

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ И МАТЕРИАЛОВ

SIMULATION OF PROCESSES AND MATERIALS

*Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2014. Т. 17, № 3. С. 189–193.  
ISSN 1609–3577. DOI: 10.17073/1609–3577–2014–3–189–193*

УДК 621.315.592:004.94

Рассмотрен объектно–реляционный подход к созданию базы данных, предназначенной для информационной поддержки многомасштабной схемы расчета многослойной полупроводниковой наноструктуры (МПНС). В разработанной ранее схеме расчета МПНС для определения свойств всей структуры использовано иерархическое представление расчетных данных, полученных с помощью различных вычислительных модулей по каждому слою рассматриваемой МПНС в отдельности. В отличие от известных материаловедческих баз данных, которые служат только для хранения и поиска информации по существующим структурам и их свойствам, представленная база данных — центральный блок схемы расчета МПНС, с помощью которого осуществляется обмен данными между различными расчетными модулями. Описан современный подход к проектированию материаловедческих баз данных, а именно: представлена реляционная модель хранения данных, которая применяется для решения ресурсоемких и разномасштабных задач. Использована объектно–реляционная архитектура планировщика, которая позволяет обеспечить высокоскоростной обмен данными между различными расчетными модулями схемы расчета МПНС. Представлена реализация простого и удобного пользовательского интерфейса, позволяющего осуществлять выборку данных, согласно заданному критерию, а также формировать файлы, содержащие входные данные для вычислительных модулей. Предложенные подходы могут быть применены в различных отраслях науки, включая авиационную и ракетно–космическую отрасли, в частности в системах управления инженерными (материаловедческими) данными.

**Ключевые слова:** база данных, объектно–реляционная архитектура, многослойная полупроводниковая наноструктура, многомасштабная схема расчета.

## ОБЪЕКТНО–РЕЛЯЦИОННАЯ АРХИТЕКТУРА ИНФОРМАЦИОННОЙ ПОДДЕРЖКИ МНОГОМАСШТАБНОЙ СХЕМЫ РАСЧЕТА МНОГОСЛОЙНОЙ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ НАНОСТРУКТУРЫ

© 2014 г. К. К. Абгарян, П. А. Сеченых,  
И. А. Супрядкина

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Вычислительный центр РАН им. А. А. Дородницына,  
ул. Вавилова, д. 40, Москва, 119333, Россия*

### Введение

Применение имитационного моделирования для разработки новых технологий по получению многослойных полупроводниковых наноструктур с заданными свойствами в настоящее время является актуальным.

Существует широкий спектр материаловедческих баз данных, однако все они рассматривают проблему с какой–то одной точки зрения. Отдельно можно выделить несколько групп.

1. Базы данных по физическим свойствам различных материалов.

Эти базы содержат информацию о различных физических свойствах веществ, однако, в большинстве своем, не хранят данных о кристаллической структуре соединения. К таким базам относятся, например: Chemical Abstracts Service, Cambridge Scientific Abstracts METADEX, MIT Material Properties Database [1], база данных по полупроводникам ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН [2].

2. Кристаллографические базы данных.

Базы данных этой группы включают в себя информацию о строении довольно большого количества химических соеди-

**Абгарян Каринэ Карленовна**<sup>1</sup> — кандидат физ.–мат. наук, доцент Московского авиационного института (национального исследовательского университета), зав. сектором ВЦ РАН им. А. А. Дородницына, e-mail: kristal83@mail.ru; **Сеченых Полина Алексеевна**<sup>1</sup> — студент Московского авиационного института (национального исследовательского университета), инженер–исследователь ВЦ РАН им. А. А. Дородницына, e-mail: p–sechenyh@mail.ru; **Супрядкина Ирина Анатольевна**<sup>1</sup> — аспирантка Физического факультета МГУ, младший научный сотрудник ВЦ РАН им. А. А. Дородницына, e-mail: irinasupriadkina@mail.ru.

нений, однако содержат мало информации о требуемых физических свойствах. Это такие базы как: Crystallography Open Database, Inorganic Crystal Structure Data, NIST Structural Database.

