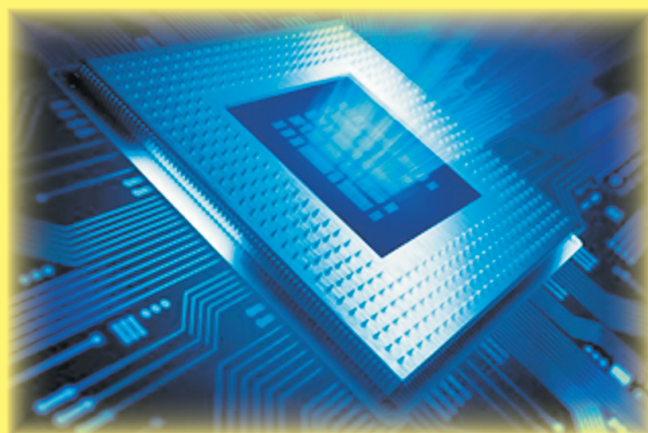


МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

в материаловедении электронных компонентов

материалы I международной конференции

МММЭК-2019



ФЕДЕРАЛЬНЫЙ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
Информатика
и Управление
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК



НИИМЭ
НИИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ
ЭЛЕКТРОНИКИ

21-23 октября 2019 г. Москва Россия

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Вычислительный центр Федерального исследовательского центра «Информатика и управление» РАН
Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)
Научный совет РАН «Фундаментальные проблемы элементной базы
информационно-вычислительных и управляющих систем и материалов для их создания»
Консорциум «Перспективные материалы и элементная база информационных
и вычислительных систем»

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
в материаловедении электронных компонентов
МММЭК–2019

Материалы I международной конференции
21-23 октября 2019 г. Москва

MATHEMATICAL MODELING
in materials science of electronic components
MMMSEC-2019

Proceedings of the international conference
October 21-23, 2019 Moscow, Russia



Москва – 2019

УДК 519.6.517.958.533.6
ББК 22.2.2218
М34

*Издание осуществляется при финансовой поддержке
Министерства науки и высшего образования Российской Федерации*

Ответственный редактор:

*К. К. Абгарян – д-р физ.-мат. наук, главный научный сотрудник,
и. о. заведующего отделом ФИЦ ИУ РАН*

М34 **Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов.** МММЭК-2019. 21–23 октября 2019 г., Москва :
Материалы I международной конференции. – Москва : МАКС Пресс,
2019. – 168 с. : ил.

ISBN 978-5-317-06245-3

<https://doi.org/10.29003/m682.MMMSEC-2019>

Сборник включает в себя научные работы, отражающие современные мировые достижения в области материаловедения электронных компонентов и представляет новые методы математического моделирования и программные решения для разработки прикладных программных систем. Для специалистов в области вычислительного материаловедения, прикладной математики, математического моделирования, проектирования и автоматизации изделий наноэлектроники, разработчиков современных прикладных программных систем, аспирантов и студентов старших курсов университетов и технических вузов.

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

УДК 519.6.517.958.533.6

ББК 22.2.2218

Статьи публикуются в авторской редакции.

Использованные изображения получены из открытых источников.

ОГЛАВЛЕНИЕ

1. А. Современные проблемы создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов с заданными свойствами, включая применение новых методов и средств анализа больших данных	7
<i>А.А. Зацаринный, К.К. Абгарян.</i> Факторы, определяющие актуальность создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках реализации приоритетов научно-технологического развития России	8
<i>А.А. Зацаринный, С.А. Денисов, В.А. Кондрашев, А.А. Сорокин.</i> Методы консолидации научных сервисов	11
<i>К.И. Волович, С.А. Денисов.</i> Основные научно-технические проблемы применения гибридных НРС кластеров в материаловедении	15
<i>А. Карцев, С.И. Мальковский, К.И. Волович, А.А. Сорокин.</i> Исследование производительности и масштабируемости пакета Quantum ESPRESSO при изучении низкоразмерных систем на гибридных вычислительных системах	18
<i>К.И. Волович, С.А. Денисов, С.И. Мальковский.</i> Формирование индивидуальной среды моделирования в гибридном высокопроизводительном вычислительном комплексе	21
<i>С.А. Синченко, Д.И. Бажанов.</i> Применение глубоких нейронных сетей для решения многочастичных задач квантовой механики	24
<i>A.L. Torosyan.</i> Rating the companies engaged in the development of composite materials and quantum-dimensional electronic heterostructures	26
2. В. Проблемы развития материаловедения кванторазмерных электронных гетероструктур	29
<i>И.В. Матюшкин, О.М. Орлов.</i> Нестабильность характеристик мемристинного элемента при циклировании как феномен нелинейной динамики	30
<i>Е.Н. Муратова, В.А. Мошников, К.В. Чернякова, И.А. Врублевский.</i> Тепловые режимы работы нагревательного элемента из алюминия с нанопористым оксидом алюминия с ленточным углеродным элементом нагрева	33
<i>А.М.Ф. Аль-Дарабсе, Е.В. Маркова.</i> Критическая толщина и луч псевдоморфных лазерных гетероструктур на основе InxGa1-xAs, выращенных на (001) GaAs и (001) InP-субстратах	36
<i>И.В. Талызин, В.М. Самсонов, М.В. Самсонов, С.А. Васильев.</i> О перспективе создания элементов памяти на основе наночастиц кремния	40
<i>В.А. Ткаченко, О.А. Ткаченко, Д.Г. Бакшеев, О.П. Сушков.</i> Влияние самоорганизации поверхностного заряда на затворно-индуцированные электронную и дырочную двумерные системы	43

3. С. Математическое моделирование в структурном материаловедении (многоуровневые, многомасштабные модели, имитационные модели и т.д.)	47
<i>А.В. Двуреченский, В.А. Зиновьев, А.Ф. Зиновьева, П.Л. Новиков, С.А. Рудин.</i> Моделирование контролируемого зарождения и роста упорядоченных ансамблей квантовых точек в гетероструктурах на основе Si	48
<i>Mikhail I. Vasilevskiy.</i> Modelling of graphene-based plasmonic nanostructures	51
<i>К.К. Абгарян.</i> Многомасштабное моделирование работы многоуровневых элементов памяти, применяемых для создания нейроморфных сетей	53
<i>Е.С. Горнев, М.В. Литаврин, И.В. Матюшкин, А.А. Резванов.</i> Моделирование процессов самоорганизации для наноразмерной DSA-литографии методом клеточных автоматов	56
<i>В.Н. Мордкович, К.К. Абгарян, Д.Л. Ревизников.</i> Моделирование характеристик полевого элемента Холла	58
<i>B.M.S. Teixeira, A.A. Timopheev, N. Caçoilo, S. Auffret, R.C. Sousa, B. Dieny, N.A. Sobolev.</i> Perpendicular magnetic tunnel junctions with a dual-FeCoB / MgO-interfaced storage-layer: parameter extraction and modeling	61
<i>А.Г. Итальянцев, В.С. Константинов.</i> Исследование формирования орторомбической фазы в оксиде гафния методом математического моделирования	62
<i>А.А. Журавлев, К.К. Абгарян, Д.Л. Ревизников.</i> Мезоскопическое расширение молекулярно-динамических моделей	65
<i>Н.А. Вerezуб, А.И. Простомолотов.</i> Сопряженное математическое моделирование выращивания кристаллов <i>KDP</i> из раствора	68
<i>А.И. Простомолотов, Н.А. Вerezуб.</i> Математическое моделирование тепловых процессов при кассетной кристаллизации халькогенидов	71
<i>П.А. Сеченых, К.К. Абгарян.</i> Математическое моделирование кристаллической структуры оксидов металлов	74
<i>Р.А. Жачук, Ж. Кутиньо.</i> Структура поверхности Si(331)-12×1	77
<i>Р.А. Жачук, А.А. Шкляев.</i> Универсальный структурный блок семейства поверхностей (1 1 0) кремния и германия	79
<i>Е.В. Мараева.</i> Моделирование процессов адсорбции инертных газов на поверхности порошковых наноматериалов для биокерамики и газовых сенсоров	80
<i>Н.В. Пермяков.</i> Моделирование углеродосодержащих наноматериалов и квазикристаллов и их поверхности по данным сканирующей зондовой микроскопии	83

<i>А.Г. Настовьяк, Н.Л. Шварц.</i> Моделирование процесса кристаллизации на границе жидкость-кристалл при росте нанопроволок	85
<i>Н.Н. Балан, В.В. Иванов, А.В. Кузовков, Е.С. Шамин.</i> Основные подходы к моделированию формирования фоторезистивной маски в вычислительной литографии	89
<i>C. Funck, S. Hoffmann-Eifert, C. Baeumer, T. Hennen, D. Wouters, R. Waser, R. Dittmann and S. Menzel.</i> Electronic Transport Properties of VCM Resistive Switching Memory Cells	91
<i>Hovik Matevossian, Tokuei Sako.</i> Mixed Biharmonic Problems in Exterior Domains	94
<i>К.К. Абгарян, И.С. Колбин.</i> Расчёт теплопроводности многослойных гетероструктур с использованием кинетического уравнения Больцмана	95
<i>С.И. Безродных, В.И. Власов.</i> Высокоточный расчет полупроводникового диода	98
<i>Sergey Bozhko, Killian Walshe, Natalia Tulina, Brian Walls, Olaf Lübben, Barry Murphy, Sergey Krasnikov, Vladimir Bozhko, Igor V. Shvets.</i> Memristor switching and oxygen atom manipulation on MoO ₂ surface	102
<i>М.В. Коровина.</i> Построение асимптотик решений линейных дифференциальных уравнений с голоморфными коэффициентами и их типы	103
<i>В.В. Сиксин.</i> Аналитическая модель по определению дозы для детектора телевизионного типа при протонной дозиметрии	107
4. D. Моделирование размерных, радиационных, поверхностных и других дефектов в полупроводниковой наноэлектронике	111
<i>С.П. Кобелева.</i> Влияние степени вырождения уровней на концентрацию собственных точечных дефектов в полупроводниковых соединениях A ² B ⁶	112
<i>С.П. Кобелева, С.Ю. Юрчук, С. Фадеев.</i> СТД в CdTe конгруэнтно испаряющихся составов	115
<i>S.I. Bozhko, A.S. Ksenz, A.M. Ionov, S.V. Chekmazov.</i> DFT simulation of the Local Violation of a Peierls Transition at the Sb(111) Surfaces	118
<i>А.Н. Чибисов, М.А. Чибисова.</i> <i>Ab initio</i> моделирование поведения спиновых квантовых кубитов фосфора в решетке кремния	119
<i>А.Н. Чибисов, М.А. Чибисова.</i> <i>Ab initio</i> расчет равновесного квантового состояния $ 1\rangle$ спина дырки в кремнии легированном бором	122
5. E. Моделирование работы многоуровневых элементов памяти для компьютеров следующего поколения	127
<i>А.Ю. Морозов, К.К. Абгарян, Д.Л. Ревизников.</i> Реализация нейросетевых алгоритмов на мемристорных кроссбарах	128

<i>Г.С. Теплов, Е.С. Горнев, О.А. Тельминов.</i> Verilog-A модель многоуровневого биполярного мемристора с учетом девиаций параметров переключения	131
<i>Д.А. Жевненко, Ф.П. Мещанинов, В.С. Кожевников, Е.С. Горнев.</i> Моделирование вольт-амперной характеристики мемристора	136
<i>M.V. Logunov, S.A. Nikitov, S.A. Osokin, A.G. Temiryazev, M.P. Temiryazeva, S. Giordano, T. Mathurin, Y. Dusch, N. Tiercelin, P. Pernod.</i> Domain walls in magneto-elastic heterostructures: modeling and experiment	139
<i>Ф.П. Мещанинов, В.С. Кожевников, Е.С. Горнев, Д.А. Жевненко.</i> Анализ аналитических моделей мемристора	141
<i>В.В. Сироткин, Н.А. Тулина.</i> Применение численного моделирования в исследовании мемристорных структур на основе оксидов и халькогенидов	143
6. Ф. Моделирование структур и свойств композиционных материалов с нанокристаллами, нанокластерами, наноаморфными включениями и т.д.	147
<i>А.А. Резванов, Я.А. Мирошкин, Д. Жевненко, И.В. Матюшкин.</i> Аналитическая модель аспектной зависимости скорости глубокого криогенного травления кремния в плазме SF ₆ /O ₂	148
<i>М.С. Рогачев, И.Ю. Катеев, А.В. Цуканов.</i> Однофотонный отклик и спектроскопия микродиска в алмазной подложке	152
<i>В.А. Ткаченко О.А. Ткаченко, Д.Г. Бакшеев, З.Д. Квон, А.С. Ярошевич, Е.Е. Родякина, А.В. Латышев.</i> Гигантская микроволновая и терагерцовая фотопроводимость квантового точечного контакта в туннельном режиме: моделирование и эксперимент	156
<i>О.А. Ткаченко, Д.Г. Бакшеев, В.А. Ткаченко.</i> Осцилляции Ааронова-Бома и распределения равновесных и неравновесных токов в открытых квантовых точках и кольцевых интерферометрах	159

1. А

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

ФАКТОРЫ, ОПРЕДЕЛЯЮЩИЕ АКТУАЛЬНОСТЬ СОЗДАНИЯ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ ИНФРАСТРУКТУРЫ ДЛЯ СИНТЕЗА НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ В РАМКАХ РЕАЛИЗАЦИИ ПРИОРИТЕТОВ НАУЧНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО РАЗВИТИЯ РОССИИ

А.А. Зацаринный, К.К. Абгарян

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

В современном мире знания и высокие технологии определяют эффективность экономики, позволяют кардинально повысить качество жизни людей, модернизировать инфраструктуру и государственное управление, обеспечить правопорядок и безопасность [1]. В условиях, когда процессы общемировой глобализации очевидно затормозились, в сфере науки и технологий они продолжают активно развиваться. Эти тенденции подтверждены итогами работы 49-го Всемирного экономического форума в Давосе, который прошел под знаком деглобализации экономики [2].

При этом, ключевой национальной целью России в настоящее время становится цифровая трансформация общества, определяемая приоритетами Стратегии научно-технологического развития. Особую стратегическую значимость при этом приобретает первый приоритет, в рамках которого на основе цифровых интеллектуальных производственных технологий, роботизированных систем, методов получения новых материалов, обработки больших объемов данных, машинного обучения и искусственного интеллекта, по существу будет создаваться технологическая база современной цифровой исследовательской инфраструктуры [3].

Актуальность создания такой инфраструктуры определяется целым комплексом взаимоувязанных факторов. Остановимся на основных из них, имеющих непосредственное отношение к задачам синтеза новых материалов.

1. Синтез новых материалов с заданными свойствами является стратегически важным направлением инновационного развития России в рамках программы цифровой экономики, учитывая низкую инновационную активность на фоне развитых государств. Так, в Германии инновации внедряют около 60% предприятий, во Франции, Великобритании – 45–50%, а в России – менее 10% [4].

2. Успешное продвижение в области синтеза новых материалов может стать основой для развития прорывных технологий, необходимых для создания отечественной электронной компонентной базы, и, как следствие, фундаментом для решения актуальных задач импортозамещения и технологической независимости [5].

3. Кардинальное решение проблемы обеспечения информационной безопасности компьютерных систем различного назначения, прежде всего в интересах государственного управления, обороны, безопасности и правопорядка, является важнейшей составляющей национальной безопасности.

4. Требования создания комплексов вооружения и военной техники на отечественной электронной компонентной базе (снижение массогабаритных показателей при возрастающих тактико-технических характеристиках, повышение устойчивости функционирования в различных температурных диапазонах и др.) могут быть выполнены только за счет создания новых комплектующих элементов и материалов, а также технологий их получения.

5. Разработанный научно-методический аппарат требует адекватной поддержки в виде высокопроизводительной гибкой исследовательской инфраструктуры.

6. Создание современной исследовательской инфраструктуры должно стать мощным толчком для развития различных отраслей российской науки, которая находится в условиях концептуального перехода к новой парадигме в научных исследованиях, основанной на анализе накопленных больших данных в конкретных предметных областях [3].

Успешное решение задачи создания современной цифровой исследовательской инфраструктуры в условиях обозначенных факторов может быть достигнуто только при активном участии российских ученых. В связи с этим, особую актуальность в рамках данного направления приобретают научные исследования, проводимые в Федеральном Исследовательском центре «Информатика и управление» РАН (ФИЦ ИУ РАН), который согласно результатам мирового рейтинга Европейской научно-промышленной палаты (World Research Institutions Ranking – WRIR) является лидером среди российских научных организаций за 2018 г. [6]. При этом основной принцип в подходах к решению перечисленных проблем заключается в синергетике теории и практики, которая предполагает практическую направленность каждого результата фундаментальных исследований.

Так, в настоящее время в ФИЦ ИУ РАН создана современная исследовательская цифровая платформа с гибридной вычислительной архитектурой. Ресурсы исследователям предоставляются как в виде традиционных облачных сервисов, так и с помощью разработанных специфических технологий применения, называемых научным сервисом (в виде предметно-ориентированных программ [7, 8]). Кроме того, разработаны: актуальные методы организации индивидуальной среды исполнения задач предсказательного моделирования, на основе технологий виртуализации; методы управления вычислительным процессом с целью обеспечения параллельности исполнения разнотипных задач, требующих выделения различных вычислительных ресурсов из состава гибридного высокопроизводительного кластера.

На базе созданной цифровой платформы стало возможным размещать высокопроизводительные программные системы иерархической архитектуры. Такие системы позволяют на основе многомасштабного подхода [9], базы знаний и современных информационных технологий решать широкий класс задач вычислительного материаловедения, связанных с предсказательным моделированием различных гетерогенных систем и процессов, а также с многомасштабным моделированием структур и свойств новых композиционных материалов с уникальными свойствами. Для решения конкретных задач используются имеющиеся расчетные модули по разноуровневым математическим моделям, базы данных по материалам, пакетные приложения, а также методы многомасштабного моделирования, в которых на каждом уровне применяются соответствующие подходы и приближения (квантово-механические, квантово-химические, молекулярно-динамические, дискретно-элементные, сплошносредные, статистические и т.д.).

В настоящее время на базе цифровой платформы ФИЦ ИУ РАН решается ряд практических задач, связанных с синтезом новых композиционных материалов с заданными свойствами. Обоснованы и сформулированы системные решения для проведения исследований с использованием ресурсов цифровой платформы, включая разработку средств предсказательного компьютерного моделирования физической структуры приборов нанoeлектроники, нейроморфной архитектуры многоуровневых устройств памяти, дефектообразования в композитных материалах и другие [9].

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (проекты 18-29-03091, 19-29-03051 мк).

Литература

1. Из выступления Президента России Владимира Путина на VI Международном форуме технологического развития «Технопром-2018» (27 августа 2018 г.). – URL: <http://www.kremlin.ru/events/president/news/58391>.
2. О Давосе. <https://www.gazeta.ru/business/2019/01/25/12143185.shtml>.
3. *Зацаринный А.А., Колин К.К.* Теория и практика цифровой трансформации общества в рамках приоритетов научно-технологического развития России. – В сб. Проектирование будущего. Проблемы цифровой реальности. – М.: ИПМ им. М.В. Келдыша, 2019. С. 29–40.
4. *Малинецкий Г.Г.* Цифровая реальность в точке бифуркации и стратегические задачи Союзного государства в контексте гуманитарно-технологической революции. – В сб. Проектирование будущего. Проблемы цифровой реальности. – М.: ИПМ им. М.В. Келдыша, 2019. С. 12–27.
5. *Зацаринный А.А., Киселев Э.В., Козлов С.В., Колин К.К.* Информационное пространство цифровой экономики России. Концептуальные основы и проблемы формирования. – М.: ФИЦ ИУ РАН, 2018. – 236 с.
6. Рейтинг World Research Institutions Ranking (WRIR) на сайте: <http://eurochambres.org/wrir/wrir-2018/informatsionnye-tekhnologii/>
7. *Зацаринный А.А.* Цифровая платформа для научных исследований // Математическое моделирование и информационные технологии в инженерных и бизнес-приложениях: сборник материалов междунауч. конф. (3–6 сентября 2018 г.) / под ред. М.Г. Матвеева, Д.Н. Борисова: Воронежский государственный университет. – Воронеж: Издательский дом ВГУ, 2018. С. 104–113.
8. *Zatsarinny A.A., Gorshenin A.K., Kondrashev V.A., Volovich K.I., Denisov S.A.* Ward high performance solutions as services of research digital platform. XIIIth International Symposium «Intelligent Systems», INTELS'18, 22–24 October 2018, St. Petersburg, Russia.
9. *Абгарян К.К.* Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. – М.: МАКС Пресс. 2017. 284 с.

МЕТОДЫ КОНСОЛИДАЦИИ НАУЧНЫХ СЕРВИСОВ

**А.А. Зацаринный¹, С.А. Денисов¹, В.А. Кондрашев¹,
А.А. Сорокин²**

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

² *Вычислительный центр Дальневосточного отделения Российской
академии наук (ВЦ ДВО РАН), Хабаровск, Россия*

Концепция многомасштабного моделирования, интегрирующая разноуровневые методы моделирования поведения материалов, широко используется в материаловедении и технологии новых материалов [1]. Необходимость комплексного моделирования на нескольких уровнях иерархии требует создания многокомпонентных

иерархических программных комплексов для решения задач многомасштабного компьютерного моделирования структурных свойств различных материалов. В комплексах используются различные программные инструменты, обеспечивающие эффективное моделирование свойств материалов на определенном уровне. Важной задачей в этих комплексах является развитие технологий связывания программных инструментов и комплексной интерпретации результатов моделирования.

Одновременно с процессом создания иерархических программных комплексов многомасштабного моделирования идет развитие технологии цифровых платформ, предлагающих сервисы, в том числе в области математического моделирования свойств материалов.

Одним из способов комплексирования инструментов многомасштабного моделирования является использование свойств цифровой платформы в среде облачных вычислений. Платформенным подходом для интеграции совокупности научных услуг, направленных на комплексное решение научной задачи с использованием серии инструментов, является объединение научных сервисов в рамках одного консолидированного сервиса.

Под научным сервисом цифровой платформы понимается совокупность процессов и ресурсов для выполнения работ научно-исследовательского характера путем предоставления потребителю оборудования, расходных материалов, информационно-коммуникационных и обеспечивающих ресурсов, продуктов интеллектуальной научной деятельности, человеческих ресурсов, результатом которых является научная (исследовательская) услуга [2].

Для описания процессов, связанных с выполнением научного сервиса, платформой предусматривается инструмент, обеспечивающий формирование технологической карты исследования с перечислением необходимых для выполнения сервиса операций, их длительности, последовательности выполнения и потребляемых ресурсов, а также информационные формы для оформления заявки на выполнение научного сервиса и его заказа. В простейшем случае процесс исследования описывается диаграммой Ганта (или ее аналогом) с указанием графика выполнения операций и необходимых для их выполнения ресурсов – оборудования, материалов и трудовых затрат. В настоящее время множество цифровых платформ этим и ограничивается. Однако, очевидно, что сложное исследование использует результаты работы нескольких коллективов исследовате-

лей, которые можно оформить в виде отдельных научных сервисов и интегрировать их в консолидированный сервис. Для этого предлагается предусмотреть в технологической карте исследования указание ссылок на используемые научные сервисы.

Для связывания одного или нескольких сервисов в один консолидированный научный сервис возможны два способа.

В первом случае процесс подачи заявки на оказание консолидированной услуги осуществляется от имени ее потребителя по всем научным сервисам, входящим в состав консолидированного научного сервиса. Потребитель заполняет формы заказа и согласует план исследования с каждым из поставщиков услуг самостоятельно.

Второй способ предоставления консолидированного сервиса предусматривает разработку для него обобщенной формы заказа с тем, чтобы процесс согласования составляющих научных сервисов велся от имени поставщика консолидированного сервиса в рамках согласования плана исследования между потребителем и поставщиком консолидированного сервиса.

Первый способ консолидации научных сервисов не предполагает серьезных изменений в алгоритмах заказа, отслеживания процессов оказания услуг и получения результатов исследования. Однако, этот метод обеспечения выполнения консолидированного сервиса требует от потребителя обладания компетенциями для заказа всех научных сервисов, входящих в состав консолидированного сервиса и связывания их результатов в единое исследование. В этом способе достаточно просто решаются вопросы организации исследований и распределения ответственности между поставщиками и потребителем услуг консолидированного сервиса. Один потребитель консолидированного сервиса имеет организационные отношения со всеми поставщиками научных сервисов, входящих в состав консолидированного сервиса.

При втором способе организации предоставления консолидированного сервиса потребитель сервиса взаимодействует только с поставщиком этого сервиса. С поставщиками научных сервисов, входящих в состав консолидированного сервиса, взаимодействует поставщик консолидированного сервиса, который должен обладать компетенциями, необходимыми для заказа этих научных сервисов. Этот метод организации консолидированного научного сервиса предполагает большую степень связывания консолидированного сервиса с сервисами, входящими в его состав в части анализа ре-

зультатов предоставления этих сервисов и формирования исходных данных для их заказа.

Таким образом, каждый из способов интеграции научных сервисов имеет свои достоинства и недостатки. Для цифровой платформы научных исследований целесообразно использовать оба способа. Для обоих методов формирования консолидированных услуг цифровая платформа должна обладать адекватными инструментами описания консолидированного сервиса и управления процессом его предоставления.

Технологическая карта научного сервиса должна позволять включать в нее операции предоставления стороннего научного сервиса с указанием метода консолидации и атрибутов заказа сервиса и получения его результатов, а также процессы использования этих результатов при выполнении консолидированного сервиса.

В частности, в области математического многомасштабного моделирования свойств материалов представленная технология позволяет проводить многоуровневые иерархические расчеты с использованием специализированных программных инструментов различными коллективами исследователей в индивидуальной среде исполнения производительных виртуальных вычислительных средств [3].

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (проекты 18-29-03091, 19-29-03051) с использованием ресурсов гибридного высокопроизводительного вычислительного комплекса ФИЦ ИУ РАН [4].

Литература

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

2. *Зацаринный А.А., Горшенин А.К., Волович К.И., Колин К.К., Кондрашев В.А., Степанов П.В.* Управление научными сервисами как основа национальной цифровой платформы «Наука и образование» // Стратегические приоритеты. № 2(14). 2017. С. 103–114.

3. *Волович К.И.* Некоторые системотехнические вопросы предоставления вычислительных ресурсов для научных исследований в гибридной высокопроизводительной облачной среде // Системы и средства информатики – М.: ТОУС ПРЕСС, 2018, Том 28, № 4. С. 97–108.

4. Федеральный исследовательский центр Информатика и управление РАН. [Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://hhpcc.frccsc.ru> (дата обращения: 26.08.2019)

ОСНОВНЫЕ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ПРОБЛЕМЫ ПРИМЕНЕНИЯ ГИБРИДНЫХ НРС КЛАСТЕРОВ В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

К.И. Волович, С.А. Денисов

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

Современной тенденцией в науке является возрастающая роль компьютерных расчетов [1]. Программные системы, предназначенные для решения задач материаловедения, требуют огромных вычислительных ресурсов. Наибольшую эффективность они проявляют при развертывании в гибридных высокопроизводительных комплексах, имеющих в своем составе акселераторы вычислений – графические ускорители. Такие комплексы обладают высокой производительностью и позволяют решать задачи за приемлемое время с достаточной точностью.

В настоящее время существует ряд программных систем, выполняющих решение задач в разных областях материаловедения. Такие системы как ABINIT, VASP, Quantum ESPRESSO, LAMMPS, MEER, MPB, OpenFOAM могут выполняться на гибридных высокопроизводительных комплексах, однако требуют подготовки программной среды исполнения, настройки системы управления вычислительным процессом, организации параллельных вычислений.

Современным подходом в управлении вычислительным процессом является использование технологий виртуализации и облачных технологий. Облачные технологии позволяют предоставлять пользователям услуги SaaS и PaaS.

Применение облачных технологий является сегодня актуальной тенденцией во всех областях, связанных с информационными технологиями [2, 3]. Предоставление сервисов гибридных высокопроизводительных вычислений в области материаловедения не является исключением.

При этом можно выделить основные проблемы, возникающие при применении облачных технологий: проблема развертывания кода программной системы, решающей задачи материаловедения в среде гибридного высокопроизводительного комплекса; проблема адаптации программного кода пользователя к гибриднему вычислителю; проблема создания индивидуальной среды исполнения заданий.

Для решения указанных проблем необходима разработка методов и алгоритмов адаптации и исполнения прикладных задач пользователей на гибридном вычислительном комплексе, использующем для выполнения вычислений специализированные ускорители вычислений.

Вопросы предоставления ресурсов высокопроизводительных вычислительных систем и одновременного исполнения различных по научной направленности задач требуют решения с точки зрения разработки эффективных алгоритмов организации вычислительного процесса. Необходимо обеспечить эффективную загрузку гибридного комплекса задачами различного типа, позволяющими минимизировать простои оборудования и сократить время исполнения научных задач.

Отдельной научной проработки требуют вопросы адаптации прикладного программного кода к архитектуре гибридного вычислительного комплекса. Данная задача должна включать классификацию программного обеспечения по степени мобильности, подходы к переводу программного кода на технологии, позволяющие использовать ускорители вычислений и создание индивидуальной среды исполнения научной задачи на ресурсах гибридного вычислительного комплекса.

В качестве основы для развертывания виртуальных сред могут использоваться образы виртуальных машин, содержащих полный комплект программного обеспечения, необходимого для решения прикладной задачи. В этом случае пользователю предоставляется сервис типа SaaS.

Другой возможностью предоставления виртуальной среды является развертывание в ней какой-либо интегрированной среды, с использованием которой пользователь разворачивает собственное программное обеспечение, предназначенное для решения задач материаловедения. В этом случае пользователь получает сервис PaaS и на его основе создает вычислительную среду для решения прикладной задачи. Отметим, что в дальнейшем на основе таких решений могут разворачиваться сервисы SaaS.

Использование графических ускорителей существенно повышает производительность решения научных задач и снижает время выполнения приложений. Необходимо отметить, что степень повышения производительности зависит от типа ускорителя и типа прикладной задачи [4]. Однако, в общем случае, применение ги-

бридных высокопроизводительных комплексов приводит к повышению качества вычислительных сервисов.

Программные системы, предназначенные для решения задач материаловедения, требуют больших объемов вычислительных ресурсов. Целесообразно их исполнение в средах гибридных высокопроизводительных комплексов. Современным эффективным решением по выполнению этих программных систем является создание индивидуальных сред исполнения на основе технологий виртуализации. Технологии контейнеров позволяют создать изолированные виртуальные объекты, содержащие все необходимое программное обеспечение для выполнения расчетов конкретной задачи материаловедения. Пользователю может быть предоставлена полностью готовая среда для выполнения расчетов. В этом случае он получает облачную услугу SaaS, имеет возможность загрузить данные и произвести вычисления. Другим вариантом использования облачной вычислительной услуги является сервис PaaS. В этом случае пользователь получает программную среду, содержащую необходимые программные инструменты. Он разворачивает свое собственное программное обеспечение, предназначенное для расчетов в области материаловедения, производит настройку лицензий, программной среды и выполнение расчетов.

Предпочтительным режимом предоставления ресурсов гибридного высокопроизводительного вычислительного комплекса для решения задач материаловедения является PaaS на основе технологии контейнеров. В этом случае наиболее полно и гибко могут быть использованы ресурсы кластера, а также возможности прикладного программного обеспечения по работе с графическими ускорителями.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (проекты 18-29-03100, 19-29-03051). При проведении исследований и постановке экспериментов по предоставлению задачам материаловедения индивидуальных сред исполнения и сервисов SaaS и PaaS использовались ресурсы гибридного высокопроизводительного вычислительного комплекса ФИЦ ИУ РАН [5].

Литература

1. *Abramov S.M., Lilitko E.P.* Current state and development prospects of high-end HPC system // Information Technologies and Computation Systems Moscow 2013. № 2. P. 6–22.
2. *Volkov S., Sukhoroslov O.* 2017. Simplifying the Use of Clouds for Scientific Computing with Everest. *Procedia Computer Science* 119:112–120.

3. *Volovich K.I., A.A. Zatsarinnyy, V.A. Kondrashev, A.P. Shabanov.* 2017. Scientific research as a cloud service. *System and Means of Informatics* 27(1):73–84.
4. *Afanasyev I., Voevodin V.* The comparison of large-scale graph processing algorithms implementation methods for Intel KNL and NVIDIA GPU // *Communications in Computer and Information Science.* 2017. Т. 793. С. 80–94.
5. Федеральный исследовательский центр Информатика и управление РАН. [Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://hhpcc.frccsc.ru> (дата обращения: 26.08.2019).

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ И МАСШТАБИРУЕМОСТИ ПАКЕТА QUANTUM ESPRESSO ПРИ ИЗУЧЕНИИ НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМ НА ГИБРИДНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ

А. Карцев¹, С.И. Мальковский¹, К.И. Волович², А.А. Сорокин¹

¹ *Вычислительный центр Дальневосточного отделения Российской академии наук (ВЦ ДВО РАН), Хабаровск, Россия*

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

Ускорение параллельных высокопроизводительных *ab initio* вычислений для низкоразмерных систем, и, в частности, для двумерных соединений, является важной задачей в области компьютерной разработки новых материалов. Как показывает практика применения первопринципных пакетов на различных суперкомпьютерах, масштабируемость данного типа параллельных вычислений в рамках теории функционала плотности для периодических систем быстро деградирует с увеличением числа используемых процессорных ядер вследствие различных численных факторов и особенностей математического описания атомных систем с пониженной размерностью. К примеру, для имитации вакуумного пространства в системе многослойного двумерного материала, зачастую, наряду с большим числом атомов, пользователи вынуждены вводить в расчетную элементарную ячейку значительное незаполненное пространство, что, в свою очередь, ощутимо снижает производительность математических подпрограмм Фурье-анализа и диагонализации в рамках метода плоских волн.

В данной работе мы провели исследование масштабируемости и производительности первопринципных пакетов в рамках гибридной вычислительной среды, организованной с использованием процес-

соров IBM POWER8 и графических сопроцессоров NVIDIA Tesla P100, где в контексте трехмерных граничных периодических условий проводились квантово-механические вычисления для описания электронных и магнитных свойств кристаллических систем. Тестовые расчеты были выполнены с помощью последовательного применения двух первопринципных программных пакетов Quantum ESPRESSO [1] и Vampire [2], обладающих разной структурой и различным программным подходом в реализации численных методов на основе математических библиотек (BLAS, LAPACK, ScaLAPACK, FFTW). Для получения сравнительных характеристик и описания эффекта ускорения вычислений на гибридных системах, тестовые расчеты дополнительно проводились на том же оборудовании без использования графических ускорителей, а также на классических многопроцессорных системах типа Cray XC30.

Для анализа производительности пакетов Quantum ESPRESSO и Vampire, собранных с использованием оптимизированных версий вышеперечисленных математических библиотек, при изучении объёмных материалов на гибридном вычислительном кластере были проведены вычисления электронной структуры, фононного спектра и температуры Кюри на примере различных модификаций мононитрида железа [3]. Данные тестовые расчеты позволили выявить пределы и возможности достигаемого ускорения первопринципных пакетов при изучении объёмных материалов и их процедурно-расчетную разницу относительно моделирования низкоразмерных систем. В свою очередь, изучение производительности пакетов применительно к низкоразмерным системам проводилось на основе двух типов систем, имеющих качественно различные физико-химические характеристики – на примере стандартного тестового расчета PSIWAT пакета Quantum ESPRESSO и моделирования двумерных многослойных магнитов на основе CrI_3 . В первом случае, тестовая система представляла собой поверхность золота, покрытую тиолами при взаимодействии с водой, а во втором – была задействована структура однослойного и двуслойного соединения CrI_3 , представляющего собой двумерный ферромагнитный материал с Cr-подрешеткой типа «пчелиные соты». На основе перечисленных систем с элементарными ячейками, содержащими различное число атомов и различное по величине вакуумное пространство, были проведены тестовые расчеты и определено влияние данных параметров на масштабируемость вычислений.

Для расчетов двумерных систем с применением пакета Quantum ESPRESSO был обнаружен достаточно резкий спад масштабируемости как функции числа процессорных ядер, что, в свою очередь, может быть связано с особенностями архитектуры кода и устранено путем подбора параметров распараллеливания его подфункций. Тем не менее, применение версии библиотеки IBM ESSL, автоматически выгружающей часть вычислений на графические сопроцессоры, позволило нам добиться значительного ускорения расчётов физических свойств всех изучаемых систем. Более того, полученные результаты указывают на эффективность применения гибридных вычислительных кластеров при компьютерном дизайне материалов и первопринципных вычислениях с использованием математической библиотеки IBM ESSL. Данный подход в будущем позволит увеличить скорость работы приложений, использующих библиотеку BLAS, которые изначально не были предназначены для выполнения на графических сопроцессорах. Поэтому полученные результаты указывают на возможность оптимизации расчетных схем в рамках методов компьютерного многомасштабного дизайна. Кроме того, предложенная в данной работе методология прокладывает путь для более быстрого и качественного проектирования материалов с заданными свойствами на базе высокопроизводительных гибридных вычислительных систем.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-29-03196. При проведении расчетов использовались вычислительные ресурсы ЦКП «Центр данных ДВО РАН» (г. Хабаровск) [4].

Литература

1. *Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., Ceresoli, D., Chiarotti, G.L., Cococcioni, M., Dabo, I. and Dal Corso, A.*, 2009. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of physics: Condensed matter*, 21(39), p. 395502.
2. *Evans, R.F., Fan, W.J., Chureemart, P., Ostler, T.A., Ellis, M.O. and Chantrell, R.W.*, 2014. Atomistic spin model simulations of magnetic nanomaterials. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 26(10), p. 103202.
3. *Kartsev, A., Feya, O.D., Bondarenko, N. and Kvashnin, A.G.*, 2019. Stability and magnetism of FeN high-pressure phases. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 21(9), pp. 5262–5273.
4. *Сорокин А.А., Макогонов С.В., Королев С.П.* Информационная инфраструктура для коллективной работы ученых Дальнего Востока России // Научно-техническая информация. Серия 1: Организация и методика информационной работы. 2017. № 12. С. 14–16.

ФОРМИРОВАНИЕ ИНДИВИДУАЛЬНОЙ СРЕДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ В ГИБРИДНОМ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНОМ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОМ КОМПЛЕКСЕ

К.И. Волович¹, С.А. Денисов¹, С.И. Мальковский²

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

² *Вычислительный центр Дальневосточного отделения Российской
академии наук (ВЦ ДВО РАН), Хабаровск, Россия*

Для эффективного применения систем моделирования при решении задач в области материаловедения, при моделировании поведения цифровых двойников, построении математических моделей анализа устойчивости программ и сетевых протоколов к внутренним сбоям и внешним атакам требуется использование высокопроизводительных вычислительных систем. В последнее время для решения задач моделирования применяют высокопроизводительные вычислительные комплексы с гибридной архитектурой в составе которых имеются специальные компоненты – ускорители (сопроцессоры) GPU [1, 2].

В тоже время существует ряд ограничений, влияющих на работу научного коллектива с системами моделирования в вычислительной среде гибридных высокопроизводительных вычислительных комплексов (ГВБК).

Во-первых, для создания эффективной модели необходимо, чтобы на этапе ее разработки и тестирования система моделирования имела доступ к графическим ускорителям ГВБК.

Во-вторых, научный коллектив в процессе исследований может решать одни и те же задачи на разных системах моделирования с целью получения наиболее оптимального варианта решения. Одновременное наличие нескольких систем моделирования в одной вычислительной среде ГВБК требует разрешение конфликтов, возникающих при их интеграции с операционной системой, управляющей вычислительными ресурсами ГВБК.

В-третьих, работа с системами моделирования при решении задач предполагает динамическое изменение настроек системы моделирования, включая выполнение операций, требующих прав администратора ГВБК, например, установка дополнительного системного программного обеспечения и программных библиотек.

Индивидуальная среда моделирования должна функционировать в вычислительной среде ГВБК и решать проблему ограничений для научного коллектива.

Оптимальным решением для создания полнофункциональных индивидуальных сред моделирования является платформенный подход на основе технологий виртуализации [3, 4]. В ГВБК система виртуальных контейнеров используется для создания индивидуальных сред небольшого числа пользователей. Для этих целей подходит широко известная система `docker`. Предлагается следующий алгоритм создания индивидуальной среды моделирования.

На первом шаге определяется необходимый базовый образ контейнера для загрузки его из репозитория.

На втором шаге принимается решение о способе формирования контейнера с индивидуальной средой моделирования: пакетном или интерактивном. Пакетное исполнение является предпочтительным, поскольку это основной режим выполнения заданий, обеспечивающий эффективную загрузку вычислительных ресурсов ГВБК [5].

В случае пакетного исполнения индивидуальная среда моделирования создается путем формирования и запуска на выполнение в вычислительной среде ГВБК пользовательского задания. Входными данными для задания является базовый контейнер и файл-сценарий, создаваемый пользователем. В файле-сценарии содержится программный код, выполнение которого приводит к загрузке, установке и настройке в базовом контейнере всех программных средств, необходимых пользователю для решения его задачи.

В случае интерактивного исполнения базовый контейнер загружается в вычислительную среду ГВБК и остается активным неопределенно долгое время. В контейнере пользователь имеет возможность производить действия по установке/компиляции, отладки любых программных средств, необходимых пользователю для решения задачи моделирования. В зависимости от сложности действий пользователя и поведения вычислительной среды контейнера возможно либо зафиксировать последовательность действий пользователя в виде файла-сценария, либо нет.

На третьем шаге принимается решение о создании из контейнера с индивидуальной средой моделирования библиотечного образа и загрузки его в репозиторий ГВБК. Библиотечный образ, не требующий дополнительной настройки, в дальнейшем по примеру базового образа может использоваться пользователем для формирования индивидуальной среды моделирования.

Предлагаемый алгоритм позволяет вносить в базовый и библиотечный образы дополнительные изменения, путем добавления в файл-сценарий соответствующих блоков программного кода. Таким образом можно создать целую серию динамически формируемых контейнеров с индивидуальной средой моделирования на базе одного образа, незначительно отличающихся составом программного обеспечения для решения похожих задач одной предметной области, но требующих дополнительной настройки среды моделирования. Отметим, что интеграция пакетного способа формирования контейнера с индивидуальной средой моделирования с последующим его запуском на исполнение системой управления заданиями ГВБК является отдельной прикладной задачей и зависит от конкретной модели системы управления. В ГВБК ФИЦ ИУ РАН данная интеграция проведена с использованием системы управления заданиями IBM Spectrum LSF.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты 18-29-03100, 18-07-00669). Представленные решения по созданию индивидуальной среды моделирования тестируются на ГВБК ФИЦ ИУ РАН [6].

Литература

1. *Абрамов С.М.* Анализ суперкомпьютерных киберинфраструктур ведущих стран мира // Суперкомпьютерные технологии (СКТ-2018). Материалы 5-й Всероссийской научно-технической конференции. Ростов-на-Дону 2018. С. 11–18.

2. *Sobolev S., Antonov A, Shvets P., Nikitenko D., Stefanov K., Voevodin V., Voevodin Vl., Zhumatiy S.* Evaluation of the octotron system on the Lomonosov-2 supercomputer // Материалы конференции параллельные вычислительные технологии (ПАВТ'2018) Ростов-на-Дону, 02–06 апреля 2018 г.

3. *Zatsarinny A.A., Gorshenin A.K., Kondrashev V.A., Volovich K.I., Denisov S.A.* Toward high performance solutions as services of research digital platform // *Procedia Computer Science*. Volume 150 (2019). P. 622–627.

4. *Кондрашев В.А., Волович К.И.* Управление сервисами цифровой платформы на примере услуги высокопроизводительных вычислений // Материалы Международной научной конференции. Воронеж, 3–6 сентября 2018 г.

5. *Nikitenko D.A., Voevodin Vl.V., Teplov A.M., Zhumatiy S.A., Voevodin V.V., Stefanov K.S., Shvets P.A.* Supercomputer application integral characteristics analysis for the whole queued job collection of large-scale hpc systems Параллельные вычислительные технологии (ПАВТ'2016) труды международной научной конференции. 2016. С. 20–30. Челябинск.

