <https://microelectronica.pro/?ysclid=m1tnqbg61w57157837>
8. Зацаринный А.А., Абгарян К.К. Факторы, определяющие актуальность создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках реализации приоритетов научно-технологического развития России// Материалы I Международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК-2019). Москва: МАКС Пресс. С. 8–11.
9. Zatsarinny A.A., Abgaryan K.K. Factors determining the relevance of creating a research infrastructure for synthesizing new materials in implementing the priorities of scientific and technological development of Russia// Russian Microelectronics. 2020. Т. 49. № 8. С. 600-602.
10. Зацаринный А.А., Абгарян К.К. Актуальные проблемы создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках цифровой трансформации общества //Материалы 2-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК-2020). Москва: МАКС Пресс. С. 3-13.
11. Контракты МИЭТ и ЗИТЦ на создание технологий для выпуска микросхем <https://www.netall.ru/economy/news/1349119.html>
12. НИИМЭ заказали создание аналога микросхемы Intel. <https://www.netall.ru/economy/news/1380426.html>

13. Зеленоградские ученые получили опытный образец фоторезиста. <https://www.netall.ru/economy/news/1401703.html?ysclid=m1tnys7tex733215956>
14. Зеленоградские компании договорились совместно разрабатывать фотолитограф <https://www.netall.ru/economy/news/1400764.html>
15. Проблема синтеза материалов для фотонных суперкомпьютеров. <https://finobzor.ru/106091-v-rossii-vpervye-v-mire-reshena-problema-sinteza-materialov-dlja-fotonnyh-superkompjuterov.html>
16. Ученые синтезировали новые материалы для перовскитных солнечных батарей <https://colab.ws/news/386?ysclid=m1v4yu2aeb87111734>
17. Материал со световыми «антеннами» разработали ученые ДВФУ и ДВО РАН. https://www.dvfu.ru/news/fevu-news/material_so_svetovymi_antennami_razrabotali_uchenye_dvfu_i_dvo_ran/?ysclid=m1x4vr29oy711939623
18. Новый композитный двумерный материал. <https://cleverussia.ru/uchenye-razrabotali-novyj-kompozitnyj-dvumernyj-material-na-osnove-prirodnogo-minerala/?ysclid=m1v5s9dy5068300221>
19. Учёные из России «срезали» одно из измерений у материала и получили новый композитный материал <https://news.rambler.ru/science/50911744-uchenye-iz-rossii-srezali-odno-iz-izmereniy-u-materiala-i-poluchili-novyy-kompozitnyy-material/?ysclid=m1v557tku935774097>
20. Гавриленко В.А. Композиты 21 века: возможности и реальность», Neftegaz.RU, №2, 2019. <https://magazine.neftegaz.ru/archive/189769/>
21. Военное обозрение. Почему так сложно решается проблема производства композитных материалов в РФ: факты и комментарии <https://topwar.ru/166584-pochemu-tak-slozhno-reshaetsja-problema-proizvodstva-kompozitnyh-materialov-v-rossii.html>
22. 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.
23. 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>
24. Абгарян К.К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. – М.: МАКС Пресс. 2017. 284 с.
25. Столбовский, А.В. Математическое моделирование процессов в материаловедении с использованием MS Excel: учебное пособие / А.В. Столбовский, М.Л. Лобанов. — Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2018. – 96 с.
26. Китай расставляет акценты в научно-технической политике. <https://issek.hse.ru/mirror/pubs/share/822379879.pdf>
27. 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>
28. Почему гибридная архитектура – это будущее? <https://habr.com/ru/companies/inferit/articles/744876/>

29. А.А. Zatsarinny. 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”.

30. Волович К.И., Денисов С.А., Кондрашев В.А. Архитектура сети обработки данных для параллельных вычислений в высокопроизводительном комплексе для задач материаловедения // Материалы 4-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК-2022). Москва: МАКС Пресс. С. 30–36.

31. ЦКП «Информатика» // [Электронный ресурс] – <http://www.frccsc.ru/ckp> (дата обращения 19.09.2023)

32. Абгарян К.К. Интеллектуальные информационные системы в микроэлектронике // В сборнике Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Материалы V международной конференции, 2023, с. 8–14.

33. Абгарян К.К., Гаврилов Е.С. Системы автоматизации научных расчетов для многомасштабного моделирования наноконпозиционных материалов // В сборнике Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Материалы V международной конференции, 2023, с. 15–17.

34. 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 (в печати).

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

MODERN APPROACHES TO SOLVING THE PROBLEM OF SYNTHESIS OF NEW MATERIALS WITH SPECIFIED PROPERTIES

Zatsarinny Alexander Alekseevich

*Doctor of Technical Sciences, Chief Researcher,
director of the Department of the Federal Research Centre
“Computer Science and Control” (FRCCSC), of the Russian Academy
of Sciences, (FRC CSC RAS). Vavilov st. 44, 119333 Moscow, Russia
e-mail: alex250451@mail.ru*

Abgaryan Karine Karlenovna

*Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Chief Researcher,
head Federal Research Centre “Computer Science and Control”
(FRCCSC), of the Russian Academy of Sciences, (FRC CSC RAS).
Vavilov st. 44, 119333 Moscow, Russia
e-mail: kristal83@mail.ru*

Abstract. The article discusses modern approaches to solving problems related to the synthesis of new materials. The relevance of this most important strategic task of innovative development in modern conditions is noted. New materials with specified properties are essential for the production of trusted Russian software and hardware products for both general and special purposes. The importance of developing mathematical modeling methods and software solutions based on them for the development of innovative approaches in the field of synthesis of new materials is shown. It is noted that further development requires a domestic high-performance environment for scientific research, which has a comfortable user interface, flexibility in setting up resources, high performance and reliability.

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

УДК 004.3:004.9

<https://doi.org/10.29003/m4251.MMMSEC-2024/22-27>

ПРОТОТИП БАЗЫ ДАННЫХ ПО СТРУКТУРАМ И ИХ СВОЙСТВАМ ДЛЯ СОЗДАНИЯ ЭНЕРГОНЕЗАВИСИМОЙ ПАМЯТИ НА ОСНОВЕ ТЕХНОЛОГИИ ReRAM

Гаврилов Евгений Сергеевич,

к.т.н., научный сотрудник¹

eugavrilov@gmail.com

Абгарян Каринэ Карленовна,

д.ф.-м.н., главный научный сотрудник, заведующая отделом¹,

профессор²

kristal83@mail.ru

Кулешов Игорь Александрович,

инженер-исследователь¹, аспирант²

alpkuleshov@gmail.com

Ерещенко Алексей Владимирович,

младший научный сотрудник¹

ereshchenko.alexey@gmail.com

¹ФИЦ ИУ РАН, г. Москва

²ВМК МГУ, г. Москва

Аннотация. Элементы энергонезависимой памяти сегодня применяются в качестве перспективной элементной базы для хранения информации, создания вычислительных систем, искусственных нейронных сетей, имитирующих функции мозга. Работа посвящена вопросам, связанным

с разработкой прототипа базы данных – составной части системы автоматизированного проектирования ЭКБ для создания ячеек энергонезависимой памяти на основе технологии ReRAM. Она предназначена для хранения информации по структурам и их свойствам, полученной в ходе вычислительных экспериментов, в ходе лабораторных исследований, из других источников. Представлены основные характеристики разработанного прототипа документоориентированной Базы данных. Отмечено, что функционал реализованного прототипа Базы данных может быть расширен, и в дальнейшем аналогичные системы могут быть использованы для хранения информации по другим типам устройств энергонезависимой памяти.

Ключевые слова: документоориентированная База данных, система автоматизированного проектирования, энергонезависимая память, электронная компонентная база (ЭКБ), система управления базой данных (СУБД).

Введение

В последнее время в области микроэлектроники наблюдается повышенный интерес к элементам энергонезависимой памяти, выступающим в качестве перспективной элементной базы для хранения информации, создания вычислительных систем, искусственных нейронных сетей, имитирующих функции мозга. В ходе разработки программных средств системы автоматизированного проектирования ЭКБ для создания ячеек энергонезависимой памяти на основе технологии ReRAM, FeRAM, MRAM (САПР «СоВа») был построен прототип Базы данных, предназначенный для хранения информации по структурам и их свойствам для ячеек ReRAM. Данная система предусматривает расширение функционала и в дальнейшем возможность использования разработанных программных средств для хранения данных по структурам и их свойствам для энергонезависимой памяти на основе технологии FeRAM и MRAM.

Описание прототипа базы данных по структурам и их свойствам для энергонезависимой памяти на основе технологии ReRAM

В архитектуре разработанного прототипа базы данных, имеются следующие ключевые особенности:

– программный интерфейс (API), позволяющий автоматизировать загрузку и другие операции с данными при помощи внешнего инструментария на различных языках программирования;

- веб-интерфейс пользователя;
- автоматическая валидация импортируемых данных;
- возможность ручного контроля качества данных;
- обязательная ссылка на источники данных.

Кроме того, из особенностей, продиктованных использованием базы данных в составе обслуживающей подсистемы САПР необходимо отметить следующие:

- возможность хранения различных объектов (например, устройств ReRAM);
- возможность расширения списка хранимых типов данных без или с небольшой доработкой системы.

Другой архитектурной особенностью реализации является использование документной СУБД вместо реляционной, что обусловлено рядом преимуществ для данной предметной области, описанных в [1, 2]. В частности, документная СУБД оперирует *коллекциями* документов, имеющих структуру дерева. Такая структура хранения позволяет работать даже с достаточно разветвленной и динамично меняющейся схемой данных, а также индексировать документы для быстрого поиска по отдельным атрибутам. Применение программного интерфейса API для поиска позволяет не только работать с оперативными данными, но и определять новые типы хранимых данных без изменения программного кода.

Приведем перечень отдельных типов хранимых данных, которые определяются потребностями САПР «CoVA» и будут расширяться в процессе развития и подключения новых видов памяти и расчетов:

- материалы, используемые в составе устройства ReRAM (для дрейф-диффузионной и квантово-механической моделей);
- структура устройства ReRAM (для дрейф-диффузионной модели);
- химические элементы, используемые в материалах ReRAM;
- кристаллическая система групп симметрии кристаллов;
- пространственные группы, используемые в кристаллических структурах ReRAM;
- псевдопотенциалы для квантово-механических расчетов материалов, используемых в составе устройства ReRAM;
- компактные модели устройства ReRAM (результаты обучения модуля компактной модели ReRAM).

Все данные в рамках одного типа объединены в виде единого табличного представления на уровне интерфейса прототипа БД (имеют единую структуру, описанную схемой).

Схема данных документной модели базы данных представлена на рис. 1.

Ключевым объектом (коллекцией) на схеме является Record, хранящий все записи базы данных. Тип данных определяется полем «type» и от схемы типа зависит содержимое поля Record.data. При добавлении и обновлении записи производится проверка соответствия данных в поле data JSON-схеме данных, определенной в RecordType – RecordTypeSchema.

Построенный прототип Базы данных существенно учитывает информационную совместимость проектирующих и обслуживающих подсистем САПР и обеспечивает независимость данных на логическом и физическом уровнях, в том числе:

- инвариантность к программному обеспечению, а также возможность одновременного использования данных, импортируемых из различных БД различными пользователями;
- возможность наращивания БД;
- контролируемую избыточность данных.

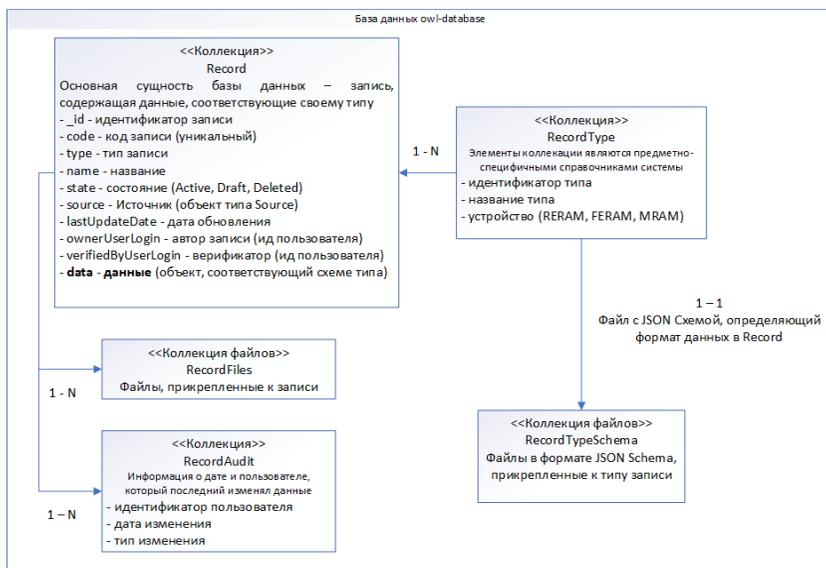


Рис. 1. Схема документной модели базы данных

Выводы

В докладе рассматриваются актуальные методы и средства компьютерного моделирования, применяемые при создании прототипа Базы данных для создания ячеек энергонезависимой памяти на основе технологии ReRAM. Представлены основные особенности и проектируемые возможности построенного программного продукта. Приведен перечень типов хранимых данных, которые определяются потребностями САПР «СоВА» и могут расширяться в процессе развития и подключения новых видов памяти и расчетов. Представлена схема документной модели базы данных.

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

Список использованных источников

[1] Абгарян К.К., Сеченых П.А., Гаврилов Е.С. Применение документно-ориентированной СУБД для хранения данных вычислительных экспериментов. // Материалы XX Международной конференции по механике и прикладным программным системам (ВМСППС'2017), 24–31 мая 2017 г., Алушта. С. 125–127.

[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

PROTOTYPE OF A DATABASE ON STRUCTURES AND THEIR PROPERTIES FOR CREATING NON-VOLATILE MEMORY BASED ON RERAM TECHNOLOGY

Gavrilov Evgeny Sergeevich,

*Candidate of Technical Sciences, Research collaborator¹
eugavrilov@gmail.com*

Abgaryan Karine Karlenovna,

*PhD, Chief Researcher, Head of the Department¹,
Professor²,
kristal83@mail.ru*

Kuleshov Igor Alexandrovich,

*Research Engineer¹, graduate student²,
alpkuleshov@gmail.com*

Ereschenko Alexey Vladimirovich,

*Junior Researcher¹,
graduate student
ereshchenko.alexey@gmail.com*

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

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

Abstract. Non-volatile memory cells are nowadays used as a promising element base for information storage, creation of computing systems, artificial neural networks imitating brain functions. The work is devoted to the issues related to the development of a prototype of a database – a component of the system of computer-aided design of ECB for the creation of non-volatile memory cells based on ReRAM technology. It is intended for storing information on structures and their properties obtained during computational experiments, in the course of laboratory research, from other sources. The main characteristics of the developed document-oriented prototype of the Database are presented. It is noted that the functionality of the realized prototype of the Database can be extended, and in the future similar systems can be used to store information on other types of non-volatile memory devices.

Keywords: document-oriented Database, computer-aided design system, non-volatile memory, electronic component base, database management system.

УДК 004.051

<https://doi.org/10.29003/m4252.MMMSEC-2024/27-30>

ДИНАМИКА ИСПОЛЬЗОВАНИЯ РЕСУРСОВ ЦКП «ИНФОРМАТИКА» ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ

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

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

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

Аннотация. В работе представлен опыт использования высокопроизводительной вычислительной инфраструктуры ЦКП «Информатика» научными коллективами ФИЦ ИУ РАН при проведении исследований и решении задач в области материаловедения.

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

Современные тенденции проведения прикладных и поисковых исследований в области материаловедения демонстрируют возрастающую потребность в высокопроизводительных вычислениях, что создает предпосылки использования существующих или создания собственных высокопроизводительных вычислительных мощностей [1].

Учитывая потребности научных коллективов в высокопроизводительных вычислительных ресурсах в ФИЦ ИУ РАН в конце 2019 года был создан Центр коллективного пользования «Высокопроизводительные вычисления и большие данные» (ЦКП «Информатика») [2], который позволяет одновременно нескольким коллективам решать задачи математического моделирования, применяя современные вычислительные технологии.

На начальном этапе в состав вычислительной среды ЦКП входили сервера с многоядерными производительными центральными процессорами и большим объемом оперативной памяти. Такая конфигурация обеспечила успешное решение многопоточных расчетных задач в рамках одного вычислительного сервера. Динамика использования ЦКП характеризуется следующими показателями: в 2021 году было выполнено 563, в 2022 г. – 641, в 2023 г. – 1958, в 2024 г. (на текущий момент) – 3092 вычислительных заданий. Таким образом, за последние три года число вычислительных заданий выросло примерно в 5–6 раз.

Последующее наращивание вычислительной мощности ЦКП осуществлялось за счет создания высокопроизводительной вычислительной сети InfiniBand EDR и подключения к ней существующих вычислительных серверов, а также вновь приобретаемых серверов гибридной архитектуры, оснащённых производительными графическими ускорителями (GPU).

На настоящий момент в единой вычислительной среде ЦКП на основе сети InfiniBand функционируют 2 сервера с GPU Nvidia V100 и 12 серверов с GPU Nvidia A100, а также 21 двухпроцессорный сервер с объемом оперативной памяти 1 Тбайт. Такая конфигурация вычислительных средств обеспечивает успешное решение многопоточных расчетных задач с задействованием графических ускорителей как в рамках одного вычислительного сервера, так и многопроцессорных (параллельных) расчетных задач на нескольких вычислительных узлах. Это подтверждается следующей статистикой: если в 2022 году число вычислительных заданий на серверах с гибридной архитектурой составило 3375, то в 2023 г. оно возросло почти в 4 раза – 12 839 (на середину 2024 года уже составило – 11 726).

Представленная динамика количества выполняемых вычислительных заданий показывает востребованность научных коллективов ФИЦ ИУ РАН в вычислительной инфраструктуре ЦКП, которая позволяет при решении задач математического моделирования использовать современные технологии распараллеливания вычислений, специализированные программные системы математического моделирования, например, Quantum Espresso [3, 4], а также вести разработку отечественного аналога зарубежных систем для моделирования ячеек энергонезависимой памяти [5, 6].

При этом количество вычислительных заданий, при выполнении которых было задействовано более одного графического ускорителя в рамках вычислительного сервера, в целом невелико по сравнению с общим количеством вычислительных заданий, при выполнении которых были задействованы графические ускорители. Данный факт создает предпосылки к проведению научными коллективами работ по доработке и оптимизации своих вычислительных заданий с целью получения возможности выполнения расчетов с задействованием нескольких графических ускорителей, что позволит увеличить реальную производительность при использовании вычислительных ресурсов ЦКП.

В настоящее время объем и производительность вычислительных ресурсов ЦКП позволяет научным коллективам решать широкий спектр актуальных задач в области материаловедения с использованием современных вычислительных технологий, применяемых в аналогичных инфраструктурах отечественных и зарубежных центров обработки данных, суперкомпьютеров и облачных платформ. При этом коллектив ЦКП продолжает выполнять комплекс экспериментальных исследований по совершенствованию технологий доступа пользователей к вычислительным ресурсам и предоставлению новых сервисов.

Список использованных источников

1. Zatsarinny A.A., Abgaryan K.K. Factors determining the relevance of creating a research infrastructure for synthesizing new materials in implementing the priorities of scientific and technological development of Russia. – Russian Microelectronics. 2020. Т. 49. № 8. С. 600–602.
2. ЦКП «Информатика» // [Электронный ресурс] – <http://www.frccsc.ru/ckp>
3. Quantum Espresso // [Электронный ресурс] – <https://www.quantum-espresso.org/>
4. Денисов С.А., Кондрашев В.А. Возможности ЦКП «Информатика» по предоставлению высокопроизводительных вычислительных ресурсов для реше-

ния задач материаловедения // В сборнике: Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Материалы V международной конференции, 2023, с. 22–25.

5. Абгарян К.К., Гаврилов Е.С. Интеграционная платформа для многомасштабного моделирования нейроморфных систем // Информатика и её применение, 14(2), 2020.

6. Абгарян К.К. Интеллектуальные информационные системы в микроэлектронике // В сборнике Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Материалы V международной конференции, 2023, с. 8–14.

DYNAMICS OF THE USE OF RESOURCES OF THE CKP «INFORMATICS» FOR SOLVING MATERIALS SCIENCE PROBLEMS

S.A. Denisov, V.A. Kondrashev

Abstract. The paper presents the experience of using the high-performance computing infrastructure of the of the CKP «Informatics» by research teams of the Federal Research Center Computer Science and Control of the Russian Academy of Sciences (FRC CSC RAS) when conducting research and solving problems in the field of materials science.

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

УДК 004.051

<https://doi.org/10.29003/m4253.MMMSEC-2024/30-34>

ПОДХОДЫ К СОЗДАНИЮ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНОЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ СРЕДЫ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ЯЧЕЕК ЭНЕРГОНЕЗАВИСИМОЙ ПАМЯТИ НА ЦКП «ИНФОРМАТИКА»

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

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

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

Аннотация. В работе рассматривается подход по предоставлению высокопроизводительных вычислительных ресурсов ЦКП «Информатика» при разработке отечественной системы моделирования ячеек энергонезависимой памяти при решении актуальных задач материаловедения.

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

Развитие микроэлектроники неразрывно связано с разработкой средств автоматизированного проектирования, в том числе специализированных программных систем моделирования [1], которые в основном являются продуктами зарубежных компаний, например, Cadence Design System, Synopsys, Ansys и Siemens EDA. Как известно, подобные системы предъявляют высокие требования как к вычислительным ресурсам, так и к способам предоставления доступа пользователей к системе моделирования, и применяются в вычислительных комплексах, которые обладают высокой производительностью. В настоящее время, столкнувшись с необходимостью импортозамещения, российские компании, ученые и исследователи в области микроэлектроники активно ведут разработки отечественных аналогов зарубежных систем в том числе для моделирования ячеек энергонезависимой памяти [2].

При этом возникла острая необходимость в обеспечении единого цикла разработки систем моделирования, включающего как классические этапы создания программного кода, так и этап проверки корректности работы системы по назначению путем выполнения расчетных задач моделирования в среде высокопроизводительных вычислений.

Для обеспечения единого цикла разработки системы моделирования в центре коллективного пользования «Высокопроизводительные вычисления и большие данные» (ЦКП «Информатика») [3] в дополнение к существующим технологиям предоставления доступа к программным системам моделирования в высокопроизводительной вычислительной среде [4] была внедрена широко известная система совместной разработки GitLab с поддержкой функций непрерывной разработки CI/CD (Continuous Integration / Continuous Deployment).

Особенностью внедрения является интеграция среды GitLab с существующей системой управления вычислительными заданиями Slurm [5,6], которая позволила реализовать единый цикл разработки отечественной системы моделирования ячеек энергонезависимой памяти с задействованием высокопроизводительных вычислительных ресурсов ЦКП.

Единый цикл разработки можно представить в виде совокупности трех основных этапов:

- создание (разработка) программного кода системы моделирования;
- тестирование программного кода на предмет поиска ошибок, допущенных при создании кода;
- тестирование системы моделирования, реализованной программным кодом, путем выполнения расчетных задач в среде высокопроизводительных вычислений ЦКП.

Создание программного кода реализуется на рабочих местах разработчиков с применением инструментов совместной разработки, интегрированных в GitLab. В дополнение к разработке программного кода разработчики готовят сценарии CI/CD, позволяющие автоматически запускать процессы тестирования программного кода и/или системы моделирования при наступлении определенных событий в системе GitLab, например, при сохранении изменений программного кода (`git commit`).

Тестирование программного кода выполняется на выделенном вычислительном сервере, функционирующем в вычислительной среде ЦКП. Данный сервер обеспечивает функционирование сервисов GitLab Runner (например, `shell runner`, `docker runner`) и Slurm. Сервисы GitLab Runner предназначены для исполнения программного кода в соответствии с подготовленными сценариями CI/CD на данном вычислительном сервере, в том числе в заранее подготовленной индивидуальной среде. Сервис Slurm предназначен для постановки расчетных задач в очередь заданий вычислительной среды ЦКП, выделения необходимых вычислительных ресурсов, последующего запуска расчетного задания и освобождения ресурсов при завершении расчетов.

Тестирование системы моделирования выполняется путем запуска расчетных задач в вычислительной среде ЦКП с возможностью использования входящих в ее состав высокопроизводительных гибридных вычислительных серверов, оснащенных графическими ускорителями вычислений (GPU). Постановка расчетных задач в очередь заданий обеспечивается на выделенном сервере сервисом GitLab Runner, который выполняет следующие функции:

- в момент исполнения соответствующего сценария CI/CD интерпретирует указанные в сценарии параметры постановки расчетного задания в очередь заданий;

– формирует скрипт постановки расчетного задания в очередь заданий, используя директивы, поддерживаемые системой управления вычислительными заданиями;

– запускает расчетное задание на исполнение путем выполнения команды `sbatch`.

Таким образом реализуется единый цикл разработки отечественной системы моделирования ячеек энергонезависимой памяти с задействованием высокопроизводительных вычислительных ресурсов ЦКП «Информатика».

Выводы

Представленный подход обеспечивает доступ пользователей к высокопроизводительной вычислительной среде ЦКП «Информатика» на основе реализации единого цикла разработки системы моделирования ячеек энергонезависимой памяти в задачах материаловедения. Такой подход позволяет расширить функционал системы GitLab за счет интеграции с системой управления вычислительными заданиями Slurm и создать для разработчиков более комфортные условия работы при разработке подобных систем моделирования, а также сократить время проверок программного кода и системы моделирования в целом.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, грант № 23-91-01012.

Список использованных источников

1. Zatsarinny A.A., Abgaryan K.K. Factors determining the relevance of creating a research infrastructure for synthesizing new materials in implementing the priorities of scientific and technological development of Russia. – Russian Microelectronics. 2020. Т. 49. № 8. С. 600–602.
2. Абгарян К.К. Интеллектуальные информационные системы в микроэлектронике // В сборнике Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Материалы V международной конференции, 2023, с. 8–14.
3. ЦКП «Информатика» // [Электронный ресурс] – <http://www.frccsc.ru/ckp>
4. 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.
5. Slurm Documentation // [Электронный ресурс] – <https://slurm.schedmd.com/documentation.html>
6. Denisov S, Kondrashev V, Zatsarinny A. Dynamic Job Queue Management for Interactive and Batch Computation on HPC System. // Engineering Proceedings, 2023, vol. 33(1):55.

APPROACHES TO CREATING A HIGH-PERFORMANCE
COMPUTING ENVIRONMENT FOR MODELING
NON-VOLATILE MEMORY CELLS AT THE SHARED
RESEARCH FACILITIES «HIGH PERFORMANCE COMPUTING
AND BIG DATA» (СКР «INFORMATICS»)

S.A. Denisov, V.A. Kondrashev

Abstract. The paper discusses an approach to providing high-performance computing resources of the СКР «Informatics» in the development of a domestic system for modeling non-volatile memory cells when solving current problems in materials science.

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

УДК 004.051

<https://doi.org/10.29003/m4254.MMMSEC-2024/34-37>

**ОСНОВНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЙ,
ПРОВОДИМЫЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ РЕСУРСОВ ЦКП
«ИНФОРМАТИКА»**

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

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

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

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

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

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

Центр коллективного пользования «Высокопроизводительные вычисления и большие данные» (ЦКП «Информатика») [1] обеспечивает потребности научных коллективов ФИЦ ИУ РАН и внешних пользователей в высокопроизводительных вычислительных ресурсах для проведения фундаментальных и прикладных исследований, в том числе в области материаловедения [2].

Анализ заявок на предоставление доступа к вычислительным ресурсам ЦКП показывает, что основными направлениями исследований научных коллективов ФИЦ ИУ РАН являются:

- системы искусственного интеллекта, извлечение знаний и анализ текстов;
- математические методы анализа данных и прогнозирования;
- моделирование сложных физических и технических систем;
- теоретико-вероятностные и статистические методы моделирования;
- методы и программные средства накопления и обработки данных;
- обучение с подкреплением с использованием сетевых векторно-символьных представлений.

При этом большинство задач в рамках этих направлений решаются (или планируются решения) с применением технологий искусственного интеллекта.

В связи с этим, одним актуальных и востребованных направлений исследований являются экспериментальные исследования в интересах решения задач по поиску и анализу уязвимостей искусственных нейронных сетей различных классов, по разработке методов оценки их устойчивости в условиях случайных и преднамеренных воздействий, а также методов повышения устойчивости нейронных сетей.

Отметим экспериментальные исследования по моделированию сложных физических и технических систем. К ним относятся исследования по разработке отечественной системы автоматизированного проектирования для создания ячеек энергонезависимой памяти в области материаловедения [3, 4], а также исследования по совершенствованию методов моделирования неравновесных течений газовых смесей в части моделирования механик разреженного газа и высокоскоростной аэродинамики [5, 6].

Продолжаются активные исследования по следующим тема-
тикам:

- разработка методов и программных средств накопления и обработки больших данных;
- извлечение знаний и анализ текстов, например, определение депрессивности у пользователя социальной сети на основе интеллектуального анализа публикуемых текстовых сообщений и информации со страницы профиля пользователя [7];
- машинное обучение, глубокое машинное обучение, разработка моделей искусственных нейронных сетей, например, разработка алгоритмов управления автономным транспортным средством в режиме реального времени с учетом статических и динамических ограничений [8].

Наряду с научными коллективами ФИЦ ИУ РАН ЦКП используется коллективами и других организаций. Так, в последние годы экспериментальные исследования в области моделирования химических реакций, квантово-механических и молекулярно-механических расчетов, молекулярной динамики, моделирования физико-химических процессов взаимодействия молекул выполняют сотрудники ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН проводит. Активно используются вычислительные ресурсы ЦКП специалистами НИИ молекулярной электроники (НИИМЭ) в рамках решения задач по проектированию отечественной электронной компонентой базы в области микроэлектроники. Кроме того, ЦКП предоставляет возможность практической отработки знаний, полученных в ходе обучения, студентам базовых кафедр в МГУ имени М.В. Ломоносова, Московского авиационного института (МАИ), Высшей школы экономики (ВШЭ) и Российского университета дружбы народов (РУДН).

При решении задач пользователи имеют возможность выполнять расчеты в высокопроизводительной вычислительной среде ЦКП с применением таких систем моделирования как Ansys, Intel oneAPI, Gromacs, Matlab, Orca, Pytorch, Tensorflow, Keras, Quantum Espresso в фоновом (пакетном) и интерактивных режимах. Имеется возможность интеграции других систем математического моделирования в высокопроизводительную вычислительную среду ЦКП.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. ЦКП «Информатика» // [Электронный ресурс] – <http://www.frccsc.ru/ckp> (дата обращения 19.09.2023)
2. 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.
3. Абгарян К.К. Интеллектуальные информационные системы в микроэлектронике // В сборнике Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Материалы V международной конференции, 2023, с. 8–14.
4. Абгарян К.К., Гаврилов Е.С. Системы автоматизации научных расчетов для многомасштабного моделирования наноконпозиционных материалов // В сборнике Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Материалы V международной конференции, 2023, с. 15–17.
5. I.V. Voronich, V.A. Titarev Numerical Analysis of Rarefied Gas Flow through a System of Short Channels // Mathematical physics, vol. 63, p. 2227–2243, 2023.
6. A.A. Morozov, V.A. Titarev Evolution of the Shape of a Gas Cloud during Pulsed Laser Evaporation into Vacuum: Direct Simulation Monte Carlo and the Solution of a Model Equation // Computational Mathematics and Mathematical Physics, vol. 63 (12), p. 2244–2256, 2024.
7. Ignatiev N., Smirnov I. and Stankevich M. Predicting Depression with Text, Image, and Profile Data from Social Media // Proceedings of the 11th International Conference on Pattern Recognition Applications and Methods (ICPRAM 2022), 2022, p. 753–760.
8. Дарьина А.Н., Прокопьев И.В. Метод активной одновременной локализации и картографирования на основе модели прогнозирующего интегрального пути для мобильных роботов // Нейрокомпьютеры: разработка, применение, 23 (6), 2021.

THE MAIN DIRECTIONS OF RESEARCH CONDUCTED USING COMPUTING RESOURCES OF THE SHARED RESEARCH FACILITIES «HIGH PERFORMANCE COMPUTING AND BIG DATA» (СКР «INFORMATICS»)

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

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

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

ПРОБЛЕМАТИКА ОПИСАНИЯ И АНАЛИЗА НАБОРОВ ДАННЫХ ДЛЯ ИНФОРМАЦИОННОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ РЕСУРСООЕМКИХ ПРИЛОЖЕНИЙ

Сеченых Полина Алексеевна,

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

¹ *ФИЦ ИУ РАН, г. Москва*

² *МАИ, г. Москва*

Аннотация. В работе представлен подход к подготовке наборов данных, используемых для информационного обеспечения ресурсоемких приложений.

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

Результаты компьютерного моделирования в области материаловедения электронных компонентов существенно зависят от качества используемых данных, поэтому при их проведении требуется уделять внимание не только поиску и накоплению информации, но и ее детальному описанию и аналитическому исследованию по ключевым требованиям контроля полноты, достоверности, применимости и адекватности данных.

Можно сформулировать три ключевых фактора проблематики построения объектов данных, характерных для рассматриваемой предметной области:

- большой объем элементов данных и их сборок (агрегатов), обусловленный тем, что математическое и компьютерное моделирование базируется на молекулярных или атомарных расчетных уровнях с последующим масштабированием их в макро-структуры [1];
- большое количество прецизионных расчетов и чувствительных к входным параметрам алгоритмов;
- множество разнообразных источников данных, требующих проверки и согласования.

Необходимость хранения, анализа, сопоставления, поиска, агрегации и фильтрации значительных объемов разнообразных данных, требуемых для работы различных материаловедческих приложений, делает актуальным не только их сбор, но и подробное

описание, включающее декомпозицию данных на множества по разнообразным критериям и требованиям, маркировку множеств по их назначению и степени достоверности, а также сопоставления им соответствующих ограничений и операций обработки.

Для проведения глубокой спецификации данных предлагается методология, включающая три базовые стадии. На первой формализуются количественные и семантические требования и определяются рабочие наборы данных, которые в зависимости от источника, могут быть классифицированы как данные из справочников, баз данных, инструментальных средств предметной области или иных экспериментально-расчетных источников информационного контента в их исходном виде. Они сохраняются для дальнейшего исследования в специализированной области. На второй стадии осуществляется анализ и выполняется иерархическая структуризация накопленных данных. Это делает возможным уточнение и сравнение данных, хранение различных наборов, и применение множества инструментов их обработки. На третьей стадии данные агрегируются и отображаются в объекты предметной области в соответствии со схемой базы данных системы информационной поддержки приложений. Перечисленные этапы предложенной методологии позволяют использовать специализированную область исследования информационного контента для построения объектных моделей сценариев приложений, структуризации схемы доменного представления данных и формирования событийно-информационных форм.

Апробация данной методологии на примере описания данных для задачи расчета метрических параметров кристаллических структур [2, 3] позволила уточнить требования, критерии и фильтры поиска информации, описания данных, каталогизацию параметров и их верификацию. Удалось также выявить взаимосвязь наборов подготовленных данных, применить фильтры и правила ограничений целостности, провести каталогизацию входных параметров и их проверку по критериям полноты и достоверности, реализовать первичное агрегирование и построение объектов доменной модели приложений.

Планируется программная реализация данного подхода, которая предполагает использование стека Web-ориентированных инструментальных средств, обеспечивающих локальный и удаленный доступ к контенту требований и каталогам решений с разделением полномочий для различных категорий исследователей и пользователей.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта Мин-ОбрНауки № 075-15-2024-544.

Список использованных источников

1. Абгарян К.К., Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. – М.: МАКС Пресс, 2017. – 284 с.
2. Сеченых П.А. Математическое моделирование метрических параметров ГПУ металлов. Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2022; 25(4):283–287. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2022-4-283-287>
3. Сеченых П.А. Моделирование кристаллической структуры шпинелей с применением реляционной схемы хранения данных // Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. МММЭК-2023 : Материалы V Международной конференции, Москва, 23–25 октября 2023 года. – Москва: ООО МАКС Пресс, 2023. – С. 96–101. – DOI 10.29003/m3597.MMMSEC-2023/98-101

PROBLEMS OF DESCRIPTION AND ANALYSIS OF DATA SETS FOR INFORMATION SUPPORT OF RESOURCE-INTENSIVE APPLICATIONS

Sechenykh P.A.

Abstract. The work presents an approach to preparing data sets used for information support of resource-intensive applications.

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

2. В

**ПРОБЛЕМЫ РАЗВИТИЯ
МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ
КВАНТОВОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ
ГЕТЕРОСТРУКТУР**

ПОВЕДЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО КУБИТА В 2D СЛОЕ MOS2

Булах Святослав Сергеевич,

аспирант, младший научный сотрудник¹,

bulakh-svyatoslav@mail.ru

Чибисов Андрей Николаевич,

д.ф.-м.н., профессор, ведущий научный сотрудник¹

Фёдоров Александр Семёнович,

д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник²

¹*Вычислительный центр ДВО РАН, г. Хабаровск*

²*Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, ФИЦ КНЦ СО РАН*

Аннотация. В данной работе проводилось исследование возможности применения монослоя дисульфида молибдена (MoS₂) для квантовых вычислений при помощи теории функционала плотности (DFT) и метода псевдопотенциала. Создание в монослое электронного кубита при образовании вакансии серы.

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

Введение

Дисульфид молибдена – представляет собой неорганическое соединение, которое принадлежит к дихалькогенидам переходных металлов. Кристаллическая структура имеет гексогональную форму плоскости атомов серы, расположенных по обе стороны от плоскости атомов молибдена. Эти плоскости накладываются друг на друга с сильными ковалентными связями между атомами, но слабыми Ван-дер-Ваальсовыми связями, удерживающими слои вместе. Это позволяет механически их разделить для образования двумерных листов MoS₂ [1]. Объемный материал представляет собой полупроводник с непрямой запрещенной зоной равной 1,2 эВ. При удалении межслойных взаимодействий и удержании электронов в одной плоскости приводит к образованию прямой запрещенной зоны, энергия которой равна 1,9 эВ [2]. Так же стоит обратить внимание на изменение свойств слоя дисульфида молибдена при образовании в нем дефектов.

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

Основной принцип электронных кубитов заключается в том, что спин электрона или его орбитальное состояние может находиться в суперпозиции двух состояний, что соответствует состояниям 0 и 1 в традиционной логике. Благодаря состоянию квантовой запутанности появляется возможность связывать несколько кубитов между собой и использовать это применительно к вычислениям [6].

Энергию образования вакансии мы определяли, используя выражение разности полных энергий:

$$E_f(n) = \frac{E_V - E_{st} + nE_S}{n} \quad (1)$$

где E_V – полная энергия структуры с вакансией серы, E_{st} – энергия слоя с вакансией, E_S – энергия, приходящаяся на 1 атом серы в объемной структуре S , n – количество образованных вакансий. В итоге мы получили значение для энергии образования вакансии серы равную 3,04 эВ. Данное значение хорошо согласуется с результатами работы [7].

