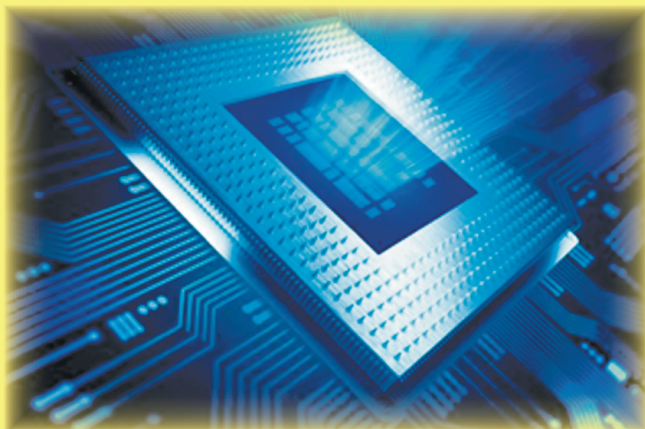


МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

в материаловедении электронных компонентов

МММЭК–2020

Материалы II международной конференции



ФЕДЕРАЛЬНЫЙ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
Информатика
и Управление
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК



НИИМЭ
НИИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ
ЭЛЕКТРОНИКИ



19–20 октября 2020 г. Москва Россия

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Вычислительный центр Федерального исследовательского центра «Информатика и управление» РАН
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
факультет Вычислительной математики и кибернетики
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–2020

Материалы II международной конференции

19–20 октября 2020 г., Москва

MATHEMATICAL MODELING in materials science of electronic components ICM3SEC–2020

Proceedings of the international conference

October 19–20, 2020 Moscow, Russia



МОСКВА – 2020

УДК 519.6.517.958.533.6
ББК 22.2.2218
М34

Ответственный редактор:

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

Математическое моделирование в материаловедении электрон-
М34 **ных компонентов.** МММЭК–2020. 19–20 октября 2020 г., Москва : Мате-
риалы II Международной конференции. – Москва : МАКС Пресс, 2020. –
144 с. : ил.

ISBN 978-5-317-06483-9

<https://doi.org/10.29003/m1506.MMMSEC-2020>

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

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

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

УДК 519.6.517.958.533.6
ББК 22.2.2218

Mathematical modeling in materials science of electronic component.
ICM3SEC–2020. October 19–20, 2020, Moscow : Proceedings of the
international conference. – Moscow : MAK S Press, 2020. – 144 p.

ISBN 978-5-317-06483-9

<https://doi.org/10.29003/m1506.MMMSEC-2020>

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

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

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

Статьи публикуются в авторской редакции.

Использованные изображения получены из открытых источников.

ISBN 978-5-317-06483-9

© Авторы, 2020

© Оформление. ООО «МАКС Пресс», 2020

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

А.А. Зацаринный, К.К. Абгарян. Актуальные проблемы создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках цифровой трансформации общества 8

Е.С. Горнев. Методы обеспечения надежности современных СБИС 13

В.А. Кондрашев, С.А. Денисов. Интерфейсы научных сервисов системы моделирования новых материалов на цифровой платформе..... 22

С.А. Денисов, К.И. Волович, В.А. Кондрашев. Опыт ФИЦ ИУ РАН в предоставлении облачных сервисов высокопроизводительных вычислений для задач материаловедения 26

К.И. Волович. Оценка загрузки гибридного вычислительного комплекса при выполнении задач моделирования в материаловедении 30

О.В. Уварова, С.И. Уваров. Применение методов машинного обучения для изучения свойств кристаллических структур..... 34

А.А. Зацаринный, К.И. Волович, С.А. Денисов, Ю.С. Ионенков, В.А. Кондрашев. Методические подходы к оценке эффективности центра коллективного пользования «Информатика» при решении задач синтеза новых материалов 38

И.Ф. Лебедкин, А.А. Молотков, О.Н. Третьякова. О разработке информационной системы для моделирования аддитивной технологии производства компонентов электронных приборов 42

2. В. Проблемы развития материаловедения квантоворазмерных электронных гетероструктур 47

Ryan Bower, Daniel A.L. Loch, Andrey Berenov, Bin Zou, Papken Eh. Hovsepian, Arutiun P. Eghisarian and Peter K. Petrov. Transition metal nitride thin films deposited at cmos compatible temperatures for tunable optoelectronic and plasmonic devices..... 48

M.I. Vasilevskiy. Modelling of environment sensors based on the surface plasmon resonance effect 50

3. С. Математическое моделирование в структурном материаловедении (многоуровневые, многомасштабные модели, имитационные модели и т.д.)	53
<i>B.M.S. Teixeira, A.A. Timopheev, N.F.F. Caçoil, S. Auffret, R.C. Sousa, B. Dieny, L. Cuchet, J. Mondaud, J.R. Childress, S. Magalhães, E. Alves, N.A. Sobolev.</i> Ion beam modification of magnetic tunnel junctions	54
<i>К.К. Абгарян.</i> Математическое моделирование нейроморфных систем	56
<i>А.Г. Настовьяк, Н.Л. Шварц, Е.А. Емельянов, М.О. Петрушков.</i> Изучение причин формирования кристаллитов в процессе самокаталитического роста нано-проводок GaAs с помощью моделирования методом Монте-Карло	60
<i>К.К. Абгарян, И.С. Колбин.</i> Построение модели эффективного коэффициента теплопроводности для наноразмерных гетероструктур с использованием машинного обучения.....	63
<i>В.С. Константинов, А.Г. Итальянцев.</i> Анизотропия термодинамических потенциалов в механически напряжённых структурах диоксида гафния	67
<i>А.В. Гревцев, К.К. Абгарян, Д.И. Бажанов.</i> Разработка функционала на основе потенциала терсоффа для моделирования свойств оксидов.....	71
<i>А.А. Орлов, А.А. Резванов.</i> Моделирование времени до пробоя пористого диэлектрика в системе металлизации интегральных схем современного топологического уровня.....	75
<i>А.И. Простомолотов, Н.А. Вerezуб.</i> Гидродинамика и массообмен в специальных конструкциях кристаллизатора.....	78
<i>А.А. Спирина, Н.Л. Шварц.</i> Влияние обработки поверхности подложки на морфологию GaAs планарных нанопроволок (Монте-Карло моделирование).....	82
<i>А.А. Шарапов.</i> Описание имитационной модели образования наноразмерной неровности края в процессе экспонирования полимерных фоторезистов	86
<i>Р.А. Жачук, А.Е. Долбак, А.А. Шкляев.</i> Атомная структура поверхности Si(47 35 7).....	88
<i>Р.А. Жачук, Ж. Кутиньо.</i> Пентамер с межузельным атомом как структурный блок реконструированных поверхностей Si(331) и Ge(331)	90
<i>Р.Т. Миннуллин, Д.С. Королев, А.А. Сапегин, М.Ю. Барабаненков.</i> Расчет спектров отражения Ge-Sb-Te дифракционной решетки с применением дисперсионной модели Тауца–Лорентца	92

<i>Ю.Д. Мочалова, К.К. Абгарян.</i> Моделирование процессов деградации механических свойств, прочности и разрушения композитных материалов	95
<i>А.В. Саенко, С.П. Малюков, А.В. Палий.</i> Численное моделирование солнечного элемента со структурой $\text{TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{Cu}_2\text{O}$	98
<i>Н.Н. Чернов, А.В. Палий, А.В. Саенко.</i> Исследование эффективности конструкции биметаллического радиатора из меди и алюминия для теплонагруженного источника электронной техники	101
4. D. Моделирование размерных, радиационных, поверхностных и других дефектов в полупроводниковой наноэлектронике	105
<i>José C. Pedro, João L. Gomes, Luís C. Nunes.</i> Consistent modeling of dc and ac characteristics of GaN/AlGaIn microwave power hemts	106
<i>А.А. Гниденко, А.Н. Чибисов, М.А. Чибисова, А.В. Прохоренко.</i> Квантово-механическое исследование влияния магнетизации на электронную структуру Si:P	109
5. E. Моделирование работы многоуровневых элементов памяти для компьютеров следующего поколения.....	113
<i>А.А. Зацаринный, Ю.А. Степченко, Ю.Г. Дьяченко, Ю.В. Рождественский.</i> Самосинхронные схемы как база создания высоконадежных высокопроизводительных компьютеров следующего поколения	114
<i>В.В. Лопатенко.</i> Применение методов машинного обучения для аппроксимации экспериментальных характеристик мемристора	116
<i>И.В. Матюшкин, Д.В. Гусейнов.</i> Исследование простой модели мемристора второго порядка при его циклировании.....	120
<i>А.Ю. Морозов, К.К. Абгарян, Д.Л. Ревизников.</i> Имитационное моделирование импульсной нейронной сети с мемристивными элементами в качестве синапсов	123
<i>Е.С. Шамин, Д.А. Жевненко, Ф.П. Мещанинов, В.С. Кожневников, Е.С. Горнев.</i> Поиск начального приближения для задачи экстракции параметров модели мемристора с помощью методов машинного обучения	127
<i>Е.А. Ганыкина, Е.С. Горнев, А.А. Резванов.</i> Исследование термических эффектов в HfO_2 RRAM-структурах в процессе RESET	131
<i>А.В. Ерещенко.</i> Применение алгоритмов машинного обучения для моделирования вольтамперной характеристики мемристора.....	133

6. F. Моделирование структур и свойств композиционных материалов с нанокристаллами, нанокластерами, наноаморфными включениями и т.д..... 137

В.Л. Евдокимов. Моделирование процесса газофазного осаждения и базовых неоднородностей слоев оксида кремния..... 138

A.N. Chibisov, M.A. Chibisova. The response of titanium and tungsten nanowires to mechanical stress: AB INITIO study 141

1. А

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

АКТУАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ СОЗДАНИЯ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ ИНФРАСТРУКТУРЫ ДЛЯ СИНТЕЗА НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ В РАМКАХ ЦИФРОВОЙ ТРАНСФОРМАЦИИ ОБЩЕСТВА

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

*Абгарян Каринэ Карленовна^{1,2},
д.ф.-м.н., г.н.с., зав. отделом ФИЦ ИУ РАН, зав.кафедрой МАИ,
e-mail: kristal83@mail.ru*

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

² *Московский авиационный институт (национальный исследовательский
университет) (МАИ), Россия, 125993, Москва, Волоколамское шоссе, д. 4*

Аннотация. В работе рассмотрены основные аспекты значимости развития высокопроизводительной среды для научных исследований в условиях цифровой трансформации для решения задач синтеза новых материалов с заданными свойствами. Дан анализ опыта ФИЦ ИУ РАН в создании современной высокопроизводительной платформы и ее использовании для научных исследований.

Ключевые слова: исследовательская инфраструктура, синтез новых материалов, гибридная вычислительная архитектура, высокопроизводительный кластер, многомасштабное моделирование, нанoeлектроника, гетероструктура.

Факторы, определяющие значимость высокопроизводительных вычислений в цифровой трансформации

Реализация Стратегии научно-технологического развития России, утвержденная Президентом 1 декабря 2016 г., в соответствии с определенными приоритетами требует развития высокопроизводительной инфраструктуры, предоставляющей условия для проведения эффективных научных исследований как научным коллективам, так и отдельным исследователям [1, 2]. Одной из важнейших задач, решаемых в рамках первого приоритета, является синтез новых материалов с заданными свойствами.

К факторам, определяющим значимость высокопроизводительных вычислений для решения такой задачи, следует отнести [2, 3].

1. Синтез новых материалов с заданными свойствами является стратегически важным направлением инновационного развития в рамках программы цифровой экономики, учитывая низкую инновационную активность России на фоне развитых государств.

2. Успешное решение задач синтеза новых материалов является основой прорывных технологий, необходимых для создания отечественной импортонезависимой электронной компонентной базы.

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

4. Требования создания перспективных комплексов вооружения и военной техники на отечественной электронной компонентной базе могут быть выполнены только за счет создания новых комплекствующих 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 [1].

7. Необходимость создания высокопроизводительной исследовательской инфраструктуры является стимулом кардинального реформирования системы подготовки специалистов. Так, факультет ВМК МГУ имени М.В. Ломоносова ориентирует программы обучения на подготовку специалистов в областях математического моделирования, систем программирования и методов анализа больших данных [2].

Последний фактор приобретает сегодня особое значение, так как постановки задач синтеза новых материалов вызывают необходимость применения современных методов математического моделирования, позволяющих адекватно отразить процессы исследуемой системы, применение которых принципиально требует высокопроизводительную вычислительную среду [3]. Речь идет о методах комплексного моделирования, представляющих из себя синтез аналитического, имитационного и натурального моделирования исследуе-

мых процессов. Такие постановки формулировались и ранее, однако условия для их реализации в виде высокопроизводительной вычислительной платформы появились только в последнее время.

При этом следует подчеркнуть, что все виды моделей в рамках комплексного моделирования играют свою роль на различных этапах исследований. Реализация современных методов моделирования предъявляет повышенные требования не только к количественным характеристикам используемой вычислительной среды (производительность, надежность, емкость хранилища данных, процедуры доступа), но и к качественным показателям, характеризующим гибкость организации вычислительного процесса и эффективность использования вычислительных ресурсов.

Другими словами, современные факторы, определяемые потребностями цифровой трансформации общества, определяют актуальность вычислительных систем для научных исследований в виде высокопроизводительной цифровой платформы.

Об опыте ФИЦ ИУ РАН

Для повышения эффективности проведения экспериментальных исследований в интересах цифровой трансформации в ФИЦ ИУ РАН создана современная цифровая платформа для научных исследований [4] как совокупность центра компетенций, высокопроизводительного вычислительного комплекса (ГВБК) и совокупности научных сервисов (аналитических, образовательных, библиотечных, вычислительных, аналитических и др.), которые предоставляют услуги различным сферам деятельности (образование, наука, бизнес, промышленность, государственные структуры).

ГВБК ФИЦ ИУ РАН имеет гибридную вычислительную архитектуру, в которой вычислительные ресурсы предоставляются исследователям в виде традиционных облачных услуг, а также специфических технологий научного сервиса как услуги (RaaS, Research as a Service) [5–7].

На базе ГВБК создан и зарегистрирован центр коллективного пользования (ЦКП) «Информатика» [8], который предоставляет научным коллективам вычислительные ресурсы для проведения научных расчетов в виде облачных сервисов (SaaS, PaaS, RaaS). Реализуемые технологии обеспечивают развертывание всех видов программных комплексов (frameworks) в индивидуальной виртуальной среде docker, on-line доступ пользователей к инструментальным средствам ГВБК, интерактивную и пакетную обработку вы-

числительных заданий научных расчетов, создание личных кабинетов пользователей, а также единую точку входа и вспомогательные сервисы цифровой платформы.

Обоснованы и сформулированы системные решения для проведения исследований с использованием ресурсов цифровой платформы, включая разработку средств многомасштабного компьютерного моделирования физической структуры приборов нанoeлектроники, нейроморфной архитектуры многоуровневых устройств памяти, дефектообразования в композитных материалах и другие [9–11].

Заключение

Развитие высокопроизводительной среды для научных исследований в условиях цифровой трансформации является актуальной задачей. Исторические факты свидетельствуют об огромном внимании руководства СССР к этому направлению, что обеспечивало ведущие позиции страны в развитии вычислительной техники для научных исследований. Большую роль в развитии этого направления сыграли советские ученые (Лебедев С.А., Брук И.С., Берг А.И., Китов А.И. и др.).

В настоящее время ФИЦ ИУ РАН проводит активные исследования и разработки по развитию современной высокопроизводительной платформы для научных исследований в сфере синтеза новых материалов с заданными свойствами на основе многомасштабного математического моделирования.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках проектов 18-29-0391 и 19-29-03051мк.

Литература

1. Zatsarinnyy A.A., Kiselev E.V., Kozlov S.V., Kolin K.K. Information space of the digital economy of Russia. Conceptual foundations and problems of formation // Under the general editorship of A.A. Zatsarinnyy. – М.: FRCCSC RAS, 2018; 236 p.
2. Большое интервью академика РАН И.А. Соколова для электронного периодического издания «Научная Россия». Режим доступа: <https://scientificrussia.ru/partners/rossijskaya-akademiya-nauk/akademik-ran-i-sokolov-vmk-mgueto-bezuslovnaya-vostrebovannost>
3. Зацаринный А.А., Абгарян К.К. Факторы, определяющие актуальность создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках реализации приоритетов научно-технологического развития России. Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2019; 22(4): 298–301.
4. Анатолий Иванович Китов / Под редакцией В. В. Шилова и В. А. Китова. – М.: МАКС Пресс, 2020. – 688 с., 64 отд. с. цв. ил. ISBN 978-5-317-06344-3 <https://doi.org/10.29003/m871.kitov>.

5. Zatsarinnyy A.A., Kondrashev V.A., Sorokin A.A. Algorithms for managing service-oriented processes of deterministic scientific services in hybrid computing environments of digital platforms // Highly Available Systems. Vol. 18. No. 3. 2020. in press.

6. Zatsarinny A.A., Volovich K.I., Kondrashev V.A. Methodological issues of managing scientific services of scientific and educational organizations of the Russian Federation // In the digest: Radar, navigation, communication. Proceedings of the XXIII International Scientific and Technical Conference. In 3 volumes. 2017. P. 7–14.

7. Kondrashev V.A. Architecture of a system for providing services of a digital platform for scientific research // System and Means of Informatics. 2018. V. 28. № 3. P. 131–140.

8. Zatsarinny A.A., Kondrashev V.A., Sorokin A.A. Approaches to the organization of the computing process of a hybrid high-performance computing cluster in the digital platform environment // 5th International Conference on Information Technologies and High-Performance Computing, ITHPC 2019; Computing Center of Far East Branch of the Russian Academy of Science Khabarovsk; Russian Federation; 16 September 2019 through 19 September 2019 // CEUR Workshop Proceedings. Volume 2426 (2019). P. 12–16.

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

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

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

CURRENT PROBLEMS OF CREATION OF RESEARCH INFRASTRUCTURE FOR SYNTHESIS OF NEW MATERIALS IN THE FRAMEWORK OF THE DIGITAL TRANSFORMATION OF SOCIETY

*Zatsarinnyy Aleksander Alekseevich, chief Researcher, doctor of engineering, deputy Director, Federal Research Centre "Computer Science and Control" (FRC CSC RAS), of the Russian Academy of Sciences (FRC CSC RAS). Vavilov st. 44, 119333 Moscow, Russia,
e-mail: alex250451@mail.ru.*

*Abgaryan Karine Karlenovna, chief Researcher, doctor of physical and mathematical Science, head of the department Federal Research Centre "Computer Science and Control" (FRCCSC), of the Russian Academy of Sciences, (FRC CSC RAS). Vavilov st. 44, 119333 Moscow, Russia, head of the department Moscow Aviation Institute (National Research University), Volokolamskoe shosse, 4, 125993, Moscow, Russia (MAI),
e-mail: kristal83@mail.ru*

Abstract. The article discusses the main aspects of the importance of developing a high-performance environment for scientific research in the context of digital transformation for solving the problems of synthesizing new materials with desired properties. An analysis of the experience of the FRC IU RAS in the creation of a modern high-performance platform and its use for scientific research is given.

Keywords: research infrastructure, synthesis of new materials, hybrid computing architecture, high-performance cluster, multiscale modeling, nanoelectronics, heterostructure.

<https://doi.org/10.29003/m1508.MMMSEC-2020/13-21>

МЕТОДЫ ОБЕСПЕЧЕНИЯ НАДЕЖНОСТИ СОВРЕМЕННЫХ СБИС

Горнев Е.С.,

*член-корреспондент РАН, д.т.н., профессор,
зам. руководителя приоритетного технологического направления
по электронным технологиям, АО «НИИМЭ»
e-mail: egornev@niime.ru*

Аннотация. Обеспечение надежности работы радиоэлектронной аппаратуры и систем на ее основе рассмотрены как комплексная научно-техническая проблема, решение которой зависит от многих факторов. Отмечено, что надёжность изделия закладывается при его разработке, обеспечивается при его производстве и поддерживается при его эксплуатации. Проанализированы основные направления мировых исследований по обеспечению надёжности. Большое внимание уделено методам моделирования, включая создание электронных двойников и новой виртуальной реальности, позволяющей проникать в сущность СБИС.

Ключевые слова: сверхбольшая интегральная схема (СБИС), надежность радиоэлектронной аппаратуры, моделирование, электронный двойник.

Обеспечение надежности радиоэлектронной аппаратуры и систем на её основе является комплексной научно-технической проблемой, решение которой зависит от многих факторов, влияющих на надежность аппаратуры и систем в течение их жизненного цикла, как на уровне исходных материалов и компонентов, так и на уровне производственно-технологических процессов, процессов проектирования, технического обслуживания и эксплуатации [1]. В промышленной технологии производства интегральных микросхем (ИС) вопросы обеспечения их качества и надежности являются

одними из основных. Особенно остро эти проблемы стоят при производстве микросхем для бортовых систем ракетно-космических и авиационных систем. Вместе с тем, и автомобильная электроника, и медицинская техника также имеют потребность в продолжительном сроке службы и высокой надежности [2]. Методология обеспечения высокого качества и надежности микросхем развивалась совместно с развитием микроэлектроники.

Мы уже отмечали, что «выработка общих принципов организации технологического процесса и разработка оптимальной, технологически реализуемой и относительно дешевой СБИС с субмикронными размерами невозможны без единого комплексного подхода, включающего в себя рассмотрение всей совокупности проблем» [3]. И этот подход в полной мере реализуется в промышленной технологии микроэлектроники, которая «направлена на решение проблем создания, оптимизации и совершенствования процессов с целью наиболее полного выполнения ожиданий» [3].

Надёжность изделия закладывается при его разработке, обеспечивается при его производстве и поддерживается при его эксплуатации.

Интегральные микросхемы в процессе своего жизненного цикла, как и большая часть электронной компонентной базы (ЭКБ) обладает U-образным распределением отказов, имеющих три периода – период ранних отказов или период приработки, период нормальной работы или период постоянной интенсивности отказов и периодом старения.

Прирабочные отказы являются, как правило, результатом наличия у объекта дефектов и дефектных элементов, надежность которых значительно ниже требуемого уровня. Для этого периода характерны низкие проценты выхода годных, экспериментальная разработка параметров процесса, подробная характеристика и идентификация дефектов. Дефектов на этой стадии множество, преобладают систематические повреждения и сильно сосредоточенные дефекты, и от средств и методов обнаружения контроля требуется сравнительно низкая производительность, но более высокой чувствительности. Если на надёжность испытываются микросхемы до завершения периода ранних отказов или приработки, то их шансы выдержать испытания уменьшаются. **Отсюда возникает вопрос о рисках и целесообразности проведения в настоящее время опытно-конструкторских разработок по форме А с одновременной постановкой на производство разрабатываемого изделия.**

Для необслуживаемых космических систем вопросы сложности и получения необходимых рабочих характеристик решаются, в том числе, ограничением числа используемых изделий и сопутствующим этому очень малым влиянием их отказов. Ограничению количества микросхем наиболее способствует применение современных СБИС «систем на кристалле» (СнК), содержащих десятки разнообразных блоков, разработка каждого из которых требует специфических навыков и большого опыта. Но, с другой стороны, выход из строя такой микросхемы может повлечь за собой значительно больше проблем, чем при выходе из строя микросхемы меньшей степени интеграции. Отсюда и повышение требований к надёжности СБИС типа «систем на кристалле».

Микросхема состоит из трех частей – транзистора, контактов и межсоединений. Транзистор располагается в нижней части структуры и служит переключателем. Межсоединения, расположенные поверх транзистора, состоят из тонких схем медной разводки, передающих сигнал от одного транзистора к другому. На каждом новом технологическом уровне межсоединения становятся все более компактными, что приводит к нежелательным резистивно-емкостным задержкам.

Дефекты, влияющие на выход годных и надежность, взаимосвязаны. Любой дефект, способный привести к снижению выхода годных, является и потенциальной угрозой надежности. Анализ отказов показывает, что большинство дефектов, влияющих на надежность, связаны с технологическим процессом. Ввиду того, что дефекты, воздействующие на выход годных и надежность, имеют одну и ту же первопричину, **увеличение выхода годных за счет снижения дефектов будет повышать и надежность.**

Выход годных зависит от таких основных факторов, как дефекты окружающей среды, статистический разброс параметров элементов ИС и технологического процесса, и надёжности функционирования инфраструктуры обеспечения производства – оборудования, микроклимата, энергообеспечения и т.д. Математически общий выход годных определяется как произведение функций вероятностей бездефектности создания изделия, включая его проектирование; воспроизводимости изделия при изготовлении; и надежности функционирования инфраструктуры обеспечения технологического процесса.

В начале фазы исследований и разработок процесса дефекты имеются в большом количестве и они могут появиться в любом ме-

сте по всей площади пластины. Дефекты будут встречаться гораздо реже по мере того, как процесс вступает в стадию роста выхода годных, однако эти дефекты все еще могут создавать достаточно много электрических неисправностей, влияющих на надёжность микросхем [4]. При организации производства всегда есть переходной период к стабильному выпуску – период обучения. Он связан с подготовкой производства, отладкой оборудования, подготовкой персонала и отработкой техпроцесса. На стадии обучения (освоения) выход годных повышается до 80 процентов. И особенностью современных СБИС является совмещение приработочного периода у поставляемых на рынок микросхем с периодом обучения.

Взаимосвязь между катастрофическими и скрытыми дефектами вытекает из наблюдения, что те же типы дефектов, что влияют на выход годных, влияют и на надёжность. Два этих типа дефектов различаются по размерам и по месту в приборной структуре, где они обычно возникают [5].

Статистически обоснованное определение надёжности за минимальное время и при минимальных издержках возможно при помощи последовательных испытаний как наиболее эффективное.

При осуществлении поставок высоконадёжных изделий, к которым относятся микросхемы, обычно используются две группы методик обеспечения высокой надёжности.

Первая группа методик – обеспечение высокой надёжности путём испытаний – базируется на предположении, что микросхемы выпускаются с применением стабильного и отлаженного техпроцесса, апробированного с точки зрения надёжности годной продукции, так что достаточно исключить приборы с отклонениями от технологии, подвергнув готовые изделия ряду отбраковочных испытаний и тренировок.

Вторая группа методик – обеспечение высокой надёжности путём контроля техпроцесса изготовления. При этом решение о пригодности выпускаемой продукции для высоконадёжной аппаратуры можно принимать задолго до окончания сборки приборов, а также использовать более информативные методы выявления скрытых дефектов, чем простая тренировка готовых изделий. Для этих методик требуются чувствительные методы операционного контроля технологии, а также методы диагностического неразрушающего контроля.

Лучший способ снизить возможность появления скрытых дефектов – снижение общего уровня случайной дефектности. Это подра-

зумекает разработку стратегий снижения дефектности по нескольким направлениям:

- обеспечение более высокого исходного уровня выхода годных;
- снижение частоты отклонений от стандартных параметров технологического процесса;
- быстрое обнаружение и исправление отклонений от параметров технологического процесса в случае их возникновения;
- отбраковка подозрительных кристаллов с использованием контроля на уровне кристалла.

На начальных этапах развития микроэлектроники переход на новый уровень был возможен с помощью простого масштабирования, но по мере уменьшения норм от 1 мкм и менее, такие переходы стали требовать сложных решений – коренных изменений процесса и оборудования фотолитографии, новых материалов, структур и т.п.

1. Учет факторов масштабирования, отражающих взаимное влияние геометрических размеров и свойств материалов, а также особенностей их интеграции в едином объеме с позиций кристаллохимической, термомеханической, электромагнитной, химической совместимостей, тепловой, электрической, механической стойкости, устойчивости к воздействию агрессивных сред и радиации, а также временной стабильности. Необходимо знать и, соответственно, учитывать размерные эффекты изменения электро-физических и других свойств малых объектов из-за увеличения вклада поверхностной энергии в общую энергию объекта. Это ведёт, например, к увеличению удельного сопротивления, снижению температуры плавления и т.д.

2. Рост задержки в RC-цепочках межсоединений. Уменьшаются как сечение проводников, так и расстояние, между ними, заполненное диэлектриком, и толщина межуровневого диэлектрика. Их влияние на задержку сильно возрастает, т.к. задержка в транзисторе уменьшается, а в межсоединениях возрастает из-за увеличения отношения их длины к площади сечения. Требуется увеличение уровней разводки с ростом сопротивления межсоединений и уменьшение емкости C за счёт новых материалов межуровневых и внутриуровневых диэлектриков с как можно более низкой электрической проницаемостью. И в этих случаях даже небольшие вариации в допуске по размеру или допуске на выравнивание, возникающие в силу многочисленных взаимодействий слоев литографии,

могут привести к значительным колебаниям в сопротивлении межсоединений, что ограничивает эксплуатационные характеристики транзистора.

3. Обеспечение приемлемого значения сигнал/шум.

4. Обеспечение контроля электромиграции медных проводников с помощью барьерных слоёв, блокирующих диффузию.

Но есть и другие проблемы:

- пленки меньше 25 нм трудно растить, также необходимо искать компромисс между скоростью роста и качеством пленок;
- туннельные эффекты;
- вертикальное масштабирование приводит к увеличению полей (вследствие увеличения концентрации примесей и уменьшения размеров), а значит к уменьшению пробойных напряжений. Латеральное масштабирование приводит к увеличению разогрева микросхем вследствие тепловых потерь (уменьшается поверхность, с которой идет излучение тепла);
- уменьшается емкость конденсаторов, что нежелательно для устройств оперативной памяти, в которых информация хранится в виде зарядов. При уменьшении размеров толщина прослойки диэлектрика d должна уменьшаться даже быстрее, чем размеры пластин конденсатора, чтобы поддержать неизменной емкость. Однако при уменьшении размеров зазора между пластинами в конденсаторе становится возможным туннелирование электронов через диэлектрический барьер. Избежать столь нежелательного уменьшения толщины диэлектрического слоя позволяют новые материалы с большой диэлектрической проницаемостью ϵ (high-k materials);
- избыточный разогрев микросхем.

Обеспечение надежности СБИС является комплексной научно-технической проблемой, решение которой зависит от многих факторов, влияющих на надежность аппаратуры и систем в течение их жизненного цикла, как на уровне исходных материалов и компонентов, так и на уровне производственно-технологических процессов, процессов проектирования, технического обслуживания и эксплуатации.

Мировые исследования по обеспечению надёжности ведутся по следующим основным направлениям:

- моделирование, проектирование, схемотехнические решения и тестирование высоконадежных систем-на-кристалле;

- надежность подзатворных изолирующих слоев транзисторов с высоким диэлектрической проницаемостью (high-k gate dielectrics);
- надежность металлических затворов (metal gate) у MOSFET/FinFET транзисторов;
- надежность медных межэлементных соединений и соединений с низким сопротивлением (copper/low-k interconnects);
- надежность монтажных контактов и соединений компонентов систем-на-кристалле.

Моделирование физических процессов в интегральных схемах и микросистемах позволяет оценить влияние различных внутренних и внешних факторов на соответствующие температурные и электрические параметры, определяющие надежность и помехозащищенность компонентной базы. К таким параметрам относятся:

- температурная зависимость напряжения смещения;
- температурная нестабильность напряжения смещения;
- миграция носителей;
- случайные ошибки из-за высокоэнергетических частиц;
- электрический пробой диэлектрика;
- другие, которые необходимо учитывать при моделировании надежности и последующем проектировании микросхем.

Моделирование температурной нестабильности напряжения смещения – важного фактора надежности современных СБИС, использующих изолирующие слои с высокой (high-k) диэлектрической проницаемостью. Причина нестабильности – высокая вероятность активации электронов в «электронных ловушках» диэлектриков, что приводит к их воздействию на положительное смещение на затворе. Моделирование таких эффектов имеет большое значение для будущих поколений запоминающих устройств, в которых надежность систем будет зависеть от поведения одиночных электронов и дефектов в наноструктурах.

Моделирование надёжности систем – на-кристалле, включает:

- анализ стабильности параметров электромиграции носителей;
- температурный анализ (приобретает особую важность при использовании активных компонентов, у которых эффект собственного нагрева структуры транзистора оказывает значительное влияние на процессы электромиграции).

Требуются модели определения фиксированных величин электромиграции при изменении температуры, в т.ч. с использованием

модели оценки непрерывных изменений миграции в линиях металлизации при градиентном изменении температуры окружающей среды и внутренних компонентов микросхемы;

- анализ влияния статического электричества – статическое электричество вызывает такие нежелательные явления, как пробой активной зоны перехода, расплавление межэлементных соединений, возникновение паразитных наводок и т.п. Комплексный анализ должен также включать также параметров соединительных линий электропитания), шины и линий передачи сигналов, электростатических параметров внутренних соединений между функциональными элементами системы-на-кристалле и внешних соединений кристалла микросхемы;

- анализ влияния горячих носителей – инжекция горячих носителей является одной из важных причин постепенного снижения надежности функционирования и сокращения срока жизни полупроводниковых компонентов, поскольку она изменяет пороговые напряжения и рабочие токи в полевых транзисторах; требуются модели, учитывающих более тонкие процессы на субмикронном и наноразмерном уровнях, позволяющие проанализировать все процессы генерации и взаимосвязи горячих и более «холодных» носителей, а также их влияние на деградацию характеристик в транзисторах с разной длиной затвора.

Электронные двойники СБИС

Необходимо будет создать новую виртуальную реальность, дающую возможность проникновения в сущность СБИС. Специалист сможет войти в виртуальный мир трехмерных объектов, и «увидеть» как формируются транзисторы, емкости и межсоединения с конкретными параметрами. Увидеть проводник с электрическими перекрестными связями и помехами, как прокладывается его трасса в сторону приемлемого местоположения. При этом будет понятно, как топология формирует электрическую схему СБИС и влияет на её электрическое поведение. Экстракция топологических элементов и синтезирование топологии затем станет в большей степени похожа на сборку трехмерных «пазлов».

Другой областью, в которой виртуальная реальность могла бы оказаться полезной является выявление аномалий в работе СБИС по сравнению с ожидаемым функционированием. Этот «виртуальный мир», в котором можно переходить между представлениями проекта и кремниевыми реализациями, представляемый такими сред-

ствами, как растровые электронные, ИК и акустические микроскопы, электронно-лучевые и оптические зонды и автоматическое тестовое оборудование, может значительно упростить понимание поведения при влиянии различных внешних и внутренних факторов.