6. Федеральный исследовательский центр Информатика и управление РАН. [Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://hhpsc.frccsc.ru> (дата обращения: 26.08.2019).

ПРИМЕНЕНИЕ ГЛУБОКИХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ РЕШЕНИЯ МНОГОЧАСТИЧНЫХ ЗАДАЧ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

С.А. Синченко¹, Д.И. Бажанов^{1,2}

¹ *Московский авиационный институт (НИИ)*

² *ФИЦ «Информатика и управление» РАН*

Реферат. Настоящая работа связана с изучением применения глубоких искусственных нейронных сетей к задачам многих тел. Мы исследовали возможности метода Neural Quantum States для поиска основных состояний цепочек спинов в квантовой модели Изинга. Были рассмотрены различные конфигурации нейронных сетей и проведено их сравнение. Полученные в результате аппроксимации значения энергии основного состояния сравнивались с известными теоретическими моделями.

Введение

Задача многих тел является одной из ключевых задач квантовой механики. Основными подходами к решению этой задачи на сегодня являются вариационные методы, в частности квантовый метод Монте-Карло [1]. Другим известным подходом является метод, называемый Matrix Product State [2]. В то же время, нельзя не отметить, что Matrix Product State не обладает необходимой масштабируемостью, а методы Монте-Карло терпят неудачу в ряде случаев [3].

В настоящей работе детально изучается новый метод, основанный на глубоких искусственных нейронных сетях [4].

Метод Neural Quantum States

Метод Neural Quantum States [4] основан на аппроксимации волновой функции системы многих тел при помощи глубокой нейронной сети. Входами такой сети являются значения спинов, связи нейронной сети определяются структурой физической системы. Скрытые нейроны описывают саму волновую функцию, а выходом сети является величина, квадрат которой отражает вероятность наблюдения физической системы в данном состоянии.

Эксперимент

В рамках эксперимента были смоделированы различные цепочки Изинга при различных параметрах нейронной сети: плотности скрытых нейронов, а также параметрам обучения сети.

Результаты представлены на рис. 1. Для моделирования использовалась библиотека NetKet [5].

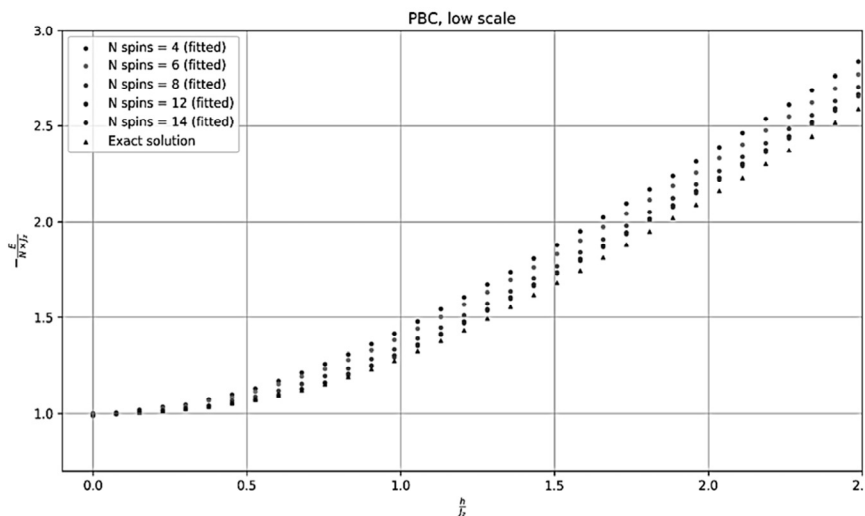


Рис. 1. Результаты моделирования в сравнении с точной диагонализацией

Можно видеть, что полученные результаты хорошо согласуются с результатами, полученными в результате точного решения задачи диагонализацией матрицы и поиском собственных значений.

Литература

1. *Metropolis, Nicholas, et al.* Equation of state calculations by fast computing machines. *The journal of chemical physics* 21.6 (1953): 1087–1092.
2. *White, Steven R.* Density matrix formulation for quantum renormalization groups. *Physical review letters* 69.19 (1992): 2863.
3. *Troyer, Matthias, and Uwe-Jens Wiese.* Computational complexity and fundamental limitations to fermionic quantum Monte Carlo simulations. *Physical review letters* 94.17 (2005): 170201.
4. *Carleo, Giuseppe, and Matthias Troyer.* Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks. *Science* 355.6325 (2017): 602-606.
5. *Carleo, Giuseppe, et al.* NetKet: A Machine Learning Toolkit for Many-Body Quantum Systems. arXiv preprint arXiv:1904.00031 (2019).

**RATING THE COMPANIES ENGAGED
IN THE DEVELOPMENT OF COMPOSITE MATERIALS
AND QUANTUM-DIMENSIONAL ELECTRONIC
HETEROSTRUCTURES**

Torosyan A.L.

*Academic adviser – Osipova V.A. Moscow Aviation Institute
(Scientific Research Institute)*

Faculty 810B, «Information technologies in modeling and management»

Technology has a great impact on our daily life. We humans invented and developed these technologies that not just change our daily life but the whole world around us.

The development of Boolean algebra along with Thomas Edison's invention of the vacuum tube became the building blocks for the entire electronics industry and provided the logical foundations for the development and modeling of digital circuits — the new offspring of materials science. Modeling and creating new materials and electronic heterostructures is penetrating and actively transforming everything from business to education alike. While many of scientists were designing the hardware and modeling the structure and properties of the composite materials for modern computers, Claude Shannon, at Bell Laboratories, worked on a theory of information to be processed by such machines. Shannon, in his thesis, showed how Boolean algebra can be simulated electronically. Shannon's result is considered the most important master's thesis of the twentieth century. He also published a paper that laid the foundation for what would become the field of information theory. Modern solid state physics with the development of the transistor, a solid-state semiconductor device, go hand-in-hand with Shannon's Fundamental Theorem of Information Science which states that all information can be represented by use of only two symbols, "0" and "1". Companies, most notably Texas Instruments and Fairchild Semiconductor, were fighting the problem, known as the "tyranny of numbers", the solution of which was the modeling and development of the integrated circuit or semiconductor chip. A new "giant", named Intel, was also started. Intel developed a brilliant idea. The company decided to build a general-purpose logic chip that could be programmed to perform any logical task. This was an advantageous approach for Intel. This chip was equivalent to the central processing unit. and became known as a microprocessor. The first microprocessor was produced and made available on the open market in

November 1971. It was a 4-bit processor called the 4004. The 4004 was used in the first scientific handheld calculators produced by Hewlett-Packard and was only powerful enough for handheld calculators. But in 1974, Intel came out with the 8080 processor, an 8-bit processor with a clock speed of 2 MHz containing about six thousand transistors. We can safely say that every aspect of our life has been impacted by the brain-children of these companies. Other IT related companies also will continue to surprise us and transform our daily lives. In business companies and corporations, the use of cloud computing, Artificial Intelligence, machine learning, predictive analytics, numerous business intelligence devices, and applications create new methods to conduct and manage the business. The rise of cloud computing and cloud storage, Machine learning and Artificial intelligence is the example, that we will soon be able to connect our body, process and store the data of human activities in real time. Digital medical records promise to save the lives of many people who die each year from various medical errors. Online information resources, such as Wikipedia, provide quick access to a breadth of knowledge that was not possible before. Information sharing via Facebook, VK, OK or Twitter has not only brought people together but has also helped spur political change around the world.

Seeing that these companies play such a tremendous role in our lives, how would we we rate those “giants”, and how would we form the initial list of our evaluation criteria? Suppose, for example, we were to rate one the most known companies in the world, say Intel. If we were not aware of Intel’s plans to develop a general-purpose logic chip, what would be the outcome of our attempt to rank the company, and vice versa, what would be the outcome if we did include this fact? But there are other questions, what if this information was not true, but we used it in our criteria for ratings. The Quality and quantity of the information, together with reliability and the authenticity are very important, as we just saw.

One way to build and analyze ratings or ranking for these companies is to use mathematical modeling which are useful both in expert and analytical rating.

The term “rating”, used in this paper, refers to an ordered list of certain objects, constructed and sorted in descending order by a certain “quality” of these objects.

The ordering of objects can be done either on the basis of a certain scale, or without it. An expert rating can be based on one or several mathematical models. The place of an object in the analytical rating is also determined on the basis of a mathematical model. But, it is im-

portant to note, that after all expert evaluations are received, the final conclusion about the place of the object in the rating is determined by the mathematical model. Places occupied by objects, or the companies in our case, are called “ranks”. the rank number 1 is usually assigned to the best. The higher the rank number, the worse some of the “qualities” of the object. This work reviews several ranking algorithms for rating companies and also suggests a new way of ranking these companies. An online software tool is also created that deploys this ranking algorithm. Rankings are usually built using the data provided by the companies or from open, publicly available data sources. So data analysis and data mining play a key role in ranking and rating the companies. The next big questions are: how good and reliable are these data, accuracy of interpretation of the data, and, as mentioned above, how to form the initial list of evaluation criteria? In this paper, author tries to answer all the these questions, lists the typical pitfalls and ways to avoid them.

Real-life examples and mathematical formulas with working code are also provided to make this work as practical as the subject suggests.

Bibliography

1. *Raiffa H.* Decision Analysis. – Addison-Wesley, Reading, Mass., 1968.
2. *Aleskerov F. Monjardet B.* – Utility Maximization, Choice and Preference. Berlin: Springer-Verlag, 2002.
3. *Roy B.* Multicriteria methodology for decision aiding. – Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1996. – 293 p.
4. *Kahneman D., Tversky A.* Choices, values, and frames. – Cambridge University Press, 2000. – 840 p.

2. В

**ПРОБЛЕМЫ РАЗВИТИЯ
МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ
КВАНТОВОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ
ГЕТЕРОСТРУКТУР**

НЕСТАБИЛЬНОСТЬ ХАРАКТЕРИСТИК МЕМРИСТИВНОГО ЭЛЕМЕНТА ПРИ ЦИКЛИРОВАНИИ КАК ФЕНОМЕН НЕЛИНЕЙНОЙ ДИНАМИКИ

И.В. Матюшкин, О.М. Орлов

АО «НИИ молекулярной электроники»

Физическая реализация мемристоров часто дается в виде структуры «металл – диэлектрик – металл» (МДМ). В зависимости от материала активного слоя эффект обратимого переключения электрической проводимости может различаться в части превалирующих физико-химических процессов, приводящих к изменению сопротивления. В роли диэлектрика обычно выступает оксид переходного металла, и за счет переменной валентности достижимы мультистабильные состояния. При внешней простоте МДМ-структуры и почти полувекового существования первой филаментарной модели мемристора, а также ставшую стандартной модель дрейфа кислородных вакансий, до сих пор нет ясного понимания физики её работы. По нашему мнению, общее объяснение состоит в том, что мемристор является хорошим примером системы, находящейся на «лезвии хаоса» (Edge of Chaos) [1], т.е. балансирующей между абсолютным порядком и непредсказуемым хаосом – в данном случае из-за наличия мультистабильности.

Экспериментально наблюдаемая [2, 3] девиация напряжений переключения мемристора при циклировании рассматривается как феномен детерминированного хаоса, а не как истинно-случайное явление. Цель работы состоит в развитии формализации и развитии предположения о том, что имеет место нелинейная динамика по крайней мере двух фазовых величин: одна из них, ставшая общепринятой – размер филамента (вдоль направления тока), а другая – ассоциируется нами с небольшим зарядом, накапливаемым в области филамента. Данный подход не претендует на точное воспроизведение сложных процессов, нося формальный характер, но открыт для включения более обоснованных физически подмоделей.

Хотя общие принципы модели должны быть детализированы для конкретных ситуаций, например, биполярного или униполярного переключения, мы неявно будем предполагать TiN-электроды и HfO_x -диэлектрик толщины $6 \div 10$ нм (рис. 1). Актуальность разработки именно формально-компактной модели, где точность и физическая обоснованность приносятся в жертву простоте реализации и скорости вычислений, обусловлена интенсивным развитием САПР.

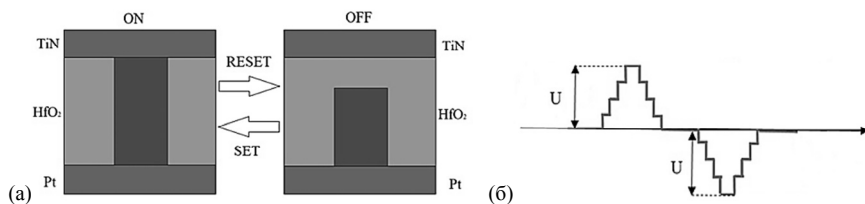


Рис. 1. Мемристивный элемент и схема его циклирования:
 (а) общая геометрия с указанием области филамента и состояний ON-OFF;
 (б) схема переключения состояний

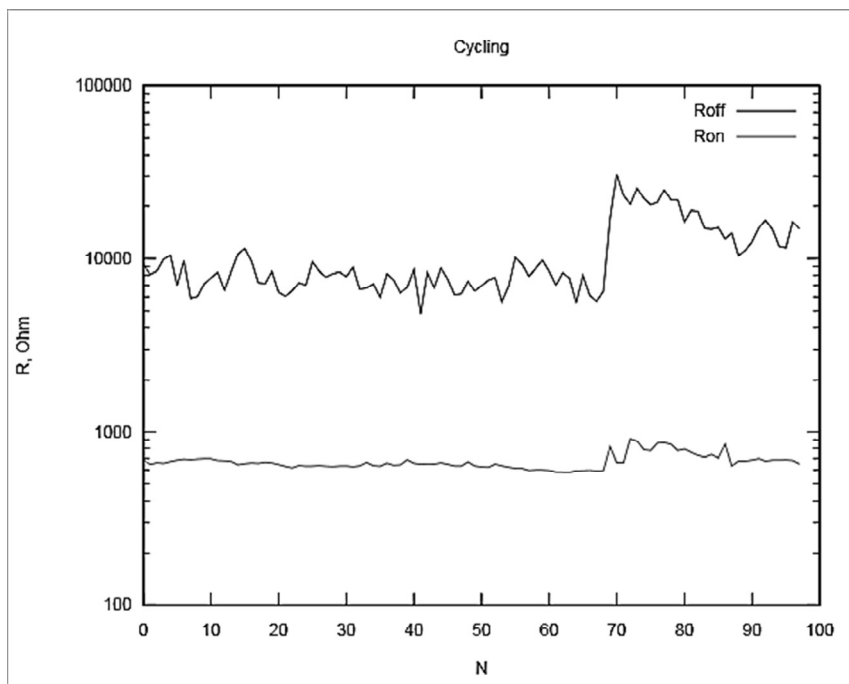


Рис. 2. Динамика ключевых параметров мемристивного элемента при его циклировании по схеме рис. 1б. Показан временной ряд $\langle R_{ON}, R_{OFF} \rangle$. Данные эксперимента

По сравнению с традиционными компонентами электрической цепи ключевым свойством мемристора является гистерезис ВАХ. Прямой и обратный ход ВАХ можно описать подгоночной алгебраической зависимостью, однако, получил распространение физически более адекватный дифференциальный подход и представление о внутренних динамических переменных s . В общем виде эту связь

можно представить системой (1), имеющей два варианта представления:

$$\begin{cases} I(t) = f_1(V(t), \mathbf{s}(t)) \\ \frac{d}{dt} \mathbf{s}(t) = f_2(V(t), \mathbf{s}(t)) \end{cases} \quad \text{или} \quad \begin{cases} I(t) = f_1(V(t), \mathbf{s}(t)) \\ \frac{d}{dt} \mathbf{s}(t) = f_2(I(t), \mathbf{s}(t)) \end{cases} \quad (1)$$

Здесь $V(t)$ – напряжение, обычно известное, на контактах мемристора, а $I(t)$ – протекающий через мемристор ток. Для мемристора практически всегда вектор \mathbf{s} отождествляют с размером (от электрода к электроду) проводящего филамента, см. рис. 1, w или с нормированной на толщину оксидного слоя D величиной $x \equiv \frac{w}{D}$, $x \in [0, 1]$. Таким образом, в существующих моделях $s \leftrightarrow w$.

Новизна нашего подхода заключается в трактовке разброса (девиации) внешних параметров мемристора при циклировании как псевдослучайного, вызванного нелинейной динамикой системы. Под циклированием мы понимаем отклик мемристора на такой подаваемый с периодом T сигнал напряжения, т.е. $V(t+T) = V(t)$, что мемристор проходит все свои мультистабильные состояния. Базовые предпосылки состоят в следующем:

P1. Девиация внешних параметров мемристора от цикла к циклу, в простейшем случае напряжений переключения $V_{SET}(n), V_{RESET}(n)$, где n – номер цикла, результат не столько случайных процессов, сколько нелинейной динамики и свойственной ей феномена детерминированного хаоса.

P2. Количество фазовых переменных динамической системы не менее двух, причем одна (w) уже присутствует в существующих моделях, а другая (Q) не имеет ясной физической интерпретации, т.е. $\mathbf{s} = (w, Q)$.

P3. Несмотря на то, что величина Q в компактной модели мемристора вводится сугубо формально, как, например, большинство SPICE-параметров модели транзистора, мы, тем не менее, для лучшего понимания ассоциируем с ней физический смысл накопленного в области филамента условно неподвижного, «фиксированного» заряда; общими условиями его возникновения служат нестехиометрия оксида, оборванные связи и многообразные ловушечные уровни.

Р4. Общей причиной изменения «фиксированного» заряда есть суммарный электронный заряд, протекший через мемристор в обоих направлениях за время от начала цикла, т.е.

$$Q(t) = Q(0) + F \left(\int_0^t I(t) dt \right), t \in [0; T],$$

где $Q(0)$ – первоначальный заряд, накопленный в начале периода; допускается, что заряд Q дискретная величина, т.е. может измеряться в единицах элементарного $Q = Ne$.

Литература

1. *Crutchfield J.P. and K. Young. Computation at the Onset of Chaos/ In W. Zurek (ed.). «Entropy, Complexity, and the Physics of Information», Reading, Massachusetts: Addison-Wesley. 1990 – pp. 223–269.*

2. *Лебедев А.О., Иванов С.В., Воронов Д.Д. и др. Исследование проблем повторяемости и воспроизводимости характеристик ячейки резистивной памяти на основе оксида гафния // Наноиндустрия. – 2018. – Т. 82, № 9. С. 234–235.*

3. *Egorov K.V., Lebedinskiy Y.Y., Markeev A.M., Orlov O.M. Full ALD TA₂O₅-based stacks for resistive random access memory grown with in vacuo XPS monitoring // Applied Surface Science. 2015. Т. 356. С. 454–459.*

ТЕПЛОВЫЕ РЕЖИМЫ РАБОТЫ НАГРЕВАТЕЛЬНОГО ЭЛЕМЕНТА ИЗ АЛЮМИНИЯ С НАНОПОРИСТЫМ ОКСИДОМ АЛЮМИНИЯ С ЛЕНТОЧНЫМ УГЛЕРОДНЫМ ЭЛЕМЕНТОМ НАГРЕВА

**Е.Н. Муратова¹, В.А. Мошников¹,
К.В. Чернякова², И.А Врублевский².**

¹ *Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет ЛЭТИ им. В.И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия
SokolovaEkNik@yandex.ru*

² *Белорусский государственный университет информатики
и радиоэлектроники, г. Минск, Беларусь*

С каждым годом увеличивается количество электронагревателей, применяемых в различных приборах промышленного и бытового назначения. Наиболее часто в конструкции экономичных тепловых приборов используется плоский электрический тепловой элемент. Это объясняется тем, что метод контактной теплопередачи характеризуется более высокой эффективностью передачи тепла по сравнению с другими типами нагрева.

Как известно, экономия электрической энергии в сфере стационарного отопления является одной из актуальных задач, на решение которой направлены усилия многочисленных разработчиков. Конструкции нагревательных систем могут быть самыми разнообразными, но основными требованиями, предъявляемыми к их разработке, является необходимость обеспечения высокой надежности в эксплуатации, экономичность, устойчивость к внешним воздействиям и высокие электрофизические характеристики. Основным элементом любого нагревательного устройства является нагреватель. Плоские резистивные нагреватели нашли широкий спектр применения в нагревательных устройствах, предназначенных для формирования здорового микроклимата в помещениях, поддержания параметров в различных технологических процессах, в системах антиобледенения, в сельском хозяйстве и в промышленности.

Применение в конструкции нагревателя металлической основы с тонким диэлектрическим слоем создает благоприятные условия для быстрой и равномерной передачи тепла к теплопринимающему элементу. Такой подход позволяет создавать элементы быстрого нагрева с равномерным распределением температуры по рабочей поверхности и высоким коэффициентом полезного действия за счет снижения потерь тепла [1, 2].

Цель настоящей работы состояла в исследовании тепловых характеристик плоских нагревателей, изготовленных на алюминиевых пластинах с ленточным углеродным элементом нагрева.

Плоский нагревательный элемент (НЭл) из алюминия имел размеры 60×24 мм. Толщина основания из анодированного алюминия составляла 0,5 мм. Толщина крышки из анодированного алюминия составляла 0,3 мм. На образцах анодированного алюминия слой пористого анодного оксида алюминия (ПАОА), сформированный методом анодирования алюминия, имел толщину 20 мкм. Такая толщина ПАОА обеспечивала необходимую изоляцию НЭл от металлического основания. В данной конструкции нагревателя углеродная электропроводящая нить на основе вискозной технической нити использовалась в качестве НЭл. Для изготовления резистивных элементов использовали нить из углеродного волокна с размерами 80 мкм (толщина)×4 мм (ширина) ×170 мм (длина) [3]. Концы нити из углеродного волокна металлизировались слоем меди (толщина 30 мкм, гальваническое осаждение) для последующей пайки в процессе сборки электрического нагревателя. Фиксацию углеродной нити на поверхности анодного оксида алюминия и за-

тем ее герметизацию осуществляли с помощью эпоксидного компаунда. Электрический нагреватель с нитью из углеродного волокна имел электрическое сопротивление 60 Ом. Измерение сопротивления диэлектрической изоляции проводилось с помощью мегаомметра Ф4101. Для получения термограмм поверхности нагревательной панели использовали тепловизионную камеру MobIR M4.

Для НЭл важной характеристикой является способность равномерного нагрева по всей площади нагревателя. В работе проведены детальные исследования таких параметров нагревателя при электрической мощности 12 Вт. Результаты тепловизионных исследований показали, что поверхность алюминия со стороны крышки имеет равномерное распределение температуры со средней температурой 52,3°C в рабочей зоне и 47,5°C в зоне контактов. Температура алюминия со стороны теплопередающего основания в рабочей зоне была равна 56,5°C и 52,0°C в зоне расположения контактов. Таким образом, при приложении электрической мощности 12 Вт плоский НЭл за 60 с нагрева выходит на температуру 56 °С для теплоотдающей поверхности.

Зависимости изменения температуры со временем нагрева на поверхности крышки НЭл и на ее обратной стороне (теплоотдающей) показаны на рис. 1.

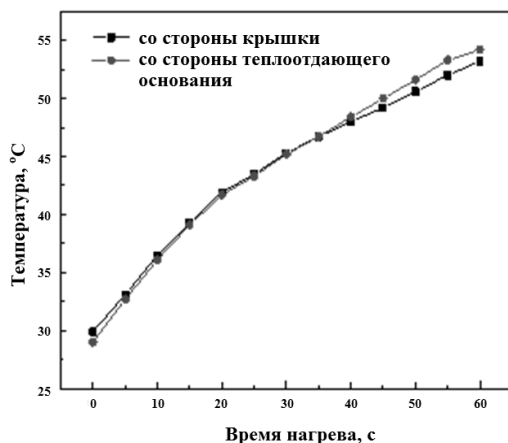


Рис. 1. Изменения температуры со временем нагрева на поверхности крышки нагревательного элемента из алюминия и на ее обратной стороне (теплоотдающей)

Результаты исследований показали, что температура на поверхности нагревателя как со стороны крышки, так и на ее обратной стороне имели близкие значения на всех стадиях нагрева. Это свидетельствует о высокой теплопроводности алюминиевой нагревательной панели, благодаря чему обеспечивается равномерный профиль распределения температуры с двух сторон нагревателя. Таким образом, высокая теплопроводность алюминия позволила теплу, генерируемому ленточным элементом нагрева, быстро перераспределиться по всему объему алюминиевой нагреваемой пластины. Следовательно, использование линейного НЭл из углеродной нити является эффективным способом нагрева алюминиевых НЭл, позволяющим обеспечить высокие скорости нагрева и равномерный профиль распределения температуры по поверхности алюминиевых элементов на всех этапах нагрева.

Литература

1. Муратова Е.Н., Мошников В.А., Лучинин В.В., Бобков А.А., Врублевский И.А., Чернякова К.В., Теруков Е.И. // Ж. технич. Физ. 2018. Т. 88, Вып. 11. С. 1678. DOI: 10.21883/JTF.2018.11.46629.2480.

2. Муратова Е.Н., Врублевский И.А., Чернякова Е.В. и др. // XIV международная конференция «Физика диэлектриков». СПб., Россия. 29 мая – 2 июня 2017. С. 136.

3. Врублевский И.А. и др. // СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии: материалы 28 Международной Крымской конференции. Крым. 9–15 сентября 2018. Севастополь: СГУ. 2018. С. 1013.

КРИТИЧЕСКАЯ ТОЛЩИНА И ЛУЧ ПСЕВДОМОРФНЫХ ЛАЗЕРНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР НА ОСНОВЕ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, ВЫРАЩЕННЫХ НА (001) GaAs И (001) InP -СУБСТРАТАХ

А.М.Ф. Аль-Дарабсе, Е.В. Маркова

*Институт авиационных технологий и управления
Ульяновский государственный технический университет*

Используя подход баланса энергии, мы оценили критическую толщину для дислокации несоответствия (MD) и изгиба пластины для одно- и многослойных псевдоморфных гетероструктур на основе InGaAs , используемых в светоизлучающих устройствах. Указы-

вая на начало релаксации напряжений посредством формирования МД, анализ критических толщин служит ориентиром для проектирования структуры устройства, избегая обширного образования дефектов, обычно сопровождающего релаксацию. Оценки структуры лука полезны для удовлетворения требований технологии обработки пластин после выращивания. Предложенная методология может быть применена для оптимизации деформированных полупроводниковых лазерных гетероструктур.

Ленточная инженерия, включая управление деформацией, стала мощным подходом к разработке современных оптоэлектронных и электронных устройств. Он был успешно применен для снижения пороговой плотности тока III–V полупроводниковых лазерных диодов, улучшения характеристик псевдоморфных транзисторов с высокой подвижностью электронов, разработки оптоэлектронных устройств на основе внутризонных оптических переходов, таких как межподзонные инфракрасные фотодетекторы и квантово-каскадные лазеры, расширения спектральный диапазон tandemных солнечных элементов и т. д. В оптоэлектронных приборах, светодиодах и лазерных диодах использование активных областей с напряженной квантовой ямой (КЯ) позволяет выбирать наиболее подходящие полупроводниковые материалы и правильно регулировать излучение. длина волны до практически важных спектральных диапазонов.

С другой стороны, использование напряженных слоев создает дополнительные проблемы. Первая – это хорошо известная проблема формирования диссоциации и дислокации нити (MD и TD) при росте напряженных эпитаксиальных слоев. В светодиодах и лазерных диодах МД (и ТД), генерируемые вблизи (и в) активной области, существенно снижают внутреннюю квантовую эффективность устройств и приводят к их ускоренному ухудшению. В электронных устройствах, таких как транзисторы с высокой подвижностью электронов, дислокации усиливают рассеяние двумерных электронов, тем самым снижая их подвижность и скорость дрейфа. Поэтому избежание образования дислокаций в напряженных гетероструктурах устройств является ключевым моментом их конструкции. Вторая проблема – изгиб растущих пластин, вызванных встроенными упругими деформациями. Сгибание нежелательно для обработки устройства после выращивания, а также для срока службы устройств в процессе их работы.

Критическая толщина квантовых ям InGaAs и изгиба пластины на рис. 1 сравниваются предсказанные значения hc для формирования MD для отдельных слоев InxGa1-xAs с различными составами, когерентно выращенными на подложках (001) InP или (001) GaAs. В случае структур InxGa1-xAs / GaAs hc резко уменьшается с мольной долей InAs x и становится настолько малым, что $hc \approx 7$ nm вблизи практически важного значения $x = 0.22$ (см. рис. 1а), соответствующего активным областям полупроводниковые лазеры, излучающие на длине волны 980 nm.

Это подразумевает, что активные области таких лазеров включают одну QW с шириной, меньшей, чем найденный выше hc . При более высоких значениях x критическая толщина уменьшается до $hc \approx 0,9$ nm в случае чистых InAs / GaAs.

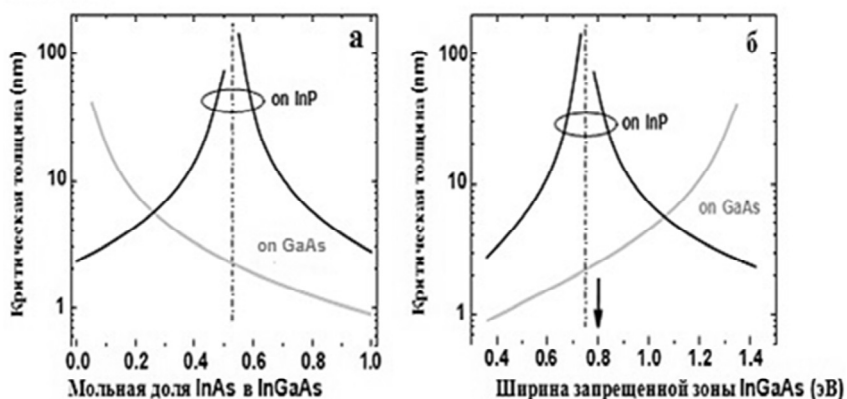


Рис. 1. Критическая толщина hc одиночного псевдоморфного слоя InxGa1-xAs, выращенного на подложке (001) InP или (001) GaAs, в зависимости от (а) состава сплава и (б) запрещенной зоны объемного недеформированного полупроводника.

Пунктирная линия обозначает состав решетки сплава, согласованной с InP. Вертикальная стрелка указывает запрещенную зону, соответствующую длине волны излучения 1,55 мкм

Используя подход энергетического баланса, распространенный на случай многослойных гетероструктур, мы оценили критическую толщину и изгиб пластины для набора псевдоморфных структур на основе InGaAs на подложках (001) GaAs и (001) InP, близких к тем, которые используются для изготовления светоизлучающих приборов. С этой целью один из параметров модели,

а именно радиус ядра дислокации, был отрегулирован так, чтобы он соответствовал критической толщине слоев InAs на подложке (001) GaAs, измеренной точно во время роста молекулярно-лучевой эпитаксии.

Ввиду продемонстрированных практических преимуществ использования компенсированных деформацией гетероструктур, анализ альтернативных механизмов релаксации напряжения, которые ограничивают их работоспособность, представляется первостепенным для будущих исследований. Предполагается, что одним из таких механизмов является морфологическая волнистость поверхности роста, сопровождающаяся локальной генерацией протяженных дефектов.

Литература

1. *Аль-Дарабсе А.М.Ф., Маркова Е.В.* Анализ авиационной безопасности: проблемы, вызовы, возможности // В сборнике: Проблемы технического сервиса в АПК Сборник научных трудов II студенческой всероссийской научно-практической конференции. 2019. С. 28–35.

2. *Аль-Дарабсе А.М.Ф., Маркова Е.В.* Использование модифицированных композиционных материалов в строительных гидротехнических сооружениях // В сборнике: Актуальные вопросы применения инженерной науки. Материалы Международной студенческой научно-практической конференции. Министерство сельского хозяйства РФ, Рязанский государственный агротехнологический университет им. П.А. Костычева. 2019. С. 325–330.

3. *Аль-Дарабсе А.М.Ф.* Исследование экономических систем в авиастроении на основе методологии функционально-стоимостной инженерии // В сборнике: Молодежь и наука XXI века Материалы Международной научной конференции. 2018. С. 470–472.

4. *Аль-Дарабсе А.М.Ф., Вольсков Д.Г.* Авиационная промышленность – смягчения последствий изменения посредством технологии и политики // В сборнике: Проблемы технического сервиса в АПК Сборник научных трудов II студенческой всероссийской научно-практической конференции. 2019. С. 21–28.

О ПЕРСПЕКТИВЕ СОЗДАНИЯ ЭЛЕМЕНТОВ ПАМЯТИ НА ОСНОВЕ НАНОЧАСТИЦ КРЕМНИЯ

**И.В. Тальзин, В.М. Самсонов,
М.В. Самсонов, С.А. Васильев**

Тверской государственный университет

Как известно, применение CD-RW и DVD-RW в качестве внешней долговременной памяти основывается на изменении отражательной способности металлического сплава при изменении фазового состояния, т.е. при переходе из кристаллического состояния в аморфное [1]. В работе [2] выдвинута и подтверждена молекулярно-динамическими экспериментами гипотеза о возможности создания элементов памяти с использованием изменения и последующего сохранения фазового состояния наночастиц Ag. В соответствии с молекулярно-динамическими (МД) результатами указанных авторов, очень быстрое, со скоростью порядка 20 ТК/с охлаждение жидкой металлической наночастицы до комнатной температуры приводит её в аморфное состояние, тогда как относительно низкая скорость охлаждения (порядка 1 ТК/с и менее) – в кристаллическое состояние. Однако в [2] не приведено соображений о том, как на практике обеспечить столь различную скорость охлаждения наночастиц, расположенных на расстоянии всего лишь в несколько нм друг от друга. Мы предлагаем использовать для подобных элементов памяти наночастицы кремния, для которых критическая скорость аморфообразования на несколько порядков ниже, чем для части металлов. Наночастицы кремния могут быть размещены, например, на подложке из аморфного углерода или на металлической подложке, кристаллическая структура которой (fcc) сильно отличается от кристаллической структуры кремния (diamond) и не будет инициировать кристаллизацию аморфного кремния.

Предварительно мы провели МД исследование размерной зависимости температуры плавления наночастиц Si, содержащей от 1015 до 100 153 атомов, т.е. в довольно широком диапазоне размеров от 3.4 до 15.6 нм. Эти исследования отвечают уточнению результатов, представленных нами в работе [3]. Выяснилось, что, в отличие от металлических нанокластеров, наночастицы Si не кристаллизуются при охлаждении со скоростями, воспроизводимыми в МД экспериментах. Для МД моделирования мы использовали из-

вестную компьютерную программу LAMMPS и потенциал Стиллинджера-Вебера [4]. На рис. 1 представлены кривые нагрева и охлаждения наночастиц Si, состоящих из 100153, отвечающие скорости нагрева охлаждения 0.2 ТК/с. При нагреве исходной кристаллической наночастицы Si при $T=1640$ К происходит её плавление. При охлаждении же расплавленной наночапли кристаллизации не происходит (рис. 1а).

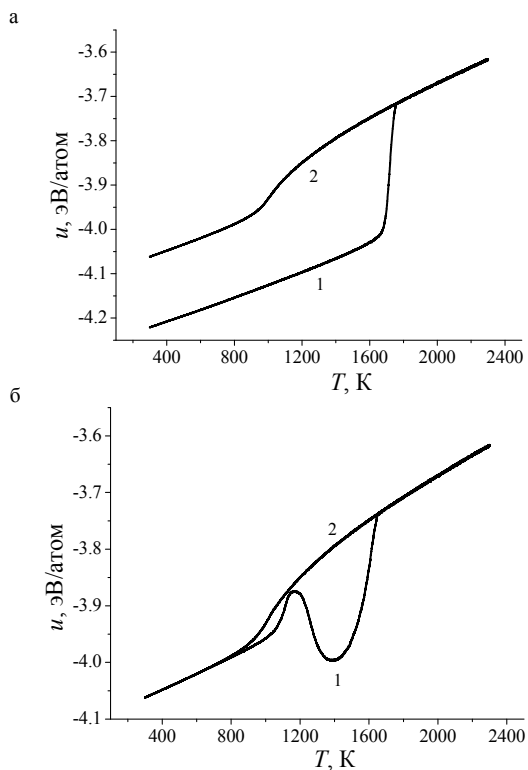


Рис. 1. Кривые нагрева (1) и охлаждения (2) наночастицы Si, состоящей из 100153 атомов:
 а – первый цикл нагрева-охлаждения,
 б – последующие циклы нагрева-охлаждения

Однако, при последующем нагреве аморфной наночастицы Si до $T=1200-1400$ К происходит её кристаллизация (рис. 1б). Кристаллизации при нагреве аморфных наночастиц Si не наблюдалась нами для наночастиц, состоящих из 1000–5000 атомов, наблюдалась в отдельных МД экспериментах для наночастиц, состоящих

10 000–30 000 атомов и во всех проведённых нами МД экспериментах для наночастиц, состоящих из 50 000 и более атомов.

Хорошо известно, что объёмные однокомпонентные металлы и островковые металлические плёнки трудно перевести в аморфное состояние [5–7]. С наночастицами Si ситуация противоположная: нагрев наночастиц Si, состоящих из 100 000 атомов до температуры 1800–1900 К и последующее охлаждение со скоростью 0.2 ТК/с до 300 К переводит их в аморфное состояние. Нагрев наночастиц Si, состоящих из 100 000 атомов до температуры 1300–1400 К переводит их в кристаллическое состояние (предполагается последующее охлаждение до 300 К с любой скоростью).

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 18-43-690001)

Литература

1. Танненбауман А. Архитектура компьютера. М.–С.Петербург, 2005.
2. Гафнер Ю.Я., Гафнер С.Л., Редель Л.В. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. Тверь: Твер. гос. ун-т, 2018. Вып. 10. С. 210–218.
3. Талызин И.В., Самсонов В.М., Пушкарь М.Ю., Дронников В.В. // Физика и техника полупроводников, 2019. Т. 53. Вып. 7, С. 964–970.
4. Stillinger F.H., Weber T.A. // Phys. Rev.B. 1985. V. 31. № 8. P. 5262–5271.
5. Полухин В.А., Ватолин Н.А. Моделирование аморфных металлов. М.: Наука, 1985.
6. Попель С.И., Спиридонов М.А., Жукова Л.А. Атомное упорядочение в расплавленных и аморфных металлах: (По данным электронографии) Екатеринбург: Изд-во УГТУ, 1997.
7. Судзуки К., Худзимори Х., Хасимото К. Аморфные металлы / Пер. с япон. М.: Металлургия, 1987.

ВЛИЯНИЕ САМООРГАНИЗАЦИИ ПОВЕРХНОСТНОГО ЗАРЯДА НА ЗАТВОРНО-ИНДУЦИРОВАННЫЕ ЭЛЕКТРОННУЮ И ДЫРОЧНУЮ ДВУМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ

В.А. Ткаченко^{1,2,3}, О.А. Ткаченко¹, Д.Г. Бакшеев^{2,4},
О.П. Сушков⁵

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

² *Новосибирский государственный университет, Новосибирск*

³ *Новосибирский государственный технический университет*

⁴ *Яндекс, Новосибирск*

⁵ *University of New South Wales, Сидней, Австралия*

Роль зарядки поверхностных дефектов является одной из основных физических проблем для полупроводниковой электроники. Мы предлагаем исследовать влияние этой зарядки на двумерный газ (ДГ) электронов, либо дырок в *нелегированной* гетероструктуре GaAs/AlGaAs. В контрасте с обычным методом модуляционного легирования, ДГ в данном случае возникает при низкой температуре под действием напряжения V_g между металлическим затвором и контактами к рабочему слою GaAs [1, 2]. Толщина подзатворного диэлектрика Al_2O_3 (20–30 нм) и разница работ выхода из прилегающих к нему GaAs и Ti полностью определяют концентрацию отрицательных зарядов $n \sim 5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ на поверхности защитного слоя GaAs в равновесии при высокой температуре, а также в случае $V_g \neq 0$ при низкой температуре. Эти заряды находятся в точечных дефектах, концентрация которых на поверхности GaAs ($\sim 10^{13} \text{ см}^{-2}$ [3]) очень велика по сравнению с n . Беспорядок в расположении поверхностных зарядов порождает флуктуации электростатического потенциала, на которых при температурах $\sim 1 \text{ К}$ рассеиваются подвижные носители в ДГ, если он размещен в 30–60 нм под поверхностью [4]. Мы промоделировали этот беспорядок и вычислили времена рассеяния носителей в ДГ, игнорируя для простоты случайное расположение и разнообразие электронных ловушек на границе GaAs/ Al_2O_3 . Предполагалось, что поверхностные заряды способны континуально перемещаться вдоль этой границы, как по идеальной плоскости, не покидая ее. В такой системе все факторы беспорядка, кроме температуры в термодинамическом равновесии, выключены. Заметим, что для подобных изолированных систем

взаимодействующих частиц давно предложен эффективный вариант метода Монте-Карло, позволяющий находить минимум внутренней энергии и равновесные расположения частиц при заданной температуре [5]. В нашей простой модели уровень беспорядка в системе поверхностных зарядов вычисляется при любой заданной температуре T алгоритмом Метрополиса [5], либо аналитически в рамках теории двумерной однокомпонентной плазмы [6]. Оба подхода адаптированы к изучаемой ситуации. При моделировании однокомпонентной плазмы важен способ, которым обеспечивается суммарный нулевой заряд, т.е. электрическая нейтральность системы. Обычно формально вводится в ту же плоскость однородный нейтрализующий фон [6–8], но в изучаемом случае нейтральность обеспечивается зарядами изображения в металле (Ti). Для найденных при фиксированной температуре распределений поверхностных зарядов на плоскости (x,y) преобразованием Фурье находится структурный фактор F_q . Для чисто случайного распределения при любых q выполняется $F_q = 1$. Для достаточно высоких температур $T > 5$ К величина F_q зависит только от модуля q волнового вектора q (рис. 1а).

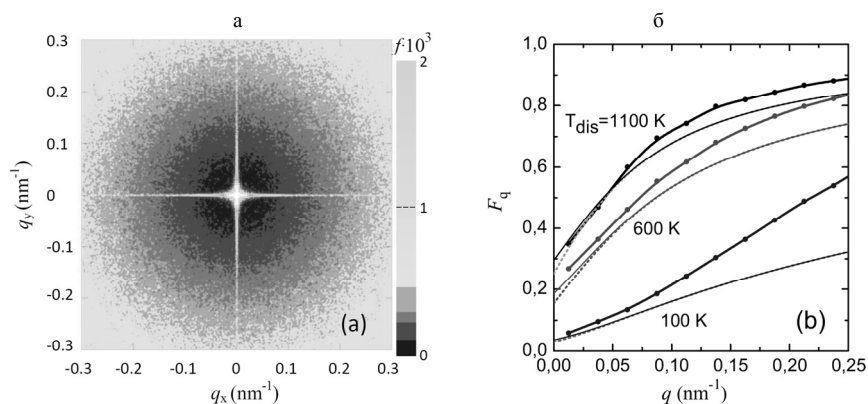


Рис. 1. (а) – Пример преобразования Фурье от распределения поверхностных зарядов на плоскости (x,y) при электростатической самоорганизации в случае $n = 5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ в равновесном состоянии с температурой $T=100$ К: расчет методом Монте-Карло, белый крест с уширением в центре связан с конечным размером области счета на плоскости (x,y) ;

(б) – Зависимость структурного фактора F_q для той же n и трех температур беспорядка T . Толстые сплошные линии получены методом Монте-Карло. Тонкие сплошные и точечные линии вычислены по теории однокомпонентной плазмы

Заметим, что для обычных структур, создаваемых методом удаленного легирования, разработана теория влияния ультра-тонких слоев заряженных примесей на низкотемпературные характеристики высокоподвижных двумерных носителей [7, 8].

В ее основе лежит знание F_q для распределения заряженных примесей. Для изучаемой нами системы построена аналогичная теория, в которой учтено присутствие металлического затвора. С ее помощью найдено, что для предсказания влияния беспорядка в расположении поверхностных зарядов на затворно-индуцированный двумерный газ важно знать лишь значения F_q в пределе малых волновых чисел q . Зависимости $F(q)$ при $q < 0.1$ в диапазоне температур $100 \text{ K} < T < \infty$ получились близкими в аналитическом расчете и в моделировании по Монте-Карло (рис. 1б).

