ОБЩИЕ ВОПРОСЫ / GENERAL QUESTIONSA

Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2023. Т. 26, № 4. С. 342—350.
DOI: 10.17073/1609-3577j.met202307.560

УДК 621.315:517.958.533.6

Об актуальности проблемы синтеза новых материалов в условиях инновационного развития промышленности

© *2023 г.* **А. А. Зацаринный[1], К. К. Абгарян[1,✉]**

[1] ***Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук,***
ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Российская Федерация

✉ *Автор для переписки: kristal83@mail.ru*

Аннотация. В статье рассматриваются актуальные проблемы синтеза новых материалов в современных условиях. Отмечено, что сегодня это важнейшая стратегическая задача инновационного развития промышленности России. Сформулированы факторы, определяющие актуальность этой задачи. Дан краткий анализ состояния российской микроэлектроники. Показана значимость методов математического моделирования и необходимость развития инновационных подходов в области синтеза новых материалов. Выделены основные направления научных исследований, связанные с разработкой новых модельных представлений, методов и алгоритмов, применяемых в области математического моделирования структур и свойств наноматериалов, а также систем на их основе, рассмотренные на IV Международной конференции «Математическое моделирование в материаловедение электронных компонентов» (МММЭК–2022). В работе показано, что для дальнейшего развития методов и средств математического моделирования требуется отечественная высокопроизводительная среда для научных исследований, обладающая комфортным пользовательским интерфейсом, гибкостью в настройке ресурсов, высокой производительностью и надежностью.

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

Для цитирования: Зацаринный А.А., Абгарян К.К. Об актуальности проблемы синтеза новых материалов в условиях инновационного развития промышленности. *Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники.* 2023; 26(4): 342—350. https://doi.org/10.17073/1609-3577j.met202307.560

On the relevance of the problem of synthesis of new materials in the conditions of innovative industrial development

A. A. Zatsarinnyy[1], K. K. Abgaryan[1,✉]

[1] ***Federal Research Centre “Information and Control” of the Russian Academy of Sciences,***
44–2 Vavilov Str., Moscow 119333, Russian Federation

✉ *Corresponding author: kristal83@mail.ru*

Abstract. The article discusses current problems of the synthesis of new materials in modern conditions. It is noted that today this is the most important strategic task of innovative development of Russian industry. The factors determining the relevance of this task are formulated. A brief analysis of the state of Russian microelectronics is given. The importance of mathematical modeling methods and

the need to develop innovative approaches in the field of synthesis of new materials are shown. The main directions of scientific research related to the development of new model concepts, methods and algorithms used in the field of mathematical modeling of the structures and properties of nanomaterials, as well as systems based on them, discussed at the IV International Conference "Mathematical Modeling in Materials Science of Electronic Components" (ICM3SEC–2022). The paper shows that for the further development of methods and means of mathematical modeling, a domestic high–performance environment for scientific research is required, with a comfortable user interface, flexibility in setting up resources, high performance and reliability.

Keywords: digital transformation, synthesis of new materials, new materials, multi–scale modeling, high–performance research infrastructure

For citation: A.A. Zatsarinnyy, K.K. Abgaryan. On the relevance of the problem of synthesis of new materials in the conditions of innovative industrial development. *Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2023; 26(4): 332—350. https://doi.org/10.17073/1609-3577j.met202307.547

Введение

В Послании Президента Федеральному собранию 21 февраля 2023 г.[1] отмечено, что в условиях беспрецедентно масштабных экономических и финансовых санкций Запада против России обеспечено устойчивое состояние экономики и, что важно, системы управления. Так, вместо ожидавшегося в 2022 г. спада валового внутреннего продукта на 20—25 % он снизился только на 2,1 %. Более того, в 2023 г. Всемирный банк включил Россию на 5–е место (1–е место в Европе)[2].

Вместе с тем, нельзя не признать, что Запад создал для России целый спектр реальных проблем, имеющих глобальный характер. Одна из них — в сфере электронной компонентной базы и материалов — ставит под угрозу возможность реализации стратегии научно–технологического развития страны на основе цифровой трансформации. Ключевой проблемой становится обеспечение технологического суверенитета страны в области микроэлектроники на основе создания полнофункциональной микроэлектронной отрасли. Для успешного решения этой проблемы необходима системная концентрация всех видов ресурсов, включая научные и образовательные. Не секрет при этом, что состояние российской науки оставляет желать лучшего. Так, по уровню публикационной активности она находится на 8–м месте (3,5 % публикаций), по уровню патентной активности на 11–м месте, а по уровню финансирования — на 34–м месте в мире (примерно 1 % от ВВП) [1].

На заседании Совета по науке и образованию 8 февраля 2023 г. Президент В.В. Путин обратил внимание на формирование целостной системы планирования и управления научно–технологическим развитием[3]. Приняты принципиальные шаги в этом направлении. Выделим наиболее важные из них: повышение роли Совета в выработке стратегических решений и приоритетов в научно–технической сфере, обновление подходов и методологии научно–технологического прогнозирования, координация на уровне правительственной комиссии действий министерств, ведомств и высокотехнологичных компаний по исполнению единой государственной программы научно–технологического развития, а также реализация Федеральных научно–технических программ и инновационных проектов для создания собственных наукоемких решений (сельское хозяйство, генетика, система мониторинга климата, строительство крупных исследовательских установок мирового уровня для создания новых лекарств, материалов и др. наукоемкой продукции).