Таблица 1

Изменение зонной структуры MoS₂

Параметр	Объемный	Монослой	С вакансией серы	2e	1e
Ширина запрещенной зоны (эВ)	0,83	1,79	1,16	1,14	0,009
Уровень валентной зоны (эВ)	7,97	-1,47	-1,68	-1,67	-2,47
Уровень зоны проводимости (эВ)	8,81	0,32	-0,52	-0,52	-2,46
Энергия Ферми (эВ)	8,08	-1,48	-1,56	-1,53	-2,47

Далее мы провели анализ электронной структуры исследуемых структур. В таблице 1 приведены изменения параметров зонной структуры для объемного MoS₂, бездефектного монослоя MoS₂ и с образованной вакансией серы MoS₂-x. Из таблицы 1 видно, что при переходе дисульфида молибдена из объемного состояния в 2D состояние происходит увеличение ширины запрещенной зоны с 0,83 эВ до 1,74 эВ из-за смещения уровней валентной зоны и зоны проводимости. Это происходит из-за наличия поверхности. Образование вакансии серы в монослое MoS₂ приводит к уменьшению ширины запрещенной зоны до 1,16 эВ.

Из-за потери 6e в системе при удалении атома серы происходит увеличение заряда на ближайших к месту вакансии атомах серы, так же заряд увеличивается на атомах молибдена вблизи места вакансии. При удалении 1e из системы с вакансией на атомах молибдена заряд уменьшается, на атомах серы так же происходит уменьшение заряда. При удалении второго свободного e заряд вблизи вакансии так же уменьшается. Перераспределение заряда отражается на поведении полного потенциала системы.

Выводы

В ходе выполнения работы были проведены расчеты с использованием теории функционала плотности и метода псевдопотенциала. Исследована возможность управления параметрами системы и создания электронного кубита на основе монослоя MoS₂ при помощи образования вакансии серы. В итоге можно заключить, что система на основе монослоя дисульфида молибдена может использоваться для создания электронного кубита и в дальнейшем масштабного квантового вычислителя. Полученные результаты могут использоваться для проведения экспериментальных и теоретических исследований.

Список использованных источников

1. Spin-defect qubits in two-dimensional transition metal dichalcogenides operating at telecomwavelengths / 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 University Press, 1995.

5. Kohn W., Sham L.J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects //Phys. Rev. – 1965. – Vol. 140. – A1133–A1138.
6. Lieven M.K. Vandersypen, Mark A. Eriksson; Quantum computing with semiconductor spins. Physics Today 1 August 2019; 72 (8): 38–45.
7. First-principles study of coupled effect of ripplocations and S-vacancies in MoS2 / G. A. Tritsarlis [et al.] // Journal of Applied Physics. – 2019. – Vol. 126, no. 8. – P. 084303.

THE BEHAVIOR OF AN ELECTRONIC QUBIT IN A 2D LAYER OF MOS2

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

Abstract. This work investigates the possibility of using a monolayer of molybdenum disulfide (MoS₂) for quantum computing through density functional theory (DFT) and the pseudopotential method. The creation of an electronic qubit in the monolayer occurs upon the formation of a sulfur vacancy.

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

УДК 537.9:004.94

<https://doi.org/10.29003/m4257.MMMSEC-2024/45-48>

КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДЫРОЧНЫХ КУБИТОВ В ДВУХМЕРНЫХ СЛОЯХ ГЕРМАНИЯ

Образцов Кирилл Владимирович,

аспирант, младший научный сотрудник¹,

2018102293@ptu.edu.ru

Чибисов Андрей Николаевич,

д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник¹,

Фёдоров Александр Семёнович,

д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник²

¹ВЦ ДВО РАН, г. Хабаровск

²ИФ ФИЦ КНЦ СО РАН, г. Красноярск

Аннотация. С помощью программного пакета VASP были выполнены исследования электронных свойств системы Si/Ge/Si с целью возможности применения данного материала для создания квантового транзистора на его основе.

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

Введение

Квантовые вычислители – это устройства, основанные на принципах квантовой механики, которые используют квантовые биты (или кубиты) для обработки информации. В отличие от классических битов в обычных компьютерах, которые могут принимать только одно из состояний (0 и 1), кубиты могут находиться в суперпозиции нескольких состояний одновременно, что позволяет квантовым компьютерам выполнять вычисления на порядки быстрее и эффективнее. Цель нашей работы состоит в проведении ряда квантово-механических расчетов системы Si/Ge/Si с внедрением в систему дырки для оценки возможности управления состоянием дырки путем воздействия внешнего магнитного поля.

Результаты расчёта и их анализ

Для исследования атомной и электронной структуры 2D интерфейса Si/Ge/Si прежде всего мы исследовали отдельные структуры для силицена и германена. Атомная структура 2D интерфейса Si/Ge/Si строилась следующим образом: между двумя слоями силицена размещался слой германена. Полученная в результате структура изображена на рис. 1. Затем проводилась полная атомная релаксация структуры с однородной сеткой k -точек $9 \times 9 \times 1$ построенной по схеме МонхорстаПэка. Расчеты проводились с помощью пакета программ VASP [1–3] Межатомные взаимодействия исследовались с применением подхода проекционных присоединенных волн (PAW) [4, 5]. Расчеты учитывали спин-орбитальное неколлинеарное взаимодействие [6].

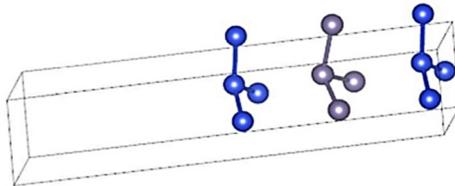


Рис. 1. Интерфейс Si/Ge/Si

Для исследования электронных свойств структуры использовалась суперъячейка гораздо большего размера. Для этого ячейка Si/Ge/Si, представленная на рис. 1, транслировалась вдоль осей X и Y с увеличением параметров ячейки a и b в 3 раза. В результате получалась суперъячейка состоящая из 54 атомов, из которых 18 атомов Ge и 36 атомов Si (рис. 2).

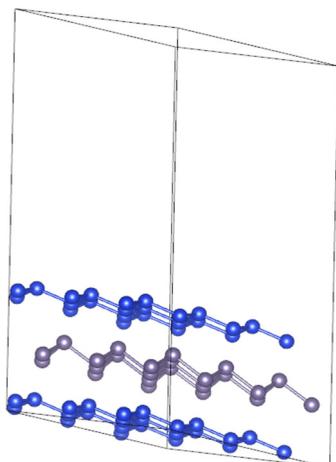


Рис. 2. Суперячейка 2D-интерфейса

Затем в системе Si/Ge/Si создавался избыточный положительный заряд и задавалась начальная намагниченность. Для увеличенной элементарной ячейки применялась равномерная сетка k -точек $4 \times 4 \times 1$ так же составленная по схеме Монхорста–Пэка. Для наглядной демонстрации локализации дырочных состояний в системе Si/Ge/Si находилась разность между зарядовыми плотностями системы без дырок и с одной дыркой.

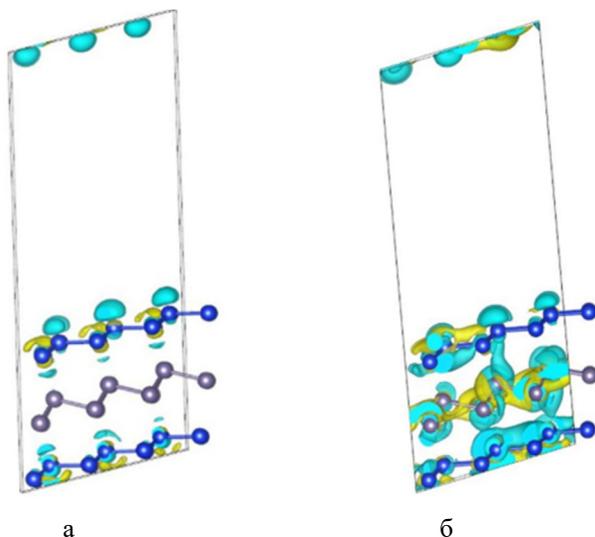


Рис. 3. Локализации дырочных состояний в системе Si/Ge/Si: (а) при заданной намагниченности +1, (б) при намагниченности -1

Видно, что при заданной намагниченности +1 (рис. 3а) дырочные состояния локализуется преимущественно на атомах кремния, в то время как на атомах германия состояния отсутствуют. Обратная ситуация наблюдается при намагниченности -1 (рис. 3б). Так же, как и в прошлом случае, дырочные состояния тоже скапливаются сверху атомов кремния, однако теперь они так же есть и на атомах германия.

Выводы

Результаты исследования показывают, что система может быть использована в качестве дырочного квантового транзистора для построения логических ворот с целью проектирования квантового вычислителя. Полученные результаты могут быть использованы для проведения последующих исследований, как экспериментальными, так и теоретическими методами.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 24-13-20024).

Авторы выражают благодарность за предоставление доступа к кластеру Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН (МСЦ РАН).

Список использованных источников

1. Kresse G.; Hafner, J. Ab initio molecular dynamics for liquid metals // Phys. Rev. B, 1993. Vol. 47, pp. 558.
2. 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, pp. 15–50.
3. 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, pp. 11169.
4. Blöchl, P.E. Projector augmented-wave method. Phys. Rev. B 1994, 50, 17953
5. Kresse G., Joubert D. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method // Phys. Rev. B, 1999. Vol. 59, pp. 1758.
6. Hobbs D., Kresse G., Hafner J. Fully unconstrained noncollinear magnetism within the projector augmented-wave method // Phys. Rev. B, 2000. Vol. 62, pp. 11556.

QUANTUM-MECHANICAL STUDY OF HOLE QUBITS IN TWO-DIMENSIONAL LAYERS OF GERMANIUM

Obraztsov K.V., Chibisov A.N., Fedorov A.S.

Abstract. Using the VASP software package, studies were carried out on the properties of the Si/Ge/Si electronic system with the aim of using this material to create a quantum transistor based on it.

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

ПРЕДСКАЗАТЕЛЬНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НОВЫХ ДВУМЕРНЫХ АЛЛОТРОПОВ КРЕМНИЯ

Прохоренко Анастасия Валерьевна,
*аспирант, младший научный сотрудник*¹,
aitpva@pni.edu.ru

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

Гниденко Антон Александрович,
к.ф.-м.н., научный сотрудник^{1, 3},

Чибисова Мария Анатольевна,
к.ф.-м.н., научный сотрудник^{1, 2}

Фёдоров Александр Семёнович,
*д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник*⁴

¹ТОГУ, г. Хабаровск

²ВЦ ДВО РАН, г. Хабаровск

³ФГБУН ИМ ХНЦ ДВО РАН, г. Хабаровск

⁴ИФ ФИЦ КНЦ СО РАН, г. Красноярск

Аннотация. С помощью программного пакета прогнозирования структур CALYPSO были найдены кристаллографические группы новых двумерных фаз кремния, рассчитаны их энергии формирования и когезии.

Ключевые слова: теория функционала плотности, метод псевдопотенциала, кремний.

Введение

Исследование двумерных материалов находится на начальном этапе, и наиболее целесообразным представляется поиск аналогов графена среди элементов группы IV периодической таблицы. Согласно периодическому закону, особое внимание следует уделить кремнию. Его внешние орбитали содержат по четыре электрона, относящихся к p - и s -орбиталям. С энергетической точки зрения кристаллы кремния имеют оптимальную пятиугольную структуру. Эта кристаллическая решётка включает две взаимопроникающие гранецентрированные подрешётки (fcc), в которых каждый атом окружён четырьмя соседними атомами. Все ковалентные связи в данной решётке эквивалентны и характеризуются гибридизацией s , p_x , p_y и p_z (sp^3).

Результаты расчёта и их анализ

Для определения стабильных конфигураций моно- и двуслой-ного кремния был использован программный пакет CALYPSO [1–3]. В процессе моделирования применялся алгоритм оптимизации роя частиц (PSO). Для углубленного анализа полученных структур были проведены квантово-механические расчёты в рамках теории функционала плотности с использованием программного пакета VASP [4–6]. Межатомные взаимодействия исследовались с применением подхода проекционных присоединенных волн (PAW) [7, 8]. Расчёты учитывали спин-орбитальное неколлинеарное взаимодействие [9]. Энергия обрезания базиса плоских волн составила 600 эВ.

Для нахождения наиболее вероятных кремниевых систем, необходимо рассмотреть ряд возможных структур. При создании элементарной ячейки было задано два атома для монослойного кремния и два атома на слой для двуслойного. Для каждого случая были отобраны четыре оптимальные структуры для дальнейшего исследования. На следующем этапе выбранные структуры были оптимизированы и рассчитаны их энергии формирования и когезии (таблица ниже).

Si ₂				Si ₄			
Точечная группа	Энтальпия, eV	E _{form} , eV	E _{coh} , eV	Точечная группа	Энтальпия, eV	E _{form} , eV	E _{coh} , eV
Pmma	-6.722	0.770	-4.919	P1	-6.880	0.612	-5.077
P6/mmm	-6.691	0.801	-4.888	P1	-6.900	0.592	-5.098
P-3m1	-6.691	0.801	-4.888	P2/c	-6.848	0.644	-5.045
P6/mmm	-6.691	0.801	-4.888	Pmma	-6.846	0.647	-5.043

Первая и наиболее энергетически выгодная структура Si₂ принадлежит пространственной группе Pmma и имеет примитивную тетрагональную кристаллическую структуру с параметрами решётки $a = b = 2.416 \text{ \AA}$ (рис. 1а).

В случае двуслойного кремния (Si₄) оптимальной является вторая по списку конфигурация кристаллографической группы P1 с примитивной орторомбической сингонией, где $a = 2.351$ и $b = 2.516 \text{ \AA}$ (рис. 1б).

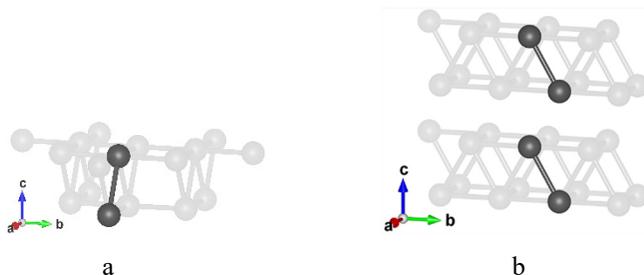


Рис. 1. Элементарные ячейки оптимальных модификаций:
 а) Si_2 , б) Si_4

Выводы

Результаты данного исследования показывают, что наиболее оптимальной конфигурацией является кристаллическая решётка типа $\text{Pm}\bar{3}\text{m}$ (энергия формирования 0.770 эВ) для однослойного кремния и P1 (энергия формирования 0.592 эВ) с различными параметрами ячейки a и b для двуслойного кремния.

Часть работы, посвященная расчетам атомной и электронной структуры, выполнена в соответствии с Государственным заданием Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект FEME-2024-0005). Расчеты выполнены с использованием методов и методик, разработанных в рамках Государственного задания Вычислительного центра ДВО РАН (ВЦ ДВО РАН). Исследования выполнены с использованием ресурсов ЦКП «Центр данных ДВО РАН».

Список использованных источников

1. Wang Y. et al. CALYPSO: A Method for Crystal Structure Prediction // Comput. Phys. Commun., 2012. Vol. 183, pp. 18.
2. Luo X. et al. Predicting Two-Dimensional Boron-Carbon Compounds by the global optimization method // J. Am. Chem. Soc., 2011. Vol. 133, pp. 21.
3. Wang Y. et al. An effective Structure Prediction Method for Layered Materials Based on 2D Particle Swarm Optimization Algorithm // J. Chem. Phys., 2012. Vol. 137, pp. 22.
4. Kresse G.; Hafner, J. Ab initio molecular dynamics for liquid metals // Phys. Rev. B, 1993. Vol. 47, pp. 558.
5. 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, pp. 15–50.
6. 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, pp. 11169.
7. Blöchl, P.E. Projector augmented-wave method. Phys. Rev. B 1994, 50, 17953.

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

9. Hobbs D., Kresse G., Hafner J. Fully unconstrained noncollinear magnetism within the projector augmented-wave method // Phys. Rev. B, 2000. Vol. 62, pp. 11556.

PREDICTIVE MODELING OF NEW 2-DIMENSIONAL SILICON ALLOTROPES

A.V. Prokhorenko, A.N. Chibisov, A.S. Fedorov

Abstract. Using the CALYPSO structure prediction software package, crystallographic groups of new two-dimensional silicon phases were found and their formation and cohesion energies were calculated.

Keywords: density functional theory, pseudopotential method, silicon.

УДК 538.91

<https://doi.org/10.29003/m4259.MMMSEC-2024/52-55>

РАСЧЕТ ТРАНСПОРТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК БИСЛОЯ ГРАФЕНА С РАЗЛИЧНЫМ ПЕРИОДОМ МУАРА

Савельев Владислав Владимирович,

асп., 4 год¹,

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

Хазанова Софья Владиславовна,

к.ф.-м.н., доцент¹,

khazanova@phys.unn.ru, +7 (902) 304-71-48

¹ННГУ им. Н.И. Лобачевского

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

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

Введение

Основными требованиями, предъявляемыми к современным электронным устройствам, являются миниатюризация, быстродействие и низкое энергопотребление, поэтому элементная база таких устройств все чаще основывается на двумерных материалах, обладающих высокой подвижностью носителей заряда и рядом уникальных электрофизических свойств. Кроме того, создание структур пониженной размерности позволяет использовать квантовые эффекты, такие как дискретизация спектра, туннелирование, осцилляции проводимости в магнитном поле. С этой точки зрения особую привлекательность получили различные Ван-дер-Ваальсовы структуры. Одним из материалов для их создания является графен (монослой атомов углерода), существенным недостатком которого является отсутствие запрещённой зоны, необходимой для управления электронным транспортом приборов. Отсюда вытекает актуальность поиска щелевых модификаций графена, другими словами, создания структур, в которых графен становится узкощелевым полупроводником. Создание требуемых энергетических свойств для однослойного графена возможно с помощью легирования или воздействия подложки. Другой способ модифицировать графен связан с созданием структур из нескольких слоёв, развёрнутых относительно друг друга, что открывает новый раздел электроники – твистронику [1]. Управление характеристиками подобных структур может осуществляться путем смещения слоёв относительно друг друга или приложением перпендикулярного электрического поля. В зависимости от типа носителей, индуцированных в различные области структуры, можно переключать изолирующие и проводящие свойства [2], таким образом, моделирование позволит эффективнее создавать приборы с такими свойствами и управлять их характеристиками.

Расчёт транспортных характеристик

В двуслойном графене с различным углом разориентации появляются периодически расположенные области (т.н. AA- и AB-упаковки), при этом свойства графена периодически меняются и возникает узор, напоминающий муаровый. Так появляется сверхпериод в геометрии данных слоёв, а вследствие этого и в энергетической структуре, размеры областей и, соответственно, параметр сверхпериода зависят от угла разориентации. Можно

подобрать углы таким образом, что пространственный период изменения энергетических параметров будет иметь порядок десяти нанометров. АА-упакованные области имеют полуметаллические свойства, характеризуются высокой плотностью состояний и обеспечивают конфайнмент электронов, в то время как АВ-упакованные имеют полупроводниковые свойства. Учитывая, что фаза графена с АА-упаковкой метастабильна, чередование различных упаковок делает структуру более стабильной и дает более широкие возможности для создания устройств на их основе. В ряде работ указывается что в некотором диапазоне угла разориентации скорость Ферми в графеновых муаровых слоях может уменьшаться [1]. С другой стороны, эффекты релаксации, усиливающие резкость границ и меняющие размеры областей с различными упаковками, приводят в результате к увеличению скорости Ферми и усложнению зонной структуры [3]. Для каждой конкретной структуры требуется детальное рассмотрение результата действия этих процессов на параметры.

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

Выводы

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

Список использованных источников

1. A.V. Rozhkov et al, Electronic properties of graphene-based bilayer systems // Physics Reports, 2016. Vol. 648, pp. 1–104.
2. Won Beom Choi et al, Characterization of a graphene-hBN superlattice field effect transistor // Applied Physics Letters, 2024. Vol. 125, p. 033503.

TRANSPORT CHARACTERISTICS CALCULATION OF GRAPHENE BILAYER WITH DIFFERENT MOIRE PERIODS

V.V. Saveliev, S.V. Khazanova

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

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

УДК 534.2+530.145.6

<https://doi.org/10.29003/m4260.MMMSEC-2024/55-59>

МОДИФИЦИРОВАННАЯ ЦЕПОЧКА МАССА-В-МАССЕ

Турин Валентин Олегович,

к.ф.-м.н., доцент¹,

voturin@mail.ru

Илья Владимирович Назрицкий,

студент магистратуры¹, nazritskiy@gmail.com

Данил Дмитриевич Киреев,

студент магистратуры¹, dankir2001@gmail.com

Павел Андреевич Андреев,

аспирант¹, pavel.andreev.2000@yandex.ru

Юлия Викторовна Илюшина,

ассистент², julie20096@mail.ru

¹ОГУ им. И. С. Тургенева, г. Орёл

²МАИ, г. Москва

Аннотация. В работе рассматривается модифицированная (с дополнительным гармоническим взаимодействием между соседними внутренними массами) одномерная бесконечная цепочка масса-в-массе. Получены уравнения для акустической и оптической ветвей дисперсии, ширины запрещённой зоны и эффективной массы.

Ключевые слова: цепочка масса-в-массе, акустическая и оптические ветви дисперсии, запрещённая зона, эффективная масса, акустический метаматериал.

Введение

Пионерская работа В.Г. Веселаго 1967 года инициировала бурное развитие исследований в области оптических и акустических метаматериалов. Изучение акустических метаматериалов представляет интерес как с точки зрения фундаментальной значимости, так и с точки зрения перспективы практических приложений. Одним из перспективных приложений является возможность создания суперпоглотителя звука. Кроме того, акустические метаматериалы могут быть полезны в акустоэлектронике и для создания более эффективных звуковых систем бытовой электроники. В работе [1] впервые была исследована механическая система, представляющая собой одномерную бесконечную цепочку масса-в-массе (рис. 1(а)). Эта система, из-за наличия запрещённой зоны, является простейшим механическим фильтром, реализует концепцию эффективной массы и продолжает вызывать интерес на современном этапе с точки зрения создания на её основе акустических метаматериалов с уникальными характеристиками [2]. В случае, когда внутренняя масса M много больше внешней m , можно считать, что положение равновесия груза m неподвижно (рис. 1(б)). В этом случае цепочка в длинноволновом приближении описывается вещественным уравнением Клейна-Гордона-Фока, которое, при равенстве нулю коэффициента упругости внутренней пружины K , переходит в волновое уравнение.



Рис. 1. (а) Одномерная бесконечная цепочка масса в массе; (б) цепочка масса в массе в случае $M \gg m$ (положение равновесия груза m неподвижно и помечено крестиком); (в) модифицированная цепочка масса в массе с добавлением гармонического взаимодействия между соседними внутренними грузами массы M

В нашей работе исследуется модифицированная (с дополнительным гармоническим взаимодействием между соседними внутренними массами) цепочка масса-в-массе (рис. 1(в)). Стоит отметить, что, ранее, на основе анализа модифицированной цепочки масса-в-массе при переходе к длинноволновому прибли-

жению удалось получить формальное обобщение комплексно-значных уравнений релятивистской квантовой механики: Клейна-Гордона-Фока и Дирака [3]. Оказалось, что обобщённое уравнение Дирака с восьмикомпонентной волновой функцией имеет оптическую и акустическую ветви дисперсии, каждая с положительной и с отрицательной энергией.

Классическая и модифицированная цепочки масса-в-массе

Классическая цепочка масса-в-массе (M внутри m) имеет акустическую и оптическую ветви дисперсии, всегда разделённые запрещённой зоной [2]. Для цепочки масса-в-массе вводится эффективная масса m_{eff} [2]. При $M = 0$ классическая цепочка масса-в-массе переходит в цепочку из одинаковых масс m соединённых пружинками с жёсткостью I с только акустической ветвью дисперсии $\omega^2 = 4\omega_m^2 \sin^2 \frac{ka}{2}$ и $m_{eff} = m$. При $M \rightarrow \infty$ классическая цепочка масса-в-массе переходит в цепочку связанных идентичных осцилляторов ω_0 с только оптической ветвью дисперсии $\omega^2 = 4\omega_m^2 \sin^2 \frac{ka}{2} + \omega_0^2$ и $m_{eff} = \left(1 - \frac{\omega_0^2}{\omega^2}\right)m$. Характерные частоты: $\omega_0 = \sqrt{K/m}$, $\omega_A = \sqrt{K/M}$, $\omega_m = \sqrt{I/m}$ и $\omega_M = \sqrt{J/M}$. Модифицированная цепочка масса-в-массе имеет акустическую (ω_-) и оптическую (ω_+) ветви дисперсии:

$$\omega_{\pm}^2 = \frac{\omega_A^2 + \omega_0^2}{2} + 2(\omega_m^2 + \omega_M^2) \sin^2 \frac{ka}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\omega_A^2 + \omega_0^2}{2} + 2(\omega_m^2 + \omega_M^2) \sin^2 \frac{ka}{2}\right)^2 - 4(\omega_m^2 \omega_A^2 + \omega_0^2 \omega_M^2 + 4\omega_M^2 \omega_m^2 \sin^2 \frac{ka}{2}) \sin^2 \frac{ka}{2}} \quad (1)$$

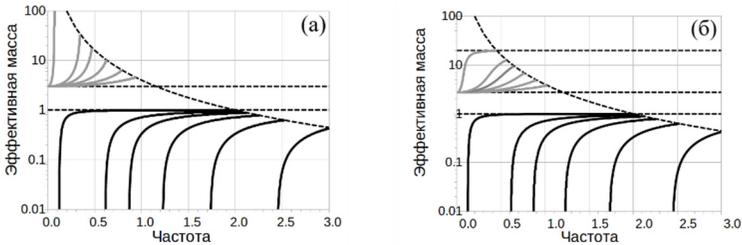


Рис. 2. Зависимость эффективной массы от частоты для акустической (серые) и оптической (чёрные) ветвей дисперсии для классической (а) и модифицированной (б) цепочек масса в массе при $I/J = 10$ и $m/M = 0,5$. Слева направо $I/K = 100; 4; 2; 1; 0,5; 0,25$. Частота в единицах ω_m , а эффективная масса в t

Ширина запрещённой зоны определяется так:

$$\Delta\omega = \sqrt{\omega_A^2 + \omega_0^2} - \sqrt{\frac{\omega_A^2 + \omega_0^2}{2} + 2(\omega_m^2 + \omega_M^2) - \sqrt{\left(\frac{\omega_A^2 + \omega_0^2}{2} + 2(\omega_m^2 + \omega_M^2)\right)^2 - 4(\omega_m^2\omega_A^2 + \omega_0^2\omega_M^2 + 4\omega_m^2\omega_M^2)}} \quad (2)$$

Отметим, что запрещённая зона для модифицированной цепочки масса-в-массе существует не всегда. Для эффективной массы получается уравнение:

$$\frac{m_{eff\pm}}{m} = -\frac{1}{2} \frac{\omega_m^2}{\omega_M^2} \left(\frac{\omega_A^2}{\omega^2} - 1 + \frac{\omega_M^2}{\omega_m^2} \left(\frac{\omega_0^2}{\omega^2} - 1 \right) \right) \mp \sqrt{\left[\frac{1}{2} \frac{\omega_m^2}{\omega_M^2} \left(\frac{\omega_A^2}{\omega^2} - 1 + \frac{\omega_M^2}{\omega_m^2} \left(\frac{\omega_0^2}{\omega^2} - 1 \right) \right) \right]^2 + \frac{\omega_m^2}{\omega_M^2} \left(\frac{\omega_A^2 - \omega^2 + \omega_0^2}{\omega^2} \right)} \quad (3)$$

Отметим, что для получения уравнений для классической цепочки масса-в-массе в уравнениях для модифицированной цепочки нужно устремить ω_M к нулю. Рассмотрим случай $\omega_m = \omega_M$. Введём обозначение ω_{ch} для этих частот. Отметим, что $\omega_A^2 + \omega_0^2 = K/\mu$. Здесь $\mu = mM/(m + M)$ – приведённая масса. Введём обозначение $\omega_{rd} = \sqrt{\omega_A^2 + \omega_0^2}$. Из уравнения (1) получается уравнение для акустической ветви дисперсии:

$$\omega_-^2 = 4\omega_{ch}^2 \sin^2 \frac{ka}{2} \text{ и } \frac{m_{eff-}}{m} = 1. \quad (4)$$

Отметим, что для акустической ветви дисперсии эффективная масса не зависит от частоты. Для оптической ветви дисперсии получаем:

$$\omega_+^2 = \omega_{rd}^2 + 4\omega_{ch}^2 \sin^2 \frac{ka}{2} \text{ и } \frac{m_{eff+}}{m} = 1 - \frac{\omega_{rd}^2}{\omega^2}. \quad (5)$$

Выводы

Получены уравнения для акустических и оптических ветвей дисперсии, для ширины запрещённой зоны и для эффективной массы модифицированной цепочки масса-в-массе. С использованием полученных уравнений промоделированы классическая и модифицированная цепочки масса-в-массе при разных соотношениях масс и упругостей пружин. Изучен частный случай $\omega_m = \omega_M$, на основе которого, с использованием длинноволнового

приближения, в работе [3] получено формальное обобщение уравнений релятивистской квантовой механики. В дальнейшей работе мы планируем изучить длинноволновое приближение, что соответствует непрерывным материалам.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Vincent J.H. On the Construction of a Mechanical Model to Illustrate Helmholtz's Theory of Dispersion. The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, 1898. Vol. 46, no. 283: pp. 557–563. <https://doi.org/10.1080/14786449808621232>

2. Huang H.H., Sun C.T., Huang G.L. On the Negative Effective Mass Density in Acoustic Metamaterials // International Journal of Engineering Science, 2009. Vol. 47, no. 4, pp. 610-617. <https://doi.org/10.1016/j.ijengsci.2008.12.007>

3. Turin V.O. et al. A Mass-in-Mass Chain and the Generalization of the Dirac Equation with an Eight-Component Wave Function and with Optical and Acoustic Branches of the Dispersion Relation // Russian Microelectronics, 2023. Vol. 52, Suppl. 1, pp. S299-S305. <https://doi.org/10.1134/S1063739723600693>

WAVES IN CLASSICAL AND MODIFIED MASS-IN-MASS CHAINS

*V.O. Turin, I.V. Nazritsky, D.D. Kireev, P.A. Andreev,
Y.V. Ilyushina*

Abstract. The paper considers mathematical models of acoustic metamaterials based on classical and modified (with additional harmonic interaction between neighboring internal masses) one-dimensional infinite mass-in-mass chains. Equations are obtained for the acoustic and optical branches of dispersion, for the band gap width, and for the effective mass.

Keywords: mass-in-mass chain, modified mass-in-mass chain, acoustic and optical branches of dispersion, band gap, effective mass, acoustic metamaterials.

3. С

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

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАБОТЫ ЯЧЕЕК ЭНЕРГОНЕЗАВИСИМОЙ ПАМЯТИ НА ОСНОВЕ ТЕХНОЛОГИИ RERAM

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

¹ФИЦ ИУ РАН, г. Москва

Аннотация. В связи с бурным развитием информационных технологий, включая системы искусственного интеллекта, в последнее время усилился интерес к элементам энергонезависимой памяти. В работе представлен прототип программного обеспечения САПР для компьютерного моделирования энергонезависимой памяти на основе технологии ReRAM (шифр «CoVA»). В основе разработки лежит многомасштабная схема моделирования. Система построена по принципу специализированного многоуровневого ПО. В работе представлена архитектура системы и описана среда проектирования.

Ключевые слова: энергонезависимая память, система автоматизированного проектирования (САПР), многомасштабное моделирование.

Введение

В связи с бурным развитием информационных технологий, включая системы искусственного интеллекта (ИИ), с активной разработкой элементной базы для нейроморфных систем и других областей, в последнее время усилился интерес к элементам энергонезависимой памяти. Данные элементы и их матрицы могут использоваться для постоянного или долговременного хранения информации, в том числе при отсутствии электрического питания, работать как искусственные синапсы, в то время как логические схемы структур металл-оксид-полупроводник (КМОП) могут функционировать как нейроны. К наиболее перспективным можно отнести такие технологии для создания ячеек энергонезависимой памяти как ReRAM (Resistive random-access memory, резистивная память с произвольным доступом), FeRAM (Ferroelectric RAM – сегнетоэлектрическая оперативная память), MRAM (magnetoresistive RAM – магниторезистивная оперативная память). Многоуровневые элементы памяти позволяют увеличить плотность интеграции, однако требуют более точного моделирования и выбора режимов переключения.

Разработка новых элементов памяти неразрывно связана с созданием средств автоматизированного проектирования электронных устройств. На большую четверку производителей автоматизированного программного обеспечения, в которую входят Cadence Design System[1], Synopsys[2], Ansys[3] и Siemens EDA[4], в настоящее время приходится более 90% доходов отрасли EDA (автоматизация проектирования электроники). Одним из наиболее востребованных в данной области программных продуктов является Quantum ATK – программное обеспечение для атомистического моделирования, входящий в состав Synopsys. Данный пакет используется в ходе компьютерного моделирования сложных структур, состоящих из новых кристаллических и аморфных материалов, сплавов, интерфейсов и многослойных стеков, позволяет исследовать различные тепловые и механические свойства, а также рассматривать диффузионные и поверхностные процессы.

Разработка отечественных программных средств системы автоматизированного проектирования ЭКБ – непереносимое условие развития микроэлектроники в РФ, особенно с учетом специфики текущей ситуации в мире. В настоящее время в России ряд компаний, разработчиков системного программного обеспечения, объединились в Консорциум «Базис», среди учредителей которого разработчики системного ПО «Аскон», «Скан», Eremex, Omega, Институт инженерной физики и Ассоциация электронного машиностроения. Консорциум отечественных разработчиков направил в 2022 году предложение Минпромторгу выработать стратегию развития российских систем автоматизированного проектирования для электроники. Актуальность такого предложения связана с необходимостью замещения зарубежных САПР, разработчики которых (Synopsys, Cadence, другие) прекратили продажу лицензий в Россию и отказались от обновлений уже приобретенного ПО (программного обеспечения).

Описание прототипа программного обеспечения САПР для компьютерного моделирования энергонезависимой памяти на основе технологии ReRAM (шифр «CoVA»)

В ФИЦ ИУ РАН в настоящее время проводятся работы по созданию программной среды для моделирования элементов энергонезависимой памяти в рамках проекта РФФИ № 23-91-01012 «Разработка программных средств системы автоматизированного

проектирования ЭКБ для создания ячеек энергонезависимой памяти на основе технологии ReRAM, FeRAM, MRAM», ШИФР «СоВа» по заказу АО НИИМЭ. На первом этапе выполнения проекта создана и программно-реализована общая архитектура системы и прототип Программного обеспечения для создания ячеек энергонезависимой памяти на основе технологии ReRAM.

ПО «СоВа» построено по принципу специализированного многоуровневого ПО.

В основе лежит многомасштабная схема моделирования [5, 6]. Уровни ПО дифференцированы по временному и пространственному масштабу задач, начиная с атомарного и молекулярного уровня с переходом на уровень веществ, тел, структур с границами раздела, электрических и электрофизических характеристик приборных структур. Для решений на каждом уровне в систему «СоВа» подгружаются соответствующие вычислительные модули ПО.

Архитектура ПО «СоВа» предусматривает использование ряда оригинальных отечественных модулей, выполненных в рамках данного проекта, а также модулей в составе зарубежных специализированных ПО. Все они объединены под управлением единой среды проектирования. В состав специализированных ПО в качестве составляющих ПО «СоВа» входят:

1. Отечественные модули (собственные разработки):

– вычислительные модули для проведения расчетов на атомно-кристаллическом уровне, на наноуровне, модуль редуцирования физико-математических моделей в компактные модели;

– набор расчетных модулей, реализующих численные методы с возможностью симуляции процессов;

– модуль описания элементов энергонезависимой памяти и ячеек на их основе.

2. Модуль для квантово-механического моделирования электронной структуры и энергетических характеристик структур на основе теории функционала электронной плотности (DFT) [7]. Могут быть задействованы пакеты: Quantum ESPRESSO (URL <https://www.quantum-espresso.org/>), SIESTA (URL <https://siesta-project.org/siesta/index.html>), ABINIT (https://abinit.github.io/abinit_web/) и другие специализированные программные продукты, которые позволяют моделировать электронную и атомную структуру молекул и кристаллов.

Архитектура системы

На рис. 1 представлена архитектура системы, описанная с помощью Диаграммы компонентов ПО «СоВа».

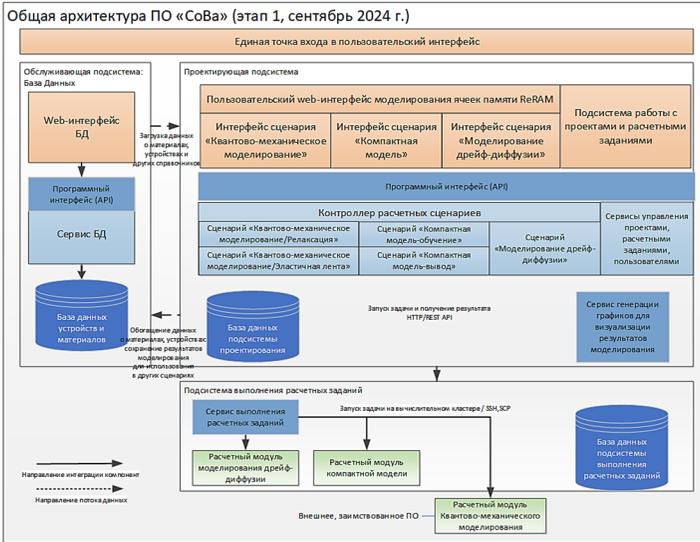


Рис. 1. Диаграмма компонентов ПО «СоВа».

Программное обеспечение для создания ячеек энергонезависимой памяти на основе технологии ReRAM предоставляет возможность:

- проведения многоуровневых и распараллеленных расчетов в автоматизированном режиме на высокопроизводительных программных комплексах;
- проведения компьютерной симуляции процессов в структурах энергонезависимой памяти на нано и микроуровнях;
- изучать поведение элементов энергонезависимой памяти в при различных режимах работы;
- использовать средства визуализации результатов вычислительных экспериментов и интеллектуального анализа данных, для анализа результатов и принятия решения на основе полученной информации;
- использовать протокол REST и формат данных JSON для информационного обмена между компонентами;
- круглосуточного режима функционирования для системы, без особых требований к доступности.

Особенности реализации среды исполнения ПО «СоВа»

Разработана среда исполнения сценариев дает возможность в автоматическом режиме запускать сценарии с заданными входными параметрами, отслеживать их выполнение в целом, и по составным задачам, просматривать входные и выходные данные (результаты расчетов).