Литература

1. McPherson J.W. (Ed.), Reliability Physics and Engineering – Time-To-Failure Modeling, Springer, 2013.
2. Ober, Holly. A Faster Way to Fail. UCR Today, June 12, 2018: <https://ucrtoday.ucr.edu/54083>.
3. Горнев Е.С. Промышленная технология микроэлектроники, «Электронная техника. Серия 3. Микроэлектроника», вып. 2 (174), 2019, с. 42–53.
4. Горнев Е.С. Разработка и внедрение промышленной субмикронной технологии СБИС. Диссертация на соискание ученой степени доктора технических наук, М., 2000 г.
5. <https://electroiq.com/2018/03/process-watch-baseline-yield-predicts-baseline-reliability/>

METHODS FOR ENSURING THE RELIABILITY OF MODERN ULSI

Gornev E.S.

*Corresponding Member of RAS,
doctor of Technical Sciences,
deputy head of the priority technological area
for electronic technologies of MERI JSC
e-mail: egornev@niime.ru*

Abstract: Ensuring the reliability of radio electronic equipment and systems based on it is considered a complex scientific and technical problem, the solution of which depends on many factors. It is noted that the reliability of the product is laid down in its development, provided in its production and maintained in its operation. The main directions of world research to ensure reliability are analyzed. Much attention is paid to the methods of modeling, including the creation of electronic twins and a new virtual reality that allows you to penetrate into the essence of ULSI.

Keywords: ultra large-scale integration (ULSI), reliability of electronic equipment, modeling, electronic twin.

ИНТЕРФЕЙСЫ НАУЧНЫХ СЕРВИСОВ СИСТЕМЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ЦИФРОВОЙ ПЛАТФОРМЕ

Кондрашев Вадим Адольфович,

к.т.н., заместитель директора,

VKondrashev@frccsc.ru, +7(499)135-43-20¹

Денисов Сергей Анатольевич,

начальник ЦКП «Информатика»,

SDenisov@frccsc.ru, +7(499)135-43-20¹

¹ *ФИЦ ИУ РАН, г. Москва*

Аннотация. В работе рассматриваются вопросы интеграции научных сервисов материаловедения цифровой платформы с использованием системного интерфейса. Формулируются требования к системному интерфейсу, а также предлагается архитектура системного интерфейса интеграции научных сервисов цифровой платформы.

Ключевые слова: научный сервис, цифровая платформа, облачные вычисления, система интеграции, системный интерфейс.

Системный интерфейс цифровой платформы для научных исследований в области материаловедения должен обеспечить информационное взаимодействие с сервисами и наборами справочных данных цифровой платформы в ходе заказа научных сервисов, предназначенных для моделирования новых материалов, а также обмена исходными данными и результатами выполнения научного сервиса в том числе в ходе междисциплинарных исследований.

Единая информационная среда цифровой платформы [1] подразумевает наличие инструментов сопряжения комплекса научных сервисов для реализации основных функций системного интерфейса, которые обычно связывают с выдачей и приемом информации, управлением передачей данных, согласованием источника и приемника информации.

В соответствии с подходом предложенным в [2] единая информационная среда цифровой платформы формируется как сервис-ориентированный комплекс на основе технологии облачных вычислений, виртуализации (контейнеризации) вычислительных ресурсов, микросервисных архитектур, обеспечивающий системные интерфейсы для эффективной интеграции компонентов комплекса, включая пользовательские сервисы.

Основными функциональными компонентами платформы являются:

- каталог исследования;
- каталог заявок на участие в исследовании;
- каталог результатов;
- каталог услуг (научных сервисов).

Центральным компонентом цифровой платформы научных исследований является каталог исследований, хранящий информацию об исследованиях (планируемых, проводимых, завершенных).

На основе каталога исследований обеспечивается выполнение следующих функций платформы:

- управление поиском и отображением систематизированной информации об исследованиях;
- управление процессом создания и обработки заявок на проведение исследования, включая поиск и предоставление списка текущих заявок на исследование, согласование требований заявок на исследование между заказчиком и исполнителем;
- согласование плана и условий проведения исследования, включая использование научной инфраструктуры и научных сервисов;
- получение информации о ходе и результатах исследования, проведенных экспертизах;
- получение информации о потребленных ресурсах.

Введение каталога заявок на участие в исследовании обеспечивает формирование и управление заявками на участие в исследованиях. Каталог содержит карточки заявок на участие в исследовании, создаваемые потенциальным исполнителем с указанием информации, требуемой Заказчиком для отбора Исполнителя.

Каталог результатов накапливает информацию о результатах исследования для использования их в других работах, для оценки результативности исследователей, для автоматизации процессов отчетности по исследованию.

Каталог услуг содержит описание научных сервисов организаций – исследовательских работ, выполняемых по квазидетерминированным (параметризованным) планам (методикам, технологическим картам).

Центральный компонент архитектуры цифровой платформы – микросервисные приложения, обеспечивающие решение целевых задач платформы, функционирующие в виртуальной контейнерной среде облачных вычислений. Основное взаимодействие компонентов платформы осуществляется в контейнерной среде исполнения

гибкой интеграции с использованием элементов системного интерфейса API, обеспечивающей децентрализованную, многокомпонентную интеграцию.

Для взаимодействия с пользовательскими информационными системами, не работающими с веб-API с стиле REST [3] или gRPC, предусматривается возможность шлюзования по технологии «точка-точка». Пользовательские информационные системы, функционирующие на основе интеграционных решений ESB [4], позволяют разработать адаптер для подключения к системному интерфейсу цифровой платформы. Для сервис-ориентированных информационных систем предоставляется возможность получить доступ к системному интерфейсу цифровой платформы, разместив на средствах платформы специализированный шлюз, согласующий правила интеграции пользовательской системы и цифровой платформы.

Проведение научных исследований с использованием современных информационных технологий является многогранной проблемой, включающей в себя вопросы организации взаимодействия ученых, использование научного оборудования, библиотек, баз данных, проведение исследований в различных организациях, другие аспекты научной и организационной деятельности.

Парадигма цифровой платформы предоставляет новые возможности организации процессов научного исследования.

Основной функцией цифровой платформы является обеспечение процессов подготовки и проведения исследований за счет формализации сценариев взаимодействия исследователей, поставщиков (источников) исходных данных, потребителей результатов. Механизмы поддержки каталогов заявок, исследований, научных сервисов и результатов позволяют реализовывать бизнес-процессы взаимодействия ученых при выполнении научных исследований. Взаимодействие компонентов и смежных систем строится на основе REST, формата обмена данными JSON (JavaScript Object Notation). С появлением парадигмы микросервисной архитектуры стал формироваться архитектурный подход облегченной (lightweight) интеграции [5].

Основными свойствами гибкой интеграции являются:

- контейнерная среда интеграции – каждая интеграция приложений использует преимущества многослойной архитектуры микросервисов, выполняется отдельными контейнерами со своей средой выполнения, настроенной на эту интеграцию;

– децентрализованная интеграция – интеграционные контейнеры функционируют независимо друг от друга, что повышает надежность функционирования комплексной системы интеграции;

– многокомпонентная интеграция – контейнер интеграции взаимодействует с множеством микросервисов, что повышает гибкость и масштабируемость информационной системы.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-29-03051мк, 18-29-0391.

Литература

1. Зацаринный А.А., Киселев Э.В., Козлов С.В., Колин К.К. Информационное пространство цифровой экономики России. Концептуальные основы и проблемы формирования / Под общей редакцией А.А. Зацаринного. – М.: ФИЦ ИУ РАН, 2018; ООО «НИПКЦ Восход-А», 2018 – 236 с.

2. Кондрашев В.А. Архитектура системы предоставления сервисов цифровой платформы для научных исследований // Системы и средства информатики. 2018. Т. 28. № 3. С. 131–140.

3. Roy Fielding Architectural Styles and the Design of Network-based Software Architectures // University of California. 2000. [Электронный ресурс] – <https://www.ics.uci.edu/~fielding/pubs/dissertation/top.htm> (дата обраш. 11.09.2020).

4. Kim Clark Microservices, SOA, and APIs: Friends or enemies? // IBM developerWorks, 2016. [Электронный ресурс] – Режим доступа: https://developer.ibm.com/depmodels/cloud/tutorials/1601_clark-trs/ (дата обраш. 11.09.2020).

5. Kim Clark, Tony Curcio, Nick Glowacki Agile integration architecture // IBM, 2018. 73 p. [Электронный ресурс] – Режим доступа: <https://www.ibm.com/downloads/cas/J7E0VLDY> (дата обраш. 11.09.2020).

INTERFACES OF SCIENTIFIC SERVICES OF A NEW MATERIALS MODELING SYSTEM ON A DIGITAL PLATFORM

V.A. Kondrashev, S.A. Denisov

Abstract. The paper discusses the integration of material science services of a digital platform using a system interface. Based on the functional structure of the integration of scientific services of the digital platform presented in the work, which are particularly effective in interdisciplinary research, the requirements for the system interface are formulated.

Keywords: scientific service, digital platform, cloud computing, integration system, system interface.

ОПЫТ ФИЦ ИУ РАН В ПРЕДОСТАВЛЕНИИ ОБЛАЧНЫХ СЕРВИСОВ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ ДЛЯ ЗАДАЧ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ

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

Волович Константин Иосифович,
к.т.н., старший научный сотрудник,
KVolovich@frccsc.ru, +7(499)135-43-20¹,

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

¹ ФИЦ ИУ РАН, г. Москва

Аннотация. В статье представлены результаты научных исследований Федерального исследовательского центра «Информатика и управление» РАН по предоставлению облачных сервисов высокопроизводительных вычислений в области материаловедения.

Ключевые слова: цифровая платформа, высокопроизводительные вычисления, облачные сервисы.

Для повышения эффективности проведения экспериментальных исследований в интересах цифровой трансформации в ФИЦ ИУ РАН создана современная цифровая платформа для научных исследований. Она представляет собой совокупность центра компетенций, в котором концентрируются знания в конкретной области, высокопроизводительного вычислительного комплекса и комплекса научных сервисов (аналитических, образовательных, библиотечных, вычислительных, аналитических и др.), которые предоставляют услуги различным сферам деятельности (образованию, науке, коммерции, промышленности, государственным структурам) 0, 0, 0.

Особое внимание уделяется исследованиям по многомасштабному моделированию для синтеза материалов с заданными свойствами 0, 0, которые направлены на разработку алгоритмов машинного обучения и методов управления большими данными для решения задач квантово-механического моделирования. Использование нейросетевых алгоритмов позволяет с высокой точностью находить решение

уравнения Шредингера в интересах эффективного решения задач расчета электронной плотности при заданной конфигурации атомов, а также поиска атомной структуры, минимизирующей энергию системы. Выполняются работы в области полупроводникового материаловедения, высокоскоростного взаимодействия твердых тел (внедрение) и моделирования свойств композитных материалов с дефектами. Применяются параллельные вычисления на гибридных программных комплексах. Результаты теоретического моделирования верифицируются по экспериментальным данным.

Высокопроизводительный вычислительный комплекс (ГВБК) ФИЦ ИУ РАН 0, 0 имеет гибридную вычислительную архитектуру, в которой вычислительные ресурсы предоставляются исследователям в виде традиционных облачных услуг в режимах программных (SaaS), платформенных (PaaS) и инфраструктурных (IaaS) сервисов, а также с помощью специфических технологий предоставления исследователям научного сервиса как услуги (RaaS, Research as a Service) 0.

Созданная в ФИЦ ИУ РАН цифровая платформа активно задействуется в рамках научных программ сотрудников ФИЦ ИУ РАН и их коллег из других академических институтов. Для решения задач материаловедения в ГВБК развертываются облачные среды для интегрированных систем моделирования ABINIT, VASP, Quantum ESPRESSO, LAMMPS, MEEP, MPB, OpenFOAM. Возможности развертывания программных сред не ограничиваются приведенным перечнем, что позволяет проводить в ГВБК практически любые научные и научно-практические расчеты.

На базе ГВБК создан и зарегистрирован ЦКП «Информатика», целью которого является предоставление научным коллективам, ученым, предприятиям, другим заинтересованным пользователям современных высокоэффективных вычислительных ресурсов для решения широкого класса прикладных и фундаментальных научных и технических задач 0. ЦКП предоставляет научным коллективам вычислительные ресурсы в виде облачных сервисов (SaaS) для проведения научных расчетов на базовом ПО, облачных сервисов PaaS для развертывания всех видов программных комплексов (frameworks) в индивидуальной виртуальной среде docker, а также on-line доступ пользователей к инструментальным средствам ГВБК, интерактивную и пакетную обработку вычислительных заданий научных расчетов, личный кабинет пользователя научных вычислительных сервисов.

Реализация перечисленных принципов осуществляется за счет использования облачных технологий, технологий виртуализации, научных сервисов 0.

В зависимости от требований к вычислительной среде пользователь получает либо базовый набор утилит и программных библиотек, либо виртуальную среду на базе технологии контейнеров. Базовый набор утилит и программных библиотек дает возможность пользователю разрабатывать, отлаживать и выполнять прикладные задачи с использованием программного обеспечения. Для этого на вычислительных узлах ЦКП установлено следующее программное обеспечение: операционная система (Red Hat Enterprise Linux), программный стек для работы с графическими ускорителями (Nvidia Cuda/Cupti/cuDNN), среда разработки (Python/ Python3), программные средства для машинного обучения (TensorFlow), модуль распараллеливания программ (Open MPI) и система контейнерной виртуализации (Docker).

Возможность формирования пользователем собственной вычислительной среды средствами виртуализации обеспечивает инвариантность программного обеспечения различных пользователей по отношению к программной среде цифровой платформы, а также параллельное выполнение научных и экспериментальных задач материаловедения и других направлений фундаментальной и прикладной науки.

Описанный выше способ предоставления вычислительных ресурсов как облачного сервиса относится к облачной услуге типа PaaS, когда облачный провайдер предоставляет программно-технические ресурсы для развертывания собственных приложений пользователей.

Преобразование готовой пользовательской вычислительной среды в облачный сервис дает возможность предоставления облачной услуги типа RaaS (RaaS – Research as a Service). Разработанная программная среда, предназначенная для решения научной задачи материаловедения, может быть преобразована в базовый контейнер. В этом случае пользователи облачного сервиса могут получать готовое программное обеспечение RaaS, загружать исходные данные и проводить научные расчеты на основе предметно-ориентированной программы, не проводя разработки и настройки программного обеспечения.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов № 18-29-03100, 18-29-0391.

Литература

1. Zatsarinny A.A., Kondrashev V.A., Suchkov A.P. The system of scientific services as a relevant component of scientific research // Systems and Means of Informatics. 2019. V. 29. № 1. P. 25–40.
2. Zatsarinny A.A., Kondrashev V.A., Sorokin A.A. Approaches to the organization of the computing process of a hybrid high-performance computing cluster in the digital platform environment // CEUR Workshop Proceedings ITHPC 2019 – Short Paper Proceedings of the 5th International Conference on Information Technologies and High-Performance Computing. 2019. P. 12–16.
3. Zatsarinny A.A., Kondrashev V.A., Sorokin A.A., Denisov S.A. Methods of research services consolidation // News of higher educational institutions. Materials of electronic equipment. 2019;22(4)
4. Абгарян К.К. Многомасштабное моделирование работы многоуровневых элементов памяти, применяемых для создания нейроморфных сетей // Материалы I международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. МММЭК-2019». – М.: МАКС Пресс (2019). С. 53–56.
5. Абгарян К.К. Информационная технология построения многомасштабных моделей в задачах вычислительного материаловедения // Издательство «Радиотехника», «Системы высокой доступности». 2018. Т. 15. № 2. С. 9–15.
6. 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.
7. Волович К.И., Шабанов А.П., Мальковский С.И. Конвергентные вычисления в гибридном высокопроизводительном вычислительном комплексе // Системы высокой доступности. 2020. Т. 16. № 2. С. 22–32. DOI: 10.18127/j20729472-202002-02.
8. Кондрашев В.А., К.И. Волович Управление сервисами цифровой платформы на примере услуги высокопроизводительных вычислений // Материалы Международной научной конференции. Воронеж, 3–6 сентября 2018 г
9. Regulations of CKP "Computer Science" // Available at: <http://www.frccsc.ru/ckp> (date of application 01.06.2020).
10. Кондрашев В.А. Архитектура системы представления сервисов цифровой платформы для научных исследований // Системы и средства информатики – М.: ТОРУС ПРЕСС, 2018, Т. 28, № 3. С. 131–140.

EXPERIENCE OF FRC CSC RAS IN PROVIDING HPC CLOUD SERVICES FOR MATERIALS SCIENCE

K.I. Volovich, S.A. Denisov, V.A. Kondrashev

Abstract. The article presents the results of scientific research of the Federal Research Center "Computer Science and Control" of the Russian Academy of Sciences in field of providing of cloud services for material science.

Keywords: digital platform, HPC, cloud service.

ОЦЕНКА ЗАГРУЗКИ ГИБРИДНОГО ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО КОМПЛЕКСА ПРИ ВЫПОЛНЕНИИ ЗАДАЧ МОДЕЛИРОВАНИЯ В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

Волович Константин Иосифович,
к.т.н., старший научный сотрудник,
KVolovich@frccsc.ru, +7(499)135-43-20¹

ФИЦ ИУ РАН, г. Москва

Аннотация. Статья посвящена методикам расчета и оценке эффективности функционирования гибридных вычислительных систем при решении задач материаловедения. В статье предлагается метод расчета значения величины загрузки с использованием пиковых значений производительности комплекса. Анализируются результаты и качество функционирования облачных научных сервисов высокопроизводительных вычислений с помощью roofline модели.

Ключевые слова: гибридная архитектура, эффективность, научный сервис, облачный сервис, графический ускоритель, междисциплинарные исследования.

Задачи моделирования в материаловедении, решаемые с помощью высокопроизводительных вычислительных средств, являются особенно ресурсоемкими и требовательными к вычислительным ресурсам. Такие программные системы как ABINIT, VASP, Quantum ESPRESSO, LAMMPS, MEEP, MPB, OpenFOAM для качественного выполнения моделирования требуют наличия специализированных ускорителей вычислений (графических ускорителей). Актуальной задачей при эксплуатации высокопроизводительного вычислительного комплекса является обеспечение наиболее полной загрузки его ресурсов.

В задаче максимизации загрузки гибридного высокопроизводительного комплекса можно выделить два основных направления $[0, 0]$:

- обеспечение выполнения максимально возможного количества приложений на определенном периоде времени;
- максимально качественное использование ресурсов комплекса приложениями пользователей.

Определение качества загрузки комплекса является важной задачей при эксплуатации, поскольку позволяет планировать предо-

ставление ресурсов, оценивать необходимость модернизации, определять качество предоставляемых услуг.

Как правило, загрузка определяется как отношение метрики (параметра) загрузки к максимально возможному значению данного параметра. Метрика определяется путем измерения или расчета.

Высокая загрузка вычислительного комплекса не означает эффективного использования его ресурсов. Возможна ситуация, когда запрошенные приложением ресурсы не используются и простаивают. В этом случае коэффициент загрузки комплекса может быть высоким, однако качество выполнения заданий – низким.

Для традиционных суперкомпьютеров параметром загрузки может быть количество ядро-часов, которые были предоставлены приложению для выполнения расчетов. Отношение выделенных ядро-часов к максимально возможному является показателем загрузки комплекса. Данные параметры рассчитываются для определенного периода времени и представляют собой интегральный показатель загрузки за данный период.

Для гибридных архитектур, предоставляющих вычислительные ресурсы как сервисы цифровой платформы, такой подход представляется менее показательным, поскольку в гибридном вычислительном комплексе присутствуют ядра различных типов, а задания резервируют ресурсы вычислителя не ядрами, а целиком графическими ускорителями. При этом заказ вычислительных сервисов осуществляется разными научными коллективами, размещающих в вычислительном комплексе моделирующие приложения разных типов, которые требуют различной программной среды и различного состава вычислительных ресурсов.

Предлагаемая методика позволяет учесть эту особенность. Оценка загрузки определяется путем сравнения запрашиваемого приложениями и максимально возможного количества операций с плавающей точкой за единицу времени.

Использование расчетной пиковой производительности вычислительных узлов позволяет оценить требуемый приложениями объем вычислительных операций, однако не позволяет судить о том, насколько эффективно используются ресурсы вычислительного комплекса.

Поэтому при эксплуатации вычислительного комплекса полезно производить оценку качества функционирования пользовательских приложений и выдавать рекомендации пользователям по оптимиза-

ции приложений. Так же на основе анализа качества использования кода могут изменяться приоритеты при предоставлении вычислительных облачных услуг цифровой платформы научных исследований.

Качество использования ресурсов вычислительного комплекса приложением полезно представлять с использованием так называемой Roofline модели [3].

Модель позволяет показать производительность компонентов алгоритма (процедур и циклов) в условиях естественных ограничений вычислительной системы – производительности памяти и пиковой производительности вычислительного блока. Причем, в зависимости от использованной технологии могут устанавливаться различные границы. Так, производительность памяти для RAM и кешей разного уровня является различной. Поэтому при условии использования приложением разных технологий работы с памятью технологические ограничения производительности различаются. Аналогично, производительность вычислительных блоков ограничивается возможностями технологии: скалярные вычисления, векторизация и т.д. Оценка эффективности выполнения вычислений может проводиться с использованием различного рода вычислительных тестов [4].

В этих условиях организация вычислительного процесса в гибридных высокопроизводительных комплексах должна быть направлена, с одной стороны, на обеспечение возможности одновременного исполнения разнотипных систем моделирования в материаловедении, часто требующих создания вычислительных сред, не совместимых между собой. С другой стороны, должны разрабатываться методы по оптимизации загрузки вычислительного комплекса, позволяющий максимально использовать возможности вычислительной инфраструктуры по выполнению математических расчетов.

Задачи первого направления решаются с за счет использования технологий виртуализации и применения облачных сервисов.

Решение задач второго направления возможно за счет применения методов и подходов, которые позволяют определять априори требуемые задачами вычислительные ресурсы и на основе данной информации планировать загрузку и выполнение заданий гибридного высокопроизводительного вычислительного комплекса [5].

Построение интуитивно понятных графических Roofline моделей позволит пользователям определять «узкие места» в собственном

программном коде и коде систем моделирования и выбирать пути оптимизации использования вычислительных ресурсов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов № 18-29-03100 и 18-07-00669.

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. Абрамов С.М., Лилитко Е.П. Состояние и перспективы развития вычислительных систем сверхвысокой производительности // Информационные технологии и вычислительные системы Москва 2013. № 2. С. 6–22.
3. Williams S., A. Waterman, D. Patterson. Roofline: an insightful visual performance model for multicore architectures // Communications of the ACM. Vol. 52, # 4, 2009, p. 65–76. Association for Computing Machinery, New York, NY, USA.
4. NAS Parallel Benchmarks (NPB) // // [Электронный ресурс] – Режим доступа: <https://www.nas.nasa.gov/publications/npb.html> (дата обращения 14.09.2020).
5. 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. T. 793. С. 80–94.

ESTIMATION OF THE WORKLOAD OF A HYBRID COMPUTING CLUSTER IN TASKS OF MODELING IN MATERIALS SCIENCE

K.I. Volovich

Abstract. The article is devoted to methods of calculation and evaluation of the effectiveness of the functioning of hybrid computing systems. The article proposes a method of calculating the value of the workload using peak values of the cluster performance. The results and the quality of the functioning of cloud scientific services of high-performance computing using the roofline model are analyzed.

Keywords: hybrid architecture, efficiency, scientific service, cloud service, graphics accelerator, interdisciplinary research.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР

Уварова Ольга Владимировна¹,

*м.н.с. ФИЦ ИУ РАН,
e-mail: olga25v@gmail.com*

Уваров Сергей Игоревич¹,

*м.н.с. ФИЦ ИУ РАН,
e-mail: seruv25@gmail.com*

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

Аннотация. В работе описывается модель, позволяющая получать значения потенциальной энергии кристаллических структур с применением методов машинного обучения. Разработанная модель была обучена на данных, рассчитанных с помощью потенциалов Терсоффа и Морзе с использованием параметров, подобранных для Si, Ge, C, Al, W, Cu, Fe.

Ключевые слова: кристаллические структуры, потенциальная энергия структуры, потенциал Терсоффа, потенциал Морзе, параметры потенциала, машинное обучение, модель стекинга.

Введение

Молекулярно-динамический подход активно применяется для моделирования различных процессов, происходящих в кристаллических структурах: возникновении дефектов, появлении вакансий, дивакансий и др. Начальное состояния кристаллической структуры, которое используется в качестве отправной точки в процессе молекулярно-динамического моделирования, определяется с помощью квантово-механических расчетов. Такие расчеты, основанные на теории функционала электронной плотности, дают возможность предсказать значения метрических параметров кристаллических структур в определенный момент времени. Однако, проводить моделирование систем, состоящих из тысяч и миллионов атомов с помощью квантово-механического моделирования проблематично, так как такой подход является вычислительно затратным и занимает очень много времени. Возможность проведения быстрых и высокоточных расчетов метрических параметров, а также изучение их изменений во времени для систем, состоящих более чем из 1000 атомов, появилась в результате применения методов молекулярной динамики

с использованием потенциалов межатомного взаимодействия. При моделировании кристаллических структур с ковалентным типом химической связи в ряде случаев используется потенциал Терсоффа. Подбор параметров данного потенциала для структуры Si позволил реализовать молекулярно-динамические расчеты и смоделировать поведение кластеров точечных дефектов в Si [1].

Постановка задачи и метод решения

Одной из важнейших характеристик структуры является значение ее потенциальной энергии. Энергия, в зависимости от атомных координат между соседними атомами в структуре, вычисляется как:

$$E = \sum_i E_i = \frac{1}{2} \sum_i V_{ij},$$

где V_{ij} – потенциальная энергия взаимодействия между частицами i, j .

Расчет энергии – ресурсоемкая, но необходимая процедура, использующаяся в том числе для получения значений таких величин, как объемный модуль упругости, постоянная решетки, модуль сдвига и др. В данной работе рассматривается подход, способный сочетать точность, близкую к точности квантово-механических расчетов и вычислительную эффективность моделей, основанных на использовании эмпирических потенциалов за счет применения методов машинного обучения. С помощью обученной модели возможно провести расчет энергии взаимодействия атомов в структуре, а в дальнейшем предсказать отдельные ее свойства.

Было проведено исследование на следующих структурах, имеющих кубические решетки: Si, Ge, C, Al, W, Cu, Fe. Для каждой рассматриваемой структуры атомов были известны координаты ее атомов $A(x_1; y_1; z_1)$ и $B(x_2; y_2; z_2)$, значение постоянной решетки (a), а также значение энергии взаимодействия пар атомов (E). Исходные значения энергии взаимодействия были получены с помощью расчетов, проводимых с использованием потенциалов Терсоффа и Морзе. Параметры для потенциалов Терсоффа и Морзе, участвующие в расчете энергии взаимодействия пар атомов, были получены благодаря разработанному программному комплексу подбора параметров потенциалов межатомного взаимодействия [2].

Для использования методов машинного обучения данные были модифицированы следующим образом:

- все категориальные признаки были переведены в числовые;
- с помощью однострочного кодирования был зафиксирован тип взаимодействующих атомов;

- по координатам взаимодействующих атомов было рассчитано расстояние между взаимодействующими атомами;

Был сформирован набор, состоящий из около 40 000 пар взаимодействующих атомов (табл. 1).

Таблица 1

x_1	y_1	z_1	x_2	y_2	z_2	r	E	a	Si	Ge	C	Al	Cu	W	Fe
0,0000	2,7154	2,7154	-1,3577	4,0730	1,3577	2,3516	-2,3150	5,4307	1	0	0	0	0	0	0
2,8300	2,8300	5,6600	4,2450	4,2450	7,0750	2,4509	-1,9251	5,6600	0	1	0	0	0	0	0
1,6282	0,0000	1,6282	0,0500	0,0500	0,0500	2,2324	-1,0361	3,2563	0	0	0	0	0	1	0
0,0000	2,9098	0,0000	0,0200	-0,0200	-0,0200	2,9299	-0,3982	2,9098	0	0	0	0	0	0	1
0,0000	1,7820	1,7820	0,8910	0,8910	0,8910	1,5433	-3,6850	3,5640	0	0	1	0	0	0	0
2,0224	2,0224	0,0000	-0,0350	0,0000	0,0000	2,8849	-1,1742	4,0447	0	0	0	1	0	0	0
3,6204	3,6204	3,6204	0,0000	0,0000	-0,0200	6,2822	-6,3141	3,6204	0	0	0	0	1	0	0

Матрица объектов-признаков состояла из следующих значений: координаты взаимодействующих атомов ($x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2$), расстояние между атомами (r), постоянная решетки структуры (a), указание на взаимодействующие атомы (Si, Ge, C, Al, Cu, W, Fe). Вектор правильных ответов состоял из значений энергий взаимодействия атомов (E). Чтобы признаки имели примерно одинаковую дисперсию, данные были нормированы.

Так как обученный алгоритм может сильно меняться в зависимости от обучающей выборки, использовалась кросс-валидация – разбиение данных на несколько одинаковых частей для поочередного использования каждой части в качестве тестовой выборки, а оставшейся части – в качестве обучающей выборки. В качестве обучающей модели была построена модель стекинга, особенностью которой является использование различных алгоритмов в качестве признаков объектов. В качестве метаалгоритма, принимающего на вход признаковые значения первичных моделей, было выбрано решающее дерево. В качестве первичных моделей были выбраны: логистическая регрессия, случайный лес и алгоритм ближайших соседей.

В процессе формирования модели был определен оптимальный параметр числа соседей $n_neighbors$ для алгоритма ближайших соседей. Также был подобран минимальный параметр $n_estimators$ для случайного леса, после которого качество обучения не менялось значительным образом. Для оценки качества работы алгоритма использовались метрики средней квадратичной ошибки и средней абсолютной ошибки.

Полученные результаты и выводы

В работе была показана модель, позволяющая получать значения потенциальной энергии кристаллических структур. Был создан алгоритм обучения модели и проведена оценка ее качества. В результате, на обучающей выборке значение средней квадратичной ошибки составило 0,00017, а средней абсолютной ошибки – 0,0036. Применение методов машинного обучения позволяет рассчитывать значение энергии взаимодействия пар атомов без использования вычислительно нагруженных алгоритмов, что позволит увеличить скорость работы молекулярно-динамического моделирования, а также повысить эффективность при решении различных задач, связанных с изучением структурных свойств новых материалов.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 19-29-03051 мк и проект № 19-08-01191 А. При проведении расчетов использовался вычислительный кластер ФИЦ ИУ РАН.

Литература

1. Abgaryan, K. K., Mutigullin, I. V., Uvarov, S. I., & Uvarova, O. V. Multiscale Modeling of Clusters of Point Defects in Semiconductor Structures // CEUR Workshop Proceedings. – 2019. – P. 43–51.
2. Abgaryan K.K., Volodina O.V., Uvarov S.I. Mathematical modeling of point defect cluster formation in silicon based on molecular dynamic approach // Modern Electronic Materials. – 2015. – Т. 1. – № 3. – P. 82–87.
3. Vorontsov K., Mathematical Learning Methods on Precedents, Course of Lectures, 2006.
4. Rupp M. et al. Fast and accurate modeling of molecular atomization energies with machine learning //Physical review letters. – 2012. – Т. 108. – № 5. – C. 058301.
5. Faber F. et al. Crystal structure representations for machine learning models of formation energies // International Journal of Quantum Chemistry. – 2015. – Т. 115. – № 16. – C. 1094–1101.

APPLICATION OF MACHINE LEARNING METHODS FOR STUDYING OF CRYSTAL STRUCTURES PROPERTIES

*Uvarova Olga Vladimirovna, Junior Researcher, Federal Research Centre "Computer Science and Control" (FRCCSC) of the Russian Academy of Sciences, (FRC CSC RAS). Vavilov st. 44, 119333 Moscow, Russia
e-mail: olga25v@gmail.com*

*Uvarov Sergey Igorevich, Junior Researcher, Federal Research Centre "Computer Science and Control"(FRCCSC) of the Russian Academy of Sciences, (FRC CSC RAS). Vavilov st. 44, 119333 Moscow, Russia
e-mail: seruv25@gmail.com*

Abstract: In this work was described a model that allows obtaining the potential energy values of crystal structures using machine learning methods. The developed model was trained on the data obtained with the Tersoff and Morse potentials, using the selected parameters for Si, Ge, C, Al, W, Cu, Fe.

Keywords: crystal structures, potential energy of structure, Tersoff potential, Morse potential, potential parameters, machine learning, stacking model.

УДК 004.051

10.29003/m1513.MMMSEC-2020/38-42

МЕТОДИЧЕСКИЕ ПОДХОДЫ К ОЦЕНКЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ЦЕНТРА КОЛЛЕКТИВНОГО ПОЛЬЗОВАНИЯ «ИНФОРМАТИКА» ПРИ РЕШЕНИИ ЗАДАЧ СИНТЕЗА НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ

Зацаринный Александр Алексеевич,
*д.т.н., профессор, заместитель директора¹,
AZatsarinny@ipiran.ru, +7 (499) 137-60-31*

Волович Константин Иосифович,
*к.т.н., старший научный сотрудник¹,
kvolovich@frccsc.ru, +7 (499) 135-43-20*

Денисов Сергей Анатольевич,
*начальник ЦКП «Информатика»¹,
sdenisov@frccsc.ru, +7 (499) 135-43-20*

Ионенков Юрий Сергеевич,
*к.т.н., старший научный сотрудник¹,
UIonenkov@ipiran.ru, +7 (499) 135-41-89*

Кондрашев Вадим Адольфович,
*к.т.н., заместитель директора¹,
vkondrashev@frccsc.ru, +7 (499) 135-43-20*

¹ ФИЦ ИУ РАН, г.Москва

Аннотация. Разработаны методические подходы к оценке эффективности высокопроизводительной платформы для научных исследований на примере центра коллективного пользования (ЦКП) «Информатика», созданного в ФИЦ ИУ РАН. Представлена общая характеристика ЦКП «Информатика» включая основные характеристики его научного оборудования, организацию работы ЦКП и его возможности. На этой основе разработан перечень показателей эффективности ЦКП, учитывающий его специфику и характеризующий различные аспекты деятельности (общесистемные, технические, результативность). Предложены методы расчета частных и обобщенных показателей эффективности ЦКП, а также общий методический подход к оценке его эффективности. Отмечены особенности выбора показателей эффективности ЦКП при решении задач синтеза новых материалов.