Одним из важнейших наукоемких научных направлений, которое определено в рамках первого приоритета Стратегии научно–технологического развития, является проблематика синтеза новых материалов с заданными свойствами на основе математического моделирования. Эта проблематика очень сложная, наукоемкая, многоаспектная и поэтому требует всестороннего обсуждения в научном сообществе [2—4]. Существенный вклад в ее развитие вносят регулярные Международные конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК),

[1] Послание Президента Федеральному собранию. 21 февраля 2023. http://www.kremlin.ru/events/president/transcripts/statements/70565

[2] Рейтинг Всемирного банка. https://www.dp.ru/a/2023/08/04/vsemirnij–bank–vkljuchil–rossiju

[3] Заседание Совета по науке и образованию 8 февраля 2023 г. Москва, Кремль. http://www.kremlin.ru/events/president/transcripts/deliberations/70473

© 2023 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.

которые, начиная с 2019 г., организуют ФИЦ ИУ РАН совместно с НИИМЭ.

В этом году состоялась юбилейная, пятая, конференция. И в этой связи, представляется целесообразным системно взглянуть на направления работ, которые были представлены и обсуждены на конференциях МММЭК–2022.

Факторы, определяющие значимость проблематики синтеза новых материалов

В докладах конференции достаточно детально и обоснованно представлены факторы, определяющие значимость проблематики синтеза новых материалов с заданными свойствами на основе математического моделирования высокопроизводительных вычислений. К ним следует отнести [5—7]:

– синтез новых материалов с заданными свойствами как стратегически важное направление инновационного развития в рамках программы цифровой экономики;

– успешное решение задач синтеза новых материалов как основа прорывных технологий для создания отечественной импортонезависимой электронной компонентной базы;

– новые материалы — кардинальное решение проблемы обеспечения информационной безопасности компьютерных систем различного назначения, прежде всего в интересах государственного управления, обороны, безопасности и правопорядка;

– требования создания перспективных комплексов вооружения и военной техники на отечественной электронной компонентной базе могут быть выполнены только за счет создания новых комплектующих элементов и материалов, а также технологий их получения;

– разработанный научно–методический аппарат требует адекватной поддержки в виде высокопроизводительной гибкой исследовательской инфраструктуры;

– 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;

– необходимость создания высокопроизводительной исследовательской инфраструктуры является стимулом кардинального реформирования системы подготовки специалистов. Так, ведущие вузы страны (МГУ им. М.В. Ломоносова, МФТИ, МИСИС, МГТУ им. Н.Э. Баумана и др.) создают новые программы обучения по подготовке специалистов в областях математического моделирования, систем программирования и методов анализа больших данных;

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

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

Состояние российской микроэлектроники и пути выхода из кризиса

В докладах и выступлениях на конференциях большое внимание уделено не только анализу состояния микроэлектроники России, но предложениям по восстановлению этой отрасли [3]. Дан ретроспективный анализ развития микроэлектроники в СССР. Приведем наиболее значимые факты.

- В электронной промышленности СССР было 107 производственных и научно–производственных объединений, 59 самостоятельных предприятий, 59 НИИ и 107 ОКБ.
- В составе Министерства электронной промышленности имелись институт повышения квалификации руководящих работников и специалистов, и 23 техникума, в которых обучались до 7000 студентов. В отрасли трудилось около 1,5 млн чел., включая примерно 170 тыс. в научных организациях и конструкторских бюро.
- Разработано около 16 тысяч типов изделий электронной техники и к 1990 г. произведено 1,8 млрд шт. интегральных микросхем и около 6 млрд шт. полупроводниковых приборов.
- По объему производства изделий электронной техники СССР был третьей страной в мире после США и Японии, а по номенклатуре выпускаемых изделий — первой.
- СССР была единственной страной в мире, которая полностью обеспечивала свои потребности в сфере вооружении и военной техники.

После распада страны в России оказались разрушены самые значимые кооперации научных организаций и предприятий электронной промышленности с участием бывших союзных республик (Украина, Армения, Прибалтика и др.). В результате Россия лишилась необходимой полнофункциональной инфраструктуры поддержки и обеспечения функционирования отрасли по развитию отечественной микроэлектроники. Потребности в микроэлектронных изделиях на протяжении последних десятилетий практически полностью

удовлетворяются за счет закупок импортных электронных компонентов. Принятые «Программа развития электронной компонентной базы» (2007 г.) и Федеральная целевая программа «Развитие электронной компонентной базы и радиоэлектроники» (на 2008—2015 гг.) практически не выполнены.

Вместе с тем, крупные зарубежные производители (TSMC, Intel, Samsung и др.) достигли высочайшего уровня технологического развития. Освоены технологические процессы 28, 20 и 10 нм, осваиваются трех– и двухнанометровые интегральные схемы. По прогнозам TSMC технологический процесс уровня 3 нм позволит разместить порядка 300 млн транзисторов, а уровня 1 нм — 1 млрд транзисторов на одном квадратном миллиметре. Отметим, что если на начальных этапах развития микроэлектроники переход на новый уровень обеспечивался простым масштабированием решений, то по мере уменьшения технологических норм до единиц нм требуются более сложные решения: кардинальные изменения процесса и оборудования фотолитографии, новые материалы, структуры и т.п.

Эти обстоятельства привели к огромному отставанию от мирового уровня и, как следствие, значительной импортозависимости, включая даже ряд стратегически важных оборонных отраслей.

