

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ ЭЛЕКТРОННЫХ КОМПОНЕНТОВ

MATHEMATICAL MODELING IN MATERIALS SCIENCE OF ELECTRONIC COMPONENTS

Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2022. Т. 25, № 4. С. 271–282.
DOI: 10.17073/1609-3577-2022-4-271-282

УДК 621.315.592

Учет тепловыделения в малых объемах вещества на примере роста микростержней ZnO: поиск методики моделирования

© 2022 г. И. В. Матюшкин¹✉, О. А. Тельминов², А. Н. Михайлов³

¹ *Национальный исследовательский университет «МИЭТ»,
пл. Шокина, д. 1, Зеленоград, Москва, 124498, Российская Федерация*

² *АО «НИИ молекулярной электроники»,
ул. Акад. Валиева, д. 6, стр. 1, Зеленоград, Москва, 124460, Российская Федерация*

³ *Национальный исследовательский
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
просп. Гагарина, д. 23, Нижний Новгород, 603022, Российская Федерация*

✉ Автор для переписки: imatyushkin@niime.ru

Аннотация. На примерах экзотермической химической реакции и саморазогрева области проводящего филамента мемристора обсуждены стимулированные теплотой фазовые переходы, недостатки применения в наномасштабах классического подхода Фурье и преимущества метода молекулярной механики при моделировании температурного фактора. Предложена коррекция к закону Аррениуса, учитывающая, что температура становится случайной величиной. На основе вводимых понятий (элементарный акт тепловыделения, радиус и регион теплового воздействия) предложена методика учета теплового фактора.

Корректирующая поправка основана на расщеплении всего ансамбля частиц на несколько потоков, каждый из которых соответствует фиксированному значению температуры, взятому из некоторого диапазона. Приведены непрерывный и дискретный варианты коррекции, показано, что дискретный вариант более предпочтителен. Это связано с тем, что методика делает акцент на применении методов молекулярной механики, причем намеренно в самом примитивном

Статья подготовлена по материалам доклада, представленного на VI-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 24–26 октября 2022 г.

© 2022 National University of Science and Technology MISiS.

This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License (CC-BY 4.0), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original author and source are credited.

варианте. Отмечена роль аморфизации как примера структурной перестройки вещества в нанобъемах. Показано, что сами фононные спектры, определяющие теплоперенос, зависят от температуры. Методика согласуется с идеологией многомасштабного моделирования. Интегральное повышение температуры рассчитано вне региона теплового воздействия, где значимы неравновесные эффекты путем решения стандартного уравнения теплопроводности.

Ключевые слова: мемристор, экзотермическая реакция, молекулярная механика, температура, закон Аррениуса

Благодарности: Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ, тема АААА-А20-120110990073-7. Моделирование физических явлений в мемристивных структурах выполнено в рамках научной программы Национального центра физики и математики (проект «Искусственный интеллект и большие данные в технических, промышленных, природных и социальных системах»).

Для цитирования: Матюшкин И.В., Тельминов О.А., Михайлов А.Н. Учет тепловыделения в малых объемах вещества на примере роста микростержней ZnO: поиск методики моделирования. *Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники.* 2022; 25(4): 271–282. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2022-4-271-282>

Accounting for heat release in small volumes of matter on the example of the growth of ZnO micro-rods: search for a modeling technique

I. V. Matyushkin¹✉, O. A. Telminov², A. N. Mikhaylov³

¹ *National Research University of Electronic Technology,
1 Shokin Sq., Zelenograd, Moscow 124498 Russian Federation*

² *Molecular Electronics Research Institute, JSC,
6–1 Acad. Valieva Str., Zelenograd, Moscow 124460, Russian Federation*

³ *National Research Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod,
23 Gagarin Ave., Nizhny Novgorod 603022, Russian Federation*

✉ *Corresponding author: imatyushkin@niime.ru*

Abstract. Using examples of an exothermic chemical reaction and self-heating of the region of a conducting filament of a memristor, heat-induced phase transitions, disadvantages of applying the classical Fourier approach on the nanoscale, and advantages of the molecular mechanics method at modeling the temperature factor are discussed. The correction for Arrhenius relationship, taking into account that the temperature becomes a random variable is proposed. Based on the introduced concepts (elementary act of heat release, distance and region of thermal impact) method for taking into account the thermal factor, is proposed.

The correction is based on splitting the entire pool of particles into several, each of which corresponds to a fixed temperature value taken from a certain range. Although continuous and discrete correction options are given both, but the discrete option is more preferable. This is due to the fact that the methodology focuses on the application of methods of molecular mechanics, and, intentionally, in the most primitive version. The role of amorphization is noted as an example of the structural restructuring of matter in nano-volumes. It is indicated that the phonon spectra themselves, which determine heat transfer, depend on temperature. The technique is consistent with the ideology of multiscale modeling. The integral temperature increase is calculated outside the region of thermal exposure, where nonequilibrium effects are significant, by solving the standard equation of thermal conductivity.

Key words: memristor, exothermic reaction, molecular mechanics, temperature, Arrhenius relationship

Acknowledgments. The work was supported by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation, topic AAAA–A20–120110990073–7. The modeling of physical phenomena in memristive structures was carried out within the framework of the scientific program of the National Center for Physics and Mathematics (project “Artificial intelligence and big data in technical, industrial, natural and social systems”).

For citation: Matyushkin I.V., Telminov O.A., Mikhaylov A.N. Accounting for heat release in small volumes of matter on the example of the growth of ZnO micro-rods: search for a modeling technique. *Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2022; 25(4): 271–282. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2022-4-271-282>

Введение

Потребность в моделировании тепловыделения и теплопередачи возникает во многих областях нанотехнологии. Актуальность такой проблемы связана с разработкой цифрового двойника интегральной схемы, где тепловыделение локализовано в наноразмерных областях. Идея использования клеточного автомата (КА), имитирующего мультифизику процессов, в качестве основы цифрового двойника принадлежит академику А.Л. Стемповскому. Когда авторы работы [1] столкнулись с препятствиями в реализации этой идеи (даже для простейшей приборной структуры не удалось корректно рассчитать наноразмерный теплоперенос на уровне взаимодействия между ячейками КА), глубина проблемы еще не была ими осознана.

Ярким примером этого является запутанный вопрос о температуре области филамента при протекании тока в мемристивном элементе [2–4]. Ниже на примере роста микроствержней ZnO [5–7] с переходами $V \rightarrow S$ (*Vapor* → *Solid*) или $V \rightarrow L \rightarrow S$ (*Vapor* → *Liquid* → *Solid*) рассмотрим возникающие противоречия при лобовом применении для малых объемов вещества классических методов: закона Фурье и уравнения теплопроводности. Другая альтернатива состоит в использовании методов квантовой химии [8–13], атомистического моделирования, что целесообразно для нанобъемов, но является ресурсоемким и избыточным для решаемой практической задачи. Методическая цель работы — разработка прежде всего концептуального базиса для учета тепловыделения — актуальна в контексте многомасштабного моделирования [14, 15].

Описание физической ситуации роста микроствержней. Нахождение противоречия

Экзотермическая химическая реакция происходит при недостатке кислорода, а лимитирующими стадиями являются адсорбция с последующей абсорбцией и поверхностная диффузия с переходом VS. Наша рабочая гипотеза изначально состо-

яла в том, что поскольку начальная температура стержня на 20–50 К ниже температуры плавления ZnO, то на его вершине образуется расплавленная капля [7] субоксидного цинка и имеет место переход VLS (*Vapor* → *Liquid* → *Solid*), а также абсорбция и объемная реакция. Каплю удобно считать однородным объектом с характерным размером R , порядка диаметра стержня d , описываемым общей температурой T и вязкостью. Аналогичная ситуация (рис. 1) рассмотрена в работе [5], где в ходе реакции $Ga + N \rightarrow GaN$ выделяется меньшая теплота, чем в реакции $Zn + 1/2O_2 \rightarrow ZnO + Q$, $2Q = 350,6$ кДж/моль.