Для того, чтобы добиться соответствия между вычисленными и экспериментальными квантовым и транспортным временами рассеяния электронов и дырок в ДГ, необходимо, чтобы значения $F(q \rightarrow 0)$ были в два-три раза меньше единицы, что получено при $T \approx 1000 \text{ K}$. Таким образом, самоорганизация поверхностных зарядов в предложенной термодинамической модели является существенной даже при столь высоких T . Поскольку мы пренебрегли всеми факторами беспорядка кроме температуры, найденное значение T является оценкой сверху для реальной температуры замораживания беспорядка, которая для систем данного типа неизвестна.

Работа выполнена в рамках гранта 19-72-30023 Российского научного фонда. Расчеты выполнялись с использованием вычислительных ресурсов МСЦ РАН. Мы благодарны сотрудникам университета Нового Южного Уэльса (Австралия) A.R. Hamilton, O. Klochan и D.Q. Wang за возможность сравнения расчетов и теории с новейшими экспериментальными данными.

Литература

1. Tkachenko O.A., Tkachenko V.A., Baksheyev D.G., Pyshkin K.S., Harrell R.H., Linfield E.H., Ritchie D.A., and Ford C.J.B. Electrostatic potential and quantum transport in a one-dimensional channel of an induced two-dimensional electron gas // J. Appl. Phys. 2001. V. 89. P. 4993.
2. Chen J.C.H., Wang D.Q., Klochan O., Micolich A.P., Das Gupta K., Sfigakis F., Ritchie D.A., Reuter D., Wieck A.D., and Hamilton A.R. Fabrication and characterization of ambipolar devices on an undoped AlGaAs/GaAs heterostructure // Appl. Phys. Lett. 2012. V. 100. P. 052101.

3. *Darling R.B.* Defect-state occupation, Fermi-level pinning, and illumination effects on free semiconductor surfaces // *Phys. Rev. B.* 1991. V. 43. P. 4071.
4. *Mak W.Y., Das Gupta K., Beere H.E., Farrer I., Sfigakis F., and Ritchie D.A.* Distinguishing impurity concentrations in GaAs and AlGaAs using very shallow undoped heterostructures // *Appl. Phys. Lett.* 2010. V. 97. P. 242107.
5. *Metropolis N., Rosenbluth A.W., Rosenbluth M.N., Teller A.H., Teller E.* Equation of State Calculations by Fast Computing Machines // *J. Chem. Phys.* 1953. V. 21. P. 1087.
6. *Gann R.C., Chakravarty S., Chester G.V.* Monte Carlo simulation of the classical two-dimensional one-component plasma // *Phys. Rev. B.* 1979. V. 20. P. 326.
7. *Efros A.L., Pikus F.G. and Samsonidze G.G.* Maximum low-temperature mobility of two-dimensional electrons in heterojunctions with a thick spacer layer // *Phys. Rev. B.* 1990. V. 41. P. 8295.
8. *Das Sarma S., Hwang E.H., Kodyalam S., Pfeiffer L.N., and West K.W.* Transport in two-dimensional modulation-doped semiconductor structures, *Phys. Rev. B*, 2015. V. 91. P. 205304.

3. С

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

МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНТРОЛИРУЕМОГО ЗАРОЖДЕНИЯ И РОСТА УПОРЯДОЧЕННЫХ АНСАМБЛЕЙ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ Si

**А.В. Двуреченский, В.А. Зиновьев, А.Ф. Зиновьева,
П.Л. Новиков, С.А. Рудин**

*ФГБУН Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова
Сибирского отделения РАН,
Новосибирск, 630090, проспект ак. Лаврентьева 13, E-mail:
dvurech@isp.nsc.ru*

Ключевой вызов в фундаментальных исследованиях и разработке технологии полупроводниковых материалов концентрируется в настоящее время в области широкого круга наноструктурированных систем, интегрируемых на технологической платформе кремниевой технологии, включающих тонкие пленки и гетероэпитаксию на структурированных кремниевых подложках. К актуальным направлениям для перспективных применений в электронике относятся селективная гетероэпитаксия, разработка гибридных структур, инженерия упруго напряженных областей для деформационно-индуцированного управления функциональными характеристиками формируемых систем, полупроводниковых приборов и схем. Инновации в этой области являются движущей силой как развития микро/нанoeлектроники, так и появления новых областей практических применений.

Наноструктуры с квантовыми точками (КТ) являются перспективными объектами для разработки нового поколения приборов нанoeлектроники и нанофотоники, совместимых с кремниевой КМОП технологией [1]. Недавний прорыв в кремниевой фотонике на основе КТ включает ряд важных достижений: лазер на квантовых точках в структурах A_3B_5 , соединенных (bonded) с Si подложкой [2], либо выращенных на Ge и Si подложках [3]; усиленная упругими деформациями фотолюминесценция от упорядоченных в плоскости роста групп квантовых точек Ge в гетероструктурах Ge/Si, [4]; лазерное излучение в гетероструктурах Ge/Si(001) с квантовыми точками Ge, в которые с помощью ионного облучения вводились локальные энергетические уровни для обеспечения прямых оптических переходов [5].

Однако полная толщина слоев GaAs, InAs и AlGaAs, включающая буферные и покрывающие слои для лазеров на квантовых точ-

ках в структурах АЗВ5 на Si и Ge подложках превышает 3 мкм. Такое сильное изменение рельефа поверхности, неприемлемое для формирования наносхем, удастся избежать только при бездефектном эпитаксиальном росте гетероструктур Ge/Si с квантовыми точками.

Для интеграции КТ с приборами кремниевой технологии необходимы разработки методов формирования ансамблей КТ, обеспечивающих рост пространственно упорядоченных и однородных по размерам, форме и химическому составу КТ. Упорядоченные ансамбли КТ обладают рядом достоинств по сравнению с хаотично распределенными КТ: более однородный химический состав и энергетический спектр КТ. Ключевым требованием к ансамблю КТ является также контролируемость пространственных координат их расположения, гарантирующая высокий уровень адресного обращения к каждой КТ.

В настоящем докладе основное внимание будет направлено на самоформирующиеся эпитаксиальные КТ Ge-на-Si. Представлены результаты разработки методов управления зарождения и роста квантовых точек (моделирование и эксперимент), связанных с формирующимся ансамблем КТ оптических явлений и энергетического спектра электронов и дырок в многослойных Ge/Si гетероструктурах с квантовыми точками Ge. Наиболее развитой технологией таких структур является деформационно-индуцированная эпитаксия Ge на Si. Формирующиеся гетероструктуры относятся ко 2 типу строения зонного спектра. Большой разрыв валентных зон (≈ 0.7 эВ) приводит к эффективной локализации дырок в Ge нанокристаллах. Деформации растяжения в Si, возникающие на границе раздела Ge/Si вследствие различия постоянных решеток Ge и Si (4%), приводят к образованию трехмерных квантовых ям, в которых происходит локализация электронов.

Такая электронная конфигурация квантовых точек делает их чрезвычайно чувствительными к изменению неоднородного поля деформаций в ансамбле квантовых точек. Развиваемые методы (моделирование и эксперимент) в управлении пространственным расположением квантовых точек обеспечивают изменение энергии связи электронов и их пространственную локализацию на квантовых точках, энергию связи и симметрию волновых функций дырок в двойных квантовых точках – искусственных молекулах, обменное взаимодействие электронов и дырок в составе экситонов.

Основные положения доклада:

1) Разработка модели и программного обеспечения трехмерного роста гетероструктур с квантовыми точками на основе метода Монте-Карло с включением упругих деформаций, используя потенциалы Киттинга и Терсофа.

2) Индуцированное механическими напряжениями зарождение и рост эпитаксиальных нанокристаллов (квантовых точек). Управление пространственным расположением квантовых точек деформационными полями при росте структур.

3) Деформационно-индуцированная локализация электронов в многослойных структурах.

4) Пространственная симметрия основного состояния в двойных вертикально связанных квантовых точках

5) Многократное увеличение силы осциллятора межзонных переходов в системе вертикально совмещенных квантовых точек.

6) Фотолюминесценция упорядоченных групп SiGe квантовых точек. Усиление фотолюминесценции в структурах с двойными квантовыми точками

8) Эффекты фотоэлектрического усиления в слоях квантовых точек при изменении их размеров и зарядовой плотности.

9) Усиление фототока дырок поверхностными плазмон-поляритонами в гибридных структурах со слоями квантовых точек

10) Инфракрасные фотоприемники излучения на основе гетероструктур Ge/Si с квантовыми точками.

11) Метод проведения одно-кубитовых и двух-кубитовых операций в системе двух обменно-связанных электронов с малым различием g -факторов в условиях наложения дополнительного слабого переменного магнитного поля, обеспечивающего как адресное обращение к выбранному кубиту, так и управление обменным взаимодействием. Оптимальные параметры системы для выполнения логических операций с минимальной погрешностью.

12) Условия пространственного упорядочения квантовых точек для подавление спиновой релаксации по механизму Дьяконова – Переля и возрастание времени спиновой релаксации/декогеренции. Условия локализации нескольких электронов с различными g -факторами на одной квантовой точке.

Работа выполнена за счет средств РНФ, грант № 19-12-00070.

Литература

1. *Dvurechenskii A.V., Yakimov A.I.* Silicon-Based Nanoheterostructures with Quantum Dots. In: *Advances in Semiconductor Nanostructures: Growth, Characterization, Properties and Applications*, Ed. by A.V. Latyshev, A.V. Dvurechenskii, A.L. Aseev. Elsevier, Amsterdam, Boston, Heidelberg, London, NewYork, 2017, p.p. 59–99.
2. *Liu A.Y., Zhang C., Norman J., Snyder A., Lubyshev D., Fastenau J. M., Liu A.W.K., Gossard A.C., Bowers J.E.* Appl. Phys. Lett. 104, 041104 (2014).
3. *Chen S., Li W., Wu J., Jiang Q., Tang M., Shutts S., Elliott S.N., Sobiesierski A., Seeds A.J., Ross I., Smowton P.M. and Liu H.* Nature Photonics 10 307 (2016).
4. *Zinovyev V.A., Zinovieva A.F., Kuchinskaya P.A., Smagina, Zh.V. Armbrister V.A., Dvurechenskii A.V., Borodavchenko O.M., Zhivulko V.D., and Mudryi A.V.* Appl. Phys. Lett. 110, 102101 (2017).
5. *Grydlik M., Hackl F., Groiss H., Glaser M., Halilovic A., Fromherz T., Jantsch W., Schäffler F. and Brehm M.* ACS Photonics 3, 298–303 (2016).

MODELLING OF GRAPHENE-BASED PLASMONIC NANOSTRUCTURES

Mikhail I. Vasilevskiy

*Centro & Departamento de Física, Universidade do Minho,
Campus de Gualtar, Braga, Portugal, and
International Iberian Nanotechnology Laboratory, Braga, Portugal
mikhail@fisica.uminho.pt*

Graphene, an atomic-thin transparent conductor with adjustable Fermi level, is a material of choice for plasmonics in the terahertz (THz) range. Surface plasmon-polaritons (SPPs) are evanescent waves involving electron density oscillations (e.g. in a 2D electron gas) and an electromagnetic (EM) field which amplitude decays exponentially with distance from the surface. SPPs' dispersion curve lies outside of the light cone, so they cannot be excited directly by propagating light. After a number of theoretical papers predicting graphene-supported SPPs (see [1] for a review), in the end of 2011 a seminal paper on SPPs in graphene was published [2]. This work triggered a new and intense research area by showing that it is possible to excite SPPs in graphene, in the THz range, by an array of micro-ribbons. In the beginning of 2012 a theoretical work followed [3], studying the manipulation of SPPs in graphene micro- and nano-ribbons. Other possible ways of coupling electromagnetic radiation in the THz and far-IR spectral region to this type of surface waves include: (i) the attenuated total internal reflection (ATR)

method employing a prism, (ii) graphene-based gratings or a graphene monolayer with modulated conductivity, (iii) a metal stripe or a slit combined with the graphene layer. Such graphene-based structures, suitable for making devices ranging from light polarisers to molecular sensors, will be reviewed in this talk, from the point of view of modelling of their observable EM properties using mostly semi-analytical methods.

The second part of the talk will be devoted to the system composed of a quantum emitter (e.g. a quantum dot, QD) located in the vicinity of a graphene layer. The idea is to use the conductive layer as a plasmonic microcavity that, in principle, can offer large Purcell factors. However, several works have shown that graphene usually quenches emitter's photoluminescence [4]. Modelling of this system employs EM Green's dyadic of the emitter [5]. It is not completely clear yet whether this is just a dissipation introduced by a lossy conductor or some resonant effects may take place for a particular matching between the QD energy levels and graphene Fermi level and non-quenching windows can be achieved. Another related interesting question concerns the possibility to control Förster Resonance Energy Transfer (FRET) between two QDs (donor and acceptor) located close to each other and also to a graphene sheet. Two dipoles located near a graphene covered interface interact not just directly but also through the polarization induced on graphene (i.e. the excitation of surface plasmons). Numerical calculations [6] indicated the possibility of FRET enhancement in such a situation, however, the physics is not completely clear and shall be re-examined.

Bibliography

1. *Yu. V. Bludov, Aires Ferreira, N. M. R. Peres, and M. I. Vasilevskiy*, Int. J. Mod. Phys. B, vol. 27. p. 1341001, 2013.
2. *L. Ju et al.*, Nature Nanotechnology, vol. 6. p. 630, 2011.
3. *Christensen J. et al.*, ACS Nano, vol. 6. p. 431, 2012.
4. *Kasry A., A.A. Ardakani, G.S. Tulevski, B. Menges, M. Copel, and L. Vyklicky*, J. Phys. Chem. C, vol. 116, p. 2858, 2012.
5. *Amorim B., P.A.D. Gonçalves, M.I. Vasilevskiy, and N.M.R. Peres*, Appl. Sci., vol. 7, p. 1158, 2017.
6. *Biehs S.A. and G.S. Agarwal*, Appl. Phys. Lett., vol. 103, p. 243112, 2013.

МНОГОМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАБОТЫ МНОГОУРОВНЕВЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ПАМЯТИ, ПРИМЕНЯЕМЫХ ДЛЯ СОЗДАНИЯ НЕЙРОМОРФНЫХ СЕТЕЙ

К.К. Абгарян

*Вычислительный центр им. А.А. Дородницына Федерального
исследовательского центра «Информатика и управление» РАН
Московский авиационный институт
(национальный исследовательский университет)*

В настоящее время искусственные нейронные сети стали эффективным инструментом для интеллектуального анализа данных, построения имитационных моделей сложных систем и процессов, распознавания образов, для решения задач классификации и кластеризации. Актуальные сегодня многоуровневые элементы резистивной памяти позволяют многократно увеличить плотность интеграции энергонезависимой памяти, а также спроектировать и создать системы с механизмом параллельных вычислений, необходимые для разработки базы для аналоговых нейроморфных сетей. Планируется, что на основе таких ячеек/матриц резистивной памяти будет создана новая элементная база компьютеров следующего поколения, работающих на новых физических принципах.

Вместе с тем, использование мемристорных элементов в составе нейроморфных устройств, для решения задач интеллектуального анализа данных сталкивается с рядом проблем. Среди них – разброс параметров переключения (напряжение, окно памяти) от ячейки к ячейке, асимметричность и нелинейные эффекты, сложность применения градиентных алгоритмов обучения вследствие дискретного характера синаптических весов. Это диктует необходимость создания оригинальных имитационных моделей и новых программных инструментов которые позволят оценить влияние возмущающих факторов на предсказательную точность и процесс обучения сети, обеспечат формирование информации для обоснованного выбора материалов, конфигурации и топологии ячеек памяти, селекторов и электродов, выработки оптимальных схемных и алгоритмических решений.

Для решения задач математического моделирования многоуровневых элементов памяти актуальным является применение разработанной в Вычислительном центре ФИЦ ИУ РАН информационной

технологии построения многомасштабных моделей, основанной на теоретико-множественном представлении физико-математических моделей и использовании информационных структур, объединяющих данные и методы их обработки [1]. На ее базе разработана оригинальная архитектура интеграционной платформы многомасштабного моделирования, которая является основой для высокопроизводительного программного комплексах [2]. Данный подход позволяет проводить эффективное параллельное решение задач с разных масштабов с учетом постоянного обмена данными.

Особенностью моделирования работы многоуровневых элементов памяти нейроморфных устройств является необходимость учета широкого спектра пространственно-временных масштабов. В данной задаче можно выделить четыре характерных масштабных уровня: (I) – уровень атомарной структуры, (II) – уровень элемента памяти, (III) – уровень нейроморфной сети, (IV) – логический уровень.

На уровне атомарной структуры (I) используется первопринципное квантово-механическое моделирование атомно-кристаллической структуры материалов с учетом примесных и искусственных структурных дефектов (например, кислородных вакансий) [3–6]. В результате проведенных расчетов определяются электронная структура, плотность носителей электрического заряда с учетом их спиновой поляризации, энергетические зоны, формируются данные для идентификации потенциалов межатомного и ионно-атомного взаимодействий, которые передаются на следующий уровень для моделирования динамики структурных элементов резистивной ячейки памяти. На уровне элемента памяти (II) осуществляется моделирование транспорта носителей заряда, тунельного перехода на интерфейсе и эволюции дефектов под действием приложенного напряжения. Для решения этой задачи проводится прямое моделирование динамики структурных элементов. Предусматривается включение в рассмотрение модели теплопереноса в элементах памяти [6].

По результатам моделирования на масштабном уровне (II) формируются данные для идентификации параметров аппроксимационных моделей, используемых на следующем масштабе (III). В настоящее время в процессе разработки находится имитационная модель, позволяющая воспроизводить работу взаимосвязанных элементов памяти в рамках нейроморфной сети. В качестве базы

планируется рассмотреть кросс-бар архитектуру устройства. На четвертом уровне (IV) – логическом, предполагается имитация работы устройства в режимах интеллектуального анализа данных и машинного обучения. Планируется рассмотреть варианты офф-лайн и он-лайн обучения, работы планируется проводить с привлечением сотрудников базовой кафедры ФИЦ ИУ РАН в МАИ. В качестве тестовых вариантов будут взяты известные примеры распознавания образов. Планируется разработка алгоритмов обновления синаптических весов, позволяющих учитывать асимметричность и нелинейные эффекты в аналоговых элементах резистивной памяти, адаптация алгоритмов построения сверточных нейронных сетей к специфике аналоговых элементов нейроморфных структур.

Вычислительные эксперименты на всех масштабных уровнях проводятся на гибридном вычислительном кластере ФИЦ ИУ РАН с использованием распараллеливания вычислений на графических процессорах.

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

Литература

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

2. *Абгарян К.К., Гаврилов Е.С., Марасанов А.М.* Информационная поддержка задач многомасштабного моделирования композиционных материалов // International Journal of Open Information Technologies. 2017. № 12. С. 24–29.
Abgaryan K.K., Mutigullin I.V., Reviznikov D.L. Theoretical investigation of 2DEG concentration and mobility in the AlGaIn/GaN heterostructures with various Al concentrations // Phys.Status Solidi (Wiley), Berlin, 2015. C12, No.12, P. 1376–1382.
<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/pssc.201400200>

3. *Абгарян К.К., Ревизников Д.Л.* Численное моделирование распределения носителей заряда в наноразмерных полупроводниковых гетероструктурах с учетом поляризационных эффектов // ЖВМ и МФ. Т. 56. № 1. 2016. С. 155–155.

4. *Abgaryan K.K.* Optimization problems of nanosized semiconductor heterostructures //Pleiades Publishing, Ltd., Russian Microelectronics. – 2018. – Vol. 47. – No. 8. – P. 561–566.

5. *Abgaryan K.K., Mutigullin I.V., Reviznikov D.L.* Computational model of 2DEG mobility in the AlGaIn/GaN heterostructures // Phys.Status Solidi (Wiley), Berlin, 2015. C12, No. 2, P. 460–465.

<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/pssc.201400200>

https://link.springer.com/chapter/10.1007%2F978-3-319-40663-3_67

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ САМООРГАНИЗАЦИИ ДЛЯ НАНОРАЗМЕРНОЙ DSA-ЛИТОГРАФИИ МЕТОДОМ КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ

Е.С. Горнев^{1,2}, М.В. Литаврин^{1,2}, И.В. Матюшкин¹,
А.А. Резванов¹

¹ АО «НИИ молекулярной электроники», г. Москва, Зеленоград

² Московский физико-технический институт
(государственный университет), г. Долгопрудный
egornev@niime.ru, mlitavrin@niime.ru, imatushikin@niime.ru,
arezvanov@niime.ru

Ключевые слова: направленная самосборка (DSA), клеточные автоматы, блок-сополимер, литография.

Минимальный размер структур определяется, в первую очередь, литографией, и по мере масштабирования минимальных размеров интегральных схем процессы литографии становятся все более и более дорогими за счет дополнения литографии операциями травления и осаждения для выхода за пределы разрешения сканера. Для масштабирования за пределы технологической нормы 28 нм с помощью иммерсионной литографии требуется двойное паттернирование (SADP, LELE), за пределы нормы 14 нм – четырехкратное (SAQP). Поэтому в настоящее время активно разрабатываются альтернативные методы, одним из которых является метод направленной самосборки (DSA, Directed Self-Assembly) [1]. В работе рассматривается моделирование процесса самосборки методом клеточных автоматов (КА) с использованием соотношений теории сополимеров. Использование КА релевантно, т.к. они удобны [2] для описания процессов самоорганизации.

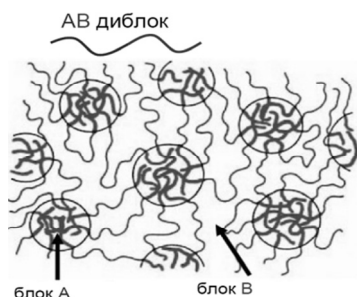


Рис. 1. Блок-сополимер после самосборки

Метод DSA заключается в усилении разрешения иммерсионной литографии за счет происходящей при отжиге самосборки раствора блок-сополимера, нанесенного на предварительно сформированную структуру, направляющую эту самосборку (рис. 1). Размеры полученных структур могут быть в пределах 5–50 нм (рис. 1). Схема маршрута DSA представлена на рис. 2.

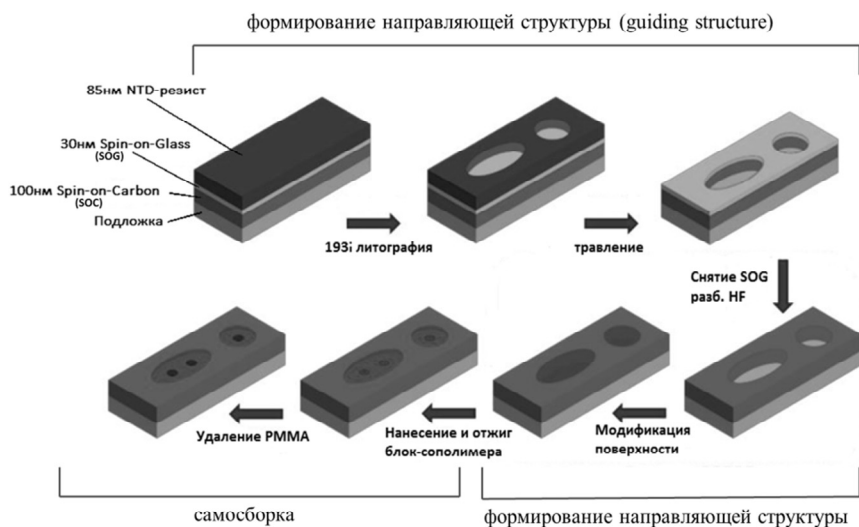


Рис. 2. Схема DSA

Основные положения и характеристики модели [3]: цепь блок-сополимера аппроксимирована сегментами Куна, что предполагает жесткие звенья, свободно вращающиеся относительно друг друга; пространственный квант клеточного автомата взят равным длине Куна для полистирола; квант времени связан с процессами переноса, точнее коэффициентами самодиффузии и кинематической вязкости. Для определения кванта времени использована модель Рауза; величина кванта времени оценена величиной $\sim 5,3 \cdot 10^{-5}$ с; моделируемый объем разбивается на шестигранные шайбы с линейным размером равным пространственному кванту автомата; горизонтальные слои расположены относительно друг друга со сдвигом для лучшей однородности по пространству.

На основании данных положений написана программа, получены первые результаты.

Литература

1. Красников Г.Я., Гуцин О.П., Литаврин М.В., Горнев Е.С., DSA – комплементарный метод усиления разрешения иммерсионной литографии // Электронная Техника. Серия 3: Микроэлектроника. 2017. С. 4–17.

2. Красников Г.Я., Горнев Е.С., Матюшкин И.В., Вильданов Р.Р., Коробов С.В., Клеточные автоматы и наноиндустрия, Научное обозрение, 2015, № 1. С. 161–172.

3. Gornev E., Litavrin M., Matyushkin I., and Gushin O. Cellular automata method for directed self-assembly modeling, Proc. SPIE 11022, International Conference on Micro- and Nano-Electronics 2018, 110221N (15 March 2019).

МОДЕЛИРОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК ПОЛЕВОГО ЭЛЕМЕНТА ХОЛЛА

В.Н. Мордкович¹, К.К. Абгарян^{2,3}, Д.Л. Ревизников^{2,3}

¹ *Институт проблем технологии микроэлектроники
и особочистых материалов РАН, г. Черноголовка*

² *Вычислительный центр им. А.А. Дородницына Федерального
исследовательского центра «Информатика и управление» РАН*

³ *Московский авиационный институт
(национальный исследовательский университет)*

Полевой элемент Холла (ПЭХ) представляет собой тонкоплёночный транзистор с двухзатворной управляющей системой типа металл – диэлектрик – кремний – диэлектрик – металл со встроенным $n^+ - n - n^+$ каналом, причём на боковых гранях канала сформированы два противоположащих n^+ омических (холловских) контакта, предназначенных для измерения эдс Холла [1]. Схема полевого элемента (датчика) Холла представлена на рис. 1.

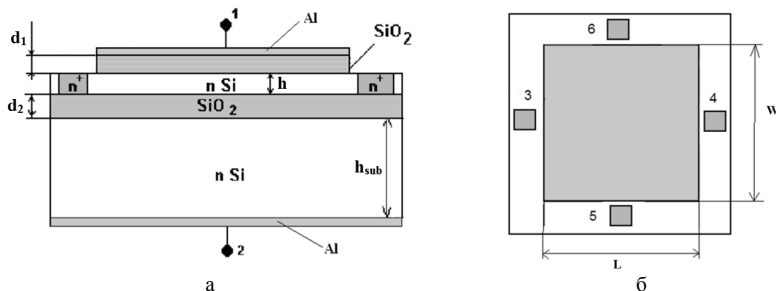


Рис. 1. Гетероструктура диэлектрик – кремний – диэлектрик:

- 1, 2 – контакты верхнего и нижнего затворов, 3, 4 – токовые (омические) контакты, 5, 6 – боковые измерительные контакты;
а) поперечное сечение, б) вид сверху

ПЭХ изготавливается по технологии «кремний на изоляторе» (КНИ). При формировании фронтальной МДП системы используется стандартный процесс термического окисления Si и формирование на окисле электрода затвора (на основе легированного поликристаллического Si). В качестве второй (нижней) управляющей системы используется слой скрытого диэлектрика (SiO_2) КНИ структуры и Si подложка, металлизированная на поверхности. ПЭХ может функционировать как в режиме обогащения поверхностных областей электронами, так и в режиме обеднения электронами. Выбор режима определяет величину и форму магнитоиндуцированного сигнала, управляемого знаком и величиной потенциала полевых затворов (положительный потенциал – обогащение, отрицательный – обеднение). В режиме обогащения ПЭХ по сути дела представляет собой систему из двух параллельно соединённых транзисторов, каналы которых, прилегающие к $\text{SiO}_2 - \text{Si}$ интерфейсам, разделены областью Si, частично обедненной электродами.

Отметим, что в отличие от МОП транзистора, в ПЭХ принципиально важна магнито – передаточная характеристика, т.е. зависимость эдс Холла V_x от знака и величины потенциалов затворов. Известно, что $V_x \approx I \cdot B$, где I – ток через элемент Холла, B – величина магнитной индукции. В ПЭХ общий ток зависит от токов, протекающих через обогащённую область, причём в каждой из которых ток зависят не только от потенциала собственного затвора, управляющего проводимостью расположенного вблизи соответствующей поверхности канала обогащённой области, но и от потенциала другого затвора (так называемый эффект зарядовой связи, зависящий от толщины Si слоя, концентрации доноров и напряжения питания). Кроме того, как правило, толщина SiO_2 под фронтальным затвором существенно меньше, чем толщина слоя скрытого диэлектрика КНИ структуры (в экспериментах это различие может составлять 20 нм и 400 нм соответственно). Следовательно, ПЭХ не является осесимметричным прибором, и характеристики «верхнего» и «нижнего» аккумулированных каналов могут существенно различаться.

При проектировании и оптимизации ПЭХ необходимо учитывать большое количество взаимно – влияющих параметров. Речь идёт о сочетании конструктивных и геометрических параметров, физических свойствах канала, подложки, диэлектрических слоёв и $\text{SiO}_2 - \text{Si}$ интерфейсов, диапазона напряжения питания и потенциалов управляющих затворов. Существенно, что выбор этих параметров во многих случаях осложняется их взаимозависимостью. Экс-

периментальное определение их значений требует длительных и неоправданно дорогостоящих экспериментов.

В этой связи актуальным представляется применение вычислительной модели ПЭХ, учитывающей многообразие взаимовлияющих факторов. В Вычислительном центре имени А.А. Дородницына ФИЦ ИУ РАН была разработана многомасштабная вычислительная модель для расчета многослойных полупроводниковых структур, которая показала достаточно высокую точность моделирования как в плане расчета концентрации носителей в двумерном электронном газе, так и касательно подвижности электронов [2–6]. В настоящей работе эта модель была модифицирована применительно к расчету полевых элементов Холла. Ключевую роль играет распределение плотности носителей заряда поперек слоистой структуры. С целью его определения решается система уравнений Шредингера-Пуассона. Полученная информация поступает в модель следующего масштабного уровня, где осуществляется расчет токовых характеристик элемента. Проведенные вычислительные эксперименты показали, что результаты моделирования хорошо согласуются с экспериментальными данными, полученными для ПЭХ. Разработанная компьютерная модель позволяет оперативно проводить многовариантный анализ слоистых структур, что создает основу для оптимизации устройств рассматриваемого класса.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-08-01191А.

Литература

1. Leonov A.V., Malykh A.A. Mordkovich V.N., Pavlyuk M.I. Field Controlled Si Hall Element with Extended Operation Temperature Range from Liquid Helium Temperature up to 650K // *Procedia Engineering*. – 2015. – V. 120. – P. 1197–1200.
2. Абгарян К.К., Ревизников Д.Л. Вычислительные алгоритмы в задачах моделирования и оптимизации полупроводниковых гетероструктур. – М.: МАКС Пресс, 2016, 120 с.
3. Абгарян К.К., Ревизников Д.Л. Численное моделирование распределения носителей заряда в наноразмерных полупроводниковых гетероструктурах с учетом поляризационных эффектов // *Журнал вычислительной математики и математической физики*, 2015. Т. 56, № 1. С. 153–164.
4. Abgaryan K. ., I. V. Mutigullin, D.L. Reviznikov. Computational model of 2DEG mobility in the AlGa_N/Ga_N heterostructures. // *Physica Status Solidi (c)*, 2015, V. 12, No. 4–5, 460–465.
5. Abgaryan K.K., I.V. Mutigullin, D.L. Reviznikov. Theoretical investigation of 2DEG concentration and mobility in the AlGa_N/Ga_N heterostructures with various Al concentrations // *Physica Status Solidi (c)*, 2015. V. 12. No. 12, pp. 1376–1382.
6. Абгарян К.К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. – М.: МАКС Пресс. 2017. 284 С.

PERPENDICULAR MAGNETIC TUNNEL JUNCTIONS WITH A DUAL-FECOB / MGO-INTERFACED STORAGE-LAYER: PARAMETER EXTRACTION AND MODELING

**B.M.S. Teixeira¹, A.A. Timopheev², N. Caçoilo^{1,2}, S. Auffret²,
R.C. Sousa², B. Dieny², N.A. Sobolev^{1,3}**

¹ *Physics Department & i3N, University of Aveiro, 3810-193 Aveiro, Portugal*

² *Univ. Grenoble Alpes, CEA, CNRS, Grenoble INP, IRIG, SPINTEC, F-38000
Grenoble, France*

³ *National University of Science and Technology «MISiS»,
119049 Moscow, Russia*

The influence of temperature, FeCoB layer thickness, and insertion of ultrathin metal spacers (Ta and W) on the magnetic anisotropy of MgO / FeCoB / MgO free layers has been explored by means of ferromagnetic resonance (FMR). The second-order contribution to the perpendicular magnetic anisotropy (PMA), stemming from the fluctuations of the first-order term, accounts for the onset of an easy-cone magnetic state in the course of the transition from the in-plane to out-of-plane magnetization. Since the second-order term is small, the easy-cone state is stable only within a narrow range of free-layer thicknesses and temperatures, where the interfacial first-order PMA term gets counterbalanced by the magnetostatic term. We have found that the insertion of metallic spacers in the middle of the FeCoB layer noticeably widens the range of thicknesses and temperatures for obtaining the easy-cone state. We show that the W spacer outperforms its Ta counterpart in this enhancement, albeit increasing the magnetization damping due to a higher degree of alloying with FeCoB. A physical mechanism of the easy-cone stabilization is proposed. It considers a variation of the local saturation magnetization (M_s) and, notably, Curie temperature (T_C) near the MgO / FeCoB interface versus the distance to the metal spacer (or the capping) layer. The larger M_s and T_C values near MgO provide more thermal stability to the first-order PMA (k_{S1}), while the lower M_s and T_C ones near the spacer layer result in a faster drop of the magnetostatic term with temperature. As a result, the effective PMA field exhibits a thermal stabilization effect that can be exploited to stabilize the easy-cone anisotropy. Alongside the improved conditions for setting an easy cone in the MgO / FeCoB / MgO free layers, we demonstrate that an easy-cone configuration with an almost temperature-independent opening angle can be obtained using a MgO / FeCoB(1.6 nm) / Ta free layer.

The work was supported by the FCT of Portugal through the project I3N / FSCOSD (Ref. FCT UID/CTM/50025/2013) and the PhD student-ship (Ref. PD/BD/113944/2015). N.A.S. acknowledges support by the grant no. K3-2018-025 of NUST “MISiS”.

ИССЛЕДОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ ОРТОРОМБИЧЕСКОЙ ФАЗЫ В ОКСИДЕ ГАФНИЯ МЕТОДОМ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

А.Г. Итальянцев¹, В.С. Константинов¹

¹ *АО «НИИ молекулярной электроники», г. Москва, Зеленоград*

Оксид гафния – один из перспективных материалов современной микроэлектроники. Уже долгое время он применяется как диэлектрический слой конденсаторов в микросхемах динамической памяти и рассматривается как *high-k* диэлектрик вместо оксида кремния в качестве подзатворного диэлектрика или функциональный слой резистивной памяти [1]. В 2011 году [2] было впервые показано наличие в HfO_2 переключаемой поляризации. Дальнейшие исследования [3] подтвердили этот результат.

Сегнетоэлектрический эффект вызван орторомбической фазой $f\text{-HfO}_2$, которая наиболее вероятно формируется из тетрагональной фазы $t\text{-HfO}$ [4]. Для получения орторомбической фазы в тонкие плёнки оксида гафния вводятся, например, атомы Zr, Si, La. Для стабилизации фазы $f\text{-HfO}_2$ необходимо выполнить термический отжиг после нанесения верхнего электрода. Требуется учитывать, что необходимая температура отжига зависит от стехиометрического состава плёнки. Есть основания полагать, что значительный вклад вносят механические напряжения, возникающие вследствие разности коэффициентов термического расширения оксида гафния и контактирующими с ним подслоями [5, 6]. Таким образом, возникают не менее трёх факторов, влияющих на формирование орторомбической фазы: стехиометрический состав, давление и температура. Число их возможных комбинаций столь велико, что представляется затруднительным полноценное экспериментальное исследование их совместного влияния на формирование $f\text{-HfO}_2$ экспериментальными методами. В связи с этим в настоящей работе указанное исследование выполнено методом математического моделирования.

Для достижения поставленной цели вычислены свободная энергия Гельмгольца ячеек моноклинной, тетрагональной и полярной орторомбической фаз оксида гафния при давлениях до 40 ГПа и температурах до 2000 К с применением расчётов из первых принципов. Свободная энергия Гельмгольца находилась по формуле:

$$F_{\varphi} = U_{\varphi} + U_{\varphi}^{vib}(T) - TS_{\varphi}, \varphi \in \{m, t, f\} \quad (1)$$

где U_{φ} – энергия основного состояния, $U_{\varphi}^{vib}(T)$ – вклад фононных колебаний при температуре T , T – абсолютная температура, S_{φ} – вибрационная энтропия.

Фононный вклад в свободную энергию получен в соответствии § 71 в [7].

Вычисления выполнены в программном комплексе Quantum Espresso v. 6.3 [8] с применением обменно-корреляционного потенциала [9] и псевдопотенциалов гафния и кислорода [10], сетки Монкруста-Пака $4 \times 4 \times 4$ и базиса плоских волн с энергиями до 200 Ry на мощностях Гибридного высокопроизводительного вычислительного комплекса (ГВВК) в составе ЦОД ФИЦ ИУ РАН.

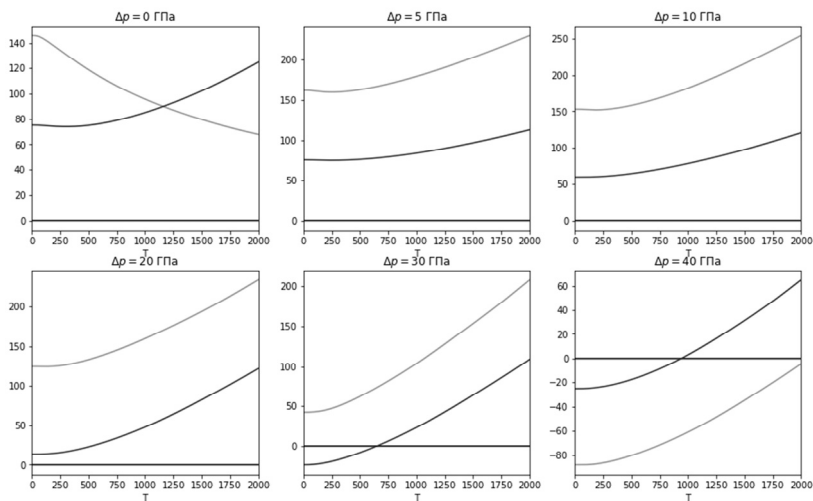


Рис. 1. Зависимости термодинамических стимулов: $\Delta F_m(T)$ (серые кривые), ΔF_{mt} (светлые кривые), черный – базовый уровень моноклинной фазы для давлений 0, 5, 10, 20, 30, 40 ГПа

На рис. 1 показаны зависимости термодинамического стимула перехода из тетрагональной фазы в моноклинную $\Delta F_{mt}(T)$ и из орторомбической в моноклинную $\Delta F_m(T)$. Из них видно, что

$\Delta F_{\text{mf}}(T) > 0$ и $\Delta F_{\text{mf}}(T) > 0$, то есть свободная энергия моноклинной фазы меньше свободной энергии тетрагональной и орторомбической фаз в большей части рассмотренного диапазона давлений и температур.

Термодинамический стимул $\Delta F_{\text{mf}}(T)$ положителен и больше, чем $\Delta F_{\text{mf}}(T)$ при давлении до 30 ГПа. С увеличением давления кривая $\Delta F_{\text{mf}}(T)$ сдвигается в область меньших значений и при давлении 40 ГПа оказывается ниже, чем соответствующие зависимости моноклинной и орторомбической фаз.

Увеличение давления приводит к смещению кривых $\Delta F_{\text{mf}}(T)$ орторомбической фазы в зону меньших энергий. При давлении 30 ГПа и температуре до 600 К $\Delta F_{\text{mf}}(T) < \Delta F_{\text{mf}}(T)$ и $\Delta F_{\text{mf}}(T) < 0$, т.е. свободная энергия орторомбической фазы меньше свободной энергии и моноклинной, и тетрагональной фаз. Учёт дисперсии тепловых колебаний атомов в кристаллической решётке сдвигает режимы стабилизации фазы f-HfO₂ в сторону меньших давлений и температур.

Литература

1. Орлов О.М. и др. Ячейка энергонезависимой памяти на эффекте резистивного переключения в оксидных пленках Hf_xAl_{1-x}O_y // Микроэлектроника. – 2014. – Т. 43. – №. 4. – С. 243–243.
2. Ferroelectricity in hafnium oxide thin films / T.S. Börscke, J. Müller, D. Bräuhaus u др. // Applied Physics Letters. 2011. Т. 99, No 10. С. 102903.
3. Ferroelectricity and Antiferroelectricity of Doped Thin HfO₂ – Based Films / Min Hyuk Park, Young Hwan Lee, Han Joon Kim [и др.] // Advanced Materials. 2015. Т. 27, No 11. С. 1811–1831.
4. Park M.H. et al. Understanding the formation of the metastable ferroelectric phase in hafnia–zirconia solid solution thin films //Nanoscale. – 2018. – Т. 10. – №. 2. – С. 716–725.
5. The effects of crystallographic orientation and strain of thin Hf_{0.5}Zr_{0.5}O₂ film on its ferroelectricity / Min Hyuk Park, Han Joon Kim, Yu Jin Kim u др. // Applied Physics Letters. 2014. Т. 104, No 7. С. 072901.
6. Pešić M. et al. A computational study of hafnia-based ferroelectric memories: from ab initio via physical modeling to circuit models of ferroelectric device //Journal of Computational Electronics. – 2017. – Т. 16. – №. 4. – С. 1236–1256.
7. Ландау Л.Д., Лившиц Е.М. Теоретическая физика: Учеб. пособ.: Для вузов. В 10 т. Т. V. Статистическая физика. Ч. I – 5-е изд., стереот. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002. – 616 с. – ISBN 5-921-0054-8 (Т. V).
8. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials / Paolo Giannozzi, Stefano Baroni, Nicola Bonini u др. // Journal of physics: Condensed matter. 2009. Т. 21, No 39. с. 395502.
9. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple // Physical review letters. – 1996. – Т. 77. – №. 18. – С. 3865.
10. Hartwigsen C., Gædecker S., Hutter J. Relativistic separable dual-space Gaussian pseudopotentials from H to Rn //Physical Review B. – 1998. – Т. 58. – №. 7. – С. 3641.

МЕЗОСКОПИЧЕСКОЕ РАСШИРЕНИЕ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

А.А. Журавлев^{1,2}, К.К. Абгарян^{1,2}, Д.Л. Ревизников^{1,2}

¹ *Московский авиационный институт*

(национальный исследовательский университет)

² *Вычислительный центр им. А.А. Дородницына Федерального
исследовательского центра «Информатика и управление» РАН*

Особенностью моделирования объектов современного материаловедения является необходимость учета широкого спектра пространственно-временных масштабов. В такой ситуации актуальным является применение комплекса взаимосвязанных математических моделей и вычислительных алгоритмов, описывающих исследуемые процессы на разных масштабных уровнях [1]. На наномасштабном уровне мощным инструментом является молекулярно-динамическое моделирование. При этом система рассматривается как совокупность взаимодействующих дискретных элементов (атомов, молекул), динамика которых описывается законами классической механики. Потенциалы межэлементного взаимодействия могут быть получены из решения задачи параметрической идентификации с применением первопринципных квантово-механических расчетов, что соответствует общей концепции многомасштабного моделирования [1]. Такой подход при современном уровне развития вычислительной техники позволяет моделировать поведение систем, состоящих из десятков и сотен миллионов структурных элементов, что соответствует нанометровому диапазону размеров (до 1 мкм). Применение в качестве дискретных элементов структурных образований, состоящих из большого числа атомов или молекул, позволяет выйти на мезоскопический уровень описания систем. Ключевым моментом при этом является наличие информации о параметрах взаимодействия между элементами. В ряде задач такую информацию удастся получить, опираясь на знание макро характеристик материалов [2, 3]. Однако больший интерес представляет построение модели на основе знания микро-структуры материалов (атомарный состав, кристаллическая решетка, размер и форма зерен и т.д.) и потенциалов межатомного взаимодействия. Это существенно расширяет сферу приложений дискретно-элементного моделирования и открывает возможности исследования новых материалов.

