

ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ

МАТЕРИАЛЫ ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕХНИКИ

ТОМ 22
4/19

Индекс по каталогам «Пресса России» и «Урал Пресс» 47215



Учредитель:

Федеральное государственное
автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Национальный исследовательский
технологический университет «МИСиС»
(НИТУ «МИСиС»)

*Известия высших учебных заведений.
Материалы электронной техники.
2019. Т. 22, № 4(88).*

Журнал основан в 1998 г.
Издаётся один раз в 3 месяца.

Издатель: Национальный исследовательский
технологический университет «МИСиС»,
119049, г. Москва, Ленинский просп., д. 4.

Почтовый адрес редакции:
119991, г. Москва, Ленинский просп., д. 4, МИСиС.

Тел.: (495) 638–45–31, внутренний 040–68,
e-mail: met.misis@inbox.ru.

Отпечатано в типографии
Издательского дома «МИСиС»,
119049, г. Москва, Ленинский просп., д. 4.
тел.: (499) 236–76–17.

Подписано в печать 23.03.2020.
Формат 60×90/8. Печать офсетная.
Заказ № 11348. Бумага офсетная.
Печ. л. 9,25. Тираж 150. Цена свободная.

Журнал зарегистрирован
в Федеральной службе по надзору в сфере связи,
информационных технологий и массовых ком-
муникаций (ПИ № ФС 77–59522 от 23.10.2014),
предыдущее свидетельство
№ 016108 от 15.05.1997 (Минпечати РФ).

Редактор М. И. Воронова
Корректор А. В. Шемерова
Верстка А. А. Космынина

Главный редактор

ПАРХОМЕНКО ЮРИЙ НИКОЛАЕВИЧ,

д-р физ.-мат. наук, проф. (АО «Гиредмет» ГНЦ РФ, Москва, Россия)

Заместители главного редактора

КИСЕЛЕВ Дмитрий Александрович, канд. физ.-мат. наук,
КОСТИШИН Владимир Григорьевич, д-р физ.-мат. наук, проф.
(НИТУ «МИСиС», Москва, Россия)

Ответственный секретарь редакции

Космынина Арина Александровна

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Акчурина Р. Х., д-р техн. наук, проф. (МИТХТ, Москва, Россия)
Асеев А. Л., акад. РАН (ИФП СО РАН, Новосибирск, Россия)
Барберо А., д-р биологии (Институт ядерных исследований, Мехико, Мексика)
Бдикин И. К., д-р физ.-мат. наук (Университет Авейро, Авейро, Португалия)
Бублик В. Т., д-р физ.-мат. наук, проф. (НИТУ «МИСиС», Москва, Россия)
Васкес Л., проф., д-р физики (Университет Комплутенс, Мадрид, Испания)
Вуль А. Я., д-р физ.-мат. наук, проф. (ФТИ им. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия)
Гуляев Ю. В., акад. РАН (ИРЭ РАН, Москва, Россия)
Двуреченский А. В., проф., член-корр. РАН (ИФП СО РАН, Новосибирск, Россия)
Казанский А. Г., д-р физ.-мат. наук (МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия)
Калошкин С. Д., д-р физ.-мат. наук, проф. (НИТУ «МИСиС», Москва, Россия)
Кобелева С. П., канд. физ.-мат. наук, доц. (НИТУ «МИСиС», Москва, Россия)
Кожитов Л. В., д-р техн. наук, проф. (НИТУ «МИСиС», Москва, Россия)
Козлова Н. С., канд. физ.-мат. наук (НИТУ «МИСиС», Москва, Россия)
Литовченко В. Г., акад. Укр АН (ИФП им. В. Е. Лашкарева НАН Украины, Киев, Украина)
Ломонова Е. Е., д-р техн. наук (ИОФ им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия)
Мансуров З. А., д-р хим. наук, проф. (Институт проблем горения, Алматы, Казахстан)
Маппс Д. Дж., проф. (Университет Плимута, Плимут, Великобритания)
Пенг Х. Х., проф. (Чжэцзянский университет, Ханчжоу, Китай)
Петров А. В., канд. физ.-мат. наук (НПЦ НАНБ по материаловедению, Минск, Беларусь)
Сафаралиев Г. К., проф., член-корр. РАН (ДГУ, Махачкала, Россия)
Соболев Н. А., проф. (Университет Авейро, Авейро, Португалия)
Солнышкин А. В., д-р физ.-мат. наук, проф. (ТГУ, Тверь, Россия)
Табачкова Н. Ю., канд. физ.-мат. наук (ИОФ им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия)
Тодуа П. А., д-р физ.-мат. наук, проф. (ОАО «НИЦПВ», Москва, Россия)
Федотов А. К., проф. (БГУ, Минск, Беларусь)
Хернандо Б., проф. (Университет Овьедо, Овьедо, Испания)
Чаплыгин Ю. А., проф., член-корр. РАН (МИЭТ, Москва, Россия)
Шварцбург А. Б., д-р физ.-мат. наук (ОИВТ РАН, Москва, Россия)
Щербачев К. Д., канд. физ.-мат. наук (XRD Eigenmann GmbH, Шнайттах, Германия)