Ключевые слова: центр коллективного пользования; эффективность; показатель; услуга; научный сервис.

Введение

Одним из приоритетных направлений развития научно-технологического комплекса России являются центры коллективного пользования (ЦКП). Основной задачей ЦКП является обеспечение широкого спектра научных исследований с использованием имеющейся у организации материально-технической базы, в том числе в интересах третьих лиц.

В рамках деятельности ЦКП представляет интерес оценка качества их функционирования. В настоящее время руководящие документы определяют минимально необходимый перечень показателей качества ЦКП, который включает время загрузки ЦКП (в том числе в интересах третьих лиц), число использующих ЦКП организаций и число публикаций о результатах исследований, полученных с использованием оборудования ЦКП [1].

В настоящей статье методические вопросы формирования перечня показателей эффективности, а также методы их расчета рассматриваются на примере ЦКП «Информатика», созданного в ФИЦ ИУ РАН.

Методические подходы к оценке эффективности ЦКП «Информатика»

Представлена общая характеристика ЦКП «Информатика», представляющего собой гибридный высокопроизводительный вычислительный комплекс, включая основные характеристики его научного оборудования, организацию работы ЦКП и его возможности [2–4].

Показано, что одной из важных задач является выбор и обоснование номенклатуры показателей эффективности, наиболее полно характеризующих ЦКП, которые выбираются исходя из целей и задач ЦКП, а также требований нормативных документов.

Выделены три группы показателей, характеризующих различные аспекты деятельности ЦКП:

- общесистемные показатели;
- технические показатели;
- показатели результативности деятельности.

К общесистемным показателям отнесены такие, которые позволяют описать соответствие структуры ЦКП решаемым задачам, общие характеристики пользователей (внутренних и внешних), штатный состав ЦКП, численность, квалификацию сотрудников ЦКП,

характеристику условий размещения, систем жизнеобеспечения, наличие нормативной и технической документации.

Вторая группа характеризует технические возможности ЦКП, включая состав и тип оборудования, режимы его использования, производительность в различных режимах; характеристику системы хранения данных; временные характеристики выполнения заданий; время загрузки ЦКП; время работы ЦКП в интересах третьих лиц.

Третья группа показателей выделяется для оценки результативности деятельности ЦКП. К таким показателям могут быть отнесены:

- число выполненных с помощью ЦКП научных исследований и прикладных задач;
- число публикаций о результатах исследований с их характеристикой, подготовленных с помощью ЦКП;
- стоимость выполненных работ и услуг ЦКП;
- использование оборудования ЦКП;
- число пользователей ЦКП за период времени с их характеристикой.

В статье также предложены методы расчета частных и обобщенных показателей эффективности ЦКП, а также общий методический подход к оценке его эффективности, в том числе с использованием описанных в научно-технической литературе методов решения многокритериальных задач [5–7].

ЦКП «Информатика» используется при решении задач синтеза новых материалов. Эти задачи требуют больших объемов вычислительных ресурсов, что делает целесообразным применение высокопроизводительных вычислительных комплексов с гибридной архитектурой. При этом современным эффективным решением является использование индивидуальных сред исполнения на основе технологий виртуализации. Использование этих технологий позволяет предоставить пользователю полностью готовую среду для выполнения расчетов.

В этом плане для оценки эффективности ЦКП «Информатика» при решении задач синтеза новых материалов особое значение приобретает первоочередной учет и выбор технических показателей эффективности ЦКП, характеризующих возможности вычислительного комплекса по созданию среды виртуализации (пиковая производительность вычислительной системы, реальная производительность вычислительной системы на специализированных тестах, загрузка оборудования прикладными задачами, эффективность программного кода – показатели производительности компонентов ал-

горитма (процедур и циклов) в условиях естественных ограничений вычислительной системы – производительности памяти и пиковой производительности вычислительного блока).

Выводы

Предложенные в статье методические подходы позволяют оценить эффективность ЦКП «Информатика» и его вклад в научные исследования ФИЦ ИУ РАН и др. организаций, использующих ЦКП.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов № 18-29-03091, 19-29-03051мк.

Литература

1. Постановление Правительства РФ от 17 мая 2016 г. № 429 «О требованиях к центрам коллективного пользования научным оборудованием и уникальным научным установкам, которые созданы и (или) функционируют, функционирование которых обеспечивается с привлечением бюджетных средств, и правилах их функционирования». <https://base.garant.ru/71402960/>.
2. Кондрашев В.А., К.И. Волович. Управление сервисами цифровой платформы на примере услуги высокопроизводительных вычислений // Математическое моделирование и информационные технологии в инженерных и бизнес-приложениях. Материалы Международной научной конференции. Воронеж, 3–6 сентября 2018 г. С. 217–223.
3. Zatsarinny A.A., Kondrashev V.A., Sorokin A.A. Approaches to the organization of the computing process of a hybrid high-performance computing cluster in the digital platform environment // 5th International Conference on Information Technologies and High-Performance Computing, ITHPC 2019; Computing Center of Far East Branch of the Russian Academy of Science Khabarovsk; Russian Federation; 16 September 2019 through 19 September 2019 // CEUR Workshop Proceedings. Volume 2426 (2019). P. 12–16.
4. 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.
5. Зацаринный А.А., А.И. Гаранин, В.А. Кондрашев, К.И. Волович, С.И. Мальковский. Оценка надежности гибридного высокопроизводительного вычислительного комплекса при решении научных задач // Системы и средства информатики – М.: ТОРУС ПРЕСС, 2019, Том 29, № 2, с. 135–147.
6. Ларичев О.И. Теория и методы принятия решений. – М.: Логос, 2007. 392 с.
7. Зацаринный А.А., Ионенков Ю.С. К вопросу оценки эффективности автоматизированных систем с использованием метода анализа иерархий // Системы и средства информатики, 2015. Т. 25. № 3. С. 162–179.

METHODOLOGICAL APPROACHES TO EVALUATING THE EFFECTIVENESS OF THE «CKP «COMPUTER SCIENCE» IN SOLVING PROBLEMS OF SYNTHESIS OF NEW MATERIALS

A.A. Zatsarinny, K.I. Volovich, S.A. Denisov, Y.S. Ionenkov, V.A. Kondrashev

Abstract. Methodological approaches to evaluating the effectiveness of a high-performance platform for scientific research have been developed based on experience of the Shared Research Facilities «CKP «Computer science» of FRC CSC RAS. The general characteristics of the CKP «Computer science» are presented, including the main characteristics of its scientific equipment, the organization of the CKP's work and its capabilities. On this basis, a list of indicators of the efficiency of the CKP has been developed, taking into account its specificity and characterizing various aspects (system, technical, effectiveness) of the activity. Methods are proposed for calculating particular and generalized indicators of the effectiveness of CKP, as well as a general methodological approach to assessing its effectiveness. The features of the choice of performance indicators of CKP in solving problems of synthesis of new materials are noted.

Keywords: the center for collective use; efficiency; indicator; service; scientific service.

УДК 519.6;536;531; 681.2; 681.5; 67.05

<https://doi.org/10.29003/m1514.MMMSEC-2020/42-45>

О РАЗРАБОТКЕ ИНФОРМАЦИОННОЙ СИСТЕМЫ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ АДДИТИВНОЙ ТЕХНОЛОГИИ ПРОИЗВОДСТВА КОМПОНЕНТОВ ЭЛЕКТРОННЫХ ПРИБОРОВ

*Лебёдкин Иван Федорович^{1,2},
аспирант, инженер-программист.
ivan_leb@mail.ru, +7 (985) 895-07-86.*

*Молотков Андрей Андреевич^{2,3},
м.н.с., аспирант, инженер-программист.
karacerr@gmail.com, +7 (967) 095-16-34.*

*Третьякова Ольга Николаевна^{2,3},
в.н.с., к.ф.-м.н, доцент.
tretiyakova_olga@mail.ru, +7 (906) 736-76-69.*

¹ МИРЭА – Российский технологический университет. Россия, 119454, Москва, просп. Вернадского, 78

² ООО «Лаборатория промышленных исследований», НПЦ «Лазеры и аппаратура». Россия, 124498, Москва, Зеленоград, Георгиевский проспект, 5, стр. 1

³ *ФГБОУ ВО Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет) МАИ. Россия, 125993, Москва, Волоколамское шоссе, 4*

Аннотация. Работа посвящена разработке программного комплекса для реализации промышленной технологии селективного лазерного сплавления (SLM – selective laser melting). Разработанный программный комплекс позволяет решать задачи организации эффективного производственного цикла исследования и изготовления технически сложных деталей изделий аэрокосмической, медицинской и машиностроительной отраслей промышленности.

Ключевые слова: технология, лазер, селективное лазерное сплавление, программное обеспечение ПО, моделирование, автоматизация, CAM, CAD.

Введение

Применение аддитивных технологий производства функциональных изделий наиболее востребовано для нужд таких отраслей промышленности как: авиакосмическая, автомобиле- и машиностроение, приборостроение, медицинская техника, то есть там, где существует острая потребность в минимизации сборочных операций и уменьшение числа сборочных единиц, уменьшении массогабаритных характеристик изделия, изготовлении высокоточных изделий и их прототипов в кратчайшие сроки. Быстрое развитие наукоемких аддитивных технологий [1] обуславливает потребность в развитии специализированного программного обеспечения (ПО). Силами Группы компаний «Лазеры и Аппаратура» разработана и создана серия станков МЛ6 [2], реализующая SLM технологию. Для обеспечения её работы разрабатывается программный комплекс для подготовки и выполнения аддитивного производства, позволяющий реализовывать полный технологический цикл изготовления.

Информационная система подбора технологических параметров

Высокая степень кастомизации процесса аддитивного производства предполагает выпуск единичных уникальных деталей либо малых их партий. Поэтому потребность в технологическом эксперименте возникает практически каждый раз при переналадке технологического оборудования для изготовления новой детали. Возникает задача снижения затрат времени и труда на проведение технологических экспериментов. Чтобы минимизировать эти затраты необходимо автоматизировать планирование технологического эксперимента, провести моделирование физических процессов изготов-

ления детали (теплообмен и термонапряженное состояние) [3–5], а также обеспечить накопление и анализ данных экспериментов.

В качестве инструмента подобной автоматизации может служить информационная система (ИС) совместимая как с ПО для подготовки и выполнения аддитивного производства, так и с CNC-системами установок аддитивного производства.

Информационная система (ИС) выполнена в традиционной архитектуре клиент-серверной модели и включает в себя: базу данных, хранящую технологическую информацию, приложение WebApi для доступа к различным набором технологической информации, а также клиентское Web-приложение для контроля и анализа технологической информации.

Для повышения гибкости разработки и взаимодействия между информационной системой и остальными компонентами ПО для подготовки технологических заданий принят подход, при котором фиксированным (но при этом расширяемым) является протокол взаимодействия, а компоненты и конкретные реализации составных частей ИС могут меняться.

На данном этапе база данных технологических параметров дорабатывается для накопления результатов предварительного моделирования тепловых деформаций. Также информационная система подбора параметров сможет брать на себя затратные по вычислительным ресурсам операции моделирования теплообмена в SLM процессах. Для расчёта стоимости и времени изготовления деталей информационная система подбора параметров может выполнять оптимизацию стоимости изготовления деталей.

Таким образом, клиентское приложение не зависит от основной части ИС и может быть изменено для достижения лучшего пользовательского опыта и для адаптации под определенные нужды каждого конкретного производства, такие как, например, вывод отчетности, мониторинг работы технологического оборудования, контроль за работой над технологическими экспериментами.

Выводы

В ходе работ проведено имитационное моделирование процесса SLM в первом приближении, создана информационная система, предназначенная для накопления, анализа и использования данных моделирования и натурных экспериментов в целях экономии затрат времени и ресурсов на НИОКР и промышленное производство высокотехнологических изделий.

Литература

1. Объем отечественного рынка 3D-печати оценивается в шесть миллиардов рублей. 03.10.2018 //3dtoday: [Электронный ресурс]. URL: <https://3dtoday.ru/blogs/news3dtoday/the-size-of-the-domestic-market-of-3dprinting-is-estimated-at-six-bil/> (дата обращения 20.04.2020).
2. Каталог аддитивного оборудования, производимого на территории Российской Федерации. 2019 // МИНПРОМТОРГ России. URL: http://minpromtorg.gov.ru/common/upload/files/docs/katalog_additivity.pdf (дата обращения 20.04.2020).
3. Лебёдкин И.Ф., Молотков А.А., Третьякова О.Н. Математическое моделирование сложного теплообмена при разработке лазерных SLM технологий // Труды МАИ. Электронный журнал. ISSN: 1727-6924, № 101, 2018.
4. Molotkov A.A., Tretiyakova O.N. On possible approaches to visualizing the process of selective laser melting/ Scientific Visualization, 2019. Vol. 11. № 4. P. 1–12.
5. Лебёдкин И.Ф., Молотков А.А., Третьякова О.Н. Разработка промышленной технологии селективного лазерного сплавления // Прикладная физика. 2020. № 3. С. 83–89.

DEVELOPMENT OF AN INFORMATION SYSTEM FOR MODELING ADDITIVE MANUFACTURING TECHNOLOGY FOR ELECTRONIC DEVICE COMPONENTS

I.F. Lebedkin, A.A. Molotkov, O.N. Tretiyakova

Abstract. The paper presents a development of a software package for the implementation of industrial technology of selective laser melting. The developed software package allows us to solve the problems of organizing an effective production cycle for research and manufacturing of technically complex products of the aerospace, medical and engineering industries.

Keywords: technology, laser, selective laser melting, software, modeling, automation, CAM, CAD.

2. В

**ПРОБЛЕМЫ РАЗВИТИЯ
МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ
КВАНТОВОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ
ГЕТЕРОСТРУКТУР**

TRANSITION METAL NITRIDE THIN FILMS DEPOSITED AT CMOS COMPATIBLE TEMPERATURES FOR TUNABLE OPTOELECTRONIC AND PLASMONIC DEVICES

Ryan Bower¹, Daniel A. L. Loch², Andrey Berenov¹, Bin Zou¹, Papken Eh. Hovsepian², Arutiun P. Ehasarian² and Peter K. Petrov¹

¹ Department of Materials, Imperial College London, London, SW7 2AZ, UK

² National HIPIMS Technology Centre – UK, Sheffield Hallam University, Howard St., Sheffield, S1 1WB, UK

Keywords: Plasmonics, High Power Impulse Magnetron Sputtering, CMOS compatible

High quality, plasmonically active binary and ternary transition metal nitride thin films are deposited using High Power Impulse Magnetron Sputtering. The deposition process is CMOS compatible and scalable. The deposition is demonstrated to be possible on a range of industrially relevant substrates and films are spectrally tunable within the wavelength range 325–483 nm.

Plasmonic materials have a wide range of applications, from energy storage and harvesting to biosensing and memory storage devices.^{1–4} However, the archetypal plasmonic materials gold and silver are limited in their applicability, displaying poor thermal stability, limited spectral tunability, and incompatibility with standard CMOS fabrication processes.

Consequently, transition metal nitrides (TMNs), including titanium nitride and niobium nitride have been suggested as viable alternative plasmonic materials. In addition to superior mechanical and thermal properties compared to gold and silver,⁵ TMNs also offer spectral tunability of the plasmonic response, with optical properties dependent on phase, stoichiometry and oxygen impurities.⁶ Broadband spectral tunability is observed in ternary transition metal nitrides and is achieved by varying cation ratios.⁷ Furthermore, TMNs such as titanium nitride are currently used within CMOS compatible fabrication processes as barrier layers and gate metals.^{8–12} However, a significant barrier to the application of transition metal nitrides as plasmonic materials within CMOS processes is the prohibitively high temperatures required for optimised thin film optical behaviour (>400°C).

High Power Impulse Magnetron Sputtering (HIPIMS) can be used to deposit binary and ternary transition metal nitride thin films at CMOS compatible temperatures. HIPIMS utilises high instantaneous powers to produce plasma density of the order of 10^{13} cm^{-3} at the substrate which

activates the deposition process by increasing the ionisation degree of the sputtered flux and the dissociation rate of the reactive gas ions.

In this presentation, we will present the plasmonic characteristics of $\text{Ti}_{(1-x)}\text{Nb}_x\text{N}_y$ thin films deposited via confocal HIPIMS on a range of industrially relevant substrates, including steel, MgO, Si, and glass. The deposition process parameters were above the threshold for achieving high dissociation and ionisation during deposition which allows access to lower substrate temperatures of 300°C, compatible with CMOS fabrication flow. A comparison of the optical properties of co-sputtered ternary transition metal nitrides with multi-layered binary nitrides, as measured by spectroscopic ellipsometry will also be presented.

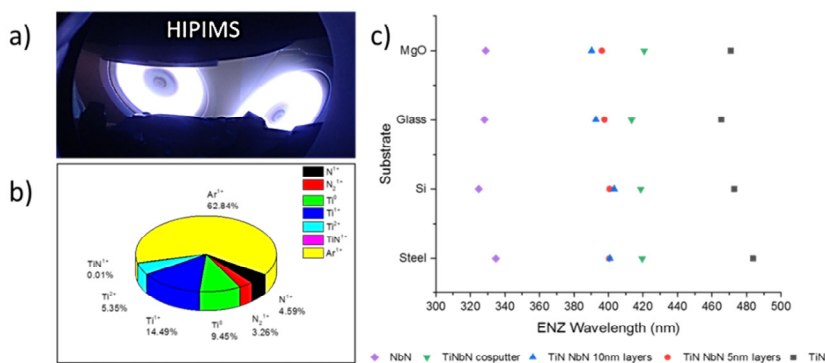


Figure 1:

- a) Photo of the two confocally-arranged HiPIMS cathodes;
- b) Plasma composition analysis. It indicates that within the plasma $\text{N}^{1+}/\text{N}_2^{1+}$ and $\text{Ti}^{1+}/\text{Ti}^0$ ratios exceed 1;
- c) A comparison of the epsilon-near-zero crossover wavelength for binary, ternary and layered films

References

- (1) Zhou, N.; Xu, X.; Hammack, A. T.; Stipe, B. C.; Gao, K.; Scholz, W.; Gage, E. C. Plasmonic Near-Field Transducer for Heat-Assisted Magnetic Recording. *Nanophotonics* 2014, 3 (3), 141–155. <https://doi.org/10.1515/nanoph-2014-0001>.
- (2) Doiron, B.; Mota, M.; Wells, M. P.; Bower, R.; Mihai, A.; Li, Y.; Cohen, L. F.; Alford, N. M. N.; Petrov, P. K.; Oulton, R. F.; Maier, S. A. Quantifying Figures of Merit for Localized Surface Plasmon Resonance Applications: A Materials Survey. *ACS Photonics*. American Chemical Society February 20, 2019, pp 240–259. <https://doi.org/10.1021/acsphotonics.8b01369>.
- (3) Boriskina, S. V.; Ghasemi, H.; Chen, G. Plasmonic Materials for Energy: From Physics to Applications. *Materials Today*. Elsevier October 1, 2013, pp 375–386. <https://doi.org/10.1016/j.mattod.2013.09.003>.

- (4) Fothergill, S. M.; Joyce, C.; Xie, F. Metal Enhanced Fluorescence Biosensing: From Ultra-Violet towards Second near-Infrared Window. *Nanoscale* 2018, 10 (45), 20914–20929. <https://doi.org/10.1039/c8nr06156d>.
- (5) Wells, M. P.; Bower, R.; Kilmurray, R.; Zou, B.; Mihai, A. P.; Gobal-krichenane, G.; Alford, N. M.; Oulton, R. F. M.; Cohen, L. F.; Maier, S. A.; Zayats, A. V.; Petrov, P. K. Temperature Stability of Thin Film Refractory Plasmonic Materials. *Opt. Express* 2018, 26 (12), 15726. <https://doi.org/10.1364/OE.26.015726>.
- (6) Graciani, J.; Hamad, S.; Sanz, J. F. Changing the Physical and Chemical Properties of Titanium Oxynitrides $\text{TiN}_{1-x}\text{O}_x$ by Changing the Composition. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.184112>.
- (7) Kassavetis, S.; Bellas, D. V.; Abadias, G.; Lidorikis, E.; Patsalas, P. Plasmonic Spectral Tunability of Conductive Ternary Nitrides. *Appl. Phys. Lett.* 2016, 108 (26), 263110. <https://doi.org/10.1063/1.4955032>.
- (8) Babicheva, V. E.; Kinsey, N.; Naik, G. V.; Ferrera, M.; Lavrinenko, A. V.; Shalaev, V. M.; Boltasseva, A. Towards CMOS-Compatible Nanophotonics: Ultra-Compact Modulators Using Alternative Plasmonic Materials. *Opt. Express* 2013, 21 (22), 27326. <https://doi.org/10.1364/oe.21.027326>.
- (9) Gosciniak, J.; Atar, F. B.; Corbett, B.; Rasras, M. CMOS-Compatible Titanium Nitride for On-Chip Plasmonic Schottky Photodetectors. *ACS Omega* 2019, 4 (17), 17223–17229. <https://doi.org/10.1021/acsomega.9b01705>.
- (10) Kim, J. D.; Kim, M.; Chan, C.; Draeger, N.; Coleman, J. J.; Li, X. CMOS-Compatible Catalyst for MacEtch: Titanium Nitride-Assisted Chemical Etching in Vapor Phase for High Aspect Ratio Silicon Nanostructures. *ACS Appl. Mater. Interfaces* 2019, 11 (30), 27371–27377. <https://doi.org/10.1021/acsaami.9b00871>.
- (11) Park, D. G.; Cha, T. H.; Lim, K. Y.; Cho, H. J.; Kim, T. K.; Jang, S. A.; Suh, Y. S.; Misra, V.; Yeo, I. S.; Roh, J. S.; Park, J. W.; Yoon, H. K. Robust Ternary Metal Gate Electrodes for Dual Gate CMOS Devices. *Tech. Dig. Electron Devices Meet.* 2001, 671–674. <https://doi.org/10.1109/IEDM.2001.979597>.
- (12) Maradudin, A. A.; Sambles, J. R.; Barnes, W. L. *Modern Plasmonics*; Elsevier Science, 2014.

<https://doi.org/10.29003/m1516.MMMSEC-2020/50-51>

MODELLING OF ENVIRONMENT SENSORS BASED ON THE SURFACE PLASMON RESONANCE EFFECT

M.I. Vasilevskiy

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

Abstract. Surface plasmons (SPs) are collective excitations of free electrons in a conducting medium bounded by a surface or interface with a dielectric. They can originate surface plasmon-polaritons (SPPs), which are evanescent waves involving electron density oscillations and the associated electromagnetic

(EM) field whose amplitude decays exponentially with distance from the surface. SPPs are characterised by a dispersion curve (frequency vs wavevector along the interface) that lies outside of the light cone, so they cannot be excited directly by propagating light; however, it is possible to excite them using the Attenuated Total internal Reflection (ATR) method or a periodic grating. SPs in a confined geometry such as a metallic sphere are localised in space and characterised by discrete frequencies (a single one in the case of sphere, two or three in the case of an ellipsoid). They can be excited directly by propagating light if its frequency coincides with the localised SP frequency, giving rise to the Localized Surface Plasmon Resonance (LSPR). Both SPPs and LSPR are highly sensitive to the dielectric constant of the surrounding media and can be used for environment sensing (e.g. gas molecules that adsorb onto the structure's surface).

In this talk, I shall consider two molecular sensor systems based on the SPPs and LSPR, respectively: (i) graphene nano-ribbon structure with adjustable Fermi energy [1], and (ii) gold nanoparticles (NPs) embedded in a dielectric film [2]. The sensing principles of these structures will be reviewed and the modelling of their observable EM properties and detection characteristics, using mostly semi-analytical methods of electrodynamics, will be described.

[1] D. Rodrigo et al., *Science* 349, 165 (2015)

[2] M. S. Rodrigues et al., *SoftwareX* 12, 100522 (2020)

Keywords: environment sensor, plasmon, graphene, nanoparticle, spectroscopy.

3. С

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

ION BEAM MODIFICATION OF MAGNETIC TUNNEL JUNCTIONS

B.M.S. Teixeira¹, A.A. Timopheev², N.F.F. Caçailo^{1,3}, S. Auffret³, R.C. Sousa³, B. Dieny³, L. Cuchet², J. Mondaud², J.R. Childress², S. Magalhães⁴, E. Alves⁴, N.A. Sobolev^{1,*}

¹ i3N, Departamento de Física, Universidade de Aveiro, Aveiro 3810-193, Portugal.

² Crocus Technology, 3 avenue Doyen Louis Weil, Grenoble Cedex1 BP1505 – 38025, France.

³ Univ. Grenoble Alpes, CEA, CNRS, Grenoble INP, SPINTEC, Grenoble F-38000, France.

⁴ IPFN, Instituto Superior Técnico, Universidade de Lisboa, Bobadela LRS 2695-066, Portugal.

Email: sobolev@ua.pt

Mobile: +351 927 992 332

Аннотация. В работе исследовано влияние бомбардировки высокоэнергетичными ионами на параметры магнитных туннельных переходов на основе CoFeB/MgO, такие как магнитная анизотропия, магнитосопротивление и коэффициент затухания прецессии намагниченности. Моделирование спектров ферромагнитного резонанса проводилось в рамках формализмов Смита-Белджерса и Ландау-Лифшица-Гильберта. Установлен предел флюенса ионов, ниже которого достигается контролируемое изменение магнитной анизотропии при сохранении высокого туннельного магнитосопротивления и магнитной конфигурации перехода.

Ключевые слова: магнитный туннельный переход, ионная имплантация, магнитная анизотропия, туннельное магнитосопротивление.

Magnetic properties of materials and layered structures may be modified by ion irradiation [1–3]. This provides a route for the control of magnetism e.g. in magnetic tunnel junctions (MTJ). We show that irradiation with 400 keV Ar⁺ ions allows obtaining an easy-cone anisotropy with different cone angles in double-MgO free layers of MTJ with an initial perpendicular magnetic anisotropy [4]. The setting of the magnetic easy-cone state in MTJ allows attaining field-free, fast and non-stochastic magnetization switching.

Before applications can be envisaged, however, it is necessary to understand the full extent of effects produced by the irradiation on the interface-controlled parameters of MTJ stacks. Thus we subjected full

MTJ stacks with the layer sequence IrMn/PL/Ru/RL/MgO/FL/Ta/Ru (the PL, RL and FL are the pinned, reference and free layers made of FeCoB) to the same type of irradiation in a wide range of ion fluences [5]. The samples were investigated by ferromagnetic resonance, vibrating sample magnetometry and current-in-plane tunneling techniques. We show that there is an ion-fluence window below ca. 10^{14} Ar⁺/cm² where the modulation of magnetic anisotropy can occur while preserving a large tunnel magnetoresistance (TMR) and stable magnetic configuration of the MTJ. Above 10^{14} Ar⁺/cm² a strong decrease in the saturation magnetization is accompanied by a loss of the interlayer magnetic coupling and of the TMR. The underlying physical processes are discussed. We demonstrate that the layers surrounding the FL play a decisive role in determining the trend of the magnetic anisotropy modulation resulting from the irradiation.

Литература

- [1] C. Chappert et al., Science 80 (1998) 1919.
- [2] I.L. Graff et al., J. Appl. Phys. 103 (2008) 033505.
- [3] V. Höink et al., Appl. Phys. Lett. 86 (2005) 152102.
- [4] B.M.S. Teixeira et al., Appl. Phys. Lett. 112 (2018) 202403.
- [5] B.M.S. Teixeira et al., J. Phys. D: Appl. Phys. 53 (2020) 455003.

ION BEAM MODIFICATION OF MAGNETIC TUNNEL JUNCTIONS

*B.M.S. Teixeira, A.A. Timopheev, N.F.F. Caçilo, S. Auffret,
R.C. Sousa, B. Dieny, L. Cuchet, J. Mondaud, J.R. Childress,
S. Magalhães, E. Alves, N.A. Sobolev*

Abstract. In this work, the effect of bombardment with high-energy ions on the parameters of magnetic tunnel junctions based on CoFeB / MgO, such as magnetic anisotropy, magnetoresistance, and the damping coefficient of magnetization precession, is investigated. The modeling of the ferromagnetic resonance spectra was carried out within the framework of the Smit-Beljers and Landau-Lifshitz-Gilbert formalisms. The ion fluence limit is established, below which a controlled modulation of the magnetic anisotropy is achieved while maintaining a high tunneling magnetoresistance and stable magnetic configuration of the transition.

Keywords: magnetic tunnel junction, ion implantation, magnetic anisotropy, tunnel magnetoresistance.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕЙРОМОРФНЫХ СИСТЕМ

Абгарян Каринэ Карленовна^{1,2,3},

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

e-mail: kristal83@mail.ru

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

² *Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет) (МАИ), Россия, 125993, Москва, Волоколамское шоссе, д. 4.*

³ *Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, физический факультет, ул. Ленинские Горы, д. 1 стр. 2, Москва 119991, Россия*

Аннотация. Рассмотрены вопросы создания математических моделей для разработки и оптимизации работы нейроморфных систем. Представлен многомасштабный подход, основанный на теоретико-множественных представлениях, позволяющий оперативно разрабатывать программное обеспечение с механизмом параллельных вычислений для создания нейроморфных систем

Ключевые слова: нейроморфные системы, металл-оксидные мемристоривные устройства, многомасштабное моделирование, многоуровневые элементы резистивной памяти.

Исследование многомасштабных проблем, связанных с разработкой и оптимизацией нейроморфных систем невозможно без учета основных факторов, играющих ключевые роли в таких задачах. При изучении вопросов, связанных с созданием основ аналоговых нейроморфных систем, необходимо спроектировать многоуровневые элементы резистивной памяти (RRAM)[1,2], позволяющие создать системы с механизмом параллельных вычислений и увеличить плотность интеграции энергонезависимой памяти. На сегодня, одним из наиболее перспективных элементов, лежащих в основе таких систем является мемристор. Конструкция и оптимизация мемристоривных элементов основана на понимании процессов формирования проводящих каналов, знании детальных механизмов переключения между различными состояниями мемристора. В этом отношении важную роль играют методы математического моделирования, позволяющие получить подробную картину происходящих

процессов на разных масштабных уровнях. При изучении проблем, связанных с созданием аналоговых нейроморфных систем ставится задача в рамках одной математической модели провести исследование многомасштабного физического процесса. Сложность создания моделей этого класса связана, с необходимостью учета широкого диапазона пространственно-временных масштабов от уровня химических элементов, квантово-механического уровня, наноуровня и уровня элемента резистивной памяти до уровня формирования нейроморфной сети и логического уровня. В таких случаях наиболее актуальным представляется применение технологии многомасштабного моделирования на основе теоретико-множественного представления физико-математических моделей и использовании информационных структур, сочетающих данные и методы их обработки, представленной в [3–6].

Таблица 1

№ масш. уровня	Обозначение и название базовой модели- композиции	Название масштабного уровня
0	MC_0^1 «АТОМ A_0^i »	Уровень химич элементов
1	MC_1^1 «КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКАЯ ФОРМУЛА» MC_1^2 «КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКАЯ ЯЧЕЙКА»	Квантово- механический уровень
2	MC_2^1 «АТОМНЫЙ КЛАСТЕР-СТАТИКА» MC_2^2 «АТОМНЫЙ КЛАСТЕР-ДИНАМИКА»	Наноуровень
3	MC_3^1 «Модель генерации/рекомбинации ионов кислорода и кислородных вакансий (GR-model)» MC_3^2 «Модель дрейфа-диффузии ионов кислорода (DD-model)» MC_3^3 «Модель силового поля (E-model)» MC_3^4 «Модель переноса электронов (электриче- ского тока) (J-model)» MC_3^5 «Модель теплопереноса (HT-model)»	Уровень элемента резистивной памяти (мемристора)
4	MC_4^1 «Фитинг моделей. ВАХ» MC_4^2 «Схемотехническое представление»	Уровень формирования нейроморфной сети
5	MC_5^1 «Нейросетевое моделирование». Обучение по прецедентам	Логический уровень

В табл. 1 из [3] представлены основные базовые модели-композиции (информационные аналоги физико-математических моделей), задействованные при формировании многомасштабных композиций (аналогов многомасштабных математических моделей), которые используются для решения задачи моделирования многоуровневых элементов памяти в качестве синапсов и разработки программного обеспечения в системах с механизмом параллельных вычислений, необходимых для создания нейроморфных сетей [3].

На рис. 1 дано схематичное изображение одной из возможных реализаций многомасштабной композиции для решения задачи.

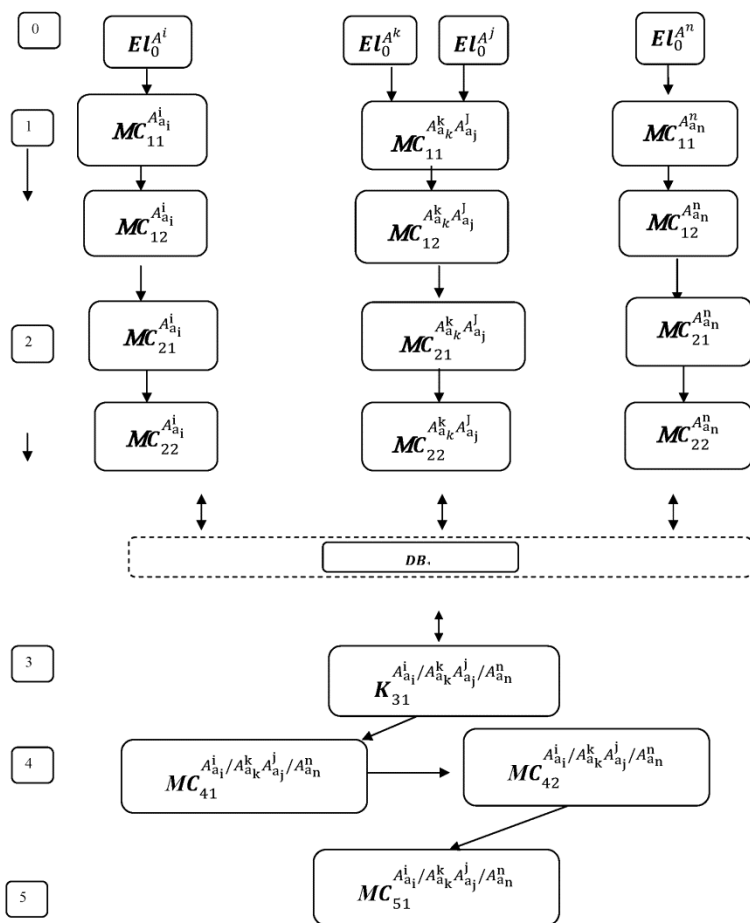


Рис. 1. Схема многомасштабной композиции для решения задачи моделирования многоуровневых элементов памяти для нейроморфных систем [2]

Здесь $K_{31}^{A_{a_1}^i/A_{a_k}^k/A_{a_j}^j/A_{a_n}^n}$ – композиция моделей третьего масштабного уровня, составленная из соответствующих экземпляров базовых моделей-композиций: $MC_3^1, MC_3^2, MC_3^3, MC_3^4, MC_3^5$. Задать химический состав по каждому соединению, входящему, например, в металл-оксидные мемристивные устройства можно с помощью экземпляров базовой модели-композиции MC_0^1 «АТОМ A_0^i »: $El_0^i, El_0^j, El_0^k, El_0^n$.