В предлагаемом методе дискретные элементы представляют собой тетраэдры, взаимодействующие между собой по смежным граням. Из тетраэдров формируются кристаллиты, характеризующиеся определенной ориентацией кристаллической решетки. С каждым дискретным элементом ассоциируется представительный фрагмент (сэмпл) атомарной структуры. Для кристаллических тел это фрагмент кристаллической решетки, ориентация которой соответствует ориентации решетки в кристаллите (рис. 1).

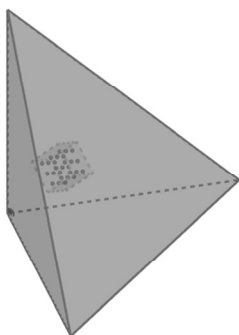


Рис 1

Дискретный элемент и ассоциированный с ним сэмпл атомарной структуры

Предполагается, что тензоры напряжений и деформаций дискретного элемента и его атомарного сэмпла одинаковы. Тензор напряжений на атомарном уровне рассчитывается с помощью молекулярно-динамического моделирования. Эта информация передается на уровень элемента, что позволяет рассчитать тензор деформации элемента, предварительно определив силы, действующие на вершины элемента и произведя расчет динамики вершин. Рассчитанный тензор деформации передается на атомарный уровень, производится деформация атомарного сэмпла, после чего снова осуществляется молекулярно-динамическое

моделирование, определяется тензор напряжений и процесс повторяется.

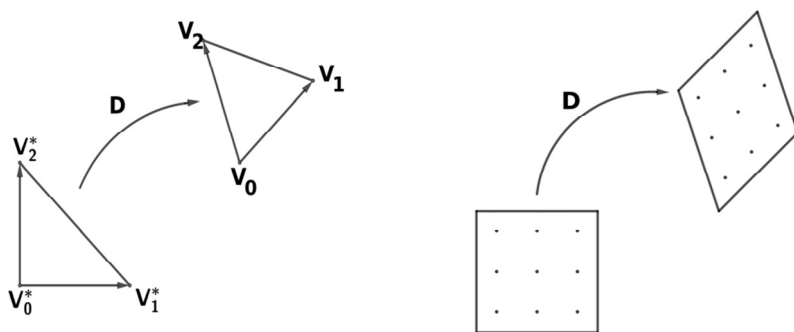


Рис 2. Деформация элемента и атомарного сэмпла

В ходе моделирования может произойти разрушение связей. Предполагается, что все разрывы происходят по границам кристаллитов, так как сами кристаллиты значительно прочнее, чем связи между ними. Для идентификации разрушения связи между кристаллитами в процессе моделирования на границах элементов, соответствующих различным кристаллитам, вводятся в рассмотрение граничные атомарные сэмплы, которые состоят из пары фрагментов кристаллических структур в ориентациях, соответствующих соседним кристаллитам. За счёт различной ориентации кристаллических решёток в граничных атомарных сэмплах процесс разрушения происходит легче, чем в монокристаллах.

Следует отметить, что предлагаемый подход связан с существенными вычислительными затратами. Трёхмерная модель объекта требует значительного количества дискретных элементов, тогда как для каждого элемента необходимо производить релаксацию в ассоциированных атомарных сэмплах путем молекулярно-динамического моделирования. В этой связи в настоящей работе осуществляется распараллеливание вычислений на графических процессорах. Вычислительный процесс хорошо отображается на архитектуру графических процессоров, поскольку состоит из решения множества не слишком больших независимых задач (молекулярно-динамическое моделирование внутри каждого атомарного сэмпла).

Апробация разработанной дискретно-элементной модели на ряде задач упруго-пластической деформации и разрушения металлов с использованием потенциала погруженного атома показало достаточно высокую точность при приемлемых временах расчета. Вычислительные эксперименты проводились на высокопроизводительном вычислительном комплексе гибридной архитектуры ФИЦ ИУ РАН.

Предлагаемый подход позволяет проводить компьютерное моделирование объектов из новых материалов, для которых известны только их атомарный состав и распределение кристаллитов по размерам, а также материалов с аморфной структурой.

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

Литература

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

2. Абгарян К.К., Журавлев А.А., Загордан Н.Л., Ревизников Д.Л. Дискретно-элементное моделирование внедрения шара в массивную преграду. // Компьютерные исследования и моделирование – 2015. – Т. 7, № 1. – С. 71–79.

3. Абгарян К.К., Елисеев С.В., Журавлев А.А., Ревизников Д.Л. Высокоскоростное внедрение. Дискретно-элементное моделирование и эксперимент // Компьютерные исследования и моделирование – 2017. – Т. 9, № 6. – С. 937–944.

СОПРЯЖЕННОЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЫРАЩИВАНИЯ КРИСТАЛЛОВ *KDP* ИЗ РАСТВОРА

Н.А. Вerezуб, А.И. Простомолотов

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского
Российской академии наук, Москва, Россия,
verezub@ipmnet.ru

Рассмотрены результаты математического моделирования процесса выращивания *KDP* кристаллов из раствора. Сопряженное моделирование выполнено в соответствии с общепринятой методикой расчета процессов гидродинамики и массопереноса при выращивании кристаллов из водно-солевых растворов [1].

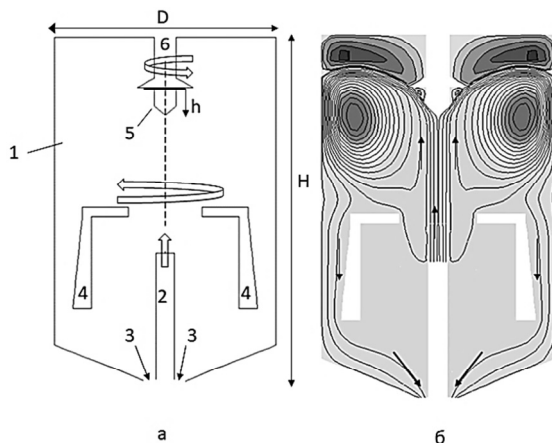


Рис. 1. Схема процесса кристаллизации (а) и линии тока раствора в кристаллизаторе без вращения кристалла и мешалки (б)

Течение раствора происходит в составной конструкции кристаллизатора, показанной на рис. 1а. Раствор полностью заполняет контейнер (1), гидродинамические потоки в котором вызваны втеканием раствора из трубки (2) и его вытеканием через трубку (3), а

также действием внутренней вращающейся мешалки (4). Кристалл (5) и мешалка (4) могут вращаться в одну или разные стороны с постоянными скоростями или в ускоренно-замедленных режимах. На структуру потоков также оказывает влияние форма и расположение модели кристалла (5). Размеры рабочей зоны: $D = 0.12$ м – радиус, $H = 0.185$ м – высота цилиндрического кристаллизатора. Кристалл имеет диаметр $d = 0.01$ м и длину $h = 0.015$ м.

Для определения вектора скорости $\mathbf{V} = (V_r, V_z)$ и давления P в растворе решаются уравнения Навье–Стокса и неразрывности, записываемые в векторном виде следующим образом:

$$\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + (\mathbf{V}\nabla)\mathbf{V} = -\frac{1}{\rho_o}\nabla P + \nu\Delta\mathbf{V}, \quad \text{div}\mathbf{V} = 0 \quad (1)$$

t – время, ρ_o – плотность раствора, $\mu = \nu \times \rho = 5.64 \times 10^{-4}$ кг/мс – динамическая вязкость раствора, где ν – кинематическая вязкость. Численное решение проведено в осесимметричном приближении методом контрольных объемов по программе *Ansys/Fluent* [2].

Совместно с уравнениями Навье–Стокса решается уравнение для переноса KDP соли:

$$\frac{\partial M}{\partial t} + \mathbf{V}\nabla M = D\Delta M \quad (2)$$

где $M = \rho_o C$ – концентрация соли в растворе [кг/м³], C – относительная масса соли на 1 кг раствора.

Для расчета по уравнениям (1–2) задаются следующие граничные условия для искомым распределений скорости и концентраций солей: *на участке втекания раствора из трубки* – 2 задается скорость струи и концентрация соли $V = V_o$, $C = C_o$, где $C_o = \exp(\sigma_o) \times C_e$ [3] при известных величинах пересыщения водно-солевого раствора σ_o и равновесной концентрации соли C_e ; *на границе вытекания из контейнера* – 3 задается скорость вытекания и солевой поток; *на боковой стенке кристаллизатора* – 2 скорость и солевые потоки задаются равными нулю, *на поверхности кристаллизации* – 4 задается соотношение баланса масс:

$$\rho_o D \frac{\partial C}{\partial n} = R(\rho_s - C_e \rho_o) \quad (3)$$

где ρ_s – плотность кристалла и R – скорость кристаллизации, рассчитываемая по следующей термодинамической формуле [3]:

$$R = \frac{\beta C_e h k T \sigma_o^2}{19\alpha} \quad (4)$$

Параметры формулы (4)	Значение
w – объем молекулы, м ³	9.68×10^{-29}
k – константа Больцмана, Дж/К	1.38×10^{-23}
β – кинетический коэффициент, м/с (32 °С)	9.55×10^{-5}
α – удельная энергия ступени для грани (100), Дж/м ²	19.5×10^{-3}
h – высота ступени на грани (100), м	7×10^{-10}

Таким образом, формула (3) сопрягает гидродинамическую макро-модель и термодинамическую микро-модель.

На рис. 2а приведены результаты расчета концентрации солевого раствора в натекающей струе и вблизи растущего кристалла. Данные графика на рис. 2б показывают, что на конусной части кристалла солевое пересыщение $\sigma = (C - C_e)/C_e$ довольно высокое. В процентном отношении оно достигает $\sim 57\%$, но на цилиндрической части её значение резко снижается (до $\sim 12\%$).

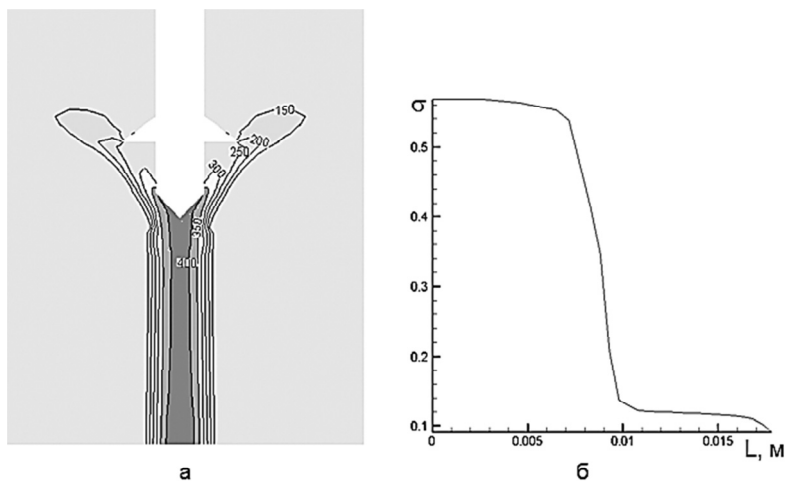


Рис. 2. Изолинии концентрации KDP соли [кг/м³] вблизи растущего кристалла (а) и распределение пересыщения от центра по длине L – образующей поверхности кристалла (б)

Работа выполнена на вычислительной базе ИПМех РАН (тема № АААА-А17-117021310373-3) при поддержке грантов РФФИ: 17-08-00078 и 16-29-11785.

Литература

1. Zhou C. Simulation of the flow and mass transfer for KDP crystals undergoing 2D translation during growth / Lin M., Hu Z., Yin H., Wang B., Cui Q // J. Crystal Growth. 2016. V. 450. P. 103–118.

2. Ansys CFD // Liscence of IPMech RAS. 659778-23-Aug-2011.

3. *Voloshin A.E.* Study of the defect formation in KDP crystals grown under extremely high supersaturation / Baskakova S.S., Rudneva E.B. // *J. of Crystal Growth*. 2016.V. 457. P. 337–342.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ ПРИ КАССЕТНОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ХАЛЬКОГЕНИДОВ

А.И. Простомолотов, Н.А. Везуб

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского
Российской академии наук, Москва, Россия,
prosto@ipmnet.ru*

Рассмотрены результаты математического моделирования тепловых процессов для новой модификации метода Бриджмена в виде процесса «кассетной» кристаллизации термоэлектрических материалов на основе халькогенидов [1]. Выполнено моделирование процесса кристаллизации как для отдельной кассеты (рис. 1а), так и для всей геометрии ростового узла (рис. 1б). Они опираются на методические разработки авторов по сопряжению конечно-элементных и конечно-разностных моделей и их программные реализации [2].

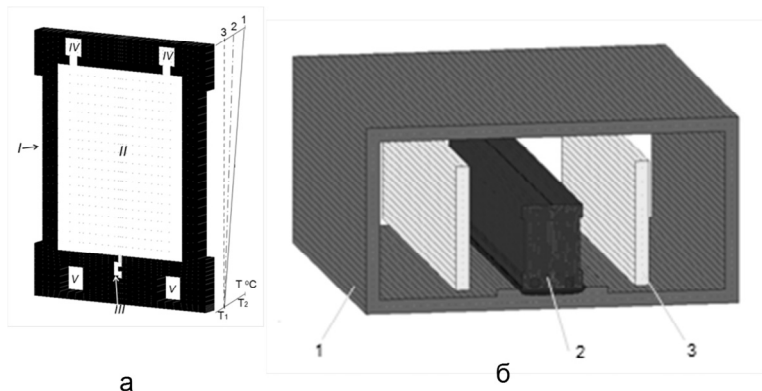


Рис. 1. Схемы моделей:

- а – кассета (графитовый корпус *I*; кристаллизующийся материал *II* с полостью для затравки *III*, каналы заливки расплава *IV*, отверстия для крепления *V*);
- б – сопряженная модель для всей геометрии ростового узла (камера *1*, кассетный блок *2*, нагреватель *3*)

В процессе выращивания пластины можно воздействовать на скорость и форму фронта кристаллизации за счет изменения мощности нагрева кассетного блока, что влияет на вертикальный градиент температуры. Установлено, что плоский фронт кристаллизации обеспечивает наилучшую текстуру материала и наиболее эффективен для формирования нужной анизотропии его структуры. Заметное искривление фронта кристаллизации приводит к значительной разориентации зерен получаемого поликристалла. Вопросы увеличения скорости кристаллизации расплава в кассете являются весьма актуальными. Однако на практике попытки значительного ускорения ростового процесса сопровождаются нарушением теплового баланса в ростовой кассете, что приводит к существенному искривлению фронта кристаллизации и дендритному росту.

При определенных технологических условиях в кассете может возникать тепловая неустойчивость, вызванная действием тепловой гравитационной конвекции. Для отдельной кассеты (рис. 1а) процессы гидродинамики и теплопереноса с учетом кристаллизации расплава моделировались численно на основе решения уравнений Навье-Стокса и теплопереноса в приближении Буссинеска. Процесс кристаллизации описывался введением в уравнение теплопереноса источника выделения скрытой теплоты кристаллизации в некотором переходном слое – между изотермой ликвидуса $T_L = 859$ К и солидуса $T_S = 857$ К. В ростовом процессе при медленном охлаждении реально реализуется слабый конвективный режим, при котором возникают симметричные вихревые структуры в расплаве, обеспечивающие слегка выпуклый в расплав фронт кристаллизации. Однако при быстром снижении нагревательной мощности происходит смена устойчивого вертикального градиента температуры в кассете на неустойчивый профиль, что вызывает конвективное движение, существенно искривляющее форму фронта кристаллизации, а последнее способствует возникновению дендритного роста.

На рис. 2а можно видеть два асимметричных вихря, вызванные тепловой гравитационной конвекцией при существенно немонотонном боковом подводе тепла. Их асимметрия обусловлена некоторыми малыми конструктивными отличиями кассеты справа и слева. Важным является то, что возникающая интенсивная конвекция значительно изменяет тепловое поле как в объеме расплава, так и вблизи фронта кристаллизации (см. рис. 2б), способствуя его искривлению.

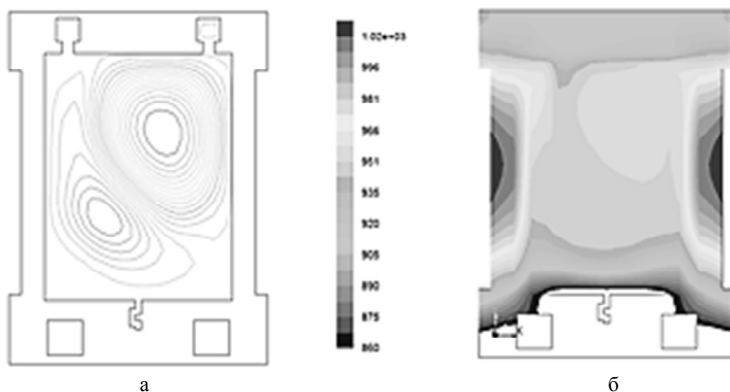


Рис. 2. Асимметричные вихревые структуры (а) и изотермы [К] (б) при быстром охлаждении кассеты

В трехмерной модели теплового узла (рис. 1б) учитывается наличие охлаждаемой камеры 1, нагревателя 2 и кассетного блока 3. Радиационный нагрев блока кассет от резистивного нагревателя играет значительную роль. Уравнения радиационно-кондуктивного теплопереноса и кристаллизации решаются для сложной геометрии теплового узла, состоящего из элементов с разными теплофизическими свойствами [2].

Устойчивый вертикальный температурный градиент сохранялся на всех стадиях процесса кристаллизации. Уменьшение этого градиента во время ростового процесса происходило путем снижения тепловой мощности нагревателя. Картина теплового поля, формируемого в блоке кассет, находящихся в тепловом узле, показана на рис. 3.

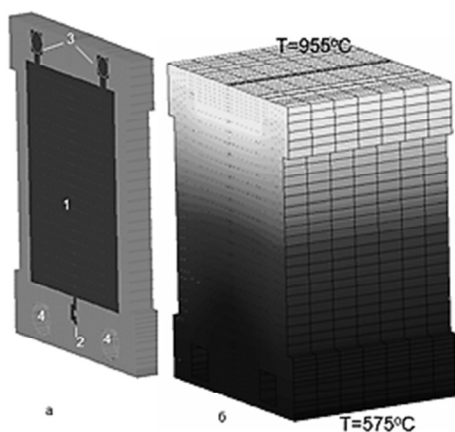


Рис. 3. Температурное поле в блоке кассет

Сопряженная модель позволила провести параметрическую оптимизацию тепловой системы для снижения нагревательной мощности во время ростового процесса, а также предложить способы улучшения конструкции и теплоизоляционных характеристик материалов теплового узла.

Работа выполнена на вычислительной базе ИПМех РАН (тема № АААА-А17-117021310373-3) при поддержке гранта РФФИ: 18-02-00036.

Литература

1. Белов Ю.М. и др. Кристаллическая пластина, прямоугольный брусок, компонент для производства термоэлектрических модулей и способ получения кристаллической пластины // Патент РФ, № 2402111. 20.10.2010. 15 с.

2. Простомолотов А.И., Везуб Н.А., Ильсов Х.Х. Дистанционное и сопряженное моделирование тепломассопереноса и дефектообразования в технологических процессах // Изв. вузов. Материалы электронной техники. 2015. Т. 18. № 1. С. 31–36.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ОКСИДОВ МЕТАЛЛОВ

П.А. Сеченых^{1,2}, К.К. Абгарян^{1,2}

¹ Вычислительный центр им. А.А. Дородницына Федерального
исследовательского центра «Информатика и управление» РАН

² Московский авиационный институт
(национальный исследовательский университет)

Широкое распространение оксидов металлов в микроэлектронике определяет необходимость использовать математическое моделирование для прогнозирования их электронных свойств. Данная работа посвящена моделированию структуры оксидов металлов с кубической кристаллической решеткой. В данной работе рассматривались соединения, реализуемые в следующих структурных типах:

- NaCl (пространственная группа симметрии $Fm\bar{3}m$);
- Fluorite (пространственная группа симметрии $Fm\bar{3}m$);
- Vixbyite (пространственная группа симметрии $Ia\bar{3}$);
- Spinel (пространственная группа симметрии $Fd\bar{3}m$).

Определение метрических параметров кристаллических структур является важным этапом расчета характеристик материалов с заданной химической формуле и федоровской группой симметрии. К таким параметрам для кубических систем относятся постоянная решетки, координаты атомов, входящих в ячейку.

Для расчета метрических параметров и плотности упаковки рассмотренных оксидов металлов была применена модель ионно-атомных радиусов, подробно изложенная в [1]. Для решения поставленной задачи в рамках данной модели был применен алгоритм имитации отжига (Simulated Annealing) [2]. На языке C# был реализован вычислительный модуль, входными данными для которого служат:

- химическая формула соединения;
- радиусы атомов химических элементов;
- справочная кристаллографическая информация – пространственные группы симметрии, позиции Уайкова и пр. [3]

Существенной особенностью программной реализации является то, что перемещения трехмерных координат центров атомов в кристаллической решетке осуществляются с учетом ограничений, накладываемых позицией Уайкова, в которой находится данный атом.

Выходными данными являются метрические параметры – постоянные решетки, координаты атомов элементарной ячейки, а также плотность упаковки атомов в ячейке.

Для хранения и подготовки входных данных вычислительного модуля (справочная кристаллографическая информация) использовалась реляционная модель данных, ранее описанная в [4], [5]. Радиусы атомов химических элементов были взяты из [6].

Результаты расчетов приведены в табл. 1.

Таблица 1

Структурные характеристики оксидов металлов

Формула	Группа симметрии	Плотность упаковки ρ	Постоянная решетки a (выч.), Å	Постоянная решетки a (эксп.), Å [7,8]	Относительная погрешность
CaO	$Fm\bar{3}m$	0.53	4.8	4.81	0.0021
CdO	$Fm\bar{3}m$	0.53	4.7	4.695	0.0011
MgO	$Fm\bar{3}m$	0.58	4.24	4.212	0.0066
HfO ₂	$Fm\bar{3}m$	0.6	5.04	5.11	0.0137
CeO ₂	$Fm\bar{3}m$	0.54	5.56	5.411	0.0275
ZrO ₂	$Fm\bar{3}m$	0.61	5.04	5.17	0.0251
Er ₂ O ₃	$Ia\bar{3}$	0.46	10.61	10.55	0.0057
Nd ₂ O ₃	$Ia\bar{3}$	0.45	10.98	11.14	0.0144
Sc ₂ O ₃	$Ia\bar{3}$	0.52	9.82	9.844	0.0017
Mn ₂ O ₃	$Ia\bar{3}$	0.56	9.44	9.411	0.0031
Tl ₂ O ₃	$Ia\bar{3}$	0.47	10.66	10.57	0.0085
Fe ₃ O ₄	$Fd\bar{3}m$	0.54	8.252	8.394	0.0169

Приведенные в табл. 1 данные показывают, что результаты расчета с помощью разработанного вычислительного модуля структурных характеристик рассмотренных оксидов близки к экспериментальным данным [7, 8].

Полученные характеристики могут служить входными данными при проведении квантовомеханических расчетов на базе теории функционала электронной плотности [9, 10], с помощью которых можно рассчитать полную энергию системы атомов, уточнить ее структуру, электронные, магнитные, механические и другие свойства оксидов металлов.

Работа выполнена за счет средств проекта РФФИ № 19-29-03051 мк в ВЦ ФИЦ ИУ РАН.

Литература

1. *Абгарян К.К.* Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. – М.: МАКС Пресс, 2017. – 284 с.
2. *Hahn T.* International Tables for Crystallography. Vol. A. // Springer, 2005 – 911 с.
3. *Metropolis N., Ulam S.* The Monte Carlo Method. Journal of the American Statistical Association, Vol. 44, No. 247 (Sep., 1949), pp. 335–341.
4. *Абгарян К.К., Сеченых П.А., Гаврилов Е.С.* Объектно-реляционный подход к разработке системы компьютерного моделирования многомасштабной схемы расчета многослойных полупроводниковых наноструктур // Программная инженерия. – 2015. – № 8. – С. 9–17.
5. *Абгарян К.К., Бажанов Д.И., Сеченых П.А.* Компьютерное моделирование кристаллической структуры и электронных свойств GaAs, GaP, GaAs_{0.75}N_{0.25}, GaAs_{0.25}P_{0.75} (F43m) // Сборник тезисов докладов Первого Российского кристаллографического конгресса (РКК'2016) – СПб.: ООО «НП-ПРИНТ», 2016. – 541 с. – С. 52.
6. *Хьюи Дж.* Неорганическая химия. Строение вещества и реакционная способность. – Пер. с англ. / Под ред. Б.Д.Степина, Р.А.Лидина. – М.: Химия, 1987. – 696 с.
7. ChemSpider [электронный ресурс]. URL: <https://www.chemspider.com/> (дата обращения: 20.09.2019).
8. Crystallography Open Database [электронный ресурс]. URL: <http://www.crystallography.net/cod/> (дата обращения 20.09.2019)
9. *Hohenberg, P.* Phys. Rev. 136, B864 / P. Hohenberg, W. Kohn // 1964.
10. *Kohn, W.* Phys. Rev. 140, A1133 / W. Kohn, L. J. Sham // 1965.

СТРУКТУРА ПОВЕРХНОСТИ Si(331)-12×1

Р.А.Жачук¹, Ж. Кутиньо²

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

Высокоиндексные поверхности кремния перспективны для использования в спинтронике [1], а также широко используются в качестве подложек для выращивания упорядоченно расположенных наноструктур [2]. В этой работе с помощью расчетов на основе теории функционала плотности с применением программных пакетов SIESTA и VASP была исследована атомная и электронная структура поверхности Si(331), исследованы её свойства и проведено сравнение с имеющимися экспериментальными данными. Хотя экспериментально поверхность Si(331) известна более 25 лет, исследована многими методами и предложено 5 моделей для объяснения её атомной структуры, реальная структура поверхности Si(331) все это время оставалась неизвестной из-за её большой сложности, сравнимой со структурой поверхности Si(111)-7×7.

Нами была разработана оригинальная модель реконструированной поверхности Si(331). Модель содержит идентичные структурные блоки, упорядоченные в зигзагообразные цепочки, которые отделены друг от друга димерами, динамически изгибающимися при комнатной температуре. Структурный блок состоит из пентамера, атомы которого удерживает вместе межузельный атом, и соседней реконструированной области. Пентамеры в реконструированной области упорядочены подобно пентамерам в структуре фуллерена C₂₀.

Разработанная модель поверхности Si(331) приводит к очень низкой энергии, сравнимой с энергией поверхности Si(111)-7×7, что свидетельствует о ее высокой стабильности. Изображения сканирующей туннельной микроскопии (СТМ), рассчитанные на основе предложенной модели, полностью согласуются с экспериментальными СТМ изображениями этой поверхности, полученными при обеих полярностях приложенного напряжения (рис. 1). Показано, что различие в размерах пентамера в атомной модели и полученных с помощью СТМ вызваны наклоном оборванных связей к нормали поверхности. Такое расхождение в размерах реальных атомных структур и их изображений, полученных с помощью СТМ, необходимо учитывать для корректной интерпретации экспериментальных

данных, полученных на любых поверхностях с направленными оборванными связями.

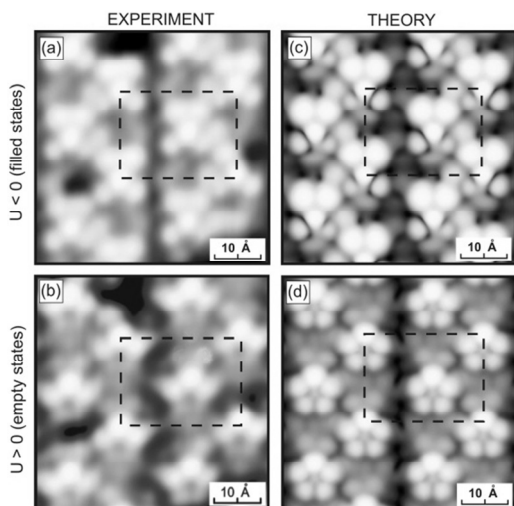


Рис. 1. Экспериментальные [Письма в ЖЭТФ 105, 469 (2017)] (a), (b) и теоретические (c), (d) СТМ изображения реконструированной поверхности Si(331). Элементарная ячейка поверхности выделена пунктиром

Расчет электронной структуры поверхности Si(331) показал, что в объемной запрещенной зоне Si имеются два широких пика, один вблизи потолка валентной зоны, а другой вблизи дна зоны проводимости в согласии с данными сканирующей туннельной спектроскопии и фотоэлектронной спектроскопии. Найдено, что дырки на поверхности Si(331) преимущественно локализуются на пентамерах с межузельными атомами, а электроны на димерах и атомах реконструированной области, имеющих одну оборванную связь в sp^3 -подобной конфигурации. Величина расчетной запрещенной зоны поверхности составляет 0.58 эВ и полностью согласуется с экспериментальными данными.

Работа выполнена при поддержке РНФ (проект № 19-72-30023).

Литература

1. Aulbach J., S.C. Erwin, R. Claessen, and J. Schäfer, Nano Lett. 16, 2698 (2016).
2. Zhachuk R.A., S.A. Teys, A.E. Dolbak, B.Z. Olshanetsky, Surf. Sci. 565, 37 (2004).

УНИВЕРСАЛЬНЫЙ СТРУКТУРНЫЙ БЛОК СЕМЕЙСТВА ПОВЕРХНОСТЕЙ (1 1 0) КРЕМНИЯ И ГЕРМАНИЯ

Р.А. Жачук¹, А.А. Шкляев^{1,2}

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

² Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 1, Россия

Хотя структура поверхностей (1 0 0) и (1 1 1) кремния и германия давно известна, детальное понимание атомной структуры поверхности (1 1 0) до настоящего времени отсутствовало из-за её большой сложности. В литературе можно найти более 10 моделей атомных структур, наблюдаемых на поверхностях (1 1 0) кремния и германия, однако все они являются ошибочными. В этой работе с помощью расчетов на основе теории функционала плотности с применением программного пакета SIESTA нами предложен универсальный структурный блок, являющийся основной частью *всех* атомных структур, формирующихся на поверхностях (1 1 0) кремния, германия и их вициналей. Структурный блок состоит из пентамера, атомы которого удерживают вместе межузельный атом, и соседней реконструированной области [1].

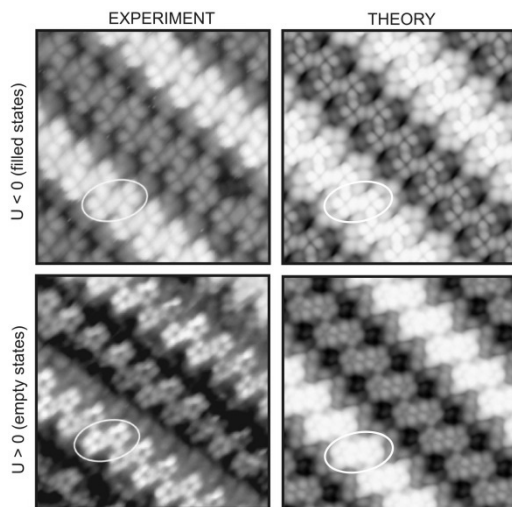


Рис. 1. Экспериментальные [Phys. Rev. B 61, 3006 (2000)] и теоретические СТМ изображения поверхности Si(110)-16×2.

С использованием универсального структурного блока нами были разработаны атомные модели поверхностей $(1\ 1\ 0)-(16 \times 2)$, $(1\ 1\ 0)-c(8 \times 10)$, $(1\ 1\ 0)-(5 \times 8)$, $(17\ 15\ 1)-(2 \times 1)$, $(47\ 35\ 7)-(1 \times 1)$. Модели приводят к самым низким энергиям поверхностей среди всех ранее предложенных. Изображения сканирующей туннельной микроскопии (СТМ), рассчитанные на основе предложенных моделей, полностью согласуются с экспериментальными СТМ изображениями этих поверхностей, полученных при обеих полярностях приложенного напряжения (см. рис. 1).

Литература

1. Zhachuk R.A., A.A. Shklyayev, Appl. Surf. Sci. (2019), DOI: 10.1016/j.apsusc.2019.07.144

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ АДСОРБЦИИ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ НА ПОВЕРХНОСТИ ПОРОШКОВЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ ДЛЯ БИОКЕРАМИКИ И ГАЗОВЫХ СЕНСОРОВ

Е.В. Мараева

*Санкт-Петербургский государственный электротехнический
университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)*

Работа посвящена моделированию процессов адсорбции и созданию программного продукта для анализа параметров пористой структуры биосовместимых наноматериалов для стоматологии и газовой сенсорики сорбционными методами. Для разработки программы использовалась среда LabView. Суть решения, представленного в докладе, состоит в создании недорогого и быстрого метода анализа структурных характеристик биосовместимых материалов для биокерамики с применением адсорбционных методов. В отличие от других методов исследования параметров пористой структуры образцов, адсорбционные методы анализа имеют ряд преимуществ: возможность исследования большого объема материала в один прием (в отличие от локальных методов, где анализируются отдельные участки образца и результаты исследования усредняются), возможность исследования материалов с большой шероховатостью, где другие методы анализа поверхности неприменимы или нежелательны. Полученные результаты

позволяют оценить близость исследуемого материала к характеристикам дентина и костной ткани человека по таким параметрам как: наличие или отсутствие микропор, которые могут привести к уменьшению прочности получаемого биоматериала, размер частиц порошка, удельная поверхность, распределение пор по размерам. В свою очередь, при исследовании наноматериалов для сенсорики газовых сред важнейшими параметрами являются значение удельной поверхности и распределение мезопор по размерам, так как развитая пористая система играет ключевую роль в процессах адсорбции-десорбции газа на поверхности полупроводникового газочувствительного материала.

Согласно общепринятой классификации, предложенной Международным советом по общей и прикладной химии [1], все пористые системы можно условно разделить на три группы. К первой относятся системы, имеющие поры размером менее 2 нанометров – их называют микропорами (хотя в этом термине есть некоторое противоречие с термином «нано»). Ко второй группе – мезопорам – относятся пористые системы со средним размером пор от 2 до 50 нанометров. Пory с размерами более 50 нанометров относятся к макропорам. Во всех этих подсистемах при исследовании их проникающими методами контроля возникают разные по механизму заполнения физические процессы.

Так, например, для определения внешней удельной поверхности и объема микропор необходимо использовать сравнительные методы анализа изотерм адсорбции. Известно [2], что в общем виде уравнение изотермы адсорбции может быть представлено как сумма ряда слагаемых, отвечающих за протекание разных, взаимно независимых сорбционных процессов, и описано следующим уравнением:

$$a(h) = a_{\mu}(h) + S\alpha(h) + a_{\text{ик}}(h),$$

где h – относительное парциальное давление газа-адсорбата, $a_{\mu}(h)$ – слагаемое, описывающее сорбцию в микропорах; S – величина поверхности мезопор; $\alpha(h)$ – слагаемое, описывающее адсорбцию на единице поверхности мезопор; $a_{\text{ик}}(h)$ – вклад вторичного процесса капиллярной конденсации.

Для азота при относительных парциальных давлениях газа-адсорбата менее 40%, когда капиллярной конденсации ещё не происходит, уравнение принимает следующий вид:

$$a(h) = V_{\mu} + S\alpha(h),$$

где V_{μ} – объем микропор в исследуемом образце.

Индикатором наличия микропор в образце будет величина отсечки зависимости $a(h)$ от стандартной изотермы адсорбции $\alpha(h)$ по оси ординат, пропорциональная объему микропор V_{μ} .

Изложенный метод анализа получил название « α -метод Синга» [2]. Разработанный виртуальный прибор позволяет также проводить оценку размеров частиц заданной формы (модель сферы, цилиндра, диска). Исходными данными для определения размеров частиц является значение плотности исследуемого вещества и величина удельной поверхности.

Таким образом, разработанная программа позволяет проводить определение удельной поверхности, размера частиц, составляющих материал, объема микропор при их наличии и распределения пор по размерам в порошковых наноматериалах. Исходными данными для работы программы являются экспериментальные результаты исследования процессов адсорбции и десорбции инертных газов [3]. Разработанная программа позволяет строить изотермы адсорбции-десорбции по введенным экспериментальным данным, сравнительные графики адсорбции, а также гистограмму распределения пор по размерам в исследуемом наноматериале. В виртуальном приборе предусмотрена возможность выбора используемого газа-адсорбата и вывода на экран его основных характеристик, используемых для расчета параметров пористой структуры. Программа может применяться при проведении экспериментов и в учебном процессе.

Литература

1. IUPAC Manual of Symbols and Terminology // Pure Appl. Chem. – 1972. – Vol. 31. – P. 578.
2. *Гаврилов В.Ю.* Физико-химические основы адсорбционного анализа дисперсных и пористых материалов: Учебное пособие. – Новосибирск: Издательство НХТК, 2007.
3. Новые наноматериалы. Синтез. Диагностика. Моделирование: лаб. практикум / под ред. В.А. Мошникова, О.А. Александровой. СПб.: Изд-во СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2015. 248 с.

МОДЕЛИРОВАНИЕ УГЛЕРОДОСОДЕРЖАЩИХ НАНОМАТЕРИАЛОВ И КВАЗИКРИСТАЛЛОВ И ИХ ПОВЕРХНОСТИ ПО ДАННЫМ СКАНИРУЮЩЕЙ ЗОНДОВОЙ МИКРОСКОПИИ

Н.В. Пермяков

*Санкт-Петербургский государственный электротехнический
университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)*

Предметы и дисциплины, посвященные изучению наноматериалов, развиваются достаточно быстро, поэтому в настоящее время существует острая необходимость в наглядных примерах, иллюстрирующих особенности изучаемых наноструктур и способы их моделирования. Цель настоящей работы – создание демонстрационных материалов для материаловедческих курсов на основе расчетных и экспериментальных данных.

Используемый метод – разработка трехмерных моделей в программе OpenSCAD на основе подготовленных данных в среде LabView и последующее изготовление из ABS-пластика с использованием трехмерного принтера Prusa i3. Данная работа посвящена трем крупным разделам: создание макетов углеродных нанотрубок и фуллеренов; создание макетов поверхности на основе данных, полученных сканирующим зондовым микроскопом; создание конструктора для демонстрации заполнения объема для модели кристалла, в котором отсутствует трансляционная симметрия.

Создание моделей на основе данных сканирующего зондового микроскопа. Была разработана программа в среде LabView для трансляции данных, полученных сканирующим зондовым микроскопом, в файлы для трехмерной печати. Данные сканирующего зондового микроскопа экспортируются в формате символов ASCII в текстовый файл, с которым работает разработанная программа и создает итоговый файл модели в формате STL, при этом программа использует заданные пользователем масштабные коэффициенты для вывода на печать.

Изготовление моделей фуллеренов. Была создана серия файлов трехмерных моделей в формате STL фуллеренов [1], которая в свою очередь основана на работе [2], где представлен подход к созданию файлов в программе OpenSCAD и [3], источнику с рассчитанными координатами атомов в различных фуллеренах. Сущность данного подхода в том, что в координатах атома располагается объект «сфе-

ра», а между двумя соседними атомами располагается объект «цилиндр». В соответствии синтаксису OpenSCAD используются модули `atom` и `bond`, которые и реализуют построение сферы и цилиндра.

Изготовление моделей углеродных нанотрубок с использованием рассчитанных значений координат атомов. Исходя из значения индексов хиральности углеродной нанотрубки, можно предсказать ее электрические свойства.

Для расчета позиций атомов углерода было использовано приложение TubeASP со свободным доступом [4], которое генерирует файл, например с именем «`nt-5-5-10.xyz`» для углеродной нанотрубки с индексами хиральности (5,5) и десяти единичных ячеек вдоль оси нанотрубки. Формат данных *.XYZ используется для записи химических формул, а именно расположения атомов в прямоугольной системе координат. В скачанном файле *.XYZ не содержится информация, о том какие атомы находятся ближе друг к другу.

Разработанная программа открывает содержимое файла «`nt-5-5-1.xyz`», и выделяет массив данных, относящийся к координатам атомов углерода, затем преобразует их так, чтобы сохранить файл «префикс_`nt-5-5-1.scad`», и затем в программе OpenSCAD экспортировать результат моделирования в формат STL. Строки для построения атомов собираются из значений координат. Например, для 7 атома из списка формируется строчка «`atom(rA, x(7), y(7), z(7)); // 7`». Для построения цилиндров сначала находятся ближайшие соседи каждого атома. Число таких соседей равно трем, как в графене при sp^2 -гибридизации атомных орбиталей, кроме краев нанотрубки. При создании всех файлов *.XYZ использовалось значение $L=1,42$ Ангстрема для длины связи C-C. Таким образом, для связи 6 и 7 атома будет записана строчка «`bond(x(6), y(6), z(6), x(7), y(7), z(7)); // 6- 7`». Расстояние между положениями атомов в изготовленной модели нанотрубки равно 7,1мм.

Создание моделей элементарных ячеек для сборки объемного квазикристалла. Существует класс материалов – квазикристаллы, в котором отсутствует трансляционная симметрия. Для визуализации двумерного случая используется мозаика Пенроуза, а для трехмерного случая используется большее число элементарных ячеек. Для построения объемного квазикристалла взята за основу работа [5]. В данной работе представлены 4 базовые фигуры: ромбоэдр, ромбический додекаэдр, ромбический икосаэдр и ромбический три-

аконтаэдр с одинаковой длиной ребра. Также представлены примеры заполнения объема

Задача нахождения координат вершин базовых фигур уже решена и можно найти файлы в формате *.WRL по адресу [6]. В настоящем докладе была разработана программа для того, чтобы из файла *.WRL брать данные о координатах вершин многогранника и данные о том какие из вершин образуют грань, затем на основании этих данных формируется часть текста, согласно синтаксису OpenSCAD, строится трехмерная модель и конвертируется в файл с расширением STL. Также внесены следующие изменения: в центре грани подготовлено место для вставки магнита (сфера диаметром 5 мм). Таким образом можно собирать модель как конструктор, за счет скрепления магнитов, расположенных в центре грани двух многогранников.

Литература

1. More Buckyballs URL: <https://www.thingiverse.com/thing:206896>
2. Buckyballs – Molecular Models URL: <https://www.thingiverse.com/thing:12675>
3. Cartesian Coordinates of a number of fullerenes URL: <http://www.ccl.net/ccs/data/fullerenes/index.shtml>
4. Carbon nanotube generation applet URL: <http://www.nanotube.msu.edu/tubeASP/>
5. *Madison A.E.* Substitution rules for icosahedral quasicrystals // RSC Advances. – 2015. – Т. 5. – №. 8. – С. 5745–5753.
6. List of VRML Polyhedra Models URL: <http://www.georgehart.com/virtual-polyhedra/alphabetic-list.html>

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ НА ГРАНИЦЕ ЖИДКОСТЬ-КРИСТАЛЛ ПРИ РОСТЕ НАНОПРОВОЛОК

А.Г. Настовьяк¹, Н.Л. Шварц^{1,2}

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

² *Новосибирский государственный технический университет,
Новосибирск, Россия*

Нанопроволоки (НП) на основе полупроводников $A^{III}B^V$ являются перспективной базой для современной оптоэлектроники. Ключевой технологией для получения НП является самокаталитический

рост по механизму пар-жидкость-кристалл (ПЖК). Рост НП происходит за счет послойной кристаллизации полупроводникового материала под каплей-затравкой. Преимущественным направлением роста является направление $\langle 111 \rangle$. Отклонение от послойного роста может приводить к появлению на границе раздела жидкость-кристалл семейства фасеток (111), что способствует разделению капли и ветвлению кристалла. Важную роль играет место зарождения на границе жидкость-кристалл, так как оно определяет морфологию растущего кристалла.