3. Базы данных, содержащие научные статьи по материаловедению.

Достоинством таких баз данных является большой объем разнообразной информации о различных свойствах веществ. К недостаткам можно отнести следующие: данные зачастую бывают плохо структурированы, что существенно осложняет поиск и дальнейшую работу с ними. Пример такой базы данных: Ulrich's Periodical Directory.

Цель работы — создание программного обеспечения, позволяющего осуществлять информационную поддержку вычислительных экспериментов по предсказательному моделированию новых многослойных полупроводниковых наноструктур с заданными параметрами и прогнозируемыми свойствами.

### Особенности архитектуры информационной поддержки для расчета многослойной полупроводниковой наноструктуры

Многослойная полупроводниковая наноструктура (МПНС) — выращенная на подложке неоднородная структура, состоящая из различных полупроводниковых слоев, имеющих определенную толщину (измеряется в НМ), химический состав и в общем случае отличающихся шириной запрещенной зоны и параметрами кристаллической структуры. При получении таких структур между двумя различными слоями формируется гетеропереход, на котором возможна повышенная концентрация носителей заряда. Следуя иерархическому представлению многослойных полупроводниковых наноструктур, предложенному в работе [3], в МПНС выделяют:

- подложку — кристаллическую основу, на которую наносят полупроводниковые слои;
- кристаллический массив полупроводника — слой с определенным химическим составом и кристаллической структурой;
- интерфейсы — границы раздела слоев;
- примыкающие к интерфейсу приповерхностные и надповерхностные кристаллические массивы (приповерхностные и надповерхностные слои, состоящие из 1—3 атомарных слоев).

Созданная база данных (БД) является составной частью многомасштабной схемы расчета (МСРПН) структуры и свойств МПНС, представленной в работе [3]. В эту схему также входят блоки, базирующиеся на статической и динамической модели твердого тела. Блок, состоящий из программных модулей, которые опираются на статическую модель, используется для теоретических расчетов равновесных свойств полупроводниковых кристаллических структур и МПНС на их основе. В него входят различные программные

модули. Так, программный модуль по плотной упаковке монокристаллов, построенный на базе модели ионно-атомных радиусов [4, 5], позволяет определять метрические параметры, в том числе координаты базисных атомов и значения параметров элементарной ячейки для отдельных кристаллических слоев МПНС, основываясь на кристаллохимической информации. Программный модуль, базирующийся на квантово-механических расчетах, с помощью которых моделируют атомно-кристаллическую и электронную структуру, а также отдельные свойства МПНС, включает в себя методы первопринципной молекулярной динамики в рамках теории функционала электронной плотности с использованием базиса плоских волн и PAW-потенциалов (программные комплексы VASP [6] и PWscf [7])[8, 9]. В динамический блок входят программные модули, позволяющие моделировать изменения структуры МПНС во времени, в том числе изучать начальные этапы роста МПНС, рассматривать структуры с дефектами, в том числе протяженными, и т. д. В этих расчетных модулях применяют методы молекулярной динамики (с подбором параметров потенциалов межатомного взаимодействия на БД первопринципных расчетов), кинетический метод Монте-Карло и др. В разработанной БД хранится как информация о расчетных и экспериментальных данных по кристаллической структуре и химическому составу по отдельным слоям МПНС, так и по всей структуре в целом. Кроме того, она обеспечивает хранение промежуточных результатов расчетов и передачу данных между расчетными модулями. В дальнейшем в БД планируется хранить результаты расчетов отдельных физических свойств, характерных для полупроводниковых материалов, и данные по способам получения конкретных полупроводниковых наноструктур.

На рис. 1 приведены примеры иерархического представления для однослойной полупроводниковой наноструктуры GaN/Si (InN/Si) и для многослойной полупроводниковой наноструктуры GaN/AlGaN/AlN на подложке Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Данные по каждому выделенному слою хранятся в разработанной БД отдельно. Например, в БД хранится информация по кристаллическому массиву Si, приповерхностному слою Si, интерфейсу, надповерхностному слою GaN и кристаллическому массиву GaN (см. рис. 1, а). Аналогичный способ хранения информации используется для структуры GaN/AlGaN/AlN/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, представленной на рис. 1, б.