*Журнал по решению ВАК Минобразования РФ включен в «Перечень периодических
и научно-технических изданий, выпускаемых в Российской Федерации, в которых
рекомендуется публикация основных результатов диссертаций на соискание
ученой степени доктора наук».*

Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedenii. Materialy elektronnoi tekhniki

Materials of Electronics Engineering

Vol. 22

4/19



Founders:

National University of Science
and Technology «MISIS»

**Izvestiya vuzov. Materialy
elektronnoi tekhniki =
Materials of Electronics
Engineering. 2019, vol. 22, no. 4**

*The journal was founded in 1998
and is published once in 3 months.*

Address of correspondence:
National University of Science
and Technology «MISIS»,
4 Leninskiy Prospekt, Moscow 119991, Russia
Tel./fax: +7(495)638–45–31,
e-mail: met.misis@inbox.ru,
<http://met.misis.ru>

The journal
«Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii.
Materialy Elektronnoi Tekhniki =
Materials of Electronics Engineering»
is registered in Federal Service for Supervision
in the Sphere of Mass Communications
(PI number FS 77–59522 of 10.23.2014),
the previous certificate number 016108
from 15.05.1997.

Editor M. I. Voronova
Corrector A. V. Shchemerova

Editor-in-Chief

Yuri N. Parkhomenko, Prof., Dr. Sci. (Phys.–Math.),
Scientific Chief of the State Scientific–Research and Design Institute of Rare–Metal Industry «Giredmet» JSC

Deputy Editor-in-Chief

Dmitry A. Kiselev, PhD, Cand. Sci. (Phys.–Math.),
Department of the Material Science of Semiconductors and Dielectrics at the MISiS

Vladimir G. Kostishin, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof.,
Head of Department of the Technology of Electronic Materials at the MISiS

Assistant Editor

Arina A. Kosmylina

EDITORIAL BOARD

- R. Kh. Akchurin**, Dr. Sci. (Eng.), Prof.,
*Lomonosov Moscow State University
of Fine Chemical Technologies, Moscow, Russia*
- A. L. Aseev**, Academician of the Russian Academy of
Sciences (RAS), *Institute of Semiconductor Physics,
SB RAS, Novosibirsk, Russia*
- I. K. Bdkin**, Dr. Sci. (Phys.–Math.), *Aveiro Institute of
Nanotechnology (AIN), University of Aveiro, Aveiro,
Portugal*
- V. T. Bublik**, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof.,
*National University of Science and Technology
«MISIS», Moscow, Russia*
- Yu. A. Chaplygin**, Corresponding Member of the Russian
Academy of Sciences (RAS), Prof., *National Research
University of Electronic Technology, Moscow, Russia*
- A. V. Dvurechenskii**, Corresponding Member of the
Russian Academy of Sciences (RAS), Prof.,
*Rzhanov Institute of Semiconductor Physics, SB RAS,
Novosibirsk, Russia*
- A. K. Fedotov**, Prof., *Belarusian State University,
Department of Energy Physics, Minsk, Belarus*
- Yu. V. Gulyaev**, Academician of the Russian Academy
of Sciences (RAS), *Kotelnikov Institute of Radio
Engineering and Electronics of RAS, Moscow, Russia*
- A. Heredia-Barbero**, PhD, Dr. (Biol.), *Instituto de
Ciencias Nucleares de la UNAM, Mexico City, Mexico*
- B. Hernando**, Prof., *Universidad de Oviedo, Oviedo, Spain*
- S. D. Kaloshkin**, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof., *National
University of Science and Technology «MISIS»,
Moscow, Russia*
- A. G. Kazanskii**, Dr. Sci. (Phys.–Math.), *Lomonosov
Moscow State University, Moscow, Russia*
- S. P. Kobeleva**, Cand. Sci. (Phys.–Math.), Assoc. Prof.,
*National University of Science and Technology
«MISIS», Moscow, Russia*
- L. V. Kozhitov**, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof., *National
University of Science and Technology «MISIS»,
Moscow, Russia*
- N. S. Kozlova**, Cand. Sci. (Phys.–Math.), *National
University of Science and Technology «MISIS»,
Moscow, Russia*
- V. G. Litovchenko**, Academician of the Ukrainian
Academy of Sciences, *Institute of Semiconductors
Physics, National Academy of Sciences in Ukraine,
Kiev, Ukraine*
- E. E. Lomonova**, Dr. Sci. (Eng.), A.M. Prokhorov General
Physics Institute, *Russian Academy of Sciences,
Moscow, Russia*
- Z. A. Mansurov**, Dr. Sci. (Chim.), Prof., *Al Farabi Kazakh
National University, Institute of Combustion Problems,
Almaty, Kazakhstan*
- D. J. Mapps**, Prof., *University of Plymouth, Plymouth,
United Kingdom*
- H.–X. Peng**, *Zhejiang University, Hangzhou, China*
- A. V. Petrov**, Cand. Sci. (Phys.–Math.), *Scientific Practical
Materials Research Centre of NAS of Belarus, Minsk,
Belarus*
- G. K. Safaraliev**, Corresponding Member
of the Russian Academy of Sciences (RAS), Prof.,
*Dagestan State University, Makhachkala,
Russia*
- K. D. Shcherbachev**, Cand. Sci. (Phys.–Math.),
XRD Eigenmann GmbH, Schnaittach, Germany
- A. B. Shvartsburg**, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof., *Joint Institute
for High Temperatures Russian Academy of Sciences,
Moscow, Russia*
- N. A. Sobolev**, Prof., *Aveiro University, Aveiro, Portugal*
- A. V. Solnyshkin**, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof., *Tver State
University, Tver, Russia*
- N. Yu. Tabachkova**, Cand. Sci. (Phys.–Math.),
*A.M. Prokhorov General Physics Institute, Russian
Academy of Sciences, Moscow, Russia*
- P. A. Todua**, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof., *Research
Center for Surface and Vacuum, Moscow, Russia*
- L. Vazquez**, Ph. D., Prof., *Universidad Complutense
de Madrid, Madrid, Spain*
- A. Ya. Vul'**, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof., *Ioffe Physico–
Technical Institute, Saint Petersburg, Russia*