Интеграционная роль среды исполнения заключается в формировании входных данных для вычислительных модулей в соответствующем формате и единицах измерения, отслеживании работы вычислительных модулей, получении конечного результата расчета и преобразовании его в формат и единицы измерения, доступные для других модулей сценария.

Среда проектирования ПО «СОВА»

Среда проектирования, под управлением которой объединяются и работают модули ПО «СоВа» включает:

- пользовательский интерфейс (рис. 2, 3);

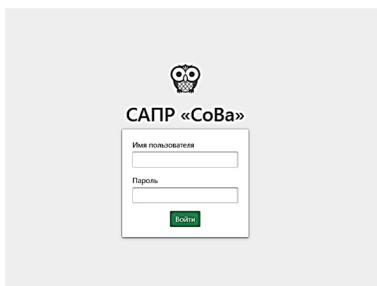


Рис. 2. Окно авторизации



Рис. 3. Приветственная страница

– графический пользовательский интерфейс для ученого-исследователя, включая средства визуализации результатов расчетов (рис. 4, 5);

– базу данных с информацией о материалах, их структурах и свойствах, интегрированную со средой моделирования сценариев;

– среду моделирования сценариев, позволяющую создавать и модифицировать сценарии, используя новые программные решения (алгоритмы последовательного выполнения отдельных многомасштабных расчетов) для решения разных классов задач, учитывающая особенности конкретной задачи и требуемых выходных данных.

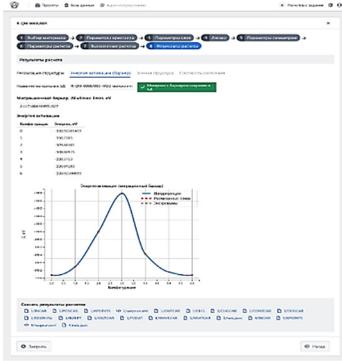


Рис. 4. Результаты расчета энергетического барьера для HfO_2

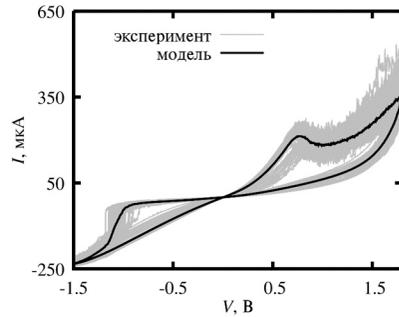


Рис. 5. Модельная и экспериментальные вольтамперные характеристики для $\text{Pt-HfO}_2\text{-TiN}$

Кроме того, среда проектирования в дальнейшем может быть использована для создания геометрического описания конструкции элементов энергонезависимой памяти в нано- и микро- масштабах, а также для разработки средств их интеграции с описанием материалов конструкции, включая интерфейсы и их параметры.

Заключение

В докладе рассматриваются актуальные методы и средства компьютерного моделирования САПР «CoVA», предназначенной для создания ячеек энергонезависимой памяти на основе технологии ReRAM. Представлены основные особенности и проектируемые возможности построенного программного продукта, с помощью которого создается эффективная среда для:

- реализации многомасштабных физико-математических моделей, описывающих с различной степенью детализации процессы, проходящие в ячейках энергонезависимой памяти на основе технологий ReRAM в ходе их функционирования при различных условиях;

- разработки солверов, базирующихся на численных алгоритмах решения уравнений математической физики, стохастических методов для Монте-Карло моделирования, аналитических методов и других, служащих для вычислительной реализации математических моделей;

- разработки компактных моделей элементов энергонезависимой памяти и устройств на их основе;

– построения компьютерных моделей для предсказания характеристик элементов на основе анализа теоретических и экспериментальных данных;

– создания методов верификации и валидации цифровых двойников элементов энергонезависимой памяти и ячеек памяти на их основе;

– разработки механизмов обратной связи с целью определения путей уточнения спецификаций проектируемых элементов и выполнения необходимых доработок;

– проведения комплексных исследований по изучению поведения элементов энергонезависимой памяти в критических режимах при превышении допустимых параметров;

– создания на основе цифровых двойников элементов энергонезависимой памяти экспертных систем для прогнозирования надежности и сроков бесперебойной работы при различных внешних воздействиях и условиях эксплуатации, позволяющих быстро выявить причины неисправностей в процессе тестирования и выработать рекомендации по их устранению.

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

Список использованных источников

[1] <https://www.cadence.com/>

[2] <https://www.synopsys.com>

[3] <http://www.ansys.com/>

[4] <https://eda.sw.siemens.com/>

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

[6] 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

[7] *W. Kohn, L.J. Sham.* Self – consistent equations including exchange and correlation effects. – Phys. Rev. 140:A. 1965. P. 1133–1138.1.

COMPUTER MODELING OF NON-VOLATILE MEMORY CELL OPERATION BASED ON RERAM TECHNOLOGY

Karine Karlenovna Abgaryan,

PhD, Chief Researcher, Head of the Department¹,

kristal83@mail.ru

Abstract. Due to the rapid development of information technologies, including artificial intelligence systems, interest in non-volatile memory elements has recently increased. This paper presents a prototype of CAD software for computer modeling of non-volatile memory based on ReRAM technology (cipher “SoVA”). The development is based on a multiscale modeling scheme. The system is built on the principle of specialized multilevel software. The paper presents the system architecture and describes the design environment.

Keywords: non-volatile memory, computer-aided design system (CAD), multiscale modeling.

УДК 538.9, 536.2.01, 536.21

<https://doi.org/10.29003/m4262.MMMSEC-2024/69-72>

О ПРОБЛЕМАХ РАСЧЕТА ЭФФЕКТИВНОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУР И КОНТАКТНОГО ТЕРМИЧЕСКОГО СОПРОТИВЛЕНИЯ ИНТЕРФЕЙСОВ

Баринов Александр Алексеевич,

к.т.н., доцент,

barinov@bmstu.ru

Хвезюк Владимир Иванович,

д.т.н., профессор,

khvesyuk@bmstu.ru

МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва

Аннотация. Показано, что в задачах расчета интенсивности теплообмена в твердотельных структурах, построенных на элементах микро- и наномасштаба, одной из ключевых является проблема учета граничного эффекта. Появление граничного эффекта связано, во-первых, с морфологией реальной поверхности образца (шероховатостью поверхности, геометрией отдельных слоев) и, во-вторых, с существенным влиянием взаимодействия переносчиков тепла с границей образца на теплоперенос. Предложены подходы к комплексному учету граничного эффекта при расчете эффективной теплопроводности пленок и контактного термического сопротивления интерфейсов.

Ключевые слова: эффективная теплопроводность, контактное термическое сопротивление, морфология поверхности, шероховатость.

Введение

Одной из тенденций в приборостроении и материаловедении является минитюаризация и применение структурных элементов наномасштаба и низкоразмерных структур [1]. В таких объектах ключевую роль в теплопередаче наряду с размерным и квантово-размерным эффектом начинают играть процессы рассеяния переносчиков теплоты на границах образца – так называемый граничный эффект. При этом возникает фундаментальная задача по созданию достоверных и надежных методов расчета и прогнозирования теплофизических свойств. В данной работе проводится анализ влияния факторов, оказывающих определяющее влияние на интенсивность теплообмена на примере двух задач: 1) расчет теплопроводности при распространении тепла вдоль пленок (трубок, нитей – каналов) нанометровой толщины; 2) расчет контактного термического сопротивления при распространении тепла поперек интерфейса (области контакта между двумя твердыми телами).

Результаты исследования

В рамках проведенного исследования можно выделить следующие ключевые тезисы

1. Для расчета теплофизических свойств применяется кинетическая теория фононов (формализм Ландауэра) [2], в соответствии с которой учет граничного эффекта происходит через длину свободного пробега l_j для определения эффективной теплопроводности плёнок и через коэффициент переноса $\alpha_{1-2,j}$ для определения контактного термического сопротивления интерфейсов.

2. Из анализа ряда экспериментальных работ по исследованию теплопроводности наноструктур и контактного термического сопротивления [3] установлено, что интенсивность теплообмена напрямую зависит не только от средней квадратичной шероховатости поверхности σ (средняя «высота» шероховатости), но также и от интервала корреляции l («длины» шероховатости). Проблема заключается в том, что существующие модели базируются на однопараметрическом задании шероховатости поверхности [3] через так называемый параметр зеркального отражения, учитывающий либо только «высоту», либо «длину» шероховатости.

3. Предложен принципиально новый подход – описание шероховатой границы с помощью модели статистически случайного профиля [2, 3]. При этом рассматриваются распределения гра-

диентов (углов) наклона профиля, а не линейные геометрические размеры шероховатости. К примеру, при рассмотрении случайной двумерной поверхности, для которой углы наклона распределены по закону Гаусса, описание шероховатой поверхности строится на задании среднего угла γ наклона профиля шероховатой поверхности, который определяется как $\gamma = \sigma / l$. Преимущество модели – одновременный учет среднеквадратичного значения шероховатости σ (высоты) и интервала корреляции l (длины).

4. Проблему расчета взаимодействия фононов с шероховатыми поверхностями твёрдых тел [2, 3] предлагается решить на основании приближения Кирхгофа – рассмотрении касательных плоскостей, от которых происходит отражение переносчиков тепла (фононов в полупроводниках и диэлектриках) при взаимодействии с каждой точкой шероховатой поверхности и определении углов отражения от такой поверхности. Данный подход, во-первых, позволяет обобщить общепринятые методы расчета теплофизических свойств на случай реальной шероховатой границы раздела при помощи простых модификаций (см. п. 3). Во-вторых, он предоставляет инструмент для определения проводимости Капицы и эффективной продольной теплопроводности и изучения влияния шероховатости на интенсивность теплообмена (см. п. 1).

Выводы

Показана необходимость анализа шероховатости поверхности при экспериментальном определении теплопроводности и контактного термического сопротивления. В настоящее время этому вопросу не уделяется должного внимания, опытные данные весьма скудные. Во-первых, требуется оценка параметров профиля реальной (шероховатой) поверхности наноструктур – среднеквадратичной шероховатости (средней высоты) и длины корреляции (базовой длины), комбинация которых образует среднеквадратичный угол наклона профиля. Во-вторых, необходимо изучение профиля поверхности наноструктур (определение вероятностной плотности распределения углов наклона), так как на данный момент общепринятым является распределение Гаусса и требуется подтверждение его применимости для различных поверхностей наноструктур и интерфейсов, в том числе с атомарной шероховатостью.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Khvesyuk, V.I., Barinov, A.A., Liu, B. et al. Fundamentally New Approaches for Solving Thermophysical Problems in the Field of Nanoelectronics. // Russ Microelectron. 2023. Vol. 52, pp. 798–804.

2. Barinov A.A., Liu B., Khvesyuk V.I. A new technique for modelling phonon scattering processes at rough interfaces and free boundaries of solids. // J. Phys.: Conf. Ser. 2022. Vol. 2150. Art.no. 012021. 6 p.

3. Баринов А.А. Разработка метода расчета теплопроводности тонких пленок на основе статистических моделей взаимодействия фононов с шероховатыми границами наноструктур: авт. дис. ... к-та. техн. наук: (01.04.14). М., 2022. 18 с.

ON THE PROBLEMS OF CALCULATING THE EFFECTIVE THERMAL CONDUCTIVITY OF MULTILAYER STRUCTURES AND THE CONTACT THERMAL RESISTANCE OF INTERFACES

A.A. Barinov, V.I. Khvesyuk

Abstract. One of the key problems of calculating the intensity of heat transfer in solid-state micro- and nanostructures is the boundary effect. The boundary effect is associated, firstly, with the morphology of the real surface of the sample (surface roughness and etc) and, secondly, with the significant influence of the interaction of heat carriers with the sample boundary. Approaches to the integrated consideration of the boundary effect in calculating the effective thermal conductivity of films and the contact thermal resistance of interfaces are proposed.

Keywords: effective thermal conductivity, contact thermal resistance, roughness.

УДК 004.94

<https://doi.org/10.29003/m4263.MMMSEC-2024/72-75>

РОЛЬ ФОНОННОЙ ЭНТРОПИИ В ФОРМИРОВАНИИ СТРУКТУРЫ 7×7 НА ПОВЕРХНОСТИ SI(111)

Жачук Руслан Анатольевич,

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

Coutinho José, PhD,

principal researcher²,

jose.coutinho@ua.pt, +351 924-406-072

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

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

Аннотация. С помощью расчетов из первых принципов, основанных на теории функционала плотности, исследована относительная термодинамическая устойчивость структур 3×3 , 5×5 , 7×7 , 9×9 , относящихся к семейству DAS-структур (dimer-atom-stacking fault) на поверхности Si(111). С учетом фононного вклада в свободную энергию поверхности было найдено, что структура 5×5 более стабильна, чем 7×7 при низких температурах. Фазовый переход $7\times 7 \rightarrow 5\times 5$ должен происходить при температуре, близкой к комнатной, однако такая трансформация структуры поверхности при охлаждении образца затруднена из-за ограниченной подвижности атомов Si при низких температурах. Результаты показывают решающую роль фононной энтропии в формировании структуры 7×7 при повышенных температурах и метастабильный характер этой структуры при температурах ниже комнатной.

Ключевые слова: кремний, поверхность, структура, теория функционала плотности.

Тезисы

Структура 7×7 реконструированной поверхности Si(111) является одной из самых сложных из известных структур на поверхностях Si и Ge. Как следует из экспериментальных данных, эта структура наиболее часто формируется на поверхности Si(111), что свидетельствует об ее исключительной стабильности, вызванной низкой энергией формирования. Атомная структура 7×7 определена достаточно давно и описывается DAS-моделью (dimer-atom-stacking fault) [1]. DAS-модель является общепризнанной [2] и служит основой для исследований, относящихся к поверхностям Si(111) и Ge(111) [3, 4]. Эта модель описывает целое семейство поверхностных структур, образующихся на поверхностях Si(111) и Ge(111) и имеющих периодичность $(2n+1)\times(2n+1)$, где n – положительное целое: 3×3 , 5×5 , 7×7 , 9×9 и т.д. Однако в литературе отсутствуют надежные данные об относительных энергиях формирования поверхности Si(111) с различными структурами. Такие расчеты требуют учета вклада энтропии в свободную энергию формирования поверхности, так как известно, что энергии формирования структур из DAS-семейства при $T=0$ К отличаются незначительно [5]. В данной работе мы провели расчеты относительной свободной энергии формирования ряда DAS-структур на поверхности Si(111) (3×3 , 5×5 , 7×7 , 9×9 и бесконечно большой) с учетом вкладов фононной и электронной энтропии. Расчеты были выполнены на основе теории функционала плотности с применением программных пакетов SIESTA и VASP.

В результате расчетов было найдено, что при температурах ниже комнатной структура 5×5 обладает меньшей свободной энергией, чем 7×7 , а при более высоких температурах наоборот. Тем не менее, структура 7×7 экспериментально наблюдается в широком диапазоне температур, от 0 К до 1100 К. Это объясняется низкой подвижностью атомов Si при температурах около комнатной и ниже, в результате чего фазовый переход $7 \times 7 \rightarrow 5 \times 5$ оказывается заблокирован. Таким образом, результаты наших исследований показывают решающую роль фононной энтропии в формировании структуры 7×7 при повышенных температурах и свидетельствуют о метастабильном характере этой структуры при температурах ниже комнатной.

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

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. K. Takayanagi, Y. Tanishiro, S. Takahashi, M. Takahashi. Structure analysis of Si(111)- 7×7 reconstructed surface by transmission electron diffraction // Surf. Sci. 164, 367 (1985). DOI: 10.1016/0039-6028(85)90753-8
2. R.A. Zhachuk, J. Coutinho. Comment on “Experimental evidence for a new two-dimensional honeycomb phase of silicon: a missing link in the chemistry and physics of silicon surfaces?” // J. Phys. Chem. C 126, 866 (2022). DOI: 10.1021/acs.jpcc.1c04561
3. R. Zhachuk, S. Teys, J. Coutinho. Strain-induced structure transformations on Si(111) and Ge(111) surfaces: a combined density-functional and scanning tunneling microscopy study // J. Chem. Phys. 138, 224702 (2013). DOI: 10.1063/1.4808356
4. R. Zhachuk, B. Olshanetsky, J. Coutinho, S. Pereira. Electronic effects in the formation of apparently noisy scanning tunneling microscopy images of Sr on Si(111)- 7×7 // Phys. Rev. B 81, 165424 (2010). DOI: 10.1103/PhysRevB.81.165424
5. S.D. Solares, S. Dasgupta, P.A. Schultz, Y.-H. Kim, C.B. Musgrave, W.A. Goddard. Density functional theory study of the geometry, energetics, and reconstruction process of Si(111) surfaces // Langmuir 21, 12404 (2005). DOI: 10.1021/la052029s
6. R.A. Zhachuk, J. Coutinho. Crucial role of vibrational entropy in the Si(111)- 7×7 surface structure stability // Phys. Rev. B 105, 245306 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevB.105.245306

ROLE OF PHONON ENTROPY IN FORMATION OF THE 7×7 STRUCTURE ON THE SI(111) SURFACE

R. A. Zhachuk, J. Coutinho

Abstract. The relative thermodynamic stability of 3×3 , 5×5 , 7×7 , and 9×9 structures belonging to the DAS (dimer-atom-stacking fault) family of structures on the Si(111) surface has been investigated using first-principles cal-

culations based on density functional theory. Taking into account the phonon contribution to the surface free energy, the 5×5 structure was found to be more stable than 7×7 at low temperatures. The phase transition $7 \times 7 \rightarrow 5 \times 5$ should occur at temperatures close to the room temperature, but such a surface structure transformation during sample cooling is hindered due to the limited mobility of Si atoms at low temperatures. The results show the crucial role of phonon entropy in the formation of the 7×7 structure at elevated temperatures and the metastable nature of this structure at temperatures below room temperature.

Keywords: silicon, surface, structure, density functional theory.

УДК 536.2.01,536.21

<https://doi.org/10.29003/m4264.MMMSEC-2024/75-78>

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВЕРОЯТНОСТИ ЗЕРКАЛЬНОГО ОТРАЖЕНИЯ УПРУГИХ ВОЛН ОТ ШЕРОХОВАТОЙ ПОВЕРХНОСТИ

Инь Фэй,

аспирант,

yinfei0426@outlook.com

Лю Шицян,

аспирант

sxliu98@gmail.com

Хвесьюк Владимир Иванович,

д.т.н., профессор

khvesyuk@bmstu.ru

МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва

Аннотация. Впервые предпринята теоретическая попытка определить вероятность зеркального отражения упругих волн p от шероховатой поверхности наноплёнок в баллистическом режиме теплопереноса вдоль плёнки. Этот параметр критически важен для оценки теплопроводности, однако теория этого явления пока отсутствует.

Ключевые слова: вероятность зеркального отражения, упругий волн, шероховатость, наноплёнка.

Введение

Параметр p был предложен Д. Займаном в 1960 году [1], но до сих пор не существует теории для его точного определения. Существует одна работа, в которой реализовано экспериментальное определение p в зависимости от длин волн, падающих на шероховатую поверхность [2]. Теоретические расчёты теплопроводности

ограничиваются, как правило, заданием этой величины [3] без каких – либо соображений, основанных на учёте особенностей шероховатости поверхности и особенностей упругих волн.

Методология

Для определения параметра p необходима модель шероховатости, разработанная в [4, 5], основанная на статистическом анализе, так как точное воспроизведение шероховатости невозможно. Анализ базируется на малых локальных наклонах шероховатости, что обеспечивается методом молекулярной эпитаксии, используемым при производстве наноструктур. Вводится функция распределения наклонов, чаще всего — функция Гаусса в форме:

$$w(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\gamma} \exp\left(-\frac{2\varphi^2}{\gamma^2}\right) \quad (1)$$

Здесь $\gamma = \sigma / \langle l \rangle$, где σ , $\langle l \rangle$ средняя высота и средняя длина шероховатостей.

Рассматривается двумерная картина шероховатости плёнки при её сечении плоскостью, нормальной к поверхности вдоль оси плёнки. Введена система координат: Ox совпадает с осью плёнки, Oy — перпендикулярна ей. Анализируются процессы падения и отражения упругих волн для SH, SV, P волн. Зеркальное отражение происходит, когда угол отражения равен углу падения, измеряемым между траекториями и нормалью к оси плёнки. Условие зеркального отражения выполняется при соотношении средней длины шероховатости $\langle l \rangle$ и проекции длины волны на ось Ox : $\lambda \cdot \sin \theta$, где θ — угол падения волны.

Принимается, что отражение является зеркальным, если $\lambda \cdot \sin \theta \geq 2 \langle l \rangle$. Введём граничное значение угла падения θ_1 , меньше которого зеркальное падение упругой волны невозможно: $\lambda \cdot \sin \theta_1 / 2 \langle l \rangle = 1$. При этом условии $p(\lambda, \theta_1) = 1$. Таким образом, волны, длины которых удовлетворяют условию $\lambda / 2 \langle l \rangle < 1$, а также волны, для которых $\lambda / 2 \langle l \rangle > 1$, но $\theta < \theta_1$, не могут отражаться зеркально, то есть для них $p(\lambda, \theta) = 0$.

При условии, что $\lambda / 2 \langle l \rangle > 1$ доля волн, отражающихся зеркально от шероховатой поверхности, то есть $p(\lambda, \theta) = 1$. Теперь

рассмотрим возможность реальной оценки величины $p(\lambda)$. Разделим все возможные волны на три части. Первая часть — волны, для которых выполняется условие:

$$\lambda / 2 \langle l \rangle < 1 \quad (2)$$

Число этих волн равно N_1 .

Вторая часть упругих волн — волны, для которых выполняется условие:

$$\lambda / 2 \langle l \rangle \geq 1, \theta_1 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2} \quad (3)$$

И число этих волн равно N_2 .

Третья часть упругих волн - волны, падающие на поверхность под углами $0 < \theta < \theta_1$ и удовлетворяющие условию $\lambda / 2 \langle l \rangle \geq 1$.

Число этих волн равно N_3 .

В ходе выполнения расчётов надо иметь в виду, что граничные значения λ зависят от температуры. Поэтому результаты этих расчётов зависят от температуры.

Таким образом, получаем:

$$p(T) = \frac{N_2(T)}{N_1(T) + N_2(T) + N_3(T)} \quad (4)$$

Выводы

В данной работе впервые дано определение вероятности зеркального отражения упругих волн от шероховатых поверхностей наноплёнок и получена формула для определения зависимости p от температуры.

Список использованных источников

1. J.M. Ziman, "Electrons and Phonons" Oxford at the Clarendon Press (1960).
2. Ravichandran N.K., Zhang H., Minnich A.J. Spectrally Resolved Specular Reflections of Thermal Phonons from Atomically Rough Surfaces // Phys. Rev. X. 2018. Vol. 8, № 4. P. 041004.
3. Maldovan M. Micro to nano scale thermal energy conduction in semiconductor thin films // Journal of Applied Physics. 2011. Vol. 110, № 3. P. 034308.
4. Bass F.G., Fuks I.M. Wave scattering from statistically rough surfaces. Oxford ; New York: Pergamon Press, 1979. 527 p.
5. Barinov A.A., Khvesyuk V.I. Statistical model of phonon scattering on rough boundaries of nanostructures // J. Phys.: Conf. Ser. 2021. Vol. 2057, № 1. P. 012111.

DETERMINATION OF THE PROBABILITY OF SPECULAR REFLECTION OF ELASTIC WAVES FROM A ROUGH SURFACE

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

Abstract. For the first time, a theoretical attempt is made to determine the probability of mirror reflection of elastic waves from the rough surface of nanofilms in the ballistic regime of heat transfer along the film. This parameter is critically important for the estimation of thermal conductivity, but the theory of this phenomenon is still missing.

Keywords: specular reflection probability, elastic wave, roughness, nanofilm.

УДК 004.94:66.011:548.55

<https://doi.org/10.29003/m4265.MMMSEC-2024/78-81>

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛООВОГО УЗЛА УСТАНОВКИ ДЛЯ ВЫРАЩИВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ ТЕЛЛУРИДА КАДМИЯ МЕТОДОМ VGF С ВВЕДЕНИЕМ АКСИАЛЬНЫХ НИЗКОЧАСТОТНЫХ ВИБРАЦИЙ

Костиков Владимир Анатольевич,

н.с.¹, kostikov.v.a@muctr.ru

Довнаревич Алексей Денисович,

м.н.с.¹, aleksejko6@gmail.com

Нефедов Олег Александрович,

инженер¹, oa.nefedov@lassard.ru

Аветисов Игорь Христофорович,

д.х.н., проф.¹,

avetisov.i.k@muctr.ru

¹РХТУ им. Д.И. Менделеева, г. Москва.

Аннотация. В работе выполнено численное моделирование тепловых полей в разрабатываемой высокотемпературной установке для выращивания монокристаллов теллурида кадмия диаметром 100 мм из расплава методом VGF (Vertical Gradient Freeze). Конструкция включает в себя механизм введения аксиальных низкочастотных вибраций в расплав для выравнивания фронта кристаллизации с помощью погруженного инертного тела специальной формы.

Ключевые слова: CdTe, кадмий, теллур, кристалл, расплав, VGF, вибрация, моделирование, CFD, конвекция, излучение.

Введение

На сегодняшний день теллурид кадмия и его твердые растворы $Cd_xZn_{1-x}Te$ являются лучшими материалами для создания детекторов рентгеновского и гамма-излучения комнатной температуры [1]. Качество таких детекторов напрямую зависит от структурного совершенства и химической чистоты выращиваемого монокристалла. Метод VGF обеспечивает малый температурный градиент, что позволяет снизить концентрацию нестехиометрических дефектов, которые образуются при высокотемпературном полиморфном переходе [2]. Однако при выращивании монокристалла диаметром 100 мм методом VGF будет образовываться вогнутый в кристалл фронт кристаллизации за счет выделения теплоты кристаллизации и низкой теплопроводности растущего кристалла CdTe, что ведет к образованию сильных термических напряжений и увеличивает плотности дислокаций. Перспективным решением поставленной задачи является введение аксиальных низкочастотных вибраций с помощью инертного тела [3] для создания контролируемого течения в расплаве, которое позволяет выровнять тепловое поле и обеспечить плоский фронт кристаллизации. Также показано [4], что введение вибраций приводит к разбиению ассоциатов в расплаве, что приближает процесс роста монокристалла из расплава к росту кристаллов из паровой фазы.

Конструкция ростовой установки

Процесс выращивания монокристаллов CdTe производится в герметичной цилиндрической камере диаметром 70 см и высотой 100 см с водоохлаждаемыми стенками. Процесс роста осуществляется в атмосфере аргона ($P_{Ar} = 5$ атм). Тепловой узел установки спроектирован из графитовых материалов. Тигель с расплавом находится в температурном градиенте между верхним и нижним нагревателями. Для выравнивания теплового поля и компенсации потерь через теплоизоляцию в радиальном направлении используется боковой нагреватель с распределительным экраном. В процессе роста монокристалла мощность нагревателей регулируется для обеспечения плавного уменьшения температуры и обеспечения постепенного роста кристалла вверх из затравочного кристалла в носике тигля. Вибрационное воздействие производится с помощью погруженного в расплав тела из графита. В центральной части тела имеется отверстие, необходимое для создания

течения необходимой конфигурации и удаления газовых пузырей. Скругление торцевых кромок тела играет определяющую роль в генерации вибрационных потоков и четко контролируется при изготовлении. Ножка тела пропускается через отверстие в крышке тигля и закрепляется на металлическом штоке, с помощью которого подводятся вибрации. Конструкция также предусматривает полное извлечение тела из расплава.

Моделирование теплового узла

Расчёт тепловых полей в установке осуществлялся с использованием пакета вычислительной гидродинамики ANSYS Fluent. Так как кристаллизация CdTe происходит при высокой температуре – 1092 °С, – то обязательным условием является учёт теплового излучения в установке, произведенный с помощью модели Discrete Ordinates. Был получен практически линейный температурный градиент 1 К/см в области с тиглем, достаточный для обеспечения плавного полиморфного перехода. Был проведен расчет введения вибраций с моделированием фронта кристаллизации при помощи Enthalpy-porosity – модели. Производился подбор геометрии тела, его положения в тигле, а также оптимальные частоты и амплитуды колебаний для обеспечения плоского фронта кристаллизации в процессе роста CdTe.

Выводы

Разработана установка для выращивания монокристаллов CdTe методом VGF и проведен ее тепловой расчет. Установлены необходимые мощности нагревателей, обеспечивающие градиент температуры в 1 К/см. Определена оптимальная форма и положение тела в тигле, а также оптимальные частота и амплитуда колебаний. Проведен расчет введения аксиальных вибраций в расплав.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках научного проекта лаборатории «Лаборатория технологий веществ электронной чистоты», проект № FSSM2022-0005.

Список использованных источников

1. Prokesch, M.; Soldner, S.A.; Sundaram, A.G. CdZnTe Detectors for Gamma Spectroscopy and X-Ray Photon Counting at 250×10^6 Photons/(mm² s). J. Appl. Phys. 2018, 124, 044503.
2. Roy, U.N.; Burger, A.; James, R.B. Growth of CdZnTe Crystals by the Traveling Heater Method. J. Cryst. Growth 2013, 379, 57–62.

3. Nefedov, O.; Dovnarovich, A.; Kostikov, V.; Mozhevitina, E.; Bocharnikov, D.; Avetissov, I. Numerical Simulation of CdTe Crystal Growth Using the Vertical Gradient Freeze Technique Assisted by Axial Low-Frequency Oscillations of the Melt. *Crystals* 2024, 14, 72.

4. Avetissov, I.; Kostikov, V.; Meshkov, V.; Sukhanova, E.; Grishechkin, M.; Belov, S.; Sadovskiy, a. Modeling of Axial Vibrational Control Technique for CdTe VGF Crystal Growth under Controlled Cadmium Partial Pressure. *J. Cryst. Growth* 2014, 385, 88–94.

NUMERICAL SIMULATION OF THE THERMAL UNIT OF AN INSTALLATION FOR CADMIUM TELLURIDE SINGLE CRYSTALS GROWTH BY VGF METHOD WITH THE INTRODUCTION OF AXIAL LOW-FREQUENCY VIBRATIONS

V.A. Kostikov, A.D. Dovnarovich, I.Ch. Avetisov

Abstract. The work performs numerical modeling of thermal fields in a high-temperature installation being developed for growing cadmium telluride single crystals with a diameter of 100 mm from a melt using the VGF (Vertical Gradient Freeze) method. The design includes a mechanism for introducing axial low-frequency vibrations into the melt to level the crystallization front using a specially shaped immersed inert disk.

Keywords: CdTe, cadmium, tellurium, crystal, melt, VGF, vibration, modeling, CFD, convection, radiation.

<https://doi.org/10.29003/m4266.MMMSEC-2024/81-84>

ВЛИЯНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЗЯЛОШИНСКОГО-МОРИЯ НА МАГНИТНУЮ ДИНАМИКУ АТОМНЫХ ДИМЕРОВ НА НИТРИДИЗИРОВАННОЙ ПОВЕРХНОСТИ МЕДИ

*Локтионов Игорь Анатольевич,
аспирант¹,*

ia.loktionov@physics.msu.ru

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

¹МГУ имени М.В. Ломоносова, г. Москва

²ФИЦ ИУ РАН, г. Москва

Аннотация. В работе исследуются димеры из атомов ферромагнитных 3d-металлов на поверхности $\text{Cu}_2\text{N}/\text{Cu}(001)$: проводится анализ их деформаций и моделируется переключение их намагниченности (spin-flip)

в магнитном поле с помощью уравнения Ландау-Лифшица-Гильберта (ЛЛГ). Рассматривается влияние антисимметричного обменного взаимодействия (взаимодействие Дзялошинского-Мория) на поле и время переключения намагниченности.

Ключевые слова: атомные димеры, спиновая динамика, уравнение Ландау-Лифшица-Гильберта, взаимодействие Дзялошинского-Мория.

Введение

Цепочки из магнитных атомов с лёгкой осью намагничивания обладают потенциалом применения в качестве элементов памяти за счёт бинарности устойчивых магнитных конфигураций, отличающихся направлением магнитных моментов. Эксперименты по переключению между такими конфигурациями были проведены на цепочках из атомов железа на поверхности меди, покрытой тонким слоем нитрида меди [1]. Выбор такой поверхности обусловлен тем, что она, во-первых, в силу своих диэлектрических свойств, позволяет «отсекать» электронную структуру подложки от адсорбата, устраняя их взаимовлияние и давая таким образом возможность исследовать электронные и магнитные свойства структур отдельно; во-вторых, эта поверхность, как было экспериментально обнаружено, может приводить к сильным релаксациям за счёт того, что атомы адсорбата внедряются в структуру монослоя нитрида меди [2], что для цепочек атомов приводит к их антиферромагнитному упорядочению за счёт сверхобменного взаимодействия через атом азота и усилению магнитной анизотропии.

В то время как в теоретических исследованиях и при интерпретации экспериментальных результатов учитывают, как правило, лишь обменное взаимодействие, магнитную анизотропию и взаимодействие с внешним магнитным полем, более общим является эффективный гамильтониан, включающий антисимметричное обменное взаимодействие Дзялошинского-Мория (ДМ) [3]. В этой связи целью настоящей работы было определение влияния этого взаимодействия на характеристики переключения намагниченности в цепочках из двух атомов (димерах) 3d-металлов (железа и кобальта) во внешнем магнитном поле, в частности на поле и время переключения.

Методы исследования

Структуры атомных димеров кобальта и железа на поверхности $\text{Cu}_2\text{N}/\text{Cu}(001)$ (см. Рис. 1) и параметры обменного взаимодействия, магнитной анизотропии и взаимодействия Дзялошинского-Мория определялись из расчётов с коллинеарным и неколлинеарным магнетизмом методом функционала плотности, реализованным в программном пакете VASP [4], при этом сравнение с экспериментальными значениями параметров [5, 6] даёт удовлетворительное согласие. Производилось несколько серий расчётов при наложении постоянного внешнего поля разной величины, что приводило к изменению структуры и параметров. Моделирование перемагничивания димеров в магнитном поле осуществлялось в рамках уравнения Ландау-Лифшица-Гильберта:

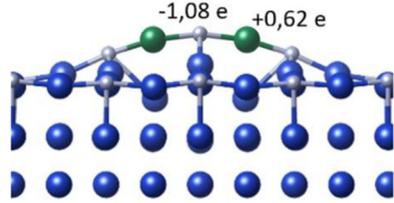


Рис. 1. Структура димера кобальта на поверхности $\text{Cu}_2\text{N}/\text{Cu}(001)$: зелёным обозначены атомы кобальта, серым – атомы азота, синим – атомы меди. Указаны заряды атомов кобальта и азота

$$\frac{\partial \mathbf{S}_i}{\partial t} = -\gamma \mathbf{S}_i \times \mathbf{H}_{\text{eff}}^i + \alpha \mathbf{S}_i \times \frac{\partial \mathbf{S}_i}{\partial t},$$

где \mathbf{S}_i – спин i -го атома, $\mathbf{H}_{\text{eff}}^i$ – эффективное магнитное поле, действующее на i -й атом:

$$\mathbf{H}_{\text{eff}}^i = \mathbf{H} + \frac{J}{\mu_s} (\mathbf{S}_{i+1} + \mathbf{S}_{i-1}) + \frac{2K_2}{\mu_s} (S_{ix} \mathbf{e}_x - S_{iy} \mathbf{e}_y) + \frac{2K_1}{\mu_s} S_{iz} \mathbf{e}_z - \frac{\mathbf{D}_{12}}{\mu_s} \times (\mathbf{S}_{i-1} - \mathbf{S}_{i+1}),$$

где \mathbf{H} – внешнее магнитное поле, J – обменный параметр, K_1 и K_2 – параметры магнитной анизотропии, \mathbf{D}_{12} – параметр ДМ, μ_s – магнитный момент атома, γ – гиромагнитное отношение, α – параметр затухания (в данной работе равен 0,1).

Выводы

Расчёты показали, что учёт взаимодействия Дзялошинского-Мория приводит к заметному изменению динамики спинов атомов в магнитном поле, следствием чего является понижение величины переключающего магнитного поля. Рассчитана зависимость поля

переключения от отношения обменного параметра к параметру ДМ. Так, например, для димера железа в случае слабого обменного взаимодействия без учёта вклада ДМ поле переключения $H_{sw} = 5,9$ Тл и время переключения $t_{sw} \approx 7$ пс, в то время как с его учётом $H_{sw} = 1,2$ Тл и $t_{sw} \approx 12$ пс.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

[1] Loth, S., Baumann, S., Lutz, C.P., Eigler, D.M., & Heinrich, A.J. (2012). Bistability in atomic-scale antiferromagnets. *Science*, 335(6065), 196–199.

[2] Hirjibehedin, C.F., Lin, C.Y., Otte, A.F., Ternes, M., Lutz, C.P., Jones, B.A., & Heinrich, A.J. (2007). Large magnetic anisotropy of a single atomic spin embedded in a surface molecular network. *Science*, 317(5842), 1199–1203.

[3] Choi, D.J., Lorente, N., Wiebe, J., Von Bergmann, K., Otte, A.F., & Heinrich, A.J. (2019). Colloquium: Atomic spin chains on surfaces. *Reviews of Modern Physics*, 91(4), 041001.

[4] Kresse, G., & Furthmüller, J. (1996). Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Physical review B*, 54(16), 11169.

[5] Bryant, B., Spinelli, A., Wagenaar, J.J.T., Gerrits, M., & Otte, A.F. (2013). Local control of single atom magnetocrystalline anisotropy. *Physical review letters*, 111(12), 127203.

[6] Spinelli, A., Gerrits, M., Toskovic, R., Bryant, B., Ternes, M., & Otte, A.F. (2015). Exploring the phase diagram of the two-impurity Kondo problem. *Nature communications*, 6(1), 10046.

EFFECT OF DZYALOSHINSKY-MORIYA INTERACTION ON MAGNETIC DYNAMICS OF ATOMIC DIMERS ON A $\text{Cu}_2\text{N}/\text{Cu}(001)$ SURFACE

I.A. Loktionov, D.I. Bazhanov

Abstract. The work focuses on chains of ferromagnetic metal atoms on the $\text{Cu}_2\text{N}/\text{Cu}(001)$ surface: their deformations are analyzed and their magnetization switching (spin-flip) in a magnetic field is simulated using the Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) equation. The influence of anisotropic exchange interaction (Dzyaloshinsky-Moriya interaction) on the field and magnetization switching time is studied.

Keywords: atomic chains, spin dynamics, Landau-Lifshitz-Gilbert equation, Dzyaloshinsky-Moriya interaction.

РАСЧЁТ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ФОНОНОВ В ГРАФЕНЕ С УЧЁТОМ АНИЗОТРОПИИ АТОМАРНОЙ РЕШЁТКИ

Лю Шисян,

аспирант,

sxliu98@gmail.com

Хвесюк Владимир Иванович,

д.т.н., профессор,

khvesyuk@bmstu.ru

МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва

Аннотация. В работе впервые сформулирован метод расчёта взаимодействия фононов с учётом анизотропии атомарной решётки для графена на основе метода Монте-Карло.