В соответствии с классической теорией нуклеации зарождение кристаллической фазы невозможно, пока концентрация раствора, из которого происходит рост, не достигнет пересыщения, необходимого для начала роста. Так как источником роста грани является капля расплава In-As, то процесс кристаллизации сопровождается изменением ее состава. Появление зародыша сопровождается снижением концентрации раствора вплоть до полного зарастания грани. Процесс зародышеобразования на грани конечного размера теоретически описывался ранее с помощью аналитических методов [1–2]. В отличие от имитационного моделирования аналитический подход не дает сведений о морфологии растущей НП. Одним из наиболее подходящих методов для выяснения кинетики и деталей роста НП является моделирование методом Монте-Карло (МК), позволяющее исследовать кинетические атомарные процессы в системах с размерами, сопоставимыми с реальными размерами нанобъектов, и учитывающее кристаллическую структуру полупроводника. В настоящей работе с помощью Монте-Карло модели проанализированы детали процесса кристаллизации при самокаталитическом ПЖК росте нитевидных нанокристаллов $A^{III}B^V$ на примере InAs. Особенностью нашего подхода к изучению зародышеобразования при росте НП является комбинация атомистического и аналитического описания.

Моделирование роста НП было проведено в программном комплексе SilSim3D [3]. В качестве исходной подложки взята подложка полупроводника $A^{III}B^V$ с ориентацией поверхности (111)В, покрытая пленкой-маской со сквозными отверстиями, в которых расположены капли металла III группы. Рассмотрена 5-компонентная система: Me(s), Me(liq), As, As₂ и M_f – галлий или индий (Me) в твердой и жидкой фазах, мышьяк в атомарной и молекулярной форме и материал пленки-маски. В модель заложены следующие процессы: адсорбция атомов Me и молекул As₂, обратимая диссоци-

ация молекулярного мышьяка $As_2 \rightleftharpoons As + As$, диффузия всех видов частиц по поверхности, испарение As_2 и металла III группы (как из твердой, так и из жидкой фазы), фазовые превращения Me (плавление, растворение, кристаллизация) и диффузия As в капле галлия. Вероятность каждого элементарного события определяется его энергией активации. Энергии активации элементарных событий являлись входными параметрами модельной системы. Способ имитации жидкой фазы в решеточной модели и методика выбора энергетических параметров описаны в [4–5].

Рост вертикальных НП происходил за счет образования под каплей плоского зародыша кристаллической фазы высотой один бислой и дальнейшего его латерального роста. С помощью МК моделирования была получена осциллирующая зависимость концентрации мышьяка в капле C_{As} от времени при росте НП InAs из капли In. Осцилляции $C_{As}(t)$ не являются строго периодическими, что связано с флуктуационным характером зарождения. Найдено, что появление зародыша кристаллической фазы не соответствует максимальной C_{As} в капле, а формирование полного монослоя нанопроволоки не соответствует минимальной C_{As} . Была обнаружена корреляция между концентрацией мышьяка $C_{As}(t)$ в капле и периметром растущего островка $P_{isl}(t)$. Были получены зависимости $C_{As}(t)$ и $P_{isl}(t)$ для разных условий роста – разных диаметров капилляра и разных интенсивностей внешнего потока мышьяка.

Для объяснения наблюдаемого временного сдвига было предложено упрощенное аналитическое описание процессов, происходящих в капле в процессе роста. Полное число атомов мышьяка в капле определяется внешним потоком и скоростью кристаллизации и растворения на границе раздела жидкость-кристалл:

$$\alpha \cdot R^3 \frac{dC_{As}(t)}{dt} = F \cdot \pi R^2 - J_{cr} \quad (1)$$

где F – внешний поток мышьяка, R – радиус капли, α – коэффициент, определяемый геометрией капли, t – время. Поток кристаллизующих частиц J_{cr} пропорционален периметру P_{isl} нового кристаллического слоя. Первое слагаемое в правой части – это скорость осаждения мышьяка из потока, а второе слагаемое характеризует скорость кристаллизации и растворения мышьяка. Уравнение (1) не может быть решено в аналитическом виде относительно $C_{As}(t)$, так как временная зависимость $P_{isl}(t)$ неизвестна и характер ее зависит от многих факторов. Однако, аналитическое рассмотрение позволя-

ет объяснить смещение начала зарождения относительно максимума концентрации As в расплаве и несоответствие формирования полного слоя минимальной концентрации. Экстремумы зависимости $C_{As}(t)$ возникают, когда скорость поступления вещества в каплю равна скорости его кристаллизации. Поток кристаллизующих частиц J_{cr} пропорционален периметру P_{isl} нового кристаллического слоя. Первый член правой части уравнения (1) не зависит от времени, а второй изменяется в процессе роста, так как периметр растущего островка является функцией времени. При малых значениях P_{isl} количество частиц, кристаллизующихся в единицу времени оказывается меньше, чем количество частиц, приходящих из потока. В этом случае $\frac{dC_{As}(t)}{dt} > 0$ и, несмотря на появление островка, концентрация мышьяка в капле продолжает нарастать, до тех пор, пока не выполнится условие $F \cdot \pi R^2 = J_{cr}$. Аналогичным образом объясняется несоответствие минимальной концентрации мышьяка формированию полного бислоя. По мере роста, края растущего островка сливаются с периметром границы раздела жидкость-кристалл и длина ступени, в которую возможно встраивание вещества, резко уменьшается. В некоторый момент скорость кристаллизации оказывается меньше, чем скорость поступления вещества в каплю, и концентрация мышьяка возрастает, несмотря на неполное зарастание грани.

Работа проведена при поддержке РФФИ (грант 18-02-00764).

Литература

1. Сибирев Н.В., В.Г. Дубровский. Письма в ЖТФ, 2004, 30, 18, 79-86.
2. Krogstrup P., H.I. Jorgensen, E. Johnson, M.H. Madsen, C.B. Sorensen, A.F. i Morral, M. Aagesen, J. Nygard, F. Glas, J. Phys. D: Appl. Phys., 201346, 313001.
3. А.Н. Карпов, А.В. Зверев, А.Г. Настовьяк, С.В. Усенков, Н.Л. Шварц. Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии, 2014, 15, 388-399.
4. Vasilenko M., I. Neizvestny, N. Shwartz. Comput. Mat. Sci., 2015, 102, 286-292.
5. Spirina A.A., A.G. Nastovjak, N.L. Shwartz. J. of Phys.: Conf. Ser., 2018, 993, 012011.

ОСНОВНЫЕ ПОДХОДЫ К МОДЕЛИРОВАНИЮ ФОРМИРОВАНИЯ ФОТОРЕЗИСТИВНОЙ МАСКИ В ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ЛИТОГРАФИИ

Н.Н. Балан, В.В. Иванов, А.В. Кузовков, Е.С. Шамин

АО НИИМЭ

Как известно [1], разрешающая способность проекционной фотолитографии (в данном случае имеется в виду минимальный размер полупериода печатаемых структур) может быть определена соотношением

$$F = \frac{k_1 \lambda}{NA}, \quad (1)$$

где λ – длина волны экспонирующего излучения, $NA = n \sin \theta$ – числовая апертура объектива (θ – апертурный угол, n – показатель преломления среды), а k_1 – **технологический коэффициент**. Разнообразные технические приемы, направленные на уменьшение k_1 , как правило, именуется в литературе термином «RET» (Resolution Enhancement Techniques). К указанным приемам, реализуемых методами **вычислительной литографии** [2], можно отнести:

- применение внеосевого освещения;
- введение фазовых элементов на фотошаблоне;
- коррекцию оптической близости.

Корректное использование RET позволяет довести значение k_1 до 0,28 (и даже менее), добиваясь пропечатывания в резисте элементов с размерами значительно менее длины волны используемого излучения.

Важнейшим разделом вычислительной литографии является моделирование процесса формирования фоторезистивной маски (ФРМ), к которому существует два подхода [3]:

– т.н. **«полное» физическое моделирование**, описывающее некоторой степенью подробности все этапы формирования фоторезистивной маски – от нанесения пленок антиотражающих слоев, фоторезиста и (если необходимо) защитного покрытия до экспонирования и проявления маски;

– **эмпирическое моделирование**, позволяющее относительно быстро рассчитать получаемую маску при помощи ряда упрощенных интерполяционных моделей (называемых также «компактными»), имея заранее большое количество экспериментальных данных

по отъему разнообразных тестовых структур, на основе которых и калибруются указанные модели.

Перечисленные подходы обычно используются в задачах, слабо пересекающихся между собой. Полное физическое моделирование реализовано, как правило, в т.н. «процессных» САПР (KLA Prolith, GenISys Lab, ASML Brion), используемых при отработке технологических процессов фотолитографии, например, для подбора оптимальных параметров резистного стека, расчета процессных окон, формы осветителя и т.п.

Основное же предназначение эмпирического моделирования ФРМ состоит, как правило, в быстром получении результата при расчете параметров топологической коррекции искажений, обусловленных эффектом оптической близости, на полноразмерной топологии литографического слоя. Так называемые «конструкторско-технологические» САПР (Mentor Graphics Calibre), реализующие такое моделирование, демонстрируют колоссальный выигрыш по времени расчета ФРМ в сравнении с процессными [3], однако точность расчета в данном случае находится в сильной зависимости от количества и качества калибровочных данных.

В некоторых случаях возможно применение компактных моделей формирования ФРМ для задач процессного моделирования. Таким образом, например, может быть произведена оптимизация формы осветителя или экспресс-оценка ширины окна процесса.

В данной работе делается обзор основных используемых в настоящее время моделей формирования фоторезистивной маски и задач, в которых они применяются. Приводятся примеры некоторых расчетов для перспективного технологического процесса.

Литература

1. Mack, C.A. Fundamental Principles of Optical Lithography: The Science of Microfabrication / C.A. Mack. – John Wiley & Sons, 2007.
2. Ma, X. Computational lithography / X. Ma, G.R. Arce. – John Wiley & Sons, Inc, 2010.
3. Амирханов, А.В. Особенности методов проектирования СБИС с учетом результатов моделирования технологического процесса / А.В. Амирханов, А.А. Гладких, А.А. Глушко, Е.П. Михальцов, И.А. Родионов, А.А. Столяров // Труды НИИСИ РАН. – 2013. – Т. 3. № 1.

ELECTRONIC TRANSPORT PROPERTIES OF VCM RESISTIVE SWITCHING MEMORY CELLS

**C. Funck¹, S. Hoffmann-Eifert², C. Baeumer^{1,2}, T. Hennen¹,
D. Wouters¹, R. Waser^{1,2}, R. Dittmann² and S. Menzel²**

¹*Institute of Electronic Materials II & JARA-FIT, RWTH Aachen University,
Sommerfeldstrasse 24, 52074 Aachen, Germany*

²*Peter Grünberg Institute 7/10 & JARA-FIT, Research Center,
Jülich, 52425 Jülich, Germany*

Resistive switching cells have drawn a high attention as novel memory and computing devices [1, 2]. Thus, novel brain-inspired computing networks could be realized using this new type of electronic device. These network concepts are collected under the headline of neural computing networks [3]. Especially, one non-volatile type of memory named valence change memory (VCM) cells show encouraging results in important figures of merit, as for instance low switching energies. In VCM cells, an active ionic conducting layer is placed between two metal electrodes. Due to an external voltage stimuli the ionic configuration is modified and a change in the electronic resistance is induced. Independent of the application as neuronal network element or digital memory, those devices are integrated in a matrix structure. The disadvantage of such matrix structures is the leakage current which deteriorates the read-out margin of a single cell [4]. Here, a selector element is required in series to the VCM cell at every matrix node. The selector element should show a highly non-linear I - V characteristic in order to minimize the sneak currents. One type of such selector elements is the so-called threshold switch, which is based on a negative differential resistance [5]. In addition, threshold switches could be used to realize the synaptic behaviour in neural networks [6].

For the application of both elements, the threshold switch and the VCM cell, it is detrimental to understand the electronic conduction mechanism in detail. Unfortunately, the current understanding of the electronic conduction mechanism in these devices is quite basic.

In our presentation, we will use continuum simulations to model the nature of the threshold switching effect, which occurs in NbO₂-based devices in the low current range. In contrast to previously dominating explanations, we will show that the threshold switching effect is based on a purely electronic mechanism, while the often addressed of an insulator-to-metal transition (IMT) is postponed to the very high current re-

gime [7–11]. Thus, the threshold switching is the result of a conduction mechanism showing an exponential field and temperature dependence. At a critical electric field a thermal runaway is induced, which leads to an enhanced conductivity. This enhanced conductivity is based on a higher amount of thermally activated mobile charge carriers. This mechanism also plays an important role for the understanding of the threshold behaviour in VO_x [9].

Furthermore, we will present the electron transport mechanisms in a Nb:SrTiO₃/SrTiO₃/Pt VCM resistive switching model system using *ab initio* methods. Density functional theory (DFT) simulations combined with the Non-Equilibrium Green's Function (NEGF) formalism are applied to explain the electronic transport mechanism at the atomic scale. The current-voltage response of the SrTiO₃/Pt based resistive switching cell is polarity dependent and has an exponential voltage dependence. This often leads to the conclusion that the electron transport is determined by the image-charge based Schottky-barrier lowering. Based on this consideration, we used DFT+NEGF simulations to explore the Schottky barrier lowering on a quantum mechanical basis [12]. In a further step, the DFT+NEGF simulations are performed to calculate the electronic current. The simulation results are compared to experimental conduction measurements. The comparison reveals that the electronic transport in the resistive switching cells is based on a band-like transport and determined by the Pt-Schottky contact. At low voltages, the Schottky barrier is surpassed by a thermally-assisted tunnelling and at higher voltages by a direct tunnelling [13–15]. The increasing tunnelling probability for higher voltages at the Schottky barrier leads to an easier transfer of the electrons through the Schottky contact. As a result, for the higher voltages the bulk transport of the SrTiO₃ becomes dominating, which temperature dependence is determined by phonon scattering. Therefore, a different temperature dependence of the current is observed at different voltages in the SrTiO₃/Pt based VCM cell. Based on the band-like transport observed in the DFT+NEGF simulations a single band transport model is developed and the model has been successfully transferred to TiO₂ [16]. The overall goal of the simulations is the development of a multi scaling resistive switching simulation tool environment (JART¹).

¹ <http://www.emrl.de/JART.html>

Bibliography

1. Waser R., R. Dittmann, G. Staikov and K. Szot, Redox-Based Resistive Switching Memories – Nanoionic Mechanisms, Prospects, and Challenges, *Adv. Mater.* **21**, 2632–2663 (2009).
2. Waser R., D. Ielmini, H. Akinaga, H. Shima, H.-S. P. Wong, J.J. Yang and S. Yu, Introduction to Nanoionic Elements for Information Technology, *Wiley-VCH*, 1–29 (2016).
3. Siemon A., S. Ferch, A. Heitmann, R. Waser, D.J. Wouters and S. Menzel, Analyses of a 1-layer neuromorphic network using memristive devices with non-continuous resistance levels, *APL Materials* **7**, 091110 (2019).
4. Burr G., R. Shenoy, K. Virwani, P. Narayanan, A. Padilla, B. Kurdi and H. Hwang, Access devices for 3D crosspoint memory, *J. Vac. Sci. Technol. B* **32**, 040802 (2014).
5. Gibson G.A., Designing Negative Differential Resistance Devices Based on Self-Heating, *Adv. Funct. Mater.* **28**, 1704175/1–9 (2018).
6. Woo J., P. Wang and S. Yu, Integrated Crossbar Array With Resistive Synapses and Oscillation Neurons, *IEEE Electron Device Lett.* **40**, 1313–1316 (2019).
7. Funck C., S. Menzel, N. Aslam, H. Zhang, A. Hardtdegen, R. Waser and S. Hoffmann-Eifert, Multidimensional Simulation of Threshold Switching in NbO₂ Based on an Electric Field Triggered Thermal Runaway Model, *Adv. Electron. Mater.* **2**, 1600169/1–13 (2016).
8. Funck C., S. Hoffmann-Eifert, S. Lukas, R. Waser and S. Menzel, Design rules for threshold switches based on a field triggered thermal runaway mechanism, *J. Comput. Electron.* **16**, 1175–1185 (2017).
9. Hennen T., D. Bedau, J. A. J. Rupp, C. Funck, S. Menzel, M. Grobis, R. Waser and D. J. Wouters, Forming-free Mott-oxide threshold selector nanodevice showing s-type NDR with high endurance ($>10^{12}$ cycles), excellent V_{th} stability (< 5%), fast (< 10 ns) switching, and promising scaling properties, *IEDM*, 37.5.1–37.5.4 (2018).
10. Kumar S., J. P. Strachan and R.S. Williams, Chaotic dynamics in nanoscale NbO₂ Mott memristors for analogue computing, *Nature* **548**, 318–321 (2017).
11. Kumar S., Z. Wang, N. Davila, N. Kumari, K. J. Norris, X. Huang, J. P. Strachan, D. Vine, A.L. D. Kilcoyne, Y. Nishi and R. S. Williams, Physical origins of current and temperature controlled negative differential resistances in NbO₂, *Nat. Comm.* **8**, 658 (2017).
12. Funck C. and S. Menzel, An atomistic view on the Schottky barrier lowering applied to SrTiO₃/Pt contacts, *AIP Advances* **9**, 045116 (2019).
13. Funck C., A. Marchewka, C. Baeumer, P.C. Schmidt, P. Mueller, R. Dittmann, M. Martin, R. Waser and S. Menzel, A Theoretical and Experimental View on the Temperature Dependence of the Electronic Conduction through a Schottky Barrier in a Resistively Switching SrTiO₃-based Memory Cell, *Adv. Electron. Mater.* **4**, 1800062 (2018).
14. Funck C., P.C. Schmidt, C. Baeumer, R. Dittmann, M. Martin, R. Waser and S. Menzel, Atomistic Investigation of the Schottky Contact Conductance Limits at SrTiO₃ based Resistive Switching Devices, *IEEE 2018 Non-Volatile Memory Technology Symposium (NVMTS)*, 1–4 (2018).

15. Baeumer C., C. Funck, A. Locatelli, T. O. Monte F. Genuzio, T. Heisig, F. Hensling, N. Raab: C. M. Schneider, S. Menzel, R. Waser and R. Dittmann, In-Gap States and Band-Like Transport in Memristive Devices, *Nano Letters* **19**, 54–60 (2019).

16. H. Zhang, S. Yoo, S. Menzel, C. Funck, F. Cüppers, D. J. Wouters, C. S. Hwang, R. Waser and S. Hoffmann-Eifert, Resistive Switching Modes with Opposite Polarity in Pt/TiO₂/Ti/Pt Nano-sized ReRAM Devices, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **10**, 29766-29778 (2018).

MIXED BIHARMONIC PROBLEMS IN EXTERIOR DOMAINS

Hovik Matevossian¹, Tokuei Sako²

¹ Federal Research Center «Computer Science & Control»,
RAS, Vavilov str., 40, Moscow 119333, Russia
E-mail: hmatevossian@graduate.org

² Nihon University, 7-24-1, Narashinodai, Funabashi, Chiba 274-8501, Japan
E-mail: sako.tokuei@nihon-u.ac.jp

Abstract. We study the properties of generalized solutions in unbounded domains and the asymptotic behavior of solutions of elliptic boundary value problems at infinity.

Moreover, we study the unique solvability of the mixed Dirichlet-Neumann and Steklov-Neumann biharmonic problems in the exterior of a compact set under the assumption that generalized solutions of these problems has a bounded Dirichlet (energy) integral with weight $|x|^a$.

Admitting different boundary conditions, we used the variation principle and depending on the value of the parameter a , we obtained uniqueness (non-uniqueness) theorems of these problems or present exact formulas for the dimension of the space of solutions.

References

1. Matevossian Hovik, Tokuei Sako, Mixed Dirichlet–Neumann and Dirichlet-Navier biharmonic problems in exterior domains, *MMSE Journal: Mechanics, Materials Science & Engineering*, **20** (2019), 8 pages (in press)
2. Matevossian Hovik, On the Mixed Dirichlet–Steklov-Type and Steklov-Type Biharmonic Problems in Weighted Spaces, *Math. Comput. Appl.*, **24**:1, 25 (2019), 1–9 (Special Issue «Mathematical Modeling in Physical Sciences»)
3. Matevossian H.A., On the Steklov–Type Biharmonic Problem in Unbounded Domains, *Russ. J. Math. Physics*, **25**:2 (2018), 271–276
4. Matevossian Hovik A., On solutions of the mixed Dirichlet–Steklov problem for the biharmonic equation in exterior domains, *P-Adic Numbers, Ultrametric Analysis and Applications*, **9**:2 (2017), 151–157.

РАСЧЁТ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ МНОГОСЛОЙНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА

К.К. Абгарян^{1,2}, Колбин И.С.¹

¹ *Вычислительный центр им. А.А. Дородницына Федерального
исследовательского центра «Информатика и управление» РАН*

² *Московский авиационный институт
(национальный исследовательский университет)*

В настоящее время изучение вопросов теплового переноса в полупроводниковых гетероструктурах является одним из приоритетных направлений исследований в микроэлектронике. Это связано с постоянным ростом частотных характеристик элементной базы, что совместно с миниатюризацией электроники влечёт за собой рост удельной выделяемой тепловой энергии, которую требуется отводить, чтобы поддерживать работоспособность устройств [1, 2].

При рассмотрении наноразмерных структур моделирование теплопереноса с использованием закона Фурье сильно ограничено, при этом не учитываются квантовомеханические свойства материалов, в связи с чем полученные результаты зачастую плохо согласуются с экспериментальными данными [2]. Значительно более точные расчёты можно получить с использованием методов молекулярной динамики [3], что, в свою очередь, сопряжено с высокой вычислительной сложностью алгоритмов, а также с нетривиальной задачей подбора потенциалов межатомного взаимодействия.

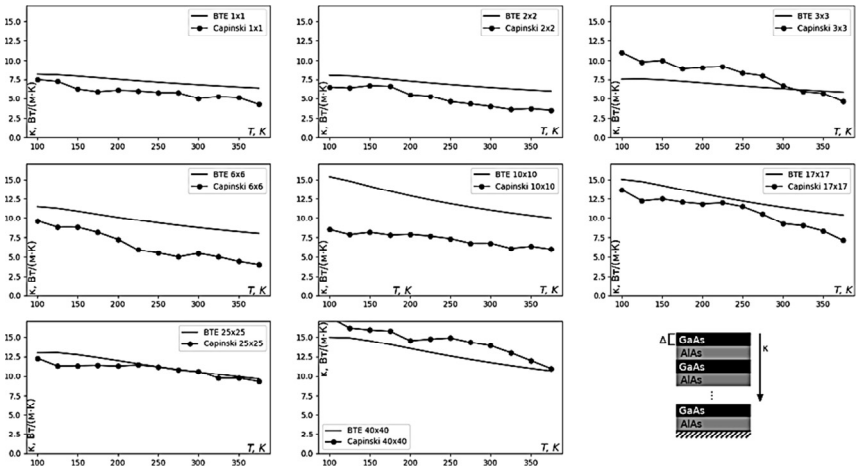
Определённым компромиссом в смысле вычислительной сложности и учёта микроскопических эффектов можно считать моделирование теплопереноса на основе кинетического уравнения Больцмана для фононов, являющихся основными носителями тепла в полупроводниках. Одна из проблем при построении вычислительных алгоритмов связана с учётом рассеивания фононов. В общем случае приходится рассматривать сложное интегродифференциальное уравнение. Однако, для практических задач часто при решении уравнения Больцмана достаточно учитывать лишь приближения времени релаксации, что существенно упрощает задачу [1].

В такой постановке остаётся вопрос, откуда получать данные по параметрам релаксации. Ранее они рассчитывались полуэмпирически с учётом согласования модельных вычислений с результатами

экспериментов. Несмотря на определённые успехи, данный подход весьма трудозатратен, в связи с чем в основном моделировались структуры из простых материалов (как правило, кремний и германий) [4]. Значительный прорыв в данном вопросе произошёл при комбинировании методов с использованием кинетического уравнения с первопринципными расчётами [1]. При этом требуемые характеристики фононов могут быть получены не из аппроксимации экспериментальных данных, а из первопринципных вычислений, что значительно повышает гибкость алгоритма, при этом минимизируя различные допущения.

В качестве примера приложения данной техники рассмотрим расчёт теплопроводности бинарной гетероструктуры GaAs/AlAs для различных периодов сверхрешётки. В результате первопринципных расчётов получены: расположения атомов, пространственные производные потенциальной энергии 2 и 3-го порядка, диэлектрический тензор и эффективные заряды Борна. Моделирование велось с использованием программного пакета almaVTE[1] для виртуального кристалла GaAs/AlAs на решётке $24 \times 24 \times 24$ [5]. Из рассчитанных на предыдущем шаге параметров можно получить полный набор разрешённых частот и соответствующих групповых скоростей и волновых функций, которые описывают поляризацию для каждой моды. Это позволяет рассчитать суммарный вклад в эластичное рассеивание и 3-х фононные взаимодействия в приближении времени релаксации. При этом, эластичное рассеивание состоит из вклада изотопического беспорядка [6], и от барьеров [1]. Зная параметры рассеивания, можно рассчитать длину свободного пробега фононов, что в свою очередь позволяет достаточно просто вычислить искомое значение теплопроводности [1, 7]. Результаты расчётов, а также данные эксперимента [8] для различных периодов сверхрешётки представлены ниже на рисунке.

Как видно, полученные вычислительные данные достаточно хорошо согласуются с результатам экспериментов [2], что позволяет судить об эффективности подхода. Стоит отметить, что в данном случае моделировались гетероструктуры с идеальными границами, в реальности, в процессе выращивания гетероструктур формируются интерфейсы с достаточно сложной формой, что оказывает эффект на результирующую теплопроводность. Таким образом, в частности, можно объяснить сравнительно низкую точность для образца с периодом 10×10 .



Сравнение рассчитанной (BTE – Boltzman Transport Equation) и экспериментальной теплопроводности (Capinski [2]) перпендикулярной росту гетероструктуры для различных периодов решётки $\Delta \times \Delta$

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-08-01191А.

Литература

1. *J. Carrete, B. Vermeersch, A. Katre, A. van Roekeghem, T. Wang, G. Madsen, N. Mingo.* AlmaBTE: a solver of the space-time dependent Boltzmann transport equation for phonons in structured materials. *Comp. Phys. Commun.* 220C, 351 (2017).
2. *Хвесюк В.И., Скрябин А.С.* Теплопроводность наноструктур. *Теплофизика высоких температур*, том 55, н. 3, с. 446–471 (2017).
3. *Zhang, Xing-li; SUN, Zhao-wei.* Molecular Dynamics Simulation on Thermal Boundary Resistance of Superlattice Structure. *Jour.of Aero. Mat.*, Vol. 31, N. 4, pp. 7–10 (2011).
4. A Fast Hybrid Fourier–Boltzmann Transport Equation Solver for Nongray Phonon Transport. *J. Heat Transfer.* Jan 2013, 135(1): 011008 (12 pp).
5. Virtual crystal approximation revisited Application to dielectric and piezoelectric properties of perovskites. *Phys. Rev. B. Condensed Matter and Materials Physics* Vol 61, N 12, p7877-7882 (2000).
6. *Tamura S.-i.*, Isotope scattering of dispersive phonons in Ge, *Phys. Rev. B* 27 (1983) 858–866.
7. *Vermeersch B., J. Carrete, N. Mingo,* Cross-plane heat conduction in thin films with ab-initio phonon dispersions and scattering rates, *Appl. Phys. Lett.* 108 (2016) 193104.
8. *Capinski W.S., H.J. Maris.* Thermal-conductivity measurements of GaAs/AlAs superlattices using a picosecond optical pump-and-probe technique. *Phys. Rev. B.* Vol 59, N 12, p. 8105–8113 (1999).

ВЫСОКОТОЧНЫЙ РАСЧЕТ ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО ДИОДА

С.И. Безродных^{1,2}, В.И. Власов¹

¹ Федеральный исследовательский центр «Информатика и Управление»
Российской академии наук

² Государственный астрономический институт им. П.К. Штернберга МГУ
e-mail: sbzrodnykh@mail.ru, vlasov@ccas.ru

Работа посвящена расчету полупроводникового диода в рамках электродинамики сплошных сред с учетом общепринятых допущений [1]–[5]. Рассматриваемая стационарная модель включает взаимодействие трех физических полей: электрического поля с потенциалом Ψ , а также полей концентраций дырок p и электронов n . Кроме того, учитывается концентрация d внедренной в диод примеси, создаваемой неподвижными зарядами. Для дырочного и электронного токов предполагается диффузионно-дрейфовое приближение [1]–[5] с учетом рекомбинации носителей электрического заряда.

Предполагается, что полупроводниковый диод имеет форму цилиндра, продольная координата x_1 которого лежит на отрезке $[-a, a]$, а размер поперечного сечения много меньше величины a . Торцы Γ^+ и Γ^- этого цилиндра являются поверхностями электрического контакта, причем подаваемый на левый контакт Γ^- потенциал равен нулю, а на правый равен $v = \text{const}$. Кроме того, предполагается, что на контактах Γ^\pm суммарный заряд равен нулю, а скорость рекомбинации дырок и электронов бесконечна. На остальной поверхности диода ставится условие отсутствия нормальной компоненты электрического поля, а также условие непротекания дырок и электронов. Предполагаем, что концентрация d примеси зависит лишь от продольной координаты x_1 и имеет вид «обратной ступеньки», т.е. $d(x_1) = -D_0 \text{sign} x_1$. В этих условиях искомые физические поля также зависят лишь от координаты x_1 , т.е. $\Psi = \Psi(x_1)$, $p = p(x_1)$, $n = n(x_1)$, см. также [6].

Введем безразмерную координату $x = x_1 / a$, безразмерные плотности примесей, дырок и электронов
 $D(x) = d(ax) / D_0$, $P(x) = p(ax) / D_0$, $N(x) = n(ax) / D_0$,

а также безразмерный электрический потенциал $\Psi(x)$ по формуле

$$\Psi(x) = \frac{1}{\Psi_\tau} [\psi(ax) - v/2],$$

где Ψ_τ – эйнштейновский потенциал, см. [1]. Тогда для искомым безразмерных функций $\Psi(x)$, $P(x)$ и $N(x)$ получаем следующую систему [6], [7] обыкновенных дифференциальных уравнений на отрезке $[-1,1]$:

$$\varkappa^2 \Psi''(x) + P(x) - N(x) = \text{sign } x, \quad (1)$$

$$P''(x) + \Psi'(x)P'(x) + \Psi''(x)P(x) = \delta_P R(x), \quad (2)$$

$$N''(x) - \Psi'(x)N'(x) - \Psi''(x)N(x) = \delta_N R(x). \quad (3)$$

Здесь параметр $\varkappa^2 = \frac{\varepsilon \Psi_\tau}{q D_0 a^2}$, выражаемый через введенные вели-

чины a , D_0 , Ψ_τ , а также диэлектрическую проницаемость материала диода ε и абсолютное значение заряда электрона q , представляет собой с учетом характерных значений

$$a \in [10^{-4}, 10^{-3}] \text{ см}, \quad D_0 \in [10^{15}, 10^{20}] \text{ см}^{-3},$$

$$q = 1.60 \times 10^{-19} \text{ Кул}, \quad \varepsilon \in [10^{-13}, 10^{-11}] \frac{\text{Кул}}{(\text{В} \cdot \text{см})},$$

малое число $\approx [10^{-8}, 10^{-4}]$. Он играет роль сингулярно возмущающего параметра для системы (1)–(3). Таким образом, эта система является сингулярно возмущенной нелинейной системой дифференциальных уравнений. Здесь $R(x)$ – рекомбинационная функция в форме Шокли–Рида–Холла [1]–[5]:

$$R(x) = \frac{P(x)N(x) - N_i^2}{N(x) + N_i + \tau(P(x) + N_i)}.$$

Числа $\delta_P \approx 10^{-4}$, $\delta_N \approx 10^{-4}$, $N_i \approx 10^{-9}$ и $\tau \approx 1$ суть параметры модели, см. об этом [6]. Краевые условия для искомым функций:

$$\Psi(-1) = -V, \quad \Psi(1) = V; \quad P(-1) = 0, \quad P(1) = 1; \quad N(-1) = 1, \quad N(1) = 0,$$

где $V = -\text{arsh}[(2N_i)^{-1}] + v/(2\psi_\tau)$ – нормированный и симметризованный внешний потенциал из диапазона $[-100, 100]$. Приведенные граничные условия вытекают из общепринятых условий равенства нулю суммарного заряда и бесконечной скорости рекомбинации на контактах, а также совпадения уровня Ферми дырок и электронов с подаваемым на контакты внешним потенциалом [1]–[5].

В работе дан аналитико-численный метод решения поставленной краевой задачи для системы сингулярно возмущенных нелинейных уравнений (1)–(3). Метод является развитием предложенных в [6], [8]–[10] методов. В его основе лежит, прежде всего, сведение исходной краевой задачи к системе двух уравнений, одно из которых интегро-дифференциальное, второе – интегральное. Первое из них вместе с граничными условиями имеет вид

$$\mathcal{D}(R)[\Psi] = \varkappa^2 \Psi''(x) - \text{sign} x + \mathcal{L}(R)[\Psi], \quad \Psi(-1) = -V, \quad \Psi(1) = V. \quad (4)$$

Здесь

$$\mathcal{L}(R)[\Psi] = e^{V-\Psi} \frac{E_{-1}^x[\Psi]}{E[\Psi]} - e^{V+\Psi} \frac{E_x^1[-\Psi]}{E[-\Psi]} +$$

$$+ \delta_p \langle \mathbb{P}(\Psi; x, \xi) * R(\xi) \rangle - \delta_N \langle \mathbb{N}(\Psi; x, \xi) * R(\xi) \rangle.$$

$\mathbb{P}(\Psi; x, \xi)$ и $\mathbb{N}(\Psi; x, \xi)$ – функции Грина дифференциальных операторов в левых частях уравнений (2) и (3),

$E_\alpha^\beta[u] = \int_\alpha^\beta \exp[u(t)] dt$, $E[u] = E_{-1}^1[u]$, кроме того, $\langle f * g \rangle$ – свертка функций f и g на отрезке $[-1, 1]$. Интегральное уравнение имеет вид

$$\mathcal{K}(\Psi)[R] := R - \mathcal{R}[\mathcal{P}[\Psi, R], \mathcal{N}[\Psi, R]] = 0. \quad (5)$$

Оператор \mathcal{R} в этой формуле дается равенством

$$\mathcal{R}(\Psi)[\mathcal{P}, \mathcal{N}] = \frac{\mathcal{P}[\Psi, R] \mathcal{N}[\Psi, R] - N_i^2}{\mathcal{N}[\Psi, R] + N_i + \tau(\mathcal{P}[\Psi, R] + N_i)}.$$

Здесь

$$P(x) = \mathcal{P}[\Psi, R] := \delta_p \langle \mathbb{P}(\Psi; x, \xi) * R(\xi) \rangle + e^{V-\Psi(x)} \frac{E_{-1}^x[\Psi]}{E[\Psi]},$$

$$N(x) = \mathcal{N}[\Psi, R] := \delta_N \langle \mathbb{N}(\Psi; x, \xi) * R(\xi) \rangle + e^{V+\Psi(x)} \frac{E_x^1[-\Psi]}{E[-\Psi]}.$$

Для решения системы уравнений (4), (5) предложено специальное сочетание функционального метода Ньютона и метода продолжения по параметру [11], [12]. При этом обращение производных Фреше соответствующих нелинейных операторов осуществляется на основе приближения Грина–Лиувилля (метод ВКБ), см. [13]. Начальное приближение для итерационного алгоритма найдено в явном виде. Предложенный метод был численно реализован и получены численные данные для распределения электрического потенциала и концентраций дырок и электронов. Установленная теоретически сверхэкспоненциальная скорость сходимости предложенного метода подтверждена численными экспериментами.

Литература

1. *S.M. Sze*. Physics of Semiconductor Devices. – New York: J. Wiley & Sons, 1981.
2. *S. Selberherr*. Analysis and simulation of semiconductor devices. – Springer Verlag, 1984.
3. *K. Kano*. Semiconductor devices. – Prentice Hall, 1988.
4. *P. Markowich, S.J. Polak, C. Den Heijer, W.H.A. Schilders*. Semiconductor device modeling from the numerical point of view // Internat. J. Numer. Methods Engng., 1987, v. 24, № 4, p. 63–83.
5. *T.E. Zirkle, D.K. Schroder, C.E. Backus*. The superlinearity of shortcircuit current of lowresistance concentrator Solar Cells // IEEE Trans., 1989, v. ED-36, № 7, p. 1286–1294.
6. *С.И. Безродных, В.И. Власов*. Краевая задача для моделирования физических полей в полупроводниковом диоде // Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 2004, т. 44, № 12, с. 2232–2263.
7. *M. Hinze, R. Pinnau*. Mathematical tools in optimal semiconductor design // Bull. Inst. Math. Acad. Sin., (New Series) 2007, v. 2, № 2, p. 569–586.
8. *В.И. Власов, С.И. Безродных*. Метод решения сингулярно возмущенной системы нелинейных дифференциальных уравнений // Докл. РАН., 2004, т. 394, № 6, с. 731–734.
9. *С.И. Безродных, В.И. Власов*. Эффективный метод решения сингулярно возмущенной системы нелинейных дифференциальных уравнений // Современная математика. Фундаментальные направления, 2006, т. 15, с. 45–58.
10. *С.И. Безродных, В.И. Власов*. Аналитико-численный метод расчета взаимодействия физических полей в полупроводниковом диоде // Матем. моделир. 2015, т. 27, № 7. С. 15–24.
11. *Л.В. Канторович, Г.П. Акилов*. Функциональный анализ. – М.: Наука, 1977.
12. *Н.С. Бахвалов, Н.П. Жидков, Г.М. Кобельков*. Численные методы. – М.: Наука, 1987.
13. *J. Heading*. An introduction to phase-integral methods. – New York: J. Wiley & Sons, 1962.

MEMRISTOR SWITCHING AND OXYGEN ATOM MANIPULATION ON MOO₂ SURFACE.

Sergey Bozhko^{1,2}, Killian Walshe², Natalia Tulina¹, Brian Walls²,
Olaf Lübben², Barry Murphy², Sergey Krasnikov²,
Vladimir Bozhko¹, Igor V. Shvets².

¹ *Institute of Solid State Physics, Russian Academy of Science, 2 Academician
Ossipyan str., 142432 Chernogolovka, Moscow district, Russia*

² *School of Physics, Trinity College Dublin, Dublin 2, Ireland*

Molibdenum oxide is one of the materials which exhibit memristor switching. However, mechanism of the switching is not clear till now. Memristor switching in MoO₂ occurs at electric field strength of 10⁶V/cm. Typical electric field in tunneling gap of STM is of 10⁶–10⁷V/cm. Thus, STM is a proper tool to simulate modification of MoO₂ structure as a result of the switching. Both inelastic tunneling and strong electric field in a STM tip – surface gap contribute into modification of the surface. Scanning Tunnelling Microscopy (STM) is a useful tool for the analysis of the surface of many conducting materials which possess atomic resolution. We have used STM and DFT simulations to study surface modification and separate contribution of tunneling current from electric field generated by a probe of STM at MoO₂/Mo(111) surface.

A monolayer of extra oxygen atoms was prepared by exposition of MoO₂/Mo(110) surface in oxygen (P=10⁻⁷Torr) at room temperature [1]. STM experiments demonstrated that extra oxygen can be removed from the surface top layer solely by means of electric field generated by STM tip. Despite of a smooth distribution of electric field it was possible to remove individual extra oxygen atoms from the surface. However, tunneling current increases the probability of oxygen atom to be escaped. We have proposed a models of surface modification both by tunneling current and electric field generated by a probe of STM. This has been confirmed by DFT simulations.

This work was supported by RFBR Grant 19-29-03021 mk

References

1. *Sergey I. Bozhko, Killian Walshe, Natalia Tulina, Brian Walls, Olaf Lübben, Barry E. Murphy, Vladimir Bozhko & Igor V. Shvets, Surface modification on MoO_{2+x}/Mo(110) induced by a local electric potential Scientific Reports (2019) 9, 1–11*

ПОСТРОЕНИЕ АСИМПТОТИК РЕШЕНИЙ ЛИНЕЙНЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ С ГОЛОМОРФНЫМИ КОЭФФИЦИЕНТАМИ И ИХ ТИПЫ

М.В. Коровина

МГУ им. М.В. Ломоносова

Работа посвящена рассмотрению асимптотик решений обыкновенных дифференциальных уравнения с голоморфными коэффициентами с вырождениями. А именно рассматриваются обыкновенные дифференциальные уравнения с голоморфными коэффициентами

$$b_n(r)\left(\frac{d}{dr}\right)^n u(r) + b_{n-1}(r)\left(\frac{d}{dr}\right)^{n-1} u(r) + \dots + b_i(r)\left(\frac{d}{dr}\right)^i u(r) + \dots + b_0(r)u(r) = 0, \quad (1)$$

здесь $b_i(r)$ являются голоморфными функциями.

Если коэффициент при старшей производной $b_n(r)$ обращается в ноль в некоторой точке, без ограничения общности можно считать, что эта точка $r = 0$, то уравнение (1), вообще говоря, имеет особенность в нуле. В этом случае ноль может быть регулярной или иррегулярной особой точкой. Проблема представления асимптотики решения уравнения с голоморфными коэффициентами в окрестности иррегулярной особой точки впервые была сформулирована А. Пуанкаре в работах [1], [2]. В этой работе впервые было показано, что решение уравнения с голоморфными коэффициентами в окрестности иррегулярной особой точки в некоторых случаях точки может разлагаться в асимптотический ряд и была предпринята попытка суммировать этот ряд с помощью интегрального преобразования Лапласа. При этом использовался частный случай асимптотического разложения решения в окрестности бесконечно удаленной особой точки, полученного в работе Томе [3].

Уравнение (1) может быть сведено к уравнению вида

$$\hat{H}u = H\left(r, -r^k \frac{d}{dr}\right)u = 0, \quad (2)$$

где \hat{H} – дифференциальный оператор с голоморфными коэффициентами

$$H(r, p) = \sum_{i=0}^n a_i(r) p^i.$$

Здесь $a_i(r)$ – голоморфные функции, причем $a_n(0) \neq 0$ и получена формула для вычисления минимального значения k . В зависимости от этого значения k можно разбить уравнения на три типа, каждому из которых соответствует свой тип асимптотик. К первому типу отнесем те уравнения, для которых $k=0$. В этом случае мы имеем невырожденные дифференциальные уравнения не имеющие особенностей в нуле. Их решения являются голоморфными функциями. В случае $k=1$ уравнения являются вырожденными, эти уравнения сводятся к уравнениям с регулярными особенностями а сами уравнения называются уравнениями фуксова типа. Как известно, асимптотики решения в нуле являются конормальными. Они представимы в виде суммы слагаемых вида $(\ln r)^m r^\sigma \sum_{k=0}^{\infty} a_k r^k$, где ряды $\sum_{k=0}^{\infty} a_k r^k$

являются асимптотическими. К третьему типу относятся те уравнения, для которых $k>1$. Это случай уравнения с иррегулярными особенностями. Эти уравнения называются уравнениями нефуксова типа. Разделим уравнения нефуксова типа на два класса, к первому классу отнесем уравнения такие, что многочлен $H_0(p) = H(0, p)$, который называется основным символом, имеет только простые корни. Назовем такие уравнения нефуксовыми уравнениями первого типа. Ко второму классу относятся остальные уравнения, то есть уравнения нефуксова типа такие, что основной символ имеет не только простые, но и кратные корни. Назовем их нефуксовыми уравнениями второго типа.

Случай нефуксовых уравнений первого типа для линейных уравнений и их систем рассматриваются, например, в работе [4], а затем во многих классических учебниках.