Планировщик на основе описаний операций с данными и спецификаций информационных потоков должен обеспечивать взаимодействие расчетных модулей многомасштабной схемы расчета (входные данные одного модуля — выходные данные другого) [3].

При создании МСРПН использовали иерархическую последовательность построения вычис-

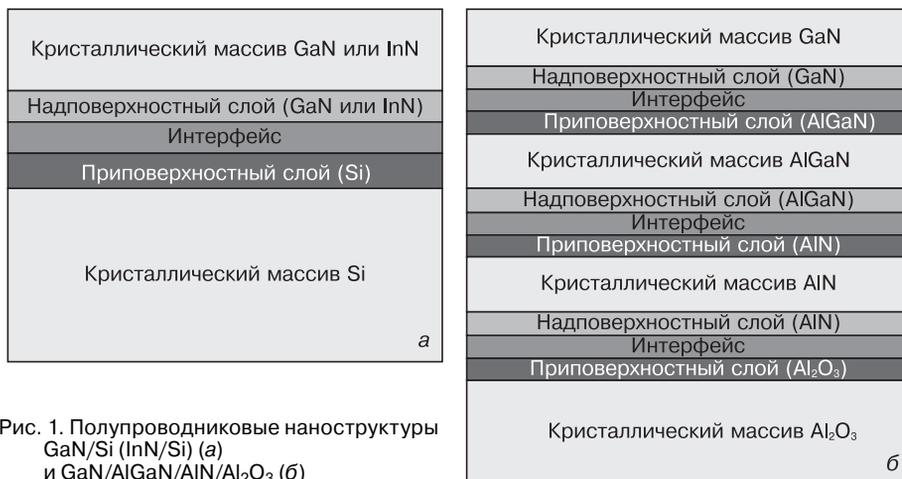


Рис. 1. Полупроводниковые наноструктуры GaN/Si (InN/Si) (а) и GaN/AlGaN/AlN/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (б)

лительных алгоритмов. МСРПН состоит из двух основных блоков, каждый из которых соответствует стационарной и динамической модели, а также соответствующей схеме базы данных. Блоки МСРПН содержат различные расчетные модули. Каждый такой модуль решает определенные задачи, и может быть рассмотрен как отдельная программа с определенной функциональностью. При разработке информационной поддержки применялся принцип последовательного иерархического представления и хранения данных во взаимосвязи структура — свойство на различных уровнях структурной иерархии. Для конкретной МПНС собираются исходные и расчетные данные по кристаллическому массиву подложки, по каждому приповерхностному и надповерхностному слою, а также по интерфейсам отдельно в виде таблиц. Затем полученные данные объединяются и ставятся в соответствие данным, известным из экспериментов, или рассчитанным с помощью МСРПН макросвойствам многослойной полупроводниковой наноструктуры в целом.

В ходе проведенных работ была построена реляционная модель хранения данных [10], а также разработана объектно-реляционная архитектура планировщика. На рис. 2 представлена спроектированная схема БД.

Согласно данной схеме, каждому монослою (блок «Кристаллохимическая формула») ставятся в соответствие характеристики, полученные при помощи различных расчетных модулей (отношение «многие-к-одному»), его химический состав (отношение «один-ко-многим») и геометрия соединения (отношение «многие-к-одному»).

Химическая формула соединения (блок «Химический

состав») и элементы таблицы Менделеева связаны отношением «многие-ко-многим». Для его реализации использована ассоциативная сущность. Химические элементы и типы радиусов также связаны соотношением «многие-ко-многим» (поскольку каждому химическому элементу может соответствовать набор радиусов для различных типов связи). Для реализации данного соотношения вводится ассоциативная сущность, которая включает в себя значения радиусов, а также ссылку на

таблицу, содержащую дополнительную информацию — заряд и координационное число, соответствующие данному атому.