Ключевые слова: взаимодействие фононов, метод Монте-Карло, анизотропия.

Введение

Метод Монте Карло имеет преимущества по сравнению с методом, использующим уравнение переноса Больцмана. Этими преимуществами является более полная информация о кинетических процессах, ведущих к переносу энергии под воздействием градиента температур. Например, доли различных фонон – фононных взаимодействий, времена жизни различных фононов и другие [1]. Однако, для полной реализации метода Монте Карло необходим учёт анизотропии атомарных решёток при решении уравнений, описывающих взаимодействия фононов друг с другом (а также и фононов с дефектами решётки и примесями).

В случае графена для этого необходимо рассчитать трёхмерные дисперсионные поверхности для соответствующих зон Бриллюэна. Форма этих поверхностей [2] учитывает влияние анизотропии атомарной решётки. Это видно на рис. 1. На нём представлены проекции сечений плоскостями, параллельными плоскости графена, дисперсионных поверхностей. Видно два семейства замкнутых кривых. Они представляют линии постоянных значений частоты (энергии) фононов. Одно семейство расположено вблизи оси дисперсионной поверхности. Это замкнутые окружности. В этой области отсутствует влияние анизотропии атомарной решётки. Имеет место однозначная связь между частотой и вели-

чиной волнового вектора фонона. Другое семейство расположено ближе к границе зоны Бриллюэна. Эти кривые не являются круглыми. Это означает, что связь частоты и волновых векторов зависит не только от величин этих векторов, но и от их направлений.

Для расчета теплопроводности требуется как матрица рассеяния, отражающая ангармонизм, так и понимание конкретной комбинации происходящих взаимодействий фононов. Процесс взаимодействия делится на N-процесс и U-процесс. В этой работе предлагается метод расчета взаимодействия фононов (N-процесс и U-процесс), который учитывает анизотропию атомной решетки графена на основе метода Монте-Карло. Этот метод будет полезен при расчете теплопроводности графена.

Метод расчёта

Для фонона с частотой ω_λ , частота взаимодействующего с ним фонона ω_{λ_1} определяется случайным числом. Согласно закону сохранения энергии, частота генерируемого фонона ω_{λ_2} определяется частотами двух фононов. Для процесса слияния: $\omega_{\lambda_2} = \omega_\lambda + \omega_{\lambda_1}$; для процесса распада: $\omega_{\lambda_2} = |\omega_\lambda - \omega_{\lambda_1}|$. На основе анизотропных дисперсионных соотношений фононов в графене, полученных путем решения собственных значений матрицы динамики во зоне Бриллюэна [2], мы можем определить изочастотные линии в \mathbf{k} -пространстве. Векторы от начала координат до любой точки этой линии являются возможными волновыми векторами на этой частоте.

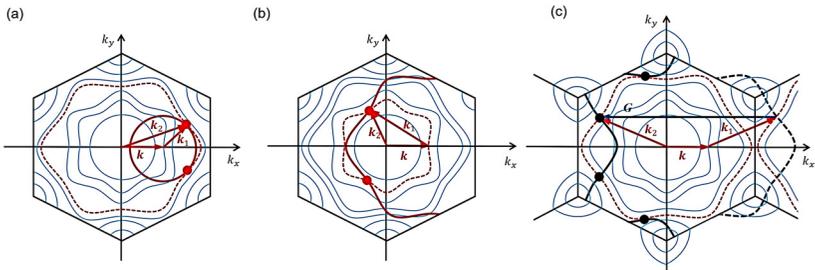


Рис. 1. Схема сохранения импульса рассеяния фононов:

(a) N-процесс при $|\mathbf{k}| + |\mathbf{k}_1| < |\mathbf{k}_2|$; (b) N-процесс при $|\mathbf{k}| + |\mathbf{k}_1| > |\mathbf{k}_2|$;

(c) U-процесс при $|\mathbf{k}| + |\mathbf{k}_1| > |\mathbf{k}_2|$. Красная точка представляет N-процесс,

черная точка — U-процесс

Во-первых, предположим, что направление \mathbf{k} является положительным направлением x , то есть \mathbf{k} можно однозначно определить по частоте ω_λ . Затем, используя точку \mathbf{k} в центре круга, рисуется изочастотная линия ω_{λ_1} и находится точка пересечения с изочастотной линией ω_{λ_2} с нулевой точкой в качестве центра. Если точка пересечения находится внутри первой зоны Бриллюэна, это N-процесс (рис. 1а и 1б). Если точка пересечения находится за пределами первой зоны Бриллюэна, это U-процесс (рис. 1с). Наконец, изменив направление \mathbf{k} , приведенный выше расчет повторяется.

На основе описанного выше метода можно определить комбинации фононных мод $\{\lambda_1\lambda_2\}$, в которых происходят N-процесс и U-процесс. Следовательно, интегрируя эти комбинации, теплопроводность графена можно рассчитать методами первых принципов.

Выводы

В работе представлен метод решения уравнений сохранения энергии и квазиимпульса при взаимодействии трёх фононов в условиях анизотропной среды на основе метода Монте-Карло. Результаты показывают, что фононную анизотропию графена нельзя игнорировать. Между N-процессом и U-процессом фононного взаимодействия имеется существенное различие: N-процесс играет важную роль в низкочастотном диапазоне, тогда как U-процесс более значим в высокочастотном диапазоне.

Список использованных источников

1. Хвесюк В.И. и др. Принципиально новые подходы к решению теплофизических задач применительно к нанoeлектронике // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2023. № 3 (26). С. 190–197.

2. Хвесюк, В.И. и др. Расчет теплоемкости двумерного графена с учетом полных дисперсионных соотношений // Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. МММЭК-2023 : Материалы V международной конференции. – Москва: ООО «МАКС Пресс», 2023. – С. 115–118.

CALCULATION OF PHONON INTERACTION IN GRAPHENE TAKING INTO ACCOUNT ANISOTROPY OF THE ATOMIC LATTICE

S. Liu, V.I. Khesyuk

Abstract. The work analyzes various phonon interaction processes using the Monte Carlo method, clearly distinguishes between the N-process and the U-process for the first time, and calculates the thermal conductivity of graphene based on first principles.

Keywords: phonon interaction, Monte Carlo method, anisotropy.

УДК 51-73: 519.245: 538.971

<https://doi.org/10.29003/m4268.MMMSEC-2024/88-91>

МОНТЕ-КАРЛО МОДЕЛИРОВАНИЕ НАЧАЛЬНЫХ ЭТАПОВ РОСТА ПЛАНАРНЫХ НАНОПРОВОЛОК GaAs С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПЛЕНОК SiO_x

Маницурова Снежана Викторовна,

аспирант¹, snezhana@isp.nsc.ru, +7 (383) 333-14-75

Шварц Наталия Львовна,

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

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

*²Новосибирский государственный технический университет,
Новосибирск, Россия*

Аннотация. В работе выполнено моделирование начальных этапов самокаталитического роста GaAs нанопроволок на подложках GaAs (111)A, покрытых пленкой SiO_x, методом Монте-Карло. Проанализировано влияние толщины оксида на смачиваемость галлиевыми каплями. Продемонстрировано влияние морфологии и свойств оксида на ориентацию GaAs нанопроволок.

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

Введение

Наноструктуры GaAs служат перспективными компонентами для создания опто- и наноустройств. Одним из механизмов роста нанопроволок (НП) GaAs является механизм пар-жидкость-кристалл (ПЖК) с использованием капель галлия. Экспериментально показано, что для самокаталитического роста НП на поверхности GaAs необходимо наличие маскирующего слоя – пленки SiO₂ [1]. На сегодняшний день существует большое количество работ, показывающих влияние покрытия SiO_x ($1 < x < 2$) на ориентацию и морфологию непланарных GaAs НП, выращенных самоката-

литическим способом как на кремниевой подложке [2], так и на GaAs [1]. Экспериментальные данные по самокаталитическому росту планарных НП GaAs, которые хорошо совместимы с планарной технологией создания интегральных схем, в настоящее время отсутствуют. Ранее были получены результаты по росту планарных НП GaAs на поверхности структурированной пленки-маски с помощью моделирования методом Монте-Карло [3]. Данная работа посвящена исследованию влияния морфологии и свойств пленок SiO_x на начальные этапы роста планарных НП GaAs по механизму ПЖК с помощью моделирования методом Монте-Карло.

Монте-Карло моделирование

Моделирование самокаталитического роста GaAs планарных нанопроволок проводилось в программном пакете SilSim3D, основанном на кинетической решеточной Монте-Карло модели [4]. При моделировании начальных этапов роста НП рассматривалась 6-компонентная система, состоящая из мышьяка в атомарном и молекулярном виде (As, As₂), галлия в твердом и жидком состоянии (Ga(s), Ga(l)), частиц слоя маски М и частиц летучего компонента М_v. Элементарные процессы модели включают в себя адсорбцию и десорбцию Ga(s) и As₂, диффузию компонентов по поверхности, распад и образование As₂, растворение Ga(s), диффузию As в жидком галлии, растворение слоя маски М каплями галлия с образованием летучего компонента М_v, диффузию М_v в капле Ga, кристаллизацию GaAs. Вероятность каждого элементарного процесса определяется экспоненциальной зависимостью от его энергии активации.

В работе проведено исследование влияния свойств пленки SiO_x на смачиваемость каплями Ga. Варьируя энергии связи, отвечающие за смачиваемость подложки каплями, были получены контактные углы 76°, 100° и 116°, соответствующие экспериментальным значениям на пленках оксида толщиной 0.6, 1.2, 1.6 нм [2]. Пленки SiO_x покрывают подложку GaAs, которая играет роль затравочного кристалла. Рост нанопроволоки начинается, когда капля протравит пленку и коснется подложки GaAs. Рассматривались два варианта роста GaAs нанопроволок: с формированием капель на поверхности SiO_x с помощью предосаждения Ga и с предварительно сформированными каплями в сквозных отверстиях в слое SiO_x. Выяснено, что в случае предосаждения Ga капли само-

стоятельно протравливают пленку, формируя ямку и смачивая поверхность SiO_x , что приводит к росту планарной нанопроволоки (рис.1 (а)). В сквозном отверстии капля может не касаться поверхности SiO_x , что приводит к росту наклонной нанопроволоки (рис. 1 (б)). Вероятность планарного роста определяется не только свойствами и морфологией пленки SiO_x , но и ростовыми условиями (температурой и скоростями осаждения Ga и As_2).

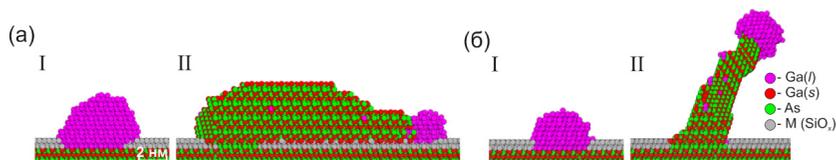


Рис. 1. Фрагменты модельных подложек при самокаталитическом росте GaAs нанопроволок со сформированной каплей в процессе предосаждения Ga (а) и с предварительно сформированной каплей в сквозном отверстии в SiO_x (б): I – сечение каплей перед ростом, II – сечение нанопроволок. $T=890$ К, $F(\text{Ga})=0.5$ МС/с, $F(\text{As}_2)=5$ МС/с

Выводы

С помощью Монте-Карло моделирования проанализировано влияние свойств и начальной морфологии пленки SiO_x и условий осаждения Ga и As_2 на направления роста GaAs нанопроволок на подложке $\text{SiO}_x/\text{GaAs}(111)\text{A}$. Показано, что предосаждение галлиевых капель и хорошая смачиваемость поверхности SiO_x жидким галлием способствует росту планарных НП.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (проект № FWGW-2022-0008).

Список использованных источников

1. Fontcuberta i Morral A. et al. Nucleation mechanism of gallium-assisted molecular beam epitaxy growth of gallium arsenide nanowires // Appl. Phys. Lett., 2008. Vol. 92, p. 063112.
2. Matteini F. et al. Wetting of Ga on SiO_x and Its Impact on GaAs Nanowire Growth // Cryst. Growth Des., 2015. Vol. 15, pp. 3105-3109.
3. Spirina A. et al. Initial Stages of Planar GaAs Nanowire Growth – Monte Carlo Simulation // Semiconductors, 2019. Vol. 53, pp. 2125-2128.
4. Карпов А.Н. и др. Решеточная модель Монте-Карло для изучения процессов формирования наноструктур // Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии, 2014, 15, 388.

MONTE CARLO SIMULATION OF THE INITIAL STAGES OF PLANAR GaAs NANOWIRE GROWTH ON SiO_x FILMS

S.V. Mantsurova, N.L. Shwartz

Abstract. The initial stages of self-catalyzed GaAs nanowire growth on GaAs (111)A substrates coated with SiO_x films was simulated by Monte Carlo. The effect of oxide thickness on the wettability by gallium droplets was analyzed. The influence of oxide morphology and properties on the orientation of the GaAs nanowires was demonstrated.

Keywords: GaAs, nanowires, Monte Carlo, simulation.

УДК 004.3:004.9

<https://doi.org/10.29003/m4269.MMMSEC-2024/91-94>

ТРЕХ-МАСШТАБНОСТЬ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ЯЗЫК К-СИСТЕМ: НА ПРИМЕРЕ ДАТЧИКА УФ-ИЗЛУЧЕНИЯ НА ОСНОВЕ НАНОСТЕРЖНЕЙ ИЗ ОКСИДА ЦИНКА

Матюшкин Игорь Валерьевич,

к.ф.-м.н., в.н.с.

imatyushkin@niime.ru

АО НИИМЭ, г. Москва-Зеленоград

Аннотация. Показана релевантность использования формализма К-систем в качестве инструмента реализации трех-масштабных моделей. Методические вопросы рассматриваются на примере матричной структуры на основе 1D наноматериала.

Ключевые слова: нано-структура, К-система, коннекционизм, методы моделирования.

Введение

Обычно нейронные сети и нейроморфные [1] системы рассматриваются как средство обработки данных, но не как прототип для цифрового двойника или имитационной модели нано-прибора. Хорошим, с методической точки зрения, примером такой структуры/прибора является сенсор на ультрафиолет [2], основанный на «лесе» нано-стержней, обладающем развитой поверхностью. Отдельная Технологическая операция создания нано-структуры также может моделироваться в рамках парадигмы коннекционизма [1], например, с помощью клеточного автомата. Сложные, и даже умеренно сложные (двойной электрический слой [3]

в водном растворе) объекты требуют много-масштабности [4] математической модели. Говоря о многомасштабности, имплицитно предполагают иерархию моделей. Актуальна задача свертки информации, полученной в ходе моделирования на определенном уровне. Для уровня квантовой механики и задач вычислительной химии эта избыточность показана в [5]. Поэтому цель работы методическая – связать концепты К-систем с проблемами много-масштабности.

Основные понятия формализма К-систем и их применение в задаче моделирования эффекта замороженной фотопроводимости сенсора

Сенсор представляет собой поликристаллическую пленку ZnO с электронной проводимостью, на которой выращен «лес» наностержней с кристаллографией вюрцита, облающий развитым кислородным обменом с газовой средой. Базовым модельным представлением является выделение пар «наностержень+ подстилающий микрообъем». К торцам пленки присоединены электроды, замеряющие фототок. Проводимость пленки, по нашему предположению зависит от числа кислородных вакансий и дефектов на поверхности кристаллитов. Эти величины связаны с диффузией кислорода и его вакансий, от поверхности наностержня и пленки в её микрообъем. Пул вакансий формируется на световой стадии и служит параметром элемента, как и его геометрические размеры.

Элементом К-системы является такая пара. Верхним уровнем моделирования M_S выступает динамика состояния К-системы, где фототок задается интегралом микротоков торцевых элементов. Детальное описание электронно-ионных процессов внутри элемента с помощью функций распределения по пространству для фазовых переменных есть суть среднего уровня (уровень элемента) моделирования M_{El} . Диффузионно-кинетические параметры, прежде всего характерные длительности, определяются на уровне атомистического моделирования M_{Qh} с применением вычислительной химии, методов Хартри-Фока.

Взаимодействие трех масштабов моделирования отражает (1), где К-система задана кортежем $\langle E, K, S, Q, \mathcal{A}, \mathcal{B} \rangle$ а именно слева направо: множества элементов; коннектома (тем или иным путем определяющим множество связей); множества (структурированного фазовыми переменными) потенциальных состояний

элемента; множества возможных сигналов с семантикой диффузии и дрейфа; алгоритма действия, функции искажения (по умолчанию предполагается её идемпотентность).

$$\left\{ \begin{array}{l} X \equiv G_{config} \\ X \Rightarrow (M_{Qh}^i) \Rightarrow Y \xrightarrow{Agr_1} \\ Y \supseteq P_i \end{array} \quad \begin{array}{l} X \{ \supseteq p \leftarrow P_i \} \\ M_{El} \\ Y = State_{(x,y,z)}^t \end{array} \quad \begin{array}{l} X = S(t=0) \subset State \\ \xrightarrow{Agr_2} \\ \mathcal{A} \equiv M_S \\ Y = S(t) \Rightarrow \int_E S(t) \end{array} \right\} \quad (1)$$

Литерами X, Y для каждого уровня указана входная и выходная информация для модели. Переход от модели к макромоделю (более компактной) указан через процедуру агрегирования Agr. Отношение вхождения отображено знаком принадлежности подмножества. Для атомистического уровня вход есть семейство геометрических конфигураций, а сам уровень дается россыпью моделей (индекс i), нацеленных на получение параметров P_i.

Выводы

Для большинства нано-приборов достаточно трех масштабов моделирования: системы, элемента и атомистического. Алгоритм действия элемента K-системы формализует кинетику превращений внутри элемента и перенос ионов и электронов между объемами вещества, а функция искажения – процессы диссипации на связях. Числовые характеристики алгоритма действия определяются в ходе атомистического моделирования. Таким образом, язык K-систем находится в синергии с трех-масштабностью моделирования. Интервальный подход [4] перспективен при агрегировании статистики численного моделирования на нижестоящем уровне и формировании компактной модели вышестоящего уровня.

Исследование выполнено в рамках научной программы Национального центра физики и математики, направление № 9 «Искусственный интеллект и большие данные в технических, промышленных, природных и социальных системах»

Список использованных источников

1. Матюшкин И.В., Тельминов О.А. Формально-философские вопросы коннекционизма и актуальные проблемы разработки нейроморфных систем // Электронная техника. Серия 3: Микроэлектроника. – 2022. – № 2(185). – С. 49–59 DOI: 10.7868/S2410993222020099

2. D. Roshchupkin, A. Redkin, E. Emelin, S. Sakharov. Ultraviolet radiation sensor based on zno nanorods/La₃Ga₅SiO₁₄ microbalance // Sensors. – 2021. – Vol. 21, No. 12. – DOI 10.3390/s21124170.

3. M. Becker, Ph. Loche, M. Rezaei, et al. Multiscale Modeling of Aqueous Electric Double Layers // Chemical Reviews. – 2024. – Vol. 124, No. 1. – P. 1–26. – DOI 10.1021/acs.chemrev.3c00307.

4. A.Y. Morozov, K.K. Abgaryan, D.L. Reviznikov. Interval Model of a Memristor Crossbar Network // Physica Status Solidi (B): Basic Solid State Physics. – 2022. – Vol. 259, No. 11. – P. 2200150. – DOI 10.1002/pssb.202200150. – EDN QHFYCU.

5. 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. – DOI 10.7868/S2410993223030016.

THREE-SCALE MODELING AND THE TERMS OF C-SYSTEMS: THE EXAMPLE OF A UV RADIATION SENSOR BASED ON ZINC OXIDE NANORODS

I.V. Matyushkin

Abstract. The relevance of using the C-systems formalism as a tool for implementing three-scale models is shown. Methodological issues are considered on the example of a matrix structure based on a 1D-nanomaterial.

Keywords: nanostructure, C-system, connectionism, methods of modeling.

УДК 548.55

<https://doi.org/10.29003/m4270.MMMSEC-2024/94-97>

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГАЗОДИНАМИКИ И ПЕРЕНОСА ПРИМЕСЕЙ ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ МОНОКРИСТАЛЛОВ КРЕМНИЯ НА УСТАНОВКЕ РЕДМЕТ-90М

Везуб Наталия Анатольевна,
к.ф.-м.н., старший научный сотрудник¹,
verezub@ipmnet.ru

Простомолотов Анатолий Иванович,
д.т.н., доцент, ведущий научный сотрудник¹,
aprosto@inbox.ru

¹ИПМех РАН, г. Москва

Аннотация. Представлены результаты математического моделирования газодинамики аргона в разреженной атмосфере ростовой камеры установки РЕДМЕТ-90М для выращивания монокристаллов кремния методом Чохральского. Анализируется влияние расположения тепловых экранов на структуру течения газа при его впуске через верхнее центральное отверстие камеры и выпуске через центральное отверстие на дне.

С учетом течения газа рассчитывается перенос монооксида кремния, испаряющейся с поверхности расплава, и монооксида углерода, образующейся в результате окисления нагревателя.

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

Введение

Монокристаллы кремния выращивают методом Чохральского при пониженном давлении в атмосфере инертного газа (аргона), чтобы избежать или снизить до минимума влияние сопутствующих химических реакций на технологический процесс. Важная реакция протекает в расплаве кремния при растворении кварцевого тигля с образованием монооксида кремния. Концентрация монооксида кремния над поверхностью расплава влияет на её испарение из расплава, тем самым определяя содержание кислорода в выращиваемом монокристалле. Кроме этого, при высоких температурах происходит нежелательное выгорание нагревателя с образованием монооксида углерода. Поэтому исследование газодинамики в ростовой камере является актуальным. В данной работе оно выполнено для отечественной большегрузной установки РЕДМЕТ-90М, предназначенной для выращивания монокристаллов кремния диаметром 200 мм методом Чохральского.

Математическая модель и результаты расчетов

Математическое моделирование процессов теплопереноса для процесса Чохральского осуществлялось на основе программного комплекса *Crystmo/Marc* [1] и состояло из 2-х этапов. На первом этапе рассчитывался сопряженный теплообмен в системе кристалл-расплав и в твердых частях ростовой камеры. На втором этапе программный комплекс *Crystmo/Marc* был дополнен модулями для решения системы нестационарных уравнений, описывающих течение и теплообмен на основе модели идеального газа. Ввиду 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. Расчетная модель для установки РЕДМЕТ-90М приведена на рис. 1а.

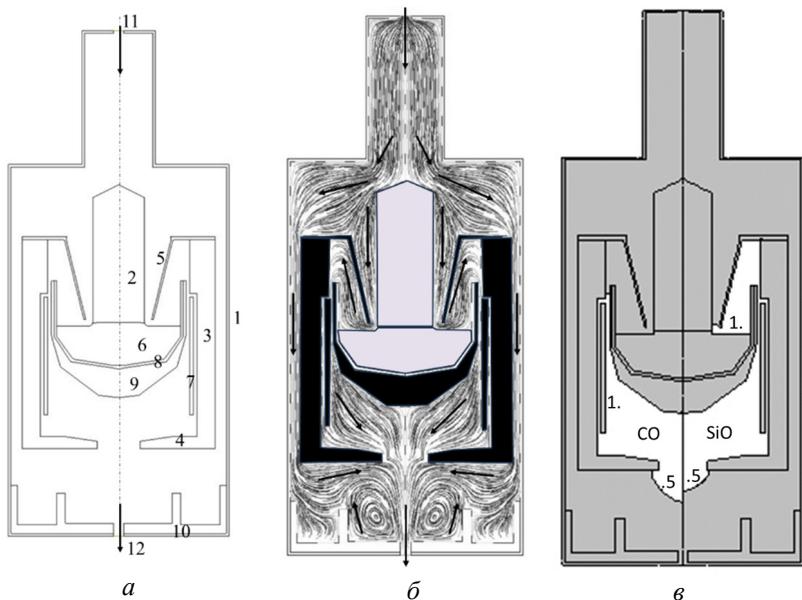


Рис. 1. Установка РЕДМЕТ-90М:

(а) схема установки: 1 – корпус, 2 – кристалл, 3 – боковой экран, 4 – нижний экран, 5 – околористальный экран, 6 – расплав, 7 – нагреватель, 8 – тигель, 9 – графитовая подставка, 10 – нижний графитовый экран, 11 – отверстие для впуска и 12 – отверстие для выпуска газа; (б) течение аргона (стрелки – направление); (в) незакрашенные области соответствуют изменению концентрации монооксида углерода CO (слева от оси) и монооксида кремния SiO (справа от оси), числа показывают концентрации, нормированные на их максимальные значения

В ростовой камере основное втекание газа через небольшое центральное отверстие радиусом 2 см (рис. 1б) происходит в виде приосевой струи со большой скоростью $V_{in} = 100$ см/с. Струя газа на конусной части растущего кристалла разделяется: часть потока меняет направление от вертикального (сверху вниз) на наклонное, определяемое углом конуса кристалла, а другая часть продолжает движение вниз вдоль боковой поверхности кристалла и обтекает околористальный экран. Оба потока сливаются в нижней части камеры и улетучиваются через донной отверстие. Такое течение оказывает определяющее влияние на перенос образующихся в процессе примесей (рис. 1в). Благодаря обтеканию частью потока газа поверхности расплава происходит его насыщение испаряющейся моноокисью кремния SiO до значения 1.0 и её перенос

вниз в соответствии с направлением течения газа. Однако в нижней части камеры этот поток сливается с другим потоком, ненасыщенным примесью SiO, поэтому её концентрация снижается до величины 0.5. Аналогичное изменение происходит с концентрацией монооксида углерода, источником которого является процесс окисления нагревателя, на котором концентрация достигает максимального значения 1.0 и соответственно падает до величины 0.5 при сливании течения газа с другим потоком, ненасыщенным примесью CO.

Работа выполнена по теме государственного задания (№ госрегистрации 124013000674-0).

Список использованных источников

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

MATHEMATICAL MODELING OF GAS DYNAMICS AND IMPURITY TRANSPORT DURING SILICON SINGLE CRYSTAL GROWTH BY REDMET-90M

N.A. Verezub, A.I. Prostromolotov

Abstract. This article presents mathematical modeling of argon gas dynamics in rarefied atmosphere of REDMET-90M hot zone for Czochralski silicon single crystal growth. The influence of heat shield locations on gas flow structure is analyzed at its inlet through upper central hole and outlet through central bottom hole. Taking into account of this gas flow, the transfer of silicon monoxide evaporating from a melt and carbon monoxide formed by heater oxidation are calculated.

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

ПОЛУЧЕНИЕ АНАЛИТИЧЕСКОЙ ФУНКЦИИ ПОТЕНЦИАЛА МЕЖАТОМНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕТОДАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Свирин Денис Витальевич¹,

магистр,

v.s.denis@yandex.ru

Бажанов Дмитрий Игоревич^{1,2},

к.ф.-м.н., доцент,

dima@kintech.ru

¹МГУ имени М.В. Ломоносова, г. Москва

²ФИЦ ИУ РАН, г. Москва

Аннотация. В данной работе исследуется возможность применения символьной регрессии 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 МТР (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 моде-

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

Один из интересных подходов машинного обучения позволяющий получить интерпретируемый результат – символьная регрессия [5], который также можно применить и для получения межатомного потенциала.

Символьная регрессия

Данный алгоритм позволяет получить аналитическую формулу, описывающую искомые данные (тренировочные). Его работа основывается на генетическом программировании. Данный алгоритм работает итерационно. На каждой итерации создается набор функций, которые представляются в виде деревьев (рис 1). Далее идет преобразование данных функций (мутация и скрещивание (рис. 1)) и получение новых, после этого отбираются N функций, которые наиболее точно описывают тренировочные данные.

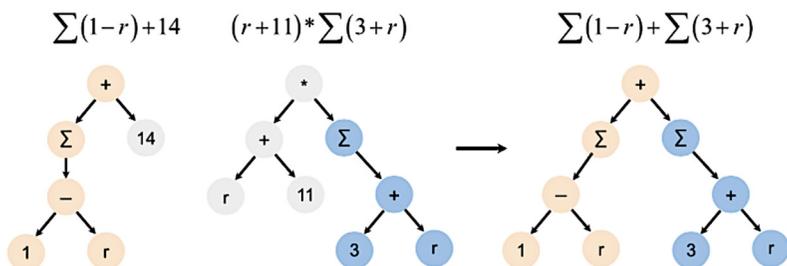


Рис. 1. Пример функций и их возможного преобразования (скрещивание)

В данной работе регрессия будет искать функции вида:

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

где E_i – полная энергия атома i ; E^b, E^r – функции энергии притяжения и отталкивания для потенциала RGL[6]; $g(r), f(r)$ – дополнительные функции, r_{ij} – расстояние между атомами i и j .

Данная форма была основана на полуэмпирическом потенциале RGL [6]. Так как RGL сам по себе способен описывать различные кристаллические системы на основе 3d-5d металлов, то его модификация с помощью функций $f(r)$ и $g(r)$ поможет сократить сложность модели и задаст вектор развития функций. Более того, использование модификации позволит ускорить время обучения. В роли параметра также выступает и степень α . Отклонение от традиционного $\alpha = 0.5$, которое было получено с помощью теории сильной связи, связано экспериментально обнаруженным плато на которое выходит модель при данном α . Задание α как свободного параметра не несет серьезной вычислительной нагрузки, так как подобрать оптимальную константу гораздо проще, чем целую функцию.

Так как RGL адаптирован для описания объемных свойств системы, он не показывает хорошего качества на низкоразмерных системах (адатом, димер на поверхности, ...)[7]. Поэтому в качестве тренировочной базы были выбраны следующие системы: гранцентрированная кубическая решётка (ГЦК, FCC) Cu и адатом Cu на поверхности $Cu(001)$. Для формирования тренировочной базы, с помощью теории функционала плотности и программы VASP, были получены группы значений (r, E) (Рис. 2) для данных двух структур.

Выводы

В работе удалось получить аналитическую форму межатомного потенциала способного описывать как объемную, так и низкоразмерную систему:

$$E_i = \sum_j E^r(r_{ij}) \cdot (1.31r_{ij})^{1.88-r_{ij}} - (\sum_j E^b(r_{ij}) \cdot (r_{ij})^{4.05-r_{ij}} - 0.33^{r_{ij}}(4.05 - r_{ij})^2)^{0.25}.$$

Данная модификация помогла не только существенно улучшить качество модели при работе с адатомом, но и повысить точность для ГЦК структуры (рис. 2). Внедрение α в роли свободного параметра помогло преодолеть плато, на которое выходила символьная регрессия при $\alpha = 0.5$. Успешный подгон модели под данные для различных систем показывает потенциальные возможности применения символьной регрессии для получения широко обобщаемого потенциала.

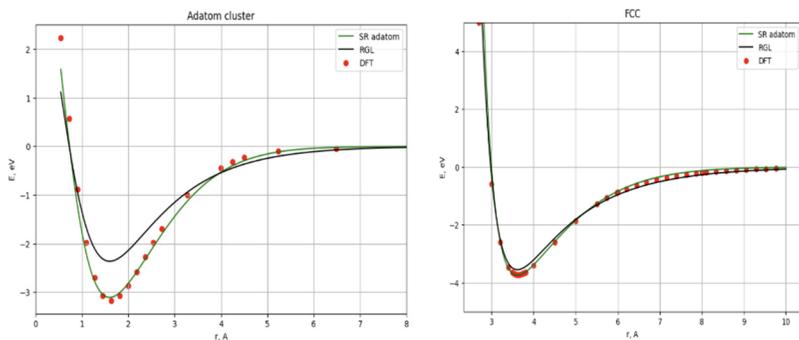


Рис. 2. Потенциал RGL и результат его модификации

Список использованных источников

1. A. Shapeev. Moment tensor potentials: A class of systematically improvable interatomic potentials // *Multiscale Model. Simul.* 14(3), 1153–1173 (2016).
2. K.T. Schütt, et al. SchNet—A deep learning architecture for molecules and materials // *J. Chem. Phys.* 148(24), 241722 (2018).
3. J. Behler et al. Generalized Neural-Network Representation of High-Dimensional Potential-Energy Surfaces // *Phys. Rev. Lett.* 98, 146401 (2007).
4. Albert P. Bartók et al. Gaussian approximation potentials: A brief tutorial introduction // *Machine Learning and Quantum Mechanics*, 2015, Vol. 15, no. 16, pp. 1051–1057.
5. T. Mueller et al. Fast, accurate, and transferable many-body interatomic potentials by symbolic regression // *npj Computational Materials*, 5, 2019.
6. V. Rosato et al. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // *PHYSICAL REVIEW B*, v 48, 1, 1993.
7. N.A. Levanov et al. Energetics of Co adatoms on the Cu(001) surface // *PHYSICAL REVIEW B*, 2000, v61, 3, pp. 2230–2234.

GENERATING ANALYTICAL FUNCTION FOR INTERATOMIC POTENTIAL USING MACHINE LEARNING APPROACH

D.V. Svirin, D.I. Bazhanov

Abstract. In this work, symbolic regression is used to generate interatomic potential in analytical form.

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

РАЗРАБОТКА МОДЕЛИ ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ АМПЛИТУДЫ НЕРОВНОСТИ КРАЯ ЛИНИИ В ПРОЦЕССЕ ДВОЙНОЙ ЛИТОГРАФИИ

Тихонова Елена Дмитриевна,

*аспирант¹, научный сотрудник²,
etikhonova@niime.ru, +7 (910) 447-02-96*

Горнев Евгений Сергеевич,

*член-корреспондент РАН, д.т.н, профессор¹,
начальник управления РПТН²,
egornev@niime.ru, +7 (903) 969-60-97*

¹МФТИ (НИУ), г. Долгопрудный

²АО «НИИМЭ», г. Москва

Аннотация. В настоящей работе мы проанализировали степень влияния различных параметров на неровность края линии для процесса двойной литографии и исследовали зависимость температуры постэкспозиционной обработки (ПЭО – Post exposure baking, PEВ) от критических размеров (КР) линий и от амплитуды неровности края линии (АНКЛ – Line edge roughness, LER).

Ключевые слова: фотолитография; разрешающая способность; множественная литография; двойная литография; двойное экспонирование; моделирование, амплитуда неровности края линии; ошибка смещения положения края.

Введение

При производстве высокотехнологичных микроэлектронных устройств разрешающая способность литографического процесса [1] становится ключевым показателем, ограничивающим точность воспроизведения топологической структуры на пластине. Улучшение разрешения требует внедрения передовых методик, таких как множественная литография (МЛ – Multiple patterning, MP) [2].

Данный метод позволяет в два и более раз улучшить разрешающую способность литографического процесса за счёт разбиения топологии фотошаблона на две и более составляющих. Однако использование двух фотошаблонов приводит к увеличению значения ошибки совмещения [2] и к усложнению процесса, из-за чего актуальным становится использование метода двойного экспонирования [3].

Данный подход потенциально ухудшает амплитуду неровности края линии (АНКЛ – Line edge roughness, LER) [3], что в свою очередь ведёт к увеличению значения ошибки смещения положения края (ОСПК – Edge placement error, EPE). В связи с этим анализ ключевых параметров, влияющих на ОСПК, таких как диффузионная длина фотокислоты, концентрация гасителя и постэкспозиционная обработка (ПЭО – Post exposure baking, PEB), в процессе двойного экспонирования становится ключевой задачей.

Исследование и разработка модели для оптимизации АНКЛ

В работе используется химически усиленная модель фоторезиста с высоким контрастом и разрешением. Структура стека включает нижнее антиотражающее покрытие (НАОП, Bottom antireflective coating – BARC), за которым следует слой SiON. Расчеты моделирования проводились по изменениям АНКЛ, профиля и КР линий после проявления фоторезиста. В качестве исследуемого параметра, влияющего на АНКЛ, был выбран параметр температуры ПЭО.

Этап ПЭО необходим для активации фотогенератора кислоты (ФГК, photoacid generator, PAG) и катализации реакции снятия защиты с полимерных цепей фоторезиста. Скорость снятия защиты сильно зависит от температуры ПЭО: более высокие температуры ускоряют реакцию [4]. Во время протекания реакции изменяется химическая структура полимера, что в конечном итоге приводит к повышению его растворимости.

Помимо этого, температура ПЭО также влияет на диффузионную длину фотокислоты в фоторезисте. Более высокие температуры увеличивают подвижность молекул фотокислоты, что приводит к большей длине диффузии [4].

Рассмотрим степень влияния температуры ПЭО на характеристики значений АНКЛ и КР. Для облегчения сравнения нормируем выходные данные. Как показано на рис. 1, при повышении температуры с 70°C до 90°C нормированные значения АНКЛ остаются равными 1, что указывает на то, что данный диапазон температур не достаточен для изменения значений неровности края. Дальнейшее повышение температуры до 110°C и 130°C соответственно приводит к значительному снижению нормированной АНКЛ до 0,89 и 0,64 соответственно.

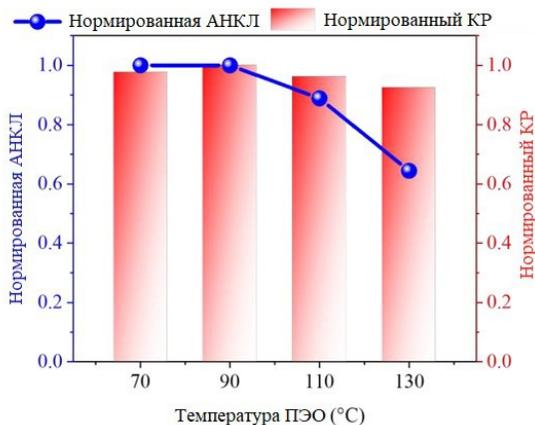


Рис. 1. Зависимость нормированных АНКЛ и КР при изменении температуры ПЭО

В этом же диапазоне температур значения нормированного КР изменяются в более сниженном темпе. Это явление объясняется тем, что высокая температура ПЭО вызывает реакцию снятия защиты фоторезиста в неэкспонированной области. После этапа проявления эта часть фоторезиста удаляется, что впоследствии и приводит к изменениям КР и профиля фоторезиста. Таким образом, в нашем исследовании оптимально работать именно в диапазоне от 110°C до 130°C.

Исходя из полученных данных, увеличивая температуру ПЭО, можно улучшить неравномерность скорости снятия защиты. Однако в слишком высоком диапазоне температур появляется риск размывания краёв рисунка, что влечёт за собой увеличение значения АНКЛ. Таким образом, для достижения минимальной АНКЛ, желаемого КР и профиля, а также контролируемой кинетики реакции, температура ПЭО должна быть тщательно оптимизирована и откалибрована под определённый тип фоторезиста в соответствии с требованиями к фотолитографическому процессу.