Для восстановления российской микроэлектроники необходимо преодоление целого ряда проблем и барьеров. Основные из них:

- Воссоздание научных школ проектирования микроэлектронной техники;
- Накопление знаний с учетом мирового опыта;
- Создание конкурирующих научно–производственных и производственных групп;
- Организация производства с необходимой мощностью;
- Изыскание необходимого финансирования всего жизненного цикла микроэлектронной техники, включая фундаментальные научные исследования;
- Поиск заинтересованных инвесторов;
- Обоснование новых логистических цепочек взаимодействия предприятий как внутри России, так и с другими странами (с учетом санкционных ограничений).

Особо отметим необходимость принципиального решения вопроса о прямом финансировании фундаментальных исследований в области микроэлектроники как со стороны государства, так и со стороны бизнеса. Речь идет об актуальных направлениях исследований компонентной базы на новых физических принципах, включая, например, многоэлементные структуры на основе сверхпроводящих квантовых битов (кубитов), элементную базу на квантовых эффектах, углеродной электронике (на графене, на углеродных нанотрубках, на алмазе), органической электронике, интегрированной радиофотонике.

Представляется, что для преодоления приведенных выше барьеров в России необходимо срочно реализовать проект по созданию отечественной ЭКБ и материалов [3, 7]. Такой «электронный» проект должен предусматривать комплекс мероприятий, включая исследования, разработку технологий, реализующих их микроэлектронных изделий, необходимого технологического оборудования и расходных материалов, научно–производственной базы, в том числе серийных заводов, а также подготовку высококвалифицированных специалистов в области радиоэлектроники. Следует отметить необходимость развития отечественных программных средств для разработки и оптимизации полупроводниковых приборов, а также технологий их производства с использованием средств автоматизированного проектирования.

Традиционно используемое понятие «импортозамещение» сегодня приобретает качественно другой характер, а именно — оно трансформируется в более актуальное — «импортонезависимость». Другими словами, важно не просто суметь создать необходимый набор аналогов существующих материалов и ЭКБ, — необходимо выйти на уровень обеспечения полного технологически независимого отечественного жизненного цикла создания материалов с требуемыми свойствами, включая исследования, разработки, внедрение и поддержание в различных условиях эксплуатации и применения.

Ключевым должно стать создание в РФ нового микроэлектронного производства для перехода на новый качественный уровень технологии 28 нм и его дальнейшее развитие до технологического уровня 7 нм. Для этого необходима системная постановка работ по разработке технологий создания микроэлектронной компонентной базы, в том числе для аппаратуры военного и двойного назначения. Микроэлектроника должна быть обозначена на государственном уровне как базовая для всего комплекса высокотехнологичных отраслей.

Понимание таких подходов к модернизации этого направления в рамках общих целей развития страны в новых геополитических и экономических условиях должно обеспечить мобилизацию и сплоченность научного сообщества перед лицом реальных глобальных угроз. Особую значимость для нашей страны представляет собой проблема консолидации интеллектуальной элиты, решение которой необходимо для обеспечения сплоченности российского общества перед лицом глобальных угроз для национальной и глобальной безопасности. Определенный оптимизм вызывают в связи с этим заявления нового Президента РАН академика Г.Я. Красникова на заседании президиума РАН

2 ноября 2022 г. о реанимации 6–й подпрограммы фундаментальных научных исследований[4].

Математическое моделирование структуры и свойств наноматериалов и систем на их основе

Основные направления научных исследований, связанные с разработкой новых модельных представлений, методов и алгоритмов, применяемых в области математического моделирования структур и свойств наноматериалов, а также систем на их основе, были рассмотрены на IV Международной конференции «Математическое моделирование в материаловедение электронных компонентов» (МММЭК–2022). Наиболее интересные результаты, представленные на конференции по следующим направлениям.

Первое. Моделирование работы многоуровневых элементов памяти для компьютеров следующего поколения:

– в докладе О.А. Тельминова и Е.С. Горнева отмечена особая роль нейронных сетей и их аппаратной реализации в развитии систем Искусственного интеллекта [8]. Отмечено, что в настоящее время развиваются две ветви нейросетевых решений — на основе классической модели нейрона и наиболее активно развивающаяся на базе нейроморфной модели. Представлены анализ и классификация элементной базы, а также схемотехнические решения для нейроморфных вычислений на мемристорных кроссбарах для «подготовки к интегральному исполнению управляющей схемы, выполненной по КМОП–технологии и матрицы мемристоров»;

– проблемы имитационного моделирования аналоговой импульсной нейронной сети на основе мемристорных элементов и решение задачи распознавания изображений рассматривалась в докладе А.Ю. Морозова, К.К. Абгарян и Д.Л. Ревизникова [9].