Авторы работы [5] учли не только прерывистость потока прекурсоров в потоках парогазовой смеси реактора и справедливо ввели задержку между абсорбцией и адсорбцией, которую они

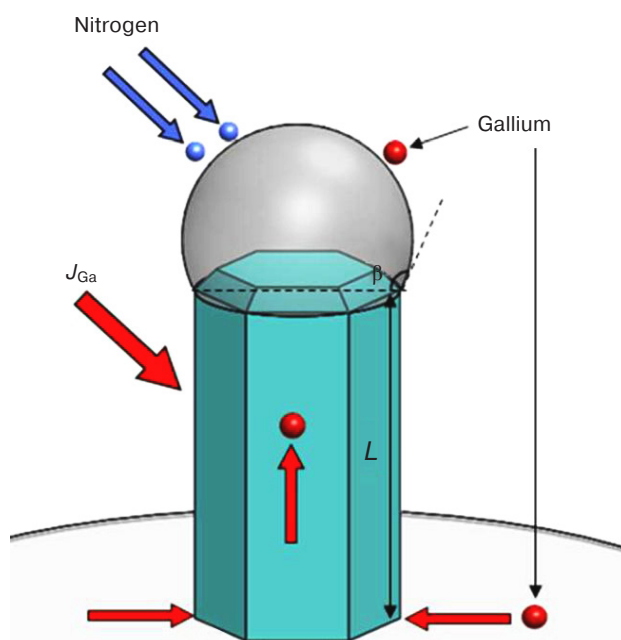


Рис. 1. Ориентированный рост микроствержня с каплей наверху (показана серым цветом), причем учитывается поток адсорбированных атомов со стороны подложки, направленный к капле по кристаллографическим граням [5]

Fig. 1. Oriented growth of a microrod with a drop at the top (shown in gray), taking into account the flow of adsorbed atoms from the side of the substrate, directed towards the drop along the crystallographic faces [5]

назвали временем инкубации, но и в явном виде попытались учесть кристаллографию стержня и угол смачивания его вязкой каплей, однако, проигнорировали тепловые эффекты.

Примем для нашего предварительного расчета следующие параметры: скорость роста $V = L/Time$ (отношение общей высоты стержня и длительности роста) = $10 \text{ мкм}/1,0 \text{ ч} = 2,78 \text{ нм/с}$, сторона квадрата сечения стержня $d = 100 \text{ нм}$, квант времени $\tau = 1 \text{ с}$ (в численном расчете приемлемо компромиссное значение $\tau = 0,1 \text{ с}$, достаточное для образования одного моноатомного слоя ZnO).

В балансовом расчете можно пренебречь объемным характером реакции и считать рост послойным на границе фаз LS. Для методических целей надо помнить, что на границе происходит только кристаллизация, при которой тепловыделение заметно меньше теплоты Q , а сама реакция происходит в объеме капли, и неясно в каком виде и по какому механизму частицы ZnO диффундируют к фронту кристаллизации, причем сама диффузия термически стимулирована.

Таким образом, за 1 с в сечении стержня нарастает масса $m = \rho_{\text{ZnO}} V d^2 = 1,5 \cdot 10^{-19} \text{ кг}$ (где ρ_{ZnO} — плотность ZnO; V — объем стержня) или молей вещества $\nu = 1,92 \cdot 10^{-18} \text{ моль}$. При этом в химической реакции выделится энергия $Qt = 6,72 \cdot 10^{-13} \text{ Дж}$. Если бы теплоотвода не было (его доминирующий механизм — теплопередача через границу LS, а не испарение или конвекция через границу VL), то эта масса нагрелась бы на $\Delta T = Qt/mC_p = 8730 \text{ К}$. Это большая теплота, по-видимому, ушедшая в самонагрев только этой массы. Последнее значение подтверждает рабочую гипотезу о капле. Однако насколько та может быть разогрета, очевидно не на тысячи градусов? Большая часть теплоты уходит с теплопередачей.

Рассмотрим баланс с потоком теплоты в соответствии с законом Фурье. Важно корректно подставить градиент температуры. Макроскопический коэффициент теплопроводности

$$\lambda = 15 \left[\frac{\text{J/s}}{\text{Km}} \right]. \text{ И так, } \Delta T = 3,36 \cdot 10^{-7} \text{ К,}$$

$$Qt = \lambda t d d \frac{\Delta T}{Rd/2} \cong 2\lambda d \Delta T \Rightarrow \Delta T = \frac{Qt}{2\lambda d}.$$

Отметим, что в обычной макроскопической ситуации при 10 К на 1 см градиент составляет 10^3 К/м и падал бы на порядок за 100—300 с с экспоненциальным снижением и общим теплоотводом, зависящим от разницы температур и времени по экспоненте, а не линейно $Qt \sim t$.

Образно говоря, есть две идеализации: ошибочная — «костер-на-колонне», и бессмысленная для классики — «вода-в-решете», но близкая к истине.

Процесс теплопередачи, помимо поверхностной диффузии, объединяет каплю, а точнее аморфизированный микрообъем субоксидного цинка, и микростержень в одну систему. Для стержня время релаксации теплоты связано, а точнее превышает на 2—3 порядка, с характерной частотой фононных колебаний ω и их спектром (рис. 2), а для капли — с колебаниями ковалентных и металлических связей. Это время релаксации можно оценить как 10^{-10} с .

Главное последствие экзотермичности реакции — это не повышение температуры, а аморфизация.

Если продолжать настаивать на применении понятия температуры к капле, то очень завышенная оценка сверху дает не 8000 К, а 80 К, но она зависит от значения кванта времени τ . Такая компромиссная оценка базируется на предположении о равномерном распределении теплоты по объему капли, что согласуется с решающей ролью именно абсорбированного кислорода и релевантностью нахождения периода инкубации [5], однако, не учитывает уход теплоты через стержень, хотя бы по области, сравнимой с объемом капли.

Учет температуры в области растущего проводящего филамента в мемристивной структуре

Сразу скажем, что в эксперименте наблюдается интенсивный разогрев, вплоть до плавления

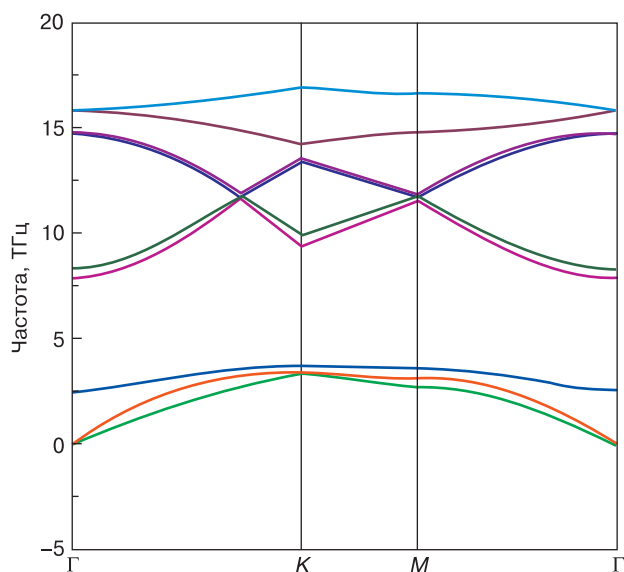


Рис. 2. Пример фононного спектра наноматериала для моноатомного слоя 2D-ZrO₂ для гексагональной упаковки [13]. Выделяются несколько ветвей в терагерцовой области, что для постоянной времени фононных колебаний дает завышенный результат по сравнению с 3D

Fig. 2. An example of the phonon spectrum of a nanomaterial for a 2D-ZrO₂ monoatomic layer for hexagonal packing [13]. Several branches are distinguished in the terahertz region, which for the time constant of phonon oscillations gives an overestimated result compared to 3D