Такое схематичное представление позволяет оперативно разрабатывать программное обеспечение с механизмом параллельных вычислений и трансформировать его под разные задачи. В частности, не разрушая общей схемы вычислений возможно менять химические составы, рассматриваемых металл-оксидных мемристивных устройств или подбирать другие, более сложные композитные материалы на которых наблюдается филаментарный процесс.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках проекта 19-29-03051мк.

Литература

1. Wong H.-S.P. et al. Metal-oxide RRAM. Proceedings of the IEEE, 2012;100(6):1951–1970. <https://doi.org/10.1109/JPROC.2012.2190369>.
2. Yang J.J., Strukov D.B., Stewart D.R. Memristive devices for computing. Nature Nanotechnology, 2013;8(1):13–24. <https://doi.org/10.1038/nnano.2012.240>.
3. Абгарян К.К., Гаврилов Е.С. Интеграционная платформа для многомасштабного моделирования нейроморфных систем. – Информатика и ее применение 2020. Т.14. Вып. 2. С. 104–110.
4. Абгарян К.К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. – М.: МАКС Пресс. 2017. 284 с.
5. Abgaryan K.K. Optimization problems of nanosized semiconductor heterostructures // Pleiades Publishing, Ltd., Russian Microelectronics. – 2018. – Vol. 47. – No 8. – P. 561–566.
6. Абгарян К.К. Информационная технология построения многомасштабных моделей в задачах вычислительного материаловедения // Издательство «Радиотехника», «Системы высокой доступности». 2018. Т. 15. № 2. С. 9–15.

MATHEMATICAL MODELING OF NEUROMORPHIC SYSTEM

Abgaryan Karine Karlenovna

e-mail: kristal83@mail.ru

Abstract. The paper deals with the creation of mathematical models for the development and optimization of the operation of neuromorphic systems.

A multiscale approach based on set-theoretic representations is presented, which makes it possible to quickly develop software with a parallel computing mechanism for creating neuromorphic systems

Keywords: neuromorphic systems, metal-oxide memristive devices, multiscale modeling, multilevel elements of resistive memory.

УДК 51-73, 538.911

10.29003/m1519.MMMSEC-2020/60-63

ИЗУЧЕНИЕ ПРИЧИН ФОРМИРОВАНИЯ КРИСТАЛЛИТОВ В ПРОЦЕССЕ САМОКАТАЛИТИЧЕСКОГО РОСТА НАНОПРОВОЛОК GaAs С ПОМОЩЬЮ МОДЕЛИРОВАНИЯ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Настовьяк Алла Георгиевна,

*к.ф.-м.н. младший, научный сотрудник¹,
alla@isp.nsc.ru, +7 (383) 333-14-75*

Шварц Наталия Львовна,

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

Емельянов Евгений Александрович,

*младший, научный сотрудник¹,
e2a@isp.nsc.ru, +7 (383) 333-32-86*

Петрушков Михаил Олегович,

*младший, научный сотрудник¹,
maikdi@isp.nsc.ru,
+7 (383) 333-19-67*

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

² *Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия*

Аннотация. С помощью атомистического моделирования методом Монте-Карло изучены возможные причины появления массивных кристаллитов GaAs при самокаталитическом росте нанопроволок GaAs.

Ключевые слова: Монте-Карло, моделирование, нанопроволока, ПЖК.

Введение

Нанопроволоки (НП) на основе материалов $A^{III}B^V$ являются перспективными низкоразмерными объектами для создания современных оптоэлектронных приборов. Одна из самых распространенных

методик для получения вертикальных НП GaAs это самокаталитический рост по механизму пар-жидкость-кристалл. Во всех экспериментах, посвященных самокаталитическому росту НП GaAs, помимо роста вертикальных НП, наблюдаются также формирование таких объектов, как массивные кристаллиты GaAs, наклонные и планарные НП [1-4]. Целью настоящей работы являлось изучение причин формирования кристаллитов GaAs в процессе самокаталитического роста нанопроволок.

Результаты Монте-Карло моделирования

МК-моделирование самокаталитического роста НП GaAs проводилось в программном комплексе SilSim3D на основе кинетической трехмерной решеточной модели [5]. Рассмотрена 5-ти компонентная система: Ga(s), Ga(l), As, As₂, M_f – галлий в твердом и жидком состоянии, мышьяк в атомарной и молекулярной форме и материал пленки-маски, соответственно. Исходная модельная подложка представляет собой кристалл с решеткой типа цинковой обманки, поверхность которого покрыта тонкой пленкой-маской. Размер поверхности равен 120×100 нм. При моделировании самокаталитического роста учитывались следующие процессы: осаждение и испарение атомов галлия и молекул мышьяка, обратимая диссоциация молекул мышьяка $As_2 \leftrightarrow As + As$, диффузия атомов и молекул, травление пленки-маски жидким галлием, диффузия мышьяка в жидком галлии, растворение GaAs в жидком галлии и кристаллизация GaAs на границе раздела жидкость-кристалл.

Традиционно выделяют два режима роста НП: диффузионный (за счет диффузионного сбора вещества с подложки) и адсорбционный (за счет непосредственной адсорбции осаждаемого вещества на каплю катализатора). В настоящей работе показано, что важным условием формирования кристаллитов является ненулевой диффузионный приток мышьяка с подложки. На рис. 1 приведена морфология модельной поверхности в адсорбционном и диффузионном режимах роста при потоках Ga и As₂ 10 и 25 МС/с, соответственно ($T = 620^\circ\text{C}$). Видно, что в адсорбционном режиме вследствие недостатка мышьяка

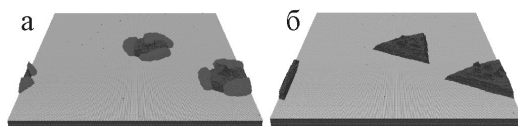


Рис. 1. Морфология модельной поверхности в (а) адсорбционном и (б) диффузионном режиме роста по мышьяку. Светло-серым цветом обозначена пленка-маска, серым – Ga(l), темно-серым – GaAs

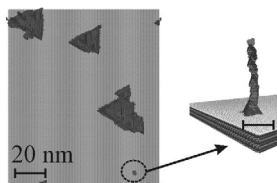


Рис. 2. Модельная поверхность (вид сверху) при самокаталитическом росте НП GaAs. Справа 3D вид нанопроволоки

яка капли катализатора кристаллизуются неполностью (рис. 1а). В диффузионном режиме мышьяка достаточно для полной кристаллизации капель (рис. 1б).

Были найдены модельные ростовые условия, при которых помимо массивных кристаллитов GaAs на ростовой поверхности наблюдалось формирование вертикальных НП: потоки Ga и As₂ для такого роста равны 5 и 25 МС/с, соответственно (рис. 2). На основе ана-

лиза кинетики модельного роста была предложена модель формирования НП и кристаллитов в процессе самокаталитического роста из капель Ga. Модель основана на изменении поверхностной концентрации галлия и мышьяка в процессе роста.

Выводы

Кристаллиты и нанопроволоки возникают на ростовой поверхности не одновременно. Самокаталитический рост НП GaAs это саморегулирующийся процесс, в котором приток галлия и мышьяка к капле катализатора задается не только внешним потоком, но регулируется морфологией поверхности.

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

Литература

1. Bastiman F. et al. Growth Map For Ga-assisted Growth of GaAs Nanowires on Si(111) Substrates by Molecular Beam Epitaxy // Nanotechnology, 2016, 27, 095601.
2. Kupers H. et al. Ga Predeposition for the Ga-assisted Growth of GaAs Nanowire Ensembles with Low Number Density and Homogeneous Length // J. Cryst. Growth, 2017, 459, 43.
3. Tauchnitz T. et al. Decoupling the Two Roles of Ga Droplets in the Self-Catalyzed Growth of GaAs Nanowires on SiOx/Si(111) Substrates // Cryst. Growth Des., 2017, 17, 5276.
4. Matteini F. et al. Impact of the Ga Droplet Wetting, Morphology, and Pinholes on the Orientation of GaAs Nanowires // Cryst. Growth Des., 2016, 16, 5781.
5. Карпов А.Н. и др. Решеточная модель Монте-Карло для изучения процессов формирования наноструктур // Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии, 2014, 15, 388.

STUDY OF THE REASONS OF CRYSTALLITE FORMATION DURING THE SELF-CATALYZED GAAS NANOWIRE GROWTH USING MONTE CARLO SIMULATION

A.G. Nastovjak, N.L. Shwartz, Emelyanov E.A., Petrushkov M.O.

Abstract. The model for the explanation of GaAs crystallite formation during the self-catalyzed nanowires growth was proposed using Monte Carlo simulation.

Keywords: Monte Carlo, simulation, nanowire, VLS.

<https://doi.org/10.29003/m1520.MMMSEC-2020/63-66>

ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛИ ЭФФЕКТИВНОГО КОЭФФИЦИЕНТА ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ДЛЯ НАНОРАЗМЕРНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Абгарян Каринэ Карленовна^{1,2},

*д.ф.-м.н., г.н.с., зав. отделом ФИЦ ИУ РАН, зав.кафедрой МАИ,
e-mail: kristal83@mail.ru*

Колбин Илья Сергеевич¹,

*к.ф.-м.н., н.с. ФИЦ ИУ РАН,
e-mail.ru: iskolbin@gmail.com*

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

² *Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет) (МАИ), Россия, 125993, Москва, Волоколамское шоссе, д. 4.*

Аннотация. В работе проводится построение нейросетевых моделей эффективного коэффициента теплопроводности для гетерогенных наноструктур на примере сверхрешеток GaAs/AlAs, обучение ведется на данных, полученных методом модального подавления.

Ключевые слова: эффективный коэффициент теплопроводности, кинетическое уравнение Больцмана, сверхрешетки, гетерогенные наноструктуры, метод модального подавления.

Введение

Моделирование тепловых свойств наноразмерных структур в настоящий момент является востребованным направлением научных исследований, что связано с постоянно растущей скоростью работы микроэлектронных элементов, которые выделяют все большее количество энергии в виде тепла, которую требуется отводить, чтобы избежать перегрева и потери функциональных свойств устройств [1, 2].

Для построения моделей теплопереноса в наноразмерных гетероструктурах свою эффективность показали методы на основе решения кинетического уравнения Больцмана для фононов [2]. Более детальное моделирование можно получить с использованием методов молекулярной динамики, но это сопряжено с более высокой вычислительной сложностью и нетривиальной задачей подбора оптимального потенциала [3]. Стоит отметить, что применение классических подходов для решения задач теплопроводности на основе закона Фурье для рассматриваемых наноструктур дает неудовлетворительные результаты, т.к. при подобном подходе игнорируются квантовомеханические эффекты материалов, что дает сильное расхождение с экспериментальными данными [2].

Технологии машинного обучения получили сильное развитие в последнее десятилетие, в том числе ведутся активные исследования в применении подобных подходов в задачах материаловедения [4, 5]. При моделировании материалов хочется получить точные характеристики при этом используя при этом минимальное количество эмпирических данных. Подобными свойствами обладают первопринципные методы расчета, к сожалению они обладают существенной вычислительной сложностью, в связи с чем рассматриваемые системы как правило ограничены размером в сотни, иногда тысячи атомов. Было продемонстрировано, что подходы машинного обучения позволило проводить адаптированные первопринципные расчеты для систем из миллионов атомов на существующем в настоящий момент оборудовании за приемлемое время [5].

Постановка задачи и метод решения

Целью настоящей работы является исследование применимости подходов машинного обучения для моделирования эффективного коэффициента теплопроводности наноразмерных гетероструктур, в частности сверхрешеток. Для этого предполагается генерация выборки на основе модели модального подавления [6] и обучения

нейронных сетей на ней. На выходе алгоритма будут получены компактные нейросетевые модели, которые будут сравниваться по точности работы на тестовом наборе данных, для определения лучшей сети.

В качестве примера были построены нейросетевые модели для расчета эффективного коэффициента теплопроводности для бинарных гетероструктур: сверхрешеток GaAs/AlAs с различными периодами слоев. Данные для обучения были сгенерированы в программном пакете AlmaBTE 1.3.2 [1], параметры материалов получены из открытой базы данных проекта. Выборка формировалась для различных комбинаций содержания GaAs и AlAs, толщин пленок, периодов сверхрешетки. Полученный массив данных был разделен на 3 части: 60% для обучения нейросетей, 20% для валидации (для избежания переобучения) и 20% как тестовая выборка, для оценки результирующей точности обученных моделей. Оптимизация нейросетей велась с использованием алгоритма RMSprop с шагом 0.0001 в среде Tensorflow 2.3 [7].

В качестве модели для расчета использовались многослойные нейронные сети прямого распространения. В работе были рассмотрены сети с различным числом скрытых слоев, также проведены сравнения для варьирующего числа нейронов и распространенных активационных функций. Полученные в результате обучения сети сравнивались по среднеквадратичной ошибке и средней абсолютной ошибке на тестовой выборке.

Полученные результаты и выводы

Наиболее высокая точность на тестовой выборке была получена на трехслойной сети с ReLU активационной функцией, с 16 нейронами на каждом скрытом слое: средняя абсолютная ошибка 0.502 Вт/(м К), среднеквадратичная ошибка 0.544 Вт/(м К). Относительная среднеквадратичная ошибка при этом составляет порядка 3–5%, что позволяет говорить о достаточно хорошей точности выбранного подхода.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты 19-29-03051 мк и 18-29-03100 мк). При проведении расчетов использовался вычислительный кластер ФИЦ ИУ РАН.

Литература

1. Carrete J., 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. Хвесьюк В.И., Скрябин А.С. Теплопроводность наноструктур. *Теплофизика высоких температур*, том 55, н. 3, с. 446–471 (2017).

3. Абгарян К.К., Евтушенко Ю.Г., Мутигуллин И.В., Уваров С.И. Молекулярно–динамическое моделирование начальных этапов процесса нитридации поверхности Si(111) в атмосфере NH₃. // *Известия вузов. Материалы электронной техники*. 2015. Т. 18. № 4. С. 267–272.

4. Mortazavi, B., Podryabinkin, E.V., Roche, S., Rabczuk, T., Zhuang, X., & Shapeev, A.V. Machine Learning Interatomic Potentials Enable First-Principles Multiscale Modeling of Lattice Thermal Conductivity in Graphene/Borophene Heterostructures. *Materials Horizons*. – 2020, *Materials Horizons*.

5. Weile Jia et al. Pushing the limit of molecular dynamics with ab initio accuracy to 100 million atoms with machine learning. – 2020, preprint <https://arxiv.org/pdf/2005.00223v1.pdf>.

6. Vermeersch, B., Carrete, J., & Mingo, N. (2016). Cross-plane heat conduction in thin films with ab-initio phonon dispersions and scattering rates. *Applied Physics Letters*, 108(19), 193104.

7. Martín Abadi et al. TensorFlow: A System for Large-Scale Machine Learning. – *Proceedings of the 12th USENIX Symposium on Operating Systems Design and Implementation (OSDI '16)*.

NANOSIZED HETEROSTRUCTURES EFFECTIVE THERMAL CONDUCTIVITY COEFFICIENT MODELING USING MACHINE LEARNING

*Abgaryan Karine Karlenovna, chief Researcher, doctor of physical and mathematical Science, head of the department Federal Research Centre "Computer Science and Control" (FRCCSC), of the Russian Academy of Sciences, (FRC CSC RAS). Vavilov st. 44, 119333 Moscow, Russia, head of the department Moscow Aviation Institute (National Research University), Volokolamskoe shosse, 4, 125993, Moscow, Russia (MAI)
e-mail: kristal83@mail.ru*

Kolbin Ilya Sergeevich, candidate of physical and mathematical science, Researcher, Federal Research Centre "Computer Science and Control" (FRCCSC), of the Russian Academy of Sciences, (FRC CSC RAS). Vavilov st. 44, 119333 Moscow, Russia, e-mail.ru: iskolbin@gmail.com

Abstract. In this work we construct neural network models of the effective thermal conductivity coefficient for heterogeneous nanostructures using GaAs / AlAs superlattices as an example; training sets are obtained from the modal suppression method.

Keywords: effective coefficient of thermal conductivity, Boltzmann transport equation, superlattices, heterogeneous nanostructures, modal suppression method.

АНИЗОТРОПИЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПОТЕНЦИАЛОВ В МЕХАНИЧЕСКИ НАПРЯЖЁННЫХ СТРУКТУРАХ ДИОКСИДА ГАФНИЯ

Константинов Вячеслав Сергеевич,
старший научный сотрудник¹,
vkonstantinov@niime.ru, +7 (495) 229-72-76

Итальянцев Александр Георгиевич,
д.ф.-м.н., начальник отдела¹,
aitalyantsev@niime.ru, +7 (495) 229-72-76

¹АО «НИИМЭ», г. Москва, Зеленоград

Аннотация. В работе исследуется анизотропия свободной энергии Гельмгольца в механически напряженных структурах тетрагональной фазы диоксида гафния с применением расчётов из первых принципов.

Ключевые слова: диоксид гафния, свободная энергия Гельмгольца, расчёты из первых принципов, механические напряжения.

Диоксид гафния известен как перспективное материаловедческое решение в современной микроэлектронике. В настоящее время диоксид гафния применяется не только как диэлектрический слой в микросхемах динамической памяти, но и рассматривается как замена диоксиду кремния в качестве подзатворного диэлектрика и как функциональный слой в сегнетоэлектрической и резистивной памяти [1–3]. Конечные свойства плёнок определяются фазовым составом диоксида гафния, который имеет три практически значимые кристаллографические модификации: моноклинную, полярную орторомбическую и тетрагональную. Метастабильная полярная орторомбическая фаза обуславливает сегнетоэлектрический эффект, а повышенная доля тетрагональной фазы приводит к росту диэлектрической проницаемости.

Тетрагональная фаза диоксида гафния тесно связана с орторомбической, которая формируется именно из тетрагональной фазы $t\text{-HfO}_2$ [4]. Таким образом, $t\text{-HfO}_2$ влияет не только на диэлектрическую проницаемость, но и косвенно – на сегнетоэлектрические свойства плёнок. Требуемые свойства и фазовый состав структур HfO_2 достигаются специальными режимами температурной обработки, изменением стехиометрии плёнок и внесением на границе с электродом механических напряжений, при том важна не только их

величина, но и кристаллографическая плоскость, в которой они вызваны [5]. Таким образом, число возможных комбинаций факторов столь велико, что представляется затруднительным исследование их влияния экспериментальным путем, в связи с чем в настоящей работе указанное исследование выполнено методом математического моделирования.

Поставленная цель решена путём расчёта свободной энергии Гельмгольца свободной и механически напряжённых структур тетрагональной фазы диоксида гафния при температурах до 2000 К с применением расчётов из первых принципов.

Свободная энергия Гельмгольца находилась по формуле:

$$F = U + U^{\text{vib}}(T) - TS \quad (1)$$

где U – энергия основного состояния, $U^{\text{vib}}(T)$ – вклад фононных колебаний при температуре T , T – абсолютная температура, S – конфигурационная энтропия.

Вычисления выполнены в программном комплексе Quantum Espresso v. 6.3 [6] с применением обменно-корреляционного потенциала [7] и псевдопотенциалов гафния и кислорода [8], сетки Монкруста-Пака $4 \times 4 \times 4$ и базиса плоских волн с энергиями до $200 \text{ Ry} = 2720 \text{ эВ}$ на мощностях Гибридного высокопроизводительного вычислительного комплекса (ГВБК) в составе ЦОД ФИЦ ИУ РАН.

На рис. 1 показано, как смещается уровень свободной энергии Гельмгольца в зависимости от характера механических напряжений в тетрагональной фазе относительно ненапряжённой структуры.

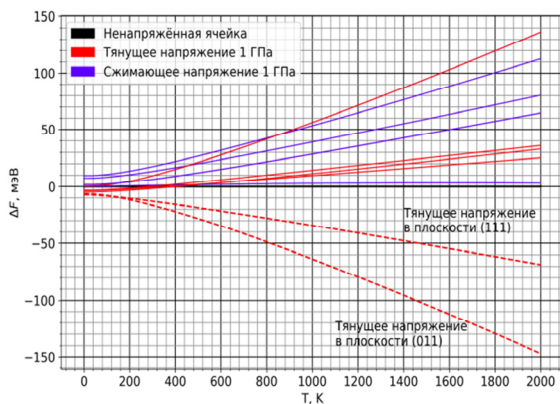


Рис. 1. Смещение уровня свободной энергии напряжениях сжатия и растяжения в различных кристаллографических плоскостях

Как видно из полученных кривых, только тянущие напряжения в плоскостях (011) и (111) уменьшают свободную энергию Гельмгольца и делают структуру более термодинамически стабильной.

На рис. 2 показана зависимость смещения уровня свободной энергии Гельмгольца от величины тянущего механического напряжения в плоскости (011). Как видно из полученного графика, полученная зависимость немонотонна и имеет экстремумы. Кроме того, в диапазоне напряжений от 3 до 7.5 ГПа увеличение температуры сопровождается ростом свободной энергии в то время, как в остальном диапазоне напряжений имеет место обратная связь. Аналогичная зависимость получена для зависимости напряжений в плоскости (111).

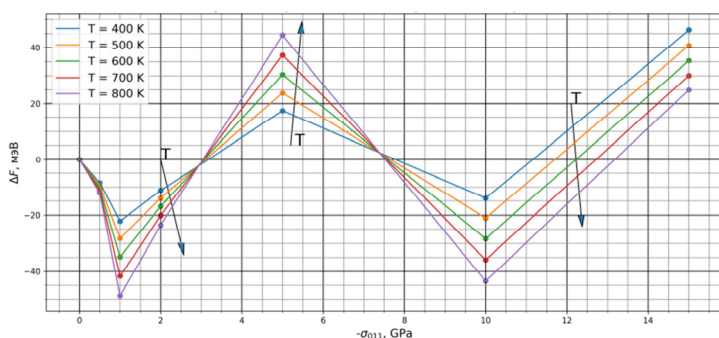


Рис. 2. Смещение уровня свободной энергии при тянущих напряжениях в кристаллографической плоскости (011)

В работе выполнено моделирование механически напряжённых структур тетрагональной фазы диоксида гафния. Показано, что тянущие напряжения в кристаллографических плоскостях (011) и (111) приводят к уменьшению свободной энергии Гельмгольца относительно ненапряженной структуры $t\text{-HfO}_2$. В указанных плоскостях зависимость смещения уровня свободной энергии имеет экстремумы и при фиксированном напряжении из диапазона от 3 до 7–8 ГПа рост температуры увеличивает свободную энергию. При фиксированном напряжении до 3 ГПа или более 8 ГПа рост температуры сопровождается уменьшением свободной энергией Гельмгольца.

Литература

1. Красников Г. Я., Шелепин Н. А. Состояние и перспективы развития технологий и элементной базы СБИС с энергонезависимой памятью // Проектирование систем на кристалле: тенденции развития и проблемы. – 2010. – С. 55–55.

2. Ячейка энергонезависимой памяти на эффекте резистивного переключения в оксидных пленках Hf_xAl_{1-x}O_y / Чуприк А.А., Батурин А.С., Орлов О.М., Горнев Е.С. и др. // Микроэлектроника. – 2014. – Т. 43. – №. 4. – С. 243–243.
3. Ferroelectricity in hafnium oxide thin films / TS Böske, J Müller, D Bräuhäus [и др.] // Applied Physics Letters. 2011. Т. 99, No 10. P. 102903.
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. – P. 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 [и др.] // Applied Physics Letters. 2014. Т. 104, No 7. P. 072901.
6. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials / Paolo Giannozzi, Stefano Baroni, Nicola Bonini [и др.] // Journal of physics: Condensed matter. 2009. Т. 21, No 39. P. 395502.
7. Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple // Physical review letters. – 1996. – Т. 77. – № 18. – P. 3865.
8. Hartwigsen C., Gødecke S., Hutter J. Relativistic separable dual-space Gaussian pseudopotentials from H to Rn // Physical Review B. – 1998. – Т. 58. – № 7. – P. 3641.

ANISOTROPY OF THERMODYNAMIC POTENTIALS IN MECHANICALLY STRESSED HAFNIA STRUCTURES

Viacheslav Konstantinov,
senior scientific researcher¹,
vkonstantinov@niime.ru, +7 (495) 229-72-76

Aleksandr Italyantsev,
PhD, head of department¹,
aitalyantsev@niime.ru, +7 (495) 229-72-76

¹JSC «MERI», Moscow, Zelenograd

Annotation. Anisotropy of Helmholtz free energy in mechanically stressed tetragonal hafnia structures is studied. Ab-initio calculations method is used for the modelling of the structures and estimation of Helmholtz free energy.

Keywords: hafnia, Helmholtz free energy, ab-initio calculations, mechanical stress.

РАЗРАБОТКА ФУНКЦИОНАЛА НА ОСНОВЕ ПОТЕНЦИАЛА ТЕРСОФФА ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ СВОЙСТВ ОКСИДОВ

Гревцев Александр Владимирович¹,

математик,

alex.grevtsev@gmail.com

Абгарян Каринэ Карленовна^{1,2,3},

д.ф.-м.н., доцент, заведующая отделом,

kristal83@mail.ru, +7 (903) 108-03-40

Бажанов Дмитрий Игоревич^{1,2,3},

к.ф.-м.н., стар. преп.,

dima@kintech.ru,

¹ *ФИЦ ИУ РАН, г. Москва*

² *МГУ, г. Москва*

³ *МАИ, г. Москва*

Аннотация. В данной работе представлена разработка функционала программного обеспечения для молекулярно-динамического моделирования структурных свойств оксидов, лежащих в основе работы ячеек резистивной памяти.

Ключевые слова: молекулярная динамика, компьютерное моделирование, параметрическая верификация, потенциал Терсоффа, оксиды.

Введение

Молекулярно-динамическое моделирование применяется в случаях, когда натуральный эксперимент невозможен, очень сложен или требует больших затрат. Данный подход является одним из направлений математического моделирования, который сейчас используется довольно часто. Суть подхода состоит в отслеживании положений атомов в пространстве с течением времени.

Параметрическая идентификация

Чтобы провести молекулярно-динамическое моделирование движения атомов в кристаллической решетке, требуется решить нормальную систему Коши представленную в уравнении (1).

Чтобы вычислить правые части, нужно иметь потенциал с корректными параметрами. Важно понимать, что для моделирования

следует иметь «правильно» работающий потенциал, то есть потенциал способный максимально полно воспроизвести основные свойства системы.

$$\left\{ \begin{array}{l} m_i \frac{dv_i^x}{dt} = -\frac{\partial U_i}{\partial x_i} \\ m_i \frac{dv_i^y}{dt} = -\frac{\partial U_i}{\partial y_i} \\ m_i \frac{dv_i^z}{dt} = -\frac{\partial U_i}{\partial z_i} \\ \frac{dx_i}{dt} = v_i^x, \frac{dy_i}{dt} = v_i^y, \frac{dz_i}{dt} = v_i^z \end{array} \right. \quad (1)$$

В качестве демонстрации работающего функционала программного обеспечения для моделирования свойств оксидов металлов был выбран измененный потенциал Терсоффа, который рассматривался в статьях [1] и [2]. Вид потенциала представлен в уравнениях (2)–(8):

$$U_T = \frac{\sum_i \sum_j u_{ij}}{2} + \sum_i \phi_i \quad (1)$$

$$\phi_i = \left[\frac{(U_{Ei} + A_{Ei})}{2e} \right] q_i + \left[\frac{(U_{Ei} - A_{Ei})}{2e^2} \right] q_i^2 \quad (2)$$

$$u_{ij} = u_{REPi j} + u_{SHTi j} + u_{IONi j} + u_{VDWi j} \quad (3)$$

$$u_{REPi j} = f_{Sij} A_{ij} \exp(-\lambda_{ij} r_{ij}) \quad (4)$$

$$u_{SHTi j} = -f_{Sij} b_{ij} B_{ij} \exp(-\mu_{ij} r_{ij}) \quad (5)$$

$$u_{IONi j} = \frac{f_{Lij} \eta_i \eta_j q_i q_j}{4\pi \epsilon_0 r_{ij}} \quad (6)$$

$$u_{VDWi j} = -\frac{f_{Lij} \sqrt{c_{VDWi} c_{VDWj}}}{r_{ij}^6}, \quad (7)$$

где U_T является энергией системы атомов; u_{ij} – это энергия связи между атомами i и j ; ϕ_i является энергией атома i ; $u_{REPi j}$, $u_{SHTi j}$, $u_{IONi j}$ и $u_{VDWi j}$ – это энергии отталкивания, ближнего порядка взаимодействия (состоит из энергии ковалентной связи и энергии металлической связи), ионной связи и взаимодействия Ван-дер-Ваальса, соответственно. Более подробно вид потенциала описан в статьях [1] и [2]. Данный вид потенциала был выбран нами для изучения свойств кристаллических и поверхностных структур на основе оксидов циркония и гафния, поскольку такие материалы в настоящее время ак-

тивно применяются для построения ячеек резистивной памяти (мемристоров) для вычислительной техники нового поколения.

У потенциалов межатомного взаимодействия существуют индивидуальный набор параметров, значения которых уникальны для каждого материала. Нахождение таких наборов называется параметрической идентификацией потенциала межатомного взаимодействия. Математическая постановка данной задачи приведена в [3] и [4]. Для ее решения требуется найти вектор параметров потенциала, представленный в уравнении (8)(9), при котором достигается минимум функционала, представленного в уравнении (9).

$$\xi = (\xi_1, \dots, \xi_k) \in X, X \subseteq R^k \quad (8)$$

$$F(\xi) = \omega_1 \frac{(f_1(\xi) - \dot{f}_1)^2}{\dot{f}_1^2} + \dots + \omega_n \frac{(f_n(\xi) - \dot{f}_n)^2}{\dot{f}_n^2} \rightarrow \min \quad (9)$$

Следует понимать, что задача параметрической идентификации является многоэкстремальной. Поскольку минимизируемый функционал $F(\xi_1, \dots, \xi_k)$ является сложной функцией с множеством локальных минимумов, необходимо применение предварительного поиска начальных приближений, который можно провести несколькими способами, например, вероятностными методами Монте-Карло или методами сканирования, имитации отжига, применяя генетические алгоритмы и другими. В качестве входных параметров нужно задать число точек (для случайного поиска) или размер сетки по каждой переменной (для метода сканирования). Можно использовать равномерно-распределенные псевдо-случайные числа по каждой из координат в пределах границ области допустимых значений. С помощью данных методов генерируются последовательности случайных начальных приближений в множестве допустимых значений Y . Предполагая, что в результате первого этапа поиска была найдена точка со значениями параметров $(\xi_1, \dots, \xi_k) \in Y$ достаточно близкими к глобальному минимуму, можно перейти к следующему этапу поиска. Здесь применяются методы локальной минимизации – методы Хука-Дживса и гранулярного поиска, который представлен в статье [5].

Верификация полученных параметров потенциала для последующего использования в молекулярно-динамическом моделировании проводилась на основе набора данных, взятых из эксперимента и расчетов на основе первопринципных методов.

Выводы

Таким образом, в данной работе представлен универсальный функционал программного обеспечения, способного производить параметрическую идентификацию и верификацию параметров потенциала. Программный пакет является продолжением работы [6] и написан на языке C++ с использованием методологии объектно-ориентированного программирования и параллельных вычислений. Кроме того, он позволяет в случае необходимости сделать замену потенциала с помощью введения нового класса.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 19-29-03051 мк и проект № 19-08-01191 А.

Литература

1. Iwasaki T. et al. Molecular-Dynamics Analysis of Interfacial Diffusion Between High-Permittivity Gate Dielectrics And Silicon Substrates // Journal of Materials Research, 2004. Vol. 19, no. 4, pp. 1197–1202.
2. Yasukawa A. Using an extended Tersoff interatomic potential to analyze the static-fatigue strength of SiO₂ under atmospheric influence // JSME international journal. Series A, mechanics and material engineering, 1996. Vol. 39, no. 3, pp. 313–320.
3. Абгарян К. К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения // М.: МАКС Пресс., 2017.
4. Абгарян К. К., Посыпкин М. А. Применение оптимизационных методов для решения задач параметрической идентификации потенциалов межатомного взаимодействия // Ж. выч. мат. и матем. физ., 2014. Vol. 54, no. 12, pp. 1994–2001.
5. Powell D. Lattice Dynamics and Parameterisation Techniques for the Tersoff Potential Applied to Elemental and Type III-V Semiconductors // 2006.
6. Abgaryan K.K., Grevtsev A.V. Parametric Identification of Tersoff Potential for Two-Component Materials // Advances in Theory and Practice of Computational Mechanics, 2020. P. 257–268.

DEVELOPMENT OF A FUNCTIONAL BASED ON TERSOFF POTENTIAL TO MODEL THE PROPERTIES OF OXIDES

A.V. Grevtsev, K.K.Abgaryan, D.I. Bajanov

Abstract. This work presents the development of software functionality for molecular dynamics simulation of the structural properties of oxides, which are using for the operation of resistive memory cells.