Выводы

По итогам проделанной работы выяснили, что повышение температуры ПЭО способствует более усиленной активации фотокислоты, что приводит к химическим реакциям, необходимым для формирования массива заданных структур, а также помогает снижению АНКЛ.

Список использованных источников

1. Красников Г.Я. Возможности микроэлектронных технологий с топологическими размерами менее 5 нм // Наноиндустрия. 2020. Т. 13. № S5-1(102). С. 13–19.
2. Тихонова Е.Д. Моделирование профиля фоторезиста в процессе самосовмещенного двойного паттернирования с учетом коррекции проблемы горячих точек / Е.Д. Тихонова // Наноиндустрия. – 2021. – Т. 14, № S7(107). – С. 786–787.
3. Тихонова Е.Д. Контроль однородности критических размеров линий металлизации, полученных методом двойного паттернирования / Е.Д. Тихонова // Кремний-2024: Тезисы докладов XV Конференции по актуальным проблемам физики, материаловедения, технологии и диагностики кремния, нанометровых структур и приборов на его основе, Иркутск, 15–20 июля 2024 года. – Иркутск: Институт географии им. В.Б. Сочавы СО РАН, 2024. – С. 90.
4. Gogolides E. A review of line edge roughness and surface nanotexture resulting from patterning processes / E. Gogolides, V. Constantoudis, G. P. Patsis, A. Tserepi // Microelectronic Engineering. – 2006. – Vol. 83, No. 4-9 SPEC. ISS.. – P. 1067–1072.

THE MODEL DEVELOPMENT FOR OPTIMIZING THE LINE EDGE ROUGHNESS IN DOUBLE PATTERNING PROCESS

E.D. Tikhonova, Y.S. Gornev

Abstract. In this paper, we analyzed the influence of various parameters on the line edge roughness (LER) for double patterning process and investigated the dependence of the post exposure baking (PEB) temperature on the critical dimension (CD) of lines and on the LER.

Keywords: photolithography; resolution; multiple patterning; double patterning; double exposure; simulation; line edge roughness; edge placement error.

<https://doi.org/10.29003/m4273.MMMSEC-2024/105-108>

ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ ПРОЦЕССА СЕГРЕГАЦИИ ПРИМЕСЕЙ НИКЕЛЯ В СТРУКТУРЕ LSNT ПЕРОВСКИТА

*Фаттахов Азат Фарвазович,
студент¹, fattahovazat@yandex.ru
Бажанов Дмитрий Игоревич,
к.ф.-м.н., доцент^{1,2},
dima@kintechlab.com*

¹МГУ имени М.В. Ломоносова, г. Москва

²ФИЦ ИУ РАН, г. Москва

Аннотация. В работе проведено исследование процесса сегрегации примесей никеля вблизи границ дефектов структуры перовскита $La_{0.2}Sr_{0.7}Ni_{0.1}Ti_{0.9}O_{2.9}$ (LSNT) методом первопринципной молекулярной

динамики. Процессы сегрегации и кластеризации рассматриваются вблизи TiO-терминированной поверхности (001), TiO-терминированной антифазной границы и ядра дислокации в соответствии с данными сканирующей электронной микроскопии. В результате расчетов обнаружена тенденция к сегрегации и кластеризации примесей никеля на границах структурных дефектов. Полученные результаты находятся в согласии с экспериментальными наблюдениями.

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

Введение

В настоящее время наблюдается большой интерес к соединениям со структурой перовскита. В частности, они используются для изготовления компонентов твердооксидных топливных элементов из-за своих электропроводных свойств. В данной работе исследуется соединение на основе титаната стронция $La_{0.2}Sr_{0.7}Ni_{0.1}Ti_{0.9}O_{2.9}$ (LSNT), в котором наблюдается сегрегация частиц никеля из кристаллического массива к поверхности электрода и формирование каталитических кластеров [1]. Благодаря этому возрастает интенсивность химических реакций окисления в топливном элементе. Предполагается, что процесс сегрегации обусловлен наличием структурных дефектов перовскита (кислородные вакансии, антифазные границы и дислокации), которые приводят к активной кластеризации примесных атомов никеля вблизи границ дефектов структуры. Рассматриваемые модели антифазной границы и дислокационного ядра основаны на экспериментальных данных электронной микроскопии (STEM) [2]. Целью работы является исследование сегрегации примесей никеля вблизи структурных дефектов в соединении LSNT.

Расчет энергий сегрегации

Для исследования процесса сегрегации в направлении TiO-терминированной поверхности (001), TiO-терминированной антифазной границы и к дислокационному ядру проводятся расчеты полной энергии моделируемых систем. Затем рассчитывается энергия сегрегации, которая определяется как:

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

где E_{Defect} – полная энергия системы с примесным атомом на границе дефекта, E_{Bulk} – полная энергия системы с примесным атомом в кристаллическом объеме. Отрицательное значение энергии

сегрегации свидетельствует о наличии тенденции к сегрегации. Расчет энергии системы в рамках теории функционала плотности проводится путем решения уравнений Кона–Шэма по формуле:

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

где ε_i – действительные собственные значения гамильтониана Кона–Шэма, $v_{xc}(r)$ – функциональная производная, E_{xc} – обменно-корреляционная энергия. Для расчетов полной энергии систем использовался программный пакет VASP [3]. В результате проведенных расчетов полной энергии при различных конфигурациях примесей никеля в структуре LSNT было установлено, что энергетически выгоден процесс сегрегации примесных атомов к поверхности, противофазной границе и ядру дислокации. Дополнительные расчеты с двумя примесными атомами никеля показывают, что также выгодна димеризация примесных атомов на границах дефектов, что свидетельствует о наличии тенденции к началу кластеризации атомов никеля. Кроме того, в ходе расчетов было установлено, что процесс сегрегации примесей связан с перераспределением зарядов атомов вблизи дефектов структуры.

Выводы

В результате проведенных расчетов была обнаружена тенденция к сегрегации и кластеризации примесей никеля на границах дефектов материала LSNT. Полученные результаты находятся в согласии с данными экспериментальных наблюдений.

Список использованных источников

1. Kim K.J. et al. Facet-dependent in situ growth of nanoparticles in epitaxial thin films: the role of interfacial energy // J. Am. Chem. Soc. 141, 7509–7517, 2019.
2. Han H. et al., Anti-phase boundary accelerated exsolution of nanoparticles in non-stoichiometric perovskite thin films // Nat. Commun. V. 13, P. 6682, 2022.
3. Kresse G. et al., Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // Phys. Rev. B 54, 11169–11186, 1996.

FIRST-PRINCIPLES STUDY OF THE PROCESS OF SEGREGATION OF NICKEL IMPURITIES IN THE STRUCTURE OF LSNT PEROVSKITE

A.F. Fattakhov, D.I. Bazhanov

Abstract. The paper investigates the segregation of nickel impurities near the boundaries of defects in the structure of perovskite $La_{0.2}Sr_{0.7}Ni_{0.1}Ti_{0.9}O_{2.9}$ (LSNT) by the method of ab initio molecular dynamics. The processes of segregation and clustering are considered near the TiO-terminated surface (001), the TiO-terminated antiphase boundary and the dislocation core in accordance with the data of scanning electron microscopy. As a result of calculations, a tendency to segregation and clustering of nickel impurities at the boundaries of structural defects was found. The results obtained are in agreement with experimental observations.

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

УДК 536.2.01, 536.21

<https://doi.org/10.29003/m4274.MMMSEC-2024/108-111>

РАСЧЕТ ФОНОННЫХ КОЛЕБАНИЙ В КРЕМНИЕВЫХ НАНОПЛЕНКАХ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА ДИНАМИКИ РЕШЕТКИ

Чжан Гэ,

магистр,

SChiou@126.com

Лю Шисян,

аспирант,

sxliu98@gmail.com

Хвесьюк Владимир Иванович,

д.т.н., профессор,

khvesyuk@bmstu.ru

МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва

Аннотация. В данной работе дисперсионные кривые кремниевых нанопленок рассчитываются методом динамики решетки для изучения колебаний фононов.

Ключевые слова: кремниевые нанопленки, метод динамики решетки, дисперсионные кривые.

Введение

С развитием наноразмеров термодинамика предоставляет новые и более эффективные методы изучения уникальных физико-химических свойств наноматериалов. В практическом применении приходится учитывать проблемы граничных эффектов и эффектов размера, которые существенно изменяют термодинамическое поведение материалов, поэтому объект наших исследований постепенно переместился от объемных к изучению тонких пленок.

Первоначально мы использовали теорию упругих волн для изучения тонких пленок. Исследование заключается в изучении дисперсионных соотношений волн в однородной тонкой пластине произвольной толщины бесконечного протяжения. Однако недостатком этого подхода является то, что он требует предположения об однородности и непрерывности материала, что, как мы знаем, не всегда имеет место в реальности, и поэтому может привести к неточным результатам.

Осознав потенциальные проблемы, связанные с теорией упругих волн, мы приступили к изучению тонких пленок с помощью динамики решетки. Метод динамики решетки через матрицу силовых постоянных дает возможность понять механические свойства материалов. Преимуществом этого подхода является возможность спуститься на микроскопический уровень и проанализировать механическое поведение на атомном уровне.

Метод расчёта

Элементарная ячейка кремния содержит два атома, которые мы обозначаем буквами a и b [1]. Повторяющиеся единицы, состоящие из этих двух атомов, позволяют получать более сложные структуры путём трансляции. Атом кремния b существует только внутри куба, а атом кремния a расположен в вершине и центре грани куба. Атомы в каждой позиции $x(l')$ решетки, соответствующей центральному атому (a или b), имеют соответствующие матрицы силовых констант $\phi_{\alpha\beta}(0b; l'b')$. Мы рассматриваем только влияние ближайших и вторых ближайших атомов к центральному атому; влияние более удаленных атомов на центральный атом пренебрежимо мало.

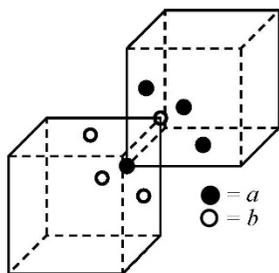


Рис 1. Расположение первого и второго ближайших атомов

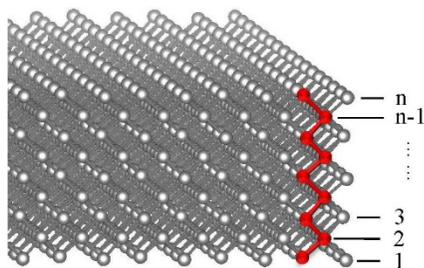


Рис 2. Расположение атомов в кремниевых пленках

Если рассматривать атомы, которые могут находиться на одной грани параллельной кремниевой пленке, как один тип атомов, то для пленки толщиной $(n-1) \cdot (a/4)$ нм существует в общей сложности n типов атомов (n – чётное число). С помощью полученной динамической матрицы нам нужно рассмотреть не более пяти из них, назвав соответствующие им силы $D_{1,1}, D_{1,2}, D_{1,3}, D_{1,n-1}, D_{1,n}$, которые являются взаимодействиями атомов классов 1, 2, 3, $n-1$ и n на атоме 1 на рис 2. Динамическая матрица имеет следующий вид:

$$D_{\alpha\beta} = \frac{1}{m} \sum_{l'} \phi_{\alpha\beta}(0\mathbf{b}; l'\mathbf{b}') \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}(l'))$$

Фононные частоты волнового вектора \mathbf{k} являются собственными значениями динамической матрицы $D(\mathbf{k})$, которая представляет собой просто преобразование Фурье межатомных силовых постоянных в реальном пространстве.

Дисперсионное соотношение получается из решения характеристического уравнения $\omega^2 A = D(\mathbf{k})A$. Универсальное выражение для динамической матрицы $D(\mathbf{k})$ имеет вид (D^* – матрица транспонирования D):

$$D(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} D_{1,1} & D_{1,2} & D_{1,3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & D_{1,n-1} & D_{1,n} \\ D_{1,2}^* & D_{1,1} & D_{1,n}^* & D_{1,n-1}^* & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & D_{1,3}^* \\ D_{1,n-1} & D_{1,n} & D_{1,1} & D_{1,2} & D_{1,3} & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & D_{1,3}^* & D_{1,2}^* & D_{1,1}^* & D_{1,n}^* & & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & D_{1,n-1} & D_{1,n} & D_{1,1} & & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & \vdots & & & \ddots & & & \vdots & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & D_{1,1}^* & D_{1,n}^* & D_{1,n-1}^* & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & D_{1,n} & D_{1,1} & D_{1,2} & D_{1,3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & D_{1,3}^* & D_{1,2}^* & D_{1,1}^* & D_{1,n}^* \\ D_{1,3} & 0 & 0 & 0 & 0 & & 0 & D_{1,n-1} & D_{1,n} & D_{1,1} \\ D_{1,n} & D_{1,n-1} & 0 & 0 & 0 & & 0 & 0 & D_{1,3}^* & D_{1,2}^* \end{bmatrix}$$

В отличие от результатов, полученных в теории упругих волн с постоянной скоростью волны, дисперсионное соотношение здесь имеет тенденцию к уплощению на границе зоны Бриллюэна. Групповая скорость фононов в пленке ниже в объемных, что видно из наклона дисперсионного соотношения.

Выводы

В данной работе предлагается метод расчета фононных колебаний кремниевых нанопленок, основанный на подходе динамики решетки. С помощью этого метода успешно рассчитаны дисперсионные кривые для нанопленок различной толщины, что углубляет понимание фононных колебательных свойств кремниевых материалов и предоставляет вычислительную основу для материалов с аналогичной кристаллической структурой. В случае очень тонких пленок, таких как моноатомные и двухатомные слои, значителен эффект квантового размера, и более точные результаты должны быть рассчитаны методом DFT (Density functional theory). Также важно учитывать влияние внеплоскостных колебательных мод, что станет темой для дальнейших исследований.

Список использованных источников

1. Herman F. Lattice vibrational spectrum of germanium // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 1959. (8). С. 405–418.

CALCULATION OF PHONON OSCILLATIONS IN SILICON NANOFILMS USING LATTICE DYNAMICS METHOD

G. Zhang, S. Liu, V.I. Khesyuk

Abstract. In this paper, dispersion curves of silicon nanofilms are calculated using the lattice dynamics method to study phonon vibrations in terms of atomic interactions.

Keywords: Silicon nanofilms, lattice dynamics method, dispersion curves.

4. D

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

РАСЧЕТ СОСТАВА РАВНОВЕСНОЙ ПАРОВОЙ ФАЗЫ ПРИ ИСПАРЕНИИ ХАЛЬКОГЕНИДОВ КАДМИЯ И ЦИНКА В ОГРАНИЧЕННЫЙ ОБЪЕМ

Стрельцов Никита Алексеевич,

студент,

streltsov.nikita@gmail.com,

Кобелева Светлана Петровна,

к.ф.-м.н., доцент,

kob@misis.ru,

Юрчук Сергей Юрьевич,

к.ф.-м.н., доцент,

yurchuk60@mail.ru

Университет МИСИС, г. Москва

Аннотация. В работе анализируются результаты расчета состава равновесной паровой фазы численным методом на базе решения уравнения электронейтральности и уравнения испарения на примере достаточно хорошо известной системы СТД в CdTe. Валидизация работы программы проведена с использованием результатов расчета испарения CdTe с составом, соответствующим конгруэнтно испаряющемуся при температуре 973 К и величиной $3,88 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ избыточного теллура. Проведены расчеты температурной зависимости такого состава для соотношения объемов паровой и твердой фазы от 2 до 40. Показано, что конгруэнтно испаряющийся состав наблюдается при 973 К, что подтверждает правильность полученных решений.

Ключевые слова: халькогениды кадмия и цинка, область гомогенности, собственные точечные дефекты, отклонение от стехиометрии.

Введение

Полупроводниковые соединения группы АІІВVI, в частности халькогениды кадмия и цинка, широко используются в различных оптоэлектронных устройствах. Для большинства из них требуется материал с высоким удельным сопротивлением и, следовательно, с минимально возможной концентрацией собственных точечных дефектов (СТД). В связи с этим стоит вопрос об определении отклонения от стехиометрии в материале, причем наиболее оптимальным как с точки зрения последующего использования для выращивания соединений из паровой фазы, так и для непосредственного использования в оптоэлектронных устройствах, является

состав, соответствующий минимальному общему давлению в паровой фазе. В [1] на примере CdTe было показано, что такие составы имеют и минимальную суммарную концентрацию дефектов и лежат внутри области гомогенности за пределами наиболее распространенных методов оценки отклонения от стехиометрии по количеству и составу материала, собранному в холодном конце измерительного устройства [2]. С другой стороны эти составы единственные, испаряющиеся конгруэнтно, т.е. измеряя состав паровой фазы к примеру по оптической плотности паров [3], можно точно идентифицировать наличие такого состава. В работе проведена валидизация программы расчета состава равновесной паровой фазы по методике, предложенной в [4] на базе модели STD в CdTe, включающей дефекты Френкеля по обеим подрешеткам и нейтральный антиструктурный дефект Te_{Cd} .

Программа расчета равновесной паровой фазы

Программа, разработанная на языке Borland Delphi 7, позволяет рассчитывать концентрацию электронов и парциальные давления паров компонент в полупроводниковых соединениях $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{VI}}$ (A – атомы кадмия или цинка; B – атомы халькогена (Te, S, Se)).

Расчеты проводили на основе решения системы уравнений электронейтральности и материального баланса [4].

Имеется система двух нелинейных уравнений с двумя неизвестными – n и P_{A} . Поскольку константы квазихимических реакций, полученные из литературных источников, отличаются у различных авторов, предусмотрена возможность загрузки системы различных данных.

Решение системы уравнений проводили с помощью метода Зейделя, для которого в качестве начального приближения использовали результаты расчетов с помощью разработанной ранее программы решения уравнения электронейтральности при заданном давлении P_{A} , где P_{A} , в свою очередь, рассчитывается с помощью константы испарения. Программа позволяет проводить расчёты как при определенной температуре, так и температурные зависимости в заданном диапазоне.

Результаты расчетов

Для валидизации программы проведены расчеты температурной зависимости состава равновесной паровой фазы для

модели дефектов, включающей дефекты Френкеля по обеим под решеткам и нейтральный антиструктурный в CdTe. Величина $\delta_0 = -3,88 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ соответствует конгруэнтно испаряющемуся составу при температуре получения материала 973 К. Расчеты проведены для отношения объемов паровой и твердой фазы от 2 до 40. Из рисунка видно, что конгруэнтно испаряющийся состав соответствует температуре испарения 973 К, с ростом α состав паровой фазы приближается к условию конгруэнтного испарения, что подтверждает правильность полученного решения.

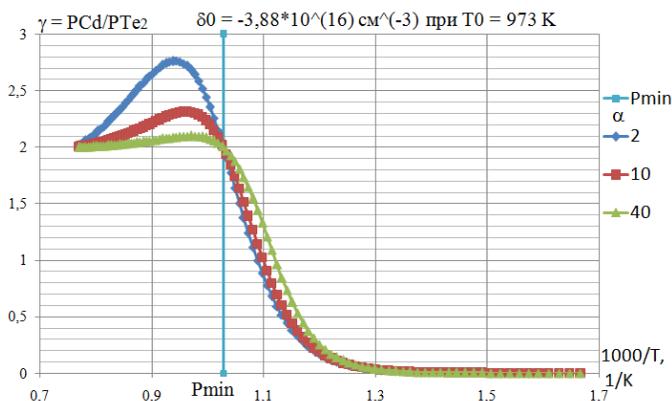


Рис. 1. Температурная зависимость состава равновесной паровой фазы

Выводы

На примере анализа испарения CdTe подтверждено, что программа решения системы уравнений, описывающих испарение материала в замкнутый объем, подтверждена правильность программы решения системы. Данную программу можно использовать для анализа величины отклонения от стехиометрии в халькогенидах кадмия и цинка.

Список использованных источников

1. Кобелева С.П., Зуев А.С., Стрельцов Н. А. Минимизация концентрации СТД в CdTe// Материалы V Международной конференции МММЭК2023, Москва, 23–25 октября 2023 г, с. 126–129.
2. Avetisov I., Mozhevitina E., Khomyakov A., Khanh T. Universal approach for nonstoichiometry determination in binary chemical compounds.// Crystall Reserch Technology, 2015, V 50(1): h): 93–100 .
3. 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

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

COMPOSITION OF THE EQUILIBRIUM VAPOR PHASE NUMERICAL CALCULATION IN THE CASE OF CADMIUM AND ZINC CHALCOGENIDES EVAPORATION IN A LIMITED VOLUME

Streltsov N.A., Kobeleva S.P., Yurchyk S.Yu.

Abstract. The results of the equilibrium vapor phase composition numerical calculations during avaporation of Cd and Zn chalcogenide are presented. The program is based on the electroneutrality and avaporation equations solution. The defects model including Frenkel defects in both sublattices and neutral antisite defect are used for calculation of CdTe composition at 973 K. The validation of the program was carried out using the results of calculating the evaporation of CdTe with a composition corresponding to congruently evaporating at a temperature of 973 K and a excess of Te in the solid state $3.88 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$.

Keywords: cadmium and zinc chalcogenides, homogeneity region, intrinsic point defects, deviation from stoichiometry.

УДК 537.9:004.94

<https://doi.org/10.29003/m4276.MMMSEC-2024/117-122>

КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АТОМНОЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ФАЗ $\text{RE}_6\text{SE}_8\text{CL}_2$

Чибисов Андрей Николаевич,

д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник¹,

andreichibisov@yandex.ru

Смотрова Дарья Михайловна,

магистрант, инженер¹,

dsmotrik@mail.ru

Анураг Сривастава,

PhD, профессор²,

¹ВЦ ДВО РАН, г.Хабаровск

²ИИИТУ, г. Гвалиор, Индия

Аннотация. Статья описывает моделирование двумерных сверхмолекулярных материалов с использованием ab initio методов. Обсуждаются результаты исследований атомной и электронной структуры

$\text{Re}_6\text{Se}_8\text{Cl}_2$ в объеме и двумерном пространстве. Анализируется разница в эффективных массах электронов и дырок между этими двумя типами материалов, что важно для транспорта в нанозлектронике.

Ключевые слова: сверхатомные 2D-материалы, атомная и электронная структура, расчеты *ab initio*, ширина запрещенной зоны, распределение атомных зарядов, эффективные массы

Введение

Проектирование 2D сверхатомных материалов образующих свою атомную структуру с помощью ковалентно связанных кластеров, с изменяющимся химическим составом, позволит получить новые материалы с перспективными электронными свойствами полезными для современной нанозлектроники. В работе представлены *ab initio* расчеты атомной и электронной структуры для объемной и 2D-мерной структуры $\text{Re}_6\text{Se}_8\text{Cl}_2$. Приведены результаты по величине запрещенной зоны, перераспределения атомных зарядов в атомных структурах. Показано различие эффективных масс для электронов и дырок для двухмерного и объемного материала $\text{Re}_6\text{Se}_8\text{Cl}_2$ и объяснено как это влияет на их транспортные свойства. Полученные результаты имеют важное значение для проектирования, синтеза и внедрения новых 2D сверхатомных материалов в современную нанозлектронику.

Сверхатомное соединение $\text{Re}_6\text{Se}_8\text{Cl}_2$ является двумерным структурным аналогом класса материалов фазы Шевреля $\text{M}_x\text{Mo}_6\text{E}_8$ (M = металл, E = S, Se, Te) [1–5]. Оно состоит из молекулярных кластеров, связанных ковалентными связями и характеризуется слоистой структурой, где кластеры $[\text{Re}_6\text{Se}_8]$ закрываются концевыми атомами хлора. Межкластерная связь в плоскости и слабые межслоевые взаимодействия допускают механическое расслоение слоев $\text{Re}_6\text{Se}_8\text{Cl}_2$ [6-8]. Объемный $\text{Re}_6\text{Se}_8\text{Cl}_2$ проявляет себя как непрямозонный полупроводник с электронной запрещенной зоной 1.58 ± 0.03 эВ, оптической запрещенной зоной 1.48 ± 0.01 эВ и большой энергией связи к экситону порядка 100 мэВ. Сильная связь электронов с межкластерными оптическими фононами приводит к возникновению сверхпроводимости. Обнаружена большая длина свободного пробега экситона порядка 1 мм, что создает предпосылки для создания баллистических экситонных транзисторов. Малая ширина полосы пропускания эксионна [9], обусловленная температурно-зависимой перенормировкой из-за оптических фононов, важна для стабильности акустических поляронов.

Переход данного материала в двумерное состояние и изменение его химического состава позволит получить еще более интересных свойств для него с возможностью создания и проектирования современных и перспективных наноэлектронных материалов на его основе. Поэтому цель нашего исследования состояла в теоретическом исследовании и детальном понимании различий атомно-электронных свойств объемного и двумерного состояний для $\text{Re}_6\text{Se}_8\text{Cl}_2$.

Методы расчетов

Исследование проводилось с использованием пакета VASP [10–12]. Применялось обобщенное градиентное приближение GGA-PBE [13] и псевдопотенциалы PAW [14,15]. Учитывалась спин-орбитальная связь. Для учета межслоевого взаимодействия использовались поправки Ван-дер-Ваальса на основе метода Гримме DFT-D3 [16]. Элементарная ячейка $\text{Re}_6\text{Se}_8\text{Cl}_2$ анализировалась с набором k-точек $9 \times 9 \times 7$. Для монослоя использовался набор k-точек размером $9 \times 9 \times 1$ с применением схемы Монкхорста–Пака [17]. Оптимизация атомной структуры выполнялась с точностью сил 0.001 эВ/Å.

Результаты расчетов

В работе был произведен расчет энергии формирования слоя, которая составила 0.65 эВ. Данное значение энергии определялось с помощью выражения:

$$E_{form} = E_{2D} - E_{bulk}$$

где E_{2D} – полная энергия 2D слоя $\text{Re}_6\text{Se}_8\text{Cl}_2$ и E_{bulk} — это полная энергия объемного материала [18]. Таким образом, видно, что полученное значение для энергии формирования двухмерного слоя $\text{Re}_6\text{Se}_8\text{Cl}_2$ гораздо больше, чем для монослоя ReSeCl равное 0.22 eV/fu [19] и монослоя ReSe_2 [20] которое составляет 0.23 eV/fu.

Ширина запрещенной зоны для объемного $\text{Re}_6\text{Se}_8\text{Cl}_2$ составляет 1.11 эВ, а для 2D слоя – 1.34 эВ. Двухмерный материал также является полупроводником с непрямой шириной запрещенной зоны. Полученные значения ширин запрещенной зоны для объемного и двухмерного $\text{Re}_6\text{Se}_8\text{Cl}_2$, хорошо согласуются с другими данными [21]. Далее проводился анализ зарядового распределения для структур $\text{Re}_6\text{Se}_8\text{Cl}_2$. Расчет зарядов на атомах производился по методу Байдера [22]. Видно, что при переходе из объемного в 2D состояние заряды на атомах рения практически не меняются.

По нашему мнению, это происходит из-за того, что на атомах Re присутствуют неспаренные электроны, которые экранированы атомами Se за счет образования стабильной связи Re-Se [8, 23].

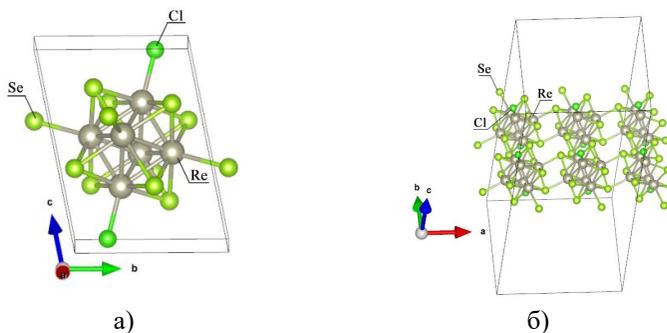


Рис. 1. а) Объемная структура $\text{Re}_6\text{Se}_8\text{Cl}_2$; б) 2D слой для $\text{Re}_6\text{Se}_8\text{Cl}_2$

Таблица 1

Заряды на атомах по методу Байдера в единицах электронов
(Приведены средние значения зарядов)

Структура	Re	Se	Cl
2D	12.404	6.325	7.489
bulk	12.405	6.318	7.512
free atom	13.000	6.000	7.000

Далее для понимания процессов переноса энергии и информации в данных материалах мы вычислили эффективную массу для электронов и дырок в плоскости слоев образованных кластерами $\text{Re}_6\text{Se}_8\text{Cl}_2$, как для объемного, так и для двухмерного материала.

Заключение

В работе были проведены квантово-механические расчеты атомной и электронной структуры для объемного и двухмерного слоя соединения $\text{Re}_6\text{Se}_8\text{Cl}_2$. Показано, что у слоя $\text{Re}_6\text{Se}_8\text{Cl}_2$ ширина запрещенной зоны увеличивается по сравнению с объемным материалом и двухмерная структура также остается полупроводником с непрямой шириной запрещенной зоны. При этом при образовании объемного и 2D материалов $\text{Re}_6\text{Se}_8\text{Cl}_2$ из химических элементов Re, Se и Cl, происходит перенос заряда с атомов Re на атомы селена и хлора. Анализ эффективных масс для электронов и дырок показывают, что для двухмерного материала $\text{Re}_6\text{Se}_8\text{Cl}_2$ характерны более повышенные транспортные свойства по электрону вдоль

направления $G \rightarrow X$, по сравнению с объемным материалом. Однако для дырок транспортные свойства понижаются в обоих направлениях $G \rightarrow X$ и $G \rightarrow Y$.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Leduc, L., Perrin, A., Sergent, M. Structure Du Dichlorure et Octaseleniure d'Hexarhenium, $Re_6Se_8Cl_2$: Compose Bidimensionnel a Clusters Octaedriques Re_6 . Acta Crystallogr., Sect. C: Cryst. Struct. Commun. 1983, 39, 1503–1506.
2. Burdett, J. K.; Lin, J. H. The Structures of Chevrel Phases. Inorg. Chem. 1982, 21 (1), 5–10.
3. Peña, O. Chevrel Phases: Past, Present and Future. Phys. C 2015, 514, 95–112.
4. E.J. Telford, J.C. Russell, J.R. Swann, B. Fowler, X. Wang, K. Lee, A. Zangiabadi, K. Watanabe, T. Taniguchi, C. Nuckolls, P. Batail, X. Zhu, J.A. Malen, C.R. Dean, X. Roy. Doping-Induced Superconductivity in the van der Waals Superatomic Crystal $Re_6Se_8Cl_2$. Nano Lett. 2020, 20, 1718–1724.
5. H. Kim, K. Lee, A.H. Dismukes, B. Choi, X. Roy, X. Zhu, M. Bonn. Charge carrier scattering and ultrafast Auger dynamics in two-dimensional superatomic semiconductors. Appl. Phys. Lett. 116, 201109 (2020).
6. Roy, X.; Lee, C.-H.; Crowther, A.C.; Schenck, C.L.; Besara, T.; Lalan-cette, R.A.; Siegrist, T.; Stephens, P.W.; Brus, L.E.; Kim, P.; Steigerwald, M.L.; Nuckolls, C. Science 2013, 341, 157–160.
7. Turkiewicz, A.; Paley, D. W.; Besara, T.; Elbaz, G.; Pinkard, A.; Siegrist, T.; Roy, X. J. Am. Chem. Soc. 2014, 136, 15873–15876.
8. Xinjue Zhong, Kihong Lee, Bonnie Choi, Daniele Meggiolaro, Fang Liu, Colin Nuckolls, Abhay Pasupathy, Filippo De Angelis, Patrick Batail, Xavier Roy, Xiaoyang Zhu. Superatomic Two-Dimensional Semiconductor. Nano Lett. 2018, 18, 1483–1488.
9. P. Shih, T.C. Berkelbacha. Theory of acoustic polarons in the two-dimensional SSH model applied to the layered superatomic semiconductor $Re_6Se_8Cl_2$. J. Chem. Phys. 160, 204705 (2024).
10. Kresse, G.; Hafner, J. Ab initio molecular dynamics for liquid metals. Phys. Rev. B 1993, 47, 558.
11. 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, 6, 15–50.
12. Kresse, G.; Furthmüller, J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. Phys. Rev. B 1996, 54, 11169.
13. Perdew, J.P.; Burke, K.; Ernzerhof, M. Generalized Gradient Approximation Made Simple. Phys. Rev. Lett. 1996, 77, 3865.
14. Blöchl, P.E. Projector augmented-wave method. Phys. Rev. B 1994, 50, 17953
15. Kresse, G.; Joubert, D. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method. Phys. Rev. B 1999, 59, 1758.
16. Grimme, S.; Ehrlich, S.; Goerigk, L. Effect of the damping function in dispersion corrected density functional theory. J. Comput. Chem. 2011, 32, 1456.
17. Monkhorst, H.J.; Pack, J.D. Special points for Brillouin-zone integrations. Phys. Rev. B 1976, 13, 5188.
18. A.V. Kuklin, S.A. Shostak, A.A. Kuzubov. Two-Dimensional Lattices of VN: Emergence of Ferromagnetism and Half-Metallicity on Nanoscale. J. Phys. Chem. Lett. 2018, 9, 1422–1428.
19. <http://www.2dmatpedia.org/>

20. N. Hasan, F. Sorgenfrei, N. Pan, D. Phuyal, M. Abdel-Hafiez, S. Kumar Pal, A. Delin, P. Thunström, D.D. Sarma, O. Eriksson, D. Karmakar. Re-Dichalcogenides: Resolving Conflicts of Their Structure–Property Relationship. *Adv. Physics Res.* 2022, 1, 220010.

21. N. Le Nagard, A. Perrin, M. Sergent and C. Levy-Clement, *Mat. Res. Bull.* 20 (1985) 835.

22. Sanville, E.; Kenny, S. D.; Smith, R.; Henkelman, G. Improved Grid-Based Algorithm for Bader Charge Allocation. *J. Comput. Chem.* 2007, 28, 899–908.

23. Q. Li, F. Liu, J.C. Russell, X. Roy, X. Zhu. Strong polaronic effect in a superatomic two-dimensional semiconductor. *J. Chem. Phys.* 152, 171101 (2020).

QUANTUM-MECHANICAL MODELING OF THE ATOMIC AND ELECTRON STRUCTURE OF $\text{Re}_6\text{Se}_8\text{Cl}_2$ PHASES

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

Abstract. The article describes the modeling of two-dimensional supermolecular materials using ab initio methods. It discusses the results of studies on the atomic and electronic structure of $\text{Re}_6\text{Se}_8\text{Cl}_2$ in bulk and two-dimensional form. It analyzes the difference in the effective masses of electrons and holes between these two types of materials, which is important for transport in nanoelectronics.

Keywords: superatomic 2D materials, atomic and electronic structure, *ab initio* calculations, band gap, atomic charges, effective masses.

УДК 620.3

<https://doi.org/10.29003/m4277.MMMSEC-2024/122-125>

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНОГО МОДИФИЦИРОВАНИЯ УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКИ ТИПА «КРЕСЛО» ОКСИДОМ КОБАЛЬТА

Эль Занин Антон Раджабович,

студент¹,

aelzanin@volsu.ru

Борознин Сергей Владимирович,

д.ф.-м.н., доцент, зав. каф. судебной экспертизы

и физического материаловедения¹,

boroznin@volsu.ru

¹*Волгоградский государственный университет, г. Волгоград*

Аннотация. В работе было проведено квантово-химическое моделирование процесса присоединения оксида кобальта Co_3O_4 к поверхности углеродной нанотрубки (УНТ) типа «кресло» в трех различных поло-

жениях адсорбции. Исследуется влияние подобного модифицирования на электронно-энергетические свойства рассматриваемой наноструктуры.

Ключевые слова: углеродные нанотрубки, оксид кобальта, адсорбция, теория функционала плотности, ширина запрещенной зоны, зарядовое распределение.

Введение

УНТ и их производные в настоящее время рассматриваются как крайне перспективная группа материалов для применения в нанoeлектронике и оптоэлектронике, в частности, для конструирования полевых транзисторов, FED-дисплеев [1], газовых сенсоров [2] и биосенсоров [3]. Высокая адсорбционная активность УНТ обуславливает широкие возможности по их модифицированию: возможно присоединение атомов, молекул, функциональных групп к поверхности, границам УНТ или их внедрение в полость структуры. Использование для модифицирования оксидов металлов позволяет управлять электрическими, оптическими и магнитными свойствами материала, а, соответственно, получать материалы с заданными характеристиками. **Целью** настоящей работы является исследование влияния на электронно-энергетические свойства УНТ поверхностного модифицирования оксидом кобальта Co_3O_4 .

Проведение модельного эксперимента

Модельный эксперимент проводился методами теории функционала плотности на уровне теории B3LYP/3-21G. УНТ характеризовалась индексами хиральности (6,6). Для компенсации оборванных химических связей границы УНТ были замкнуты псевдоатомами водорода. Приближение оксида кобальта Co_3O_4 проводилось атомом кобальта вдоль нормали к поверхности УНТ. Были выбраны три положения адсорбции: над атомом углерода, над центром связи углерод-углерод и над центром гексагона. В каждой точке фиксировались значения расстояния и энергии для дальнейшего построения профилей поверхности потенциальной энергии (ПППЭ) взаимодействия. Заряды на атомах рассчитывались по схеме Малликена. Ширина запрещенной зоны ΔE_g определялась как разность между энергией нижней вакантной молекулярной орбитали E_{LUMO} и энергией верхней заполненной молекулярной орбитали E_{HOMO} :

$$\Delta E_g = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}.$$

На основе проведенного квантово-химического моделирования были построены ПППЭ для каждого положения адсорбции (рис. 1). Анализ профилей показал, что взаимодействие между оксидом металла и УНТ становится возможным во всех рассматриваемых вариантах. Однако наиболее глубокий минимум при адсорбции над центром связи говорит о наибольшей энергетической выгоде этого положения по сравнению с остальными.

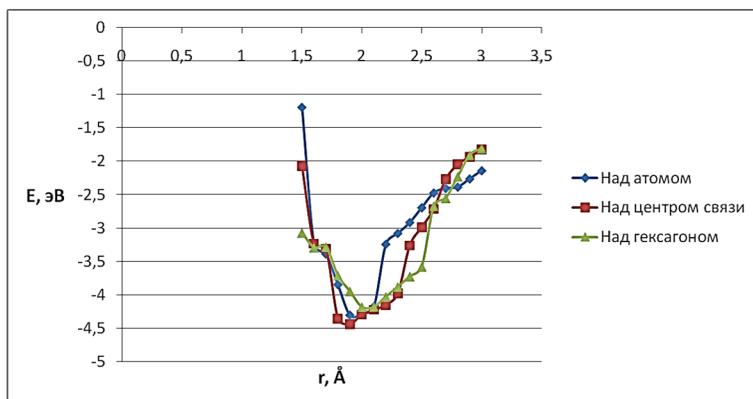


Рис. 1. ПППЭ взаимодействия УНТ и Co_3O_4 в различных положениях адсорбции

Поверхностное модифицирование УНТ оксидом кобальта во всех рассмотренных случаях приводит к уменьшению ширины запрещенной зоны. Причем наиболее сильно это выражено для положения над центром гексагона – ширина запрещенной зоны здесь снижается на 26% при использовании при расчете энергий альфа-орбиталей и 36% при использовании энергий бета-орбиталей. Анализ зарядового распределения позволил установить уменьшение заряда на атомах углерода поверхности УНТ и увеличения заряда на атоме кобальта, которым производилось присоединение. Соответственно, электронная плотность смещается с оксида на УНТ.