В этих работах построены асимптотические разложения решений нефуксовых уравнения первого типа, они были получены в виде произведений соответствующих экспонент на расходящиеся степенные ряды, а именно

$$\sum_{j=1}^n e^{\frac{p_j}{r^k} + \sum_{i=1}^{k-1} \frac{\alpha^j_{k-i}}{r^{k-i}}} r^{\sigma_j} \sum_{i=0}^{\infty} b_i^j r^i. \quad (3)$$

где $\alpha_i, i = 1, \dots, n$ – корни полинома $H_0(p)$ и σ_j и a_i^k – некоторые комплексные числа. Назовем эти асимптотики нефуксовыми асимптотиками первого типа.

В конце 80-х годов прошлого века был получен аппарат пригодный для суммирования подобных рядов, основанный на преобразовании Лапласа-Бореля и понятии ресургентной функции, впервые введенном французским математиком Ж. Экалем.

Благодаря этим методам в работах [5], [6], [7] были построены равномерные асимптотики решений для случая, когда корни старшего символа $H_0(p) = H(0, p)$ являются простыми.

ТЕОРЕМА. *Решение уравнения (2) является ресургентной функцией. Если полином $H_0(p)$ имеет корни первого порядка в точках p_1, \dots, p_m , тогда асимптотика решения однородного уравнения будет иметь вид*

$$u(r) = \sum_{j=0}^m e^{\frac{p_j}{r^k} + \sum_{i=1}^{k-1} \frac{\alpha^j_{k-i}}{r^{k-i}}} r^{\sigma_j} \sum_{i=0}^{\infty} b_i^j r^i,$$

где сумма берется по объединению всех корней полинома $H_0(p)$.

Примером нефуксовой иррегулярной особенности 2-го типа является особенность в окрестности бесконечности решения уравнения

$$\left(\frac{d}{dx}\right)^n u(x) + a_{n-1}(x) \left(\frac{d}{dx}\right)^{n-1} u(x) + \dots + a_i(x) \left(\frac{d}{dx}\right)^i u(x) + \dots + a_0(x) u(x) = 0 \quad (4)$$

здесь коэффициенты $a_i(x)$ регулярны на бесконечности, это означает, что существует такая внешность круга $|x| > a$, что функции $a_i(x), i = 0, 1, \dots, n-1$ разлагаются в ней в сходящиеся степенные ряды

$$a_i(x) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{b_i^j}{x^j}.$$

Это уравнение путем замены $x = \frac{1}{r}$ сводится к уравнению с вырождением типа клюва второго порядка в нуле.

Здесь мы сформулируем теорему для случая, когда основной символ дифференциального оператора имеет один корень. Без ограничения общности будем считать, что этот корень находится в нуле.

В этом случае $a_i(x) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{b_i^j}{x^j}$. Перепишем уравнение (4) в виде

$$\left(-r^2 \frac{d}{dr}\right)^n u + b_0 r^m \left(-r^2 \frac{d}{dr}\right)^k u + b_1 r^{m+1} \left(-r^2 \frac{d}{dr}\right)^{k-1} u + b_2 r^{m+2} \left(-r^2 \frac{d}{dr}\right)^{k-2} u + \dots + b_{k+1} r^{m+k} u + \sum_{i=1}^m r^i \sum_{j=h_i}^{n-1} b_j^i \left(-r^2 \frac{d}{dr}\right)^j u + r^{h+1} \sum_{i=0}^{n-1} a^i(r) \left(-r^2 \frac{d}{dr}\right)^i u = 0$$

Здесь $i + h_i > m + k$, через b_i, b_j^i — соответствующие числа, $a^i(r)$ — голоморфные функции. Число $h = m + k$ называется индексом сингулярности уравнения (4).

Пусть выполнено неравенство

$$h_i + i - h > (m - i) \frac{n - k - m}{m} \quad (5)$$

тогда верна

ТЕОРЕМА. *Асимптотика решения уравнения (4) в окрестности бесконечности имеет вид*

$$u(x) \approx \sum_{j=1}^{n-k} \exp\left(\sum_{i=1}^{n-k-m} \alpha_i^j x^{\frac{i}{n-k}}\right) x^{-\frac{\sigma_j}{n-k}} \sum_l A_l^j x^{-\frac{l}{n-k}} + \sum_{j=0}^{k_0} \left(\ln \frac{1}{x}\right)^j x^{\alpha_j} \sum_{i=0}^{\infty} b_i^j x^{-i}, \quad (6)$$

где $\alpha_{n-k-m}^j, j = 1, \dots, n-k$ — корни полинома $P^{n-k} + \left(\frac{n-k}{n-k-m}\right)^{n-k} a_0$, а $A_l^j, \sigma_j, b_i^j, k_0$ и $\alpha_i^j, j = 1, \dots, n-k-1$ — некоторые числа.

асимптотики типа (6) будем называть обобщенными нефуксовыми асимптотиками, в отличие от нефуксовых асимптотик (3) содержат в показателях экспоненты нецелые степени переменной x .

Можно показать, что в общем случае справедлива

ТЕОРЕМА. *Решение задачи (5) представимо в виде обобщенной нефуксовой асимптотики и конормальной асимптотики.*

Литература

1. Poincare H. Sur les integrales irregulieres des equations lineaires. //Acta math. 1886, v. 8, p. 295–344.
2. Пуанкаре / Избранные труды в трех томах. Том 3. Математика. Теоретическая физика. Анализ математических и естественных работ Анри Пуанкаре. Изд-во наука. 1974.
3. Thome L.W. Zur Theorie der linearen differentialgleichungen. (German) 1872
4. Sternberg W. Uber die asymptotische Integration von Differencialgleichungen, Verlag von Julius Spriger, Berlin, 1920.

5. Коровина М.В., Шаталов В.Е. Дифференциальные уравнения с вырождением и ресургентный анализ // Дифференциальные уравнения. – 2010. – Т. 46, № 9. – С. 1259–1277.

6. Коровина М.В. Существование ресургентного решения для уравнений с вырождением высших порядков // Дифференциальные уравнения. – 2011. – Т. 47, № 3. – С. 349–357.

7. Коровина М.В. Асимптотики решений уравнений с высшими вырождениями // Доклады Академии наук. – 2011. – Т. 437, № 3. – С. 302–304.

АНАЛИТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПО ОПРЕДЕЛЕНИЮ ДОЗЫ ДЛЯ ДЕТЕКТОРА ТЕЛЕВИЗИОННОГО ТИПА ПРИ ПРОТОННОЙ ДОЗИМЕТРИИ

В.В. Сиксин

*Физический институт им. П.Н. Лебедева, РАН, г.Москва,
e-mail: antktech@yandex.ru*

Проведены расчеты по совершенствованию математической модели для вычислителя детектора телевизионного типа. Определены параметры аналитической формулы, справедливой для энергий протонов от 30 до 250 МэВ, в основе которой применена комбинация функций параболического цилиндра, согласуемая с численными методами и новыми экспериментальными данными. Предложена математическая модель для работы вычислителя детектора телевизионного типа с аналитической аппроксимацией кривой Брегга в простом виде для быстрых вычислений. Основной проблемой в планировании лучевой терапии является определение кривых зависимости доза-глубина (кривых Брегга). Для улучшения качества протонной дозиметрии был предложен новый вид детектора – детектор телевизионного типа (ДТеТ). ДТеТ реализует новую методику диагностики дозных полей, регистрируя и вычисляя точные распределения и значения основных характеристик пучка при планировании протонной терапии. Разработанная математическая модель с аналитической аппроксимацией кривой Брегга позволяет проводить быстрые вычисления в on-line режиме работы.

При создании вычислителя для нового типа детектора ДТеТ – детектора телевизионного типа [1], [2], [3] и [4], разработана математическая модель с аналитическим представлением кривой Брегга [5], которая основывается на экспериментально полученных резуль-

татах при энергиях протонного пучка от 60 до 150 МэВ. Совершенство протонного варианта детектора ДТеТ позволило провести эксперименты в более широком диапазоне терапевтических энергий – от 30 до 250 МэВ, что обеспечило перекрытие терапевтического диапазона энергий ускорителя «Прометеус».

В данной работе используется аналитическая формула из работы [5], с помощью которой описываются дополнительные данные эксперимента [4], полученные в декабрьском сеансе 2018 года на ускорителе «Прометеус» в терапевтическом диапазоне энергий от 30 до 250 МэВ.

В вычислителе промышленного образца предполагается использовать полученные аналитические формулы, при этом в алгоритме вычислений должны учитываться показатели интенсивности пучка, получаемые от ускорителя через интерфейс связи с ним, и измеренные детектором ДТеТ значения z – координаты глубины максимума пика Брэгга, что позволит определять дозу $DOZA(z)$ на глубине максимума пика Брэгга.

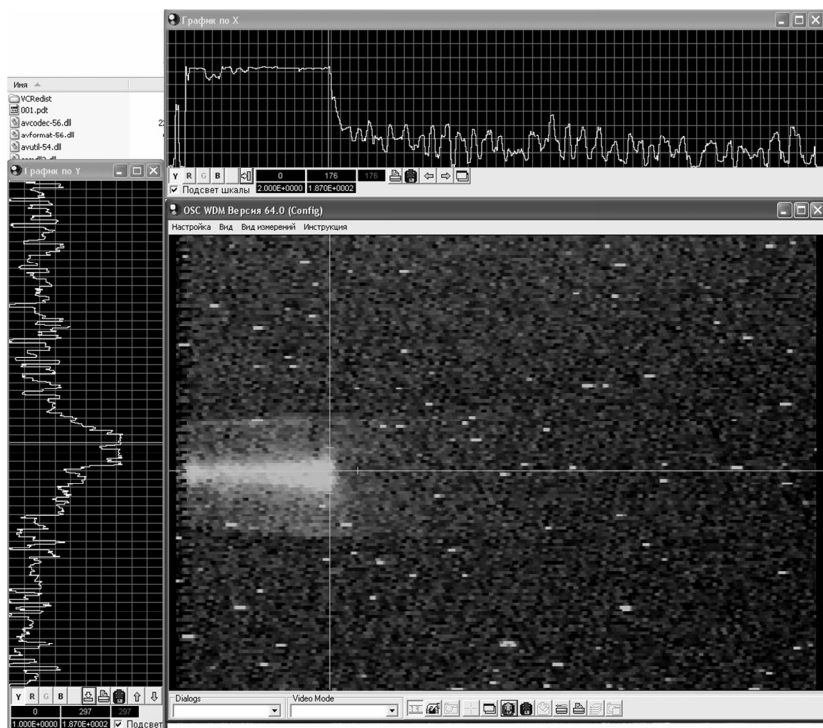


Рис. 1. Рабочий кадр процесса измерения зафиксированной траектории пучка протонов с энергией 100 МэВ в водном фантоме

При обработке математической модели использован пакет программ FLUKA [6], [7], с помощью которого для энергий терапевтического диапазона проведены вычисления величин DOZA(z).

На рис. 1 показан рабочий кадр детектора ДТеТ с результатом попиксельного измерения длины «области свечения» при энергии пучка протонов 100 МэВ, которая определяет величину z (точку остановки протона в водном фантоме, зафиксированную детектором телевизионного типа по вспышке в конце пути протона).

Математическая модель с аналитической аппроксимацией кривой Брегга имеет простой и удобный вид, позволяющий проводить быстрые вычисления программным обеспечением детектора ДТеТ в on-line режиме работы.

Литература

1. Сиксин В.В. Установка для визуализации энерговыделения в фантоме с водой на пучке протонов радиотерапевтического ускорителя, Журнал «Краткие сообщения по физике ФИАН», Физический Институт им. П.Н. Лебедева РАН, г. Москва, 2017, № 2
2. Сиксин В.В. Исследование опытного образца детектора ДТеТ на пучке протонов радиотерапевтического ускорителя, Журнал «Краткие сообщения по физике ФИАН», Физический Институт им. П.Н. Лебедева РАН, г. Москва, 2018, № 5.
3. Сиксин В.В. Пути совершенствования детектора ДТеТ, Журнал «Краткие сообщения по физике ФИАН», Физический Институт им. П.Н. Лебедева РАН, г. Москва, 2018, № 12.
4. Сиксин В.В. Измерение профилей пиков Брегга детектором ДТеТ, Журнал «Краткие сообщения по физике ФИАН», Физический Институт им. П.Н. Лебедева РАН, г. Москва, 2019, № 2.
5. Гринкевич А.В., Сиксин В.В. Аналитическое представление кривой Брегга для работы с детектором телевизионного типа на радиотерапевтическом ускорителе, Журнал «Краткие сообщения по физике ФИАН», Физический Институт им. П.Н. Лебедева РАН, г. Москва, 2018, № 2.
6. Официальный сайт пакета FLUKA – <http://www.fluka.org>.
7. A. Fasso, A. Ferrari, J. Ranft, and P.R. Sala, FLUKA: a multi-particle transport code, CERN-2005-10 (2005), INFN/TC 05/11, SLAC-R-773.
8. K.-U. Gardey, A Pencil Beam Model for Proton Therapy–Treatment Planning and Experimental Results, Ph.D. thesis, Universitat Heidelberg, 1996.

9. *U. Oelfke, K.-U. Gardey, E.W. Blackmore, and G. K. Y. Lam*, Proton dosimetry at TRIUMF: Experimental profiles and PTRAN MC calculations, in PTCOG XXI, San Francisco, April 25 1995.

10. *J.F. Janni*, Proton range-energy tables, 1 keV–10 GeV, *At. Data Nucl. Data Tables* 27, 147-339, 1982.

4. D

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

ВЛИЯНИЕ СТЕПЕНИ ВЫРОЖДЕНИЯ УРОВНЕЙ НА КОНЦЕНТРАЦИЮ СОБСТВЕННЫХ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СОЕДИНЕНИЯХ A^2B^6

С.П. Кобелева

*НИТУ «МИСис», г. Москва
kob@misis.ru*

Прямозонные полупроводниковые соединения группы A^2B^6 широко востребованы в приборах оптоэлектроники как фоточувствительные материалы и как источники монохроматического света видимого диапазона. Особенно это относится к широкозонным соединениям этой группы – халькогенидам кадмия и цинка. Широкое применение этих материалов в оптоэлектронных устройствах сдерживает их чрезвычайная чувствительность к технологическим условиям выращивания. Связано это в первую очередь с тем, что они имеют достаточно большую область гомогенности (до 10^{19} см^{-3} избыточного компонента), а собственные точечные дефекты (СТД), формирующие этот избыток, в отличие, к примеру, от таковых в соединениях A^3B^5 , электрически активны [1]. Это приводит к тому, что нелегированные материалы с шириной запрещенной зоны (E_g) меньше 2 эВ могут обладать биполярной проводимостью в зависимости от того, с избытком какого компонента они выращены, а более широкозонные материалы трудно получить р- типа за счет образования при легировании компенсирующих СТД. Еще одной сложностью является получение высокоомного материала, т. к. большая концентрация СТД даже в материале стехиометрического состава затрудняет получение материала близкого к собственному.

При разработке технологии получения высокоомных материалов этой группы особенно возрастает роль моделирования состава и концентраций СТД при использовании различных технологических режимов. Для расчета концентраций СТД при высоких температурах пользуются методом квазихимических реакций [2]. Для оценки концентрации свободных носителей заряда (СНЗ) при комнатной температуре необходима информация о зарядовом состоянии дефектов. На примере наиболее изученного материала этой группы – CdTe, известно, что образуются дефекты Френкеля по обоим под решеткам и антиструктурные дефекты, при этом практически все могут быть как однократно, так и двукратно заряженными. В связи с

этим возникает необходимость рассмотрения статистики многозарядных центров и решения уравнения электронейтральности на базе такой статистики. Целью данной работы является анализ влияния степени вырождения энергетических уровней дефектов на расчеты как концентраций СТД при высоких температурах, так и последующие расчеты концентрации СНЗ при рабочей температуре приборов на основе этих материалов.

Для расчета числа центров в разном зарядовом состоянии воспользуемся выражением, описывающим отношение вероятности f заполнения энергетического уровня дефекта D числом электронов $n+1$ и n [3]:

$$\frac{f_{n+1}}{f_n} = \frac{g_{n+1}}{g_n} \exp\left(\frac{(F - E_{D_{n+1}})}{kT}\right) \quad (1)$$

g – фактор вырождения соответствующего энергетического уровня, F – уровень Ферми, $E_{D_{n+1}}$ – энергия, необходимая для увеличения числа электронов на центре на 1, k – постоянная Больцмана, T – температура. Условие нормировки: $\sum f_n = 1$. Выражения для вероятностей заполнения уровней электронами в терминологии (1) одинаковы для доноров и акцепторов, но концентрации заряженных доноров и акцепторов будут определяться разными вероятностями заполнения. Так, если центры могут быть одно- и двукратно заряженными,

$$N_{D^+} = f_1 \cdot N_D; \quad N_{D^{++}} = f_0 \cdot N_D; \quad N_{A^-} = f_1 \cdot N_A; \quad N_{A^{--}} = f_2 \cdot N_A; \quad (2)$$

Акцепторные и донорные уровни отличаются также факторами вырождения, определение которых не всегда однозначно. В случае двукратно заряженных донорных и акцепторных СТД, как это имеет место в соединениях A^2B^6 , если учитывать только спиновое вырождение и считать, что каждый дополнительный электрон на центре имеет свой энергетический уровень в запрещенной зоне, то [4] для донорных уровней:

$$g_0 = 1, g_1 = 2, g_2 = 4 \quad (3)$$

а для акцепторных уровней:

$$g_0 = 1, g_1 = 1/2, g_2 = 1/4 \quad (4)$$

Вместе с тем в CdTe для межузельного кадмия (донорный центр) предлагается считать [5]:

$$g_0 = 1, g_1 = 2, g_2 = 1 \quad (5)$$

Действительно, атом кадмия в междоузлии имеет два внешних электрона в S состоянии и если рассматривать этот уровень как атомарный, $g_2 = 1$. Для акцепторных уровней ситуация более неопределенная. В [6] при сохранении изложенного выше подхода, предложено использовать для акцепторных уровней факторы вырождения также по (3). Надо отметить, что в этом случае известные формулы для однократно заряженных акцепторных центров [3, 4] отличаются от предложенных в [6]. В [5] также факторы вырождения донорных и акцепторных центров выбраны одинаковыми. Надо отметить, что факторы вырождения в первую очередь влияют на константы квазихимических реакций образования ионизированных дефектов, изменяя энтропийный член констант в 2–4 раза.

Не обсуждая физическую сторону такого выбора, мы рассмотрели влияние факторов вырождения на решение уравнения электронейтральности при комнатной температуре в предположении, что в соединении доминируют дефекты Френкеля по металлической подрешетке, при этом атом металла в междоузлии всегда будет двукратно заряженным:

$$p+2[A_i^{''}] = n+[V_A'] + 2[V_A^{''}] \quad (6)$$

Концентрации дефектов определяли в соответствии с (2). Рассмотрены все три варианта факторов вырождения акцепторных уровней. Было показано, что влияние факторов вырождения на концентрацию СНЗ при фиксированном соотношении концентраций донорных и акцепторных центров, что соответствует определенному отклонению от стехиометрии, практически не зависит от ширины запрещенной зоны, но сильно увеличивается с увеличением глубины второго акцепторного уровня (увеличении энергии ионизации акцептора). В интервале величин E_g от 1,5 эВ (CdTe) до 2,5 эВ (CdS) концентрация электронов (дырок) может отличаться в 2 – 4 раза, для разных вариантов факторов вырождения.

Физическое обоснование выбора факторов вырождения для СТД в соединениях A^2B^6 обсуждается.

Литература

1. Зломанов В.П., Аветисов И.Х., Можевитина Е.Н. Физическая химия твердого тела. P–T–x диаграммы фазовых равновесий. М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2019. 184 с.
2. Креггер Ф.А. Химия несовершенных кристаллов. М.: Мир, 1969. 654 с.

3. Бонч-Бруевич В.Л., Калашиников С.Г. Физика полупроводников. М., Мир, 1977, 672 с.
4. Киреев П.С. Физика полупроводников. М., Высшая школа, 1975, 581 с.
5. Saraie J., Kitagava M., Tanaka T. J. Electrochem. Soc., V. 126, No 12, p. 2226, 1979.
6. Иванов А.А., Лукьянов А.А., Раевский А.О. Физическое образование в вузах, т. 7, № 3, с. 42, 2001.

СТД В CdTe КОНГРУЭНТНО ИСПАРЯЮЩИХСЯ СОСТАВОВ

С.П. Кобелева, С.Ю. Юрчук, С. Фадеев

НИТУ «МИСиС», г. Москва

CdTe – типичный и наиболее исследованный материал из группы полупроводниковых широкозонных соединений A^2B^6 широко востребован в первую очередь как материал для детекторов ионизирующих излучений, он считается одним из перспективных для создания однопереходных солнечных элементов, а также востребован в ряде других оптоэлектронных приборов [1]. Большая доля ионности материалов приводит к тому, что собственные точечные дефекты (СТД) электрически активны: со стороны избытка теллура можно получить материал дырочного типа проводимости с концентрацией дырок (p) до 10^{17} см^{-3} , со стороны избытка кадмия – электронный материал с такой же большой концентрацией электронов (n) [2]. Вместе с тем для детекторов и фотоприемников необходим материал близкий к собственному, который можно надеяться получить в соединении с небольшим отклонением от стехиометрии (δ). Такие составы можно получить только используя методы выращивания из газовой фазы. Соединения A^2B^6 при испарении полностью разлагаются. Равновесная паровая фаза CdTe состоит из атомов кадмия и двухатомных молекул теллура, причем не смотря на относительно небольшой с химической точки зрения предельный избыток компонентов на границе области гомогенности (до 10^{-4} ат. долей) паровая фаза при испарении граничных соединений состоит либо практически из атомов кадмия, либо из молекул теллура. Парциальные давления компонентов связаны соотношением [3]:

$$K_{\text{CdTe}} = P_{\text{Cd}}(P_{\text{Te}_2})^{1/2} \quad (1)$$

где K_{CdTe} – константа квазихимической реакции испарения соединения, P – парциальные давления компонентов равновесной паровой фазы. И только единственный состав внутри области гомогенности, имеющий минимальную энергию Гиббса, испаряется конгруэнтно, т. е. $P_{\text{Cd}} = 2P_{\text{Te}}$, при этом общее равновесное давление $P = P_{\text{Cd}} + P_{\text{Te}}$ минимально (составы $P_{\text{мин}}$). Соединение этого состава идеально подходит для выращивания монокристаллов и пленок из паровой фазы методом термической сублимации. В [4] предложен метод многократной очистки – сублимации, в котором после синтеза соединения из компонентов идет как очистка от примесей, так и от избыточного по отношению к составу $P_{\text{мин}}$ компоненту. Но δ в CdTe составов $P_{\text{мин}}$ точно не известно. В серии работ, в частности, в [5,6] было показано, что в CdTe составы $P_{\text{мин}}$ лежат в области избытка теллура и их сопротивление при комнатной температуре может достигать 10^9 Ом см [6]. В [7] получены экспериментальные зависимости сопротивления образцов предположительно составов $P_{\text{мин}}$ от температуры. В данной работе поставлена задача теоретического расчета такой зависимости и сопоставления ее с экспериментальными данными [7] для уточнения модели дефектообразования в CdTe и определения δ составов $P_{\text{мин}}$.

Концентрации дефектов рассчитывали методом квазихимических реакций [3]. В CdTe рассматривали как дефекты Френкеля по обеим подрешеткам, так и антиструктурный дефект Te_{Cd} . Для большинства дефектов учитывали одно- и двухзарядные состояния. Для расчета высокотемпературного равновесия уравнение электронейтральности решали численным методом:

$$p + [\text{Cd}'_i] + 2[\text{Cd}''_i] + [\text{V}'_{\text{Te}}] + 2[\text{V}''_{\text{Te}}] + [\text{Te}'_{\text{Cd}}] + 2[\text{Te}''_{\text{Cd}}] = n + [\text{V}'_{\text{Cd}}] + 2[\text{V}''_{\text{Cd}}] + [\text{Te}'_i] \quad (2)$$

где i – межузельный атом, V – вакансия соответствующего атома.

Каждый вид дефекта D_m описывается соответствующей константой квазихимических реакций:

$$K_m^j = [D_m^j] P_{\text{Cd}}^k n^{-j} \quad (3)$$

где $[D_m]$ – концентрация дефекта D_m , j – зарядовое состояние дефекта, $k = +1$ для Cd'_i и V_{Te} , $k = -1$ для V_{Cd} Te_i , $k = -2$ для антиструктурного дефекта. Уравнение (2) в таком виде содержит два неизвестных – P_{Cd} и n . В работе давление P_{Cd} определяли из условия для $P_{\text{мин}}$ и решали уравнение относительно n .

Были рассмотрены три модели дефектообразования в CdTe [5, 8–9].

Во всех моделях материал состава $P_{\text{мин}}$ вплоть до температур 900 К имеет избыток теллура и дырочную проводимость как при температуре выращивания, так и при комнатной температуре, но высокоомный материал с $p \sim 10^7 \text{ см}^{-3}$ при комнатной температуре дают только расчеты по модели [5] при температурах $P_{\text{мин}}$ выше 1100 К.

Расчет температурной зависимости n и p от 70 до 300 К был проведен в предположении, что высокотемпературный состав был заморожен и суммарная по всем зарядовым состояниям концентрация каждого типа дефектов осталась постоянной. Решали уравнение электронейтральности (2), концентрации заряженных дефектов определяли с учетом статистики многозарядных центров [10, 11]. Выражения для вероятностей заполнения электроном центра аналогичны изложенным в [12], но факторы вырождения взяты по [11]. Для расчета энергии активации сопротивления, полученные в [7] экспериментально в интервале температур 70 – 300 К, учитывали рассеяние на длинноволновых акустических фононах (подвижность $\mu \sim \text{эВ}^{-1,5}$).

В таблице приведены рассчитанные энергии активации сопротивления для трех моделей дефектообразования и экспериментальные значения. Только для модели [5] и температуре 1273 К данные расчета удовлетворительно совпали с экспериментальными данными [7].

Модель	[5]		[9]		[8]		[7]
	1073	1273	1073	1273	1073	1273	
$E_{\text{акт}}$, эВ	0,158	0,712	0,164	0,157	0,026	0,368	0,7-0,72

При этой температуре δ порядка 10^{18} см^{-3} для всех моделей и низкие значения концентрации дырок при $T = 300\text{К}$ определены эффектом компенсации примесей и тем, что акцепторные примеси достаточно глубокие. По технологии [4] предполагалось, что температура последней стадии процесса сублимации около 900 К. В таких материалах δ порядка 10^{16} см^{-3} . Низкие расчетные энергии активации возможно указывают на необходимость дальнейшего уточнения модели дефектообразования в этом материале.

Литература

1. *Triboulet R., Siffert P.* CdTe and Related Compounds, Elsevier Science BV, Amsterdam, Netherland, 2010. 279 p.
2. *Зломанов В.П., Аветисов И.Х., Можевитина Е.Н.* Физическая химия твердого тела. Р–Т–х диаграммы фазовых равновесий. М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2019. 184 с.
3. *Крегер Ф.А.* Химия несовершенных кристаллов. М.: Мир, 1969. 654 с.
4. *Medvediev S.* US Patent No. 5201985 (13.04.1993).
5. *Медведев С.А., Мартынов В.Н., Кобелева С.П.* // Кристаллография, 1983, т. 28, № 3, с. 556.
6. *Боброва Е.А., Клевков Ю.В., Черноок С.Г., Сентюрин Н.Н.* // ФТП. Т. 48, 2014, с. 421.
7. *Багаев В.С., Ю.В. Клевков, С.А. Колосов, и др.* //ФТТ, т. 53, № 8, 2011, с. 1479.
8. *Chern S.S., Vudyanath H.R., Kroger F.A.* // Phys. Chem. Solids, 1975. V. 14. № 1. P. 33.5.
9. *Fochuk P., Grill R., Panchuk O.* // J. Electron. Mater. 2006. –V. 35. –№ 6. P. 1354–1359.
10. *Бонч-Бруевич В.Л., Калашиков С.Г.* Физика полупроводников.М., Мир, 1977, 672 с.
11. *Киреев П.С.* Физика полупроводников. М., Высшая школа, 1975, 581 с.
12. *Иванов А.А., Лукьянов А.А., Раевский А.О.* Физическое образование в вузах, т. 7., № 3, с. 42, 2001.

DFT SIMULATION OF THE LOCAL VIOLATION OF A PEIERLS TRANSITION AT THE Sb(111) SURFACES

S.I. Bozhko, A.S. Ksenz, A.M. Ionov, S.V. Chekmazov

Institute of Solid State Physics Russian Academy of Sciences, ISSP RAS, Chernogolovka, Moscow District, 2 Academician Ossipyan str., 142432 Russia

Antimony is a Peierls semimetal. I.e. atomic structure can be described in terms of Peierls distortion of a simple cubic structure of praphase. As a result a lattice period of Sb in [111] direction exceeds twice one of the praphase. Doubling of period leads to creation of covalent bods between double atomic plains while the double plains are connected by Van der Waals forces resulting in opening of a gap at Fermi energy. Dispersion of bulk electrons reveals a small gap in a vicinity of Γ point. Surface states spectrum is a resulted from surface crystal lattice symmetry [1]. Non degenerated Dirac massless cone of surface states in a vicinity Γ point with a Dirac point at 270 mev below the Fermi level is due to strong spin orbit coupling.

In this work we present the results of our simulations of Sb(111) crystal structure and surface states in a frame of DFT approximation. The simulations were performed for Sb(111) cleaved both by Van der Waals and covalent bonds. Crystal structure of Sb(111) cleaved by Van der Waals bonds can be described in terms of bulk like structure with a small distortion of atomic inter plane distance (about 1%) in the vicinity of the surface.

Model simulations of the atomic and electronic structure of two-dimensional defects on the Sb (111) surface in a frame of DFT demonstrated that break of covalent bonds resulted in a strong distortion of the crystal structure in the [111] direction. The violation of the alternating interplanar distance along [111] occurs in a limited region of 8–10 interplanar distances and well described in the SSH model by a soliton. It is established that the soliton is displaced by $Z_0 \approx 2.5$ nm from the surface of the model structure. Estimations of the energy formation of a long bond is $E_{vdw} = 0.2$ eV, and the energy of covalent bond formation is $E_{cb} = 1.42$ eV. Formation of soliton leads to relaxation of the crystal structure of the surface layer and reduction of the energy of covalent bond break to $E_d = 0.78$ eV. Thus, the relaxation of the Sb (111) surface, due to the presence of a soliton, substantially increases the probability of the formation of surface areas obtained by break of covalent bonds at the cleaved surface of the sample.

Presence of a soliton in the model structure leads to significant changes in the dispersion of electrons in the vicinity of the Γ point at the Fermi level. In the presence of a soliton, additional branches of $E(k)$ appear.

References

1. *Molotkov S.N, Ryzhkin M.I.*, JETP Lett (Sov) 102, 216, 2015

AB INITIO МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ СПИНОВЫХ КВАНТОВЫХ КУБИТОВ ФОСФОРА В РЕШЕТКЕ КРЕМНИЯ

А.Н. Чибисов, М.А. Чибисова

*ФГБУН Вычислительный центр Дальневосточного отделения
Российской академии наук (ВЦ ДВО РАН), г. Хабаровск
e-mail: andreichibisov@yandex.ru*

Введение

Способность управления квантовыми состояниями и реализация процесса передачи и преобразования квантовой информации позволят создать квантовые компьютеры. Эти машины дадут возможность мгновенно решать такие важные задачи как: проектирование современных материалов с заданными свойствами, создание новых видов лекарств, а также позволят кардинально улучшить работу систем машинного обучения и искусственного интеллекта. В последнее время активный интерес проявляется к квантовым кубитам на основе ядерных спинов примесей фосфора в кристалле Si [1–3], технологическая схема которых была предложена еще Кейном (Kane) в 1998 году [4]. Спиновые состояния электрона, связанного с одним донором фосфора в кремнии, показывают долгое время согласованности и релаксации [5]. Впервые в работе Марелло [6] было сообщено об экспериментальной возможности считывания ориентации спина электрона в системе P:Si, что вызвало активный интерес в исследованиях ориентаций спинов квантовых кубитов [7, 8]. Авторы в работе [9] показали, что наблюдаются удивительные эффекты, которые возникают из-за квантования взаимодействия ядер-доноров фосфора. В [10] была продемонстрирована работа одно- и двухкубитовых операций в системе. Лаухт (Laucht) с соавторами продемонстрировал порядок кодирования квантовой информации для системы P:Si [11]. В настоящее время исследователи пытаются достичь контролируемого перекрытия волновой функции для высокоточного считывания спинов на каждом кубите. Так, в работе [12], были получены антикоррелированные спиновые состояния между двумя кубитами P, расположенными на расстоянии 16 ± 1 нм. Авторы показали, что обменное взаимодействие может быть «включено» и «выключено» с помощью электрического поля, управляемого двумя атомами фосфора. Литературный обзор показывает, что теоретических расчетов квантово-механическим мето-

дом спиновых систем не проводилось. Все системы исследуются в основном экспериментальными методами. Мы считаем, что применение метода спин-орбитального неколлинеарного учета спина позволит качественно провести анализ системы кремний-фосфор. С этой целью, в данной работе исследуется поведение спина избыточного электрона фосфора в решетке объемного кремния.

Методы и детали расчетов

Для вычисления полных энергий атомных систем мы использовали пакет Quantum ESPRESSO [13]. Расчет элементарной ячейки объемного кремния производился с учетом $6 \times 6 \times 6$ k-точек. Для системы P:Si (64 атома Si и 1 атом P) использовался набор k-точек $3 \times 3 \times 3$ с энергией обрезания плоских волн 476,20 эВ.

Результаты расчетов и их анализ

Атом фосфора помещался ровно в центр супер ячейки состоящей из 64 атомов Si. Расчеты показывают, что для атома P более энергетически выгодна ориентация спина $m_z = -1$ (квантовое состояние $|1\rangle$ в сфере Блоха), что хорошо согласуется с экспериментальными данными. Свободная релаксация атомов приводит к ориентации спина P в сфере Блоха $(\theta; \varphi) = 176^\circ; 102^\circ$. На рис. 1 представлены ориентация спина атома фосфора и плотность $|\psi|^2$ локализации избыточного электрона. Избыточный электрон создает магнитное локальное поле в окружении атома P. Известно, что векторное произведение плотности намагниченности (или спиновой плотности) $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ и магнитного поля создаваемого электроном атома фосфора $\mathbf{V}(\mathbf{r})$, т.е. $\mathbf{m}(\mathbf{r}) \times \mathbf{V}(\mathbf{r})$ определяет спиновый ток в системе (рис. 1б).

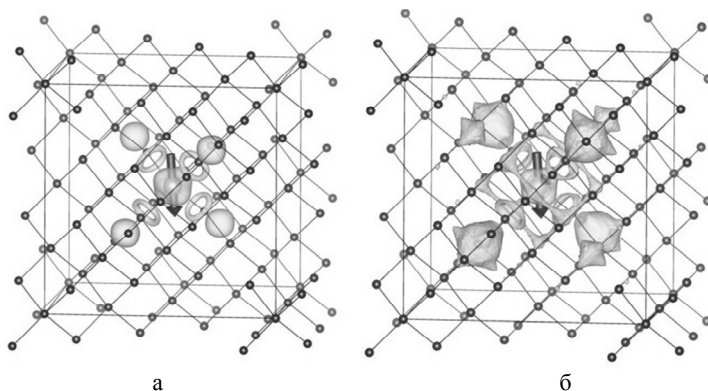


Рис. 1. а – ориентация $|1\rangle$ спина избыточного электрона атома P и плотность $|\psi|^2$ локализации электрона; б – спиновый ток в системе

На рис. 2 представлена разница между спиновыми токами, созданными избыточным электроном P, но с разным направлением спинов ($|0\rangle$ – направление спина «up» и $|1\rangle$ – направление спина «down»), т.е. $\Delta J = J(|1\rangle) - J(|0\rangle)$. Расчет показывает, что из-за разного направления спинов, в силу наличия прецессии между орбитальным L и спиновым S моментами атома, главные оси тензора спинового тока направлены под углом к направлению спина атома.

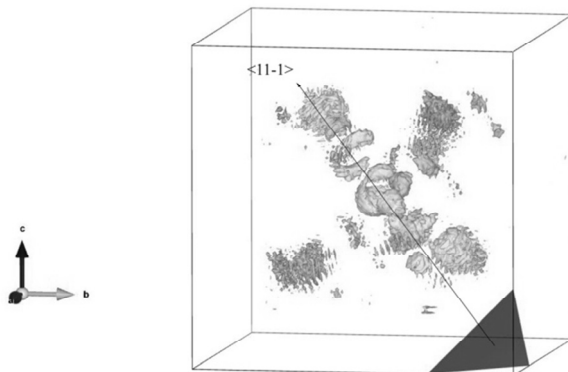


Рис. 2. Разница между спиновыми токами

Мы уверены, что полученные результаты имеют перспективное значение для использования их в технологии проектирования кубитов для будущих квантовых компьютеров.

Благодарности. Работа выполнена согласно гос. заданию на выполнение НИР № 2019-0030. При выполнении расчетов были использованы вычислительные ресурсы ЦКП «Центр данных ДВО РАН, ВЦ ДВО РАН (г. Хабаровск), ЦКП сверхвысокопроизводительных вычислительных ресурсов МГУ имени М.В. Ломоносова (г. Москва), ЦКП «Иркутский суперкомпьютерный центр СО РАН» (г. Иркутск).

Литература

1. *L. Oberbeck, T. Hallam, N.J. Curson et al.* Applied Surface Science. Vol. 212–213. 2003. P. 319–324.
2. *M. Fuechsle et al.* Nature Nanotechnology. Vol. 7. 2012. P. 242–246.
3. *M.A. Broome.* Nature Communications. Vol. 9. 2018. P. 980.
4. *B.E. Kane.* Nature. Vol. 393. 1998. P. 133.
5. *H. Buch.* Nature Communications. Vol. 4. 2017. P. 2013.
6. *A. Morello.* Nature. 467. 2010. P. 687–691.

7. *J.J. Pla et al.* Nature Vol. 489. 2012. P. 541–545.
8. *J.T. Muhonen. J. Phys.: Condens. Matter.* Vol. 27. 2015. P. 154205.
9. *S.K. Gorman, M.A. Broome, W.J. Baker et al.* Phys. Rev. B 92. 2015. P. 125413.
10. *M. Veldhorst.* Nature. Vol. 526. 2015. P. 410–414.
11. *A. Laucht.* Nature Nanotechnology. Vol. 12. P. 61–66. 2017.
12. *M.A. Broome et al.* Nature Communications. Vol. 9. 2018
13. *P. Giannozzi et al.* J. Phys.:Condens. Matter. Vol. 29. P. 465901. 2017.

AB INITIO РАСЧЕТ РАВНОВЕСНОГО КВАНТОВОГО СОСТОЯНИЯ $|1\rangle$ СПИНА ДЫРКИ В КРЕМНИИ ЛЕГИРОВАННОМ БОРОМ

А.Н. Чибисов, М.А. Чибисова

*ФГБУН Вычислительный центр Дальневосточного отделения
Российской академии наук (ВЦ ДВО РАН), г. Хабаровск
e-mail: andreichibisov@yandex.ru*

Введение

Проблема создания квантового компьютера является важной научной и технологической задачей современной твердотельной наноэлектроники. Создание данных машин позволит мгновенно решать актуальные проблемы проектирования современных материалов с заданными свойствами, создавать новые виды лекарств и т.д. До недавнего времени активный интерес в основном проявлялся к квантовым кубитам на основе спинов примесей фосфора в кристалле Si [1–4]. Однако спины электронов имеют слабые внутренние спин-орбитальные взаимодействия и при связывании данных кубитов друг с другом создаются технологические сложности. С другой стороны, спины дырок в валентной зоне кремния имеют большие внутренние спин-орбитальные взаимодействия и легче поддаются управлению электрическим полем [5, 6], что делает их привлекательной альтернативой. При помещении атома бора в решетку объемного кремния, он создает локальную нехватку одного электрона и образует дырку, локализованную в валентной зоне. Прецессия спина дырки создает локальную намагниченность и магнитное поле в окружении атома бора, а движение заряда дырки в магнитном поле создает спиновый ток. Детальное понимание данных процессов позволит нам преобразовывать и передавать зарядо-

вые состояния, а значит даст возможность производить квантовую передачу информации посредством спинов дырок.

Методы и детали расчетов

Расчет полных энергий атомных систем выполнялся с использованием программного пакета Quantum ESPRESSO [7], с применением высокопроизводительных вычислений. Элементарная ячейка объемного кремния рассчитывалась с набором $6 \times 6 \times 6$ k-точек. При расчете системы B:Si, содержащей 63 атома кремния (Si) и один атом бора (B), использовался специальный набор k-точек $3 \times 3 \times 3$ с энергией обрезания плоских волн 476,20 эВ.

Результаты расчетов и их анализ

В объемном кремнии верх валентной зоны содержит уровни, соответствующие легким LH (light hole) и тяжелым HH (heavy hole) дыркам, и ниже лежащую зону SO удаленную на $\Delta=0,048$ эВ (наш расчет), возникающую за счет спин-орбитальной природы взаимодействия атомов [8]. Зоны LH и HH дырок вырождены в G точке ($|k|=0$) при отсутствии примесей и магнитного поля (рис. 1а). Результаты показывают, что наиболее энергетически выгодна ориентация спина для бора $m_z=-1$ (квантовое состояние $|1\rangle$ в сфере Блоха). Данная ориентация спина наводит локальную атомную намагниченность в позиции B равную $-0,040$ μ_B /ячейка. Свободная релаксация атомов, без учета ограничений на неколлинеарную намагниченность, приводит к следующей ориентации спина атома бора в сфере Блоха $(\theta; \varphi) = 179^\circ; -42^\circ$, с намагниченностью $-0,012$ μ_B /ячейка, что на 1,8 мэВ энергетически более выгодно, чем фиксированная ориентация $m_z=-1$ с углами $(\theta; \varphi) = 180^\circ; -44^\circ$.

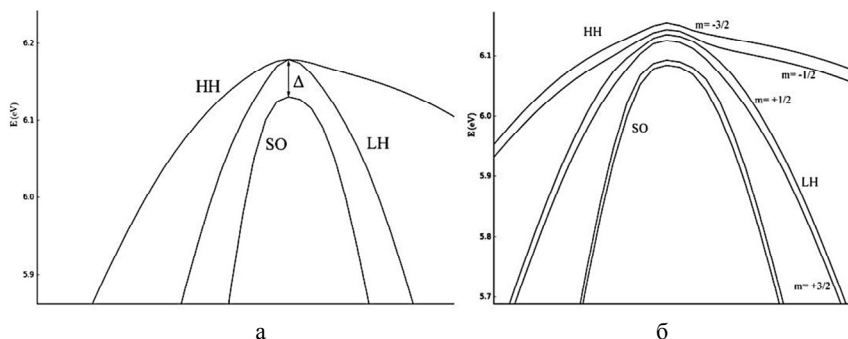


Рис. 1. Зонная структура объемного кремния в области G точки:
 а – беспримесного кремния. $\Delta=0,048$ эВ – спин-орбитальный параметр зоны SO. LH и HH – зоны соответствующие легким и тяжелым дыркам;
 б – кремний содержащий бор B:Si.

Наши расчеты показывают, что бор приводит к расщеплению зон ЛН и НН дырок, даже в отсутствии магнитного поля. Зона НН расщепляется на подзоны с $m=\pm 3/2$, а зона ЛН – на подзоны $m=\pm 1/2$ [9] (рис. 1б). Далее мы определяли область пространственной локализации дырки в решетке в окружении атома бора. Расчеты показывают, что зарядовые состояния дырки более всего соответствуют состоянию $m=-3/2$. Таким образом, мы можем с уверенностью утверждать, что квантовое состояние спина дырки $|1\rangle$, с ориентацией спина $m_z=-1$, заселяет энергетическое состояние $m=-3/2$ на зонной структуре.