Keywords: molecular dynamics, computer modeling, parametric verification, Tersoff potential, oxides.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВРЕМЕНИ ДО ПРОБОЯ ПОРИСТОГО ДИЭЛЕКТРИКА В СИСТЕМЕ МЕТАЛЛИЗАЦИИ ИНТЕГРАЛЬНЫХ СХЕМ СОВРЕМЕННОГО ТОПОЛОГИЧЕСКОГО УРОВНЯ

Орлов Андрей Алексеевич^{1,2},

младший научный сотрудник,

aorlov@niime.ru, +7 (495) 229-70-99

Резванов Аскар Анварович^{1,2},

к.ф.-м.н., начальник лаборатории,

arezvanov@niime.ru, +7 (495) 229-70-99

¹ *АО НИИМЭ, г. Зеленоград*

² *МФТИ (НИУ), г. Долгопрудный*

Аннотация. В работе выполняется имитационное моделирование процессов диффузии ионов металлического барьера в low-k диэлектрик между двумя медными линиями.

Ключевые слова: low-k диэлектрик, TDDB.

Введение

Согласно международной дорожной карте для устройств и систем (International Roadmap for Devices and Systems – *IRDS* 2020), временной пробой диэлектрика (*Time-Dependent Dielectric Breakdown – TDDB*) является одной из основных проблем, приводящих к отказу сверхбольших интегральных схем (СБИС) [1]. Временной пробой диэлектрика это механизм отказа в системе металлизации, при котором пробой диэлектрика – результат длительного воздействия электрического поля. Причиной *TDDB* предполагается формирование проводящего слоя ловушек в диэлектрике, соединяющего две близлежащие металлические линии (электроды), что впоследствии приводит к существенному увеличению тока. Считается, что ловушки (центры локализации туннелирующих электронов из электродов) формируются за счет диффузии ионов металлического барьера [2]. Локальная проводимость между медными линиями определяется вероятностью прыжка электрона между ближайшими центрами, которая, в свою очередь, определяется концентрацией ионов металлического барьера $C(x,y,t)$ в рассматриваемом слое [3]. При этом из-за разницы в расстоянии между центра-

ми, полное сопротивление проводящего пути определяется минимумом указанной выше концентрации.

Моделирование временного пробоя диэлектрика

Нормированную минимальную концентрацию ионов металла можно определить, исходя из уравнения диффузии и дрейфа ионов в электрическом поле и граничными условиями на электродах [4]. Представленные на рис. 1 расчеты нормированной концентрации ионов металлического барьера между двумя близлежащими медными линиями (при фиксированном расстоянии между ними) в зависимости от времени проводились в программе *COMSOL Multiphysics®* (значения входных параметров моделирования показаны вверху рис. 1) [3]. Из графика зависимости нормированной минимальной концентрации от времени $C_{norm}^{min}(t)$ можно оценить время до пробоя диэлектрика (*Time to Failure* – TTF) при условии $C_{norm}^{min} \approx 1$ (область определения TTF указана на рис. 2). В данном случае значение TTF составляет примерно 1.2×10^8 секунд (≈ 3.85 лет). Требуемые параметры для моделирования извлекаются из экспериментальных данных диффузии ионов металлического барьера в диэлектрик [6].

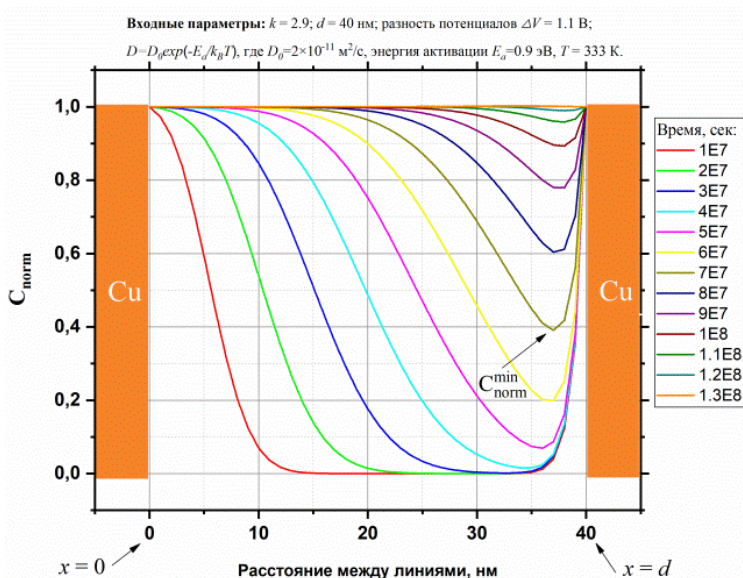


Рис. 1. Распределение концентрации ионов металлического барьера между двумя близлежащими медными линиями

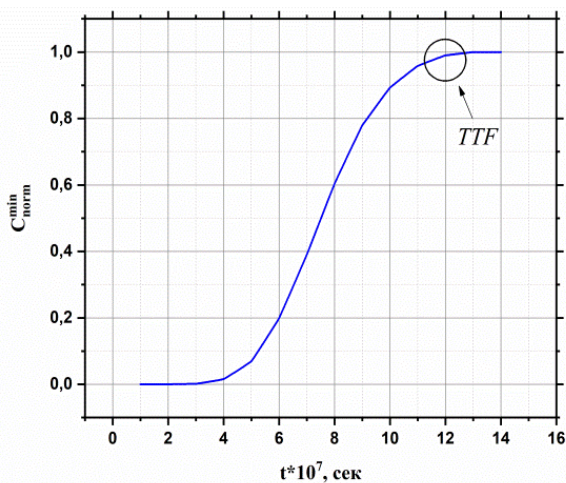


Рис. 2. Определение времени до пробоя (TTF) пористого диэлектрика

Выводы

В данной работе представлен метод оценки времени до пробоя пористого диэлектрика в элементах СБИС, исходя из математической модели распределения ионов металлического барьера в материале между двумя близлежащими медными линиями. Дополнительно, в работе произведены расчеты зависимости TTF от расстояния между двумя близлежащими медными линиями, а также в зависимости от геометрии топологии системы металлизации.

Литература

1. International Technology Roadmap for Semiconductors (ITRS) Interconnect, 2020 Edition. [Online]. Available: <https://irds.ieee.org/editions/2020>.
2. Tan T.L., Gan C.L., Du A.Y., Cheng C.K. *Effect of Ta migration from side-wall barrier on leakage current in Cu/SiOCH low-k dielectrics* // Journal of Applied Physics. – 2009. – V. 106. – № 4. – 043517.
3. Huang X., Sukharev V., Qi Z., Kim T., Tan S. X.-D. *Physics-based full-chip TDDDB assessment for BEOL interconnects* // Proceedings of the 53rd Annual Design Automation Conference 2016 – DAC '16.
4. Groove A.S. *Physics and Technology of Semiconductor Devices*. Hoboken, NJ, USA: Wiley, 1967.
5. Валеев А.С., Красников Г.Я. Технология изготовления внутрикристалльных и межкристалльных межсоединений современных СБИС (обзор, концепция развития) // Микроэлектроника, 2015. – Т. 44. – № 3. – С. 180–201.
6. Kuo Y.-L., Lee H.-H., Lee C., Lin J.-C., Shue S.-L., Liang M.-S., Daniels B.J. *Diffusion of Copper in Titanium Zirconium Nitride Thin Films* // Electrochemical and Solid-State Letters. – 2004. – V. 7. – № 3. – C35.

SIMULATION OF THE TIME-DEPENDENT DIELECTRIC BREAKDOWN IN THE METALLIZATION SYSTEM OF INTEGRATED CIRCUITS OF THE MODERN TOPOLOGICAL LEVEL

A.A. Orlov, A.A. Rezvanov

Abstract. In this work, simulation modeling of processes of the diffusion of ions of a metal barrier in low-k dielectric between two copper lines is performed.

Keywords: low-k dielectric, TDDb.

УДК 548.55

<https://doi.org/10.29003/m1524.MMMSEC-2020/78-82>

ГИДРОДИНАМИКА И МАССООБМЕН В СПЕЦИАЛЬНЫХ КОНСТРУКЦИЯХ КРИСТАЛЛИЗАТОРА

Простомолотов Анатолий Иванович¹,

*д.т.н., доцент, ведущий научный сотрудник ,
prosto@ipmnet.ru, +7 (495) 434-41-53*

Верезуб Наталия Анатольевна¹,

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

¹ *ИПМех РАН, г. Москва*

Аннотация. Рассмотрены два варианта кристаллизатора: в первом раствор подается к центральной части кристалла, во втором имеет место периферийная подача раствора по периметру кристаллизатора, позволяющая создать его закрученное течение. Расчетные модели соответствовали ламинарным и турбулентным режимам течения раствора при выращивании смешанного кристалла KCNSH из смеси двух водно-солевых растворов (кобальтовой KCSH и никелевой KNSH солей).

Ключевые слова: рост кристаллов, водно-солевые растворы, пересыщение, гидромеханика.

Введение

Фундаментальной проблемой выращивания кристаллов из раствора является управление процессами гидродинамики и массообмена в кристаллизаторах специальных сложных конструкций. Эта проблема осложняется тем, что на практике часто выращивают кристаллы из раствора, вовлеченного в турбулентное течение за счет различных перемешивающих устройств, вращения самого кристал-

ла, высокоскоростной подачи раствора в кристаллизатор и т.д. Традиционный способ увеличения скорости роста кристаллов заключается в применении вынужденной конвекции для ускорения массопереноса в растворе. Обычно используется метод реверсивного вращения растущего кристалла. Конвекция может как увеличить скорость роста, так и усилить морфологическую неустойчивость поверхности кристалла, что может ухудшить его качество.

Влияние гидродинамики на кинетику процессов на ростовой поверхности определяется влиянием скорости потока раствора на пересыщение на грани кристалла и зависимостью тангенциальной скорости движения ступеней от пересыщения. Неоднородное распределение пересыщения вдоль грани приводит к флуктуациям скорости ступеней и морфологической неустойчивости поверхности.

Проведен ряд экспериментальных и теоретических [1] исследований с целью определения влияния конвекции на неустойчивость роста грани и образование включений. Показано, что направление течения потока раствора вблизи границы раствор-кристалл в значительной степени влияет на возникновение морфологической неустойчивости. Если поток направлен против движения ростовых ступеней, то морфологическая устойчивость грани сохраняется. Напротив, течение раствора по направлению движения ступеней приводит к ее неустойчивости. Экспериментальное определение распределения поверхностного пересыщения затруднительно, поэтому большую роль играет численное моделирование течения и массопереноса при росте кристаллов из раствора.

Моделирование гидромеханики при росте кристалла из раствора

В [2] было проведено численное моделирование влияния характера гидродинамики в проточном кристаллизаторе на распределение солевых компонентов раствора вдоль растущей грани кристалла. Рассматривалась схема кристаллизатора, реализованная в используемой установке температурного перепада при росте кристалла «сверху вниз», когда раствор втекает вертикально вверх из трубки в нижней открытой части цилиндрического сосуда с заданной скоростью и обтекает поверхность растущего кристалла. Рассматривались варианты подачи раствора в центр кристалла, а также 2 варианта подачи потока с закруткой струи: при помощи винтовой насадки на трубку питателя и по касательной к стенке формообразователя под наклоном к вертикальной оси. Из-за разницы коэффициентов диффузии солей Co и Ni

неоднородность состава раствора вдоль грани кристалла варьировалась в пределах 0.1 ат.%. Проведенные расчеты показали, что шероховатость поверхности кристаллизации приводит к образованию множества мелких вихрей вблизи нее. Это, в свою очередь, влияет на массообмен на границе раствор-кристалл, что приводит к отличию радиальных распределений концентрации примесей и уровней пересыщения солями. Так, если при гладкой поверхности кристаллизации изменение пересыщения снижается плавно по мере удаления от оси, то при шероховатой имеют место колебания пересыщения, соответствующие неровностям поверхности.

До настоящего времени моделировались только ламинарные течения раствора, соответствующие докритическим числам Рейнольдса Re . Особенности влияния турбулентного течения на процесс кристаллизации из раствора рассмотрены в работе [3]. Для этого были использованы данные для развитого турбулентного режима, реализуемого в частном случае – для течения в гладкой трубе при больших числах Re . На их основе были сделаны некоторые общие выводы для кристаллизации из раствора для турбулентного обтекания поверхности кристаллизации. Эти выводы являются основой для применения результатов моделирования турбулентной гидродинамики к выращиванию кристаллов из различных кристаллизаторов [4]. В данной работе проведено численное моделирование процесса с учетом разницы в коэффициентах распределения солевых компонентов. Рассматривались варианты с центральной и периферийной (по касательной) подачей раствора.

Схема ростового процесса с центральной подачей раствора показана на Рис. 1а: раствор (3) втекает вертикально вверх из трубки (1) с дна цилиндрического сосуда (2) при заданной скорости V_{jet} и обтекает поверхность растущего кристалла (4). Осаждение солей на поверхность кристалла обеспечивает его наращивание сверху вниз по всему диаметру сосуда. Затем «отработавший» раствор вытекает через открытую часть дна сосуда (5). Размеры кристаллизатора: высота $H = 0.04$ м, диаметр $D = 0.03$ м. Диаметр трубки (1) с втекающим раствором $d = 0.003$ м.

Для интенсификации процесса гидродинамики была рассмотрена модель с периферийной подачей раствора в кристаллизатор, показанная на рис. 1б: 1 – цилиндрический сосуд, 2 – кольцо для втекания раствора с компонентами скорости (V_r , V_z , V_Ω), 3 – кристалл, 4 – отверстие для стока раствора. Применительно к этой схеме размеры модели были увеличены пропорционально в 5 раз. При сохра-

нении той же скорости втекания раствора в кристаллизатор число Рейнольдса возросло до критического значения $Re = 2.25 \times 10^4$, соответствующего переходу в турбулентный режим течения. Для расчетов применена стандартная $k-\varepsilon$ модель.

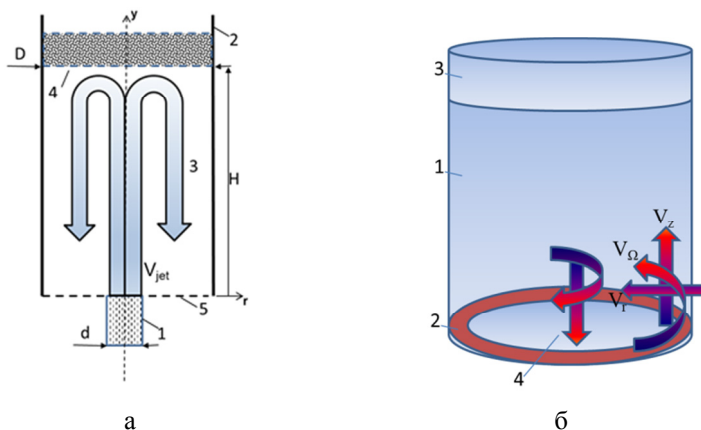


Рис. 1. Схемы математических моделей:
а – с центральной и б – с периферийной подачей раствора

Выводы

Периферийная подача раствора обеспечивает более равномерное распределение солевого пересыщения вдоль поверхности растущего кристалла, что способствует более устойчивой морфологии поверхности и, как следствие, уменьшению количества дефектов в кристалле. При исследовании процесса с периферийной подачей раствора конструкция кристаллизатора были пропорционально увеличены в 5 раз. При этом необходимый уровень равномерности распределения пересыщения солей вдоль поверхности кристалла сохраняется. По результатам расчетов была изменена форма трубки, через которую осуществляется подача раствора к кристаллу, для возможности его подачи с закруткой.

Работа выполнена на вычислительной базе ИПМех РАН (тема № АААА-А20-120011690136-2) при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 18-02-00036).

Литература

1. Coriell S.R., Murray B.T., Chernov A.A., McFadden G.B. The effect of a shear flow on the morphological stability of a vicinal face: Growth from a supersaturated solution // *Advances in Space Research*, 1998. Vol. 22, no 8. P. 1153–1158.

2. Verezub N.A., Voloshin A.E. and Prostomolotov A.I. Hydrodynamics and mass transfer during growth of mixed crystals from solution // Crystallography Reports, 2019. Vol. 64, no 6. P. 979–983.

3. Chernov A.A., Rashkovich L.N., Vekilov P.G. Steps in solution growth: dynamics of kinks, bunching and turbulence // J. Crystal Growth, 2005. Vol. 275. P. 1–18.

4. Zhou C., Li M.W., Yin H.W., Hu Z., Yin H., Wang B., Cuiet O. Simulation of the flow and mass transfer for KDP crystals under going 2D translation during growth // J. Crystal Growth. 2016, Vol. 450. P. 103–118.

HYDRODYNAMICS AND MASS TRANSFER IN SPECIAL CRYSTALLIZER DESIGNS

A.I. Prostomolotov, N.A. Verezub

Abstract. Two variants of the crystallizer are considered: in the first, the solution is supplied to the central crystal part, in the second, there is a peripheral solution supply along the crystallizer perimeter, what provides creating its swirling flow. The calculation models corresponded to the laminar and turbulent regimes of the solution flow during the mixed KCNSH crystal growth from a mixture of two water-salt solutions (cobalt KCSH and nickel KNSH salts).

Keywords: crystal growth, water-salt solutions, supersaturation, hydromechanics.

УДК 538.975: 519.245

<https://doi.org/10.29003/m1525.MMMSEC-2020/82-85>

ВЛИЯНИЕ ОБРАБОТКИ ПОВЕРХНОСТИ ПОДЛОЖКИ НА МОРФОЛОГИЮ GaAs ПЛАНАРНЫХ НАНОПРОВОЛОК (МОНТЕ-КАРЛО МОДЕЛИРОВАНИЕ)

Спирина Анна Александровна¹,

аспирант,

an.spirits@isp.nsc.ru, +7 (383) 333-14-75

Шварц Наталия Львовна^{1,2},

к.ф.-м.н., с.н.с., доцент,

nataly.shwartz@gmail.com, +7 (383) 333-14-75

¹ ИФП СО РАН, г.Новосибирск.

² НГТУ, г. Новосибирск

Аннотация. Представлены результаты имитационного моделирования самокаталитического роста GaAs планарных нанопроволок.

Ключевые слова: нанопроволоки, самокаталитический рост, GaAs.

Введение

Интерес к планарным GaAs нанопроволокам связан с их совместимостью с традиционной планарной технологией создания полупроводниковых приборов. Формирование нанопроволок производится в основном с помощью химического осаждения из газовой фазы по механизму пар-жидкость-кристалл, где в качестве катализатора используются капли Au. Встраивание атомов Au в растущий кристалл приводит к ухудшению характеристик GaAs оптоэлектронных приборов, основанных на нанопроволоках [1]. Решением данной проблемы может быть самокаталитический рост (катализатором является материал, входящий в состав растущей проволоки) [2]. При самокаталитическом формировании планарных нанопроволок большую роль играют свойства поверхности подложки, поэтому требуется детальное исследование влияния свойств пассивации поверхности на морфологию планарных нанопроволок. Ранее с помощью моделирования методом Монте-Карло изучалось влияние ориентации подложек, температуры и скоростей осаждения Ga и As₂ на морфологию планарных GaAs нанопроволок [3]. Нерешенной проблемой является уменьшение капли-катализатора в процессе роста и, как следствие, неоднородность нанопроволок по диаметру. В данной работе с использованием решеточной Монте-Карло модели проводился поиск свойств пассивированной поверхности необходимых для сохранения размера капли-катализатора в процессе роста.

Моделирование самокаталитического роста планарных GaAs нанопроволок

Моделирование самокаталитического роста GaAs планарных нанопроволок осуществлялось с помощью программного комплекса SilSim3D на базе решеточной 3D Монте-Карло модели [4]. В модели пространство представляет собой набор узлов в алмазоподобной решетке, каждый из которых может быть свободен или занят только одной частицей. В латеральных направлениях ставятся циклические граничные условия. Максимально возможное количество частиц в модели зависит от мощности компьютера и для процессора типа Core i7 составляет $\sim 10^8$. Рассматривалась пятикомпонентная система, состоящая из мышьяка в атомарном и молекулярном виде (As, As₂), галлия в твердом и жидком состоянии (Ga(s), Ga(l)) и пленки-маски. В модель заложены следующие элементарные события: адсорбция Ga(s) и As₂; диффузионный скачок As, As₂, Ga(s), Ga(l)

в свободный узел в первой, второй или третьей координационной сферы; десорбция $\text{Ga}(s)$, $\text{Ga}(l)$ и As_2 ; распад и образование As_2 посредством обратимой реакции $\text{As} + \text{As} \leftrightarrow \text{As}_2$; диффузия As в жидком галлии; растворение и кристаллизация GaAs . Кристаллизация GaAs реализовывалась при взаимодействии жидкого галлия с мышьяком $\text{Ga}(l) + \text{As} \rightarrow \text{Ga}(s) + \text{As}$. Растворение GaAs имитировалось через взаимодействия твердого галлия и мышьяка с жидким галлием $\text{Ga}(s) + \text{Ga}(l) \rightarrow \text{Ga}(l) + \text{Ga}(l)$ и $\text{As} + \text{Ga}(l) \rightarrow \text{Ga}(l) + \text{As}$. Вероятность любого элементарного события в Монте-Карло модели определяется его энергией активации E_{act} и предэкспоненциальным множителем A : $P = A \cdot \exp(-E_{\text{act}} / kT)$. Выбор E_{act} и A проводился на основе справочных данных, а также согласования экспериментальных и модельных температурных зависимостей растворения GaAs в жидком галлии и температурных зависимостей равновесного давления паров GaAs .

В качестве исходного модельного кристалла использовались подложки GaAs размером 120×20 нм, покрытые 4 монослоями материала пленки-маски. Под изменением свойств поверхности в данной работе понимается изменение энергии связи (энергии активации диффузии) частиц с атомами пленки-маски. При равных энергиях связи As , As_2 и Ga с поверхностью были получены неоднородные по диаметру нанопроволоки, достигающие 100 нм в длину. Неоднородность проволок обусловлена уменьшением капли и радиальным ростом, то есть встраиванием Ga и As в боковые стенки нанопроволоки. С уменьшением энергии активации диффузии As возрастает скорость его диффузии по поверхности. Моделирование показало, что при уменьшении энергии связи мышьяка с поверхностью, уменьшается радиальный рост проволоки и капля галлия сохраняет свой размер. Однако, вместо однородного по диаметру кристалла, наблюдалось периодическое изменение его диаметра (рис. 1).

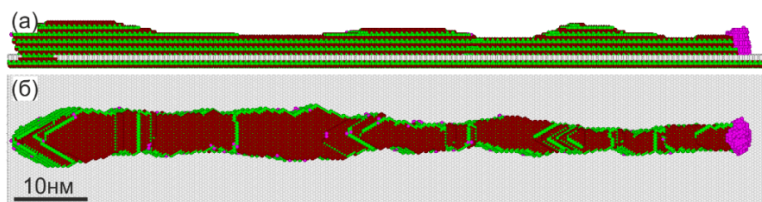


Рис. 1. Боковое сечение (а) и вид сверху (б) модельной планарной GaAs нанопроволоки

Это связано с недостатком диффузионного сбора мышьяка с поверхности подложки в каплю и появлением конкурирующей фasetки на границе раздела капли-нанопроволока. Недостаток мышьяка возникает из-за роста скорости десорбции As_2 , вероятность образования которого возрастает при увеличении скорости диффузии As.

Выводы

В работе выполнено моделирование самокаталитического роста GaAs планарных нанопроволок методом Монте-Карло. Найдены условия уменьшения радиального роста нанопроволок и сохранения размера капель галлия.

Работа поддержана РФФИ (проект №19-31-90023) и программами РАН.

Литература

1. Breuer S. et al. Suitability of Au- and Self-Assisted GaAs Nanowires for Optoelectronic Applications // Nano Letters, 2011, 11, 3, 1276.
2. Bastiman F. et al. Growth map for Ga-assisted growth of GaAs nanowires on Si(111) substrates by molecular beam epitaxy // Nanotechnology, 2016, 27, 9, 095601.
3. Spirina A., Shwartz N. Influence of gallium and arsenic deposition rates on the GaAs planar nanowire morphology // Journal of Physics: Conference Series, 2020, 1482, 012007.
3. Карпов А. и др. Решеточная модель Монте-Карло для изучения процессов формирования наноструктур // Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии, 2014, 15, 388.

INFLUENCE OF SUBSTRATE SURFACE TREATMENT ON THE GAAS PLANAR NANOWIRE MORPHOLOGY (MONTE CARLO SIMULATION)

A.A. Spirina, N.L. Shwartz

Abstract. The simulation results of the self-catalyzed planar GaAs nanowires growth are presented.

Keywords: nanowire, self-catalyzed growth, GaAs.

ОПИСАНИЕ ИМИТАЦИОННОЙ МОДЕЛИ ОБРАЗОВАНИЯ НАНОРАЗМЕРНОЙ НЕРОВНОСТИ КРАЯ В ПРОЦЕССЕ ЭКСПОНИРОВАНИЯ ПОЛИМЕРНЫХ ФОТОРЕЗИСТОВ

Шарапов Андрей Анатольевич,

научный сотрудник¹, аспирант²

andrey.sharapov@phystech.edu, +7 (905) 747-68-35

¹ АО «НИИМЭ», Москва, г. Зеленоград

² Московский физико-технический институт (НИУ), г. Долгопрудный

Аннотация. В работе предложен подход к проведению имитационного моделирования образования неровности края в процессе экспонирования полимерных резистов, а также приведены результаты оценки влияния параметров фотолитографии на амплитуду шероховатости краёв линейных наноструктур.

Ключевые слова: неровность края, фотолитография.

Введение

Одной из ключевых количественных характеристик качества проявления линейного элемента на интегральной схеме служит величина неровности края (LER). При уменьшении технологических норм значение LER в относительном выражении становится всё больше [1]. В связи с этим исследование путей снижения параметров шероховатости является весьма актуальным.

В технологии Si микроэлектроники анализ неровности краёв боковых поверхностей структур осуществляют с помощью растрового электронного микроскопа (РЭМ) [2]. При этом расчёт значения параметра LER осуществляется по среднеквадратичному отклонению, что в сравнении с другими известными методиками даёт наиболее стабильный результат [3].

Моделирование образования неровности края

На базе приближения полимерных фоторезистов в виде свободно-сочленённой цепи мономеров построена модель образования наноразмерной неровности края, схематически представленная на рис. 1. Явление фотонного шума позволяет определить область так называемой негарантированной засветки, в которой степень экспонирования молекул резиста определяется случайностью. Также

данная модель позволяет учесть дискретность структуры вещества резиста. Представлены результаты имитационного моделирования образования наноразмерной неровности края для тестовой линейчатой структуры в процессе экспонирования фоторезиста.

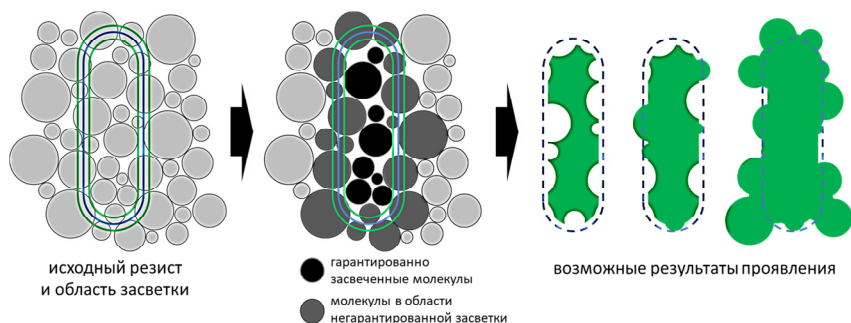


Рис. 1. Схематическое представление имитационной модели образования неровности края при проявлении фоторезиста

Выводы

В работе выполнено имитационное моделирование образования наноразмерной неровности края, и проведена оценка влияния параметров фотолитографии для линейных структур.

Литература

1. International Technology Roadmap for Semiconductors, 2011.
2. Горнев Е.С., Календин В.В, Новиков Ю.А., Раков А.В., Тодуа П.А. Метрологическое обеспечение линейных измерений в нанотехнологии // Материалы электронной техники. Известия вузов. 2004. № 2. С. 55–59.
3. Шарапов А.А., Баранов Г.В. Сравнительный анализ методик оценки количественных характеристик шероховатости наноразмерных структур // Труды МФТИ. 2018. Т. 10, № 2 (38). С. 72–79.

SIMULATION MODEL DESCRIPTION OF A NANOSCALE EDGE ROUGHNESS EMERGENCE DURING POLYMER PHOTORESIST EXPOSURE

A.A. Sharapov

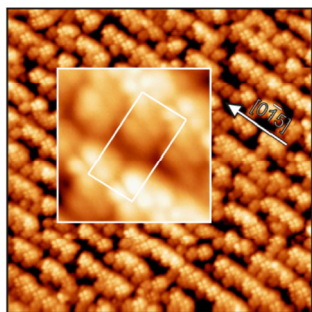
Abstract: In this work, an approach to simulation modeling of an edge roughness emergence during POLYMER PHOTORESIST EXPOSURE is suggested. There are evaluation results of photolithography parameters' impact on edge roughness magnitude for linear nanostructures provided as well.

Keywords: edge roughness, photolithography.

АТОМНАЯ СТРУКТУРА ПОВЕРХНОСТИ Si(47 35 7)**Жачук Руслан Анатольевич,***к.ф.-м.н., старший научный сотрудник¹,
zhachuk@isp.nsc.ru, +7 (952) 911-44-50***Долбак Андрей Евгеньевич,***к.ф.-м.н., научный сотрудник¹,
dolbak@isp.nsc.ru, +7 (913) 749-67-03***Шкляев Александр Андреевич,***д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник^{1,2},
shklyaev@isp.nsc.ru, +7 (913) 001-00-85*¹ ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13, Россия² НГУ, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 1, Россия

Аннотация. В работе исследована атомная структура чистой высокоиндексной поверхности Si(47 35 7). С помощью расчетов на основе теории функционала плотности с использованием экспериментальных данных разработана атомная модель поверхности.

Ключевые слова: кремний, поверхность, структура, пентамер, сканирующая туннельная микроскопия, теория функционала плотности

**Рис. 1**

Экспериментальное
СТМ-изображение
поверхности Si(47 35 7),
400×400 Å²:

На вставке показано
СТМ-изображение высокого
разрешения, 5×5 Å² и элемен-
тарная ячейка поверхности

Исследование атомной структуры высокоиндексных поверхностей кремния представляет интерес, так как они часто используются в качестве подложек для выращивания упорядоченно расположенных наноструктур [1]. С помощью методов дифракции медленных электронов, сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) и расчетов из первых принципов, основанных на теории функционала плотности (SIESTA), исследована атомная структура высокоиндексной поверхности Si(47 35 7), отклоненной на угол 10.7° к плоскости (1 1 0) [2]. Установлено, что поверхность остается стабильной по крайней мере до температуры 900°C и имеет периодичность 1×1. Атомная

структура поверхности значительно реконструирована по сравнению с плоскостями (47 35 7) в объеме кристалла и содержит пентамеры, аналогичные тем, которые наблюдаются на поверхностях Si(1 1 0) и Ge(1 1 0) (рис. 1).

Разработана атомная модель реконструированной поверхности Si(47 35 7). Модель состоит из мини- $\{111\}$ фасеточных плоскостей и универсального структурного блока, предложенного ранее для объяснения пентамеров на поверхностях Si(1 1 0) и Ge(1 1 0) [3]. Предложенная модель стабильна, хорошо воспроизводит основные черты экспериментальных СТМ-изображений высокого разрешения поверхности Si(47 35 7) и приводит к достаточно низкой энергии.

Экспериментальная работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 18-02-00025), теоретические расчеты выполнены при поддержке РНФ (проект № 19-72-30023).

Литература

1. Zhachuk R.A., S.A. Teys, A.E. Dolbak, B.Z. Olshanetsky. Formation of ordered arrays of Ag nanowires and nanodots on Si(557) surface // Surf. Sci. 565, 37 (2004). DOI: 10.1016/j.susc.2004.06.202.
2. Zhachuk R.A., A.E. Dolbak, A.A. Shklyayev. Atomic structure of high Miller index Si(47 35 7) surface // Surf. Sci., 693, 121549 (2020). DOI: 10.1016/j.susc.2019.121549.
3. Zhachuk R.A., A.A. Shklyayev. Universal building block for (110)-family silicon and germanium surfaces // Appl. Surf. Sci., 494, 46 (2019). DOI: 10.1016/j.apsusc.2019.07.144.

ATOMIC STRUCTURE OF THE SI(47 35 7) SURFACE

R.A. Zhachuk, A.E. Dolbak, A.A. Shklyayev

Abstract. The atomic structure of clean high-index Si(47 35 7) surface is studied. The atomic model of this surface is proposed based on density functional theory calculations and experimental data.

Keywords: silicon, surface, structure, pentamer, scanning tunneling microscopy, density functional theory

ПЕНТАМЕР С МЕЖУЗЕЛЬНЫМ АТОМОМ КАК СТРУКТУРНЫЙ БЛОК РЕКОНСТРУИРОВАННЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ Si(331) И Ge(331)

Жачук Руслан Анатольевич¹,

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

Кутиньо Жозе²,

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

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

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

Аннотация. На основе единого структурного блока, содержащего пентамер с межузельным атомом, разработаны атомные модели чистых поверхностей Si(331) и Ge(331). Работа проведена с использованием расчетов на основе теории функционала плотности.

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

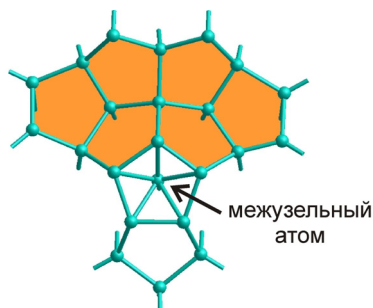


Рис. 1. Модель структурного блока поверхностей Si(331) и Ge(331):

8PU (8-pentagon unit), состоящая из пентамера с межузельным атомом и шести пентагонов кремния (выделены цветом)

Высокоиндексные поверхности кремния широко используются в качестве подложек для выращивания упорядоченно расположенных наноструктур [1]. В этом цикле работ [2–3] с помощью расчетов на основе теории функционала плотности с применением программного пакета SIESTA была исследована атомная структура высокоиндексных поверхностей Si(331)-12×1 и Ge(331)-5×1 и проведено сравнение с имеющимися экспериментальными данными сканирующей туннельной микроскопии (СТМ).