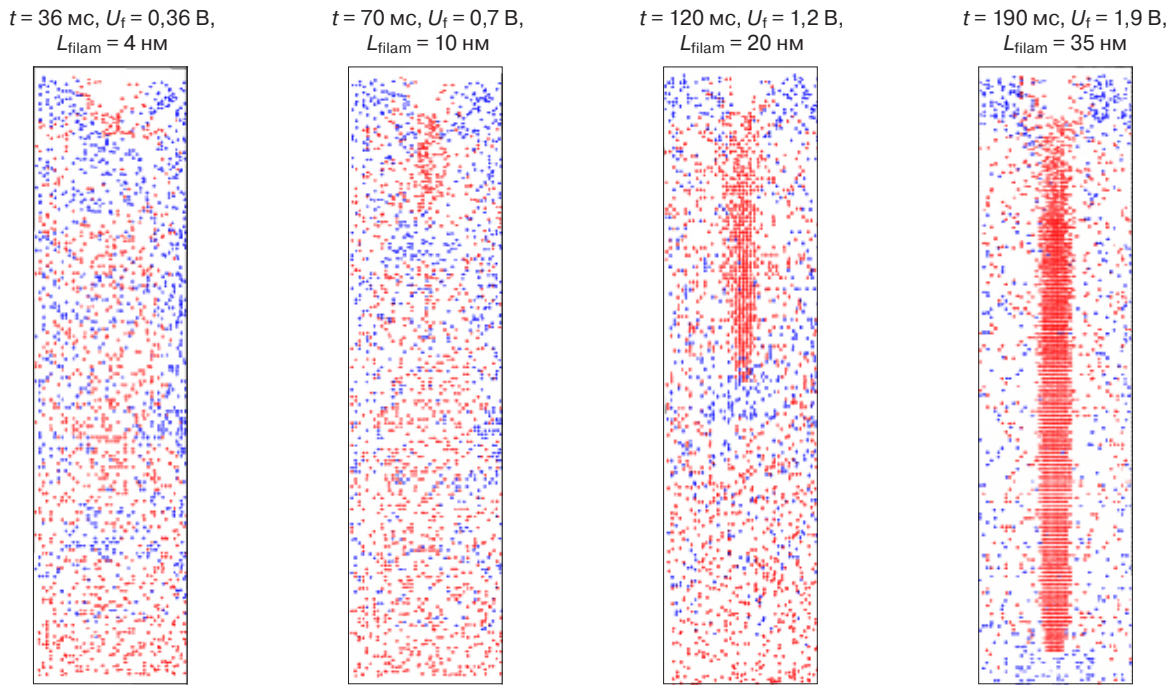
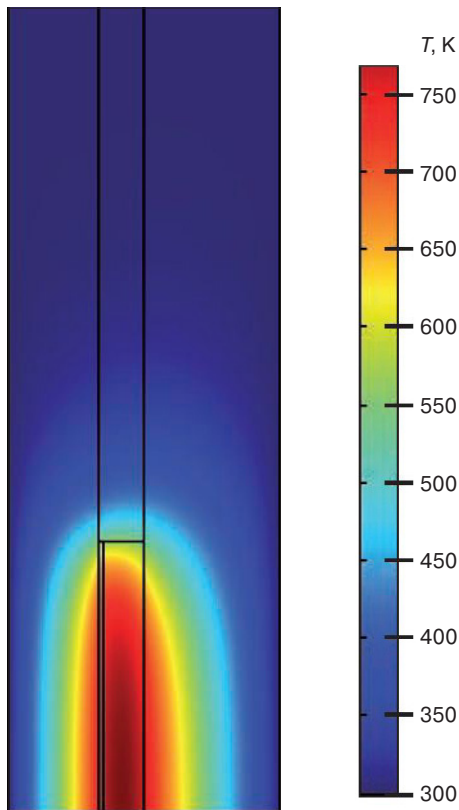


Рис. 3. Эволюция области филамента в структуре Au/YSZ/TiN [2].

L_{filam} — длина сформированного филамента; U_f — напряжение, приложенное к структуре; t — время от начала процесса формовки (линейный поперечный размер филамента ~ 4 нм). Красные точки — свободные от электронов вакансии; синие — вакансии с захваченными электронами

Fig. 3. Evolution of the filament region in the Au/YSZ/TiN structure [2]. L_{filam} is the length of the formed filament; U_f is the voltage applied to the structure; t is the time from the beginning of the molding process (linear transverse size of the filament ~ 4 nm). Red dots are electron-free vacancies; blue is vacancies with trapped electrons

ния, прилегающих контактов (площадь до 100—1000 $\mu\text{м}^2$). Экспериментаторы, наблюдая этот мезоскопический эффект, рассуждают обычно так: если такой разогрев дает 100—200 К, то, наверное, область филамента (рис. 3) разогреета на 800 К,



что нужно учитывать во всех моделях генерации, диффузии и дрейфа кислородных вакансий. Это вариант идеализации «костра-на-колонне».

Авторы работы [2] попытались также рассчитать методом Монте—Карло температуру филамента и учли только акустическую ветвь фонового спектра. Однако они верно акцентировали внимание на том, что выявляются значительные флуктуации температуры с амплитудой ~ 100 К и длительностью ~ 10 пс, что среднее время одного прыжка вакансии при температуре 800 К будет составлять $\sim 10^{-10}$ с, а время всего процесса электроформовки — порядка 1 мс. Размер же филамента 10 нм много меньше длины свободного пробега фононов.

В работе [3] на примере межслойного SrTiO₃, легированного Nb (рис. 4), продемонстрирован классический подход. Для целевых величин предполагается или степенной (для подвижности электронов $\sim T \sim K^{-\beta}$, $\beta = 2,23$), или Аррениусовский закон (для подвижности вакансий $\sim (T/K)^{-1} \exp(-E_A/kT)$), хотя дополнительно выпи-

Рис. 4. Распространение теплового поля на ~ 200 — 300 нм вдоль радиуса цилиндрического контакта [3] при подаче на мемристор импульса напряжения длительностью 10 нс — 10 мкс. Направление филамента сверху—вниз в центральном слое диэлектрика толщиной 50 нм

Fig. 4. Propagation of a thermal field by ~ 200 — 300 nm along the radius of a cylindrical contact [3] when a voltage pulse with a duration of 10 ns—10 μs is applied to the memristor. The direction of the filament from top to bottom in the central layer of the dielectric with a thickness of 50 nm

сана температурная зависимость предэкспонента. Подвижность влияет на удельное сопротивление $1/\sigma$, а через него — на диссипацию джоулевого тепла.

Классическая связка уравнений (обозначения стандартны для электротехники) имеет вид

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla(\lambda \nabla T) = \frac{J^2}{\sigma}, \quad \nabla J = \nabla(-\sigma \nabla \phi).$$

Авторы работы [4], рассматривая эволюцию филамента, условно разделяют его объем на диски и выделяют зерна, на границе которых происходит скачок проводимости. Как и в работе [2] моделируется генерация и дрейф вакансий, но, как и в работе [3], этот процесс рассматривается как Аррениусовский. Описываются структурные превращения материала, когда при достижении пороговой концентрации вакансий локально происходит металлизация материала, смена фазы его проводимости.

Методы расчета температурного поля

Температура — это макропараметр, характеризующий термодинамическую систему, находящуюся в равновесии, когда усреднение по объему дает тот же самый результат, что и усреднение по времени. Для малых объемов линейного размера ($\gg 10$ нм и $< 0,1$ мкм), где количество вещества еще статистически значимо, усреднение представляется малоинформативным, например, из-за флуктуаций структуры вещества, но в ситуации тепловыделения значим фактор времени и флуктуаций самого тепловыделения, и исчисления только средних величин явно недостаточно. Поэтому понятие температуры перестает работать, и нужны иные концепции, чтобы лучше описать феномены. Например, для ситуации адсорбции на переходе VLS привычное использование модели Ленгмюра, пусть даже с учетом кривизны поверхности капли, игнорирует два важных вторичных эффекта: 1) облако выбитых за счет активации теплотой атомов в прилегающем слое пара; 2) динамика числа активных центров абсорбции за счет активной аморфизации капли. Для развития филамента рост числа кислородных вакансий вызывает металлизацию материала, и эта взаимосвязь, найденная в работе [4], по-видимому, не единственная. Так, выделение теплоты может влиять на локально-эпизодический заброс электронов в зону проводимости, маловероятный при использовании статистики Ферми—Дирака ($E_g \sim kT$), что усиливает эффект металлизации. При тепловыделении структура вещества рандомизируется, а значит, возникает легкая некорректность самого использования привычных в физике твердого тела понятий вакансии и фонона, предполагающих порядок кристаллической решетки вещества.