Заключение

В данной работе нами впервые произведено определение квантового состояния спина дырки $|1\rangle$ в решетке объемного кремния с акцепторным примесным атомом бора. Показано, что состоянию $|1\rangle$ спина дырки, с ориентацией спина $m_z=-1$ соответствует энергетическое состояние $m=-3/2$ на зонной структуре. Представленные результаты имеют важное и перспективное значения для физики твердотельных квантовых компьютеров.

Благодарности. Работа выполнена согласно гос. заданию на выполнение НИР № 2019-0030. При выполнении расчетов были использованы вычислительные ресурсы ЦКП «Центр данных ДВО РАН», ВЦ ДВО РАН (г. Хабаровск), ЦКП сверхвысокопроизводительных вычислительных ресурсов МГУ имени М.В. Ломоносова (г. Москва), ЦКП «Иркутский суперкомпьютерный центр СО РАН» (г. Иркутск).

Литература

1. Oberbeck L., Hallam T., Curson N.J., et al. Applied Surface Science; 2003; 212–213: 319–324.
2. Fuechsle M., Miwa J.A., Mahapatra S. et al. Nature Nanotechnology; 2012; 7: 242-246.
3. Broome M.A., Gorman S.K., House M.G., et al. Nature Communications; 2018; 9: 980.
4. Buch H., Mahapatra S., Rahman R., et al. Nature Communications; 2013; 4: 2017.
5. Heijden J. van der, Kobayashi T., House M.G., et al. Sci. Adv.; 2018; 4: 9199.
6. Maurand R., Jehl X., Kotekar-Patil D., et al. Nat. Commun.; 2016; 7: 13575.

7. *Giannozzi P., Andreussi O., Brumme T., et al.* J. Phys.: Condens. Matter.; 2017; 29: 465901.
8. *Liu L.* Phys. Rev.; 1962; 126: 1317.
9. *Tezuka H., Stegner A.R., Tyryshkin A.M., et al.* Phys. Rev. B; 2010; 81: 161203(R).

5. Е

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

РЕАЛИЗАЦИЯ НЕЙРОСЕТЕВЫХ АЛГОРИТМОВ НА МЕМРИСТОРНЫХ КРОССБАРАХ

А.Ю. Морозов^{1,2}, К.К. Абгарян^{1,2}, Д.Л. Ревизников^{1,2}

¹ *Вычислительный центр им. А. А. Дородницына Федерального
исследовательского центра «Информатика и управление» РАН*

² *Московский авиационный институт
(национальный исследовательский университет)*

Присущее мемристорным кроссбарам свойство естественной параллелизации матрично-векторных операций создает возможности для их эффективного использования в нейросетевых вычислениях. Аналоговые вычисления производятся быстрее по сравнению с вычислениями на центральном процессоре и на графических ускорителях. Кроме того, существенно ниже энергозатраты на проведение математических операций. Корпорация HP уже создала в «железе» мемристорный кроссбар, на котором реализована операция матрично-векторного умножения [1, 2]. На данный момент, точность задания матрицы ограничивается 6 битами (для каждого мемристора выделяется 64 уровня проводимости). Такая точность приемлема для решения ряда задач машинного обучения и анализа данных.

Можно выделить два основных подхода к построению аналоговых нейросетей. Первый подход предполагает обучение сети непосредственно на «железном» уровне, что в наибольшей мере соответствует аналоговой парадигме нейроморфных сетей. Наиболее простой вариант может быть представлен двухслойной полносвязной сетью с одним слоем мемристорных элементов (синапсов). В этом случае соответствие синаптического веса (проводимости мемристора) интенсивности входного сигнала, подаваемого на нейрон, обеспечивает достаточно высокую точность решения задачи классификации [3]. В последнее время усиливается интерес к импульсным нейронным сетям, обучение которых организуется с использованием правила Хебба и синаптической пластичности (метод STDP, согласно которому изменение весов синапсов нейрона зависит от разницы во времени между входным и выходным импульсом) [4, 5]. Однако такой подход трудно реализуем применительно к сложным многослойным сетям.

Другой подход предполагает разделение этапов обучения и анализа данных. Как правило, на этапе обучения используются гради-

ентные методы оптимизации, реализацию которых целесообразно выполнять на центральном процессоре (или на графических ускорителях). Этап анализа данных состоит в прямом распространении сигнала по сети, что, учитывая возможности параллельного выполнения матрично-векторных умножений, идеально ложится на архитектуру мемристорного кроссбара [6]. Таким образом, этап анализа данных эффективно реализуется в аналоговом режиме.

При таком подходе возникают две основные проблемы. Первая связана с переходом от непрерывного диапазона изменения синаптических весов к дискретному набору значений, обеспечиваемых мемристором. В наиболее радикальном варианте, когда мемристор может находиться в двух состояниях, высокоомном и низкоомном, речь идет о бинаризации синаптических весов. Ясно, что такая дискретизация может вносить погрешности в результаты анализа данных. Поэтому актуальной задачей является выявление зависимости погрешности дискретизации от количества дискретных уровней для различных наборов данных.

Другой проблемой является возможное несовершенство мемристорного элемента, ведущее к неконтролируемому изменению уровня проводимости в ходе функционирования системы или инициации. В этой связи актуальным является анализ влияния дефектов мемристорных элементов на точность решения задач обработки данных.

В настоящей работе рассматривается второй подход к реализации многослойных нейронных сетей. Вычисления в каждом слое сети включают перемножение матрицы весов на входной вектор, прибавление вектора смещения и применение нелинейной функции активации. Все эти действия возможно выполнить в аналоговом представлении.

Нейронная сеть заранее обучается с использованием центрального процессора или графических ускорителей и далее её веса размещаются в соответствующих мемристорных кроссбарах.

Так как все аналоговые вычисления имеют пониженный порядок точности, важно понимать, как дискретизация весов нейронной сети будет сказываться на точности результатов. Рассматриваются две многослойные нейронные сети. Первая (3 сверточных слоя и два полносвязанных слоя) обучена на выборке MNIST (рукописные цифры), а вторая (6 сверточных слоев и два полносвязанных слоя) – на CIFAR_10 (самолеты, автомобили, животные и т.д.). Для обучения

и работы с сетью использовалась библиотека Keras написанная на языке Python, которая является надстройкой над фреймворками DeepLearning4j, TensorFlow и Theano.

Точность распознавания на тестовых выборках обученной нейронной сети составила: для MNIST – 99.16% и для CIFAR_10 – 74.86%. Далее была выполнена дискретизация весов данных сетей: начиная с 2х значений (1 бит точности) и до 1024 значений (10 бит точности). Дискретизация выполнялась в рамках каждого слоя отдельно. Дополнительно также выполнялась дискретизация промежуточных значений между слоями.

В результате получена зависимость качества распознавания от точности задания весов глубокой нейронной сети, которая показывает, что возможно без сильной потери точности применять мемристоры для реализации многослойных нейронных сетей. Для сети, обученной на MNIST'е для достижения приемлемой точности (98-99%) требуется 3-4 бита точности. А для нейронной сети, обученной на CIFAR_10, необходимо уже 9–10 бит.

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

Литература

1. *Li C., Hu M., Li Y., Jiang H., Ge N., Montgomery E., Zhang J., Song W., Dávila N., Graves C. E., Li Z., Strachan J. P., Lin P., Wang Z., Barnell M., Wu Q., Williams R. S., Yang J. J., Xia Q.*, Analogue signal and image processing with large memristor crossbars // *Nature Electronics*, vol. 1, no. 1, Dec. 2017, pp. 52–59.
2. *Hu M., Graves C. E., Li C., Li Y., Ge N., Montgomery E., Davila N., Jiang H., Williams R. S., Yang J. J., Xia O., Strachan J. P.* Memristor-Based Analog Computation and Neural Network Classification with a Dot Product Engine // *Advanced Materials*, vol. 30, no. 9, p. 1705914, Jan. 2018.
3. *Тарков М. С.* Реализация нейронной WTA-сети на мемристорном кроссбаре // ПДМ. Приложение, 2015, выпуск 8, с. 151–154.
4. *Ambrogio S. et al.*, Neuromorphic Learning and Recognition With One-Transistor-One-Resistor Synapses and Bistable Metal Oxide RRAM // *IEEE Transactions on Electron Devices*, 2016, vol. 63, no. 4, pp. 1508–1515.
5. *Guo Y, Wu H, Gao B, Qian H.* Unsupervised Learning on Resistive Memory Array Based Spiking Neural Networks // *Front Neurosci.* 2019, vol. 13, article 812.
6. *Li B., Shan Y., Hu M., Wang Y., Chen Y., Yang H.*, Memristor-based approximated computation // *International Symposium on Low Power Electronics and Design (ISLPED)*, Beijing, 2013, pp. 242–247.

VERILOG-A МОДЕЛЬ МНОГОУРОВНЕВОГО БИПОЛЯРНОГО МЕМРИСТОРА С УЧЕТОМ ДЕВИАЦИЙ ПАРАМЕТРОВ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ

Г.С. Теплов, Е.С. Горнев, О.А. Тельминов

АО «НИИ Молекулярной Электроники»

Аннотация. В работе представлено описание биполярного мемристора на языке Verilog-A. Предлагаемые модельные представления учитывают в процессе переключения мемристора между состояниями проводимости следующие девиации параметров: разбросы параметров проводимости в высокорезистивном и низкорезистивном состояниях, разбросы порогов переключения и разброс количества циклов переключения .

Ключевые слова: моделирование мемристора, мемристор, биполярный мемристор, многоуровневый мемристор, Verilog-A модель, девиации параметров переключения.

MULTILEVEL BIPOLAR MEMRISTOR MODEL CONSIDERING DEVIATIONS OF SWITCHING PARAMETERS IN THE VERILOG-A LANGUAGE

Georgii Sergeevitch Teplov, Evgenii Sergeevitch Gornev,
Oleg Aleksandrovich Telminov

Molecular Electronics Research Institute, Zelenograd, Moscow, Russia

Abstract. We describe a bipolar memristor in the Verilog-A language. The proposed model concepts take into account the following parameter deviations in the memristor switching between conduction states: the variation of the conduction parameters in the highly resistive and low-resistance state, the switching threshold variations, and the variation of the number of switching cycles.

Keywords: memristor, simulation memristor, bipolar memristor, multilevel memristor, Verilog-A model, switching parameter deviations.

Множество новых компонентов элементной базы энергонезависимой памяти обладают схожими параметрами по масштабированию [1], так например, MRAM уже внедряется на техпроцессе 32 нм, для PCM идет отработка процесса 22 нм, ReRAM на основе мемристоров, также обрабатывается на техпроцессе 22 нм. Пре-

имуществом, выгодно отличающим мемристор из всего множества новых компонентов, является его многоуровневость, то есть, возможность получения более двух устойчивых дискретных состояний на одном элементе [2].

Традиционный подход к описанию мемристора позволяет определить его как элемент энергонезависимой памяти, имеющий два контакта. Реализация функции памяти на элементе осуществляется, за счет изменения состояния проводимости между высокорезистивным (HRS) и низкорезистивным состояниями (LRS). Теоретическое описание компонента впервые предложил Chua L. в работе [3]. Первые экспериментальные образцы были получены в лаборатории HP десятилетие назад [4]. Проектирование на основе компактных моделей мемристоров уже активно применяется разработчиками [5].

Подходы к описанию мемристивных компонентов изначально базировались на модели линейного ионного дрейфа, представленной в работе [4]. Модель использовала линейную зависимость процесса миграции кислородных вакансий для объяснения изменения механизма проводимости:

$$V(t) = I(t) * \left(R_{ON} \frac{w(t)}{D} + R_{OFF} \left(1 - \frac{w(t)}{D} \right) \right), \quad w(t) = \mu_V \frac{R_{ON}}{D} q(t) \quad (1)$$

Здесь R_{OFF} , R_{ON} – константное значение низко проводящего и высоко проводящего состояний соответственно, $w(t)$ – величина допированного кислородными вакансиями активного слоя, μ_V – подвижность носителей заряда, D – толщина активного слоя, $q(t)$ – протекающий через мемристор заряд.

Модель линейного дрейфа на языке Verilog-A представлена в исследовании [6]. Предложенный метод использует декомпозицию функции изменения проводимости на «функцию окна» и линейную функцию изменения проводимости в зависимости от протекающего через мемристор тока. Функция окна $f_w(w)$ ограничивает выход за пределы значений R_{OFF} и R_{ON} состояния проводимости мемристора.

$$\frac{dw}{dt} = f(w, I) \triangleq kI(t)f_w(w), \quad k = \frac{\mu_V * R_{ON}}{D}, \quad f_w(w) = \begin{cases} 1, & 0 < \frac{w}{D} < 1 \\ 0, & \text{else} \end{cases} \quad (2)$$

Помимо ограничения выхода за пределы, в существующих моделях мемристоров функция окна может также вносить нелинейность в процесс изменения проводимости. Например, в работе [7] предлагаются свой вариант нелинейной функций окна, и исследуется их влияние на процесс изменения проводимости. Процесс протекания

тока в мемристоре может быть описан с применением уравнений Симмонса для туннелирования сквозь барьер [8]. Преимуществом подхода является отсутствие в модели порогов переключения, что в свою очередь приводит к повышенным требованиям к ресурсам в процессе вычислений. Помимо рассмотренных выше моделей, которые используют в качестве механизма управления изменением проводимости значения электрического тока, исследователями также применяются модели биполярных мемристоров, использующие значения напряжений для управления процессом переключения [9]. Модель с управляющим внутренним состоянием проводимости мемристора пороговым напряжением, обобщающая основные мемристивные компоненты и различные подходы к их описанию, представлена в [10]. Модель, учитывающая множественность состояний проводимости с учетом разброса параметров, представлена в работе [11]. К недостаткам подхода можно отнести необходимость отдельного, заранее определяемого моделью, описания каждого из уровней проводимости, что не позволяет определить влияние разброса параметров на количество получаемых промежуточных состояний.

Предлагаемая авторами модель описания мемристора средствами САПР Cadence на языке высокого уровня Verilog-A представлена в работе [12]. Реализуемые отклонения наблюдаются экспериментально и представлены в работе [13]. Введенные в модель параметры позволяют моделировать процесс переключения мемристора между состояниями проводимости с учетом девиаций параметров, что позволяет учитывать дисперсию выходного сигнала при проектировании последующих схем обработки сигналов.

Для учета разбросов по количеству циклов переключения мемристора, была введена переменная ресурса переключения. Количество циклов переключения задается напрямую параметром модели, аналогично подходу, применяемому в работе [11]. Отличие от подхода, применяемого в указанной работе, заключается в использовании не количества циклов напрямую, а применении переменного значения ресурса переключения мемристора.

Указанные особенности описания мемристора позволяют добиться переменного количества циклов переключения при изменении состояния проводимости мемристора в зависимости от порогов переключений в высокорезистивное и низкорезистивное состояния, а также, в зависимости от разбросов параметров низкорезистивного и высокорезистивного состояний при переключении.

Верификация модели биполярного мемристора на языке Verilog-A выполнялась в среде САПР Cadence. Применение переменной ресурса переключения позволяет моделировать различные типы отказов мемристоров. Первый тип – отказ в LRS состоянии (рис. 1), второй – отказ в HRS (рис. 2). В рамках данной работы проводилось определение, для предлагаемого Verilog-A описания мемристора, наиболее выгодной стратегии переключения при ограничении импульсов по напряжению и длительности. График получаемых промежуточных состояний проводимости мемристора представлен на рис. 3. Влияние амплитуды импульса напряжений на скорость переключения рис. 4.

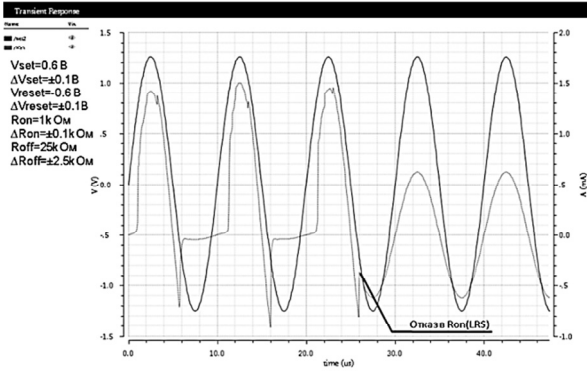


Рис. 1. Отказ в LRS. Выходной ток – светлая линия. Подаваемое на вход напряжение – черная линия

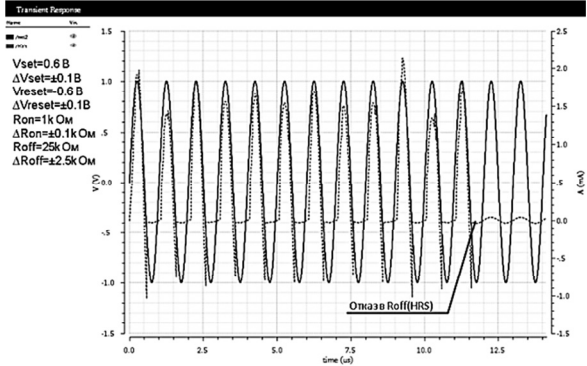


Рис. 2. Отказ в HRS. Выходной ток – пунктирная линия. Подаваемое на вход напряжение – черная линия

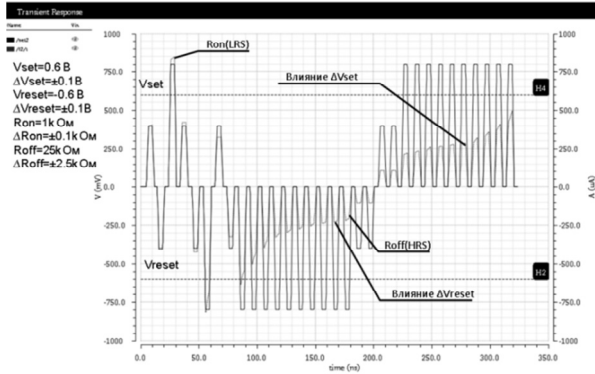


Рис. 3. Множественность состояний проводимости. Выходной ток – светлая линия. Подаваемое на вход напряжение – черная линия

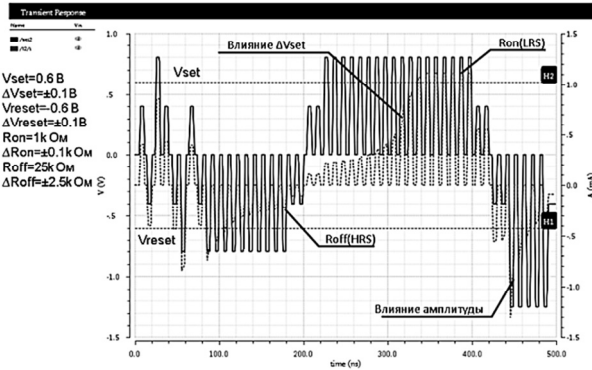


Рис. 4. Влияние амплитуды импульсов на скорость изменения проводимости. Выходной ток – пунктирная линия. Подаваемое на вход напряжение – черная линия

Литература

1. Лукичев В.Ф., Шиколенко Ю.Л. Современная элементная база запоминающих устройств //Нано- и микросистемная техника. – 2015. – №. 11 (184). – С. 40–53.
2. Алексеева Л.Г., Иванов А.С., Лучинин В.В. Новая электронная компонентная база. Мемристор //Нано- и микросистемная техника. – 2016. – Т. 18. – №. 5. – С. 297–308.
3. Chua L. Memristor-The missing circuit element//IEEE Transactions on circuit theory. – 1971. – Т.18. – №.5. – С. 507–519.

4. *Strukov D.B. et al.* The missing memristor found //nature. – 2008. – Т. 453. – №. 7191. – С. 80.
5. *Маевский О.В., Писарев А.Д., Бусыгин А.Н. и др.* Логический коммутатор и запоминающее устройство на основе мемристивных ячеек для электрической принципиальной схемы нейропроцессора //Вестник Тюменского государственного университета. Физико математическое моделирование. Нефть, газ, энергетика. – 2016. – Т. 2. – №.4 – С. 100–111.
6. *Etara A.A., Aboudina M.M., Fahmy H.A.H.* Corrected and accurate Verilog-A for linear dopant drift model of memristors // Circuits and Systems (MWSCAS), 2014 IEEE 57th International Midwest Symposium on. – IEEE, 2014. – С. 499–502.
7. *Biolek Z., Biolek D., Biolkova V.* SPICE Model of Memristor with Nonlinear Dopant Drift //Radioengineering. – 2009. – Т. 18. – № 2.
8. *Kvatinsky S. et al.* Models of memristors for SPICE simulations //Electrical & Electronics Engineers in Israel (IEEEI), 2012 IEEE 27th Convention of. – IEEE, 2012. – С. 1–5.
9. *Yakopic C. et al.* A memristor device model // IEEE electron device letters. 2011. – Т. 32. – №. 10. – С. 1436–1438.
10. *Kvatinsky S. et al.* VTEAM: A general model for voltage-controlled memristors // IEEE Transactions on Circuits and Systems II: Express Briefs. – 2015. – Т. 62. – №. 8. – С. 786–790.
11. *Garcia-Redondo F. et al.* SPICE compact modeling of bipolar/unipolar memristor switching governed by electrical thresholds //IEEE Transactions on Circuits and System I: Regular Papers. – 2016. – Т. 63. – №. 8. – С. 1255–1264.
12. *Teplov G. S., Gornev E. S.* Multilevel Bipolar Memristor Model Considering Deviations of Switching Parameters in the Verilog-A Language // Russian Microelectronics. – 2019. – Т. 48. – №. 3. – С. 131–142.
13. *Орлов О.М., Маркеев А.М., Зенкевич А.В. и др.* Исследование особенностей элементов энергонезависимой памяти FRAM и ReRAM, полученных с использованием метода атомно-слоевого осаждения // Электронная техника. Серия 3. Микроэлектроника. – 2015. – Т. 4(160). – С. 62–68.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЛЬТ-АМПЕРНОЙ ХАРАКТЕРИСТИКИ МЕМРИСТОРА

**Д.А. Жевненко^{1,2}, Ф.П. Мещанинов^{1,2}, В.С. Кожевников^{1,2},
Е.С. Горнев^{1,2}**

¹ АО «Научно-исследовательский институт молекулярной электроники»,
г. Зеленоград

² Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет) г. Долгопрудный
e-mail: DmitryZhev@yandex.ru

Аннотация. В работе рассматривается методика построения новой аналитической модели мемристора. Построение модели включает в себя численный учёт эффектов нелинейного дрейфа в объёме мемристора, и эффективную аппроксимацию параметров обобщен-

ной модели на наборе экспериментально и численно полученных результатов.

Ключевые слова: мемристор, мемристивная система, математическое моделирование, функция окна, линейный дрейф, нелинейный дрейф, модель мемристора.

Задачи современной микроэлектроники все чаще лежат в области построения нейроморфных и нейроподобных систем. И наиболее перспективным кандидатом для создания элементной базы под такие задачи является мемристор – так называемый четвертый базовый элемент электрической цепи, связывающий между собой заряд и магнитный поток [1]. Первые мемристоры на оксидных структурах были получены в 2008 году [2]. Вместе с ними появились первые модели, такие как модели линейного [2] и нелинейного дрейфа [3], а также модель мемристора на барьере Симмонса [4]. Из-за сложностей, связанных с решением уравнений эволюции и отсутствия явного вида зависимости тока от напряжения в моделях, например [3, 4], система дифференциальных уравнений дополняется функциями окна для модификации модели линейного дрейфа [5, 6, 7, 8] и пороговыми условиями для мемристоров, управляемых током [9] и напряжением [10, 11]. Пороговые модели позволяют при меньших временных затратах получать результаты, аналогичные тем, что дают модели нелинейного дрейфа и мемристора на барьере Симмонса, а также учитывать наличие пороговых токов и напряжений, ограничивающих напряжения и токи переключения снизу по модулю.

В нашей работе представлена методика построения обобщенной аналитической модели мемристора. Под обобщенной моделью понимается такая модель, что может с высокой точностью приближать результаты экспериментов (см. например рис. 1) для разных материалов оксидного слоя. Помимо точного учета нелинейного дрейфа в объеме, одним из преимуществ представленной методики является схема построения параметров обобщенной модели. Используя численные методы с оптимальной относительно точности метрикой, мы находим параметры обобщенной модели для множества вольт-амперных характеристик. Используя полученное множество параметров, мы формируем итоговые значения параметров обобщенной модели. Нами была получена обобщенная модель, и выполнено её сравнение с существующими моделями.

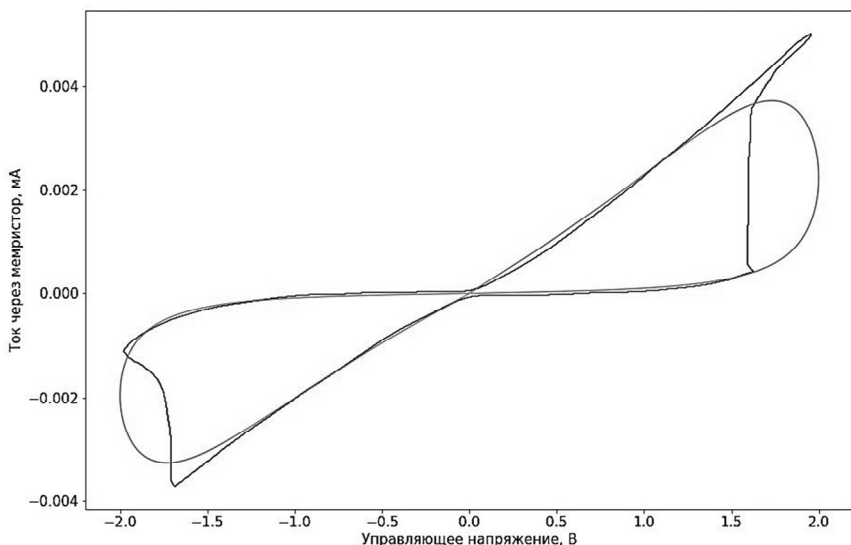


Рис. 1. Аппроксимация результатов эксперимента при помощи обобщенной модели на основе модели Yakopcic [11]

Литература

1. *L. Chua* «Memristor—the missing circuit element», *IEEE Transactions on circuit theory*, Vol. 18, № 5, 1971, pp. 507–519.
2. *D.B. Strukov, G.S. Snider, D.R. Stewart, R.S. Williams* «The missing memristor found», *Nature*, Vol. 453, № 7191, 2008, p. 80.
3. *J.J. Yang, M.D. Pickett, L. Xuema, D. A.A. Ohlberg, D.R. Stewart, R.S. Williams* «Memristive switching mechanism for metal/oxide/metal nanodevices», *Nature nanotechnology*, Vol. 3, № 7, 2008, p. 429.
4. *M.D. Pickett, D.B. Strukov, J.L. Borghetti, J.J. Yang, G.S. Snider, D.R. Stewart, R.S. Williams* «Switching dynamics in titanium dioxide memristive devices», *Journal of Applied Physics*, Vol. 106, № 7, 2009, p. 074508.
5. *Y. N. Joglekar, S. J. Wolf* «The elusive memristor: properties of basic electrical circuits», *European Journal of Physics*, Vol. 30, № 4, 2009, p. 661.
6. *Z. Biolek, D. Biolek, V. Biolkova* «SPICE Model of Memristor with Nonlinear Dopant Drift», *Radioengineering*, Vol. 18, № 2, 2009.
7. *T. Prodromakis, B. P. Peh, C. Papavassiliou, C. Toumazou*, «A versatile memristor model with nonlinear dopant kinetics», *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol. 58, № 9, 2011, pp. 3099–3105.
8. *J. Zha, H. Huang, Y. Liu* «A novel window function for memristor model with application in programming analog circuits», *IEEE Transactions on Circuits and Systems II: Express Briefs*, Vol. 63, № 5, 2015, pp. 423–427.
9. *S. Kvatinsky, E. G. Friedman, A. Kolodny, U. C. Weiser* «TEAM: Threshold adaptive memristor model», *IEEE Transactions on Circuits and Systems I: Regular Papers*, Vol. 60, № 1, 2012, pp. 211–221.

10. S. Kvatinsky, M. Ramadan, E. G. Friedman, A. Kolodny «VTEAM: A general model for voltage-controlled memristors», IEEE Transactions on Circuits and Systems II: Express Briefs, Vol. 62, № 8, 2015, pp. 786–790.

11. C. Yakopcic, T. M. Taha, G. Subramanyam, R. E. Pino, S. Rogers «A memristor device model», IEEE electron device letters, Vol. 32, № 10, 2011, pp. 1436–1438.

DOMAIN WALLS IN MAGNETO-ELASTIC HETEROSTRUCTURES: MODELING AND EXPERIMENT

**M.V. Logunov^{1,2}, S.A. Nikitov^{1,2,3}, S.A. Osokin^{1,2,3},
A.G. Temiryazev^{2,4}, M.P. Temiryazeva^{2,4}, S. Giordano^{2,5},
T. Mathurin^{2,5}, Y. Dusch^{2,5}, N. Tiercelin^{2,5}, P. Pernod^{2,5}**

¹ *Kotel'nikov Institute of Radio Engineering and Electronics of RAS*

² *LIA LICS / LEMAC*

³ *Moscow Institute of Physics and Technology (State University)*

⁴ *Fryazino branch of Kotel'nikov Institute of Radio Engineering and Electronics of RAS*

⁵ *Univ. Lille, CNRS, Centrale Lille, ISEN, Univ. Valenciennes, UMR 8520 IEMN*

Domain walls, skyrmions and other nanoscale spin structures are considered as key elements of future 3D nanodevices of information processing, including nonvolatile memory devices [1]. Interest in such structures is also due to the phenomenon of new physical effects associated with nanosize, topology and chirality of magnetic elements. In turn, magnetic nanostructures with controlled magnetoelastic properties are promising for creating information storage and processing devices with record energy consumption [2–4], up to tens of attojoules per one elementary operation to change the state of nanoelement's magnetization.

The possibility to manipulate domain walls in magnetoelastic nanostripes by means of uniform mechanical stresses has been numerically demonstrated [5]. Elastic stresses induced by the piezoelectric layer are used to change the magnetic state of the nanostripe (Fig., *a*) In this case, the domain-wall velocity of the same order of magnitude as when exposed to magnetic fields or spin-polarized currents is achieved, and energy consumption is significantly reduced.

This paper presents the results of modeling and experimental study of the domain structure and magnetization reversal processes of magnetoelastic parabolic-shaped nanostripes (Fig., *b-e*). Multilayered magnetostrictive films of TbCo₂/FeCo composition were deposited onto piezo-

lectric PMN-PT substrates by RF sputtering using a Leybold Z550 equipment [6]. The deposition was made under a magnetic field generated by permanent magnets in order to induce a magnetic easy axis anisotropy in the desired direction in the plane of the multilayer film. Then, micro- and nanostructures of various shapes were formed in the films by lithography for experimental study of magnetization distribution, processes of magnetization reversal, formation and movement of domain walls in the films.

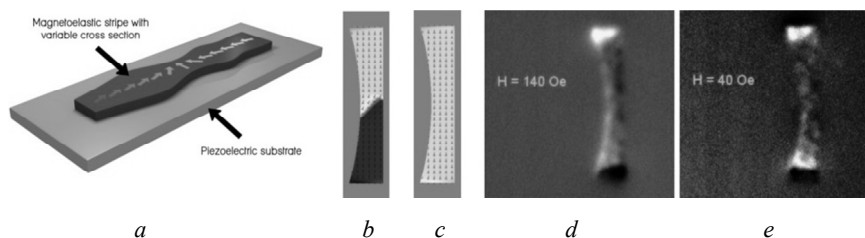


Fig. Model (a-c) and image (d-e, magnetic force microscopy) of the domain structure in magnetoelastic nanostripes of variable width

It is shown that in the initial state in the nanostripe, depending on the prehistory of the magnetization/demagnetization of the nanostripe, there are two variants for the formation of an equilibrium magnetic structure – with asymmetric (Fig., b, d) or symmetrical (Fig., b, e) direction of the magnetization vectors at the edges of the nanostripe and, accordingly, with a state close to the monodomain, or split of the parabolic-shaped nanostripe into domains. The symmetry breaking of the stable magnetization states in the nanostripe can be realized by a static magnetic field applied perpendicular to the easy axis of the ferromagnetic. Further change of magnetization states allows their manipulation by means of homogeneous mechanical effects induced by the application of an electric field to the piezoelectric substrate.

The work is supported by Russian Foundation for Basic Research (projects #18-52-16006, #18-29-27020), and Russian Science Foundation (#19-19-00607).

Bibliography

1. *A. Fernandez-Pacheco et al.* Nature Comm. **8**, 15756 (2017).
2. *N. Tiercelin et al.* Appl. Phys. Lett. **99**, 192507 (2011).
3. *A.A. Bukharaev et al.* Phys. Usp. **61**, 1175 (2018).
4. *N. D'Souza et al.* Nanotechnology **29**, 442001 (2018).
5. *T. Mathurin et al.* Phys. Rev. B **95**, 140405(R) (2017).
6. *Y. Dusch et al.* J. Appl. Phys. **113**, 17C719 (2013).

АНАЛИЗ АНАЛИТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ МЕМРИСТОРА

Ф.П. Мещанинов^{1,2}, В.С. Кожевников^{1,2}, Е.С. Горнев^{1,2},
Д.А. Жевненко^{1,2}

¹ АО «Научно-исследовательский институт молекулярной электроники»,
г. Зеленоград

² Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет), г. Долгопрудный
e-mail: DmitryZhev@yandex.ru

Аннотация. В работе рассматриваются различные аналитические модели мемристора. Для каждой модели было выполнено численное моделирование и проведено её сравнение с экспериментальными результатами.

Ключевые слова: модель мемристора, мемристивная система, математическое моделирование, функция окна, линейный дрейф, нелинейный дрейф, пороговые модели.

Мемристоры были предложены в 1971 в качестве четвертого основного элемента электрических цепей, определяющего соотношение между магнитным потоком и зарядом. Развитие этого предположения привело к созданию мемристивных структур, обладающих уникальными свойствами и крайне высоким потенциалом применения [1, 2]. И одной из ключевых задач построения элементной базы на основе таких мемристоров, является построение их точной математической модели.

Одними из ранних моделей являются модели линейного дрейфа кислородных вакансий [2], нелинейного дрейфа [3] и модель мемристора на барьере Симмонса [4]. Так как последние две являются достаточно сложными с точки зрения вычислений, то для упрощения вводят функции окна для модели линейного дрейфа [5, 6, 7, 8], а также пороговые модели для мемристоров, управляемых током [9] и напряжением [10, 11], чтобы дополнительно облегчить вычисления и учесть наличие пороговых значений для токов и напряжений переключения. На рис. 1 изображен набор вольт-амперных характеристик аналитической модели мемристора, полученный вариацией параметров при численном решении системы дифференциальных уравнений [10].

В рамках нашей работы был произведен обзор аналитических моделей мемристивных структур. Проанализирована модель линей-

ного дрейфа с наиболее простой физикой переключения состояний, обладающая, однако, наименьшей точностью, и модели, учитывающие характер взаимодействия с поверхностью, а также наличие пороговых напряжений и токов. Проведена аппроксимация эксперимента данными моделями и выполнено сравнение оптимальных по нормированной площади ВАХ моделей с экспериментальной ВАХ.

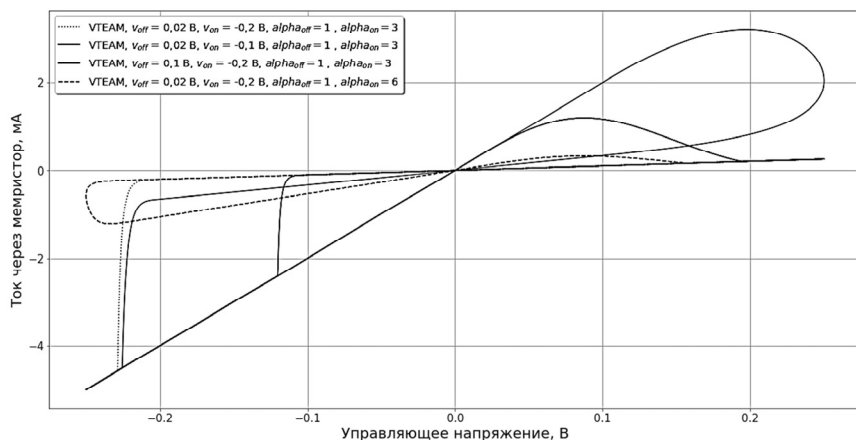


Рис. 1. ВАХ мемристора в модели VTEAM с поданным на вход синусоидальным сигналом амплитуды $V_0 = 0,25$ В и частоты $f = 100$ кГц

Параметры модели, не представленные на графике:

$$k_{\text{off}} = 5,0 \cdot 10^{-4} \text{ м / с}, k_{\text{on}} = -10,0 \text{ м / с}, x_{\text{off}} = 3 \text{ нм}, x_{\text{on}} = 0 \text{ нм}, \\ R_{\text{on}} = 50 \text{ Ом}, R_{\text{off}} = 1 \text{ кОм}, \alpha_{\text{off}} = 1, \alpha_{\text{on}} = 6.$$

Литература

1. *L. Chua* «Memristor-the missing circuit element», IEEE Transactions on circuit theory, Vol. 18, № 5, 1971, pp. 507–519.
2. *D.B. Strukov, G.S. Snider, D.R. Stewart, R.S. Williams* «The missing memristor found», Nature, Vol. 453, № 7191, 2008, p. 80.
3. *J.J. Yang, M.D. Pickett, L. Xuema, D. A.A. Ohlberg, D.R. Stewart, R.S. Williams* «Memristive switching mechanism for metal/oxide/metal nanodevices», Nature nanotechnology, Vol. 3, № 7, 2008, p. 429.
4. *M.D. Pickett, D.B. Strukov, J.L. Borghetti, J.J. Yang, G.S. Snider, D.R. Stewart, R.S. Williams* «Switching dynamics in titanium dioxide memristive devices», Journal of Applied Physics, Vol. 106, № 7, 2009, p. 074508.
5. *Y. N. Joglekar, S. J. Wolf* «The elusive memristor: properties of basic electrical circuits», European Journal of Physics, Vol. 30, № 4, 2009, p. 661.
6. *Z. Biolek, D. Biolek, V. Biolkova* «SPICE Model of Memristor with Nonlinear Dopant Drift», Radioengineering, Vol. 18, № 2, 2009.

7. T. Prodromakis, B. P. Peh, C. Papavassiliou, C. Toumazou, «A versatile memristor model with nonlinear dopant kinetics», IEEE Transactions on Electron Devices, Vol. 58, № 9, 2011, pp. 3099–3105.

8. J. Zha, H. Huang, Y. Liu «A novel window function for memristor model with application in programming analog circuits», IEEE Transactions on Circuits and Systems II: Express Briefs, Vol. 63, № 5, 2015, pp. 423–427.

9. S. Kvatinsky, E. G. Friedman, A. Kolodny, U. C. Weiser «TEAM: Threshold adaptive memristor model», IEEE Transactions on Circuits and Systems I: Regular Papers, Vol. 60, № 1, 2012, pp. 211–221.

10. S. Kvatinsky, M. Ramadan, E. G. Friedman, A. Kolodny «VTEAM: A general model for voltage-controlled memristors», IEEE Transactions on Circuits and Systems II: Express Briefs, Vol. 62, № 8, 2015, pp. 786–790.

11. C. Yakopcic, T. M. Taha, G. Subramanyam, R. E. Pino, S. Rogers «A memristor device model», IEEE electron device letters, Vol. 32, № 10, 2011, pp. 1436–1438.

ПРИМЕНЕНИЕ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В ИССЛЕДОВАНИИ МЕМРИСТОРНЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ ОКСИДОВ И ХАЛЬКОГЕНИДОВ

В.В. Сироткин¹, Н.А. Тулина²

¹ *Институт проблем микроэлектроники и чистых веществ РАН,
Черноголовка*

² *Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка*

Биполярные эффекты резистивных переключений (БЭРП) в гетерогенных структурах различных соединений рассматриваются и реализуются на практике в качестве элементов памяти нового поколения (memристоры). Эффект резистивных переключений наблюдается в широком спектре структур с диэлектрическим слоем, состоящим как из простых оксидов, халькогенидов, так и сложных соединений [1]. В наших работах было показано [2–5], как, используя функциональные свойства высокотемпературных сверхпроводников и селенида висмута, можно формировать мемристоры гетероструктуры. В этих работах также с помощью численного моделирования было изучено влияние **неоднородного распределения электрического поля** в интерфейсе гетероконтактов на мемристорные свойства полученных структур.

В данной работе проведено численное исследование БЭРП в гетероструктурах, построенных на основе либо высокотемпературных сверхпроводников $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-y}$ (NCCO) или $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$

(BSCCO), либо селениде висмута Bi_2Se_3 . Структуры имеют верхний электрод точечного типа. Другой важной особенностью этих гетероструктур является наличие поверхностного слоя толщиной несколько десятков нанометров с удельной проводимостью, значительно пониженной относительно объемной. Изменение резистивных свойств гетероструктур обуславливается формированием или разрушением проводящего канала через указанный слой. Предполагается, что существенную роль при этом играет электродиффузия ионов либо кислорода, либо селена. Наиболее интенсивно этот процесс протекает в зоне, которая расположена в окрестностях края точечного контакта и характеризуется сильным локальным повышением напряженности электрического поля. Таким образом, при моделировании БЭП в рассматриваемых гетероструктурах, необходимо учитывать существование трех масштабов: вся гетероструктура (миллиметры – сотни микрон), поверхностный слой + точечный контакт (микроны – сотни нанометров), поверхностный слой + край точечного контакта (десятки нанометров). В работе представлены математические модели, при численной реализации которых проблема многомасштабности решается сочетанием интегро-разностной аппроксимации дифференциальных уравнений [6], многосеточного подхода для локализации неоднородностей [7], специального итерационного метода декомпозиции [8] и составных адаптивных сеток.

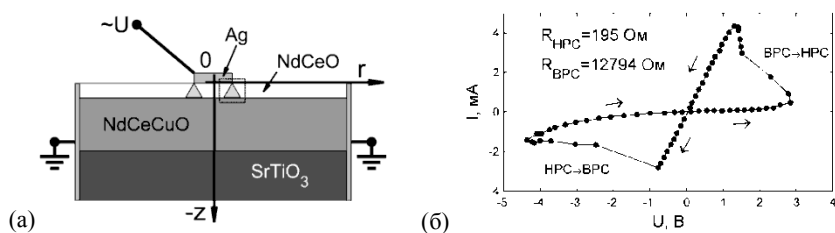


Рис. 1. (а) Схема гетероструктуры на основе NCCO.
 (б) Пример экспериментальной ВАХ для NCCO гетероструктуры при подаче на ее контакты синусоидального сигнала.
 ВРС и НРС – высокорезистивное и низкорезистивное состояния, соответственно

На рис. 1а показана схема гетероструктуры на основе эпитаксиальных пленок NCCO. В этом случае поверхностный слой (30 нм) состоит из дефектного оксида $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{O}_y$ [3]. При подаче на контакты такой структуры синусоидального сигнала наблюдаются ВАХ,

на которых фиксируются БЭРП (см. рис. 1б). В [2] для описания подобных БЭРП была предложена модель «критического поля» (МКП), в которой, без указания конкретного механизма образования проводящего канала, полагается, что изменение удельной проводимости происходит в тех частях поверхностного слоя, где напряженность электрического поля превышает некоторое критическое значение. МКП основана на численном расчете по распределению в структуре удельной проводимости распределения электрического потенциала.

Результаты расчетов по МКП для NCCO гетероструктуры изображены на рис. 2. Видно, что переход гетероструктуры из ВРС (рис. 2а) в НРС (рис. 2б) связан с прорастианием проводящего канала от края точечного контакта к слою NCCO (рис. 2в). Разрушение канала при смене полярности сигнала происходит в обратном направлении (рис. 2г). Полученные при моделировании данные о форме и размерах проводящего канала соответствуют экспериментальным оценкам.