Федоровская группа (блок «Кристаллографическая информация») принадлежит к определенной кристаллической системе (отношение «многие-к-одному»). Для каждой федоровской группы определен набор позиций Уайкова, ссылающихся на нее при помощи внешнего ключа (отношение «один-ко-многим»). Позиция Уайкова принадлежит к определенному типу, который, в свою очередь, определяется таблицей типов позиций Уайкова. Условие принадлежности атома какой-либо позиции Уайкова означает, что центр атома находится в определенном объеме, лежит в плоскости или на прямой, и т. д. Другими словами, это условие ограничивает область изменения координат атома.

Элементарная ячейка (блок «Структурные характеристики элементарной ячейки»), соответствующая рассматриваемому монослою, представлена как собственными характеристиками, так и набором составляющих ее атомов, а также связей между ними (отношение «один-ко-многим»). Атомы и связи



Рис. 2. Схема базы данных

ссылаются на содержащую их ячейку с помощью внешнего ключа. Кроме того, связь ссылается на пару атомов, которые она связывает между собой (два отношения «один–к–одному»).

Рассматриваемый монослой определяется химическим составом (формулой) и кристаллической структурой. Также при задании химической формулы существенным является число компонент и тип химической связи (ионная, ковалентная и пр.).

Геометрия соединения определяется федоровской группой (которая принадлежит определенной кристаллической системе). Каждому химическому элементу, входящему в данное соединение, ставится в соответствие атомный радиус (в зависимости от типа связи в соединении) и позиция Уайкова (в зависимости от выбранной федоровской группы, с учетом кратности конкретного атома, входящего в химическую формулу). Причем для ионного типа связи при выборе радиуса также имеют значение координационное число и заряд атома.

Монослою с заданными химической формулой и кристаллической структурой ставятся в соответствие результаты расчетов, которые могут быть получены при помощи различных расчетных модулей (модуль плотной упаковки, модуль первопринципного расчета, модуль подгонки (фиттинга) потенциала, молекулярно–динамический модуль).

Результатами являются как физические свойства (плотность упаковки, полная энергия, распределение электронных плотностей и т. д.), так и структурные характеристики (постоянные решетки, углы, координаты атомов). При этом данные, полученные в результате работы одного модуля, могут быть использованы как входные для другого.

В приложении, реализующем функции планировщика, было построено отображение реляционной модели в объектную и реализован интерфейс пользователя (рис. 3), позволяющий осуществлять выборку данных, согласно заданному критерию, а также сохранять результат выполнения запроса в текстовый файл для последующего импорта в цепочку расчетных модулей.

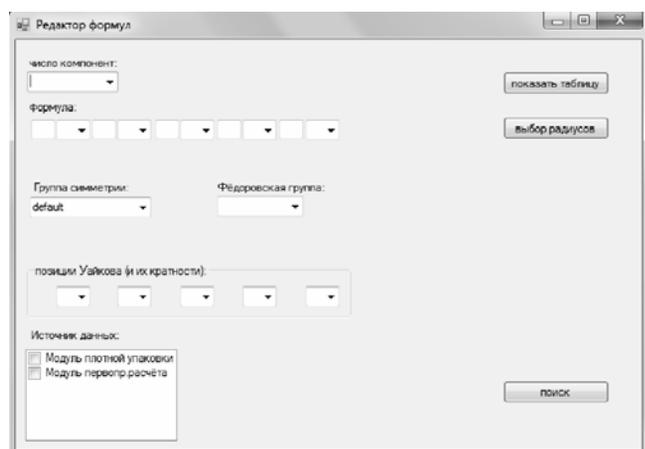


Рис. 3. Пользовательский интерфейс информационной поддержки

Реализация объектно–реляционного отображения (ORM) базировалась на технологии NHibernate [11, 12]. Ее существенной особенностью является абстрактная инвариантная модель представления данных, которая может быть легко адаптирована в слой пользовательского интерфейса (механизм *mapping*) и среду СУБД (механизм *connection*). В процессе выполнения данной работы для задания отображений использовали код на языке C# и соответствующую библиотеку Fluent NHibernate.