Уместно вспомнить классическое соотношение (1) из химической термодинамики, означающее, что теплота идет на повышение внутренней энергии (температуры) и изменение энтропии (структурную перестройку):

$$0 > \Delta G = \Delta(U + pV - TS) = \\ = C_p \Delta T - T \Delta S = C_p \Delta T - T \|\Delta S\| = Q. \quad (1)$$

Хотя напрямую применять это соотношение нельзя, общий его смысл, остается верным.

Чтобы учесть эффекты неравновесности тепловыделения, мы предлагаем внести коррекцию в Аррениусовский закон, поскольку все остальные средства более радикальны, например апелляция к кинетическому уравнению Больцмана или к фундаментальным результатам статистической физики (теорема Лиувилля). Разделим общий статистический ансамбль каких-то частиц на несколько по времени и пространству и представим, что на каждый из них действует своя температура. В обычной ситуации, допустим для генерации вакансий, мы имели бы $A = A_0 \exp(-B/kT)$, где A — целевая величина (например, число вакансий) как динамическое равновесие прямого и обратного процесса, т. е. генерации и рекомбинации; A_0 — предэкспонент (предэкспоненциальный множитель), величина экстенсивная; B — энергия активации. Для нескольких ансамблей частиц тогда имеем

$$A = \frac{A_0}{I} \sum_{i \geq 1}^I m_i \exp(-B/kT_i);$$

$$\sum (m_i > 0) = 1 \quad T_i \in \left[T_\infty; T_\infty + \frac{n}{k} vQ \right], \quad T_i < T_{i+1}. \quad (2)$$

Здесь k — постоянная Больцмана; Q — теплота; v — доля теплоты, пошедшая на разогрев; I — число частиц; m_i — весовые коэффициенты, отражающие распределение энергии по флуктуациям (рис. 5). Параметр n учитывает превышение случайного выброса над ожидаемым средним, $n \sim 2$. За T_∞ можно принять температуру внешней среды, причем эта температура самосогласованно берется с учетом интегрального мезоскопического нагрева среды.

Рассмотрим возможность применения метода молекулярной механики (ММ) для решения нашей задачи (рис. 6). Первые приложения ММ описаны западногерманским ученым У. Буркертом и американцем Н. Эллингджером в работе [12], уже ставшей раритетом, в начале 1980-х гг. Являясь удобным компромиссом между квантовой химией, требующей больших вычислительных ресурсов, и относительной простотой целей моделирования ММ прочно вошла в практику многих биохимических лабораторий. Авторы работы [12] суммировали материал по геометрическим конфигурациям раз-

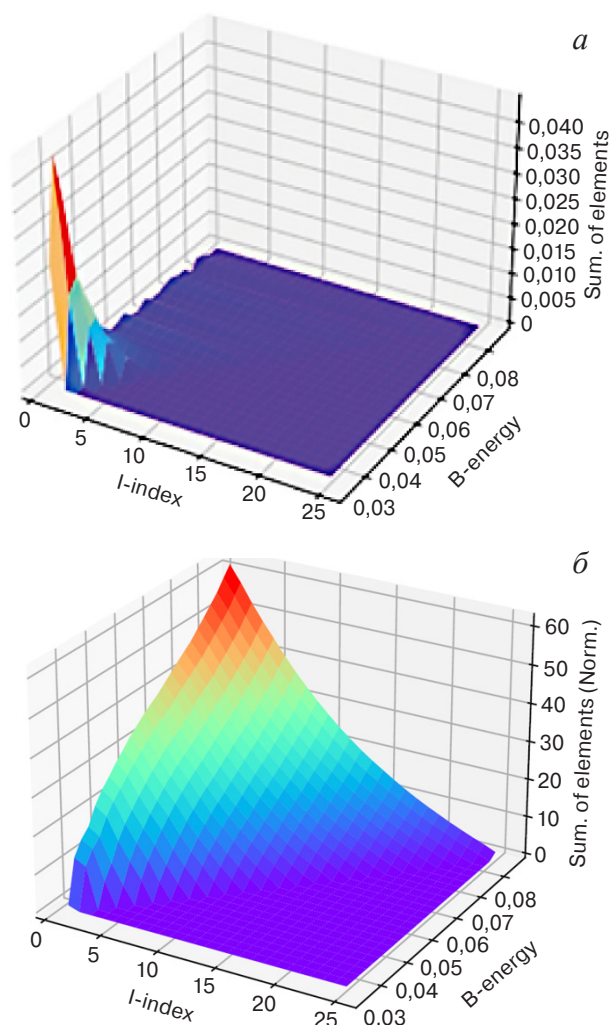


Рис. 5. Расчет по формуле (2), влияние шага дискретизации при разделении ансамбля частиц: а — равномерное распределение; б — гауссово распределение $kT = 1/40$ эВ. Q соответствует 100 К, $n = 2$, центр распределения отвечает $kT + Q$. B дано в эВ. Сумма нормирована стандартной ситуацией, когда весь ансамбль частиц находится в точке $kT + Q$. На графике ощущается эффект дискретизации, зависимость от числа ансамблей частиц

Fig. 5. Calculation by formula (2), the influence of the discretization step when separating the ensemble of particles: (a) uniform distribution; (b) Gaussian distribution $kT = 1/40$ eV. Q corresponds to 100 K, $n = 2$, distribution center corresponds to $kT + Q$. B is given in eV. The sum is normalized by the standard situation, when the entire ensemble of particles is at the point $kT + Q$. The discretization effect is felt on the graph, the dependence on the number of ensembles of particles

личных молекул, термохимии, кинетике химических реакций и строению кристаллов.

Набор параметров, состоящий из равновесных значений длин связей, валентных углов, величин парциальных зарядов, силовых констант и ван-дер-ваальсовых параметров, называется в ММ силовым полем (*force-field*), в котором находится каждый атом. Это формально сближает ММ с молекулярной динамикой, что, к сожалению, скрывает красоту исходной идеи ММ. Так, ММ сосредоточена на потенциальной энергии, минимум которой дает геометрию конформации макромолекулы,

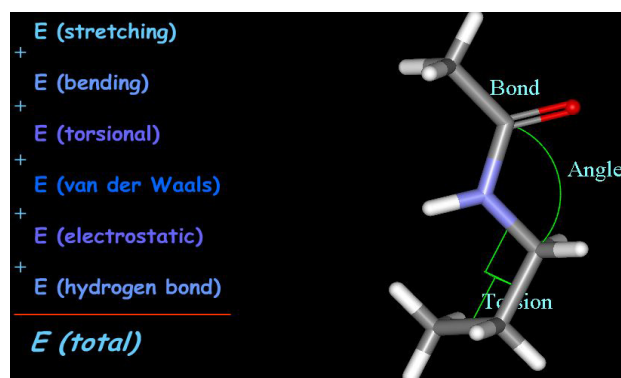


Рис. 6. Идея метода молекулярной механики, предложенного в 1960-х годах советскими физиками И.Е. Таммом и А.И. Китайгородским

Fig. 6. The idea of the molecular mechanics method proposed in the 1960s by Soviet physicists I.E. Tamm and A.I. Kitaygorodsky

т.е. равновесных положений атомов, но метод ММ игнорирует колебания атомов, кинетическую энергию т. е. нужно обращать внимание на локальные минимумы вблизи глобального в целевой энергии учитывать вклад кинетической энергии¹.