Показано, что обе поверхности состоят из одинаковых структурных

блоков, упорядоченных различным образом. Структурный блок состоит из пентамера, атомы которого удерживает вместе межузельный атом, и соседней реконструированной области (см. рис. 1). Пентамеры в реконструированной области упорядочены подобно пентамерам в структуре фуллерена C_{20} (выделены цветом на рисунке). Модель получила название 8PU (8-pentagon unit), по числу видимых пентагонов в одном структурном блоке поверхности.

Разработанные атомные модели поверхностей $Si(331)-12\times 1$ и $Ge(331)-5\times 1$ приводят к очень низкой энергии, сравнимой с энергией других реконструированных поверхностей кремния и германия. Изображения СТМ, рассчитанные на основе предложенных моделей, полностью согласуются с экспериментальными СТМ изображениями поверхностей $Si(331)-12\times 1$ и $Ge(331)-5\times 1$.

Таким образом, мы продемонстрировали структурное подобие чистых поверхностей $Si(331)$ и $Ge(331)$, которое ранее было найдено для поверхностей $Si(100)$ и $Ge(100)$, $Si(110)$ и $Ge(110)$, $Si(113)$ и $Ge(113)$.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 18-02-00025).

Литература

1. Zhachuk R.A., S.A. Teys, A.E. Dolbak, B.Z. Olshanetsky. Formation of ordered arrays of Ag nanowires and nanodots on $Si(557)$ surface // Surf. Sci. 565, 37 (2004). DOI: 10.1016/j.susc.2004.06.202.
2. Zhachuk R.A., J. Coutinho, K. Palotás. Atomic and electronic structure of the $Si(331)-12\times 1$ surface // J. Chem. Phys. 149, 204702 (2018). DOI: 10.1063/1.5048064
3. Zhachuk R.A., J. Coutinho. Pentamers with interstitial atoms as the building blocks of the $Ge(331)-5\times 1$ surface // Appl. Surf. Sci. 533, 147507 (2020). DOI: j.apsusc.2020.147507.

PENTAMER WITH INTERSTITIAL ATOM AS THE STRUCTURAL BLOCK OF RECONSTRUCTED $Si(331)$ AND $Ge(331)$ SURFACES

R.A. Zhachuk, J. Coutinho

Abstract. Atomic structure models of the $Si(331)$ and $Ge(331)$ surfaces are developed based on unified structural block, containing pentamer with interstitial atom. The work is performed using density functional calculations.

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

РАСЧЕТ СПЕКТРОВ ОТРАЖЕНИЯ Ge-Sb-Te ДИФРАКЦИОННОЙ РЕШЕТКИ С ПРИМЕНЕНИЕМ ДИСПЕРСИОННОЙ МОДЕЛИ ТАУЦА–ЛОРЕНТЦА

Миннуллин Рамиль Талгатович^{1,2},

*аспирант, научный сотрудник,
rminnullin@niime.ru, +7 (926) 690-61-47*

Королев Дмитрий Сергеевич^{1,3},

*к.ф.-м.н., научный сотрудник,
dmkorolev@phys.unn.ru*

Сапегин Александр Андреевич^{1,2},

*начальник лаборатории,
asapegin@niime.ru*

Барабаненков Михаил Юрьевич^{1,4},

*д.ф.-м.н., главный научный сотрудник,
barab@iptm.ru*

¹ АО «НИИМЭ», г. Зеленоград, г. Москва

² МФТИ (НИУ), г. Долгопрудный

³ ННГУ им. Н.И. Лобачевского, г. Нижний Новгород

⁴ ИПТМ РАН, г. Черноголовка

Аннотация. В работе приводятся результаты теоретического расчета спектров отражения в ближнем инфракрасном диапазоне для дифракционной решетки из соединения Ge-Sb-Te на волноводе структуры кремний-на-изоляторе с применением дисперсионной модели Тауца–Лорентца и метода матричного уравнения Риккати.

Ключевые слова: дифракционная решетка, спектр отражения, материалы с изменяемым фазовым состоянием, Ge-Sb-Te, модель дисперсии Тауца–Лорентца.

Введение

Современное развитие радиофотоники ставит перед исследователями ряд важных задач. Одна из них – разработка энергонезависимой оптической памяти с возможностью встраивания в волноводные структуры нанофотоники [1]. Возможным решением данной задачи может служить создание ячеек оптической памяти с применением материалов, способных быстро менять свои оптические параметры в результате относительно небольших по величине внешних воздействий. Весьма перспективными являются материалы на основе халькогенидного соединения Ge-Sb-Te (GST), обладающие

значительным контрастом оптических характеристик в аморфном и кристаллическом состоянии. Однако, возможное применение этого материала в качестве активного элемента ячейки оптической памяти – дифракционной решетки, помещенной на волновод структуры кремний-на-изоляторе – ограничивается пока еще сравнительно малой степенью изученности его дисперсионных свойств. Эффективным методом описания изменения оптических свойств материалов при взаимодействии со светом является использование теоретических моделей дисперсии. Таковой, например, модель дисперсии Тауца–Лорентца, которая хорошо описывает экспериментальные зависимости, полученные методом эллипсометрии [2]. В настоящей работе будут рассмотрены спектры отражения для дифракционной решетки из GST в аморфной и кристаллической фазе, рассчитанные с применением модели Тауца–Лорентца с помощью метода матричного уравнения Риккати.

Расчет спектров отражения

Расчет спектров отражения производится с помощью метода матричного уравнения Риккати [3], который позволяет определить матричные волновые коэффициенты отражения и прохождения для многослойной неоднородной структуры. Для описания дисперсии в GST аморфной и кристаллической фазы применяется модель Тауца–Лорентца с добавками вида гауссова осциллятора [2]:

$$\varepsilon''_{TL}(E) = \frac{(E - E_g^{opt})^2}{E^2} \cdot \frac{ACE_0E}{(E^2 - E_0^2)^2 + C^2E^2} \quad (1)$$

$$\varepsilon''_{G_{osc}} = \frac{A_G}{C_G} \exp\left(-\left(\frac{E - E_G}{C_G}\right)^2\right) + \frac{A_G}{C_G} \exp\left(-\left(\frac{E + E_G}{C_G}\right)^2\right). \quad (2)$$

Здесь E_g^{opt} , A , C , E_0 , A_G , C_G , E_G являются специальными параметрами моделей и имеют различные значения для аморфной и кристаллической фазы, ε'' – мнимая часть комплексной диэлектрической проницаемости. Аморфная фаза GST описывается с помощью составляющей Тауца–Лорентца диэлектрической проницаемости (1), а описание кристаллической фазы также включает добавку (2). Действительная часть диэлектрической проницаемости рассчитывается с помощью интеграла Крамерса–Кронига как для аморфной, так и для кристаллической фазы:

$$\varepsilon'(E) = \varepsilon'(\infty) + \frac{2}{\pi} v.p. \int_{E_g^{opt}}^{\infty} \frac{\xi \varepsilon''(\xi)}{\xi^2 - E^2} d\xi, \quad (3)$$

$\varepsilon'(\infty)$ – постоянный вклад в диэлектрическую проницаемость при высоких энергиях (высокочастотная составляющая), *v.p.* означает, что интеграл берется в смысле главного значения.

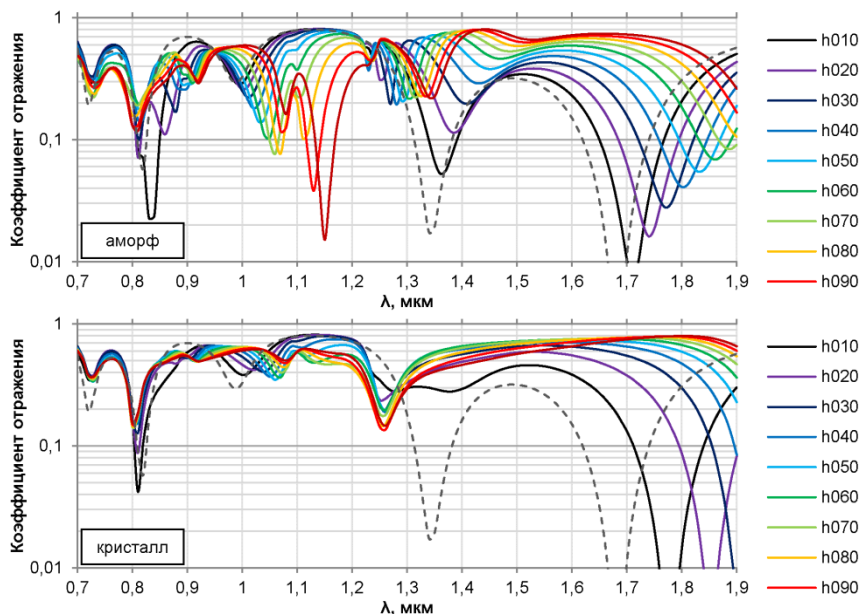


Рис. 1. Рассчитанные спектры отражения для дифракционной решетки из GST в аморфной (сверху) и кристаллической (снизу) фазе при разных ее высотах (указаны справа в нм). Свет падает на решетку вертикально сверху в ТЕ поляризации. Период решетки фиксирован и составляет 0.8 мкм, фактор заполнения – 0.5. Пунктирная линия представляет спектр отражения КНИ волновода в отсутствие дифракционной решетки

Выводы

В работе проведен теоретический расчет спектров отражения в ближнем ИК диапазоне для дифракционных решеток из соединения Ge-Sb-Te на КНИ волноводе с учетом дисперсии материалов. Полученные спектры будут использованы в дальнейшем для определения оптимальных параметров дифракционных решеток (период, высота, фактор заполнения) для обеспечения наибольшей эффективности оптической ячейки памяти, в частности, с точки зрения уменьшения энергетических затрат на переключение.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-29-03040 мк.

Литература

1. Ríos C. et al., Integrated all-photonics non-volatile multi-level memory // *Nature Photonics*, 2015, 9, 725–732.
2. Orava J. et al., Optical properties and phase change transition in $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ flash evaporated thin films studied by temperature dependent spectroscopic ellipsometry // *Journal of Applied Physics*, 2008, 104, 4, 043523.
3. Barabanenkov Yu.N., Barabanenkov M.Yu., Energy invariants of composition rules for scattering and transfer matrices of propagating and evanescent electromagnetic waves in dielectric structures // *PIERS Online*, 2006, 2, 10–12.

CALCULATION OF THE REFLECTION SPECTRA OF Ge-Sb-Te DIFFRACTION GRATING USING THE TAUC–LORENTZ DISPERSION MODEL

R.T. Minnullin, D.S. Korolev, A.A. Sapegin, M.Yu. Barabanenkov

Abstract. In this paper reflection spectra in the near infrared range are calculated for the diffraction grating of Ge-Sb-Te alloy on a silicon-on-insulator waveguide with use of Tauc–Lorentz dispersion model and Matrix Riccati Equation method.

Keywords: diffraction grating, reflection spectrum, phase-change materials, Ge-Sb-Te (GST), Tauc–Lorentz dispersion model.

УДК 004.3:004.9

<https://doi.org/10.29003/m1530.MMMSEC-2020/95-97>

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ДЕГРАДАЦИИ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ, ПРОЧНОСТИ И РАЗРУШЕНИЯ КОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Мочалова Юлия Дмитриевна¹,

аспирант,

juliamochalova96@gmail.com, +7 (977) 357-60-76

Абгарян Каринэ Карленовна^{1,2},

д.ф.-м.н., доцент, заведующая отделом,

kristal83@mail.ru, +7 (903) 108-03-40

¹ *ФИЦ ИУ РАН, г.Москва*

² *МАИ, г. Москва*

Аннотация. В работе выполняется моделирование прочности и прогнозирование деградационных процессов механических свойств композитных материалов с использованием многомасштабного моделирования и методов машинного обучения.

Ключевые слова: композитные материалы, многомасштабное моделирование, машинное обучение, нейронные сети.

Введение

Применение композитных материалов нашло свое применение в различных отраслях инженерной деятельности, что обусловлено преимуществом композитных материалов перед металлами, при равных механических и эксплуатационных свойствах. Вместе с тем, композитные материалы подвержены изменению своих свойств под действием некоторых внешних воздействий. Исследование этих процессов натурным методом и формирование доказательной базы для применения способно существенно замедлить темпы обоснованного применения композитных материалов. По этой причине была разработана методика для прогнозирования деградационных процессов основанная на многомасштабном моделировании и машинном обучении. Моделирование, реализуемое в работе, в результате позволяет обнаружить и зарегистрировать только развивающиеся дефекты, из чего следует классификация дефектов не по размерам, форме, положению и ориентации, а по степени их опасности, то есть по влиянию на прочность контролируемого материала.

Многомасштабное моделирование и машинное обучение

Многомасштабная модель позволяет рассчитать структуру материала на атомно-кристаллическом уровне, далее осуществляется переход на следующие масштабные уровни к молекулярно-динамическим, дискретно-элементным, сплошносредным моделям. При этом результаты моделирования композиционного материала на более мелком масштабном уровне используются как предварительный шаг обработки данных для крупномасштабных (макроскопических) моделей. Построение связей между масштабными уровнями осуществляется посредством выделения глобальных параметров моделей, задействованных в процессе создания многомасштабной модели и передающихся с масштаба на масштаб.

Второй подход заключается в использовании методов машинного обучения для получения формулы эмпирического прогноза. Детерминированные методы машинного обучения, такие как многомерная линейная регрессия, ансамбли над деревьями решений и искусственная нейронная сеть, позволяют получать точные уравнения для прогнозирования деградации механических свойств и состояния прочности на основе материалов и параметров процесса.

В машинном обучении на основе моделей связь процесс-структура-свойство-производительность выражается условными распределениями вероятностей. Данное исследование сосредоточено на связи между свойствами и структурами материалов.

Выводы

В работе была предложена основа для прогнозирования деградационных процессов механических свойств композитных материалов с использованием многомасштабного моделирования и методов машинного обучения. Результаты показывают, что машинное обучение на основе моделей наряду с многомасштабным моделированием является многообещающим инструментом для прогнозирования состояния свойств композитных материалов.

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

Литература

1. Shiraiwa T., Miyazawa Y., Enoki M. Fatigue Performance Prediction of Structural Materials by Multi-scale Modeling and Machine Learning // Proceedings of the 4th World Congress on Integrated Computational Materials Engineering (ICME 2017) (pp.317-326), April 2017. DOI: 10.1007/978-3-319-57864-4_29.
2. Chen Z., Zhang Z., Dong F., Liu S. A Hybrid Finite Element Modeling: Artificial Neural Network Approach for Predicting Solder Joint Fatigue Life in Wafer-Level Chip Scale Packages // Journal of Electronic Packaging 143(1), May 2020. DOI: 10.1115/1.4047227.

SIMULATION OF THE DEGRADATION PROCESSES OF MECHANICAL PROPERTIES, STRENGTH AND FRACTURE OF COMPOSITE MATERIALS

Y.D. Mochalova, K.K. Abgaryan

Abstract. The work is aimed at modeling strength and predicting degradation processes of mechanical properties of composite materials using multiscale modeling and machine learning methods.

Keywords: composite structures, multiscale modeling, machine learning, neural networks.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СОЛНЕЧНОГО ЭЛЕМЕНТА СО СТРУКТУРОЙ $\text{TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{Cu}_2\text{O}$

Саенко Александр Викторович¹,

к.т.н., доцент,

avsaenko@sfedu.ru, +7 (989) 704-40-01

Малюков Сергей Павлович¹,

д.т.н., профессор,

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

Палий Александр Викторович²,

к.т.н., доцент,

avpaliy@sfedu.ru, +7 (988) 573-94-99

¹ ЮФУ, г. Таганрог

² ДГТУ, г. Таганрог

Аннотация. Работа посвящена численному моделированию перовскитных солнечных элементов со структурой $\text{TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{Cu}_2\text{O}$ для оптимизации их конструкции и улучшения эффективности.

Ключевые слова: солнечный элемент, перовскит, численное моделирование, толщина пленки, эффективность.

Введение

Развитие перовскитных солнечных элементов в основном связано с технологическим прогрессом формирования пленок перовскитов типа йодид метиламмоний свинца ($\text{CH}_3\text{CN}_3\text{PbI}_3$) [1]. Несмотря на впечатляющий прогресс данных солнечных элементов, их коммерциализация по-прежнему требует решения нескольких проблем, включая стабильность при воздействии света, влажности и высокой температуры, а также усовершенствование процессов производства и оптимизацию конструкции. Кроме того, все перовскитные солнечные элементы с высокой эффективностью содержат свинец, что создает существенную экологическую проблему. Разработка и использование перовскитных материалов, не содержащих свинца, имеет решающее значение для их дальнейшей коммерциализации.

Моделирование структуры солнечного элемента

При моделировании рассматривался перовскитный солнечный элемент с p-i-n структурой, где в качестве поглощающего материала

использовался нетоксичный перовскит $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ (толщина 10–1000 нм) в сочетании с электронным TiO_2 (толщина 50 нм) и дырочным Cu_2O (толщина 500 нм) транспортными слоями [2]. В процессе моделирования толщина пленки $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ изменялась для определения максимальной эффективности солнечного элемента.

Модель перовскитного солнечного элемента основана на стационарной диффузионно-дрейфовой системе уравнений полупроводника, в которую входят уравнения непрерывности и уравнение Пуассона [3]:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\mu_n \left(-n \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \varphi_t \frac{\partial n}{\partial x} \right) \right] + G - R = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\mu_p \left(p \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \varphi_t \frac{\partial p}{\partial x} \right) \right] + G - R = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) = \frac{q}{\varepsilon_0} (n - p - N_D + N_A), \quad (3)$$

где n , p – концентрация электронов и дырок; μ_n , μ_p – подвижности электронов и дырок; φ – электрический потенциал; φ_t – температурный потенциал; q – элементарный заряд; ε – относительная диэлектрическая проницаемость; ε_0 – диэлектрическая постоянная; G – скорость оптической генерации электронно-дырочных пар; R – скорость рекомбинации электронно-дырочных пар; N_D , N_A – концентрация донорной и акцепторной легирующей примеси.

Решение диффузионно-дрейфовой системы уравнений модели солнечного элемента осуществлялось численно в системе Matlab итерационным методом Гуммеля, в котором на каждой итерации сначала решалось уравнение Пуассона, а затем вычисленное значение электрического потенциала подставлялось в уравнения непрерывности для расчета концентраций носителей заряда.

Проведено исследование влияния толщины пленки перовскита $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ на фотоэлектрические характеристики солнечного элемента, поскольку она влияет на поглощение света, генерацию, рекомбинацию и перенос носителей заряда. Оптимальная толщина пленки $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ составляет 400–500 нм, при которой наблюдается максимальная эффективность солнечного элемента. Наличие максимума связано с тем, что при увеличении толщины пленки перовскита возрастает фототок, который выходит на насыщение, в то время как фотонапряжение с ростом толщины уменьшается вследствие возрастания скорости рекомбинации.

Выводы

На основе моделирования исследовано влияние толщины пленки $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ на эффективность солнечных элементов. Установлено, что максимальная эффективность оптимизированной структуры солнечного элемента $\text{TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{Cu}_2\text{O}$ составляет 19,3% при толщине пленки перовскита 450 нм и концентрации дефектов в ней порядка 10^{15} см^{-3} . Наличие максимума связано с конкуренцией между зависимостями тока короткого замыкания и напряжения холостого хода от толщины. Полученные результаты показывают, что пленка $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ обладает большим потенциалом в качестве поглощающего слоя с подходящим неорганическим дырочно-проводящим материалом, таким как Cu_2O (более высокая подвижность дырок по сравнению со Spiro-OMeTAD), для достижения высокой эффективности.

Литература

1. Hobeom Kim, Kyung-Geun Lim, Tae-Woo Lee. Planar heterojunction organometal halide perovskite solar cells: roles of interfacial layers // *Energy Environ. Sci.* – Vol. 9, 2016. – P. 12–30.
2. Minemoto T., Murata M. Device modeling of perovskite solar cells based on structural similarity with thin film inorganic semiconductor solar cells // *Journal of Applied Physics.* – Vol. 116, 2014. – P. 054505.
3. Malyukov S. P., Sayenko A. V., Ivanova A. V. Numerical modeling of perovskite solar cells with a planar structure // *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering.* – Vol. 151, 2016. – P. 012033.

NUMERICAL SIMULATION OF SOLAR CELL WITH $\text{TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{Cu}_2\text{O}$ STRUCTURE

A.V. Sayenko, S.P. Malyukov, A.V. Palii

Abstract. The work is devoted to the numerical simulation of perovskite solar cells with the $\text{TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{Cu}_2\text{O}$ structure to optimize their design and improve efficiency.

Keywords: solar cell, perovskite, numerical simulation, film thickness, efficiency.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ КОНСТРУКЦИИ БИМЕТАЛЛИЧЕСКОГО РАДИАТОРА ИЗ МЕДИ И АЛЮМИНИЯ ДЛЯ ТЕПЛОАГРУЖЕННОГО ИСТОЧНИКА ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕХНИКИ

Чернов Николай Николаевич¹,

д.т.н., профессор,

nncernov@sfedu.ru, +7 (928) 908-11-77

Палий Александр Викторович²,

к.т.н., доцент,

avpaliy@sfedu.ru, +7 (988) 573-94-99

Саенко Александр Викторович¹,

к.т.н., доцент,

avsaenko@sfedu.ru, +7 (989) 704-40-01

¹ ЮФУ, г. Таганрог

² ДГТУ, г. Таганрог

Аннотация. В работе описаны результаты вычислительного эксперимента по оценке эффективности и оптимизации конструкции теплоотвода для теплонагруженного источника электронной техники с целью минимизации температуры источника и снижению производственных затрат.

Ключевые слова: теплоотвод, тепловой режим аппаратуры, вычислительный эксперимент, материалы электронной техники.

Введение

Достижения электроники раскрывают большие перспективы дальнейшего улучшения качественных показателей разрабатываемой аппаратуры. В то же время непрерывное ее усложнение неразрывно связано с ростом количества используемых элементов, дальнейшим увеличением плотности монтажа и миниатюризацией элементной базы. Это обуславливает рост удельной тепловой нагрузки на элемент и соответственно повышение требований к надежности самих элементов. В свою очередь рост удельной тепловой нагрузки и задача обеспечения больших выходных мощностей аппаратуры связаны с проблемой отвода тепла – неизбежного побочного продукта ее элементов, что в свою очередь требует поиска новых конструкций, применения новых материалов и способов теплоотвода [1, 2].

Вычислительный эксперимент

Для отвода тепла от кристалла к корпусу в первую очередь необходим правильный выбор материала с высокой теплопроводностью. Во многих литературных источниках, описывается возможность применения в качестве материалов для отвода тепла металлов (Cu, Al и др.) [3]. Применение различных материалов в конструкции теплоотвода обусловлено разной эффективностью площади рассеивания. Основную нагрузку несет основание теплоотвода, непосредственно контактирующее с теплонагруженным элементом и ее предлагается выполнять из меди. Так как ее коэффициент теплоотвода выше, но выше и масса. Дальнейшее же развитие конструкции, в виде штырей, ребер и пр., предлагается выполнять из алюминия, так как подобная развитая поверхность уже менее эффективна.

Авторами работы предлагается оптимизированная конструкция радиатора с равноэффективной, выполненной по эквипотенциальным поверхностям от теплонагруженного источника, обеспечивающая минимизацию температуры на нем при заданных массогабаритных характеристиках [4].

На вход канала с заданной скоростью и температурой подается воздушный поток, обтекающий теплоотводящее тело с внутренним точечным источником тепла. Требуется определить распределение температурного поля на поверхности тела с целью выявления неэффективных участков площади теплоотвода и области отрыва потока от поверхности тел, влияющие на температуру источника. Внешняя среда в рабочем пространстве – воздух, считается несжимаемой невесомой вязкой теплопроводной жидкостью. Обтекание симметричное, режим течения – ламинарный.

В программе *SolidWorks* были созданы трехмерные модели исследуемых теплоотводящих тел и теплонагруженного элемента. В программе *Ansys Workbench* были разработаны файлы проектов, содержащие в себе все нужные комплексы, для исследования распространения температурных полей в системе тело–поток.

Посредством *DesignModeller* созданные геометрии были помещены в программу *Workbench*, в ней же были разработаны и рабочие области, на два порядка превышающие размеры созданных объектов. Спроектированная геометрия рабочей области в дальнейшем была преобразована в сеточную структуру, где с помощью программного компонента *Ansys Meshing* была спроектирована расчетная сетка.

Выводы

В результате проведенного вычислительного эксперимента определялась зависимость температуры теплонагруженного элемента от формы теплоотводящего тела в конвективном потоке. Численные исследования проводились в универсальной программной системе конечно-элементного анализа *Ansys Fluent*, математической основой которого являются уравнения Навье-Стокса, теплопроводности и непрерывности в приближении для несжимаемой жидкости. Для описания процесса распределения теплового поля в системе тело-поток мы воспользовались аналогией распространения теплового и электростатического полей от точечного источника. Приведенные теоретические данные об разнотемпературности зон поверхности теплоотводящего тела в конвективном потоке были подтверждены вычислительным экспериментом, который показал, что форму теплоотвода следует выполнять по эквипотенциальным поверхностям теплонагруженного источника.

Литература

1. Лутченков Л.С., Лайне В.А. Моделирование и анализ тепловых режимов аппаратуры. – СПб.: ГУТ им. проф. М.А. Бонч-Бруевича. 1995. 355 с.
2. Автоматизированное теплофизическое проектирование микроэлектронных устройств: Учеб. Пособие / А.В. Муратов, О.Ю. Макаров; Воронеж. гос. техн. ун-т. Воронеж, 1997. – 92 с.
3. Дульнев Г.Н. Тепло- и массообмен в радиоэлектронной аппаратуре: Учебник для вузов по спец. «Конструированию и производству радиоаппаратуры». – М.: Высш. шк., 1984. – 247с.
4. Палий А.В. Массоперенос и основное уравнение аэродинамики. Таганрог: Изд. ТТИ ЮФУ, 2012. 192 с.

RESEARCH OF THE EFFICIENCY THE DESIGN A BIMETALLIC RADIATOR COPPER AND ALUMINUM FOR A HEAT-LOADED SOURCE OF ELECTRONIC TECHNOLOGY

N.N. Chernov, A.V. Palii, A.V. Sayenko

Abstract. The paper describes the results of a computational experiment to assess the efficiency and optimize the design of a heat sink for a heat-loaded source of electronic equipment in order to minimize the temperature of the source and reduce production costs.

Keywords: heat removal, thermal conditions of equipment, computational experiment, materials of electronic technology.

4. D

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

CONSISTENT MODELING OF DC AND AC CHARACTERISTICS OF GaN/AlGaN MICROWAVE POWER HEMTS

José C. Pedro^{1,2}, João L. Gomes^{1,2} and Luís C. Nunes^{1,2}

*jcpedro@ua.pt, joaolucas@ua.pt, cotimos@ua.pt,
+351 234377900*

¹ *Instituto de Telecomunicações, Aveiro, Portugal*

² *Universidade de Aveiro, Aveiro, Portugal*

Abstract. This work discusses the necessary modelling efforts needed to build nonlinear equivalent-circuit models that can produce consistent direct-current (dc) and alternate-current (ac) characteristics of non-quasi-static devices such as GaN/AlGaN HEMTs, showing electro-thermal and/or trapping behavior. With this goal in mind, a measurement methodology addressing both pulsed dc I/V characteristics and pulsed S-parameters is presented and exemplifying results are shown.

Keywords: GaN HEMT, modeling, nonlinear measurements, non-quasi-static model, Pulsed S-parameters, trapping.

Static and Non-Quasi-Static Electron Devices

By adopting an equivalent-circuit topology based on the physical structure of the device to be modeled, and then extracting the values of its elements from measurements, an equivalent-circuit model can provide a representation of the device that is optimal in accuracy and predictive capabilities [1]. Indeed, it is this predictive capability that leads us to believe that a model extracted from dc current-voltage, dc I/V, measurements, can be useful to predict the device's response to a time-varying signal.

In mathematical terms, this means that, e.g., the drain-source current of an FET, $i_{DS}(t)$, which is dependent on the transistor's terminal gate-source and drain-source voltages, $v_{GS}(t)$ and $v_{DS}(t)$, respectively, can be calculated as a times series of static points $i_{DS}(v_{GS}, v_{DS})$, as if the succession of the voltages in time was irrelevant. This is so because the FET is supposed to react to the present terminal voltages, regardless of their past:

$$i_{DS}(t) \equiv i_{DS}[v_{GS}(t), v_{DS}(t)] = i_{DS}(v_{GS}, v_{DS}) \quad (1)$$

Under this assumption, the device is said to obey the quasi-static approximation, so that its drain-source current small-signal characteristics can be estimated from the following first-order Taylor series approximation:

$$i_{DS}(v_{GS}, v_{DS}) \approx I_{DS} + i_{ds} = i_{DS}(v_{GS}, v_{DS})|_{v_{GS}, v_{DS}} + \frac{\partial i_{DS}(v_{GS}, v_{DS})}{\partial v_{GS}} \Big|_{v_{GS}, v_{DS}} (v_{GS} - V_{GS}) + \frac{\partial i_{DS}(v_{GS}, v_{DS})}{\partial v_{DS}} \Big|_{v_{GS}, v_{DS}} (v_{DS} - V_{DS}) \equiv I_{DS} + G_m(V_{GS}, V_{DS})v_{gs} + G_{ds}(V_{GS}, V_{DS})v_{ds} \quad (2)$$

where the small-signal or incremental components, v_{gs} , v_{ds} , i_{ds} , and their corresponding dc quiescent points, V_{GS} , V_{DS} , I_{DS} , are defined from the total voltages and currents, v_{GS} , v_{DS} , i_{DS} , by $v_{GS} \equiv V_{GS} + v_{gs}$, $v_{DS} \equiv V_{DS} + v_{ds}$ and $i_{DS} \equiv I_{DS} + i_{ds}$.

According to (2), one could be led to believe that a fitting function of $i_{DS}(v_{GS}, v_{DS})$ (i.e., the nonlinear voltage-dependent current source that, in the equivalent-circuit model, represents the FET's drain-source current) can be either directly extracted from measured dc I/V characteristics – $i_{DS}(v_{GS}, v_{DS}) = I_{DS}(V_{GS}, V_{DS})$ – or from the integration of measured transconductance [e.g., from the low-frequency bias-dependent forward admittance parameter, $y_{21}(V_{GS}, V_{DS})$]

$$i_{DS}(v_{GS}, V_{DS}) = \int_{V_{GS1}}^{v_{GS}} G_m(u, V_{DS}) du + I_{DS}(V_{GS1}, V_{DS}) \quad (3)$$

or even from the integration of measured output conductance [e.g., from the low-frequency bias-dependent output admittance parameter, $y_{22}(V_{GS}, V_{DS})$]

$$i_{DS}(V_{GS}, v_{DS}) = \int_{V_{DS1}}^{v_{DS}} G_{ds}(V_{GS}, u) du + I_{DS}(V_{GS}, V_{DS1}). \quad (4)$$

The problem is that the drain-source currents obtained from (3) and (4) are equal, and equal to the directly measured dc I/V characteristics, if, and only if,

$$\frac{\partial^2 i_{DS}(v_{GS}, v_{DS})}{\partial v_{GS} \partial v_{DS}} = \frac{\partial^2 i_{DS}(v_{GS}, v_{DS})}{\partial v_{DS} \partial v_{GS}}$$

or

$$\frac{\partial G_{ds}(v_{GS}, v_{DS})}{\partial v_{GS}} = \frac{\partial G_m(v_{GS}, v_{DS})}{\partial v_{DS}},$$

something that is not verified in any device that shows significant electro-thermal and/or trapping behavior, as is the case of modern high-power GaN/AlGaN HEMTs, as illustrated in Fig. 1.

DC I/V and Small-Signal Isodynamic Characterization

To guarantee the above quasi-static conditions, it is necessary that the dc I/V or bias-dependent small-signal tests are made under isodynamic (same temperature and trapping state) conditions [1], with double-pulse v_{DS} biasing and a specific laboratory setup like the one shown in Fig. 2 [2].

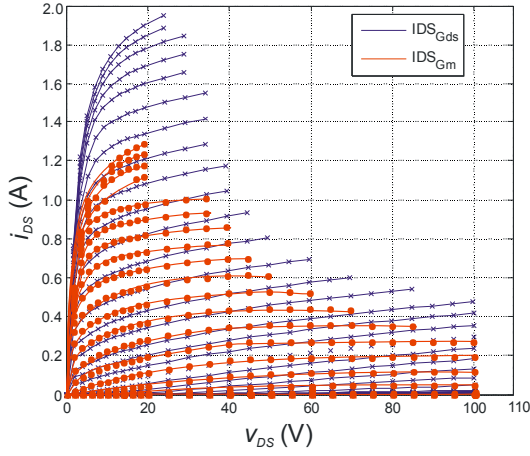


Fig. 1. Inconsistent drain-source current characteristics obtained from non-isodynamically measured $G_m(v_{GS}, V_{DS})$ and $G_{ds}(V_{GS}, v_{DS})$

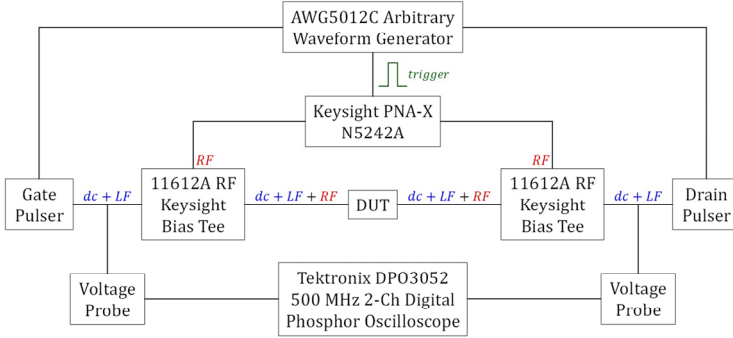


Fig. 2. Laboratory measurement setup for isodynamic dc I/V and Y-parameter characterization [2]

Although complex and expensive, such a laboratory setup pays back since it provides the measurements needed to extract GaN HEMT models that are consistent under dc and ac excitations. In addition, and beyond quasi-static drain-source current extractions, this laboratory setup also provides quasi-static gate charge [actually, gate-source capacitance, $C_{gs}(v_{GS})$] measurements, essential for high-frequency GaN HEMT applications.