Покажем, например, как планировщик формирует в БД представления и рабочие файлы импорта для расчетных программных модулей системы МСРПН. Пользователь, в удобном графическом интерфейсе (см. рис. 3), задает число компонент, из которых состоит рассматриваемая химическая формула, вводит наименование химических элементов (базисных атомов), входящих в нее, и их коэффициенты в химической формуле. В соответствии с тем, какой тип связи имеет место в материале с рассматриваемой химической формулой (ионной, ковалентной и т. д.), пользователь имеет возможность выбрать значения радиусов базисных атомов с учетом значений соответствующих координационных чисел [4]. Далее задается геометрия рассматриваемой структуры. Из списка всех возможных федоровских групп симметрии и соответствующих им наборов возможных позиций Уайкова, которые определяют границы значений координат базисных атомов, входящих в химическую формулу, пользователь выбирает конкретное геометрическое представление заданной химической формулы. Итогом работы этого блока является файл с данными о химическом составе, значениях радиусов атомов химических элементов, из которых состоит рассматриваемое вещество. Таким образом, с помощью БД формируются представления и рабочие файлы для расчетных модулей, которые при необходимости могут быть отредактированы пользователем. Результаты работы различных расчетных модулей МСРПН также сохраняются в специализированной подсистеме БД.

При создании информационной поддержки для хранения и манипулирования свойствами многослойной полупроводниковой наноструктуры использовали следующие программные средства и технологии:

- Microsoft SQL Server 2008 — целевая СУБД;
- NHibernate — ORM–библиотека;
- NET Framework 3.5 — программная платформа;
- Microsoft Visual Studio 9.0 — среда разработки (язык программирования — C#).

### Заключение

Классифицированы и структурированы соответствующие данные предметной области и собраны функциональные требования для реализации проек-

та. Разработана информационная поддержка вычислительного эксперимента, включающая схему БД, ограничения целостности, правила агрегирования данных и прототип пользовательского интерфейса. Кроме того, построено отображение реляционной модели в объектную, а также реализован планировщик, являющийся поставщиком данных в приложение. Разработанная многомасштабная схема расчета апробирована на компьютерных моделях процессов получения перспективных многослойных гетероструктур и для оценки их базовых параметров.

#### Библиографический список

1. MIT Material Properties Database: <http://www.mit.edu/~6.777/matprops/>
2. База данных по полупроводникам ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН: <http://www.matprop.ru>
3. Абгарян, К. К. Применение оптимизационных методов для моделирования многослойных полупроводниковых наносистем / К. К. Абгарян // Тр. Института системного анализа Российской академии наук. Динамика неоднородных систем. – 2010. – Т. 53, № 3. – С. 6–9.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты №13-08-01335 А, № 13-01-12110 ОФИ-М).

4. Абгарян, К. К. Компьютерное моделирование устойчивых структур кристаллических материалов / К. К. Абгарян, В. Р. Хачатуров // Журнал вычисл. математики и математ. физики – 2009. – Т. 49, № 8. – С. 1517–1530.
5. Abgaryan, K. K. Application of optimization methods for modeling of semiconductor film nanostructures / K. K. Abgaryan // Internat. conf. «Optimization and applications» (Optima-2011). – Petrovac (Montenegro), 2011. – P. 3–4.
6. Программный комплекс VASP: <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/>
7. Программный комплекс PWscf <http://www.pwscf.org/>
8. Blochl, P. E. Projector augmented-wave method / P. E. Blochl // Phys. Rev. B. – 1994. – V. 50. – P. 17953.
9. Kresse, G. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set / G. Kresse, J. Furthmüller // Comput. Mat. Sci. – 1996. – V. 6. – P. 15.
10. Date, C. J. Introduction to database systems / C. J. Date. – Addison-Wesley, 2005. – 1024 p.
11. Dentler, S. J. NHibernate 3.0 Cookbook / S. J. Dentler. – Packt Publishing, 2010. – 368 p.
12. Schenker, G. N. NHibernate 3 Beginner's Guide / G. N. Schenker, A. Cure – Packt Publishing, 2011. – 328 p.
13. Хьюи, Дж. Неорганическая химия. Строение вещества и реакционная способность / Дж. Хьюи. – М.: Изд-во Химия, 1986.

Статья поступила в редакцию 04 декабря 2013 г.