Однако для целей расчета температурного поля правильно ограничиться «наивной» ММ: идеей грузиков на пружинках. Причем параметры жесткости пружин, постоянные ангармонизма можно брать из первопринципных расчетов, что согласуется с идеологией многомасштабного моделирования [15]. Полезен расчет цепочек Нозе—Гувера (*Nosé—Hoover chains*), которые были одной из новаций статистической физики с 1984 г.

В ИК-спектроскопии, а также при анализе спектров комбинационного рассеяния (КРС) используется понятие характеристических частот, причем в отличие от простейших двухатомных молекул, в многоатомных молекулах, например органических, колебания не относятся лишь к одной связи или группе атомов. Валентные колебания C—H-связи для простых метиловых эфиров ($\tilde{\nu} = 2850\text{—}2815$ см⁻¹, т. е. в единицах энергии ~ 25 ккал/моль), при этом различают колебания в плоскости молекулы и вне плоскости, а также прочие типы, например деформационные веерные [8], когда искажаются углы.

КРС-спектры позволяют выделять не только общие значения частот, например, для колебаний атомов связей Ge—Ge (~ 290 см⁻¹), связей Ge—Si (400 см⁻¹) и Si—Si (510 см⁻¹), но позволяют также получать более детальную информацию о твердом теле.

Открытым вопросом для аморфного тела, хотя обычно считают ($E = E_{\text{эл}} + E_{\text{кол}} + E_{\text{вращ}}$, $E_{\text{эл}} \gg E_{\text{кол}} \gg E_{\text{вращ}}$), является учет или неучет вращательной энергии группы атомов. В этот вид энергии может уходить часть теплоты. Экспери-

¹ Современная версия ММ представлена в ПО <https://www.charmm.org> [11] группы из Гарвардского университета (Martin Karplus).

ментально найденные частоты в модели гармонического осциллятора и, следовательно, закона Гука помогают параметризовать модель, построенную в рамках ММ. Амплитуда колебаний может быть значительной, что нарушает гармонический закон, т. е. надо использовать постоянные ангармонизма.

Если распространение теплоты происходит в кристалле, то необходимо применять формализм фононов: фононный спектр (см. рис. 2), возможный ангармонизм, фонон–фононное рассеяние и электрон–фононное взаимодействие.

Например, в работе [9] для ZnO и $Zn_{0,1}Mg_{0,9}O$ установлено влияние изменений характеристик локальной структуры, в частности координационного числа и длины связи, на параметры ангармонического потенциала $U(x) = ax^2/2 + bx^3 + cx^4$. Здесь x — отклонение межатомных расстояний от их равновесных значений, параметр a выражает «наивный» закон Гука. Параметры потенциала оксида цинка использованы для расчета линейного коэффициента теплового расширения и характеристической температуры Дебая θ_D .

Молярную теплоемкость можно рассчитать по формуле (3). Обратим внимание, что через последнюю величину в формуле (3) теплоемкость связана с параметрами ангармонизма, но теплоемкость, в свою очередь, определяет по формуле (1) приращение температуры

$$C_V(T) = 18R \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{e^{\xi} \xi^4}{(e^{\xi} - 1)^2} d\xi, \quad (3)$$

$$\theta_D = 1,27\theta_E = \frac{\hbar}{k} \sqrt{\frac{a}{M_{1-2}}}.$$

Здесь R — универсальная газовая постоянная; θ_D , θ_E — температура Дебая и Эйнштейна соответственно; a — постоянная жесткости в потенциале для связи между атомами 1—2; M_{1-2} — приведенная масса этих атомов.

Для ZnO температура Дебая $\theta_D = 871$ К [9] и может преодолеваться при температурных флуктуациях.

В структуре вюрцита ZnO возможны [10] два вида межузельных атомов цинка и кислорода, причем одни находятся в тетраэдрическом окружении, а другие — в октаэдрическом. Помимо межузельного атома цинка могут образовываться и вакансии кислорода. Если рассматривать нано- или микрообъем кристалла, то надо учитывать рассеяние фононов на точечных дефектах. Обычно же коллективные возбуждения представляют как набор плоских невзаимодействующих гармонических волн (фононов) $dn \int D(\omega) d\omega$.

$$D(\omega) \equiv \frac{1}{\sqrt{\omega_{r\max}^2 - \omega^2}},$$

который обычно разделяют на несколько интервалов спектра, полагая иногда для спектральной плотности фононов закон обратного корня. Здесь введена максимальная частота для r -го интервала. Для продольной и поперечных ветвей суммарный спектр, например, для алюминия имеет резкие перегибы и острые пики (критические точки, сингулярности Ван Хова), причем этим значениям частот соответствуют нулевые групповые скорости. Время жизни фонона, помимо дисперсионного закона $\omega(\mathbf{k})$, связывающего частоту с поляризацией, — это его важная характеристика. При помощи фононного спектра можно выразить свободную энергию гармонического кристалла (постоянная Маделунга). Укажем еще на одну трудность: фононы являются Бозе–частицами, но какую температуру подставлять в статистику Бозе–Эйнштейна? Описывая взаимодействие фононов, различают их слияние и распад, вводят энергию деформации и процедуру квантования. Описывают также переброс импульса.

Согласно работе К.К. Абгарян [15], многомасштабное моделирование формализуется через базовую модель–композицию, предусматривающую восемь уровней иерархии, от атомарного (уровень 0) до дискретно–континуального (уровень 7). Учет температурного фактора, т. е. не только расчет температурного поля, требует применение моделей уровней 1—2—3 и, в некоторых случаях, уровня 4. В работе [15] приведена многомасштабная композиция для расчета эффективного коэффициента теплопроводности наногетероструктуры. На уровне 3 этим же автором [14] предложено использование модели модального подавления, с учетом угла между осью теплопереноса и групповой скоростью фононов некоторой моды.

Хочется отметить важность перехода «атомный кластер — статика» → «атомный кластер — динамика» на уровне 2. Хотелось бы предостеречь, что использование мощных средств расчета, как в случае рассмотренного в работе [14] кинетического уравнения Больцмана (даже трех–фононных столкновений) и нейросетевого счета, оправдано целями демонстрации и некоторой изящностью, «тонкостью» результатов, но не оправдано прагматикой задачи.

Важность краевых условий на границе области рассмотрения, хотя это замечание тривиально, иллюстрируется спецификацией термостатирования ансамбля фононов, если такой формализм выбран, и закреплением, или откреплением части концевых атомов при наивном расчете ММ.

Идеология многомасштабности отражена в формуле (2), поскольку в ее дискретном прочтении коэффициенты $m_i \Rightarrow \mu(T)$ легко трансформируются в плотность распределения случайной величины, которой становится температура. Они

могут быть взяты из ММ–симуляций затухания колебаний атомов («грузиков») для некоторой сети. Хотя дискретный вариант уравнения (2) больше соответствует ММ–расчету региона теплового воздействия, рассмотрим и непрерывный вариант (4):

$$A = A_0 \int_0^1 \mu(t) \exp\left(\frac{-B}{kT + n\nu Qt}\right) dt, \quad \int_0^1 \mu(t) dt = 1. \quad (4)$$

Интересно взглянуть на ММ–симуляцию как на динамику [16] коннекционистской системы (К–системы), где роль сигнала принадлежит фононам, а состояние элемента определяется электронной энергией, а также деформацией углов, т. е. мы имеем ситуацию, когда энергия Хартри–Фока для атома на небольшую величину отличается от минимальной, т. е. вблизи экстремума.

Методика расчета теплового фактора в 1D–2D материалах

Методика расчета [17] состоит в последовательном исполнении пяти пунктов, четыре из которых связаны с вводимыми понятиями.