Fig. 3 and Fig. 4 illustrate such $C_{gs}(v_{GS})$ and $G_{ds}(v_{GS})$ measurements, respectively, taken from a commercial microwave power GaN HEMT, where V_{DSQ} set the isodynamic state.

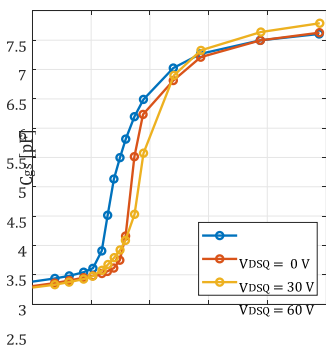


Fig. 3. Measured $C_{gs}(v_{GS})$ values obtained from double-pulse bias-dependent Y-parameters [2]

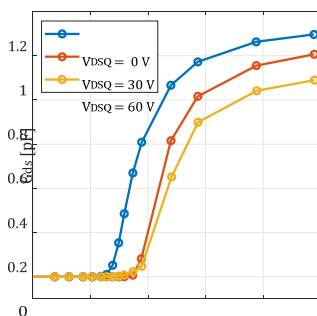


Fig. 4. Measured $G_{ds}(v_{GS})$ values obtained from double-pulse bias-dependent Y-parameters [2]

References

- [1] Pedro J., D. Root, J. Xu and L. Nunes, Nonlinear Circuit Simulation and Modeling – Fundamentals for Microwave Design, Cambridge University Press, 2018.
- [2] Gomes J., L. Nunes and J. Pedro, “Transient Pulsed S-Parameters for trapping Characterization,” International Workshop on Integrated Nonlinear Microwave and Millimetre-Wave Circuits, Cardiff, Jul. 2020.

УДК 537.9:004.94

<https://doi.org/10.29003/m1534.MMMSEC-2020/109-112>

КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ МАГНЕТИЗАЦИИ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ Si:P

Гниденко Антон Александрович^{1,3},

к.ф.-м.н., научный сотрудник,
agnidenko@mail.ru, +7 (924) 203-06-65

Чибисов Андрей Николаевич¹,

к.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник,
andreichibisov@yandex.ru, +7 (924) 402-89-08

Чибисова Мария Анатольевна²,

к.ф.-м.н., старший научный сотрудник,
otariya2003@yandex.ru, +7 (924) 113-42-09

Прохоренко Анастасия Валерьевна¹,

магистрант, младший научный сотрудник,
aimrva@pni.edu.ru, +7 (924) 225-42-40

¹ Тихоокеанский государственный университет, г. Хабаровск

² Вычислительный центр ДВО РАН, г. Хабаровск

³ ФГБУН Институт Материаловедения ХНЦ ДВО РАН, г. Хабаровск

Аннотация. Проведен неколлинеарный расчет электронной структуры кремния допированного фосфором. Установлена зависимость ширины энергетической щели между донорным уровнем и дном зоны проводимости от величины магнетизации на атоме фосфора, показана возможность управления направлением атомного спина фосфора с помощью магнитного поля.

Ключевые слова: кристаллический кремний, донорная примесь, теория функционала плотности, метод, псевдопотенциалов, кубит.

Введение

Способность управления квантовыми состояниями, возможность считывания и передачи информации через кубиты – важный вопрос в развитии квантовых компьютеров. Один из перспективных способов создания кубитов – использование одиночных атомов фосфора, допированных в кристаллический кремний. Технологическая схема создания кубитов на основе Si:P была предложена Кейном [1] еще в 1998 году. Спиновые состояния электрона, связанного с атомом фосфора характеризуются относительно высоким временем когерентности, кроме того создание кубитов на основе Si:P полностью совместимо с текущей кремниевой полупроводниковой технологией. В работе Морелло [2] экспериментально была показана возможность считывания ориентации спина электрона. В представленной работе был проведен комплекс квантово-механических расчетов с целью изучения электронной структуры Si:P и влияния, оказываемого на нее ограничением магнетизации.

Результаты расчетов и их анализ

Квантово-механические расчеты, представленные в данной работе, выполнены с использованием программного пакета Quantum ESPRESSO [3], основанного на теории функционала плотности и методе псевдопотенциала. Для обменно-корреляционного потенциала было использовано приближение обобщенных градиентов. Энергия обрезания базиса плоских волн составила 476 эВ. Кристаллическая решетка кремния была задана суперячейкой из 64 атомов, центральный атом в ячейке замещался атомом фосфора. Набор k-точек был задан сеткой $3 \times 3 \times 3$ по схеме Монкхорста-Пэка.

Полную магнетизацию системы Si:P определяет наличие неспаренного электрона атома фосфора, в состоянии равновесия она составляет $1 \mu_B/\text{cell}$. Так же как и плотность избыточного электрона не локализована исключительно на атоме, а пространственно распределена в некоторой области, так и магнетизация имеет простран-

ственное распределение. В случае ячейки из 64 атомов (1 атом кремния замещен фосфором) магнетизация на атоме фосфора составляет 0.019 $\mu\text{B}/\text{cell}$, на 4-х атомах кремния связанных с атомом фосфора – 0.010 $\mu\text{B}/\text{cell}$. На других атомах кремния величина магнетизации меняется в пределах от 0.002 до 0.007 $\mu\text{B}/\text{cell}$.

Мы использовали два основных, реализованных в программе Quantum ESPRESSO, способа ограничить магнетизацию. При ограничении величины общей магнетизации и ее направления мы можем рассмотреть ее влияние на ориентацию спина атома фосфора. Отклонение общей магнетизации системы от оси Z приводит к созданию магнитного поля, которое разворачивает направление магнитных моментов отдельных атомов (квантовые состояния $|0\rangle$ и $|1\rangle$ в сфере Блоха) по направлению общей магнетизации. Ограничение (усиление) магнетизации на атоме фосфора ведет к соответствующему увеличению полной энергии, которое может быть обусловлено увеличением энергетической щели между донорным уровнем и потолком зоны проводимости. Увеличение магнетизации на атоме фосфора до величины 0.140 $\mu\text{B}/\text{cell}$ приводит к увеличению энергетической щели, вычисленной в Γ -точке, с 0.056 до 0.091 эВ. Полученные результаты могут быть использованы для качественного описания Si:P в перспективе проектирования кубитов на основе данных систем.

Работа поддержана в соответствии с Государственным заданием на выполнение НИР Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № 0818-2020-0005). В работе использовались методы, разработанные в рамках Государственного задания на выполнение НИР в ВЦ ДВО РАН (ХФИЦ ДВО РАН). При выполнении расчетов были использованы ресурсы ЦКП «Центр данных ДВО РАН» (г. Хабаровск) [4], ЦКП «Иркутский суперкомпьютерный центр СО РАН» (г. Иркутск) [5].

Литература

1. Kane B.E. A silicon-based nuclear spin quantum computer. Nature, 1998. Vol. 393, pp. 133–137. DOI: 10.1038/30156.
2. Morello A., Pla J.J., Zwanenburg F.A. et al. Single-shot readout of an electron spin in silicon. Nature, 2010, Vol. 467, pp. 687–691. DOI: 10.1038/nature09392.
3. P. Giannozzi P. et al. Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO. J. Phys.:Condens. Matter., 2017, Vol. 29, P. 465901. DOI: 10.1088/1361-648X/aa8f79.

4. ЦКП «Центр данных ДВО РАН» [Электронный ресурс]: URL: <http://lits.ccfefbras.ru> (дата обращения 02.10.2020).

5. Иркутский суперкомпьютерный центр СО РАН [Электронный ресурс]: URL: <http://hpc.icc.ru> (дата обращения 02.10.2020).

QUANTUM MECHANICAL STUDY OF THE MAGNETIZATION EFFECT ON THE ELECTRONIC STRUCTURE OF SI: P

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

Abstract. Non-collinear calculation of the electronic structure of silicon doped with phosphorus were performed. The dependence of the energy gap between the donor level and the bottom of the conduction band on the phosphorus atom magnetization is investigated, the possibility of manipulation of the phosphorus atom spin using a magnetic field is shown.

Keywords: crystalline silicon, donor impurity, density functional theory, pseudopotential, qubit.

5. Е

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

САМОСИНХРОННЫЕ СХЕМЫ КАК БАЗА СОЗДАНИЯ ВЫСОКОНАДЕЖНЫХ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ КОМПЬЮТЕРОВ СЛЕДУЮЩЕГО ПОКОЛЕНИЯ

Зацаринный Александр Алексеевич¹,

д.т.н., заместитель директора ФИЦ ИУ РАН

AZatsarinny@ipiran.ru, +7 (499) 137-60-31

Степченко Юрий Афанасьевич¹,

к.т.н., заведующий отделом,

YStepchenkov@ipiran.ru +7(495) 671-15-20

Дьяченко Юрий Георгиевич¹,

к.т.н., с.н.с.,

diaura@mai.ru, +7 (495) 678-02-57

Рождественский Юрий Владимирович¹,

к.т.н., вед.н.с.,

YRogdest@ipiran.ru, +7 (495) 678-02-57

¹ *ФИЦ ИУ РАН, г.Москва*

Аннотация. В работе предлагаются конструктивные и схемотехнические решения для реализации высокопроизводительных компьютеров следующего поколения. Они основаны на методологии проектирования самосинхронных схем и обеспечивают повышение устойчивости вычислительных систем к логическим сбоям, являющимся следствием наведенных помех и радиационного воздействия.

Ключевые слова: самосинхронная схема, индикация, сбоеустойчивость, КМОП, многопороговый транзистор.

Введение

Основным трендом современной микроэлектроники являются постоянная борьба за снижение энергопотребления и соблюдение жестких требований к надежности и помехозащищенности схем. В настоящее время существует достаточно хорошо проработанная альтернатива синхронным схемам – самосинхронные (СС) схемы. Они являются многообещающей заменой синхронных схем в качестве схемотехнической базы для создания компьютеров нового поколения, обеспечивая бесперебойную работу в нестабильных условиях эксплуатации вычислительных систем (напряжения питания, температуры) и повышенную устойчивость к воздействию неблагоприятных факторов окружающей среды. В работе обсуждаются

конструктивные и схемотехнические методы повышения надежности СС-схем и вычислительных систем на их основе.

Повышение сбоеустойчивости СС-схем

СС-схемы используют четыре основных принципа проектирования [1]: избыточное кодирование информационных бит; двухфазное поведение; индикацию окончания переключения схемы в очередное состояние; запрос-ответное взаимодействие соседних в тракте обработки информации СС-устройств. Использование парафазного кода [2] для представления информационных сигналов упрощает индикацию окончания переходных процессов в элементах СС-схемы и повышает надежность передачи информации между блоками вычислительной системы.

Анализ поведения самосинхронных схем в условиях воздействия неблагоприятных факторов окружающей среды, приводящих к появлению кратковременных логических сбоев, показывает, что СС-схемы обладают естественной устойчивостью к кратковременным логическим сбоям. Они маскируют более 80% логических сбоев за счет своих принципов организации и функционирования. Индикация запрещенного состояния парафазного сигнала, появляющегося в результате логического сбоя, как спейсера и использование Dual Interlocked Cell (DICE) подхода [3] к проектированию критических узлов СС-схем дополнительно повышают устойчивость СС-схем к кратковременным логическим сбоям до уровня 96%.

Уменьшение сложности СС-схем

Основной недостаток самосинхронных схем – аппаратная избыточность, связанная с избыточным кодированием информационных сигналов и необходимостью подтверждения завершения процессов переключения всех элементов схемы. В работе обсуждается возможность сокращения аппаратных затрат на реализацию СС-схем за счет использования нового схемотехнического компонента – многопорогового транзистора. Его применение позволило бы упростить схемотехническую и топологическую реализации СС-схем и за счет этого дополнительно увеличить их помехо- и сбоеустойчивость.

Выводы

В работе предложены новые подходы к повышению надежности СС-схем в базе КМОП технологии, включающие схемотехнические, конструктивные и топологические способы. Разработка многопороговых МОП транзисторов и схемотехники основных

элементов СС-схем на их основе позволит сократить сложность СС-устройств и площадь их топологической реализации.

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

Литература

1. Степченко Ю.А., Дьяченко Ю.Г., Горелкин Г.А. Самосинхронные схемы – будущее микроэлектроники // ЦНИИ «Электроника»: Вопросы радиоэлектроники, 2011. № 2. С. 153–184.

2. Зацаринный А.А., Козлов С.В., Степченко Ю.А., Дьяченко Ю.Г. Формирователь парафазного сигнала с единичным спейсером. Пат. РФ № 2718220, опубл. 31.03.2020. Бюл. № 10. – 7 с.

3. Berg M. Revisiting Dual Interlocked Storage Cell (DICE) Single Event Upset (SEU) Sensitivity // Microelectronics Reliability & Qualification Working Meeting (MRQW) 2013 and HiREV Industry Day, El Segundo, CA, December 10–12, 2013 https://nrc.nasa.gov/files/25702/2013MRQW_Berg_n272.pdf (дата последнего обращения 03.10.2020).

SELF-TIMED CIRCUITS AS A BASIS FOR DEVELOPING NEXT GENERATION HIGH-RELIABLE HIGH-PERFORMANCE COMPUTERS

A.A. Zatsarinny, Yu.A. Stepchenkov, Yu.G. Diachenko, Yu.V. Rogdestvenski

Abstract. The paper proposes design and circuitry solutions for the implementation of high-performance next generation computers. They are based on self-timed circuit design methodology and provide an increase in the tolerance of computing systems to soft errors resulting from induced noises and radiation exposure.

Keywords: self-timed circuit, indication, fault-tolerance, CMOS, multi-threshold transistor.

<https://doi.org/10.29003/m1536.MMMSEC-2020/116-119>

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ АППРОКСИМАЦИИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК МЕМРИСТОРА

Лопатенко В.В.¹

¹ *Московский авиационный институт (НИУ)*

Аннотация. Мемристор – пассивный элемент в микроэлектронике, по своим свойствам похожий на биологический синапс. Возможность использования мемристора в качестве аналогового элемента в нейросетях повышает интерес к изучению его свойств со стороны научного сообщества.

В данной работе изучается возможность моделирования некоторых характеристик мемристора, используя алгоритмы машинного обучения, в частности алгоритм градиентного бустинга.

Ключевые слова: мемристор, машинное обучение, градиентный бустинг, задача регрессии.

Искусственный интеллект является одним из самых важных направлений инновационного развития нашего времени. Все более и более востребованным на практике становятся методы нахождения закономерностей в больших объемах данных и, в частности, алгоритмы машинного обучения на прецедентах или алгоритмы обучения с учителем. В контексте таких алгоритмов можно говорить о двух типах задач – задача регрессии и классификации, причем если мы хотим предсказывать значения из конечного множества меток (классов), то следует говорить о задаче классификации. Напротив, пытаясь поставить множеству данных в соответствие определенное вещественное число, мы решаем задачу регрессии, как бы восстанавливая неизвестную целевую функцию.

Мемристор – пассивный элемент в микроэлектронике, способный изменять своё сопротивление в зависимости от протекшего через него заряда (интеграла тока за время работы) [1, 2]. По своей сути он похож на резистор, с тем лишь отличием, что сопротивление меняется нелинейно (резистор может иметь как постоянно сопротивление, так и переменное – в таком случае оно будет изменяться по линейному закону). Данный элемент представляется перспективным аналогом биологического синапса, что делает особенно актуальным изучение его свойств.

В данной работе изучается применимость методов машинного обучения, в частности метода градиентного бустинга, для решения задачи аппроксимации вольт-амперной характеристики мемристора во времени. На основе имеющихся экспериментальных данных, представленных на рис. 1, модель пытается предсказать значение величины силы тока в определенный момент времени.

Градиентный бустинг является ансамблевым алгоритмом машинного обучения, поскольку на самом деле использует композицию алгоритмов, построенных итеративно таким образом, что каждый следующий обучаемый алгоритм решает задачу минимизации ошибки между наблюдаемыми значениями целевой переменной и прогнозом текущей композиции [3]. По сути это метамодель, которая выполняет градиентный поиск наилучшей в смысле выбранной метрики модели в пространстве функций. Такой подход к решению

задач машинного обучения делает этот алгоритм лидером во многих задачах среди классических алгоритмов, не использующих принципы глубокого обучения.

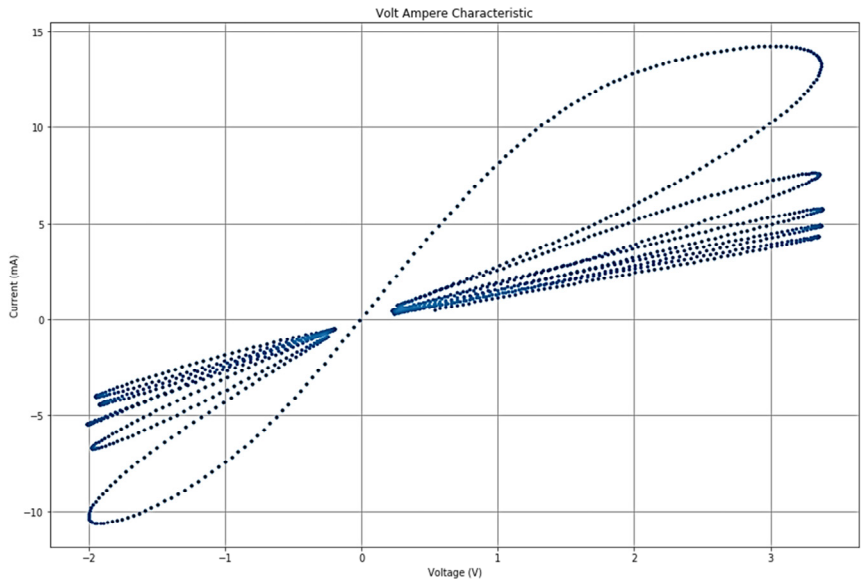


Рис. 1. Вольт-амперная характеристика на экспериментальных данных

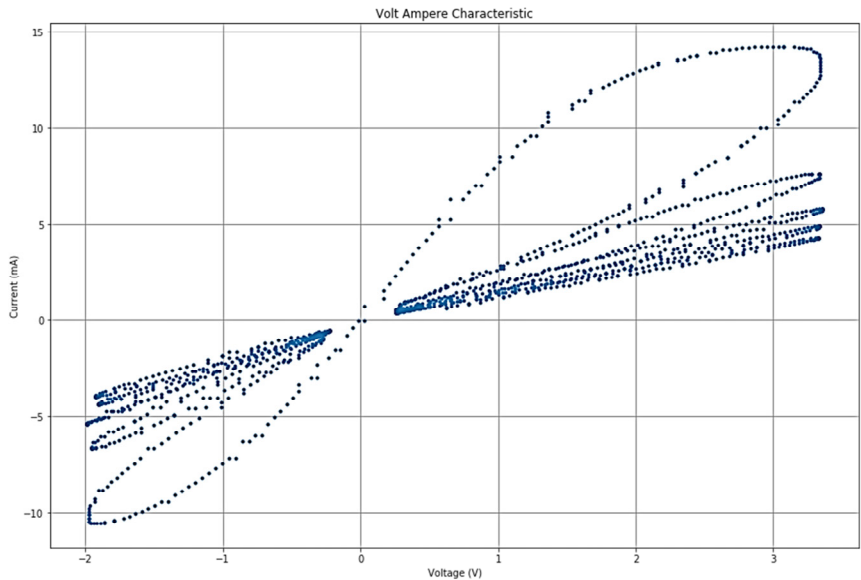


Рис. 2. Вольт-амперная характеристика согласно прогнозу модели

На рис. 2 представлена прогнозная вольт-амперная характеристика мемристора, построенного на основе наноструктуры диоксида титана (TiO_2), полученной в результате обучения алгоритма градиентного бустинга на имеющихся экспериментальных данных. При моделировании использовалась реализация алгоритма, представленная в вычислительном фреймворке XGBoost [4] языка программирования Python.

В результате обучения модели были получены удовлетворительные результаты, которые достаточно хорошо согласуются с экспериментальными данными, что говорит об эффективности предложенного подхода. Абсолютное значение величины ошибки при этом не превышает 1. В качестве функционала качества при решении данной задачи была использована среднеквадратичная ошибка.

Литература

- [1] Z. Bielek, D. Bielek and V. Biolkova, “Spice model of memristor with non-linear dopand drift” // Redioengineering, vol. 18, no. 2, pp. 210–214, 2009.
- [2] L. O. Chua and O. Leon, “Memristor – The missing circuit element” // IEEE Trans, Circuit Theory, vol. CT-18, no. 5, pp. 507–519, Sep. 1971.
- [3] Jerome H. Friedman, “Greedy Function Approximation: A Gradient Boosting Machine” // IMS 1999 Reitz Lecture, Feb. 1999.
- [4] Tianqi Chen, Carlos Guestrin, “XGBoost: A Scalable Tree Boosting System” // arXiv preprint arXiv:1603.02754, Jun. 2016.

APPLICATION OF MACHINE LEARNING METHODS TO APPROXIMATE THE EXPERIMENTAL CHARACTERISTICS OF A MEMRISTOR

V.V. Lopatenko

Abstract. Memristor is a passive element in microelectronics, similar in its properties to a biological synapse. The possibility of using a memristor as an analog element in neural networks increases the interest of the scientific community in the study of its properties. In this paper, we study the possibility of modeling some characteristics of a memristor using machine learning algorithms, in particular, the gradient boosting algorithm.

Keywords: Memristor, Machine learning, Gradient Boosting, Regression task.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОСТОЙ МОДЕЛИ МЕМРИСТОРА ВТОРОГО ПОРЯДКА ПРИ ЕГО ЦИКЛИРОВАНИИ

Матюшкин Игорь Валерьевич¹,

*к.ф.-м.н., старший научный сотрудник,
imatyushkin@niime.ru, +7 (906) 048-21-11*

Гусейнов Давуд Вадимович²,

*к.ф.-м.н., старший научный сотрудник
guseinov@phys.unn.ru, +7 (903) 657-76-66*

¹ АО НИИМЭ, г. Москва, Зеленоград

² ННГУ им. Лобачевского, г. Нижний Новгород

Аннотация. Предложена простая модель нелинейной динамики поведения сопротивления мемристора при его циклировании, предполагающая две фазовые переменные (длина и захваченный им заряд), определяющие четыре ключевые параметры мемристора. В пространстве трех параметров модели найдены квазипериодические режимы, странный аттрактор и хаотическое поведение. В большинстве случаев управление рассматривалось синусоидальным сигналом.

Ключевые слова: мемристор, нелинейная динамика, странный аттрактор.

Введение

Нестабильность работы мемристора, проявляющаяся, в частности, при его циклировании [1–3], является сдерживающим фактором для его применения. Эта нестабильность, по нашему предположению, есть свойство нелинейной динамики области филамента под воздействием внешнего напряжения. Актуальна задача поиска, желательно простой, модели, описывающей эту динамику. Исследование такой модели и фазового портрета её режимов работы представляет интерес и для математиков, и для практиков, поскольку правильный выбор численных значений параметров, например, при тренировке мемристора, способен устранить нестабильность и ввести мемристор в простой периодический режим.

Структура модели и методы её исследования

Формальный и физический базис модели дан нами в [1]. Традиционная модель Струкова для мемристора первого порядка не способна ввиду следствия из теоремы Пуанкаре-Бендиксона воспроизвести хаос, наблюдаемый при циклировании [2]. Нужны модели

более высоких порядков для нахождения бифуркаций [3]. Наша модель не является точной в смысле описания электрофизики, в ней лишь добавлено наряду с дифференциальной связью на длину филамента, формализуемой через примитивную ступеньку функции захвата, одно уравнение на захваченный филаментом заряд, пропорциональный протекающему через него току, и соответственно вводится функция захвата. Структура второго уравнения повторяет структуру первого уравнения, а функция захвата имеет также простой вид – линейной функции с нормировкой на некий максимальный заряд.

Динамика изменения длины филамента, связанная обычно с подвижностью ионов кислорода, дает первый коэффициент, а динамика захвата заряда, определяемая из квантово-механических соображений, дает второй коэффициент модели. Третий коэффициент отражает поправку на сдвиг напряжения для преодоления кулоновского барьера и результирующий ток, вводимую в алгебраическое уравнение модели Струкова для омической связи тока и напряжения. Таким образом, поведение модели, т.е. вид режима, может быть исследовано в пространстве трех параметров и двух начальных условий.

Внешнее напряжение при циклировании по сути является управлением для автономной системы уравнений; мы рассматривали две базовые формы – синусоида и периодическая ступенька-меандр. Временная ось делилась на периоды, а фазовые переменные смотрелись как в непрерывном времени, так и в дискретном – как отсчеты в середине периода сигнала. В пределах одного периода мы имеем одну гистерезисную кривую, характеризуемую 4-мя параметрами – напряжениями записи и стирания, сопротивлениями во включенном и выключенном состоянии.

В первую очередь исследовалось разнообразие траекторий дискретных отсчетов и фазовых переменных, и четверки параметров мемристора. Нами были не только устойчивые траектории, т.е. стремление к равновесию или 2-, 3-периодические орбиты, то и динамическая смена аттрактора (после 50-200 циклов), и квазипериодичность, и хаотические колебания. Было построено несколько фазовых портретов. Наиболее трудоемким оказалось построение трех фазовых диаграмм-сечений в пространстве трех параметров; начальные условия полагались нулевыми. Каждое сечение строилось при некотором диапазоне изменения двух параметров и фиксированном уровне третьего параметра.

Выводы

Хотя при составлении модели мы руководствовались соображениями простоты и исследовалась лишь одна из её вариаций, но вычислительный эксперимент показал сложность её поведения в динамике, наличие области хаоса в компактной области трехмерного пространства параметров, а также явление странного аттрактора (неустойчивой смены динамики при смене одного аттрактора на другой при длительном циклировании). Таким образом, при периодическом внешнем воздействии (циклировании) модель мемристора второго порядка способна описывать хаотические сдвиги кривой гистерезиса.

Работа выполнена при поддержке Правительства РФ через соглашение № 074-02-2018-330 (2).

Литература

1. Матюшкин И.В. Нелинейно-динамический подход в анализе неустойчивости параметров мемристора // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2019. Т. 22, № 4. С. 253 – 261
2. Mikhaylov A.N., A.I. Belov, D.V. Guseinov, D.S. Korolev, I.N. Antonov, D.V. Efimovych, S.V. Tikhov, A.P. Kasatkin, O.N. Gorshkov, D.I. Tetelbaum et al., “Bipolar resistive switching and charge transport in silicon oxide memristor,” Materials Science and Engineering: B, vol. 194, pp.48–54, 2015.
3. Pershin Y.V., Slipko V.A. Bifurcation analysis of a TaO memristor model // J. Phys. D: Appl. Phys. 2019. V. 52, N 50. P. 505304.

INVESTIGATION OF A SIMPLE MODEL OF A SECOND-ORDER MEMRISTOR DURING ITS CYCLING

I.V. Matyushkin, D.V. Guseinov

Abstract. A simple model of nonlinear dynamics of the memristor resistance behavior during its cycling is proposed, which assumes two phase variables (the length and the charge captured by filament) that determine the four key parameters of the memristor. In the space of three parameters of the model, quasi-periodic modes, a strange attractor, and chaotic behavior are found. In most cases, the control was considered a sinusoidal signal.

Keywords: memristor, nonlinear dynamics, strange attractor.

ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИМПУЛЬСНОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ С МЕМРИСТИВНЫМИ ЭЛЕМЕНТАМИ В КАЧЕСТВЕ СИНАПСОВ

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)

Искусственные нейронные сети используются во многих областях современной жизни и позволяют решать актуальные, важные и практически значимые задачи, которые зачастую не поддаются решению с помощью классических подходов. Для ускорения работы нейросетевых алгоритмов ведутся разработки специальных процессоров, основанных на принципах действия человеческого мозга и представляющих собой аппаратную реализацию импульсных (спайковых) нейронных сетей. Перспективным в данном направлении представляется использование аналоговых вычислений вместо цифровых, так как они производятся на порядки быстрее. В связи с этим, актуальной задачей является создание аналоговых нейроморфных систем.

Мемристор – это резистор, проводимость которого меняется в зависимости от суммарного протекшего через него электрического заряда и который является элементарной ячейкой долгосрочной энергонезависимой памяти [1]. Объединение мемристоров в матрицу (кроссбар) позволяет выполнять быстрое аналоговое произведение матрицы на вектор. За счет определенного сходства мемристивных элементов с биологическим синапсом перспективным представляется их использование для аналоговой реализации самообучающихся импульсных нейронных сетей [2].

В работе выполняется имитационное моделирование двухслойной полносвязной самообучающейся аналоговой сети с одним слоем мемристивных элементов (синапсов), которая состоит из n входов и m нейронов (рис. 1). Используется 1T1R-кроссбар-архитектура, в которой каждому мемристорному элементу соответствует один транзистор. Благодаря такой комбинации имеется возможность выполнять обучение сети на аппаратном уровне с помощью метода STDP (Spike Timing Dependent Plasticity) [3]. Данный механизм обучения

реализуется за счет обратной связи (V_{te}). В момент активации нейрона по каналу обратной связи с задержками поступают два противоположных по знаку импульса (рис. 2).

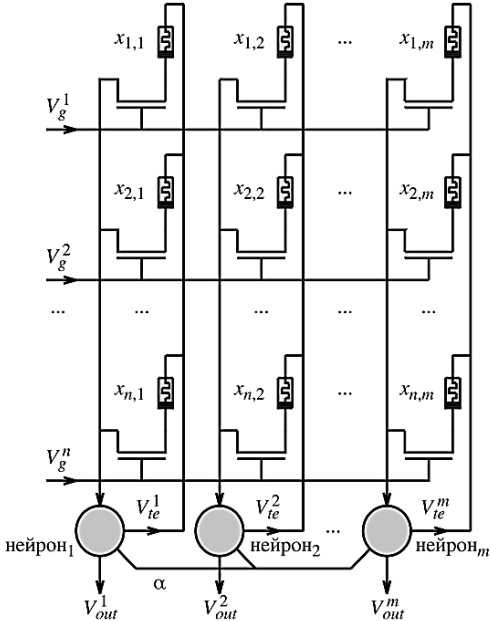


Рис. 1. Схмотехническая реализация импульсной нейронной сети

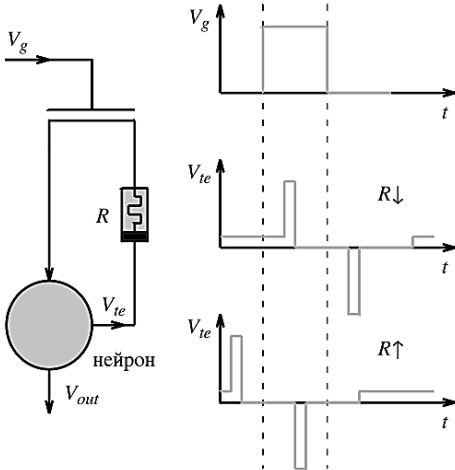


Рис. 2. Схмотехническая реализация правила обучения STDP

Если на синапсе есть активность и пришел положительный импульс обратной связи, то значение сопротивления соответствующего мемристора уменьшается, а если пришел отрицательный импульс обратной связи, то сопротивление мемристора увеличивается.

Схемотехническая модель нейрона представляет собой параллельную RC цепь и абстрактный генератор импульсов G (рис. 3). Как только значение потенциала на конденсаторе превышает некоторый порог, его потенциал сбрасывается, и генератор импульсов выдает выходной сигнал V_{out} и сигнал обратной связи V_{te} . Дополнительно, в момент активации нейрона происходит подавление других нейронов (принудительно уменьшается накопленный ими потенциал пропорционально коэффициенту α).

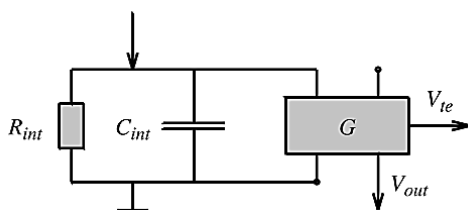


Рис. 3. Схемотехническая реализация нейрона

Обучение сети происходит следующим образом: в начальный момент времени синаптические веса инициализируются случайным образом, а далее многократно на вход в сеть с равной вероятностью подается или произвольный шум, или заранее определенные шаблоны. Спустя некоторое время сеть адаптируется к распознаванию шаблонов. Под одной эпохой обучения подразумевается то время, на протяжении которого сети демонстрируется образец или случайный шум.

Рассматривается задача распознавания пяти образцов размером 8×8 . Выполняется математическое моделирование нейронной сети состоящей из 64 входов и 5 нейронов. В качестве модели мемристора используется модель с нелинейной зависимостью от напряжения [4], которая описывает мемристор на основе оксида гафния HfO_2 .

На рис. 4 показан процесс адаптации синаптических весов к распознаваемым образцам. Цвет соответствует значению переменной состояния соответствующего мемристора: чем темнее, тем проводимость больше; чем светлее, тем меньше. Примерно с 3000-й эпохи веса сети начинают соответствовать распознаваемым шаблонам: происходит запоминание информации нейронной сетью.

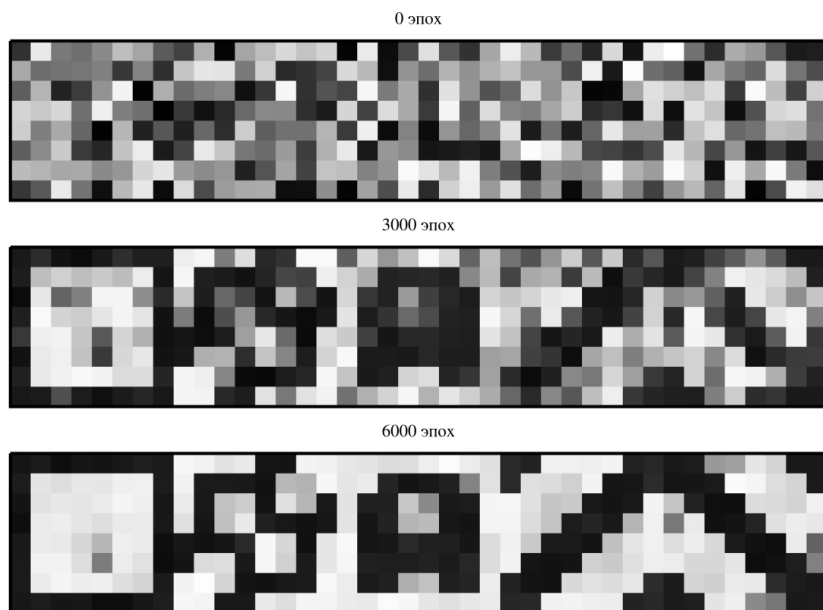


Рис. 4. Изменение синаптических весов в процессе обучения

В конце процесса обучения каждый нейрон срабатывает только на свой определенный входной сигнал (определяемый шаблоном), игнорируя шум, что говорит о том, что нейронная сеть успешно обучилась распознавать заданные образцы.