Второе. Математическое моделирование в структурном материаловедении:

– рассматривались как подходы, связанные с проектированием программных систем для моделирования в материаловедении электронных компонентов [10], так и решение конкретных задач, таких как численное моделирование фотоэлектрических характеристик солнечных элементов на основе гетероперехода TiO_2/Cu_2O [11] и моделирование высокотемпературных отжигов массива нанопроволок GaAs;

– как отмечалось в ряде работ моделирование тепловых процессов в наноструктурах представляет актуальную научно–техническую задачу, связанную со значительным увеличением выделяемого тепла при росте рабочих частот с одновременным уменьшением размеров микроэлектронных устройств [12]. В работе профессора В.И. Хвесюка из МГТУ имени Н.Э. Баумана обсуждались теплофизические проблемы. Показано, что «изучение процессов переноса тепла в наноструктурах требует развития принципиально нового направления» [13]. В его совместном докладе с учениками А.А. Бариновым и Чжен Цзяюэ развиваются подходы, позволяющие определять теплопроводность в нанопленках, опираясь на расчеты длин свободных пробегов фононов с учетом шероховатостей поверхностей пленок [14];

– в докладе И.В. Матюшкина, О.А. Тельминова и А.Н. Михайлова из АО НИИМЭ предложена новая методика моделирования с учетом тепловыделения в малых объемах вещества на примере роста микростержней оксида цинках [15];

– в работе А.Г. Настовьяк и ее коллег из ИФП СО РАН из Новосибирска представлены результаты имитационного моделирования процесса отжига массива нанопроволок GaAs методом Монте–Карло [16].

Третье. Современные проблемы создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов с заданными свойствами, включая применение новых методов и средств анализа больших данных:

– были представлены методы создания интеграционной платформы для решения задач материаловедения [17];

– рассмотрены вопросы, связанные с архитектуры обработки данных для параллельных вычислений в высокопроизводительном комплексе для задач материаловедения [18];

– также освещались вопросы, связанные с применением методов машинного обучения для конструирования новых неорганических соединений, перспективных для электроники [19].

Четвертое. Проблемы развития материаловедения квантоворазмерных электронных гетероструктур:

– в докладе коллег из Германии, Белоруссии и Португалии, были представлены результаты исследований магнитных свойств искусственно выращенных структур ферромолибдата стронция (SFMO), применяемых в многофункциональных микроэлекронннных устройствах [20].

О развитии высокопроизводительных вычислений

Важное место на конференциях заняли вопросы создания и применения высокопроизводительной исследовательской инфраструктуры. Дан анализ тенденций в этой области за рубежом [7, 21, 22]. Так, в Стратегии развития Europe–2020 Strategy

[4] Красников Г.Я. на Президиуме РАН. 02.11.2022. https://youtu.be/GQB8kP575Xo

одним из инструментов социально–экономического развития признано создание и совершенствование общеевропейских исследовательских инфраструктур. Европейский Совет в 2002 г. учредил специальный форум по исследовательским инфраструктурам (European Strategy Forum on Research Infrastructures 2012 (ESFRI). Во Франции в 2004 г. создан Национальный центр научных исследований для развития больших исследовательских инфраструктур, в октябре 2012 г. утверждена «Французская Национальная стратегия исследовательских инфраструктур 2012—2020». В Германии в 2013 г. Федеральное министерство образования и науки (BMBF) приняло «Дорожную карту развития исследовательских инфраструктур». Создана сеть национальных научных лабораторий (SNLs) для проблемно–ориентированных междисциплинарных исследований [23, 24]. Китайская академия наук в начале «нулевых» разработала и приняла дорожную карту развития больших исследовательских инфраструктур до 2050 г., охватывает почти 50 действующих или проектируемых больших инфраструктурных исследовательских объектов [25].

Как показывает анализ мирового опыта [8, 9], основными тенденциями являются использование гибридных вычислительных архитектур, организация вычислений в территориально распределенных вычислительных комплексах; виртуализация вычислительных сред и миграция вычислительной среды к источнику данных за счет использования технологий виртуализации и контейнеризации.

С учетом указанных тенденций для повышения эффективности проведения экспериментальных исследований в интересах цифровой трансформации в ФИЦ ИУ РАН создана современная цифровая платформа для научных исследований, которая предоставляет исследователям традиционные облачные услуги, а также технологии научного сервиса как услуги (RaaS — *Research as a Service*) в виде предметно–ориентированных программ [21, 23—26].

На базе платформы зарегистрирован центр коллективного пользования (ЦКП) «Информатика», на котором успешно решается целый ряд разнообразных задач, включая задачи синтеза материалов с заданными свойствами. Вместе с тем, ЦКП по своим характеристикам (15 узлов, 536 ядер, 26 графических ускорителей, 0,225 PFlops) уступает не только отечественным суперкомпьютерам, но и последним из TOP–500 (Китайский суперкомпьютер Inspur TS10000, 34 400 ядер и GPU, 3.0 PFlops).

В этой связи необходимо упомянуть о торжественном открытии 1 сентября 2023 г. нового суперкомпьютера «МГУ–270» в МГУ имени М.В. Ломоносова (на факультете ВМК). Архитектура суперкомпьютера «МГУ–270» сочетает в себе центральные процессоры (CPU), графические процессоры (GPU) и нейронные процессоры (NPU). Его вычислительная мощность достигает 400 петафлопс по операциям искусственного интеллекта. Суперкомпьютер стал результатом сотрудничества МГУ с ведущими российскими и зарубежными компаниями и организациями (Росатом, Роскосмос, Сбербанк, Intel, Nvidia, Huawei и другие)[5].

Однако и наличие высокопроизводительной инфраструктуры не является достаточным условием решения задач синтеза новых материалов: здесь обязательно следует указать на необходимость подготовки кадров высшей квалификации, способных выполнять постановки задач на основе современных математических методов, разрабатывать сложные программные модели для решения таких задач, а также способных выполнять обработку и анализ больших объемов данных (методы искусственного интеллекта, машинного обучения, теории управления, системного анализа).