1. Ведем понятие «элементарный акт тепловыделения» (**ЕАТ**), которое моделируется тройкой $\langle \tau_{\text{ЕАТ}}, \nu_{\text{ЕАТ}}, q_{\text{ЕАТ}} \rangle$ величин с характерными длительностью, объемом и тепловым эффектом.

Выявление ЕАТ может быть нетривиально. Для реакции окисления цинка — это переход энергии электронных орбиталей (из атомных в молекулярные) через активированный комплекс в кинетическую энергию ядер по отдельности и молекулы в целом. Для теплового расчета [18–20] значима общая длительность всей оцепи пере-

ходов (1 пс?). В случае проводящего филамента обычное указание на джоулево тепло недостаточно. Свой вклад могут вносить безызлучательные переходы электронов, например, между зоной проводимости и ловушечным уровнем в запрещенной зоне. Привычный макроскопический закон Джоуля, наверняка, скрывает в себе тонкие детали взаимосвязи группового движения электронов зоны проводимости с генерацией фононов.

2. Область и распределение ЕАТ по пространству, которое моделируется [21–24] многообразием $G \in \mathbb{R}^3$, дискретным, но возможно и непрерывным, облаком точек, центров ЕАТ. Надо помнить, что ЕАТ распределены и во времени; наверняка, присутствуют флуктуации во времени.

3. Радиус ЕАТ–воздействия $\rho_{\text{ЕАТ}}$. Для кристаллического материала — это длина свободного пробега фонона [25], а в формализме колебаний атомных связей — это характерная длина затухания (корректнее рассматривать избыточную энергию колебаний и затухание до величины $\approx \frac{1}{10} \max\{kT_\infty, q_{\text{ЕАТ}}\}$. Можно учесть анизотропию

$\rho_{\text{ЕАТ}}$, сведя тензор к скаляру. С этим связано время теплового воздействия, которое ранее оценивалось нами в виде времени релаксации $\tau_{\text{relax}} \approx 300 \frac{1}{\omega}$, что вытекает из оценки $\rho_{\text{ЕАТ}}$.

4. Регион теплового воздействия (**РТВ**). На его границах можно задавать краевые условия для решения классического уравнения теплопроводности, баланса тепловых потоков, сравнения $T_\infty > T_{\text{ex}}$, выявления степени перегретости РТВ (раз-

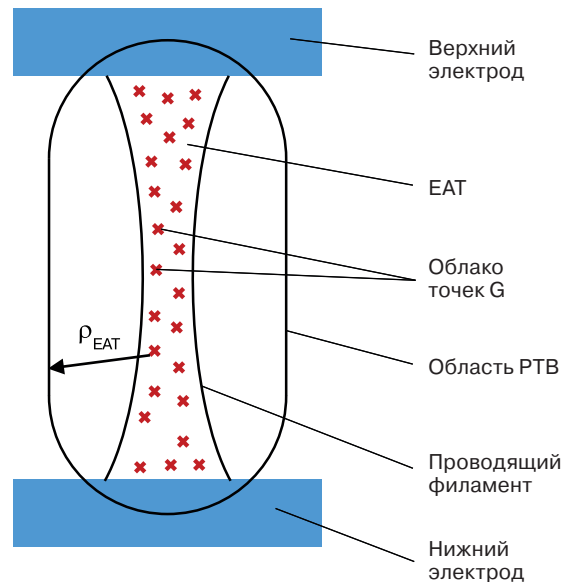
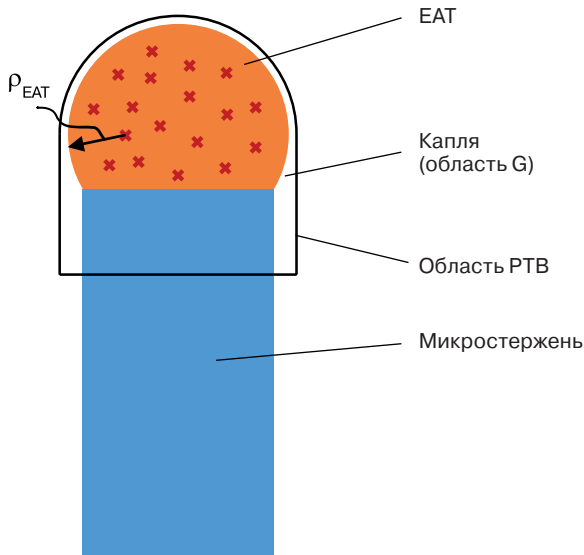


Рис. 7. Применение методики для роста микростержней и мемристора.

«x» — центры тепловыделения; пунктир — граница зоны теплового воздействия; сплошная линия — условная граница зоны тепловыделения

Fig. 7. Application of the technique for the growth of microrods and memristor. “x” is centers of heat release; the dotted line is the boundary of the heat–affected zone; solid line is conditional boundary of the heat release zone

ность температур его границы и внешней среды). При этом естественные границы системы могут лежать внутри границ РТВ. Для примера с ростом леса стержней ZnO разогреваемая ими подложка лежит все-таки вне РТВ, РТВ предположительно ограничен верхней частью микростержня (его высота 10 мкм). На рис. 7 визуализированы предлагаемые понятия для двух конкретных ситуаций. Вне РТВ отсутствуют неравновесные эффекты, а перегрев присутствует, что легко подтвердить опытным путем.

5. Характеризация ключевых электрофизических процессов, для которых будет рассматриваться температурный фактор. Вначале проводится оценка характерных длительностей процессов, а затем коррекция классических соотношений, как, например, нами сделано для закона Аррениуса (см. рис. 5).

Заключение

Показана актуальность выработки модельных представлений и новых понятий (ЕАТ, РТВ),

которые потом можно формализовать, для решения конкретно-расчетных задач в области тепловыделения, теплопередачи, воздействия теплоты для наноструктурированных 1D—2D материалов [18—20]. Две конкретные задачи, рассмотренные авторами, послужили только для осознания и постановки проблемы. Апробация же методики на будущих задачах предполагает ее уточнение и адаптацию самими исследователями под прагматику физико-технической ситуации. Традиционное понимание проблемы тепловыделения в нанoeлектронике сосредоточено на макро- и мезоскопических эффектах избыточного нагрева и теплоотвода в керамике и других наноматериалах с измененными значениями коэффициентов теплопроводности. Принципиальная неравновесность наномасштабных эффектов до сих пор остается без внимания. Предложена методика, которая на последнем шаге решения классических уравнений вне РТВ позволяет сосредоточить внимание на мезоэффектах.