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

Литература

1. Wong H.-S. P. et al. Metal-oxide RRAM // Proceedings of the IEEE, 2012. Vol. 100, no. 6, pp. 1951–1970. DOI: 10.1109/JPROC.2012.2190369.
2. Морозов А.Ю., Ревизников Д.Л., Абгарян К.К. Вопросы реализации нейросетевых алгоритмов на мемристорных кроссбарах // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники, 2019. Т. 22. № 4. DOI: 10.17073/1609-3577-2019-4-272-278.
3. 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. DOI: 10.1109/TED.2016.2526647.
4. Mladenov V. Analysis of Memory Matrices with HfO₂ Memristors in a PSpice Envi-ronment // Electronics, 8(4), 383, March 2019, p. 16. DOI: 10.3390/electronics8040383.

ПОИСК НАЧАЛЬНОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ ДЛЯ ЗАДАЧИ ЭКСТРАКЦИИ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ МЕМРИСТОРА С ПОМОЩЬЮ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Шамин Евгений Сергеевич

eshamin@niime.ru

Жевненко Дмитрий Алексеевич

DmitryZhev@yandex.ru

Мещанинов Федор Павлович

fmeshaninov@yandex.ru

Кожевников Владислав Сергеевич

vladislavkozhevnikov@gmail.com

Горнев Евгений Сергеевич

egornev@niime.ru

МФТИ (НИУ), 141707, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский переулок, дом 9.

АО «НИИМЭ». 124460, г. Москва, г. Зеленоград, ул. Академика Валиева, дом 6, строение 1

Аннотация. В центре внимания данной работы лежит задача экстракции параметров модели мемристора из экспериментально полученных вольтамперных характеристик. Ставится проблема поиска начального приближения для данной задачи на основе анализа внешнего вида ВАХ средствами машинного обучения.

Ключевые слова: модель мемристора, вольтамперная характеристика, машинное обучение.

Введение и проблематика

Мемристор – микроэлектронное устройство, в основе работы которого лежит обратимое изменение своего сопротивления в зависимости от протекшего через него заряда и сохранение этого сопротивления после отключения питания. Первый образец мемристора был получен в 2008 году [1], однако задача построения его точной физической модели всё ещё не решена [2]. Основное распространение получили компактные модели [3], которые применяются для множества прикладных задач, включая построение схемотехнических моделей на основе мемристоров. Использование компактных моделей для анализа реальных устройств предваряется экстракцией их ключевых параметров из эксперимента. Для экстракции приме-

няются различные методы [4-6], самым распространенным из которых является аппроксимация ВАХ мемристора при помощи различных методов оптимизации.

Количество итераций, необходимых для аппроксимации даже одной ВАХ может исчисляться десятками тысяч. Это может занимать значительное время, ведь для каждого определения целевой функции необходимо полностью пересчитывать модельную ВАХ. В случае, когда необходимо определить параметры модели для десятков тысяч ВАХ (например, для анализа серии переключений), это не является приемлемым. На данный момент разработка методов быстрой оптимизации серии переключений является открытой задачей.

Описание подхода к решению проблемы

В данной работе предлагается решение представляющее собой комбинацию методов, в основе которых лежит применение машинного обучения, а именно алгоритмов случайного леса. для определения начального приближения аппроксимации по признакам обрабатываемых ВАХ.

Ввиду того, что, обычно, экстракция параметров мемристора подразумевает достаточно хорошее совпадение модельных и эмпирических ВАХ – составление обучающей выборки, в рамках данного решения, завязано на рандомизации параметров модели мемристора, используемой далее для задачи экстракции параметров. В случае данной работы в качестве модели мемристора использовалась модифицированная версия модели Yakorсіс.

В работе приводится описание алгоритма поиска численных значений признаков контуров ВАХ, основанного на выделении особых точек – начала и конца переключения мемристора. На рис. 1а можно видеть результат работы алгоритма по выделению особых точек на примере модельной ВАХ мемристора. На рис. 1б – схематичное изображение рассчитываемых признаков ВАХ.

Для анализа зависимостей между признаками ВАХ и параметрами модели было реализовано программное средство, позволяющее в реальном времени варьировать параметры модели мемристора и следить за изменениями вида ВАХ.

Для получения начального приближения для каждого параметра модели мемристора проводился регрессионный анализ, по вычисленным признакам ВАХ с помощью алгоритмов случайного леса. График точности случайного леса для параметра b используемой модели мемристора можно видеть на рис. 2.

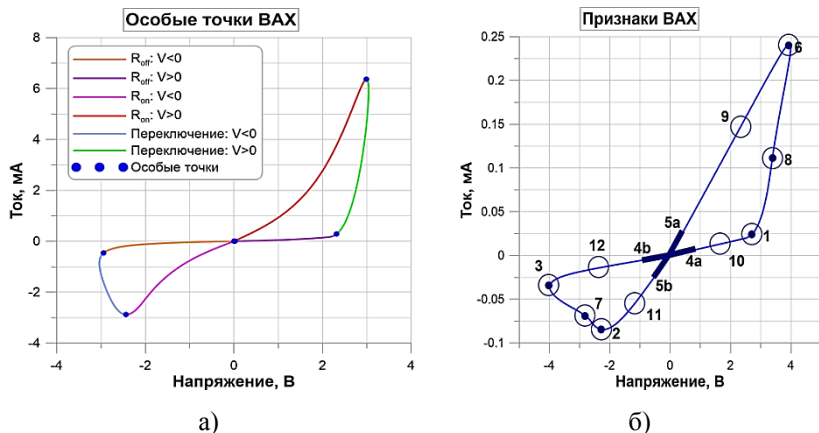


Рис. 1: а) Особые точки модельной ВАХ;
 б) Схематическое изображение рассчитываемых признаков ВАХ.
 Жирные точки – координаты, жирные линии – первые производные,
 круги – вторые производные

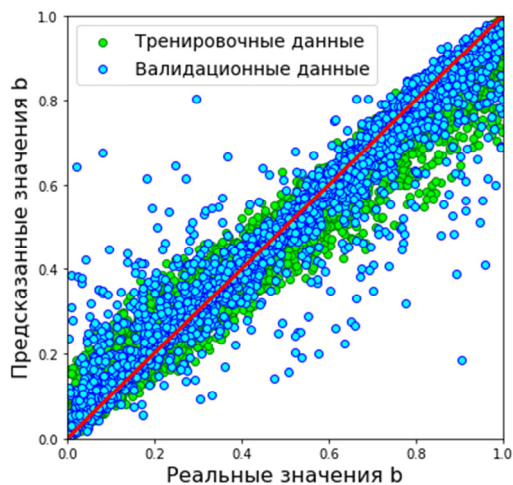


Рис. 2. График точности предсказания параметра b модели Yakorpic

Обученные модели случайного леса использовались для анализа серии переключений мемристора, состоящей из 300 контуров.

Литература

1. Strukov D. B. et al. The missing memristor found //nature. – 2008. – Т. 453. – №. 7191. – С. 80–83.
2. Pershin Y.V., Di Ventra M. On the validity of memristor modeling in the neural network literature //Neural Networks. – 2020. – Т. 121. – С. 52–56.
3. Кожевников В. С. и др. Анализ методов математического моделирования мемристоров // Международный форум «Микроэлектроника-2019» 5-я Международная научная конференция «Электронная компонентная база и микроэлектронные модули». – 2019. – С. 556–568.
4. Chawa, A., et al. "A simple quasi-static compact model of bipolar reram memristive devices." IEEE Transactions on Circuits and Systems II: Express Briefs 67.2 (2019): 390–394.
5. Garcia, A. A., and L. O. Reyes. "Analysis and parameter extraction of memristive structures based on Strukov's non-linear model." Journal of Semiconductors 39.12 (2018): 124009.
6. Yakopcic C. et al. A memristor device model // IEEE electron device letters. – 2011. – Т. 32. – №. 10. – P. 1436–1438.

DETERMINATION OF THE INITIAL GUESS FOR THE PROBLEM OF MEMRISTOR MODEL PARAMETERS EXTRACTION USING MACHINE LEARNING ALGORITHMS

*Shamin Evgeniy Sergeevich, Zhevnenko Dmitriy Alekseevich,
Meshchaninov Fedor Pavlovich, Kozhevnikov Vladislav Sergeevich,
Gornev Evgeniy Sergeevich*

*Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudny
JSC MERI, 124460, Moscow, Zelenograd*

Abstract. The focus of this work is on the algorithm of extraction of parameters of the memristor model from the experimentally obtained current-voltage characteristics. The problem of finding the initial guess for this algorithm based on current-voltage characteristic features is stated and solved by means of machine learning algorithms.

Keywords: memristor model, current-voltage characteristic, machine learning.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМИЧЕСКИХ ЭФФЕКТОВ В HfO_2 RRAM-СТРУКТУРАХ В ПРОЦЕССЕ RESET

Ганыкина Екатерина Андреевна^{1,2},
научный сотрудник,
eganykina@niime.ru, +7 (905) 515-20-38

Горнев Евгений Сергеевич¹,
член-корреспондент РАН, д.т.н., профессор,
начальник управления РПТН,
egornev@niime.ru, +7 (903) 969-60-97

Резванов Аскар Анварович^{1,2},
к.ф.-м.н., начальник лаборатории,
arezvanov@niime.ru, +7 (916) 197-29-98

¹АО «НИИМЭ», г. Зеленоград

²МФТИ, г. Долгопрудный

Аннотация: в настоящей работе исследуется образование и разрыв проводящего слоя вакансий в структуре $\text{Hf}/\text{HfO}_2/\text{TiN}$. Работа охватывает теоретическое рассмотрение термических эффектов, возникающих в данной структуре в процессе RESET. Проведён анализ образования и разрыва филамента в поликристаллическом и аморфном слое HfO_2 .

Ключевые слова: оксид гафния, филамент, переключение, разрыв проводящего слоя, RRAM

Введение

RRAM-устройства, в частности на основе оксида гафния, вызывают наибольший интерес из-за высокой скорости работы, стабильности и долговечности, а также возможности 3D-интеграции [1]. На данный момент нет точно установленных связей свойств материалов структуры с переключательными характеристиками устройства.

В данной работе рассматривается RRAM-структура $\text{Hf}/\text{HfO}_2/\text{TiN}$. Первым этапом формирования внутреннего проводящего слоя в диэлектрике является разрыв Hf-O -связи. Важнейшей причиной разрыва связей является повышение локальной температуры, вызванное скачками электронов, инжектированных из внешней цепи, по вакансиям. Данный процесс вызывает смещение соседних атомов решетки, что эквивалентно испусканию фононов. Это приводит к

повышению локальной температуры и увеличению частоты вибрации Hf-O-связи.

Из-за сильного кулоновского взаимодействия вакансии и ион кислорода, образовавшиеся при разрыве Hf-O-связи, быстро рекомбинируют. Однако в условиях инжекции электронов из внешней цепи у отрицательного электрода образуются вакансии, захватившие электроны. При наличии вблизи образовавшейся пары такой вакансии она стабилизируется за счет обобществления электронов. Новообразовавшаяся вакансия оказывается электрически нейтральной, что предотвращает быструю рекомбинацию [2].

Таким образом, у отрицательного электрода начинается формирование кластера вакансий. Из-за различных свойств материалов электродов филамент будет иметь коническую форму: наблюдается расширение слоя вакансий у верхнего Hf-электрода [3].

При переключении напряжения (процесс RESET) ионы кислорода начинают собираться вблизи нижнего электрода, который является хорошим блокирующим слоем для кислорода (TiN, кристаллическая структура которого не имеет вакансий для внедрения ионов кислорода). Движимые внешним полем и градиентом температуры, ионы кислорода диффундируют к нижнему электроду и втягиваются в область филамента, рекомбинируя с имеющимися там вакансиями. Диффузия ионов в направлении от филамента подавляется сильным снижением температуры: более низкая температура вне области филамента снижает скорость диффузии [4].

Выводы

В работе рассмотрены и проанализированы процессы формирования и разрыва проводящего слоя вакансий в структуре Hf/HfO₂/TiN. Также были получены распределения температуры и электрического поля в процессе RESET. Было показано, что в низкоомном состоянии электрическое поле и градиент температуры вызывают диффузию ионов кислорода и их втягивание вблизи нижнего края филамента, что приводит к переключению структуры в высокоомное состояние.

Литература

1. Красников Г.Я., Горнев Е.С. Развитие полупроводниковой микроэлектроники ОАО «НИИМЭ и Микрон» // История отечественной электроники. М.: Столичная энциклопедия, 2012.
2. Bersuker G., Gilmer D. C., Veksler D. Metal-oxide resistive random access memory (RRAM) technology: Material and operation details and ramifications //

Advances in Non-Volatile Memory and Storage Technology: Woodhead Publishing, 2019. P. 35–102.

3. Goux L. OxRAM technology development and performances // Advances in Non-Volatile Memory and Storage Technology: Woodhead Publishing, 2019. P. 3–33.

4. Niraula D., Karpov V. Numerical modeling of resistive switching in RRAM device // Proceedings of the 2017 COMSOL Conference in Boston. 2017.

INVESTIGATION OF THERMAL EFFECTS IN HfO_2 RRAM STRUCTURES DURING THE RESET PROCESS

E.A. Ganykina, E.S. Gornev, A.A. Rezvanov

Abstract. In this paper, the formation and rupture of a conducting filament in the $\text{Hf}/\text{HfO}_2/\text{TiN}$ structure are investigated. Theoretical consideration of the thermal effects occurring during the RESET process is covered. The analysis of the formation and rupture of a filament in an amorphous HfO_2 layer is carried out. The introduction of the thin Al_2O_3 layer into the $\text{Hf}/\text{HfO}_2/\text{TiN}$ structure is also considered.

Keywords: hafnium oxide, aluminum oxide, filament, switching, conductive filament rupture, RRAM

<https://doi.org/10.29003/m1541.MMMSEC-2020/133-136>

ПРИМЕНЕНИЕ АЛГОРИТМОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ВОЛЬТАМПЕРНОЙ ХАРАКТЕРИСТИКИ МЕМРИСТОРА

Ерещенко А.В.¹

¹ *Московский авиационный институт (НИУ)*

Аннотация. Работа посвящена изучению возможности применения алгоритмов машинного обучения для моделирования вольтамперной характеристики (ВАХ) мемристора на примере моделирования мемристоров на основе HfO_2 , TiO_2 . Исследована возможность совмещения нескольких математических моделей на основе предсказаний отдельных моделей. Выполнено сравнение результатов полученных с помощью комбинированной модели с предсказаниями отдельных моделей и экспериментальными данными.

Ключевые слова: мемристор, вольтамперная характеристика, модифицированные оконные функции, машинное обучение.

Введение

Эффект переключения сопротивления, наблюдаемый во многих аморфных оксидах (TiO_2 , HfO_2 и др.), анализируется с 1970 г. Установлено, что такие оксиды способны изменять свое сопротивление

в соответствии с приложенным напряжением и сохранять свое состояние в течение длительного периода времени, с чем связано наличие физических реализаций мемристоров на основе HfO_2 , TiO_2 . При исследовании мемристоров и их свойств, одним из важных параметров является ВАХ [1].

Существуют различные подходы к математическому моделированию поведения мемристора. Данная работа заключается в объединении двух моделей мемристоров, основанных на модели Lehtonen-Laiho и использующих модифицированные оконные функции Joglekar и Biolek [1].

Объединенная предсказательная модель

Приблизительная зависимость между током мемристора i и напряжением v выражается следующим уравнением [1]:

$$i = x^n \beta \sinh(\alpha v) + \chi [\exp(\gamma v) - 1],$$

где n , β , α , χ и γ , являются подгоночными параметрами, $x \in [0,1]$ – переменная состояния. Эта модель описывает асимметричное поведение. В общем виде уравнение, описывающее состояние мемристора с нелинейной зависимостью от напряжения, может быть представлено следующим образом [1]:

$$\frac{dx}{dt} = a * f(x) * v^s,$$

где a – постоянная, s – нечетное целое число, а $f(x)$ – функция окна, используемая для приблизительного представления нелинейных эффектов ионного дрейфа и ограничения границ.

В статье [1] приводятся две модели основанные на различных оконных функциях. В первой модели используется оконная функция Biolek:

$$\left| \begin{array}{l} \frac{dx}{dt} = a * \left[1 - (x - 1)^{2\text{round}\left(\frac{b}{|v|+c}\right)} \right] * v^s, v \leq -v_{thr}, \\ \frac{dx}{dt} = a * \left[1 - x^{2\text{round}\left(\frac{b}{|v|+c}\right)} \right] * v^s, v > v_{thr}, \\ \frac{dx}{dt} = 0, -v_{thr} < v \leq v_{thr}, \end{array} \right.$$

где v_{thr} – пороговое значение напряжения активации, b и c – подгоночные параметры, а функция «round» используется для получения целочисленного результата.

Модель, использующая модифицированную оконную функцию Joglekar:

$$\frac{dx}{dt} = a * \left[\frac{d * f_j(x) + g * \sin^2(\pi x)}{d + g} \right] * v^s,$$

где d и g – подгоночные параметры.

На основании предсказаний данных моделей была обучена регрессионная модель с применением градиентного бустинга (реализация CatBoost [2]).

Результаты

При моделировании использовались экспериментальные данные по мемристору на основе оксида гафния приведенные в работе [1]. В ходе подгонки параметров, точность моделей оценивалась с помощью среднеквадратичной ошибки (RMSE). В ходе подбора гиперпараметров математических моделей применялся алгоритм дифференциальной эволюции [3].

На рис. 1. приведено сравнение полученных вольтамперных характеристик с экспериментальной кривой.

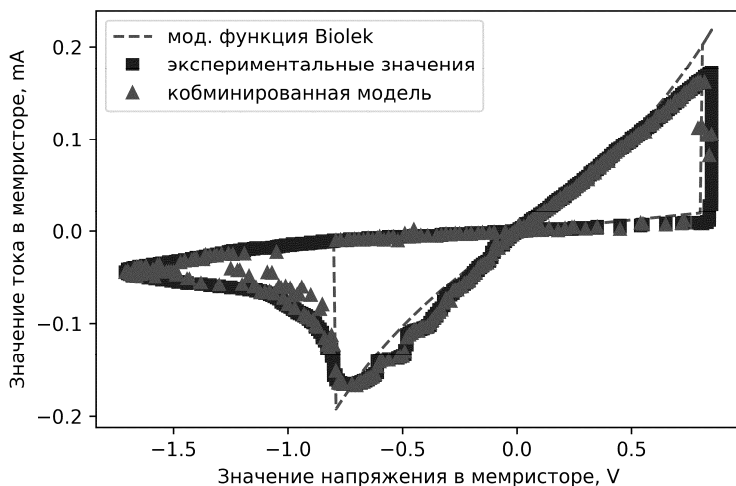


Рис. 1. Сравнение графиков ВАХ

Здесь наблюдается, что комбинированная модель лучше согласуется с экспериментальными данными, чем каждая модель в отдельности, что говорит об эффективности использованного подхода.

Литература

1. *Mladenov V.* Analysis of Memory Matrices with HfO₂ Memristors in a PSpice Environment // Electronics, 8(4), 383, March 2019, p. 16. DOI: 10.3390/electronics8040383.
2. CatBoost is a high-performance open source library for gradient boosting on decision trees. Available at: <https://catboost.ai/>. (accessed 02.09.2020).
3. *Storn, R., Price, K.* Differential Evolution – A Simple and Efficient Heuristic for global Optimization over Continuous Spaces// Journal of Global Optimization 11, 341–359, December 1997. DOI: 10.1023/A:1008202821328.

APPLICATION OF MACHINE LEARNING ALGORITHMS FOR MODELING THE CURRENT-VOLTAGE CHARACTERISTIC OF A MEMRISTOR

Ereshchenko A.V.

Abstract. The goal of this work is to explore the possibility of using machine learning algorithms for modeling the current-voltage characteristic of a memristor, using modeling of HfO₂ and TiO₂ based memristors as an example. The possibility of combining several mathematical models based on the predictions of individual models is investigated. The results obtained using the combined model are compared with the predictions of individual models and experimental data.

Keywords: memristor, current-voltage characteristic, modified window functions, machine learning.

6. F

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

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ГАЗОФАЗНОГО ОСАЖДЕНИЯ И БАЗОВЫХ НЕОДНОРОДНОСТЕЙ СЛОЕВ ОКСИДА КРЕМНИЯ

Евдокимов Владимир Лукьянович,

научный сотрудник,

vevdokimov@niime.ru, +7 905 702 65 66

АО НИИМЭ, г Москва

Аннотация. Предложена молекулярно-кинетическая модель процесса осаждения слоев из газовой фазы. Даны оценки примесности, полиморфности и неконформности как неоднородностей слоев оксида кремния, полученных окислением моносилана и тетраэтоксисилана.

Ключевые слова: газофазное осаждение, моделирование процесса, гетерогенный и гомогенный рост, показатели неоднородностей.

Введение

Процессы газофазного осаждения оксида кремния широко используются в технологии микросхем. Однако до настоящего времени не сформулированы комплексные представления о внутренних механизмах процесса осаждения и их роли в формировании состава, структуры и топологии, как базовых характеристик слоев. Для оценки и прогнозирования указанных характеристик необходима разработка адекватной физико-химической модели, учитывающей кинетику всех стадий и ветвей процесса осаждения.

Кинетическая схема и моделирование процесса осаждения

В соответствии с предлагаемой моделью, кинетическая схема процесса осаждения (рис 1) показывает равновесное состояние комплекса взаимно связанных скоростей диффузии, адсорбции, десорбции и химической реакции в газовом пограничном слое и на подложке, включая образование и диффузию основного и побочного молекулярных продуктов и кластеров. Процесс протекает по трем параллельным ветвям. По 1-й ветви слой формируется по гетерогенному механизму, включающему в себя стадии диффузии реагента G (скорость r_{g0}), его адсорбцию (r_{ga}) и химическое превращение в основной продукт $S(r_s)$ с побочным продуктом $I(r_i)$, а также стадии дезактивации молекул побочного продукта (r_{da}), адсорбции на подложке (r_{il}) и диффузии из пограничного слоя (r_{id}). По 2-й ветви

рост протекает по гомогенному механизму с образованием продуктов в объеме пограничного слоя, в основном, в области максимума реакции. Стадии включают в себя образование в газовом слое основного продукта S_v (скорость r_{sv}), побочного продукта I_v (r_{iv}), диффузию основного продукта к подложке (r_{ss}) и диффузию основного и побочного продуктов наружу пограничного слоя (r_{s0} и r_{i0}). Ветвь 3 представляет собою также гомогенный механизм и определяет формирование слоя за счет кластеров, образующихся в пограничном слое. Кластеры, с их концентрацией C , образуются и растут в столкновениях молекул основного и побочного продуктов ($r_{sc} + r_{ic} \Rightarrow r_{nc}$) и диффундируют к подложке (r_{nd}), а также наружу пограничного слоя (r_{c0}).

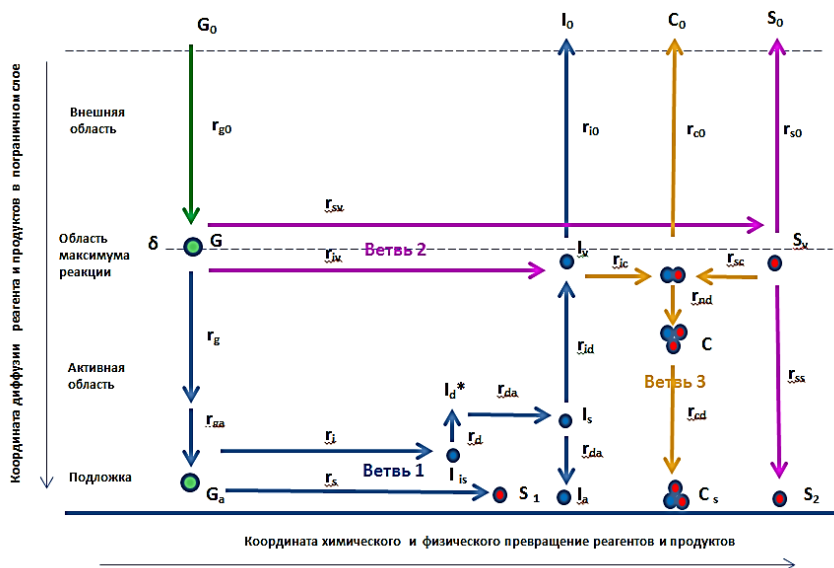


Рис 1. Кинетическая схема стадий и ветвей процесса осаждения

Примесность как показатель химической неоднородности определяется долей скорости роста по побочному продукту в молекулярном виде и в составе кластеров в отношении к полной скорости по всем составляющим роста, $K_i = (r_{i1} + r_{in})/r$, где $r = r_s + r_{i1} + r_{ss} + r_{nd}$.

Полиморфность, как показатель структурной неоднородности, выражается долей скорости роста слоя за счет основного продукта, поставляемого из пограничного слоя в молекулярной и кластерной формах в общей скорости роста, $K_s = (r_{ss} + r_{nd}) / r$, где $r = r_s + r_{ss}$ – общая скорость роста по гетерогенной и гомогенной составляющей.

Неконформность, как показатель топологической неоднородности, отражает локальную неравномерность толщины слоя у элементов микрорельефа подложки при гетерогенном или гомогенном механизмах роста. При гетерогенном росте, показатель неконформности $K_{11} = 1 - r_s/r$, а при гомогенном $K_{12} = r_{ss}/r$.

Сопоставление расчетных данных с экспериментом для слоев SiO_2 , осажденных из моносилана или тетраэтоксисилана – прекурсоров, имеющих существенно различающиеся теплоту адсорбцию и энергию активации окисления, показало хорошее соответствие модели с результатами измерений базовых характеристик слоев.

Заключение

Разработанная модель может быть применена для оценки и прогнозирования базовых характеристик слоев, осаждаемых из газовой фазы в различных условиях процессов из различных прекурсоров.

Литература

1. Cobianu C. and C. Rovelescu. A Theoretical Study of the Low – Temperature CVD of SiO_2 Films / J Electrochem. Soc., 1983, vol. 130. № 9. P. 1888–1893.
2. Васильев В.Н., С.М. Репинский. Осаждение диэлектрических слоев из газовой фазы. Ж. Успехи химии, 2005, 74. P. 452–483.
3. Tobin, J.Price and L. Kempbell, Gas Phase Composition in the Low Pressure CVD of Silicon Dioxide J. Electrochem. Soc., 1980, vol. 127. № 10. P. 2222–2227.
4. Евдокимов В.Л. Молекулярно-кинетическая модель процесса осаждения слоев из газовой фазы. Ж. Электронная техника, серия 3, Микроэлектроника. Вып 4 (168), 2017, с. 42–55.
5. Евдокимов В.Л. Моделирование топологической неравномерности слоев осаждаемых из газовой фазы на микрорельефную подложку. Ж. Электронная техника, серия 3, Микроэлектроника. Вып 1(177), 2020, с. 47–53.

MODELING OF GAS-PHASE DEPOSITION AND BASIC INHOMOGENEITIES OF SILICON OXIDE LAYERS

V.L. Evdokimov

JSC NIIME, Moscow

Abstract. A molecular-kinetic model of the deposition of layers from the gas phase is proposed. Impurity, polymorphism, and nonconformity are estimated as inhomogeneities of silicon oxide layers obtained by oxidation of monosilane and tetraethoxysilane.

Keywords: gas-phase deposition, process modeling, heterogeneous and homogeneous growth, inhomogeneities indicators.

THE RESPONSE OF TITANIUM AND TUNGSTEN NANOWIRES TO MECHANICAL STRESS: AB INITIO STUDY

Chibisov Andrey,

*PhD in Physics and Mathematics, senior researcher,
andreichibisov@yandex.ru, +7 (924) 402-89-08*

Chibisova Mary,

*PhD in Physics and Mathematics, senior researcher, omari-
ya2003@yandex.ru, +7 (924) 113-42-09*

*Computing Center, Far Eastern Branch, Russian Academy of Sciences, 65
Kim Yu Chen Street, Khabarovsk, 680000, Russia*

Abstract. Using density functional theory, we studied the atomic, electronic and elastic properties of titanium and tungsten nanowires oriented in the [0001] and [111] directions, respectively. It was found that the Young's modulus for W nanowire is 1.8 times smaller than the value for bulk tungsten, but for titanium nanowire is three times greater than the value for the bulk material.

Keywords: titanium and tungsten nanowires, Young's modulus, total energy calculation.

Introduction

Due to their unique properties, such as high melting temperature and high corrosion resistance, tungsten (W) and titanium (Ti) have been widely used in aircraft building, electronics, medicine, inter alia [1,2]. In addition, in recent years, much attention has been devoted to the study of metallic nanostructures on the basis of W and Ti [3,4], due to the prospect of using the material in nanomechanical and nanoelectronic devices. The size miniaturization leads to a change in the physicochemical properties of the material, due to surface and quantum size effects. However, so far, there is no clear understanding of the interconnection between the direction orientation and mechanical properties of tungsten and titanium nanowires. Therefore, our work deals with the ab initio calculations of Young's modulus of tungsten and titanium nanowires oriented in the [111] and [001] directions, respectively. In this work, we construct an atomic model of the W and Ti nanowires, calculate the equilibrium structures, and use an integral form of Young's modulus to determine the elastic and electronic properties of nanowires.

Methods and approaches

For the total energy calculations, we used density functional theory with the generalized gradient approximation (GGA) and spin polarization. A special Monkhorst–Pack grid composed of $4 \times 1 \times 1$ k points with a cutoff energy of 761.92 eV was used to simulate the Ti nanowires by means of the ABINIT code [5]. The simulation model was placed in a very large cell, which had a size of approximately $18 \times 18 \times 3.200$ Å. The W atomic systems was calculated using the Quantum Espresso software package [6]. During the calculation of tungsten nanowire behaviour, a special k-point set of $1 \times 1 \times 8$ with an energy cutoff of 734.71 eV was used. The atomic structure was relaxed until the interatomic forces were less than 0.005 eV/Å, which is sufficient to obtain good results.

The elastic modulus K can be calculated from the change in the total electronic nanowire energy E during its deformation (elongation or compression) along a certain direction d :

$$E(d) = \frac{1}{2} \frac{KV_0}{d_0^2} (d - d_0)^2 + C(d - d_0) + E_0, \quad (1)$$

where E_0 is the total energy at the equilibrium length d_0 , V_0 is the equilibrium volume and C an integration constant.

Next, the structural models for titanium and tungsten nanowires were deformed in the [0001] and [111] directions, respectively and the dependences of the total energies on the nanowire lengths d were obtained. Using expression (1), we can obtain the values of Young's modulus for the nanowires. The calculated Young's modulus for titanium nanowire is 485.4 GPa. This value is three times greater than the value for the bulk material. The calculated value of the Young's modulus for the tungsten nanowire is 200 GPa. Thus, tungsten Young's modulus of the nanowire is 1.8 times smaller than the Young's modulus for bulk W. Therefore, the W nanowire has reduced elastic properties compared to the bulk W. In our opinion, the only explanation of such a difference in these values is associated with a change in the electronic structure.

Conclusion

In this work, we have used first-principle calculations to construct the equilibrium atomic models of titanium and tungsten nanowires oriented in the [0001] and [111] directions and calculated their elastic properties. To calculate Young's modulus, the integral form of the total electronic energy with respect to the nanowire length was proposed. The value of Young's modulus for titanium nanowire is three times greater than the

value for the bulk material, but for W nanowire is 1.8 times smaller than the value for bulk tungsten.

Acknowledgments

Computations were performed using methods and techniques developed under the State assignment for research work implementation from the Computing Centre Far Eastern Branch of the Russian Academy of Sciences (KhFRC FEB RAS). This research was supported through computational resources provided by the Shared Services Centre “Data Centre of FEB RAS” (Khabarovsk). The authors would like to thank the Irkutsk Supercomputer Centre of SB RAS for providing access to HPC-cluster ‘Akademik VM Matrosov’.

References

1. Hou L.-Z. et al. Mechanical properties of tungsten nanowhiskers characterized by nanoindentation // Trans. Nonferrous Met. Soc. China, 2013. Vol. 23, pp. 2323–2328.
2. Nurul Amin AKM. Titanium alloys – towards achieving enhanced properties for diversified applications. Rijeka: InTech; 2012.
3. Wang S. et al. Vapor-phase synthesis, growth mechanism and thickness-independent elastic modulus of single-crystal tungsten nanobelts // Nanotechnology, 2013. Vol. 24, pp. 505705-1–505705-9.
4. Lin K.-H. et al. Mechanical properties and thermal stability of ultrathin tungsten nanowires // RSC Adv., 2014. Vol. 4, pp. 6985–6990.
5. Gonze X., et al. ABINIT: first-principles approach to material and nanosystem properties // Comput. Phys. Commun., 2009. Vol. 180, pp. 2582
6. Giannozzi P., et al. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials // J. Phys.: Condens. Matter, 2009. Vol. 21, pp. 395502-1–395502-19.

Научное издание
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
в материаловедении электронных компонентов
МММЭК–2020

19–20 октября 2020 г., Москва
Материалы II Международной конференции

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

Подписано в печать 16.10.2020 г.
Формат 60х90 1/16. Усл. печ. л. 9,0.
Тираж 300 (1–100) экз. Изд. № 151.

Издательство ООО «МАКС Пресс»
Лицензия ИД N00510 от 01.12.99 г.

119992, ГСП-2, Москва, Ленинские горы,
МГУ им. М. В. Ломоносова, 2-й учебный корпус, 527 к.
Тел. 8(495) 939–3890/91. Тел./Факс 8(495) 939–3891.

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