Заключение

1. Новые материалы — важнейший компонент успешного развития цифровой трансформации. Создание отечественной электронной компонентный базы становится стратегической задачей в рамках цифровой трансформации. Без ее решения невозможно обеспечить создание базовых доверенных компонентов.

2. Синтез новых материалов на основе методов математического моделирования — сложная наукоемкая задача.

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

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

5. Для решения назревших проблем необходима системная постановка работ по созданию технологий создания микроэлектронной компонентной базы для аппаратуры военного и двойного назначения. Необходимо признание микроэлектроники базовой отраслью для всего промышленного комплекса.

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

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

[5] В МГУ появился мощный суперкомпьютер для работы с ИИ. 01.09.2023. https://www.gazeta.ru/tech/2023/09/01/17518010.shtml

Библиографический список

1. Власова В.В., Гохберг Л.М., Дитковский К.А., Коцемир М.Н., Кузнецова И.А., Мартынова С.В., Нестеренко А.В., Полякова В.В., Ратай Т.В., Репина А.А., Росовецкая Л.А., Сагиева Г.С., Стрельцова Е.А., Тарасенко И.И., Фридлянова С.Ю., Юдин И.Б., Варзановцева И.О., Гохберг Л.М., Кузьминов Я.И. Наука. Технологии. Инновации: 2023. Краткий стат. сб. М.: НИУ ВШЭ; 2023. 102 с. https://doi.org/10.17323/978–5–7598–2742–9

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

3. Зацаринный А.А., Абгарян К.К. Синтез новых материалов как приоритетное направление инновационного развития промышленности. *Материалы IV Междунар. конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК–2022). 24–26 октября 2022 г., Москва.* М.: МАКС Пресс; 2022. С. 8—14. https://doi.org/10.29003/m3057.MMMSEC-2022/8-14

4. Абгарян К.К., Осипова В.А. Применение методов поддержки принятия решений для многокритериальной задачи отбора многомасштабных композиций. *Информатика и ее применения.* 2019; 13(2): 47—53. https://doi.org/10.14357/19922264190207

5. Зацаринный А.А., Абгарян К.К. Факторы, определяющие актуальность создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках реализации приоритетов научно–технологического развития России. *Материалы I Междунар. конф. «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК–2019). 21–23 октября 2019 г., Москва.* М.: МАКС Пресс; 2019. С. 8—11.

6. Zatsarinny A.A., Abgaryan K.K. Factors determining the relevance of creating a research infrastructure for synthesizing new materials in implementing the priorities of scientific and technological development of Russia. *Russian Microelectronics.* 2020; 49(8): 600—602. https://doi.org/10.1134/S1063739720080132

7. Зацаринный А.А., Абгарян К.К. Актуальные проблемы создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках цифровой трансформации общества. *Материалы II Междунар. конф. «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК–2020). 19–20 октября 2020 г., Москва.* М.: МАКС Пресс; 2020. С. 3—13. https://doi.org/10.29003/m1507.MMMSEC-2020/8-13

8. Тельминов О.А., Горнев Е.С. Анализ элементной базы и схемотехнических решений для нейроморфных вычислений на мемристорных кроссбарах. *Материалы IV Междунар. конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК–2022). 24–26 октября 2022 г., Москва.* М.: МАКС Пресс; 2022. С. 156—159. https://doi.org/10.29003/m3098.MMMSEC-2022/156-159

9. Морозов А.Ю., Абгарян К.К., Ревизников Д.Л. Иммитационное моделирование аналоговой импульсной нейронной сети на основе мемристивных элементов с использованием параллельных технологий. *Материалы IV Междунар. конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК–2022). 24–26 октября 2022 г., Москва.* М.: МАКС Пресс; 2022. С. 150—156. https://doi.org/10.29003/m3097.MMMSEC-2022/150-156

10. Абгарян К.К. Проектирование программных систем для моделирования в материаловедении электронных компонентов. *Материалы IV Междунар. конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК–2022). 24–26 октября 2022 г., Москва.* М.: МАКС Пресс; 2022. С. 62—68. https://doi.org/10.29003/m3069.MMMSEC-2022/62-68

11. Саенко А.В., Жейц В.В., Билык Г.Е., Малюков С.П. Численное моделирование фотоэлектрических характеристик солнечных элементов на основе гетероперехода TiO_2/Cu_2O. *Материалы IV Междунар. конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК–2022). 24–26 октября 2022 г., Москва.* М.: МАКС Пресс; 2022. С. 102—105. https://doi.org/10.29003/m3082.MMMSEC-2022/102-105

12. Абгарян К.К., Колбин И.С. Применение метода модального подавления для расчета эффективного коэффициента теплопроводности сверхрешеток. *Материалы IV Междунар. конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК–2022). 24–26 октября 2022 г., Москва.* М.: МАКС Пресс; 2022. С. 77—79. https://doi.org/10.29003/m3073.MMMSEC-2022/77-79

13. Хвесюк В.И. Теплофизика для наноэлектроники. *Материалы IV Междунар. конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК–2022). 24–26 октября 2022 г., Москва.* М.: МАКС Пресс; 2022. С. 120—123.