Библиографический список

1. Stempkovsky A.L., Gavrilov S.V., Matyushkin I.V., Teplov G.S. On the issue of application of cellular automata and neural networks methods in VLSI design. *Optical Memory and Neural Networks*. 2016; 25(2): 72—78. <https://doi.org/10.3103/S1060992X16020065>; <https://www.elibrary.ru/wvvdld>
2. Сидоренко К.В., Горшков О.Н., Касаткин А.П. Применение метода кинетического Монте-Карло для расчета ВАХ и теплопереноса в мемристивных структурах на основе стабилизированного диоксида циркония. *Труды XXI Междунар. симпозиума «Нанofизика и нанoeлектроника»*. 13–16 марта 2017 г., Нижний Новгород. В 2 т. Нижний Новгород: Издательство Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского; 2017. Т. 2. С. 716—717.
3. Menzel S., Waters M., Marchewka A., Böttger U., Dittmann R., Waser R. Origin of the ultra-nonlinear switching kinetics in oxide-based resistive switches. *Advanced Functional Materials*. 2011; 21(23): 4487—4492. <https://doi.org/10.1002/adfm.201101117>
4. Guseinov D.V., Korolev D.S., Belov A.I., Okulich E.V., Okulich V.I., Tetelbaum D.I., Mikhaylov A.N. Flexible Monte-Carlo approach to simulate electroforming and resistive switching in filamentary metal-oxide memristive devices. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2020; 28(1): 015007—015023. <https://doi.org/10.1088/1361-651X/ab580e>
5. Zhang X., Yang Sh., Tu Ch.-G., Kiang Y.-W., Yang C.C. Growth model of a GaN nanorod with the pulsed-growth technique of metalorganic chemical vapor deposition. *Crystal Growth & Design*. 2018; 18(7): 3767—3773. <https://doi.org/10.1021/acs.cgd.7b01605>
6. Шарапов А.А., Матюшкин И.В. Моделирование процесса роста массива одномерных монокристаллических структур ZnO. В сб.: *Математическое моделирование в материаловедении электронных*
7. Редькин А.Н., Рыжова М.В., Якимов Е.Е., Грузинцев А.Н. Упорядоченные массивы наностержней оксида цинка на кремниевых подложках. *Физика и техника полупроводников*. 2013; 47(2): 216—222. <https://journals.ioffe.ru/articles/viewPDF/4898>; <https://www.elibrary.ru/rcqwit>
8. Носенко Т.Н., Ситникова В.Е., Стрельникова И.Е., Фокина М.И. Практикум по колебательной спектроскопии. СПб.: Университет ИТМО; 2021. 173 с.
9. Недосейкина Т.И., Шуваев А.Т., Власенко В.Г. Исследование ангармонического парного потенциала связей Zn—O в ZnO и Zn_{0,1}Mg_{0,9}O. *Исследовано в России*. 1999; 2: 1—9.
10. Воробьева Н.А. Нанокристаллический ZnO(M) (M = Ga, In) для газовых сенсоров и прозрачных электродов. Дисс. ... канд. хим. наук. М.; 2015. 180 с.
11. Lu X., Fang D., Ito S., Okamoto Y., Ovchinnikov V., Cui Q. QM/MM free energy simulations: recent progress and challenges. *Molecular Simulation*. 2016; 42(13): 1052—1078. <https://doi.org/10.1080/08927022.2015.1132317>
12. Буркерт У., Эллингджер Н. Молекулярная механика; пер. с англ. М.: Мир; 1986. 364 с.
13. Zhang Y., Chen H.X., Duan L., Fan J.-B. The electronic structures, elastic constants, dielectric permittivity, phonon spectra, thermal properties and optical response of monolayer zirconium dioxide: A first-principles study. *Thin Solid Films*. 2021; 721: 138549—138556. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2021.138549>; <https://www.elibrary.ru/rimzwe>
14. Abgaryan K.K., Kolbin I.S. Ab initio calculation of the effective thermal conductivity coefficient of a superlattice using the Boltzmann transport equation. *Russian Mi-*

croelectronics. 2020; 49(8): 594—599. <https://doi.org/10.1134/S1063739720080028>; <https://www.elibrary.ru/powoad>

15. Абгарян К.К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. М.: МАКС Пресс; 2017. 280 с. <https://www.elibrary.ru/xuntmd>

16. Матюшкин И.В., Тельминов О.А. Формально-философские вопросы коннекционизма и актуальные проблемы разработки нейроморфных систем. *Электронная техника. Серия 3. Микроэлектроника*. 2022; (24(186)): 49—59. <https://doi.org/10.7868/S2410993222020099>

17. Матюшкин И.В., Тельминов О.А., Михайлов А.Н. Учет тепловыделения в малых объемах вещества на примере роста микростержней ZnO: поиск методики моделирования. В сб.: *Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов МММЭК-2022. Материалы IV Междунар. конф. Москва, 24–26 октября 2022 г.* М.: Макс Пресс; 2022. С. 68—71. <https://doi.org/10.29003/m3070.MMMSEC-2022/68-71>

18. Hu Y., Chen Ch., Wen Y., Xue Zh., Zhou X., Shi D., Hu G., Xie X. Novel micro–nano epoch composites for electronic packaging application: Balance of thermal conductivity and processability. *Composites Science and Technology*. 2021; 209(4): 108760. <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2021.108760>

19. Manavendra P. Singh, Ryntathiang S., Krishnan S., Nayak P. Study of thermal conductivity in two–dimensional Bi₂Te₃ from micro–Raman spectroscopy. *Current Chinese Science*. 2021; 1(4): 453—459. <https://doi.org/10.2174/2210298101666210412101104>

References

1. Stempkovsky A.L., Gavrilov S.V., Matyushkin I.V., Teplov G.S. On the issue of application of cellular automata and neural networks methods in VLSI design. *Optical Memory and Neural Networks*. 2016; 25(2): 72—78. <https://doi.org/10.3103/S1060992X16020065>; <https://www.elibrary.ru/wvvdld>

2. Sidorenko K.V., Gorshkov O.N., Kasatkin A.P. Application of the kinetic Monte Carlo method for calculating the CVC and heat transfer in memristive structures based on stabilized zirconia. *Proc. of the XXI Inter. symposium “Nanophysics and Nanoelectronics”. March 13–16, 2017, Nizhny Novgorod*. In 2 vol. Nizhny Novgorod: Nizhni Novgorod University Press (NNUP); 2017. Vol. 2. P. 716—717. (In Russ.)

3. Menzel S., Waters M., Marchewka A., Böttger U., Dittmann R., Waser R. Origin of the ultra–nonlinear switching kinetics in oxide–based resistive switches. *Advanced Functional Materials*. 2011; 21(23): 4487—4492. <https://doi.org/10.1002/adfm.201101117>

4. Guseinov D.V., Korolev D.S., Belov A.I., Okulich E.V., Okulich V.I., Tetelbaum D.I., Mikhaylov A.N. Flexible Monte–Carlo approach to simulate electroforming and resistive switching in filamentary metal–oxide memristive devices. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2020; 28(1): 015007—015023. <https://doi.org/10.1088/1361-651X/ab580e>

5. Zhang X., Yang Sh., Tu Ch.–G., Kiang Y.–W., Yang C.C. Growth model of a GaN nanorod with the pulsed–growth technique of metalorganic chemical vapor deposition. *Crystal Growth & Design*. 2018; 18(7): 3767—3773. <https://doi.org/10.1021/acs.cgd.7b01605>

6. Sharapov A.A., Matyushkin I.V. Simulation of the growth process of an array of one–dimensional ZnO single–crystal structures. In: *Mathematical modeling in materials*

20. Wang X., An M., Ma W., Zhang X. Tunable Anisotropic lattice thermal conductivity in one–dimensional superlattices from molecular dynamics simulations. *Journal of Thermal Science*. 2022; 31(1): 1068—1075. <https://doi.org/10.1007/s11630-022-1661-2>

21. Fernandes H., Cerqueira N., Sousa S., Melo A. A molecular mechanics energy partitioning software for biomolecular systems. *Molecules*. 2022; 27(17): 5524. <https://doi.org/10.3390/molecules27175524>

22. Костюков В.В. Молекулярная механика биополимеров. М.: ИНФРА–М; 2020. 140 с. <https://doi.org/10.12737/1010677>

23. Wang Yu., Fass J., Kaminow B., Herr J., Rufa D., Zhang I., Pulido I., Henry M., Macdonald H., Takaba K., Chodera J. End–to–end differentiable construction of molecular mechanics force fields. *Chemical Science*. 2022; 13: 12016—12033. <https://doi.org/10.1039/D2SC02739A>

24. Pei Zh., Mao Y., Shao Y., Liang W. Analytic high–order energy derivatives for metal nanoparticle–mediated infrared and Raman scattering spectra within the framework of quantum mechanics / molecular mechanics model with induced charges and dipoles. *The Journal of Chemical Physics*. 2022; 157(16): 164110. <https://doi.org/10.1063/5.0118205>

25. Yang X., Feng T., Li J., Ruan X. Evidence of fifth– and higher–order phonon scattering entropy of zone–center optical phonons. *Physical Review B*. 2022; 105(11): 115205—115206. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.105.115205>

science of electronic component. Proc. of the Inter. conf. IC–M3SEC–2021. October 25–27, 2021, Moscow. Moscow: Maks Press; 2021. P. 150—151. (In Russ.) <https://doi.org/10.29003/m2497.MMMSEC-2021/150-151>; <https://www.elibrary.ru/tgzahm>

7. Redkin A.N., Ryzhova M.V., Yakimov E.E., Gruzintsev A.N. Aligned arrays of zinc oxide nanorods on silicon substrates. *Semiconductors*. 2013; 47(2): 252—258. (In Russ.) <https://journals.ioffe.ru/articles/viewPDF/4898>; <https://www.elibrary.ru/rcqwit>

8. Nosenko T.N., Sitnikova V.E., Strel'nikova I.E., Fokina M.I. Workshop on vibrational spectroscopy. St. Petersburg: Universitet ITMO; 2021. 173 p. (In Russ.)