ISSN 1609–3577 *Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2014, vol. 17, no. 3, pp. 189–193.

### Object-Relational Architecture of Information Support of the Multi-Circuit Calculation Multilayer Semiconductor Nanostructures

Karine Karlenovna Abgaryan<sup>1</sup> — Cand. Sci. (Phys.-Math.), Associate Professor of Moscow Aviation Institute (National Research University), Head of the Section at the Dorodnitsyn Computing Center of RAN, (kristal83@mail.ru); Polina Alekseevna Sechenykh<sup>1</sup> — Student of Moscow Aviation Institute (National Research University), Research Engineer at the Dorodnitsyn Computing Center of RAN (p-sechenyh@mail.ru); Irina Anatolevna Supriadkina<sup>1</sup> — Graduate Student the Faculty of Physics, Moscow State University, Research Associate at the Dorodnitsyn Computing Center of RAN (irinasupriadkina@mail.ru)

<sup>1</sup>Institution of Russian Academy of Sciences  
Dorodnitsyn Computing Centre of RAS,  
40 Vavilov Str., Moscow 1 19333, Russia

**Abstract.** The article examines the object-relational approach to the creation of a database, designed to provide informational support to the multiscale computational scheme of multilayer semiconductor nanostructures. The MSNS computational scheme developed earlier by our group uses hierarchic representation of computational data obtained by various computational modules. Each layer of MSNS is treated separately. In contrast to well-known materials databases, which serve for storing and retrieving of information on existing structures and its properties, the database described in this paper is the central unit of MSNS computational scheme. The database provides data interchange between various computational units. In this paper we describe the modern approach to material database design. More specifically, data storage relational model which applies to solving resource-intensive and different-scale problems is proposed. Object-relational scheduler architecture is used in our work. It allows high-speed data exchange between various computational units of MSNS computational scheme. We introduce simple and user-friendly interface allowing criteria-based data retrieving as well as creation of input files for computational modules. These approaches can be applied in various branches of science, including the aviation and space industry, in particular in control systems of engineering (materials science) data.

**Keywords:** database, object-relational architecture, multilayer semiconductor nanostructures, multiscale calculation scheme.

#### References

1. MIT Material Properties Database: <http://www.mit.edu/~6.777/matprops/>
2. Database semiconductors Ioffe Institute RAS: <http://www.matprop.ru>
3. Abgaryan K. K. The use of optimization techniques for modeling multilayer semiconductor nanosystems. *Trudy Instituta sistemnogo analiza Rossijskoj akademii nauk. Dinamika neodnorodnyh sistem*. 2010, vol. 53, no. 3, pp 6–9. (In Russ.)
4. Abgaryan K. K., Khachaturov V. R. Computer simulation of stable structures of crystalline materials. *Zhurnal «Vychislitel'naya matematika i matematicheskaya fizika»*. 2009, vol. 49, no. 8, pp. 1517–1530. (In Russ.)
5. Abgaryan K. K. Application of optimization methods for modeling of semiconductor film nanostructures. *Internat. conf. «Optimization and applications» (Optima-2011)*. Petrovac (Montenegro), 2011, pp. 3–4.
6. The software package VASP: <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/>
7. The software package PWscf: <http://www.pwscf.org/>
8. Blochl P. E. Projector augmented-wave method. *Phys. Rev. B*. 1994, vol. 50, p. 17953.
9. Kresse G., Furthmüller J. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set. *Computer Material Science*. 1996, vol. 6, p. 15.
10. Date Ch. J. *An Introduction to Database Systems*. Addison-Wesley, 2004. 1024 p.
11. Schenker G., Cure A. *NHibernate 3 Beginner's Guide*. Packt Publishing, 2011. 368 p.
12. Dentler J. *NHibernate 3.0 Cookbook*, Packt Publishing, 2010. 328 p.
13. Huheey J. E. *Inorganic Chemistry*. Harper&Row Publishers, 1987. 696 p.

**Acknowledgements.** This work was supported by RFBR (projects No. 13-08-01335 A, No. 13-01-12110 OFI-M).

Received December 4, 2013