14. Хвесюк В.И., Чжен Ц., Баринов А.А. Длины свободных пробегов фононов в нанопленках. *Материалы IV Междунар. конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК–2022). 24–26 октября 2022 г., Москва.* М.: МАКС Пресс; 2022. С. 124—127. https://doi.org/10.29003/m3088.MMMSEC-2022/120-123

15. Матюшкин И.В., Тельминов О.А., Михайлов А.Н. Учет тепловыделения в малых объемах вещества на примере роста микростержней ZnO: поиск методики моделирования. *Материалы IV Междунар. конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК–2022). 24–26 октября 2022 г., Москва.* М.: МАКС Пресс; 2022. С. 68—71.

16. Настовьяк А.Г., Штеренталь Д.В., Неизвестный И.Г., Щварц Н.Л. Моделирование высокотемпературных отжигов массива нанопроволок GaAs. *Материалы IV Междунар. конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК–2022). 24–26 октября 2022 г., Москва.* М.: МАКС Пресс; 2022. С. 71—74. https://doi.org/10.29003/m3071.MMMSEC-2022/71-74

17. Абгарян К.К., Гаврилов Е.С. Методы создания интеграционной платформы для решения задач материаловедения. *Материалы IV Междунар. конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК–2022). 24–26 октября 2022 г., Москва.* М.: МАКС Пресс; 2022. С. 18—23. https://doi.org/10.29003/m3059.MMMSEC-2022/18-23

18. Волович К.И., Денисов С.А., Кондрашев В.А. Архитектура сети обработки данных для параллельных вычислений в высокопроизводительном комплексе для задач материаловедения. *Материалы IV Междунар. конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК–2022). 24–26 октября 2022 г., Москва.* М.: МАКС Пресс; 2022. С. 30—36. https://doi.org/10.29003/m3061.MMMSEC-2022/30-36

19. Киселева Н.Н., Дударев В.А., Сенько О.В., Докукин А.А., Кузнецова Ю.О. Применение методов машинно-

го обучения для конструирования новых неорганических соединений, перспективных для электроники. *Материалы IV Междунар. конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (ММЭК–2022). 24–26 октября 2022 г., Москва.* М.: МАКС Пресс; 2022. С. 36—39. https://doi.org/10.29003/m3062.MMMSEC-2022/36-39

20. Suchaneck G., Kalanda N., Yarmolich M., Artiukh E., Gerlach G., Sobolev N. Magnetization of magnetically inhomogeneous Sr_2FeMoO_6 nanoparticles. *Материалы IV Междунар. конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (ММЭК–2022). 24–26 октября 2022 г., Москва.* М.: МАКС Пресс; 2022. С. 58. https://doi.org/10.29003/m3067.MMMSEC-2022/58-58

21. Волович К.И., Денисов С.А., Кондрашев В.А. Управление вычислительными заданиями высокопроизводительного вычислительного комплекса при решении задач материаловедения. *Материалы IV Междунар. конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (ММЭК–2022). 24–26 октября 2022 г., Москва.* М.: МАКС Пресс; 2022. С. 24—29. https://doi.org/10.29003/m3061.MMMSEC-2022/24-29

22. Изотова Г.С. Отчет о результатах экспертно–аналитического мероприятия «Определение основных причин, сдерживающих научное развитие в Российской Федерации: оценка научной инфраструктуры, достаточность мотивационных мер, обеспечение привлекательности работы ведущих ученых». Счетная палата Российской Федерации. 2020. 53 с. http://fgosvo.ru/uploadfiles/Work_materials_disscusion/sp.pdf (дата обращения: 06.10.2021).

23. Large research infrastructures development in China: A Roadmap to 2050. Chen H. (ed.). Berlin, Heidelberg: Science Press Beijing and Springer–Verlag; 2010. 148 p.

24. Large research infrastructures: Report on roadmapping of large research infrastructures (2008). OECD Global Science Forum. 2010 http://www.oecd.org/sti/inno/47057832.pdf (дата обращения: 06.10.2021).

25. Report on establishing large international research infrastructures: issues and options. OECD Global Science Forum. 2010. http://www.oecd.org/sti/inno/47057832.pdf (дата обращения: 06.10.2021).

26. Zatsarinnyy A.A. The experience of the FRC CSC RAS in creating a digital platform for scientific research in the cause of digital transformation. *2020 Inter. scient. and techn. conf. "Modern Computer Network Technologies" (MoNeTeC). 27–29 October 2020, Moscow.* IEEE; 2020. P. 1—8. https://doi.org/10.1109/MoNeTeC49726.2020.9258073

References

1. Vlasova V.V., Gokhberg L.M., Ditkovskii K.A., Kotsemir M.N., Kuznetsova I.A., Martynova S.V., Nesterenko A.V., Polyakova V.V., Ratai T.V., Repina A.A., Rosovetskaya L.A., Sagieva G.S., Strel'tsova E.A., Tarasenko I.I., Fridlyanova S.Yu., Yudin I.B., Varzanovtseva I.O., Gokhberg L.M., Kuz'minov Ya.I. The science. Technologies. Innovation: 2023. Moscow: NIU VShE; 2023. 102 p. (In Russ.). https://doi.org/10.17323/978-5-7598-2742-9

2. Abgaryan K.K. Multiscale modeling in problems of structural materials science. Moscow: MAKS Press; 2017. 284 p. (In Russ.)