9. Nedoseikina T.I., Shuvaev A.T., Vlasenko V.G. Investigation of the anharmonic pair potential of Zn–O bonds in ZnO and Zn_{0,1}Mg_{0,9}O. *Issledovano v Rossii*. 1999; 2: 1—9. (In Russ.)

10. Vorob'eva N.A. Nanocrystalline ZnO(M) (M = Ga, In) for gas sensors and transparent electrodes. Diss. Cand. Sci. (Chem.). Moscow; 2015. 180 p. (In Russ.)

11. Lu X., Fang D., Ito S., Okamoto Y., Ovchinnikov V., Cui Q. QM/MM free energy simulations: recent progress and challenges. *Molecular Simulation*. 2016; 42(13): 1052—1078. <https://doi.org/10.1080/08927022.2015.1132317>

12. Burkert U., Allinger N.L. Molecular mechanics. Washington, D.C.: American Chemical Society; 1982. 339 p. (Russ. transl.: Burkert U., Allinger N.L. Molekulyarnaya mekhanika. Moscow: Mir; 1986. 364 p.)

13. Zhang Y., Chen H.X., Duan L., Fan J.–B. The electronic structures, elastic constants, dielectric permittivity, phonon spectra, thermal properties and optical response of monolayer zirconium dioxide: A first–principles study. *Thin Solid Films*. 2021; 721: 138549—138556. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2021.138549>

org/10.1016/j.tsf.2021.138549; <https://www.elibrary.ru/rimzwe>

14. Abgaryan K.K., Kolbin I.S. Ab initio Calculation of the effective thermal conductivity coefficient of a superlattice using the Boltzmann transport equation. *Russian Microelectronics*. 2020; 49(8): 594—599. <https://doi.org/10.1134/S1063739720080028>; <https://www.elibrary.ru/powoad>

15. Abgaryan K.K. Multiscale modeling in problems of structural materials science. Moscow: MAKS Press; 2017. 280 p. (In Russ.). <https://www.elibrary.ru/xuntmd>

16. Matushkin I.V., Telminov O.A. Formal and philosophical issues of connectionism and actual problems of neuromorphic systems design. *Electronic Engineering. Series 3. Microelectronics*. 2022; (2(186)): 49—59. (In Russ.). <https://doi.org/10.7868/S2410993222020099>

17. Matyushkin I.V., Telminov O.A., Mikhailov A.N. Accounting for heat release in small volumes of matter on the example of the growth of ZnO microrods: search for a modeling technique. In: *Mathematical modeling in materials science of electronic components ICM3SEC-2022. Proc. of the International conference. October 24–26, 2022, Moscow*. Moscow: Maks Press 2022. P. 68—71. <https://doi.org/10.29003/m3070.MMMSEC-2022/68-71>

18. Hu Y., Chen Ch., Wen Y., Xue Zh., Zhou X., Shi D., Hu G., Xie X. Novel micro–nano epoxy composites for electronic packaging application: Balance of thermal conductivity and processability. *Composites Science and Technology*. 2021; 209(4): 108760. <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2021.108760>

19. Manavendra P. Singh, Ryntathi S., Krishnan S., Nayak P. Study of thermal conductivity in two–dimensional

Bi₂Te₃ from micro–Raman spectroscopy. *Current Chinese Science*. 2021; 1(4): 453—459. <https://doi.org/10.2174/2210298101666210412101104>

20. Wang X., An M., Ma W., Zhang X. Tunable Anisotropic lattice thermal conductivity in one–dimensional superlattices from molecular dynamics simulations. *Journal of Thermal Science*. 2022; 31(1): 1068—1075. <https://doi.org/10.1007/s11630-022-1661-2>

21. Fernandes H., Cerqueira N., Sousa S., Melo A. A molecular mechanics energy partitioning software for biomolecular systems. *Molecules*. 2022; 27(17): 5524. <https://doi.org/10.3390/molecules27175524>

22. Kostyukov V. Molecular mechanics of biopolymers. Moscow: INFRA–M; 2020. 140 p. (In Russ.). <https://doi.org/10.12737/1010677>

23. Wang Yu., Fass J., Kaminow B., Herr J., Rufa D., Zhang I., Pulido I., Henry M., Macdonald H., Takaba K., Chodera J. End–to–end differentiable construction of molecular mechanics force fields. *Chemical Science*. 2022; 13: 12016—12033. <https://doi.org/10.1039/D2SC02739A>

24. Pei Zh., Mao Y., Shao Y., Liang W. Analytic high–order energy derivatives for metal nanoparticle–mediated infrared and Raman scattering spectra within the framework of quantum mechanics / molecular mechanics model with induced charges and dipoles. *The Journal of Chemical Physics*. 2022; 157(16): 164110. <https://doi.org/10.1063/5.0118205>

25. Yang X., Feng T., Li J., Ruan X. Evidence of fifth– and higher–order phonon scattering entropy of zone–center optical phonons. *Physical Review B*. 2022; 105(11): 115205—115206. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.105.115205>

Информация об авторах / Information about the authors

Матюшкин Игорь Валерьевич — канд. физ.–мат. наук, доцент кафедры проектирования и конструирования интегральных микросхем, Национальный исследовательский университет «МИЭТ», пл. Шокина, д. 1, Зеленоград, Москва, 124498, Российская Федерация; ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-2988-8803>; e–mail: mivmiv@yandex.ru

Тельминов Олег Александрович — канд. техн. наук, начальник лаборатории нейроморфных систем, АО «НИИ молекулярной электроники», ул. Акад. Валиева, д. 6, стр. 1, Зеленоград, Москва, 124460, Российская Федерация; <https://orcid.org/0000-0002-2358-3689>; e–mail: otelminov@niime.ru

Михайлов Алексей Николаевич — канд. физ.–мат. наук, заведующий лабораторией, Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, просп. Гагарина, д. 23, Нижний Новгород, 603022, Российская Федерация; <https://orcid.org/0000-0001-5505-7352>; e–mail: mian@nifti.unn.ru

Igor V. Matyushkin — Cand. Sci. (Phys.–Math.), Associate Professor of the Department of Design and Construction of Integrated Circuits, National Research University of Electronic Technology, 1 Shokin Sq., Zelenograd, Moscow 124498 Russian Federation; ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-2988-8803>; e–mail: mivmiv@yandex.ru

Oleg A. Telminov — Cand. Sci. (Eng.), Head of the Laboratory of Neuromorphic Systems, Molecular Electronics Research Institute, JSC, 6–1 Acad. Valieva Str., Zelenograd, Moscow 124460, Russian Federation; <https://orcid.org/0000-0002-2358-3689>; e–mail: otelminov@niime.ru

Alexey N. Mikhaylov — Cand. Sci. (Phys.–Math.), Head of Laboratory, National Research Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod, 23 Gagarin Ave., Nizhny Novgorod 603022, Russian Federation; <https://orcid.org/0000-0001-5505-7352>; e–mail: mian@nifti.unn.ru

Поступила в редакцию 22.11.2022; поступила после доработки 02.12.2022; принята к публикации 19.12.2022
Received 22 November 2022; Revised 2 December 2022; Accepted 19 December 2022