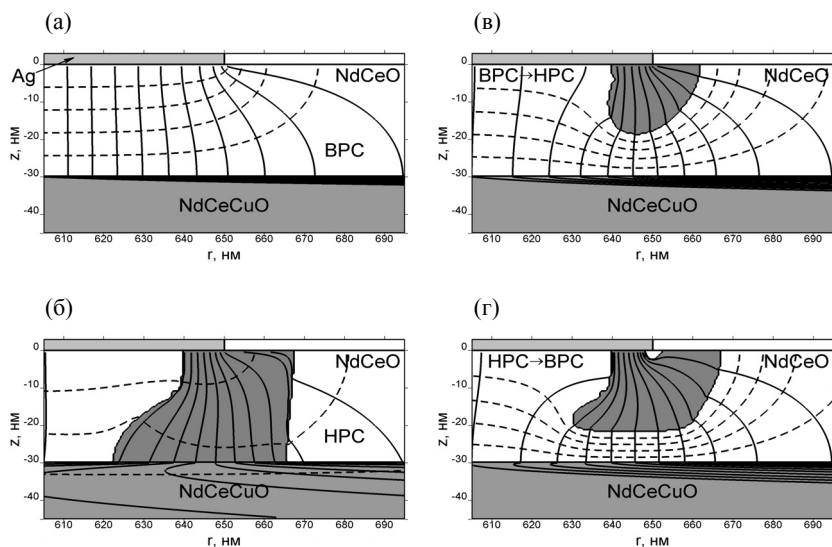


Рис. 2. Результаты расчетов по МКП для NCCO гетероструктуры с параметрами, соответствующими рис. 1б.

На рисунках проведены эквипотенциали (пунктир) и линии тока (сплошные)

Большинство соединений, в которых наблюдается эффект резистивных переключений – оксидные соединения. Поэтому изучение БЭРП в гетероструктурах на основе селенида висмута интересно

прежде всего с точки зрения наблюдения БЭРП в неоксидных соединениях. Bi_2Se_3 является узкозонным полупроводником, селеновые вакансии и легирование по катиону меняют число носителей в довольно широком диапазоне, при этом тип носителей изменяется от электронного к дырочному. С точки зрения математической модели применимой к этому типу мемристорных структур мы учли служебное свойство: легко переходить из монокристаллического в многофазное состояние при небольших температурах. Учет локальных перегревов позволили численными методами описать ВАХ с переключениями при физических параметрах, совпадающих с экспериментальными.

Работа поддержана грантами РФФИ № 19-29-03011мк и № 19-29-03021мк.

Литература

1. *Pershin Y.V., Ventra M.D.* // *Advances in Physics*. 2011, v. 60, p. 145–227.
2. *Tulina N.A., Borisenko I.Yu., Sirotkin V.V.* // *Solid State Communications*. 2013, v. 170, № 1, p. 48–52; *Tulina N.A.* // *arXiv.org > cond-mat > arXiv:1801.09428*. 2018.
3. *Tulina N.A., Rossolenko A.N., Ivanov A.A., Sirotkin V.V., Shmytko I.M., Borisenko I.Yu., Ionova A.M.* // *Physica C*. 2016, v. 527, p. 41–45.
4. *Сироткин В.В., Тулина Н.А., Россоленко А.Н., Борисенко И.Ю.* // *Известия РАН, сер. Физическая*. 2016, т. 80, № 5, с. 551–553.
5. *Тулина Н.А., Россоленко А.Н., Шмытько И.М., Колесников Н.Н., Борисенко Д.Н., Сироткин В.В., Борисенко И.Ю.* // *Известия РАН, сер. Физическая*. 2016, т. 80, № 6, с. 741–743.
6. *Марчук Г.И.* *Методы вычислительной математики*. М.: Наука, 1977.
7. *Trottenberg U., Oosterlec C.W., Schiiller A.* *Multigrid*. London: Acad. Press, 2001.
8. *Сироткин В.В.* // *Фундаментальные проблемы радиоэлектронного приборостроения*. 2016, т. 16, № 3, с. 181–183.

6. F

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

АНАЛИТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ АСПЕКТНОЙ ЗАВИСИМОСТИ СКОРОСТИ ГЛУБОКОГО КРИОГЕННОГО ТРАВЛЕНИЯ КРЕМНИЯ В ПЛАЗМЕ SF_6/O_2

А.А. Резванов^{1,2}, Я.А. Мирошкин^{1,2}, Д. Жевненко^{1,2},
И.В. Матюшкин²

¹ *Московский Физико-Технический Институт (НИУ),
Долгопрудный, Россия*

² *АО «НИИ молекулярной электроники», Зеленоград, Россия*

Технология формирования глубоких отверстий в кремнии для последующего заполнения их металлом является необходимым этапом в создании 3D-интегрированных интегральных схем (3D-TSV) различного назначения [1]. Как правило, для этих целей используются технологии плазмохимического травления (ПХТ), являющихся вариантами двухшагового «Bosch»-процесса, имеющими большую скорость анизотропного травления и большую селективность к маске. Альтернатива «Bosch»-процессу – глубокое плазмохимическое травление при криогенных температурах, имеющее несколько меньшую скорость травления, но проводящееся в непрерывном режиме. В качестве слоя пассивации, обеспечивающего анизотропию травления в криогенном процессе используется SiO_xF_y (10 – 20 нм толщиной), образующийся на боковых стенках и препятствующий попаданию радикалов фтора при криогенных температурах. Одной из проблем этого процесса является зависимость скорости травления от размера вытравливаемого отверстия или канавки, известная под названием ARDE. Целью данной работы является разработка простой аналитической модели, описывающей этот эффект, что позволит предсказать длительность процесса травления круглых отверстий на фиксированную глубину.

Существующие модели [2, 3] носят имитационный характер, связанный с применением методов Монте-Карло, и поэтому требуют значительных вычислительных ресурсов. Несмотря на сложность происходящих в системе физико-химических и транспортных процессов, мы попытаемся предложить сравнительно простую аналитическую модель, аналогичную по принципам построения известной модели Дила–Гроува для термического окисления. На первом этапе нами было проведено описание геометрии системы (рис. 1), которая была разбита на 3 подсистемы: плазма, газовая динамика, кинетика.

Газовая динамика. Была оценена доля частиц, попадающих в стенку канавки ниже некоторого уровня δ . Оценка основывается на предположении, что частицы имеют гауссово распределение по скоростям. Полная доля частиц, попавших в стенку – есть повторный интеграл вида:

$$Q = \int_0^R \frac{dn_\alpha}{N} \frac{2r}{R^2} dr = \int_0^r \left(\int_{\alpha_1}^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{\alpha^2}{2\sigma^2}} d\alpha + \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\alpha_2} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{\alpha^2}{2\sigma^2}} d\alpha \right) * \frac{2r}{R^2} dr.$$

Тогда, доля частиц, попавшая на дно канавки определяется как $1-Q$ (рис. 2).

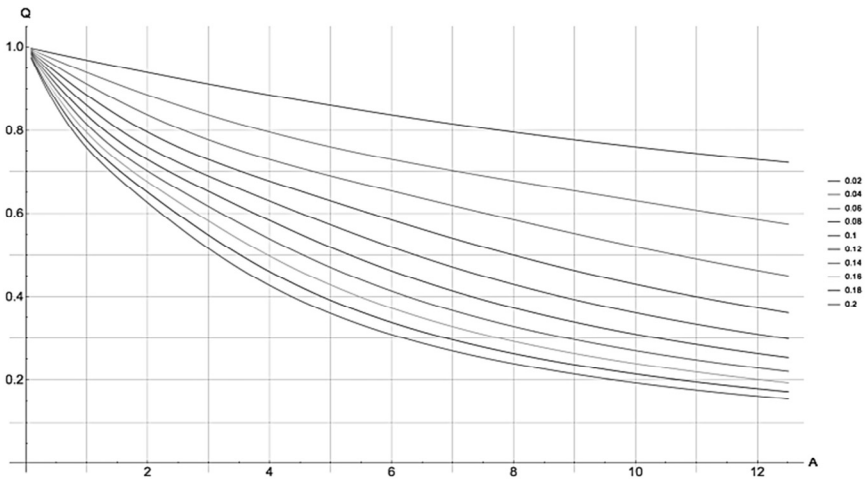


Рис. 2. График зависимости доли частиц, попавших в дно, от аспектного отношения

Кинетика. Модель одномерная по оси аппликат, направленной вниз (за нулевой уровень взята поверхность пластины). Однако при выводе транспортных соотношений будет использоваться цилиндрическая геометрия с радиальной симметрией и последующая редукция к переменной z .

При анализе экспериментальных данных было выявлено наличие пересечения графиков зависимости мгновенной скорости от времени (рис. 3). При детальном рассмотрении, можно увидеть, что канавка, травящаяся с наименьшей скоростью в начале эксперимента, в конце травится наиболее быстро. Данное явление встречается не так часто и в литературе получило название обратный апертурный

эффект, связан этот эффект с тем, что поток пассивирующих частиц на дно широкой канавки большой, что замедляет скорость травления, а поток бомбардирующих ионов в узких тренчах растёт, за счет отражения от стенок увеличивая скорость травления.

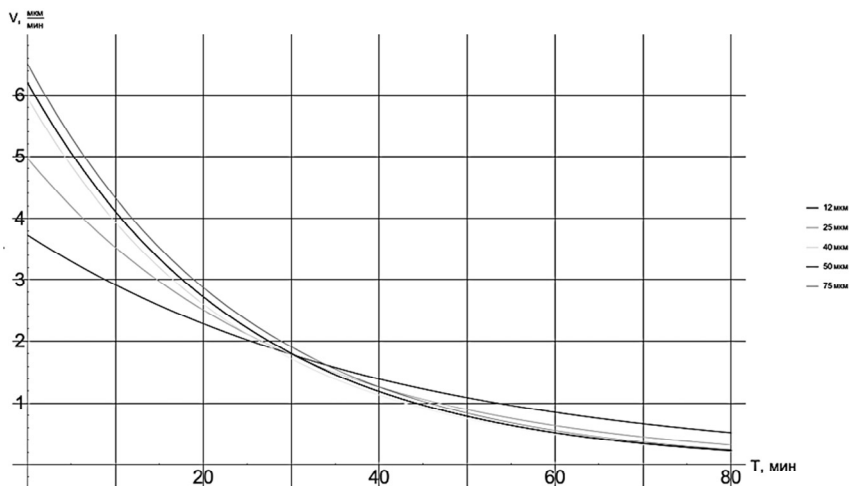


Рис. 3. Мгновенные скорости травления канавок в зависимости от времени

По результатам моделирования было продемонстрировано, что количество частиц, достигших дна структуры, уменьшается с ростом среднеквадратичного отклонения гауссова распределения и увеличением аспектного отношения. Также, в результате анализа экспериментальных данных было показано, что скорость травления падает с ростом аспектного отношения и выявлено наличие точки пересечения, показывающее большую скорость травления узких канавок по сравнению с широкими в конце эксперимента и меньшую в начале.

Литература

1. Красников Г.Я. Конструктивно-технологические особенности субмикронных МОП-транзисторов. 2-е, исправленное-е изд. Москва: Техносфера, 2011. 800 с.
2. Marcos G., Rhallabi A., Ranson P. Monte Carlo simulation method for etching of deep trenches in Si by a SF₆/O₂ plasma mixture // Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films. – 2003. – Т. 21. – №. 1. – С. 87–95.

3. *Ishchuk V et al.* Profile simulation model for sub-50 nm cryogenic etching of silicon using SF_6/O_2 inductively coupled plasma // *Journal of Applied Physics*. – 2015. – Т. 118. – №. 5. – С. 053302.

4. *M. K. Rudenko et al.* Monte Carlo Simulation of Defects of a Trench Profile in the Process of Deep Reactive Ion Etching of Silicon // *Russian Microelectronics*. – 2019. – V. 48. – № 3. – P. 157–166.

ОДНОФОТОННЫЙ ОТКЛИК И СПЕКТРОСКОПИЯ МИКРОДИСКА В АЛМАЗНОЙ ПОДЛОЖКЕ

М.С. Рогачев^{1,2}, И.Ю. Катеев¹, А.В. Цуканов¹

¹ *Физико-технологический институт им. К.А. Валиева РАН*

² *Московский физико-технический институт
(государственный университет)*

К настоящему времени достигнут существенный прогресс в изготовлении алмазных микрорезонаторов (МР) с малым оптическим объемом и большой добротностью в виде дефектов в фотонных кристаллах, а также в форме микродисков или микроколец [1]. Последний тип МР может поддерживать моды шепчущей галереи (МШГ), где пучности электромагнитного поля, возникающие как оптический отклик на облучение светом, располагаются около края МР [2]. Если вблизи пучности находится квантовый эмиттер, такой как квантовая точка или NV-центр, то благодаря его взаимодействию с МШГ происходит модификация спектра МР. В статье [3] было теоретически изучено взаимодействие NV-центра с транспортной модой фотонной молекулы из трёх МР и предсказано влияние NV-центра на спектроскопический отклик системы на лазерное облучение. В работе [4] развита технология создания микродисковых МР на основе массивного алмазного монокристалла, где полученные диски оказывались окруженными материалом подложки (рис. 1).

Для контроля электронных спиновых состояний NV-центров на поверхность диска обычно наносятся металлические затворы, что приводит к резкому уменьшению добротности МР. Чтобы избежать этой проблемы, можно наносить затворы на поверхность подложки, а не на поверхность микродиска. В настоящей работе мы исследовали влияние алмазной подложки и металлических затворов на спектроскопический отклик одиночного микродиска, содержащего NV-центр.

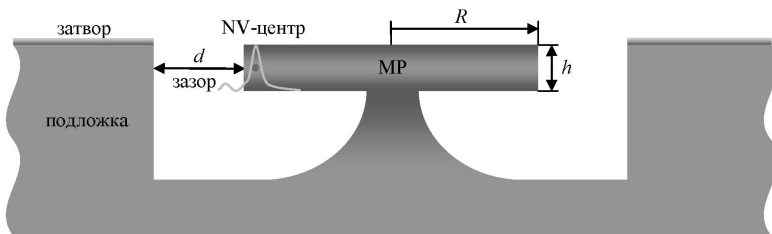


Рис. 1. Схематичное изображение микродиска с NV-центром в алмазной подложке

Спектр чётных ТМ-мод микродиска в алмазной подложке рассчитывается путём сведения трёхмерных уравнений Максвелла к следующей системе:

$$\begin{cases} [J_{m+1}(kR)J_m(k\tilde{n}R) - \tilde{n}J_{m+1}(k\tilde{n}R)J_m(kR)][\tilde{n}_s H_{m+1}(k\tilde{n}_s(R+d))N_m(k(R+d)) - N_{m+1}(k(R+d))H_m(k\tilde{n}_s(R+d))] = \\ = [\tilde{n}J_{m+1}(k\tilde{n}R)N_m(kR) - N_{m+1}(kR)J_m(k\tilde{n}R)][J_{m+1}(k(R+d))H_m(k\tilde{n}_s(R+d)) - \tilde{n}_s H_{m+1}(k\tilde{n}_s(R+d))J_m(k(R+d))], \\ \sqrt{n_c^2 - \tilde{n}^2} \operatorname{tg}\left(\frac{kh}{2}\sqrt{n_c^2 - \tilde{n}^2}\right) = n_c^2 \sqrt{\tilde{n}^2 - 1}, \quad k^2(n_c^2 - \tilde{n}_s^2) = \frac{\pi^2}{h^2}, \end{cases}$$

где k – волновой вектор фотона, \tilde{n} и \tilde{n}_s – эффективные показатели преломления диска и подложки соответственно, $n_c = 2.4$ – показатель преломления алмаза, R – радиус диска, d – зазор между диском и подложкой, h – высота диска и подложки, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ – азимутальное число, J_m , N_m , H_m – функции Бесселя, Неймана и функция Ганкеля первого рода, соответственно. Расчет зависимости излучательной добротности Q МШГ с длиной волны бесфононного спинового перехода NV-центра $\lambda_0 = 637$ от величины зазора d между микродиском и подложкой для дисков различных размеров при $m = 30$ показал, что подложка с нанесенными на ее поверхность затворами оказывает сильное влияние на добротность Q . При некотором значении $R = R_0 = 2250$ нм добротность не зависит от величины зазора d и равна значению Q_0 , соответствующего добротности в отсутствии алмазной подложки. Если $R \neq R_0$, то на зависимости $Q(d)$ наблюдаются осцилляции, причем с увеличением разности $|R - R_0|$ их амплитуда растёт.

Мы вычислили вероятность P_{exc} возбуждения микродиска с одиночным NV-центром лазером в зависимости от отстройки частот бесфононного перехода NV-центра от МР δ и отстройки частот лазера от МР Δ_L для различных величин d при двух значениях коэффициента взаимодействия NV-центра с МР: $g = 10^{-5}$ (рис. 2) и $g = 10^{-6}$ (рис. 3). Все величины на графиках даны в единицах частоты МШГ.

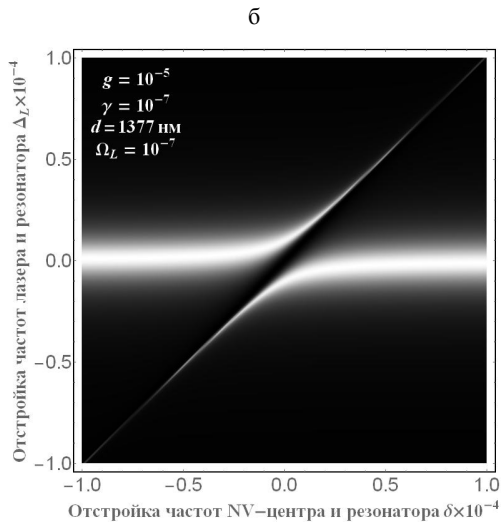
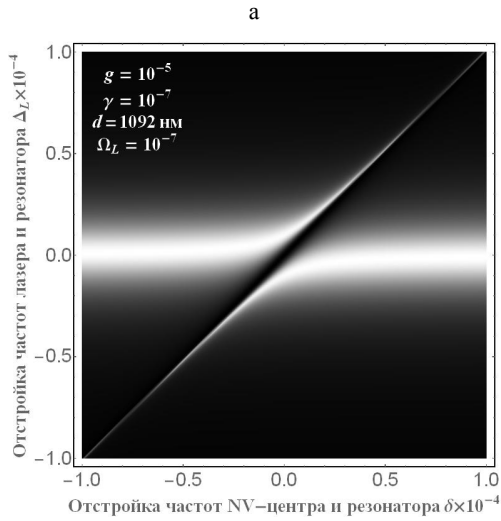


Рис. 2. Зависимость вероятности возбуждения МР $P_{\text{exc}}(\Delta_L, \delta)$ от частоты лазера и частоты бесфононного перехода NV-центра для $g = 10^{-5}$ при (а) $d = 1092$ нм и (б) $d = 1377$ нм

Видно, что существует два режима отклика системы на лазерное возбуждение: режим люминесценции и режим поглощения. В первом режиме, который реализуется при большом коэффициенте g (рис. 2), возникает люминесценция NV-центра и на зависимости $P_{\text{exc}}(\Delta_L, \delta)$ наблюдается характерное антипересечение. Во втором

случае на светлом фоне моды МР видна только узкая темная линия поглощения лазерного излучения NV-центром (рис. 3). При зазоре $d = 1092$ нм, соответствующему одному из минимумов добротности МР (рис. 2а, 3а), светлая горизонтальная линия от моды микродиска шире, а размер области антипересечения (для $g = 10^{-5}$) меньше, чем при $d = 1377$ нм, соответствующему одному из максимумов добротности (рис. 2б, 3б).

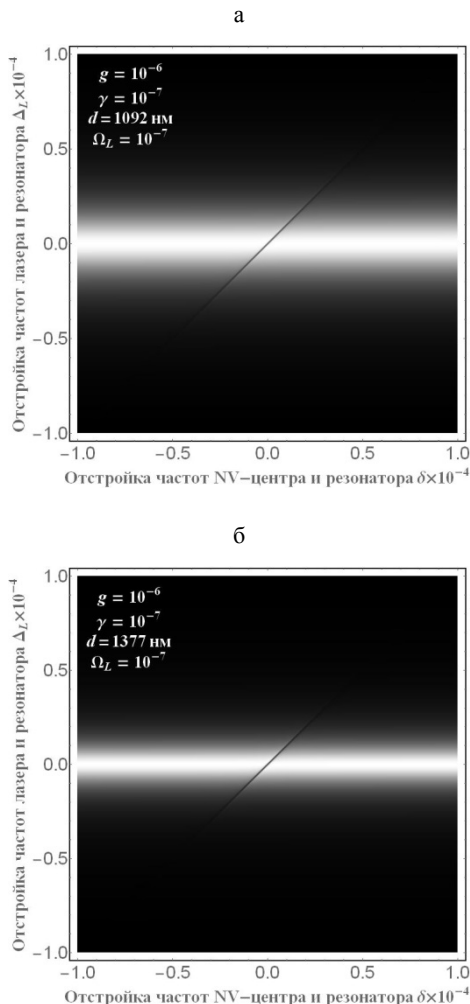


Рис. 3. Зависимость вероятности возбуждения МР $P_{\text{exc}}(\Delta_L, \delta)$ от частоты лазера и частоты бесфононного перехода NV-центра для $g = 10^{-6}$ при (а) $d = 1092$ нм и (б) $d = 1377$ нм

Работа выполнена в рамках Государственного задания ФТИАН им. К.А. Валиева РАН Минобрнауки РФ по теме № 0066-2019-0005 «Фундаментальные исследования в области квантовых вычислений и прикладные разработки твердотельной элементной базы квантовых компьютеров 2019».

Литература

1. Цуканов А.В., Катеев И.Ю. Экспериментальная алмазная фотоника: современное состояние и перспективы развития. Часть I // Микроэлектроника. 2016. Т. 45. С. 325.
2. Городецкий М.Л. Оптические микрорезонаторы с гигантской добротностью. М.: Физматлит, 2011.
3. Цуканов А.В., Рогачев М.С., Катеев И.Ю. Однофотонный отклик и спектроскопия фотонной молекулы на основе алмазных микроколец // Микроэлектроника. 2017. Т. 46. С. 411.
4. Kanaliloov B., Mitchell M., Hryciw A.C., Barclay P.E. High Q/V monolithic diamond microdisks fabricated with quasiisotropic etching // Nanolett. 2015. V. 15. P. 5131.

ГИГАНТСКАЯ МИКРОВОЛНОВАЯ И ТЕРАГЕРЦОВАЯ ФОТОПРОВОДИМОСТЬ КВАНТОВОГО ТОЧЕЧНОГО КОНТАКТА В ТУННЕЛЬНОМ РЕЖИМЕ: МОДЕЛИРОВАНИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТ

В.А. Ткаченко^{1,2,3} О.А. Ткаченко¹, Д.Г. Бакшеев^{2,4}, З.Д. Квон^{1,2}
А.С. Ярошевич¹, Е.Е. Родякина^{1,2}, А.В. Латышев^{1,2}

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

² Новосибирский государственный университет, Новосибирск

³ Новосибирский государственный технический университет

⁴ Яндекс, Новосибирск

Гигантское увеличение электронной прозрачности плавного туннельного барьера под действием высокочастотного (ВЧ) поля было давно предсказано в рамках теории когерентного фотонно-стимулированного прохождения (ФСП) [1–3], но экспериментально обнаружено совсем недавно [4–6]. Короткие квантовые точечные контакты (КТК) были сформированы электростатически в высокоподвижном двумерном электронном газе (ДЭГ) двумя способами: с помощью непрерывного и расщепленного металлического затворов (рис. 1). При облучении структур волнами на частоте $f = 0.15$, 0.17 ТГц и 0.69 ТГц наблюдался гигантский фотоконтакт КТК

в туннельном режиме: т.е. рост G_{ph} на два порядка по сравнению с $G_{dark} \sim 10^{-3}G_0$, $G_0=2e^2/h$ [4,6] (рис.2).

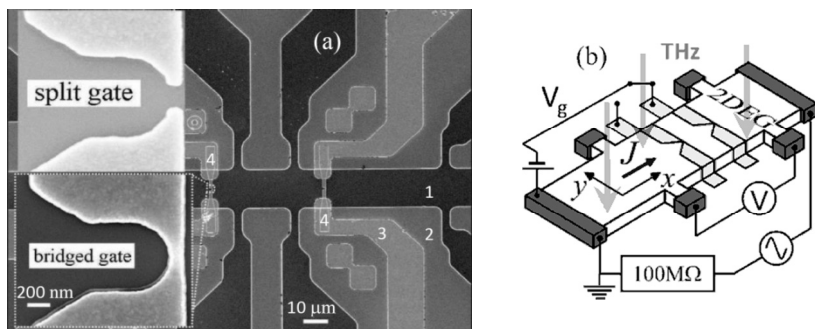


Рис. 1. (a) – Микрофотография холловского мостика и двух типов затворов: расщепленного и непрерывного. Цифрами отмечены: 1 – область, под которой находится ДЭГ, 2 – область травления, 3 – Au контакты к затвору, 4 – затворы, которые на вставке показаны в увеличенном масштабе. (b) – Схема измерений фотокондуктанса $G=J/V$.

На удивление, КТК показал практически нулевой отклик на облучение с наибольшей частотой $f=1.63$ ТГц [6] (рис.2b). Выяснено, что фотоотклик вызван компонентой внешнего ВЧ электрического поля вдоль тока в КТК. Это позволяет свести задачу о прохождении электрона через КТК к одномерной [6]. Поведение при всех частотах было количественно воспроизведено решением нестационарного уравнения Шредингера для барьера $(U_0+A\cos(\omega t))/\hbar^2(x/W)$ и расчетом среднего по времени коэффициента прохождения D . Предполагалось, что кондуктанс связан с D через формулу Ландауэра $G=D(E_F)\times G_0$ (рис. 2) [5, 6]. На интервале измерений темнового кондуктанса $0.002G_0 < G_{dark} < 0.1G_0$ затворные характеристики не имели особенностей. Однако, особенности были обнаружены расчетом в рамках теории ФСП [7], когда граница D была понижена на 1–3 порядка по сравнению с G_{min} и использованы $\hbar\omega$ из интервала 2–7 мэВ ($0.5\text{ТГц} < f < 1.7\text{ ТГц}$) при сохранении ранее найденных в [5, 6] значений параметров барьера W , U_0 , A (рис. 3а). Эти особенности являются фотонными репликами ступени коэффициента прохождения $D(E)$ при $A=0$. Из-за конечной ширины данной ступени фотонные реплики полностью размываются, если $f \leq 0.25$ ТГц. Положение реплик дается формулой $|E-U_0| = n\hbar\omega$ ($n=1,2,3$) и не зависит от конкретных значений A . Появление фотонных реплик объяснено

квазиклассическим торможением электрона с исходной энергией E при его оптическом переходе в канал с энергией, близкой к вершине барьера U_0 . Реплики другого типа предсказаны в [8] при действии на тот же барьер ВЧ полей с частотой 20 ГГц и ниже. Их положение $|E-U_0| \approx A$ зависит только от амплитуды A (рис.3б), но не от f . При небольших f электрон быстро проходит через барьер, как через статический. Однако высота барьера $U_0 + A \cos(\omega t)$ медленнее всего меняется при $\omega t = n\pi$, и это дает особенности с $|E-U_0| \approx A$ для среднего по времени $D(E)$. Наблюдения гигантской фотопроводимости КТК в туннельном режиме в СВЧ поле с частотой $f = 2.44$ ГГц сделаны уже в этом году.

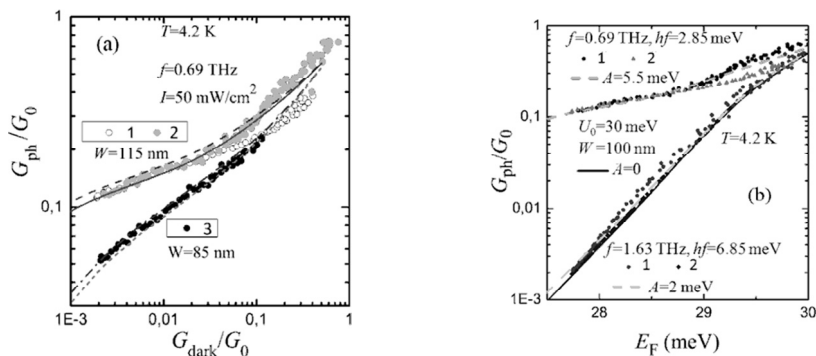


Рис. 2. Эксперимент (точки) и моделирование фотокондуктанта G_{ph} (линии) для указанных частот: 1,2 – образцы с непрерывным затвором, 3 – с расщепленным. (а) – Зависимость от темного кондуктанта, расчет для указанных W , $U_0=30$ мэВ, $A \approx 5.5$ мэВ. (б) – Зависимость G_{ph} от вычисленного E_F и расчет для указанных параметров

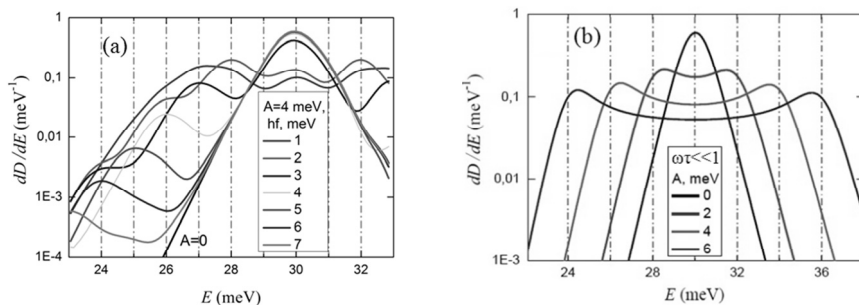


Рис. 3. Вычисленные для $U_0 = 30$ мэВ, $W=100$ нм и указанных A , hf зависимости производной $D'(E)$. (а) – Расчет по теории ФСП. (б) – Расчет в низкочастотном пределе

Теоретическая часть работы выполнена в рамках гранта 19-72-30023 Российского научного фонда, а экспериментальная – в рамках гранта 17-02-00384 Российского фонда фундаментальных исследований.

Литература

1. *O.A. Tkachenko, V.A. Tkachenko, D.G. Baksheev, H. Nejoh*, Localization of tunneling electron in a potential barrier with alternating height// in «Quantum coherence and decoherence» edited by K. Fujikawa, Y.A. Ono., New York: Elsevier/North Holland, 1996, P. 207–210.

2. *K. Yakubo, S. Feng, Q. Hu*, Simulation studies of photon-assisted quantum transport, *Phys. Rev. B.* 54. 7987 (1996).

3. *J.-Y. Ge, J. Z. H. Zhang*, Quantum mechanical tunneling through a time-dependent barrier, *J. Chem. Phys.* 105. 8628 (1996).

4. *A.D. Levin, G.M. Gusev, Z.D. Kvon, A.K. Bakarov, N.A. Savostianova, S.A. Mikhailov, E.E. Rodyakina, A.V. Latyshev*, Giant microwave photo-conductance of a tunnel point contact with a bridged gate, *Appl. Phys. Lett.* 107. 072112 (2015).

5. *О.А. Ткаченко, В.А. Ткаченко, З.Д. Квон*, Фотонно-стимулированное прохождение электрона через туннельный точечный контакт в микроволновом поле, Письма в ЖЭТФ, 102. 417 (2015).

6. *M. Otteneder, Z.D. Kvon, O.A. Tkachenko, V.A. Tkachenko, A.S. Jaroshevich, E.E. Rodyakina, A.V. Latyshev, S.D. Ganichev*, Giant Terahertz Photoconductance of Quantum Point Contacts in the Tunneling Regime, *Phys. Rev. Applied.* 10. 014015 (2018).

7. *О.А. Ткаченко, В.А. Ткаченко, Д.Г. Бакшеев, З.Д. Квон*, Ступени терагерцового гигантского фотоконтактанса туннельного точечного контакта, Письма в ЖЭТФ. 108. 422 (2018).

8. *О.А. Ткаченко, В.А. Ткаченко, Д.Г. Бакшеев*, Прохождение электрона через туннельный плавный барьер в высокочастотном поле, Сибирский физический журнал. 13, 74 (2018).

ОСЦИЛЛЯЦИИ ААРОНОВА–БОМА И РАСПРЕДЕЛЕНИЯ РАВНОВЕСНЫХ И НЕРАВНОВЕСНЫХ ТОКОВ В ОТКРЫТЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ И КОЛЬЦЕВЫХ ИНТЕРФЕРОМЕТРАХ

О.А. Ткаченко¹, Д.Г. Бакшеев^{2,3}, В.А. Ткаченко^{1,2,4}

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

² *Новосибирский государственный университет, Новосибирск*
³ *Яндекс, Новосибирск*

⁴ *Новосибирский государственный технический университет*

Наблюдение осцилляций Ааронова–Бома (ОАБ) является средством измерения эффективной площади S полупроводниковых кольцевых интерферометров и субмикронных квантовых точек в перпендикулярном магнитном поле B . Обычно S находится по простой формуле, которую предсказывают одномерные модели кольца и краевых токовых состояний: $S = \Phi_0 / \Delta B$, где ΔB – период ОАБ, а Φ_0 – квант магнитного потока. Однако поведение магнитополевых осцилляций кондактанса реальных наносистем в двумерном электронном газе оказывается более сложным. Мы проясняем его с помощью расчетов распределения равновесных (персистентных) токов и магнитного момента M . Вихревые персистентные токи создают магнитный момент. Полный равновесный ток для заданных значений энергии Ферми E_F и B определяется суммой вкладов $d\mathbf{J}(x,y)/dE$ по состояниям с энергиями $E \leq E_F$. Полный магнитный момент вычисляется как векторное произведение радиус вектора $\mathbf{r} = (x,y)$ на ток: $\mathbf{M} = 0.5\mathbf{r} \times \mathbf{J}(x,y)$. Обычно равновесный ток теоретически и численно изучают в аксиально-симметричных закрытых системах с дискретным спектром E_i [1], но мы рассматриваем открытые субмикронные системы с непрерывным спектром, которые соединены с подводящими широкими каналами через проницаемые плавные потенциальные барьеры. Для расчета $d\mathbf{J}(x,y)/dE$ и неравновесного тока $\mathbf{I}(x,y)$ использован алгоритм из работы [2]. По структурным данным для большого и малого интерферометров [3, 4], а также квантовой точки [5, 6] мы вычисляли сначала трехмерный электростатический потенциал, а затем по эффективному двумерному потенциалу и величине B определялись полный неравновесный ток I через устройство при заданных E_F и тянущем напряжении V (кондактанс $G = I/V$), а также распределения $\mathbf{I}(x,y)$, $d\mathbf{J}(x,y)/dE$ и dM/dE .

В качестве примера полученные результаты в случае квантовой точки показаны на рис. 1, 2. Из графиков $G(B)$ и $\Delta G_{smooth}(B)$ виден период ОАБ 17–19 мТл (рис. 1а), который близок к измеренному $\Delta B = 15$ мТл [5]. Пикам на зависимости $G(B)$ отвечают узкие положительные, либо отрицательные особенности dM/dE . Области подводящих каналов при вычислении dM/dE и M игнорировались.

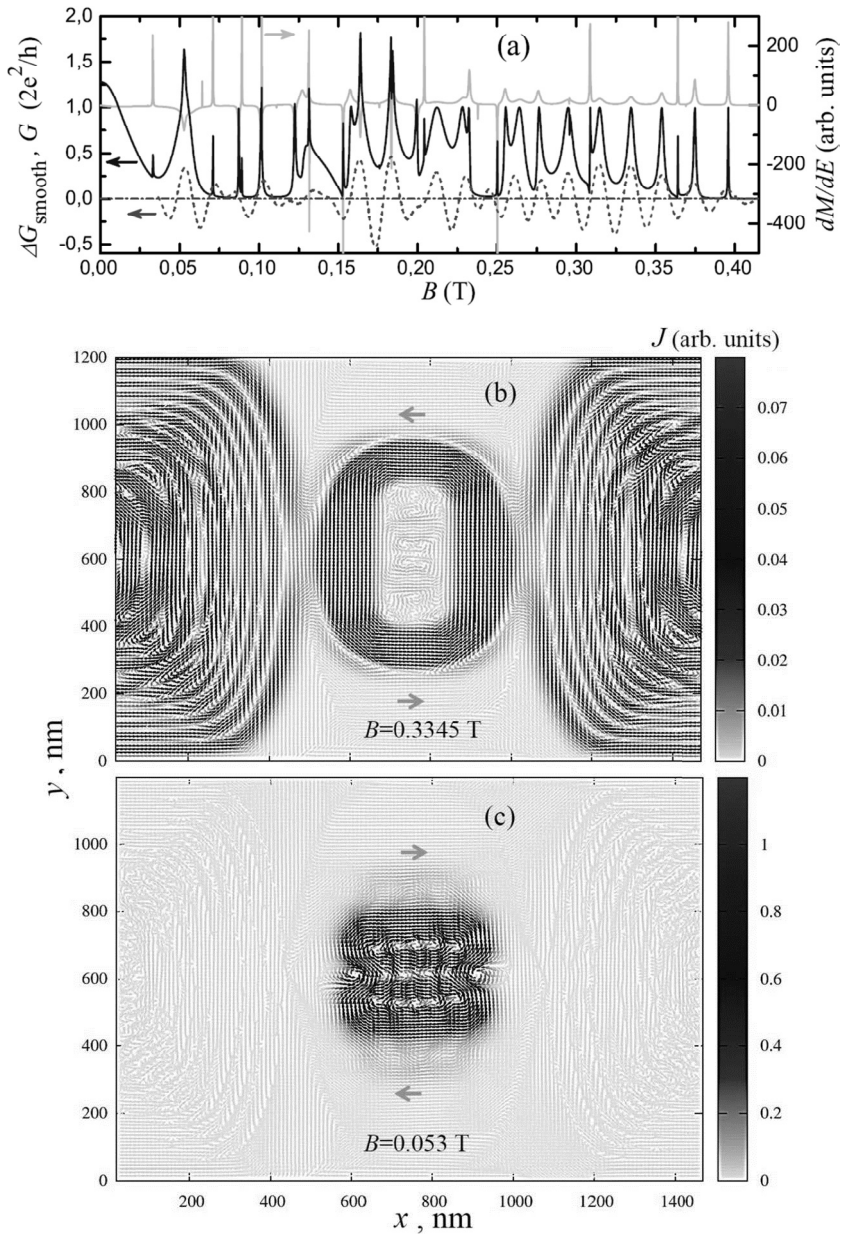


Рис. 1. Характеристики квантовой точки при $E_F=0.1$ мэВ. (а) – Вычисленные зависимости от B кондуктанса и производной магнитного момента dM/dE . Нижняя кривая – результат полосовой фильтрации $G(B)$ для имитации измерений. (b,c) – Полный равновесный ток J в точке и подводящих каналах при указанных B

Основной равновесный ток J в квантовой точке для пика $G(B)$ при $B=0.053$ Тл на порядок выше, чем для пика при $B=0.3345$ Тл, и идет, соответственно, по и против часовой стрелки (рис. 1с,б). Расчеты проводились на интервале от $E=-3$ мэВ до $E_F=0.1$ мэВ, но определяющий вклад в полный магнитный момент вносят состояния вблизи уровня Ферми, которые отвечают пикам в $G(E)$ на рис. 2.

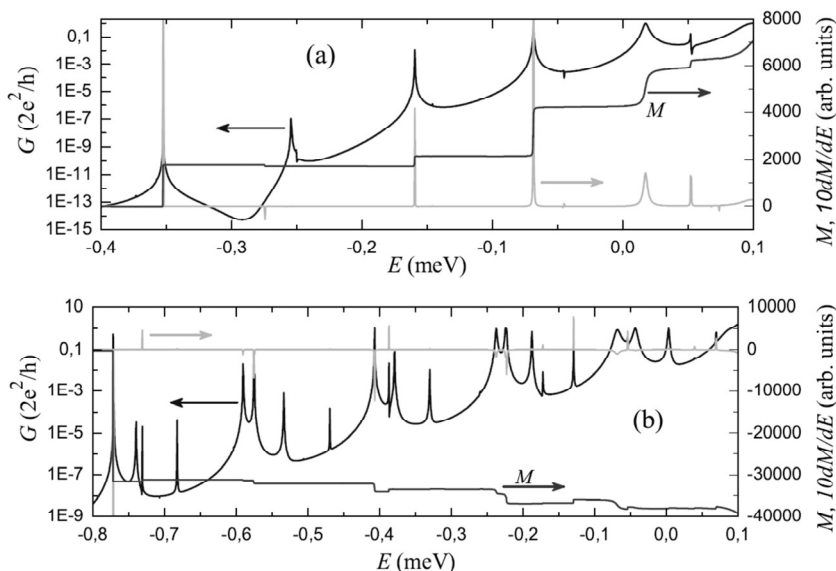


Рис. 2. Зависимости коэффициента прохождения электрона $G(E)$, магнитного момента $M(E)$ и $10 \times dM(E)/dE$ для случаев $B=0.3345$ Тл (а) и $B=0.053$ Тл (б)

Литература

1. *W.-C. Tan and J.C. Inkson*, Magnetization, persistent currents, and their relation in quantum rings and dots, *Phys. Rev. B.* 60. 5625 (1999).
2. *A. Cresti, R. Farchioni, G. Grosso, and G.P. Parravicini*, Keldysh-Green function formalism for current profiles in mesoscopic systems, *Phys. Rev. B.* 68. 075306 (2003).
3. *O.A. Tkachenko, V.A. Tkachenko, D.G. Baksheev, Z.D. Kvon, and J.C. Portal*, Electrostatic Potential, Energy Spectrum, and Fano Resonances in a Ballistic Ring Interferometer Based on an AlGaAs/GaAs Heterojunction, *JETP Letters*, 71, 255 (2000).
4. *V.A. Tkachenko, Z.D. Kvon, D.V. Sheglov, A.V. Latyshev, A.I. Toropov, O.A. Tkachenko, D.G. Baksheyev, and A.L. Aseev*, Aharonov–Bohm Oscillation Amplitude in Small Ballistic Interferometers, *JETP Letters*, 79, 136 (2004).

5. *C.-T. Liang, M. Y. Simmons, C. G. Smith, G. H. Kim, D. A. Ritchie, and M. Pepper*, Experimental Evidence for Coulomb Charging Effects in an Open Quantum Dot at Zero Magnetic Field, *Phys. Rev. Lett.* **16**, 3507 (1998).

6. *O.A. Tkachenko, V.A. Tkachenko, D.G. Baksheyev, C-T Liang, M.Y. Simmons, C.G. Smith, D.A. Ritchie, Gil-Ho Kim, and M. Pepper*, Coulomb charging effects in an open quantum dot device, *J. Phys.: Condens. Matter* **13**, 9515 (2001).

*The publication is supported by the Ministry of Science
and Higher Education of the Russian Federation*

Mathematical modeling in materials science of electronic components. MMMSEC–2019. October 21–23, 2019, Moscow : Proceedings of the I International conference. – Moscow : MAKS Press, 2019. – 168 p.

ISBN 978-5-317-06245-3

<https://doi.org/10.29003/m682.MMMSEC–2019>

The proceedings includes scientific works reflecting modern world 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 of nanoelectronics products, developers of modern applied software systems, graduate students and senior students of universities and technical universities.

Keywords: mathematical modeling, computational materials science, applied mathematics, materials design, electronic components, nanoelectronics devices, applied software systems.

Научное издание
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
в материаловедении электронных компонентов
МММЭК-2019
21–23 октября 2019 г. Москва.
Материалы I международной конференции

Подготовка оригинал-макета:
Издательство «МАКС Пресс»
Главный редактор: *Е. М. Бугачева*
Компьютерная верстка: *В. А. Катина*
Обложка: *М. А. Еронина*

Подписано в печать 16.10.2019 г.
Формат 60x90 1/16. Усл.печ.л. 10,5. Тираж 150 экз. Заказ 217.
Издательство ООО «МАКС Пресс»
Лицензия ИД N 00510 от 01.12.99 г.
119992, ГСП-2, Москва, Ленинские горы, МГУ им. М.В. Ломоносова,
2-й учебный корпус, 527 к.
Тел. 8(495)939-3890/91. Тел./Факс 8(495)939-3891.

Отпечатано в полном соответствии с качеством
предоставленных материалов в ООО «Фотоэксперт»
115201, г. Москва, ул. Котляковская, д.3, стр. 13.