3. Zatsarinnyy A.A., Abgaryan K.K. Synthesis of new materials as a priority direction of innovative development of the industry. *Proceed. of the IV Inter. conf. "Mathematical modeling in materials science of electronic component" (ICM3SEC–2022). October 24–26, 2022, Moscow.* Moscow: MAKS Press; 2022. P. 8—14. (In Russ.). https://doi.org/10.29003/m3057.MMMSEC–2022/8–14

4. Abgaryan K.K., Osipova V.A. Application of decision support methods for the multicriterial selection of multiscale compositions. *Informatika i ee primeneniya = Informatics and Applications.* 2019; 13(2): 47—53. (In Russ.). https://doi.org/10.14357/19922264190207

5. Zatsarinnyy A.A., Abgaryan K.K. Factors that determine the relevance of creating a research infrastructure for the synthesis of new materials as part of the implementation of the priorities of scientific and technological development of Russia. *Proceed. of the I Inter.* conf. *"Mathematical modeling in materials science of electronic component" (*MM*MSEC–2019). October 21–23, 2019, Moscow.* Moscow: MAKS Press; 2019. P. 8—11. (In Russ.)

6. Zatsarinny A.A., Abgaryan K.K. Factors determining the relevance of creating a research infrastructure for synthesizing new materials in implementing the priorities of scientific and technological development of Russia. *Russian Microelectronics.* 2020; 49(8): 600—602. https://doi.org/10.1134/S1063739720080132

7. Zatsarinnyy A.A., Abgaryan K.K. Current problems of creation of research infrastructure for synthesis of new materials in the framework of the digital transformation of society. *Proceed. of the II Inter. conf. "Mathematical modeling in materials science of electronic component" (*MM*MSEC–2020). October 19–20, 2020, Moscow.* Moscow: MAKS Press; 2020. P. 3—13. (In Russ.). https://doi.org/10.29003/m1507.MMMSEC-2020/8-13

8. Telminov O.A., Gornev E.S. Analysis of the element base and circuit design for neuromorphic computing on memristor crossbars. *Proceed. of the IV Inter. conf. "Mathematical modeling in materials science of electronic component" (ICM3SEC–2022). October 24–26, 2022, Moscow.* Moscow: MAKS Press; 2022. P. 156—159. (In Russ.). https://doi.org/10.29003/m3098.MMMSEC-2022/156-159

9. Morozov A.Y., Abgaryan K.K., Reviznikov D.L. Simulation modeling of an analogue spiking neural network based on memristic elements using parallel technologies. *Proceed. of the IV Inter. conf. "Mathematical modeling in materials science of electronic component" (ICM-3SEC–2022). October 24–26, 2022, Moscow.* Moscow: MAKS Press; 2022. P. 150—156. (In Russ.). https://doi.org/10.29003/m3097.MMMSEC-2022/150-156

10. Abgaryan K.K. Designing software systems for modeling in the material science of electronic components. *Proceed. of the IV Inter. conf. "Mathematical modeling in materials science of electronic component" (ICM-3SEC–2022). October 24–26, 2022, Moscow.* Moscow: MAKS Press; 2022. P. 62—68. (In Russ.). https://doi.org/10.29003/m3069.MMMSEC-2022/62-68

11. Saenko A.V., Zheits V.V., Bilyk G.E., Malyukov S.P. Numerical modeling of photovoltaic characteristics of solar cells based on a TiO_2/Cu_2O heterojunction. *Proceed. of the IV Inter. conf. "Mathematical modeling in materials science of electronic component" (ICM3SEC–2022). October 24–26, 2022, Moscow.* Moscow: MAKS Press; 2022. P. 102—105. (In Russ.). https://doi.org/10.29003/m3082.MMMSEC-2022/102-105

12. Abgaryan K.K., Kolbin I.S. Application of the modal suppression method to calculate the effective thermal conductivity coefficient of superlattices. *Proceed. of*

the IV Inter. conf. "Mathematical modeling in materials science of electronic component" (ICM3SEC–2022). October 24–26, 2022, Moscow. Moscow: MAKS Press; 2022. P. 77—79. (In Russ.). https://doi.org/10.29003/m3073.MMMSEC-2022/77-79

13. Khvesyuk V.I. Thermal physics for nano electronics. *Proceed. of the IV Inter. conf. "Mathematical modeling in materials science of electronic component" (ICM-3SEC–2022). October 24–26, 2022, Moscow.* Moscow: MAKS Press; 2022. P. 120—123. (In Russ.)

14. Khvesyuk V.I., Zheng J., Barinov A.A. Mean free paths of phonons in nanofilms. *Proceed. of the IV Inter. conf. "Mathematical modeling in materials science of electronic component" (ICM3SEC–2022). October 24–26, 2022, Moscow.* Moscow: MAKS Press; 2022. P. 124—127. (In Russ.). https://doi.org/10.29003/m3088.MMMSEC-2022/120-123

15. Matyushkin I.V., Telminov O.A., Mikhaylov A.N. Accounting for heat release in small volumesof matter on the example of the growth of ZnO micro–rods: search for a modeling technique. *Proceed. of the IV Inter. conf. "Mathematical modeling in materials science of electronic component" (ICM3SEC–2022). October 24–26, 2022, Moscow.* Moscow: MAKS Press; 2022. P. 68—71. (In Russ.). https://doi.org/10.29003/m3070.MMMSEC-2022/68-71