Выводы

В работе было проведено квантово-химическое моделирование присоединения оксида кобальта Co_3O_4 к поверхности УНТ типа «кресло» с индексами хиральности (6,6). Установлено, что таким способом возможно управлять шириной запрещенной зоны, что может быть полезно для создания новых материалов для нанoeлектроники и оптоэлектроники.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема «FZUU-2023-0001»).

Список использованных источников

1. Maheswaran R., Shanmugavel B.P. A critical review of the role of carbon nanotubes in the progress of next-generation electronic applications // Journal of Electronic Materials, 2022, Vol. 51, no. 6., pp. 2786-2800. DOI: 10.1007/s11664-022-09516-8
2. Luo K. et al. Advances in carbon nanotube-based gas sensors: Exploring the path to the future // Coordination Chemistry Reviews, 2024, Vol. 518, p. 216049. DOI: 10.1016/j.ccr.2024.216049
3. Ferrier D.C., Honeychurch K.C. Carbon nanotube (CNT)-based biosensors // Biosensors, 2021, Vol. 11, no. 12, p. 486. DOI: 10.3390/bios11120486

QUANTUM CHEMICAL MODELING OF THE SURFACE MODIFICATION OF AN “ARMCHAIR” CARBON NANOTUBE WITH COBALT OXIDE

A.R. El Zanin, S.V. Boroznin

Abstract. In this work quantum chemical modeling of the process of attachment of cobalt oxide Co_3O_4 to the surface of a carbon nanotube (CNT) of the “armchair” type in three different adsorption positions was carried out. The effect of such modification on the electronic properties of the nanostructure under consideration is investigated.

Keywords: carbon nanotubes, cobalt oxide, adsorption, density functional theory, energy gap, charge distribution.

5. Е

**МОДЕЛИРОВАНИЕ РАБОТЫ
МНОГОУРОВНЕВЫХ ЭЛЕМЕНТОВ
ПАМЯТИ ДЛЯ КОМПЬЮТЕРОВ
СЛЕДУЮЩЕГО ПОКОЛЕНИЯ**

НЕСТАЦИОНАРНАЯ МОДЕЛЬ МАССОПЕРЕНОСА ЗАРЯДОВ В САМОСОГЛАСОВАННОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ВЛИЯНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ НА ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕТАЛЛОКСИДНОГО МЕМРИСТОРА

Бусыгин Александр Николаевич,
*к.ф.-м.н., доцент, старший научный сотрудник*¹,

Габдулин Бауржан Хайруллович,
*аспирант, младший научный сотрудник*¹

Удовиченко Сергей Юрьевич,
*д.ф.-м.н., профессор, научный руководитель*¹
idotgi@mail.ru

Шулаев Н.А.,
*аспирант, младший научный сотрудник*¹

Писарев А.Д.,
*к.т.н., доцент, старший научный сотрудник*¹

Ибрагим А.Х.А.,
*младший научный сотрудник*¹

¹ТюмГУ, г. Тюмень

Аннотация. Представлена нестационарная одномерная физико-математическая модель массопереноса кислородных вакансий и захваченных электронов в самосогласованном электрическом поле, которая позволяет точнее определить влияние температуры на электрофизические свойства металлооксидного мемристора по сравнению со стационарной и нестационарной моделями в приближении постоянного поля.

Ключевые слова: мемристор на основе оксида металла, модель массопереноса зарядов, кислородные вакансии, вольт-амперная характеристика мемристора.

Введение

В [1] на основе достаточно полной системы уравнений массопереноса зарядов [2] представлена простая стационарная физико-математическая модель переключения мемристора из низкопроводящего в высокопроводящее состояние. Модель [1] в отличие от [2] учитывает диффузионный член в уравнении непрерывности для концентрации вакансий кислорода, связанный с наличием градиента концентрации в оксидном слое.

В настоящей работе представлена нестационарная одномерная модель массопереноса зарядов в самосогласованном электрическом поле оксидного слоя мемристора, в которую помимо уравнений непрерывности концентрации кислородных вакансий и ионов впервые включены нестационарные уравнения непрерывности концентрации и плотности тока захваченных электронов.

Нестационарная модель массопереноса заряда

Система нестационарных уравнений массопереноса зарядов в самосогласованном электрическом поле оксидного слоя мемристора имеет вид:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \vec{\nabla}(D\vec{\nabla}N - NV_E) + (N_{max} - N)f_0 \exp\left(-\frac{E_g - \sqrt{\frac{q^3 E}{\pi \epsilon \epsilon_0}}}{kT}\right) - NN_{ox}V_{Eox} \frac{q}{4\epsilon \epsilon_0 E}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial N_{ox}}{\partial t} = \vec{\nabla}(D_{ox}\vec{\nabla}N_{ox} + N_{ox}V_{Eox}) + (N_{max} - N)f_0 \exp\left(-\frac{E_g - \sqrt{\frac{q^3 E}{\pi \epsilon \epsilon_0}}}{kT}\right) - NN_{ox}V_{Eox} \frac{q}{4\epsilon \epsilon_0 E}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial n_t}{\partial t} = -a\vec{\nabla}\left(n_t\left(1 - \frac{n_t}{N}\right)P_{tun} \frac{\vec{E}}{E}\right), \quad (3)$$

$$\frac{\partial n_t}{\partial t} = -\frac{1}{e}\vec{\nabla}\vec{j}, \vec{j} = ean_t\left(1 - \frac{n_t}{N}\right)P_{tun} \frac{\vec{E}}{E}, \quad (4)$$

$$divE = -e \frac{n_t + N_{ox} - N}{\epsilon_r \epsilon_0}, \quad (5)$$

Уравнения для концентраций кислородных вакансий и ионов (1) и (2) взяты из [1]. Нестационарные уравнения непрерывности концентрации и плотности тока электронов (3) и (4) используются впервые. Все обозначения в этих уравнениях взяты из [1].

Численное моделирование системы уравнений (1) – (5) проведено с помощью программы на языке Python. Построена вольт-амперная характеристика (ВАХ) на участке переключения мемристора из низкопроводящего в высокопроводящее состояние при постоянном электрическом поле, соответствующая нестационарному режиму резистивного переключения мемристора. Она расположена ближе к экспериментальной кривой, чем кривая в случае стационарного режима (рис. 1). Расчётная ВАХ при самосогласованном поле расположена ещё ближе к экспериментальной кривой относительно соответствующей кривой при постоянном поле (рис. 2).

Получены кривые ВАХ на участке переключения мемристора из низкопроводящего в высокопроводящее состояние при различной температуре оксидного слоя.

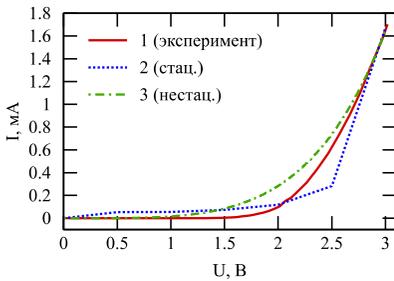


Рис. 1. Зависимость тока $I = \pi D^2/4$ от напряжения U на аноде, описывающая резистивное переключение мемристора

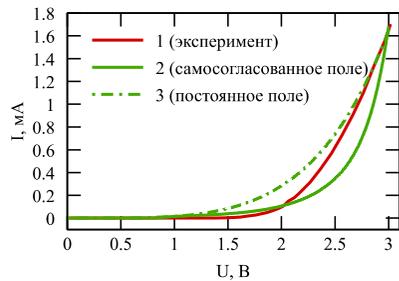


Рис. 2. Влияние самосогласованного электрического поля на вид кривой ВАХ мемристора.

Выводы

Представлена нестационарная модель массопереноса зарядов в самосогласованном электрическом поле оксидного слоя мемристора. Расчетная ВАХ расположена ближе к экспериментальной кривой по сравнению со стационарной моделью и нестационарной моделью с постоянным полем. Определено влияние температуры на распределение концентрации кислородных вакансий по толщине мемристора и вид кривой ВАХ на участке переключения мемристора из низкопроводящего в высокопроводящее состояние.

Исследование проведено при поддержке Минобрнауки РФ в рамках государственного задания (проект FEWZ-2024-0020).

Список использованных источников

1. Udovichenko S., Busygin A., Ebrahim A., Bobylev A., Gubin A. 2023. Mathematical Model of Metal–Oxide Memristor Resistive Switching based on Full Physical Model of Heat and Mass Transfer of Oxygen Vacancies and Ions // Physica status solidi (a). Article 2200478. <https://doi.org/10.1002/pssa.202200478>
2. Chernov A.A., Islamov D.R., Pik'nik A.A., Perevalov T.V., Gritsenko V.A. 2017. Three-dimensional non-linear complex model of dynamic memristor switching // ECS Transactions. Vol.75. No.32. Pp. 95-104. <https://doi.org/10.1149/07532.0095>

A NON-STATIONARY MODEL OF MASS TRANSFER
IN A SELF-CONSISTENT ELECTRICAL FIELD FOR
DETERMINING THE INFLUENCE OF TEMPERATURE

ON ELECTROPHYSICAL PROPERTIES OF METAL OXIDE MEMRISTORS

*A.N. Busygin, B.K. Gabdulin, S.Y. Udovichenko, N.A. Shulaev,
A.D. Pisarev, A.H.A. Ebrahim*

Abstract. A non-stationary one-dimensional physical and mathematical model of mass transfer of oxygen vacancies and trapped electrons in a self-consistent electric field is presented, this model allows to determine the influence of temperature on the electrophysical properties of metal oxide memristors.

Keywords: metal oxide based memristor, physical model of charge mass transfer, oxygen vacancies and trapped electrons, current-voltage characteristic of a memristor, oxide film temperature.

УДК 621.3:004.032.26

<https://doi.org/10.29003/m4279.MMMSEC-2024/131-133>

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИОННОЙ ДИНАМИКИ В ReRAM ЭЛЕМЕНТАХ

*Журавлев Андрей Андреевич,
младший научный сотрудник¹,
zhuravlyow.andrei@gmail.com*

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

*Ревизников Дмитрий Леонидович,
д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник¹,
reviznikov@mai.ru*

¹ФИЦ ИУ РАН, г. Москва

Аннотация. В работе рассматриваются вопросы вычислительной реализации математической модели переключательной динамики ReRAM элементов, основанной на системе уравнений дрейфа-диффузии ионов, электропроводности и теплопроводности в элементе.

Ключевые слова: мемристор, ReRAM, филамент, уравнение дрейфа-диффузии.

Работа посвящена вопросам моделирования переключательной динамики мемристивных элементов. Переключение между высокорезистивным и низкорезистивным состояниями элемента на основе тонкого оксидного слоя связано с образованием/разрушением филаментных структур, которые обычно представляют

собой кластеры кислородных вакансий. Доминирующую роль в этих процессах играет динамика ионов кислорода.

В настоящее время предложен целый ряд математических моделей, в той или иной степени отражающих основные механизмы мемристивного переключения. Наиболее комплексный подход предполагает прямое моделирование процессов генерации/рекомбинации ионов кислорода, транспорта ионов и электронов в оксидном слое. Как правило, для описания динамики ионов в этих моделях используется метод кинетического Монте-Карло. Такой подход, в частности, применялся авторами в работах [1, 2]. Осуществлялось моделирование динамики ионов методом кинетического Монте-Карло на реальной кристаллической решетке оксида кремния, что позволило получить детальную картину эволюции филаментных структур. При этом моделирование связано во значительными вычислительными затратами, а воспроизведение стабильных циклов, характерных для вольтамперных характеристик мемристивных элементов, затруднительно. В этой связи представляют интерес модели, основанные на макроскопическом описании дрейфа и диффузии ионов. Как правило, уравнение дрейфа-диффузии в таких моделях дополняется уравнениями электропроводности и теплопроводности с целью учета джоулева тепловыделения. В докладе рассматривается вычислительная реализация математической модели [3]. Модель позволяет, с одной стороны, адекватно описать механизмы мемристивного переключения и получить стабильные вольт-амперные характеристики, а с другой – сделать это при приемлемых вычислительных затратах, что актуально для многовариантного анализа.

С точки зрения вычислительной реализации следует отметить два аспекта. Первый связан с сопряженным характером уравнений. Коэффициент диффузии и скорость дрейфа существенно зависят от температуры, которая определяется уравнением теплопроводности, где коэффициент теплопроводности зависит от концентрации вакансий, а правая часть зависит от протекающего тока. Плотность тока в элементе определяется уравнением электропроводности, в котором коэффициент электропроводности зависит от концентрации вакансий и температуры. Для получения самосогласованного решения уравнений ионной динамики на каждом временном шаге требуется организация специального итерационного процесса.

Второй аспект касается построения вычислительной сетки. В процессе переключения в элементе ReRAM возникают подвижные зоны с резким перепадом концентрации частиц. Для повышения точности и сокращения вычислительных затрат расчетная сетка автоматически перестраивается для адаптации к особенностям получаемых решений.

Дальнейшее развитие модели связано с добавлением уравнений химической кинетики в оксидном слое и на интерфейсах оксидного слоя с электродами [4], а также с учетом контактного термического сопротивления гетероинтерфейсов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 23-91-01012).

Список использованных источников

1. Абгарян К.К., Ревизников Д.Л., Журавлёв А.А., Морозов А.Ю., Гаврилов Е.С. Многомасштабное моделирование нейроморфных систем. М.: Изд-во МАКС Пресс, 2022. – 120 с.
2. Zhuravlev, A.A., Abgaryan, K.K., Reviznikov, D.L. Multiscale Modeling of Ion Dynamics in Memristive Elements, *Physica Status Solidi (B)*. - 2022, – Vol. 259., Is.11 – 2200151.
3. S. Larentis, F. Nardi, S. Balatti, D. C. Gilmer, and D. Ielmini. Resistive Switching by Voltage-Driven Ion Migration in Bipolar RRAM–Part II: Modeling. *IEEE transactions on electron devices*, vol. 59, no. 9, 2012.
4. Y. Hirchaou, W. Goes, C. Hylin, P. Blaise, J. Li, F. Triozon. Advanced TCAD Modeling of HfO₂-based ReRAM: Coupling Redox Reactions and Thermal Effects, *Simulation Standard Technical Journal*, Silvaco, Feb 14, 2024.

MODELING OF ION DYNAMICS IN RERAM ELEMENTS

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

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

Annotation. The paper deals with the computational realization of the mathematical model of switching dynamics of ReRAM elements based on the system of equations of drift-diffusion of ions, electrical conductivity and thermal conductivity in the element.

Keywords: memristor, ReRAM, filament, drift-diffusion equation.

МОДЕЛИРОВАНИЕ СЕЛЕКТОРА ReRAM НА ОСНОВЕ ТУННЕЛЬНОГО ДИОДА

Курьянов Антон Олегович,

младший научный сотрудник^{1, 2,}

akuryanov@niime.ru

Теплов Георгий Сергеевич,

к.ф.-м.н., начальник лаборатории^{1, 2,}

gteplov@niime.ru

Федотов Михаил Игоревич,

к.ф.-м.н., научный сотрудник^{1, 2, 3,}

mfedotov@niime.ru

¹НИИМЭ, г. Зеленоград

²МФТИ, г. Долгопрудный

³ИПТМ РАН, г. Черноголовка

Аннотация. В работе было произведено моделирование селектора ReRAM на основе туннельного диода с использованием TiN в качестве электрода и различных материалов диэлектрика (Ta_2O_5 , TiO_2 , Si_3N_4). Было произведено сравнение результатов моделирования с результатами теоретических расчетов структуры. Полученные при моделировании ВАХ совпадают с теоретическим расчетом.

Ключевые слова: ReRAM, селектор, моделирование, туннельный диод.

Введение

С целью решения проблем с масштабированием устройств памяти типа Flash [1] разрабатываются новые технологии памяти, одной из которых является ReRAM. Резистивная память с произвольным доступом (ReRAM) – это вид энергонезависимой памяти, которая работает за счет изменения сопротивления тонкого диэлектрического слоя под действием внешнего электрического поля. Элементы хранения ReRAM (мемристоры, англ. – memristors) обладают высокой масштабируемостью, долговечностью, низким энергопотреблением и высокой скоростью работы. Традиционный подход к описанию мемристора позволяет определить его как элемент энергонезависимой памяти, имеющий два контакта [2]. Данная работа посвящена рассмотрению компонента массивов ReRAM, который применяется совместно с мемрис-

тором – селекторное устройство. Селектор предназначен для контроля нежелательных токов утечки. Биполярные селекторы, способные проводить ток в двух направлениях, делают компоненты более привлекательными благодаря возможности управления доступом к ячейке памяти при приложении напряжения разной полярности.

Моделирование селектора ReRAM в TCAD

В связи с наличием или отсутствием доступа к некоторым из требуемых материалов, наиболее технологически реализуемым является MIM-селектор на основе туннельного диода. Среди материалов, широко распространенных в Российской микроэлектронике, подходящую МДМ структуру можно реализовать на основе TiN в качестве материала электродов и Ta₂O₅/TiO₂/Si₃N₄ в роли функционального слоя.

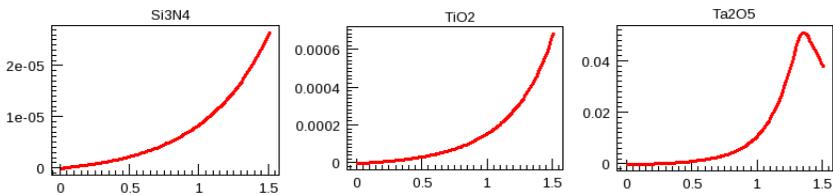
Моделирование производилось в САПР Sentaurus TCAD вер. К-2015.06. Наиболее подходящей для моделирования MIM структуры среди доступных в среде TCAD моделей туннелирования является Direct Tunneling. В связи с тем, что корректное применение моделей туннелирования возможно только для структур диэлектрик-полупроводник, металл TiN задавался как полупроводник через ряд параметров в соответствующем файле (WorkFunction, Eg0, Chi0, epsilon, Resist0, TempCoef).

Полученная модель показала соответствие с теоретически рассчитанной по формуле Симмонса вольтамперной характеристикой в работе [3]. Сравнение приведено в табл. 1 в виде величины тока для различных видов диэлектрика и площадей структуры, откуда можно заметить, что величина тока зависит прямо пропорционально от площади структуры, что соответствует с теорией.

На рис. 1 представлены вольтамперные характеристики для структур с материалом диэлектрика Si₃N₄/TiO₂/Ta₂O₅ толщиной 1 нм и площадью структуры 1 мкм². Можно заметить, что селектор на основе Si₃N₄ обладает низкой нелинейностью. Для селектора, использующего оксид тантала моделирование корректно для напряжения, не превышающего 1,3 В, поскольку при дальнейшем расчете в формуле, лежащей в основе модели Direct Tunneling происходит возникновение отрицательных корней, и последующие результаты нельзя считать релевантными.

Сравнение результатов моделирования

Диэлектрик/ толщина, нм/ площадь, мкм ²	Формула Симмонса, 0,1 В	Моделирование, 0,1 В	Формула Симмонса, 1,4 В	Моделирование, 1,4 В
Si ₃ N ₄ / 1 / 1	8,22019e-07	3,95763e-07	2,53446e-05	8,78106e-06
Si ₃ N ₄ / 1 / 4	3,28808e-06	1,58305e-06	0,000101378	3,51242e-05
Si ₃ N ₄ / 1 / 9	6,57615e-06	3,56186e-06	0,000202757	7,90295e-05
TiO ₂ / 1 / 1	1,16301e-05	4,98759e-06	0,000514109	0,000344518
TiO ₂ / 1 / 4	4,65205e-05	1,99503e-05	0,002056437	0,00137807
TiO ₂ / 1 / 9	0,000104671	4,48883e-05	0,004626984	0,00310067

Рис. 1. Вольтамперные характеристики для Si₃N₄/TiO₂/Ta₂O₅

Выводы

В работе было произведено моделирование селектора резистивной памяти на основе туннельного диода с использованием TiN в качестве электрода и различных материалов диэлектрика. Сравнение результатов моделирования с результатами теоретических расчетов структуры выявило соответствие модели и теории.

Список использованных источников

1. Overview of Emerging Nonvolatile Memory Technologies / Meena, J.S. [et al.] // *Nanoscale Res. Lett.* 2014. 9(526):1–33.

2. Г.С. Теплов, Е.С. Горнев. Модель на языке Verilog-A многоуровневого биполярного мемристора с учетом девиаций параметров переключения // *Микроэлектроника*. 2019. Т.48, № 3. С. 163–175.

3. Федотов М.И., Коротичкий В.И., Ковешников С.В. Самосовмещенный селектор для матриц энергонезависимой резистивной памяти на основе двухслойных диэлектриков. // *Российский форум «Микроэлектроника 2022»*, сборник тезисов 8-й науч. конф. 2022. С. 500–502.

MODELING OF RERAM SELECTOR BASED ON MIM DIODE

A.O. Kuryanov, G.S. Teplov, M.I. Fedotov

Abstract. This work presents modeling a ReRAM selector based on a tunnel diode using TiN as the electrode material and various dielectric materials (Ta_2O_5 , TiO_2 , Si_3N_4). The modeling results were compared with the results of theoretical calculations of the structure. The IVC obtained during modeling agrees with the theoretical calculation.

Keywords: ReRAM, selector, modeling, mim diode.

УДК 621.3:004.032.26

<https://doi.org/10.29003/m4281.MMMSEC-2024/137-141>

ДВУХЭТАПНЫЙ МЕТОД ПОСТРОЕНИЯ КОМПАКТНЫХ МОДЕЛЕЙ ЭЛЕМЕНТОВ ReRAM

Морозов Александр Юрьевич,

д.ф.-м.н., научный сотрудник¹,

morozov@infway.ru

Абгарян Каринэ Карленовна,

д.ф.-м.н., главный научный сотрудник, руководитель отдела¹,

kristal83@mail.ru

Ревизников Дмитрий Леонидович,

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

¹ФИЦ ИУ РАН, г. Москва

Аннотация. Математические модели мемристоров, как правило, задаются в виде динамических систем относительно параметра состояния элемента, характеризующего проводимость. При этом зависимость тока (или сопротивления) от параметра состояния и приложенного к элементу напряжения может быть довольно сложной. Существующие модели зачастую не в полной мере воспроизводят экспериментальные данные. В связи с этим в работе предлагается двухэтапный метод, заключающийся в использовании классических моделей на первом этапе и нейронных сетей для аппроксимации зависимости тока от параметра состояния и напряжения на втором этапе.

Ключевые слова: компактная модель, ReRAM, мемристор, аппроксимация, BAX, оксид гафния, HfO_2 .

Введение

Большинство известных компактных моделей элементов RERAM сформулированы в виде динамической системы относительно параметра состояния мемристора $w(t) \in [0, 1]$. Параметр

состояния мемристора — это величина, которая соответствует положению границы, разделяющей области с низкой и высокой концентрацией вакансий кислорода, толщине проводящего слоя, или толщине непроводящего барьера, в котором возникает туннельный ток электронов. В самом простом и наиболее распространенном варианте сопротивление мемристора задается в виде выпуклой линейной комбинации двух крайних его значений (высокоомного — R_{off} и низкоомного — R_{on}) с весовыми коэффициентами, определяемыми параметром состояния $R(t) = (1 - w(t))R_{off} + w(t)R_{on}$, а ток — через закон Ома: $I(t) = V(t)/R(t)$.

Зачастую существующие модели не в полной мере воспроизводят экспериментальные данные. Ранее авторами работы было предложено использовать интервальный аппарат для улучшения данной ситуации [1–2]. В настоящей работе предлагается подход, заключающийся в использовании нейронных сетей для аппроксимации зависимости тока $I(t)$ от параметра состояния $w(t)$ и напряжения $V(t)$ [3]. В результате получается компактная модель, в которой параметр состояния определяется с помощью динамической системы, учитывающей основные физические особенности элементов, а уже тонкая подстройка модели под экспериментальные данные осуществляется на уровне нейронной сети.

Построение компактных моделей мемристоров

Построение компактной модели осуществляется в два этапа. Пусть экспериментальные данные представлены в виде таблицы $t_k : V(t_k) : \hat{I}(t_k)$, $k = 1, \dots, N_{exp}$, где N_{exp} — количество экспериментальных точек. На первом этапе выполняется моделирование динамической системы по $V(t_k)$, и определяются $w(t_k)$. Отметим, что динамическая система может зависеть от ряда параметров, значения которых задаются в соответствии с доступной информацией относительно экспериментального образца. Важной особенностью представленного подхода является то, что динамическая система может быть любой. На втором этапе с экспериментальными данными сопоставляется $w(t_k) : V(t_k) : \hat{I}(t_k)$ и решается задача

построения функции $I(w, V)$ аппроксимирующей \hat{I} . Любую непрерывную функцию действительных переменных можно аппроксимировать с любой точностью искусственной нейронной сетью прямого распространения с одним скрытым слоем и непрерывными сигмоидными функциями активации. Поэтому вид $I(w, V)$ выбирается следующим:

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

где $a, b_i, c_i, d_i, e_i, i = 1, \dots, N$ — весовые коэффициенты.

Результаты

Выполняется построение нейросетевой модели мемристора, на основе оксида гафния. На рис. 1а показана зависимость напряжения от времени, а на рис. 1б — серым цветом экспериментальная вольтамперная характеристика (ВАХ) в соответствии с работой [4]. В качестве основной модели использовалась модель, предложенная в [4]:

$$\frac{\partial w(t)}{\partial t} = a \cdot V(t)^s \begin{cases} 0, -V_{thr} < V(t) \leq V_{thr}, \\ 1 - (1 - w(t))^{2 \cdot round\left(\frac{b}{|V(t)| + c}\right)}, V(t) \leq -V_{thr}, \\ 1 - w(t)^{2 \cdot round\left(\frac{b}{|V(t)| + c}\right)}, V(t) > V_{thr}, \end{cases} \quad (2)$$

где $V_{thr} = 0.8$ В — пороговое значение напряжения активации; $a = 1$ — константа; $s = 5$ — нечетное целое число; $round$ — функция получения целочисленного результата; $b = 15, c = 2$ — подгоночные коэффициенты, $w(0) = 0$.

По (2) был получен набор значений $w(t_k) : V(t_k) : \hat{I}(t_k)$ и далее выполнено обучение нейронной сети (1) с помощью библиотеки TensorFlow до достижения сетью определенной точности аппроксимации. В скрытом слое нейронной сети находится порядка сотни нейронов ($N = 120$ в (1)). На рис. 1б — черным цветом показана модельная ВАХ. Небольшое несоответствие наблюдается только в левом «хвосте».

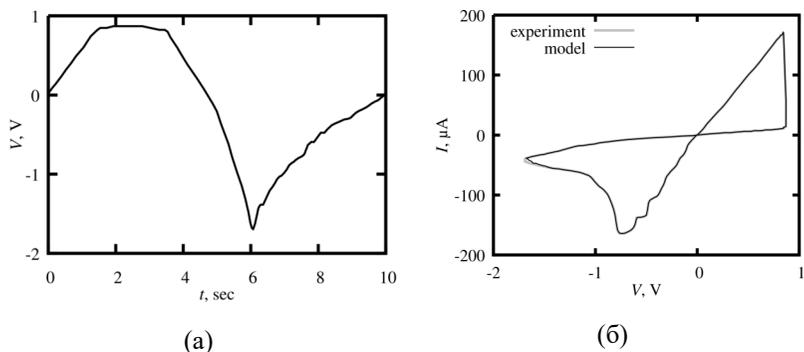


Рис. 1. Сравнение модельной ВАХ с экспериментальной ВАХ (б) при определенной форме входного напряжения (а)

Заключение

Представлен метод построения компактных моделей элементов RERAM, согласно которому параметр состояния определяется с помощью динамической системы, учитывающей основные физические особенности элементов, а тонкая подстройка модели под экспериментальные данные осуществляется на уровне нейронной сети. Предложенный подход применен к мемристору на основе оксида гафния (HfO₂). Расчетная ВАХ соответствует экспериментальной, что демонстрирует универсальность и эффективность предложенного подхода.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 23-91-01012).

Список использованных источников

1. Morozov A.Yu., Abgaryan K.K., Reviznikov D. L. Interval Model of a Memristor Crossbar Network // *Physica status solidi (b)*, 2022, Vol. 269, No. 11, 2200150. DOI: 10.1002/pssb.202200150
2. Morozov A.Yu., Abgaryan K.K., Reviznikov D.L. Simulation Modeling of an Analog Impulse Neural Network Based on a Memristor Crossbar Using Parallel Computing Technologies // *Russian Microelectronics*, 2023, Vol. 52, No. 8, pp. 1–7. DOI:10.1134/S1063739723080024
3. Abgaryan K.K., Morozov A.Yu., Reviznikov D.L. Hybrid Approach for Modeling Memristive Elements // *Physica status solidi (b)*. 2024. DOI: 10.1002/pssb.202400058.
4. Mladenov V. Analysis of Memory Matrices with HfO₂ Memristors in a PSpice Environment // *Electronics*, 8(4), 383, March 2019, p. 16. DOI: 10.3390/electronics8040383.

TWO-STEP METHOD FOR CONSTRUCTING COMPACT MODELS OF RERAM ELEMENTS

A.Yu. Morozov, K.K. Abgaryan, D.L. Reviznikov
morozov@infway.ru

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

Annotation. Mathematical models of memristors are usually specified as dynamic systems relative to the state parameter of the element characterizing conductivity. In this case, the dependence of the current (or resistance) on the state parameter and the voltage applied to the element can be quite complex. Existing models often do not fully reproduce experimental data. In this regard, the paper proposes a two-stage method consisting of using classical models at the first stage and neural networks to approximate the dependence of the current on the state parameter and voltage at the second stage.

Keywords: compact model, ReRAM, memristor, approximation, I-V characteristics, hafnium oxide, HfO₂.

<https://doi.org/10.29003/m4282.MMMSEC-2024/141-144>

АСПЕКТЫ ФИЗИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ МАГНИТОРЕЗИСТИВНОЙ ПАМЯТИ STT-MRAM НА БАЗЕ ЯЧЕЙКИ МТП С ТУННЕЛЬНЫМ БАРЬЕРОМ MGO

Щербаков Василий Сергеевич,
инженер-исследователь¹, аспирант²,
basil-scherbakov@ya.ru, +7 (930) 893-88-10

¹ФИЦ ИУ РАН, г. Москва

²МАИ, г. Москва

Аннотация. Работа посвящена вопросам физического моделирования ячеек магниторезистивной памяти. Рассмотрено влияние электросопротивления, туннельного магнитосопротивления и критического тока переключения на скорость записи и считывания устройства.

Ключевые слова: магнитосопротивление, магнитные туннельные переходы (МТП), энергонезависимая память.

Одним из наиболее перспективных направлений в развитии элементной базы вычислительной техники будущего является создание устройств магниторезистивной памяти. Такие устройства обеспечивают надёжное хранение данных, высокую скорость

записи и чтения, а также независимость от источника питания [1]. В частности, многообещающей является память с произвольным доступом на основе перемангничивания свободного слоя спин-поляризованным током (STT-MRAM).

Этот тип оперативной памяти имеет ряд преимуществ:

- высокая плотность ячеек на кристалле;
- меньшее энергопотребление;
- высокую скорость чтения и записи данных;
- срок службы такой памяти практически неограничен;
- отсутствие проблемы перекрытия соседних ячеек индуцированным магнитным полем тока.

Важными характеристиками ячейки STT-MRAM являются электросопротивление, туннельное магнитосопротивление (TMR), критический ток переключения и термическая стабильность [2]. Туннельное магнетосопротивление возникает на границе раздела двух ферромагнитных материалов, разделённых тонким слоем диэлектрика. Когда поток электронов проходит из одного ферромагнитного материала (закреплённого слоя) в антипараллельно ориентированный ферромагнитный материал (свободный), последний при превышении определённого порогового значения скачкообразно изменяет свою намагниченность, переходя в параллельную конфигурацию. Для создания массива памяти из магнитно-туннельных переходов (МТП), каждое устройство обычно интегрируется с изолирующим транзистором, который может быть включен для выборочного пропускания тока через интересующие устройства МТП, например, во время операции считывания. Для STT MRAM один и тот же транзистор используется для пропускания коммутационного тока через целевые устройства MTJ. Поскольку каждая ячейка памяти обычно имеет один транзистор и один МТП эта конкретная архитектура известна как архитектура MRAM 1T-1MTJ [3].

Электросопротивление туннельной ячейки определяется туннельным барьером и площадью контакта. При этом следует учитывать толщину барьера, материал контакта, наличие дефектов или примесей в барьере или контакте, температуру, при которой осуществляется измерение, а также внешнее напряжение.

При разработке ячеек STT-MRAM необходимо учитывать ряд физических аспектов, влияющих на характеристики такой памяти. Например, для изменения намагниченности свободного слоя

в магниторезистивных ячейках используется спин-поляризованный ток. Это позволяет избавиться от растущих магнитных полей и тока, необходимых для записи битов в уменьшенных спин-вентильных элементах (МТЭ), за счет снижения критической плотности тока переключения. При низком значении тока можно значительно сократить время и энергию записи в STT-MRAM. Однако уменьшение значения электрического тока I увеличивает частоту отказов при хранении и вероятность возникновения помех при чтении и ошибок при записи. Эти проблемы могут иметь существенные последствия для проектирования архитектур интегральных микросхем (ИМС) на основе STT-MRAM. В ячейке МТЭ с туннельными барьерами MgO критическая плотность тока переключения примерно в три раза меньше, чем в МТЭ с барьерами AlO_x . Это связано с более эффективным спиновым переносом благодаря более высокому коэффициенту поляризации электронов. Кроме того, низкие значения $RA = \approx 50 \text{ Ом} \cdot \text{мкм}^2$ и $J_{c0} = 2,2 \times 10^6 \text{ А/см}^2$ для ячейки МТЭ с барьерами MgO позволяют создавать MRAM с высокой плотностью размещения ячеек и быстрым временем доступа в несколько наносекунд.

Формирование перпендикулярной магнитной анизотропии в ячейке МТЭ позволяет использовать меньшие значения J_{c0} для переключения намагниченности свободного слоя. Это приводит к более низкому значению TMR. При этом необходимо учитывать влияние толщины свободного слоя на характеристики TMR и J_{c0} при синтезе структуры STT MRAM с оптимальными параметрами.

Для дальнейшего уменьшения величины J_{c0} рекомендуется использовать двухбарьерные МТЭ-структуры, состоящие из двух изолирующих барьеров MgO с различным сопротивлением, двух закреплённых слоёв, намагниченных антипараллельно друг другу, и свободного слоя, помещённого между двумя изолирующими барьерами. Это позволяет получить критическую плотность тока переключения $J_{c0} = 0,52 \text{ МА/см}^2$ при 30 мс. Это значение J_{c0} в 2-3 раза меньше, чем у структуры МТЭ с одним изолирующим барьером из MgO, и обусловлено улучшением эффективности момента переноса спина.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 23-91-01012).

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Абгарян К.К., Бажанов Д.И., Соболев Н.А. Многомасштабное моделирование многослойных наногетероструктур на основе ферромолибдата стронция // Материалы III международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» МММЭК–2021. 25–26 октября 2021 г., Москва, с. 53–57 <https://doi.org/10.29003/m2455.MMMSEC-2021>.

2. Spin-transfer torque magnetic random access memory (STT-MRAM) / D. Apalkov, A. Khvalkovskiy, S. Watts, et al. // ACM Journal on Emerging Technologies in Computing Systems. – 2013. – Vol. 9, No. 2. P. 1–35.

3. Dmytro Apalkov, Bernard Dieny, J.M. Slaughter. Magnetoresistive Random Access Memory. Proceedings of the IEEE, 2016, 104, pp.1796 – 1830. [ff10.1109/JPROC.2016.2590142](https://doi.org/10.1109/JPROC.2016.2590142) [ff.fhal-01834195](https://doi.org/10.1109/JPROC.2016.2590142)

ASPECTS OF PHYSICAL MODELING OF STT-MRAM MAGNETORESISTIVE MEMORY BASED ON MTJ CELL WITH MGO TUNNEL BARRIER

V.S. Scherbakov

Abstract. The work is devoted to the issues of physical modeling of magnetoresistive memory cells. The influence of electrical resistance, tunneling magnetoresistance (TMR) and critical switching current on the recording and reading speed of the device is considered.

Keywords: magnetoresistance, magnetic tunnel junctions (MTP), non-volatile memory.

6. F

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

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ МИКРОСТРУКТУРЫ МЕДНОЙ ПРОВОЛОКИ ПРИ ДЕФОРМИРОВАНИИ НОВЫМ СОВМЕЩЕННЫМ СПОСОБОМ

Волокитин Андрей Валерьевич,

*PhD, доцент¹,
dyusha.vav@mail.ru*

Панин Евгений Александрович,

*PhD, доцент¹,
cooper802@mail.ru*

¹*КарИУ, г. Темиртау, Казахстан*

Аннотация. В данной работе было проведено исследование влияния совмещенного способа радиально-сдвиговой протяжки и последующего волочения на эволюцию микроструктуры медной проволоки методом Джонсона–Мейла–Аврами–Колмогорова (Johnson–Mehl–Avrami–Kolmogorov или ЖМАК). Анализируя полученные данные, можно отметить, что с ростом частоты вращения матрицы возникает повышенный уровень закручивания заготовки, что отражается на плавном уменьшении размера зерна. Рассматривая микроструктуру в различных направлениях, можно отметить почти идентичную картину по размеру зерна.

Ключевые слова: волочение, ЖМАК, моделирование, скручивание, проволока.

Введение

В системе Deform существует два метода моделирования микроструктуры. Первым методом является метод Джонсона–Мейла–Аврами–Колмогорова (Johnson–Mehl–Avrami–Kolmogorov или ЖМАК). Вторым методом является метод дискретных решеток, реализованный с помощью алгоритма клеточных автоматов (Cellular Automata). В методе ЖМАК окончательный средний размер зерна определяется на основе начального среднего размера зерна, констант материала и полей переменных данных, таких как температура, деформация, скорость деформации и время.

Моделирование эволюции микроструктуры в ходе совмещенного процесса «радиально-сдвиговая протяжка с волочением» методом ЖМАК

Для использования данного метода необходимо изначально рассчитывать модель с заданными параметрами начального размера зерен. По умолчанию модель подразумевает равномерное распределение начального размера зерен по всему объему заготовки. В качестве начального размера зерна стали AISI 1045 было принято значение 60 мкм.