16. Nastovjak A.G., Shterental D.V., Neizvestny I.G., Shwartz N.L. simulation of high–temperature annealing of GaAs nanowire array. *Proceed. of the IV Inter. conf. "Mathematical modeling in materials science of electronic component" (ICM3SEC–2022). October 24–26, 2022, Moscow.* Moscow: MAKS Press; 2022. P. 71—74. (In Russ.). https://doi.org/10.29003/m3071.MMMSEC-2022/71-74

17. Abgaryan K.K., Gavrilov E.S. Methods of creating an integration platform for solving material science problems. *Proceed. of the IV Inter. conf. "Mathematical modeling in materials science of electronic component" (ICM-3SEC–2022). October 24–26, 2022, Moscow.* Moscow: MAKS Press; 2022. P. 18—23. (In Russ.). https://doi.org/10.29003/m3059.MMMSEC-2022/18-23

18. Volovich K., Denisov S., Kondrashev V. Data processing network architecture for parallel computing in a high–performance complex for materials science problems. *Proceed. of the IV Inter. conf. "Mathematical modeling in materials science of electronic component" (ICM-3SEC–2022). October 24–26, 2022, Moscow.* Moscow: MAKS Press; 2022. P. 30—36. (In Russ.). https://doi.org/10.29003/m3061.MMMSEC-2022/30-36

19. Kiselyova N.N., Dudarev V.A., Senko O.V., Dokukin A.A., Kuznetsova Yu.O. Application of machine learning methods for the design of new inorganic compounds promising for electronics. *Proceed. of the IV Inter. conf. "Mathematical modeling in materials science of electronic component" (ICM3SEC–2022). October 24–26, 2022, Moscow.* Moscow: MAKS Press; 2022. P. 36—39. (In Russ.). https://doi.org/10.29003/m3062.MMMSEC–2022/36–39

20. Suchaneck G., Kalanda N., Yarmolich M., Artiukh E., Gerlach G., Sobolev N. Magnetization of magnetically inhomogeneous $S_{r2}FeMoO_6$ nanoparticles. *Proceed. of the IV Inter. conf. "Mathematical modeling in materials science of electronic component" (ICM3SEC–2022). October 24–26, 2022, Moscow.* Moscow: MAKS Press; 2022. P. 58. (In Russ.). https://doi.org/10.29003/m3067.MMMSEC-2022/58-58

21. Volovich K., Denisov S., Kondrashev V. Data processing network architecture for parallel computing in a high–performance complex for materials science problems. *Proceed. of the IV Inter. conf. "Mathematical modeling in materials science of electronic component" (ICM-3SEC–2022). October 24–26, 2022, Moscow.* Moscow: MAKS Press; 2022. P. 24—29. (In Russ.). https://doi.org/10.29003/m3061.MMMSEC-2022/24-29

22. Izotova G.S. Report on the results of the expert analytical event "Identification of the main reasons constraining scientific development in the Russian Federation: assessment of scientific infrastructure, sufficiency of motivational measures, ensuring the attractiveness of the work of leading scientists". Accounts Chamber of the Russian Federation. 2020. 53 p. (In Russ.). http://fgosvo.ru/uploadfiles/Work_materials_disscusion/sp.pdf (accessed on 06.10.2021).

23. Chen H. (ed.). Large research infrastructures development in China: A Roadmap to 2050. Berlin, Heidelberg: Science Press Beijing and Springer–Verlag; 2010. 148 p.

24. Large research infrastructures: Report on roadmapping of large research infrastructures (2008). OECD Global Science Forum. 2010. http://www.oecd.org/sti/inno/47057832.pdf (accessed on 06.10.2021).

25. Report on establishing large international research infrastructures: issues and options. OECD Global Science Forum. 2010. http://www.oecd.org/sti/inno/47057832.pdf (accessed on 06.10.2021).

26. Zatsarinnyy A.A. The experience of the FRC CSC RAS in creating a digital platform for scientific research in the cause of digital transformation. *2020 Inter. scient. and techn. conf. "Modern Computer Network Technologies" (MoNeTeC). October 27–29, 2020, Moscow.* IEEE; 2020. P. 1—8. https://doi.org/10.1109/MoNeTeC49726.2020.9258073

Информация об авторах / Information about the authors

Зацаринный Александр Алексеевич — доктор техн. наук, главный научный сотрудник, руководитель отделения, Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук, ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Российская Федерация; https://orcid.org/0000-0002-8872-2774; e–mail: azatsarinny@frccsc.ru

Alexander A. Zatsarinnyy — Dr. Sci. (Eng.), Chief Researcher, Deputy Director, Federal Research Centre "Information and Control" of the Russian Academy of Sciences, 44–2 Vavilov Str., Moscow 119333, Russian Federation; https://orcid.org/0000-0002-8872-2774; e–mail: azatsarinny@frccsc.ru

Абгарян Каринэ Карленовна — доктор физ.–мат. наук, главный научный сотрудник, зав. отделом, Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук, ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Российская Федерация; https://orcid.org/0000-0002-0059-0712; e–mail: kristal83@mail.ru

Karine K. Abgaryan — Dr. Sci. (Phys.–Math.), Chief Researcher, Head of the Department, Federal Research Centre "Information and Control" of the Russian Academy of Sciences, 44–2 Vavilov Str., Moscow 119333, Russian Federation; https://orcid.org/0000-0002-0059-0712; e–mail: kristal83@mail.ru

Поступила в редакцию 07.10.2023; поступила после доработки 27.10.2023; принята к публикации 06.11.2023
Received 7 October 2023; Revised 27 October 2023; Accepted 6 November 2023