После этого необходимо ввести параметры эволюции зерна для метода ЖМАК. Они включают в себя данные по статической, динамической и мета-динамической рекристаллизации, а также о кинетике роста новых зерен. Суть ввода этих данных заключается во вводе определенных констант модели, зависящих от свойств материала и типа процесса обработки. Все они подробно рассмотрены в работах [1,2], где представлено большое количество значений данных коэффициентов для различных марок сталей и сплавов в зависимости от видов деформационных и термических обработок.

На рис. 1 представлены результаты моделирования микроструктуры методом ЖМАК изучаемого процесса с расстоянием между матрицей и волокой 300 мм и скоростью вращения матрицы 30 об/мин.

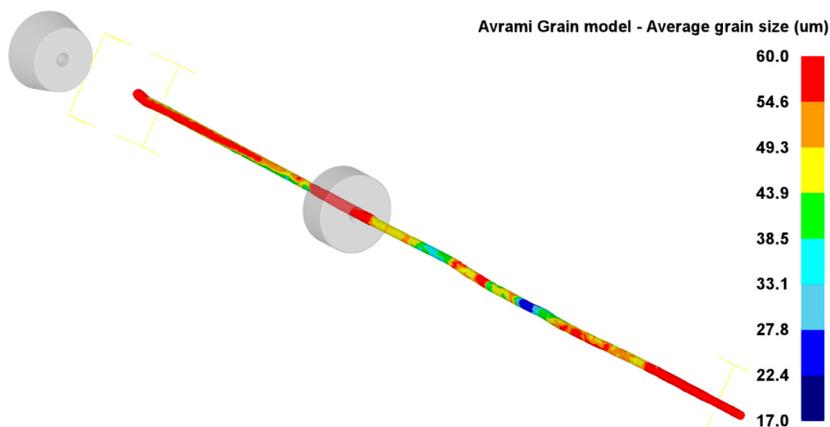


Рис. 1. Эволюция микроструктуры по методу ЖМАК
в модели «300 мм 30 об/мин»

Картины представлены в поперечном сечении заготовки после всех стадий деформирования для всех моделей, которые рассматривались ранее при изучении напряженно-деформированного состояния. Для удобства сравнения все результаты имеют одинаковый диапазон шкалы.

Выводы

Анализ полученных результатов показал, что распределение размера зерна вдоль оси заготовки носит неоднозначный характер. Это является результатом того, что данный алгоритм расчета в большей степени оптимизирован для более массивных заготовок, чем для проволоки. При этом ключевым недостатком является полное отсутствие данных об изменении формы зерен.

Данное исследование финансировалось Комитетом науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (Грант № AP19676903).

Список использованных источников

1. Lenard J.G. et al. Mathematical and Physical Simulation of the Properties of Hot Rolled Products // Amsterdam: Elsevier, 2005. 376 p.
2. Lenard J.G. Primer on Flat Rolling. 2nd Edition // Amsterdam: Elsevier, 2013. 450 p.

MODELING OF COPPER WIRE MICROSTRUCTURE EVOLUTION DURING DEFORMATION BY A NEW COMBINED METHOD

A.V. Volokitin, E.A. Panin

Abstract. In this work, the influence of the combined method of radial-shift broaching and subsequent drawing on the evolution of the microstructure of copper wire by the Johnson–Mehl–Avrami–Kolmogorov (Johnson–Mehl–Avrami–Kolmogorov or JMAK) method was investigated. Analyzing the data obtained, it can be noted that with increasing die speed, there is an increased level of twisting of the workpiece, which is reflected in a smooth decrease in grain size. Looking at the microstructure in different directions, one can note a nearly identical grain size pattern.

Keywords: drawing, JMAK, modeling, twisting, wire.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ МИКРОСТРУКТУРЫ ПРУТКОВ ИЗ УГЛЕРОДИСТОЙ СТАЛИ ПРИ ДЕФОРМИРОВАНИИ НОВЫМ КОМБИНИРОВАННЫМ СПОСОБОМ

Волокитина Ирина Евгеньевна,

*PhD, профессор¹,
irinka.vav@mail.ru*

Панин Евгений Александрович,

*PhD, доцент¹,
cooper802@mail.ru*

¹*КарИУ, г. Темиртау, Казахстан*

Аннотация. В данной работе было проведено исследование влияния совмещенной технологии радиально-сдвиговой протяжки и последующего волочения на эволюцию микроструктуры прутков методом Джонсона-Мейла-Аврами-Колмогорова (Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov или ЖМАК). Из полученных данных моделирования микроструктуры можно сказать, что деформирование заготовки по схеме 30–25–20 при комнатной температуре является самым эффективным способом, поскольку позволяет измельчить исходное зерно более чем в 3 раза на поверхности заготовки. При этом использование схемы 30–27–23 при комнатной температуре дает двукратное измельчение исходного зерна. Проработка центральной области заготовки во всех рассмотренных моделях носит слабо выраженный характер, достигая 35%-го уменьшения в самых оптимальных условиях.

Ключевые слова: волочение, ЖМАК, моделирование, протяжка, прутки.

Введение

В системе Deform существует два метода моделирования микроструктуры. Первым методом является метод Джонсона-Мейла-Аврами-Колмогорова (Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov или ЖМАК). Вторым методом является метод дискретных решеток, реализованный с помощью алгоритма клеточных автоматов (Cellular Automata).

Моделирование эволюции микроструктуры при радиально-сдвиговой протяжке и последующего волочения методом ЖМАК

Для использования данного метода необходимо изначально рассчитывать модель с параметрами расчета микроструктуры. По

умолчанию модель подразумевает однородное распределение начального размера зерен по всей площади или объему заготовки. В качестве начального размера зерна Ст 10 было принято значение 25 мкм.

Для корректного моделирования нужно ввести параметры эволюции зерна для метода JMAK. Они включают в себя данные по статической, динамической и мета-динамической рекристаллизации, а также о кинетике роста новых зерен. Суть ввода этих данных заключается во вводе определенных констант модели, зависящих от свойств материала и типа процесса обработки. Все они подробно рассмотрены в работе [1], где представлено большое количество значений данных коэффициентов для различных марок сталей и сплавов в зависимости от видов деформационных и термических обработок. На рис. 1 представлены картины эволюции микроструктуры.

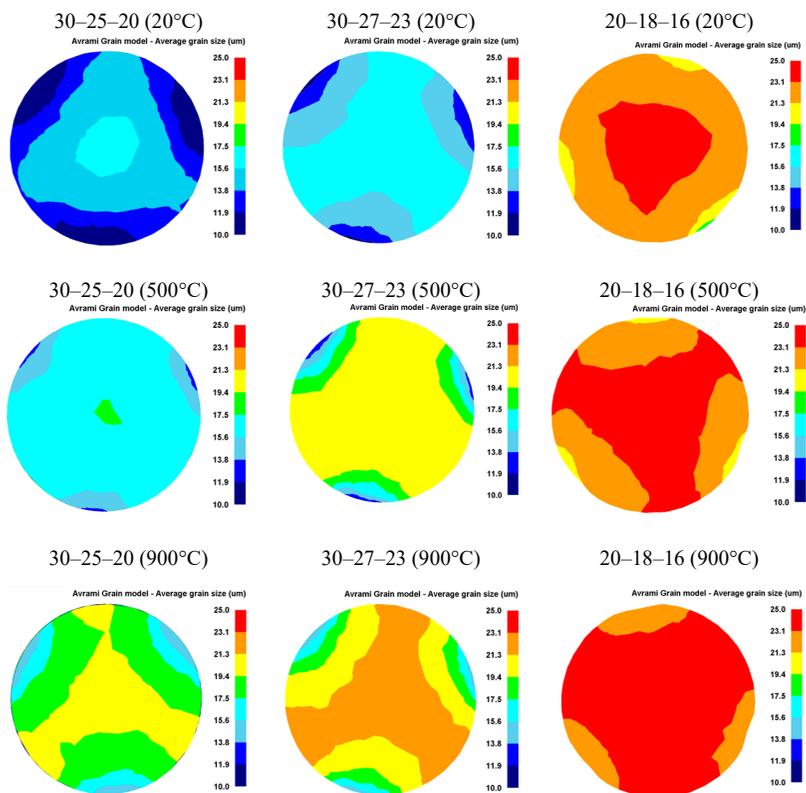


Рис. 1. Распределение среднего размера зерна по сечению заготовки

Картины представлены в поперечном сечении заготовки после всех стадий деформирования для всех моделей, которые рассматривались ранее при изучении напряженно-деформированного состояния. Для удобства сравнения все результаты имеют одинаковый диапазон шкалы.

Выводы

1. Наиболее интенсивное измельчение исходного размера зерна наблюдается в модели 30–25–20 при 20°C, что является следствием максимальных единичных и суммарных обжатий, а также минимальной температуры заготовки; также в остальных моделях данная температура является наиболее предпочтительной;

2. Модель 20–18–16 является наименее эффективной с точки зрения измельчения зерна при всех температурах, даже при отсутствии нагрева заготовки центральная зона заготовки почти не получает какого-либо значимого измельчения зерна.

Данное исследование финансировалось Комитетом науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (Грант № AP19678974).

Список использованных источников

1. Lenard J.G. et al. Mathematical and Physical Simulation of the Properties of Hot Rolled Products // Amsterdam: Elsevier, 2005. 376 p.

MODELING OF MICROSTRUCTURE EVOLUTION OF CARBON STEEL BARS DURING DEFORMATION BY A NEW COMBINED METHOD

I.E. Volokitina, E.A. Panin

Abstract. In this work, the influence of combined radial-shift broaching and subsequent drawing technology on the evolution of bar microstructure by the Johnson–Mehl–Avrami–Kolmogorov (JMAK) method was investigated. From the obtained data of microstructure modeling, we can say that deformation of the billet according to the scheme 30–25–20 at room temperature is the most effective way, because it allows to crush the initial grain more than 3 times on the surface of the billet. At the same time, the use of the scheme 30–27–23 at room temperature gives a twofold pulverization of the initial grain. Processing of the central region of the workpiece in all considered models has a weakly pronounced character, reaching 35% reduction in the most optimal conditions.

Keywords: Drawing, JMAK, modeling, broaching, bars.

ПРИЛОЖЕНИЕ ГАММА-РАСПРЕДЕЛЕНИЯ К МОДЕЛИРОВАНИЮ ДВУХТОЧЕЧНОГО ИЗГИБА МНОГОСЛОЙНОГО СТЕРЖНЯ

Мартirosян Микаэл Дереникович,

студент¹,

martirosyan-mikael@yandex.ru

¹НИУ МЭИ, г.Москва

Аннотация. В данной работе был проведён статистический анализ результатов эксперимента по двухточечному изгибу многослойного стержня, в качестве которого использовалось оптическое волокно с заданными параметрами. Каждый параметр модели был оценен трижды с помощью методов наименьших квадратов, моментов и максимального правдоподобия. Высказанная в предыдущих работах гипотеза о наибольшей применимости распределения Вейбулла для объяснения результатов этого эксперимента была опровергнута: гамма-распределение может применяться с весьма хорошим успехом, оно также значительно снижает общую дисперсию распределения при использовании оценок максимального правдоподобия.

Ключевые слова: гамма-распределение, предел прочности, эксперимент, оценка максимального правдоподобия, метод моментов, метод наименьших квадратов.

Введение

Перед построением модели стоит обозначить условия эксперимента: эксперимент производился с помощью прибора, измеряющего предел прочности многослойных стержней методом двухточечного изгиба, в ходе него были измерены три типа оптических волокон как примеров многослойных стержней. Волокно не контактировало с какими-либо средами, кроме атмосферного воздуха и стальных пластин прибора, целостность его покрытия не нарушалась, в трёх сериях было совершено 30 измерений. Ниже можно увидеть геометрические характеристики волокон.

Тип 1. Волокно диаметром 125 мкм с полимерным покрытием толщиной 42.5 мкм.

Тип 2. Волокно с диаметром оболочки 125 мкм и диаметром сердечника 62.5 мкм с полиимидным покрытием толщиной 10 мкм.

Тип 3. Волокно с диаметром сердечника составляет 160 мкм и диаметром оболочки 390 мкм с медным покрытием толщиной 40 мкм.

Методология построения модели

Для статистической модели находились значения математического ожидания, медианы, несмещённой дисперсии и среднеквадратическое отклонение для оценок, произведённых методом наименьших квадратов. Для их нахождения были применены метод наименьших квадратов, метод максимального правдоподобия и метод моментов. Была оценена правдоподобность гипотезы о виде распределения с помощью критерия Пирсона (см. источник [1]), эта оценка давала широкий запас под изменяемость данных, разница с пороговым значением критерия была более 5 для всех типов. Все оценённые величины смогли пройти интервалы с уровнем значимости 0.99. Формулы для осуществления метода моментов были взяты из источника [2], оценки для параметра математического ожидания методом максимального правдоподобия была взята из источника [3]. Важно помнить о приближённом характере вычисления медианы – либо с помощью асимптотических приближений, как в работе [4], либо с помощью обратной функции гамма-распределения, как в данной работе.

Для оценок максимального правдоподобия использовались нижеприведённые формулы. Формула (2) рекомендуется к применению нормативным документом [5], нелинейное уравнение (1) решалось методом секущих, но лучше бы подошёл метод Ньютона из-за большего порядка сходимости (см. книгу [6]) и сокращения суммы в производной по параметру формы. Формулы (1) и (2):

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \ln X_i - \ln \bar{X} + \ln k - \Psi(k) = 0, \quad (1)$$

$$\theta = \frac{\bar{X}}{k}, \quad (2)$$

где N – количество случайных значений в выборке, X_i – значение случайной величины, k и θ – параметры формы и масштаба гамма-распределения соответственно, Ψ – пси-функция Эйлера или ди-гамма-функция, подробнее см. источник [7] и \bar{X} – среднее случайной величины X , рассчитанное по соответствующей выборке.

Выводы

Настоящая статистическая модель проста в реализации, достаточно точна (максимальное относительное отклонение составляет 0.0384), надёжна относительно небольших (не более 1 ГПа в восьмой-шестой части выборки) искажений данных, что делает её отличным выбором для прикладного применения вместе с прибором, реализующим двухточечный изгиб многослойных стержней в обычных условиях и является хорошей альтернативой ставшему традиционным распределению Вейбулла.

Список использованных источников

1. *Ивченко Г.И., Медведев Ю.И.* / Введение в математическую статистику: Учебник. М.: Издательство ЛКИ, 2010. – 600 с.
2. Continuous univariate distributions / N.L. Johnson. S. Kotz. N. Balakrishanan. – 2nd ed. Vol. 1. NY: John Wiley & Sons, 1994.
3. Е.А. Буровский, Ю.Б. Гришунина / Задачи математической статистики и их решение с использованием языка программирования Python: учеб. Пособие. – М.: Изд. дом Высшей школы экономики, 2022. – 64 с.
4. Lyon R.F. // PLOS ONE. 2023. V. 18: e0288601. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0288601>
5. ГОСТ 11.011-83. Правила определения оценок и доверительных границ для параметров гамма-распределения.
6. *Крылов В.И.* и др. Вычислительные методы высшей математики. Т. 1. Под ред. И.П. Мысовских. Минск, «Вышэйшая Школа», 1972. – 584 с., с илл.
7. И.С. Градштейн, И.М. Рыжик. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М. «Физматгиз», 1963. – 1100 с., с илл.

APPLICATION OF GAMMA DISTRIBUTION TO MODELING THE TWO-POINT BENDING OF A MULTILAYER ROD

M.D. Martirosyan

Abstract. In this paper, a statistical analysis of the results from an experiment involving the two-point bending of a multi-layer rod using an optical fiber with specific parameters was conducted. Each parameter of the model was evaluated three times three times using method of least squares, method of moments, and maximum likelihood estimations. The hypothesis proposed in previous studies about the supremacy of the Weibull distribution for explaining the results of this experiment was refuted. Instead, the gamma distribution was found to be a suitable option too, as it significantly reduces the overall variance in the distribution when maximum likelihood estimates are used.

Keywords: gamma-distribution, ultimate strength, experiment, maximum likelihood estimation, method of moments, least squares method.

7. G

**ПРОБЛЕМЫ ОБЕСПЕЧЕНИЯ
НАДЕЖНОСТИ ЭКБ МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ
И СИСТЕМ НА ЕЕ ОСНОВЕ**

ПОВЫШЕНИЕ СТОЙКОСТИ ЭЛЕКТРОННЫХ КОМПОНЕНТОВ В СИСТЕМЕ ИНДУКТИВНОГО ЭНЕРГООБЕСПЕЧЕНИЯ ИМПЛАНТИРУЕМЫХ МЕДИЦИНСКИХ ПРИБОРОВ

*Гуров Константин Олегович,
младший научный сотрудник¹,
constantinegurov@yandex.ru*

¹НИУ МИЭТ, г. Москва

Аннотация. В работе описывается проблема выбора электронных компонентов в системе индуктивного энергообеспечения имплантируемых медицинских приборов. Проведено сравнение защитных (конформных) покрытий для снижения нагрева электронных компонентов и повышения их стойкости к агрессивной среде организма человека.

Ключевые слова: электронная компонентная база, защитные покрытия, индуктивная передача энергии, имплантируемые медицинские приборы.

Введение

Одним из перспективных методов энергообеспечения имплантируемых медицинских приборов (ИМП), например, нейростимулятора, визуального и слухового протезов, является беспроводная передачи энергии на основе индуктивной связи. Однако, в системе индуктивной передачи энергии (ИПЭ) к ИМП нагрев отдельных электронных компонентов, таких как конденсаторов и катушек индуктивности, может превышать 55°C на открытой плате, что приводит к уменьшению выходных характеристик до 40% [1]. В тоже время, согласно международному стандарту ISO 14708-1:2000, ткани вблизи внешних поверхностей ИМП не должны нагреваться более чем на 2°C от нормальной температуры тела пациента. Применение конденсаторов с температурным коэффициентом емкости типа NPO в системе ИПЭ позволяет снизить нагрев более чем на 30%, а снижение нагрева катушек индуктивности можно обеспечить применением компонентов с низким эквивалентным последовательным сопротивлением (low ESR) [1], [2]. Для дополнительного снижения нагрева отдельных электронных компонентов в замкнутой имплантируемой системе ИПЭ к ИМП можно использовать защитные (конформные) покрытия, которые, в свою

очередь, повышают диэлектрические свойства, химическую и механическую стойкость электрической схемы к агрессивной среде организма человека.

Сравнение защитных покрытий электронных компонентов

На выбор конформного покрытия влияют условия эксплуатации прибора, топология платы и используемые компоненты, электроизоляционная прочность покрытия, удобство обслуживания и ремонтпригодность. Условно можно выделить пять основных типов конформных покрытий: акриловое, эпоксидное, силиконовое, параксилеленовое и уретановое [3]. Стоит отметить, что акриловые покрытия условно можно отнести к покрытиям для общего применения, эпоксидные – для защиты от химических воздействий, силиконовые – для высокотемпературной защиты, а уретановые и параксилеленовые – для защиты от влаги и химических воздействий [3].

По результатам проведенного анализа, было установлено, что эпоксидные покрытия могут приводить к аллергическим реакциям организма человека, а также через данное покрытие может происходить диффузия водяного пара, который является источником выхода прибора из строя. Таким образом, для применения в системе ИПЭ к ИМП можно выделить уретановое и параксилеленовое конформное покрытие, поскольку такие покрытия обладают лучшими диалектическими свойствами, теплопроводностью, химической и механической стойкостью к агрессивной среде организма человека.

Для дополнительного повышения стойкости электронных компонентов в системе ИПЭ к ИМП к внешним воздействующим факторам необходимо использовать внешний защитный корпус. В работе были сформулированы требования к свойствам защитного герметичного корпуса, которые соответствуют принятым международным стандартам для активных имплантируемых медицинских изделий. На основе данных требований были выбраны биоинертные материалы, такие как некоторые виды полимера, силикона, керамики и металла [4]. Было установлено, что оптимальными материалами для защитного внешнего корпуса системы ИПЭ к ИМП являются полимер, например, политетрафторэтилен, и металл, например, титан [5].

Выводы

В работе выполнено сравнение защитных (конформных) покрытий для снижения нагрева отдельных электронных компонентов в системе индуктивной передачи энергии (ИПЭ) к имплантируемым медицинским приборам (ИМП), а также повышения их стойкости к агрессивной среде организма человека. Установлено, что оптимальными защитным покрытиями для электронных компонентов в системе ИПЭ к ИМП являются уретановое и параксилленовое конформные покрытия, а материалами для защитного внешнего корпуса являются политетрафторэтилен и титан.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках реализации крупного научного проекта (Соглашение № 075-15-2024-555 от 25.04.2024).

Список использованных источников

1. Селютина Е.В., Гуров К.О., Миндубаев Э.А., Данилов А.А., Влияние паразитных компонентов и нагрева конденсаторов на адаптивную подстройку усилителя мощности в системе индуктивного питания медицинских имплантатов // Известия ВУЗов. Электроника, 2024, Т. 29, №1, С. 108–117.
2. Миндубаев Э.А., Гуров К.О., Элементная база для создания высокоэффективных систем беспроводной передачи энергии // Наноиндустрия, 2023, Т. 16, № S9-1 (119), С. 75–78.
3. Фил К., Шихов С., Конформные покрытия для жестких условий эксплуатации // Технологии в электронной промышленности, 2020, № 120, С. 26–32.
4. Joung Y-H., Development of implantable medical devices: from an engineering perspective // International neurourology journal, 2013, Vol. 17(3), P. 98-106.
5. Gurov K.O., Danilov A.A., Mindubaev E.A., Ryabchenko E.V., Surkov O.A., The Assembly's Sheath For Inductive Powering Of Artificial Organs // The International Journal of Artificial Organs, 2019, Vol. 42(8), P. 428.

INCREASING THE DURABILITY OF ELECTRONIC COMPONENTS IN THE INDUCTIVE POWER SUPPLY SYSTEM OF IMPLANTABLE MEDICAL DEVICES

K.O. Gurov

Abstract. The work describes the problem of selecting electronic components for an inductive power supply system for implantable medical devices. A comparison of protective (conformal) coatings is made to reduce the heating of electronic components and increase their resistance to the aggressive environment of the human body.

Keywords: electronic component base, protective conformal coatings, inductive power transfer, implantable medical devices.

ПРОЕКТИРОВАНИЕ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ ИНДУКТИВНОГО ПИТАНИЯ ИМПЛАНТАТОВ С ПОВЫШЕННОЙ УСТОЙЧИВОСТЬЮ К ИЗМЕНЕНИЮ УСЛОВИЙ ЭКСПЛУАТАЦИИ

Данилов Арсений Анатольевич,

к.ф.-м.н доцент, доцент¹
arseny.danilov@gmail.com

¹ *Национальный исследовательский университет МИЭТ,
г. Зеленоград, Москва*

Аннотация. рассмотрены основные подходы к проектированию и математическому описанию работы систем индуктивного питания имплантатов с целью повышения устойчивости таких систем к изменению условий эксплуатации.

Ключевые слова: метод конечных элементов, численное интегрирование, силовая электроника, имплантируемые электронные системы.

Введение

Одним из наиболее важных направлений развития современной имплантируемой медицинской электроники является совершенствование систем индуктивного питания имплантатов, однако наличие ряда нерешённых проблем мешает широкому их внедрению [1]. Одной из таких проблем является изменение условий эксплуатации: изменение толщины слоя биологической ткани, разделяющей приёмную и передающую катушки; смещения передающей катушки относительно принимающей; изменения температуры тела. Это делает актуальной разработку методов проектирования и математического описания устойчивых к изменению условий эксплуатации систем.

Описание индуктивной связи произвольно ориентированных в пространстве катушек индуктивности

Ключевой физической величиной, описывающей связь пары LC-контуров, является взаимная индуктивность. Эта величина может быть получены на основе решений уравнений Максвелла численными методами, и такая возможность реализована в существующих прикладных пакетах физического моделирования.

Недостатком такого подхода является усложнение процедур проектирования при необходимости параметрического анализа и итерационного подбора конструктивных характеристик.

Альтернативой такому подходу может быть численное интегрирование так называемой формулы Неймана для вычисления взаимной индуктивности [3]. Использование численного интегрирования позволяет проводить параметрический анализ в процессе проектирования. В ряде случаев объём вычислений оказывается достаточно большим для того, чтобы оправданным было использование параллельных вычислений. Для решения этой проблемы был разработан алгоритм, использующий программно-аппаратную архитектуру CUDA [2].

Алгоритмизация проектирования систем индуктивного питания имплантатов с повышенной устойчивостью

На основе метода численного интегрирования была разработана группа алгоритмов для оптимизации конструкции катушечных пар в составе систем индуктивного питания имплантатов. Целью алгоритмов является получение конструкций катушек индуктивности, обеспечивающих заданную устойчивость системы (отклонение выходной мощности от номинального значения не превышает заданного) в заданном диапазоне смещений катушек индуктивности. В основу алгоритма положена итерационная процедура подбора конструктивных характеристик для достижения заданной устойчивости на основе вычисления взаимной индуктивности. Было показано, что разработанные алгоритмы позволяют обеспечить относительно высокую устойчивость систем: перепад мощности $\pm 10\%$ при боковых смещениях, достигающих величины радиуса принимающей катушки индуктивности [3].

Метод быстрой оценки тепловой безопасности

Для оценки тепловой безопасности обычно используют численные решения т.н. уравнения Пеннеса. Существенным недостатком такого подхода при проектировании является необходимость повторения расчётов для каждого нового варианта конструкции. Можно предложить метод быстрой оценки изменения характеристик нагрева при изменении конструкции на основе на линейной аппроксимации расчётов для двух вариантов конструкции. Было показано, что линейная аппроксимация в пределах физиологического диапазона температур (36...42 °C) позволяет оценивать ожидаемый нагрев тканей с ошибкой 0,2..0,5 °C [4].

Выводы

Итерационные процедуры проектирования требуют использования относительно простых математических моделей, позволяющих предсказывать изменение характеристик системы при изменении условий эксплуатации. Для систем индуктивного питания имплантатов такие модели могут быть построены либо на основе численного интегрирования формулы Неймана (для предсказания изменения мощностных характеристик) или на основе линейной аппроксимации расчётов на основе метода конечных элементов (для предсказания характеристик нагрева).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российской Федерации в лице Минобрнауки России в рамках крупного научного проекта по соглашению № 075-15-2024-555 от 25.04.2024 г.

Список использованных источников

1. Danilov, A.A., Mindubaev, E.A. & Selishchev, S.V. Methods for Compensation of Coil Misalignment in Systems for Inductive Transcutaneous Power Transfer to Implanted Medical Devices. *Biomed Eng* 51, 56–60 (2017).
2. Danilov A.A., Mindubaev E.A., Selishchev S.V. Design and Evaluation of an Inductive Powering Unit for Implantable Medical Devices Using GPU Computing // *Progress In Electromagnetics Research B*, 2016. – Vol. 69. – P. 61–73.
3. Danilov A.A., Aubakirov R.R., Mindubaev E.A., Gurov K.O., Telyshev D.V., Selshchev S.V. An Algorithm for the Computer Aided Design of Coil Couple for a Misalignment Tolerant Biomedical Inductive Powering Unit // *IEEE Access*, 2019. – Vo. 7. – P. 70755–70769.
4. Ryabchenko, E.V., Mindubaev, E.A. & Danilov, A.A. Rapid Assessment of the Thermal Safety of Low-Frequency Inductive Power Transfer Systems for Implantable Devices. *Biomed Eng* 56, 185–189 (2022).

DESIGN AND MATHEMATICAL MODELING OF ELECTRONIC INDUCTIVE POWER SUPPLY SYSTEMS FOR IMPLANTS WITH INCREASED STABILITY TO CHANGING OPERATING CONDITIONS

A.A. Danilov

Abstract. the main approaches to the design and mathematical description of the operation of inductive power supply systems for implants are considered in context of improving the tolerance of such systems to changing operating conditions.

Keywords: finite elements method, numerical integration, power electronics, implantable electronic systems.

ПРИМЕНЕНИЕ ЦИФРОВЫХ ДВОЙНИКОВ ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ НАДЁЖНОСТИ ИМПЛАНТИРУЕМЫХ МИКРОЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ

Миндубаев Эдуард Адипович,

к.т.н., ведущий инженер,

edmindubaev@gmail.com

НИУ МИЭТ, г.Москва, г.Зеленоград

Аннотация. В работе описываются результаты проектирования прототипа цифрового двойника системы индуктивной передачи энергии к имплантируемому медицинскому прибору. В основе цифрового двойника математическая модель для расчёта электрических характеристик системы, а также конечно-элементные модели для оценки нагрева и электрических характеристик катушек индуктивности.

Ключевые слова: цифровой двойник, имплантируемые медицинские приборы, индуктивная передача энергии.

Введение

Специфика применения медицинских имплантатов значительно ограничивает возможности мониторинга их состояния во время эксплуатации устройства. При этом неполадки в работе и отказ имплантируемой системы связаны с риском для жизни пациента. Это делает актуальным развитие методов прогнозирования состояния таких систем с целью повышения надёжности данных устройств.

Возможным решением задачи повышения надёжности имплантируемых медицинских устройств является переход к парадигме «цифровых двойников». В рамках данной парадигмы конкретному физическому объекту ставится в соответствие его цифровая копия, так называемый «цифровой двойник». Цифровой двойник является математической моделью, часть входных параметров которой определяется выходными данными сенсоров, подключенных к физическому объекту. В отдельных случаях, на основе данных, полученных при помощи цифрового двойника, оказывается управляющее воздействие на физической объект. Таким образом, формируется замкнутая система «физический объект – цифровой двойник».

Основной предпосылкой для развития технологии цифровых двойников является совершенствование методов и программ для моделирования процессов и систем, а также развитие вычислительной техники. Так, Национальное управление по аэронавтике и исследованию космического пространства (НАСА) США использует цифровые двойники для оценки и прогнозирования состояния космических летательных аппаратов [1]. До перехода к парадигме цифровых двойников для этой задачи использовались дублёры аппаратов, к которым прикладывались воздействия аналогичные тем, которым подвергался аппарат, находящийся в космосе.

Помимо космической отрасли, цифровые двойники применяются в промышленности, машиностроении, авиастроении. Цифровые двойники также находят применение в медицине. Известны работы, направленные на создание цифровых двойников органов, а также, например, цифровых двойников популяции, позволяющие оценить распространение вирусных заболеваний [2, 3]. В свою очередь, исследования, направленные на создание цифровых двойников имплантируемых медицинских приборов, можно считать малочисленными.

Проектирование прототипа цифрового двойника

В данной работе было выполнено проектирование прототипа цифрового двойника системы индуктивной передачи энергии. Основным отличием прототипа от полноценного цифрового двойника является то, что данные с сенсоров, которые поступают на вход цифрового двойника, являются синтетическими.

Основой цифрового двойника является математическая модель, при помощи которой выполняется расчёт электрических характеристик системы индуктивной передачи энергии. К таким характеристикам относятся, например, выходное напряжение, выходной ток, напряжение на отдельных элементах системы, а также фазовые характеристики электрической цепи. Рабочая частота моделируемой системы индуктивной передачи энергии – 300 кГц; выходная мощность системы может достигать 500 мВт, номинальное расстояние между передающей и принимающей катушками индуктивности составляет 15 мм.

Эквивалентные электрические характеристики ключевых реактивных компонент рассчитываются при помощи конечно-элементного моделирования. Модель является мультифизической

и позволяет учитывать влияние нагрева компонент на их электрические характеристики. Данные о нагреве оцениваются на основе показаний сенсоров. Дополнительно реализован модуль для расчёта временной деградации параметров электронных компонент.

Выводы

В работе выполнено проектирование прототипа цифрового двойника системы индуктивной передачи энергии. Определён функционал цифрового двойника. При помощи цифрового двойника возможна оценка электрических характеристик системы. Модель учитывает влияние нагрева и временной деградации ключевых электронных компонентов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-29-00649.

Список использованных источников

1. Tuegel E.J., Ingrassia A.R., Eason T.G., Spottswood S.M. Reengineering Aircraft Structural Life Prediction Using a Digital Twin // International Journal of Aerospace Engineering. 2011. Vol. 2011. Art. ID 154798.
2. Viola F., Del Corso G., De Paulis R. GPU accelerated digital twins of the human heart open new routes for cardiovascular research // Scientific Reports. 2023. Vol. 13.
3. Khan S., Ullah S., Khan H.U., Rehman I.U. Digital-Twins-Based Internet of Robotic Things for Remote Health Monitoring of COVID-19 Patients // IEEE Internet of Things Journal. 2023. Vol. 10. № 18.

APPLICATION OF DIGITAL TWINS TO THE IMPLANTABLE MICROELECTRONIC SYSTEMS RELIABILITY ISSUE

E.A. Mindubaev

Abstract. The paper describes the results of designing a prototype of a digital twin of an inductive energy transfer system for an implantable medical device. The digital twin is based on a mathematical model for calculating the electrical characteristics of the system, as well as finite element models for assessing the heating and electrical characteristics of the inductance coils.

Keywords: digital twin, implantable medical devices, inductive power transfer.

ПРОБЛЕМЫ СОЗДАНИЯ СИНТЕЗАТОРА САМОСИНХРОННЫХ СХЕМ ПО СИНХРОННОМУ ОПИСАНИЮ

Плеханов Леонид Петрович,

к.т.н., старший научный сотрудник¹,

lplekhanov@inbox.ru

¹*ФИЦ ИУ РАН, г. Москва*

Аннотация. В работе описываются особенности и проблемы создания автоматического синтезатора самосинхронных схем по синхронному описанию. Синтезатор обеспечивает для схем уникальные свойства поведения и надежности.

Ключевые слова: самосинхронные схемы; синтез самосинхронных схем.

Введение

Самосинхронные схемы далее обозначаются как СС-схемы.

В предлагаемом методе синтезируются СС-схемы исходя из условия, что задержки в цепях после разветвления не превышают задержки подключаемых элементов.

СС-схемы такого типа имеют уникальные свойства поведения и надежности: полное отсутствие состязаний и отказобезопасность (остановка работы при появлении выходных константных неисправностей типа залипаний на 0 или 1). Эти свойства гарантируются во всем диапазоне физической работоспособности транзисторных структур, то есть в максимально возможных пределах по напряжению питания и температуре.

Схемы класса ВД не имеют основного преимущества СС-схем – способности к обнаружению константных неисправностей, а также обеспечивают меньший диапазон нечувствительности к задержкам. Далее схемы этого класса рассматриваться не будут.

Существует ряд зарубежных методов автоматизированного проектирования СС-схем.

Основной недостаток этих методов – неприспособленность к проектированию схем в промышленных масштабах, что выражается в следующем:

- отсутствие какой-либо оптимизации получаемых схем;
- применение собственных языков описания, исходных описаний в виде графов (например, сетей Петри) [1–3], не используемых

в промышленных разработках (в настоящее время массовое проектирование схем проводится на языках описания аппаратуры Verilog и VHDL);

– методы, основанные на исходном синхронном описании, например, [4, 5], не обнаруживают константные неисправности, а также обеспечивают меньший диапазон нечувствительности к задержкам;

– отсутствие иерархического синтеза;

– в большинстве методов отсутствие привязки к конкретной библиотеке элементов, что делает эти методы незаконченными.

Проблемы создания СС-схем

Для разработки СС-схем необходимо применение специальных математических методов [6], подготовки библиотечных элементов и выполнение ряда других условий.

Предлагается метод создания автоматического синтезатора для СС-схем, пригодный для промышленного проектирования.

Исходное описание схемы – описание корректной несамосинхронной схемы на языке Verilog. Это описание может быть иерархическим и содержать операторы любого уровня: поведенческого, регистровых передач, логических функций

На первом этапе синтеза используется система открытого доступа Yosys, которая преобразует исходное описание в форму, удобную для дальнейшего синтеза.

Синтез проводится с минимизацией затрат в транзисторах и по возможности с улучшением быстродействия. Выполняются специфические для синтеза СС-схем действия: разбиение исходной схемы на каскады, преобразование исходных функций в СС-функции с оптимизацией [7].

Синтез элементов и регистров памяти проводится с учетом ранее выполненных работ [8–10].

На последних этапах синтеза создается индикаторная часть текущего модуля и другие необходимые действия. Иерархическая исходная структура синтезируется рекурсивно.

Выводы

Предложен метод создания автоматического синтезатора для СС-схем по синхронному описанию, пригодный для промышленного проектирования.

Синтезатор конструирует иерархическую СС-схему, оптимизированную по затратам в транзисторах и быстродействию.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Edwards D., Bardsley A., Jani L., Plana L., Toms W. Balsa: A Tutorial Guide. The University of Manchester, Manchester, U.K., 2006.
2. Cortadella J., Kishinevsky M., Kondratyev A., Lavagno L., Yakovlev A. Petrify: a tool for manipulating concurrent specifications and synthesis of asynchronous controllers // Conference on Design of Circuits and Integrated Systems. DCIS96, 1996, pp. 205–210.
3. Poliakov I., Sokolov D., Mokhov A. Workcraft: a static data flow structure editing, visualisation and analysis tool. https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-540-73094-1_30.
4. Oliveira D.L., Duarte G.C., Batista G.C., Silva D.A., Romano L. Synthesis of Asynchronous State Machines from Synchronous Specifications. 2020 IEEE 11th Latin American Symposium on Circuits & Systems (LASCAS), San Jose, Costa Rica, 2020, pp. 1-4, doi: 10.1109/LASCAS45839.2020.9069010.
5. Semba S., Saito H. RTL Conversion Method From Pipelined Synchronous RTL Models Into Asynchronous Ones. IEEE Access, vol. 10, pp. 28949-28964, 2022, doi: 10.1109/ACCESS.2022.3158487.
6. Автоматное управление асинхронными процессами в ЭВМ и дискретных системах / Под ред. В.И. Варшавского. – М.: Наука, 1986. 400 с.
7. Плеханов Л.П. Основы самосинхронных электронных схем. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2013. 208 с.
8. Yury Stepchenkov, Yuri Diachenko, Dmitry Khilko, Nikolai Morozov, Sergey Berstnev, Dmitri Stepchenkov. Self-Timed Trigger Synthesis with Composite Write-Enable Input // 2024 IEEE Conference of Russian Young Researchers in Electrical and Electronic Engineering (ElConRus) St. Petersburg, Moscow, Russia, January 29–31, 2024. – P. 7– 82.
9. Dmitry Khilko, Yury Stepchenkov, Georgy Orlov, Artem Grigoriev, Yuri Diachenko. Desynchronization of a synchronous circuit to synthesize self-timed circuit // 2024 IEEE Conference of Russian Young Researchers in Electrical and Electronic Engineering (ElConRus) St. Petersburg, Moscow, Russia, January 29-31, 2024. – P. 45–49.
10. Igor Sokolov, Yuri Stepchenkov, Yuri Diachenko. Synthesis of Self-Timed Circuits with Memory / 2024 International Russian Smart Industry Conference (SmartIndustryCon), 25–29 March 2024. – pp. 225 – 230. doi. 10.1109/SmartIndustry-Con61328.2024.10516224.

PROBLEMS OF CREATING A SYNTHESIZER FOR SELF-TIMED CIRCUITS FROM SYNCHRONOUS DESCRIPTION

L.P. Plekhanov

Abstract. The paper describes the features and problems of creating an automatic synthesizer of self-timed circuits from synchronous description. The synthesizer provides unique features of behavior and reliability.

Keywords: self-timed circuits, synthesis of self-timed circuits.

ОСОБЕННОСТИ АРХИТЕКТУР НЕЙРО- И НЕЙРОМОРФНЫХ ПРОЦЕССОРОВ

Тельминов Олег Александрович,

к.т.н., начальник отдела¹,

otelminov@niime.ru

¹АО «НИИМЭ», г. Москва, Зеленоград

Аннотация. в работе рассмотрены архитектуры аппаратных средств для реализации формальных и спайковых нейронных сетей.

Ключевые слова: нейропроцессоры, нейроморфные процессоры, мемристорные матрицы.

Центральные и нейропроцессоры

Технологии искусственного интеллекта можно разделить на экспертные системы, методы машинного обучения без применения нейросетей и с их применением. Масштабирование с помощью параллельного выполнения операций возможно именно для нейросетей благодаря их архитектуре. В зависимости от применяемой модели нейрона — формальной или спайковой, — используются различные фреймворки, программные среды для разработки, обучения и запуска нейросетей. Рассматривается набор характеристик и возможных тестов для сравнения нейропроцессоров [1].

Архитектуры нейропроцессоров состоят из «дирижера» — центрального процессора и сопроцессоров для эффективного расчета нейросетей. Выполняется сравнение архитектур ARM и RISC-V, а также архитектур популярных нейропроцессоров фирм NVIDIA, Rockchip (RK3588), а также отечественных разработок фирм НТЦ «Модуль», НПЦ «ЭЛВИС» и НТЦ «ХайТэк».

Рассматривается возможность изготовления нейропроцессоров с помощью методов печатной электроники как альтернативы общепринятой КМОП-технологии [2].

Нейроморфные процессоры

К отличительным характеристикам нейроморфных процессоров относятся: (1) архитектура, отличная от архитектуры фон Неймана; (2) новые способы кодирования сигналов; (3) реализация на элементной базе на новых физических принципах. Такой процессор должен иметь хотя бы одну из перечисленных характеристик.

Рассматриваются зарубежные нейроморфные процессоры, включая TrueNorth, Tianjic, Loihi 2 и другие, а также отечественный «Алтай».

Широкое применение нейроморфных процессоров на элементной базе на новых физических принципах — мемристорах, ограничены достигнутыми показателями последних: временем сохранения резистивного состояния, выносливостью к циклическим переключениям, пластичностью, напряжением и временем переключения, напряжением и током чтения, а также другими параметрами. Рассмотрены различные схемотехнические решения, компенсирующие указанные и другие ограничения при реализации матрично-векторного умножения с помощью мемристорных матриц. Приведены возможные технологические решения по интеграции мемристорных матриц и управляющих КМОП-схем.

Список использованных источников

1. На пути к реализации высокопроизводительных вычислений в памяти на основе мемристорной электронной компонентной базы / А.Н. Михайлов, Е.Г. Грязнов, В.И. Лукоянов, М.Н. Коряжкина, И.А. Борданов, С.А. Щаников, О.А. Тельминов, М.В. Иванченко, В.Б. Казанцев // Физмат. – 2023. – Т. 1, № 1. – С. 42–64. – DOI 10.56304/S2949609823010021. – EDN HTSRZQ.

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

FEATURES OF NEURO- AND NEUROMORPHIC PROCESSOR ARCHITECTURES

O.A. Telminov

Abstract. The paper considers hardware architectures for the implementation of formal and spike neural networks.

Keywords: neuro-accelerators, neuromorphic processors, memristor matrices.

МЕТОД ДЕСИНХРОНИЗАЦИИ ДЛЯ СИНТЕЗА САМОСИНХРОННЫХ СХЕМ

Хилько Дмитрий Владимирович,
к.т.н., старший научный сотрудник¹,
dhilko@yandex.ru

Орлов Георгий Александрович,
младший научный сотрудник¹,
orlov.jaja@gmail.com

Григорьев Артем Андреевич,
инженер 3 кат.¹,
ar.grigor.ev@yandex.ru

Апполонов Георгий Сергеевич,
инженер 3 кат.¹,
geral234256@gmail.com

¹ФИЦ ИУ РАН, г.Москва

Аннотация. В работе приводится метод десинхронизации, который позволяет автоматизировать один из этапов синтеза самосинхронной схемы на основе ее исходного синхронного поведенческого описания на языке Verilog.

Ключевые слова: десинхронизация, самосинхронная схема, логический синтез.

Введение

Самосинхронные схемы (или СС-схемы) являются перспективной альтернативой синхронных, так как не используют глобальный тактовый сигнал и работают на основе запрос-ответного механизма и обязательной индикации окончания переключений всех элементов. Преимуществами СС-схемы являются: максимально возможный диапазон работоспособности; отсутствие аппаратных и энергетических расходов для реализации "тактового дерева" и локализации неисправностей за счет механизма индикации завершения переходных процессов. Перечисленные свойства обуславливают высокую надёжность самосинхронных изделий [1, 2].

Следует отметить три обстоятельства, препятствующие более широкому использованию самосинхронной парадигмы в схемотехнике: 1) избыточность аппаратных затрат; 2) недостаточный спектр отработанных схемотехнических решений; 3) отсутствие

необходимого спектра средств САПР, обеспечивающих эффективную разработку схем. Для решения указанных проблем в ФИЦ ИУ РАН были разработаны: методические подходы, библиотеки СС-элементов и прототипы устройств, а также набор программных средств. Единственным оставшимся препятствием для полноценного проектирования СС-изделий является отсутствие эффективной системы синтеза, не требующей от разработчика глубокого знания специфики схем данного класса.

Метод десинхронизации синхронного описания

К настоящему времени процедура десинхронизации применялась при синтезе асинхронных схем (СС-схемы являются их подклассом). В качестве основного подхода к десинхронизации в асинхронных схемах используется четырех фазовый протокол «рукопожатия». [3 4]. Реализуется данный протокол путем построения Doubly Latched Asynchronous Pipeline (DLAP) [5, 6]. В работе [7] представлено описание методологии и маршрута синтеза СС-схем из исходного синхронного поведенческого описания на языке описания аппаратуры Verilog. Процедура десинхронизации в рамках данного маршрута предшествует этапу СС-кодирования информационных сигналов схемы и является одним из этапов процесса построения индикаторной схемы. Эта процедура должна заменить глобальные и локальные «деревья» тактовых сигналов сетью сигналов управления, формируемых на основе индикаторных выходов устройств синтезируемой схемы и обеспечивающих бесконфликтное взаимодействие составных частей синтезируемой схемы на основе запрос-ответных отношений между ними.

Для реализации данной процедуры в рамках статьи предлагается метод десинхронизации, включающий в себя шесть этапов. На первом этапе осуществляется синтез исходного синхронного описания средствами свободно распространяемой системы Yosys. Промежуточные результаты синтеза извлекаются в виде описания на специальном языке Register transfer level intermediate language (RTLIL). На втором этапе осуществляется преобразование RTLIL-описания в граф соединений между базовыми ячейками. На третьем этапе с использованием различных алгоритмов на графах осуществляется определение стадий конвейера в виде множества подграфов. На четвертом этапе осуществляется десинхронизация каждой стадии конвейера путем замены исходных управляющих

сигналов на набор управляющих сигналов запрос-ответного взаимодействия и специальных гистерезисных триггеров (Г-триггер). На пятом этапе из сигналов и Г-триггеров формируется схема управления конвейером. На шестом этапе полученный граф преобразуется в RTLIL и загружается в Yosys для дальнейшего синтеза.

Выводы

В работе предложен метод десинхронизации синхронного описания для дальнейшего синтеза СС-схемы. Данный метод отличается от существующих решений тем, что позволяет реализовать самосинхронный конвейер вместо DLAP, а также принципиально другую схему управления, основанную на использовании самосинхронного кодирования и Г-триггеров.

Список использованных источников

1. Соколов И.А., Степченков Ю.А., Рождественский Ю.В., Дьяченко Ю.Г. Приближенная оценка эффективности синхронной и самосинхронной методологий в задачах проектирования сбоеустойчивых вычислительно-управляющих систем // Автоматика и Телемеханика, 2022, № 2, С. 122–132.

2. А.А. Зацаринный, Ю.А. Степченков, Ю.Г. Дьяченко, Д.В. Хилько, Г.А. Орлов, Д.Ю. Дьяченко. Сбоеустойчивые самосинхронные счетчики // Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. МММЭК–2023. 23–25 октября 2023 г., Москва, Россия. Материалы V Международной конференции. (сборник тезисов). – Москва: МАКС Пресс, 2023. С. 167–170. DOI: 10.31857/S0005231022020088.

3. J. Cortadella, A. Kondratyev, L. Lavagno and C.P. Sotiriou, “Desynchronization: Synthesis of Asynchronous Circuits From Synchronous Specifications,” in IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems, vol. 25, no. 10, pp. 1904–1921, Oct. 2006, doi: 10.1109/TCAD.2005.860958.

4. D. L. Oliveira, G. C. Duarte, G. C. Batista, D. A. Silva and L. Romano, “Synthesis of Asynchronous State Machines from Synchronous Specifications,” 2020 IEEE 11th Latin American Symposium on Circuits & Systems (LASCAS), San Jose, Costa Rica, 2020, pp. 1–4, doi: 10.1109/LASCAS45839.2020.9069010.

5. S. Semba and H. Saito, “RTL Conversion Method From Pipelined Synchronous RTL Models Into Asynchronous Ones,” in IEEE Access, vol. 10, pp. 28949–28964, 2022, doi: 10.1109/ACCESS.2022.3158487.

6. Simlastik, M., Stopjakova, V. (2009). Automated Synchronous-to-Asynchronous Circuits Conversion: A Survey. In: Svensson, L., Monteiro, J. (eds) Integrated Circuit and System Design. Power and Timing Modeling, Optimization and Simulation. PATMOS 2008. Lecture Notes in Computer Science, vol 5349. Springer, Berlin, Heidelberg. https://doi.org/10.1007/978-3-540-95948-9_35.

7. Зацаринный А.А., Степченков Ю.А., Дьяченко Ю.Г., Морозов Н.В., Степченков Д.Ю. Автоматизация синтеза самосинхронных схем // Системы высокой доступности. т. 19, № 3, С. 48–56, 2023 г. DOI: 10.18127/j20729472-202303-04.

DESYNCHORNIZATION METHOD FOR SELF-TIMED CIRCUITS SYNTHESIS

D.V. Khilko, G.A. Orlov, A.A. Grigoriev, G.S. Appolonov

Abstract. The paper covers a desynchronization method that allows automating one of the stages of synthesis of a self-timed circuit based on its original synchronous behavioral description in the Verilog language.

Keywords: desynchronization, self-timed circuits, logic synthesis.

8. Н

МЕТОДЫ

МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

В ФОТОНИКЕ

РАСЧЕТ ВАРИАЦИИ ПОКАЗАТЕЛЯ ПРЕЛОМЛЕНИЯ В Ge/SiGe ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ ДЛЯ СОЗДАНИЯ ОПТИЧЕСКИХ МОДУЛЯТОРОВ

*Панфилов Андрей Сергеевич
Хазанова Софья Владиславовна
Бобров Александр Игоревич
Горшков Алексей Павлович
Нежданов Алексей Владимирович*

¹ННГУ им. Лобачевского, г. Нижний Новгород

Аннотация. В работе выполняется расчет показателя преломления кремний-германиевой гетероструктуры, которую может быть использована в качестве активной среды для создания модулятора по схеме Маха–Цендера.

Ключевые слова: модулятор, интегральная схема, гетероструктура, эффект Штарка.

Введение

Развитие оптической связи требует создания всё более совершенных фотонных интегральных схем. Для соединений центров обработки данных наиболее широко используется архитектура модулятора Маха–Цендера (ММЦ), при этом ММЦ предназначен для модуляции как синфазной, так и квадратурной компоненты сигнала. Принцип действия этого устройства основан на вариации коэффициента преломления под воздействием электрического поля на телекоммуникационной длине волны. Поскольку изменение коэффициента преломления напрямую связано с коэффициентом поглощения, для реализации данных эффектов могут быть использованы полупроводниковые массивы квантовых ям как на основе материалов с прямой запрещенной зоной III – V, так и материалов группы IV. Вариация коэффициента поглощения в гетероструктурах на основе Ge/SiGe при воздействии внешнего напряжения смещения обусловлена квантово-размерным эффектом Штарка.

Моделирование изменения показателя преломления

Несмотря на то, что Ge в целом является непрямозонным полупроводником, с помощью деформации и легирования гетерослоев происходит модификация зонной диаграммы все гетеро-

системы. При этом слои германия, окруженные напряженными слоями SiGe образуют квантовые ямы с гетеропереходами первого рода подобно материалам III–V, также становится возможными поглощение при прямых межзонных переходах в Γ долине [1]. В ряде работ сообщалось об эффективном изменении показателя преломления (около $1,3 \times 10^{-3}$) с помощью создания множественных Ge/SiGe квантовых ям. При этом электрооптические характеристики могут быть заметно улучшены за счет создания структур с туннельно-связанными квантовыми ямами (ТСКЯ). Так, в [2] продемонстрирована работа волноводного модулятора с асимметричными Ge/SiGe ТСКЯ, который может быть реализован как для модуляции интенсивности, так и фазовой модуляции при низком напряжении смещения в кремниевой фотонной интеграции. В данной работе с помощью численного метода на основе конечных разностей было решено уравнение Шредингера, оплучены энергии размерного квантования, огибающие волновые функции для трех различных дизайнов гетероструктур. Результаты расчетов демонстрируют заметное перераспределение электронной плотности в системах ТСКЯ, обусловленное явлением квантово-размерного эффекта Штарка. На основе рассчитанных энергий размерного квантования и огибающих волновых функций получена мнимая часть диэлектрической проницаемости как результат сложения межзонного и экситонного вкладов поглощения. 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, получены спектры изменения показателя преломления под действием обратного смещения на длине волны 1550 нм.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект № FSWR-2022-0007.

Выводы

Результаты расчётов показывают заметное изменение показателя преломления в требуемом диапазоне длин волн (1,55 мкм), что позволяет использовать данные гетероструктуры в качестве электрооптически активной среды модулятора по схеме Маха–Цендера.

Список использованных источников

1. K. Guilloy, N. Pauc, A. Gassenq, et al., ACS Photonics, v. 3, p. 1907, 2016.
2. Yi Zhang, Jianfeng Gao, Senbiao Qin et al, Nanophotonics, 10(6), 1765, 2021.

CALCULATION OF REFRACTIVE INDEX VARIATION IN GE/SIGE HETEROSTRUCTURES FOR CREATING OPTICAL MODULATORS

***Khazanova S.V., Panfilov A.S., Bobrov A.I., Gorshkov A.P.,
Nezhdanov A.V.***

Abstract. In this paper refractive index is calculated for a silicon-germanium heterostructure, which can be used as an active medium for creating a modulator using the Mach-Zehnder scheme.

УДК 535.341:004.94

<https://doi.org/10.29003/m4293.MMMSEC-2024/178-185>

ОЦЕНКА НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКОГО ОТКЛИКА ПЕНТА(ХЛОР)ЦИКЛОТРИФОСФАЗЕНЗАМЕЩЕННЫХ МОНОФТАЛОЦИАНИНОВ Zn, Cu И Co НА ОСНОВЕ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ МОДЕЛЕЙ

Савельев Михаил Сергеевич,

*к.ф.-м.н., доцент Института БМС^{1, 2},
savelyev@bms.zone*

Василевский Павел Николаевич,
аспирант¹, pavelvasilevs@yandex.ru

Герасименко Александр Юрьевич,
*д.т.н., доцент, профессор Института БМС^{1, 2},
gerasimenko@bms.zone*

Толбин Александр Юрьевич,
*д.х.н., профессор РАН, профессор Института БМС³
tolbin@inbox.ru*

¹МИЭТ, г. Зеленоград, г. Москва

²Сеченовский университет, г. Москва

³ИФАВ ФИЦ ПХФ и МХ РАН, г. Черногловка

Аннотация. Поиск подходящих нелинейных оптических материалов является затруднительным из-за необходимости проведения большого числа дорогостоящих исследований. Для сокращения числа

экспериментов при определении подходящего фталоцианинового комплекса в качестве оптического ограничителя был использован новейший корреляционный метод *CORRELATO*. Для апробации был использован ряд низкосимметричных пента(хлор)циклотрифосфазензамещенных монофталоцианинов. Пониженная симметрия молекул позволила получить эффективные среды для ограничителей, обеспечивающие ослабление наносекундного лазерного излучения до 20 крат в зависимости от центрального иона металла. В корреляциях участвовали значения дипольного момента, поляризуемости и гиперполяризуемости, полученные квантово-химическим методом DFT, а также экспериментальные значения из лазерных экспериментов. Таким способом теория была сопоставлена с экспериментом. Оценка эффективности материала ограничителей производилась на основе дескрипторов, выведенных в аналитическом виде.

Ключевые слова: *CORRELATO*, квантовая химия, оптическое ограничение, фталоцианины, нелинейные оптические свойства.

Введение

Для развития пассивных средств лазерной защиты необходимы нелинейно-оптические материалы, обладающие большим поглощением высокоинтенсивного излучения. Поиск таких сред осложнён необходимостью использования дорогостоящего оборудования и проведением большого числа исследований для каждого образца. Для облегчения этой задачи в настоящем исследовании был использован корреляционный метод *CORRELATO*, основанный на статистическом поиске соотношений различных данных – экспериментальных и/или теоретических – с построением прогностических моделей и выводом всех соотношений в аналитическом виде [1–3]. Данный подход позволил найти серию корреляций между теоретически рассчитанными параметрами (дипольный момент, поляризуемость и гиперполяризуемость – квантовая химия) и параметрами, вычисленными на основе экспериментальных данных (лазерные эксперименты).

В результате из серии низкосимметричных пента(хлор)циклотрифосфазензамещенных монофталоцианинов NH (**1a**), Mg (**1b**), Zn (**1c**), Cu (**1d**), Ni (**1e**) и Co (**1f**) (рис. 1) были выбраны красители **1c,d,f** для проведения исследований на стенде. Целью явился выбор эффективных нелинейных абсорберов для достижения ослабления излучения при превышении определённого порогового значения (порог ограничения) за время, меньшее длительности импульса (скорость срабатывания).

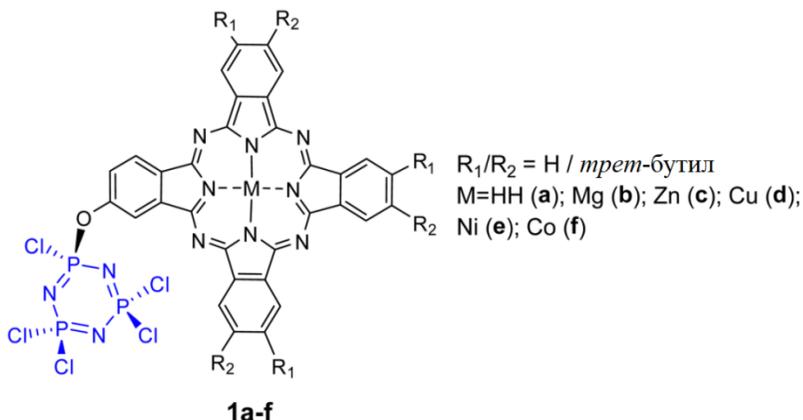


Рис. 1. Химическая структура пента(хлор)циклотрифосфазензамещенных монофталоцианинов **1a-f**

Необходимо обеспечить достаточно сильное ослабление опасного излучения (коэффициент нелинейного поглощения), чтобы не вызывать необратимое повреждение глаз [4] или светочувствительных детекторов [5], но при этом незначительно поглощать полезный сигнал (коэффициент линейного пропускания) для сохранения работоспособности прибора на рабочей длине волны. В настоящей работе проведена апробация результатов прогнозирования на серии низкосимметричных фталоцианинов **1a-f**.

Квантово-химические расчеты

Оптимизация целевых структур пента(хлор)циклотрифосфазензамещенных низкосимметричных монофталоцианинов **1a-f**, в которых *трет*-бутильные заместители заменены атомами водорода для увеличения скорости расчетов, была выполнена методом теории функционала плотности (DFT). Устойчивость геометрии оценивалась по решению специальной задачи – вычисление матриц Гессе, в которых отсутствовали мнимые частоты, что указывает на получение истинных минимумов энергии. Лазерное излучение может быть представлено в виде электрических компонент, что позволяет использовать расчёты DFT путем возмущения основного состояния молекул статическими электрическими полями. С использованием схемы ограниченного поля (FF) для оптимизированных структур производился расчет статических поляризуемостей α_0 и первых гиперполяризуемостей β_0 , а также значений дипольного момента μ (таблица 1). Расчеты выполнены

в GAMESS-US. Все квантово-химические расчеты (газовая фаза) проводились на кластере Intel/Linux (Межведомственный суперкомпьютерный центр РАН – <https://www.jscs.ru>).

Таблица 1

Параметры структур **1a-f** рассчитанные методом FF-DFT

Соединение	Дипольный момент (μ), Д	Поляризуемость (α_0), Å ³	Первая гиперполяризуемость, ($\beta_0 \times 10^{-29}$), esu
1a	3,63	68,0	2,2
1b	3,53	69,0	2,8
1c	3,52	68,7	2,2
1d	3,47	68,4	2,4
1e	3,44	67,9	2,6
1f	3,51	67,8	2,9

Необходимо добиться значения коэффициента ослабления свыше 10. Воспользовавшись системой уравнений [3], которая связывает этот параметр с поляризуемостью, гиперполяризуемостью и дипольным моментом, проведем сортировку красителей:

$$\begin{cases} k_A \geq \alpha^3 \\ \frac{\alpha_0}{\mu^2 \beta_0} \geq \alpha \end{cases} \quad (1)$$

В соответствии с системой неравенств (1) наибольшая величина рассчитанного значения коэффициента ослабления $k_A = 16$ может быть получена в случае образца **1c** для линейного пропускания свыше 60%. При этом значение линейного коэффициента поглощения должно находиться в пределах $\alpha \leq 2,5 \text{ см}^{-1}$, откуда допустимая толщина оптического слоя должна составлять 0,21 см. Нелинейный коэффициент поглощения β найдем из выражения [3]:

$$\beta \geq 100\alpha^3. \quad (2)$$

В результате такой оценки значение нелинейного коэффициента поглощения должно быть больше $1600 \text{ см} \cdot \text{ГВт}^{-1}$. Наименьшим значением коэффициента ослабления, согласно таким расчетам, обладает образец **1f**, а **1d** занимает промежуточную позицию между ними. Структуры фталоцианинов **1c**, **1d** и **1f** выбраны для апробации результатов моделирования.

Результаты

Апробация производилась по результатам исследований трех образцов на основе оптического отклика модельного лимитера (рисунок 2а,б,в), а также метода Z-сканирования с открытой апертурой [6] (рис. 2г,д,е).

На основе полученных закономерностей (рисунок 2) определены характеристические параметры оптического лимитирования, которые приведены в табл. 2.

Таблица 2

Параметры оптического ограничения

Образец	Линейный коэффициент поглощения α , см ⁻¹	Нелинейный коэффициент поглощения β , см·ГВт ⁻¹	Пороговая экспозиция лазера, F_n , Дж/см ²	Коэффициент ослабления, k_A , отн. ед.	Динамический диапазон, DR, отн. ед.	Дескриптор, σ_1 , отн. ед.	Дескриптор, σ_2 , отн. ед.
1с	2,1	1200	0,09	20,5	550	-3,72	500
1д	3,0	630	0,06	12,9	630	-3,75	215
1ф	1,6	1550	0,73	7,2	80	-3,60	190

Кривые оптического ограничения связывают интенсивность прошедшего излучения с падающей в соответствии с аналитическим решением уравнения переноса излучения для случая луча с плоской вершиной [7]:

$$T = \exp \left(\left(\frac{\beta}{\tau} \left(F_n - \frac{U_0}{\pi w_0^2} w_n \right) - \alpha \right) d \right). \quad (3)$$

где α – линейный коэффициент поглощения, β – нелинейный коэффициент поглощения, T – пропускание, F_n – пороговая экспозиция лазерного излучения, U_0 – полная энергия одиночного падающая импульса, w_n – нормированный радиус, который для случая кривой оптического ограничения равен нулю. В случае Z-сканирования с закрытой апертурой нормированный радиус определяется из соотношения:

$$w_n = \sqrt{1 + \frac{z^2}{z_0^2}}. \quad (4)$$

где z – смещение образца относительно фокуса линзы, z_0 – длина Рэлея.

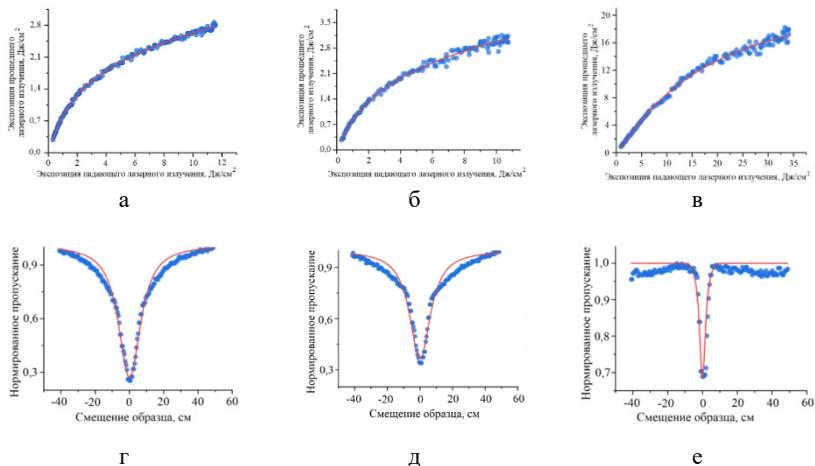


Рис. 2. Экспериментальные кривые для комплексов фталоцианинов в тетрагидрофуране: оптического ограничения (а – 1с, б – 1д, в – 1ф) и Z-сканы (г – 1с, д – 1д, е – 1ф)

Значения дескрипторов σ_1 и σ_2 определены в соответствии с методикой, описанной в работе [2, 7]:

$$\begin{cases} \sigma_1 = \lg(\alpha^{-2}\beta^{-1}) \\ \sigma_2 = \frac{k_A\beta}{DR \cdot F_{II}} \end{cases} \quad (5)$$

В соответствии с граничным условием усиление эффективно-сти оптического ограничения происходит при $\sigma_1 \rightarrow -\infty$ и $\sigma_2 \rightarrow +\infty$. Низкосимметричный пента(хлор)циклотрифосфазензамещенный монофталоцианин **1с** обладает наилучшей совокупностью нелинейных оптических параметров, он характеризуется значениями дескрипторов $\sigma_1 = -3,7$ и $\sigma_2 = 500$.

Для полученных данных Z-сканирования с открытой апертурой определены значения оптических параметров. Для образца **1с** (рисунок 2г) значение нелинейного коэффициента поглощения $\beta = 1200$ см/ГВт и пороговая экспозиция лазерного излучения $F_{II} = 0,09$ Дж/см². В случае комплекса **1ф** (рисунок 2е) соответствующее значение составило $\beta = 1500$ см/ГВт, но пороговая экспозиция значительно выше $F_{II} = 0,73$ Дж/см².

Заключение

В случае цинкового фталоцианинового комплекса **1c** достигается наибольшее значение коэффициента ослабления 20,5, что совпадает с результатами прогнозирования методом *CORRELATO*. Анализ эффективности с использованием дескрипторов также указывает на преимущество использования данного фталоцианина в качестве ограничителя лазерного излучения. Образец **1d** занимает промежуточную позицию между **1c** и **1f**, что также соответствует нашему теоретическому моделированию.

Выводы

Квантово-химическое моделирование для известных структур фталоцианинов позволило определить набор необходимых параметров: поляризуемость, первую гиперполяризуемость и значение дипольного момента. По этим значениям в соответствии с корреляционными моделями, полученными методом *CORRELATO*, были определены параметры среды, обеспечивающие достижение необходимого нелинейного оптического отклика, что выражается на примере требуемых значений коэффициента ослабления. При проведении экспериментов всегда возникают вопросы по выбору толщины слоя и концентрации красителя, и данный подбор значительно упрощается с использованием описанной методики. При этом для учета совокупности параметров нелинейной-оптической среды также удобно использовать дескрипторы, которые позволяют определять эффективность материала ограничителя.

Экспериментальные исследования нелинейных оптических параметров фталоцианинов выполнены в рамках государственного задания Минобрнауки России (Проект FSMR-2024-0003). Квантово-химические расчеты DFT и анализ с использованием корреляционной модели CORRELATO произведены при поддержке Российского научного фонда (21-73-20016).

Список использованных источников

1. Tolbin A.Y. Establishing Correlations between Unlimited Datasets, Certificate of State Registration of Computer Program – Correlato No 2022613888, 2022.
2. Tolbin A.Yu. An efficient method of searching for correlations between unlimited datasets to provide forecasting models // Mendeleev Commun., 2023. Vol. 33, pp. 419-421.

3. Tolbin A.Y. et al. Conditions for the efficiency of optical limiting based on experiment and quantum chemical calculations // Phys. Chem. Chem. Phys., 2024. Vol. 26, pp. 8965–8972.

4. Seifert. E. et al. Investigations on Retinal Pigment Epithelial Damage at Laser Irradiation in the Lower Microsecond Time Regime // Invest. Ophthalmol Vis Sci., 2021. Vol. 62, pp. 1–11.

5. Westgate C. Visible-Band Nanosecond Pulsed Laser Damage Thresholds of Silicon 2D Imaging Arrays // Sensors, 2022. Vol. 22, pp. 2526-1–2526-12.

6. Sheik-Bahae M. et al. Sensitive Measurement of Optical Nonlinearities Using a Single Beam // IEEE Journal of quantum electronics, 1990. Vol. 26, pp 760–769.

7. Савельев М.С. и др. Нелинейное оптическое ограничение мощности лазерного излучения в ультрафиолетовом и видимом диапазонах бис-фталоцианинами clamshell типа // Журнал технической физики, 2024. Т. 94, №. 3, pp. 443–451.

ESTIMATION OF THE NONLINEAR OPTICAL RESPONSE OF PENTA(CHLORINE)CYCLOTRIPHOSPHAZENE OF SUBSTITUTED MONOPHTHALOCYANINES Zn Cu AND Co BASED ON CORRELATION MODEL

*M.S. Savelyev, P.N. Vasilevsky, A.Yu. Gerasimenko,
A.Yu. Tolbin*

Abstract. The search for suitable nonlinear optical materials is difficult due to the need for a large number of expensive studies. The use of the Correlator program is proposed to reduce the number of experiments in determining the best phthalocyanine complex as a optical limiter. A number of low-symmetry penta(chloro)cyclotriphosphazenesubstituted monophtalocyanines were used for testing. The reduced symmetry of the molecules made it possible to obtain effective media for limiters that provide attenuation of nanosecond laser radiation up to 20 times, depending on the central metal ion. The correlations involved the values of the dipole moment, polarizability and hyperpolarizability obtained by the DFT quantum chemical method, as well as experimental values from laser experiments. The effectiveness of the limiter material was evaluated on the basis of descriptors derived analytically.

Keywords: CORRELATO, quantum chemistry, optical limitation, phthalocyanines, nonlinear optical properties.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК СОЛНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ НА ОСНОВЕ ГЕТЕРОПЕРЕХОДА ZnO/CuO

Саенко Александр Викторович,

к.т.н., доцент,

avsauenko@sfnedu.ru

Жейц Виталий Владимирович,

лаборант-исследователь,

vzhyauc@sfnedu.ru

Билык Герман Евгениевич,

ведущий инженер-конструктор,

bilyk@sfnedu.ru

Смирнов Владимир Александрович,

к.т.н., доцент, заведующий кафедрой,

vasmirnov@sfnedu.ru

ЮФУ, г. Таганрог

Аннотация. В работе проведено численное моделирование солнечного элемента на основе ZnO/CuO и исследовано влияние толщины, концентрации носителей заряда и ширины запрещенной зоны пленки CuO на фотоэлектрические характеристики.

Ключевые слова: солнечный элемент, оксид меди, численное моделирование, толщина пленки, концентрации носителей заряда, эффективность.

Введение

В настоящее время активно ведутся поиски недорогих полупроводниковых материалов для формирования простых и эффективных фотоэлектрических структур. Оксидные полупроводники широко распространены и безопасны для окружающей среды, а также не требуют сложных технологических процессов, что делает их многообещающими материалами для снижения стоимости изготовления солнечных элементов. В частности, ширина запрещенной зоны оксидов меди (CuO и Cu₂O) близка к оптимальной (1,0–2,0 эВ) для использования их в фотоэлектрических структурах в качестве поглотителей солнечного излучения, тогда как ZnO, TiO₂ или Ga₂O₃ могут использоваться в качестве широкозонного окна (> 3 эВ) для формирования p-n-гетероперехода, что открывает большие возможности в создании различных структур недорогих оксидных солнечных элементов [1–3].

Моделирование структуры солнечного элемента

Для численного моделирования фотоэлектрических характеристик и параметров гетероструктур солнечных элементов существует широкий выбор программных пакетов, таких как SCAPS, PC1D, AFORS-HET, AMPS и другие [1, 2]. Программа SCAPS (Solar Cell Analysis Program Simulator) является наиболее мощной и удобной системой одномерного численного моделирования для описания физических процессов, протекающих в структурах солнечных элементов. Данная программа позволяет учитывать рекомбинацию носителей заряда через локальные уровни (дефекты) в запрещенной зоне полупроводника и на межфазной границе гетеропереходов, а также задавать тип проводимости и уровень легирования за счет наличия определенной концентрации примеси или структурных дефектов (донорных или акцепторных) [3]. Численное моделирование в SCAPS основано на нестационарной диффузионно-дрейфовой системе уравнений полупроводника, в которую входят уравнения непрерывности для электронов и дырок и уравнение Пуассона [1].

В данной работе при моделировании солнечного элемента на основе гетероперехода ZnO/CuO в качестве фронтального и тыльного контактов использовались прозрачный проводящий оксидный слой (TCO) и золото (Au), а также принималось, что основными дефектами в пленке ZnO являются вакансии кислорода, которые также являются донорами, а основными дефектами в пленке CuO выступают вакансии меди, которые являются акцепторами. Для оксидных пленок эффективное сечение захвата электронов и дырок дефектом принималось равным 10^{-14} см², а тепловая скорость носителей заряда 10^7 см/с. Эффективное сечение захвата электронов и дырок дефектом принималось равным 10^{-13} см² [3]. Коэффициент пропускания фронтального электрода составлял 95% при стандартном спектре плотности потока фотонов AM1.5G. Тип дефектов кристаллической решетки (центров рекомбинации) задавался нейтральным, поэтому механизм рекомбинации описывался согласно теории Шокли-Рида-Холла. Согласно эквивалентной схеме реального солнечного элемента также необходимо учитывать значения шунтирующего и последовательного сопротивлений, которые составляли 2500 и 3,3 Ом·см² [1, 3].

Проведено моделирование влияния толщины и концентрации носителей заряда (акцепторов) в пленке CuO от 0,1 до 4 мкм и от

10^{13} до 10^{19} см^{-3} на фотоэлектрические характеристики солнечного элемента при толщине пленки ZnO 20 нм и концентрации носителей заряда (доноров) 10^{19} см^{-3} . Оптимальная концентрация носителей заряда в пленке CuO составила 10^{17} см^{-3} , а в качестве оптимальной толщины выбрано значение 3 мкм. Показано, что максимальная эффективность солнечного элемента достигается при ширине запрещенной зоны CuO равной 1,4 эВ и величине смещения краев зон проводимости между ZnO и CuO 0,03 эВ. Также улучшение фотоэлектрических характеристик солнечного элемента возможно за счет увеличения коэффициента поглощения пленки CuO с $5 \cdot 10^4$ до 10^5 см^{-1} [3], а также снижения концентрации дефектов на гетерогранице ZnO/CuO с 10^{13} до 10^{10} см^{-2} , что позволяет получить максимальную эффективность солнечного элемента 18,27%, плотность тока короткого замыкания 28,55 мА/см^2 и напряжение холостого хода 0,84 В.

Выводы

В результате моделирования получена максимальная эффективность солнечного элемента на основе ZnO/CuO равная 18,27%, которая достигается при ширине запрещенной зоны, толщине и концентрации носителей заряда (акцепторов) в пленке CuO равной 1,4 эВ, 3 мкм и 10^{17} см^{-3} соответственно, а также величине смещения краев зон проводимости 0,03 эВ на гетерогранице ZnO/CuO. Полученные результаты могут быть использованы при разработке и изготовлении недорогих и эффективных гетероструктур солнечных элементов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-29-00827, <https://rscf.ru/project/23-29-00827/> в Южном федеральном университете.

Список использованных источников

1. A.V. Saenko, G.E. Bilyk, V.A. Smirnov. Study of the Photovoltaic Parameters of Inorganic Solar Cells Based on Cu_2O and CuO // Russian Microelectronics, 2024, Vol. 53, No. 4, pp. 319–328.
2. P. Sawicka-Chudy, Z. Starowicz, G. Wisz, R. Yavorskyi, Z. Zapukhlyak, M. Bester, L. Glowa, M. Sibinski, M. Cholewa. Simulation of TiO_2/CuO solar cells with SCAPS-1D software // Materials Research Express, 6, 2019, 085918.
3. Nguyen Dinh Lam. Modelling and numerical analysis of ZnO/CuO/ Cu_2O heterojunction solar cell using SCAPS // Engineering Research Express, 2, 2020, 025033.

MODELING PHOTOELECTRIC CHARACTERISTICS OF SOLAR CELLS BASED ON ZNO/CUO HETEROJUNCTION

A.V. Saenko, V.V. Zheits, G.E. Bilyk

Abstract. The paper presents a numerical simulation of a ZnO/CuO-based solar cell and studies the influence of thickness, charge carrier concentration, and band gap of the CuO film on photovoltaic characteristics.

Keywords: solar cell, copper oxide, numerical simulation, film thickness, charge carrier concentration, efficiency.

Научное издание
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
в материаловедении электронных компонентов
МММЭК–2024
21–23 октября 2024 г., Москва
Материалы VI Международной конференции

Подготовка оригинал-макета
Издательство «МАКС Пресс»
Главный редактор: *Е. М. Бугачева*
Компьютерная верстка: *Н. С. Давыдова*
Обложка: *А. В. Кононова*

Подписано в печать 20.10.2024 г.
Формат 60x90 1/16. Усл. печ. л. 11,875.
Тираж 300 (1–8) экз. Изд. № 173.

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