*In accordance with a resolution of the Higher Attestation Committee at the Ministry of Education of the Russian Federation,
the Journal is included in the «List of Periodical and Scientific and Technical Publications Issued in the Russian Federation
in which the Publication of the Main Results of Dr.Sci. Theses is Recommended».*

Статьи, опубликованные в этом номере, были подготовлены по материалам докладов, представленных на I–й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 21—23 октября 2019 г.

СОДЕРЖАНИЕ

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ ЭЛЕКТРОННЫХ КОМПОНЕНТОВ

Е. Н. Муратова, В. А. Мошников, К. В. Чернякова, И. А. Врублевский Исследование тепловых характеристик нагревательного элемента из алюминия с нанопористым оксидом алюминия.....	241
В. В. Сироткин, Н. А. Тулина Применение численного моделирования в исследовании мемристивных структур на основе оксидов и халькогенидов.....	246
И. В. Матюшкин Нелинейно–динамический подход в анализе неустойчивости параметров мемристора.....	253
К. И. Волович, С. А. Денисов Основные научно–технические проблемы применения гибридных высокопроизводительных вычислительных комплексов в материаловедении	262
П. А. Сеченых Математическое моделирование перспективных структур оксидов металлов	268
А. Ю. Морозов, Д. Л. Ревизников, К. К. Абгарян Вопросы реализации нейросетевых алгоритмов на мемристорных кроссбарах	272
Н. Н. Балан, В. В. Иванов, А. В. Кузовков, Е. В. Соколова, Е. С. Шамин Основные подходы к моделированию формирования фоторезистивной маски в вычислительной литографии	279
О. А. Ткаченко, Д. Г. Бакшеев, В. А. Ткаченко Осцилляции Ааронова—Бома и распределения равновесных токов в открытой квантовой точке и кольцевом интерферометре	290
ОБЩИЕ ВОПРОСЫ	
А. А. Зацаринный, К. К. Абгарян Факторы, определяющие актуальность создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках реализации приоритетов научно–технологического развития России.....	298
А. А. Зацаринный, В. А. Кондрашев, А. А. Сорокин, С. А. Денисов Методы консолидации научных сервисов.....	302
Список статей, опубликованных в 2019 году	308
К сведению авторов	310

CONTENTS

MATHEMATICAL MODELING IN MATERIALS SCIENCE OF ELECTRONIC COMPONENTS

E. N. Muratova, V. A. Moshnikov, K. V. Chernyakova, I. A. Vrublevsky

Investigation of the thermal characteristics of a heating element based
on aluminum with nanoporous alumina 241—245

V. V. Sirotkin, N. A. Tulina

Application of numerical simulation in investigation of memristor structures
based on oxides and chalcogenides 246—252

I. V. Matyushkin

Nonlinear dynamic approach to the analysis of memristor parameters instability 253—261

K. I. Volovich, S. A. Denisov

The main scientific and technical problems of using hybrid HPC clusters in materials science..... 262—267

P. A. Sechenykh

Mathematical modeling of perspective structures of metal oxides 268—271

A. Yu. Morozov, D. L. Reviznikov, K. K. Abgaryan

Issues of implementing neural network algorithms on memristor crossbars 272—278

N. N. Balan, V. V. Ivanov, A. K. Kuzovkov, E. V. Sokolova, E. S. Shamin

Basic approaches to photoresist mask formation modeling in computational lithography 279—289

O. A. Tkachenko, D. G. Baksheev, V. A. Tkachenko

Aharonov—Bohm oscillations and distributions of equilibrium current
in open quantum dot and ring interferometer..... 290—296

GENERAL QUESTIONS

A. A. Zatsarinny, K. K. Abgaryan

Factors determining the relevance of creation research infrastructure for the synthesis
of new materials in the framework of the implementation of the priorities of scientific
and technological development of Russia 298—301

A. A. Zatsarinny, V. A. Kondrashev, A. A. Sorokin, S. A. Denisov

Scientific services consolidation methods 302—307

List of publications for 2019 308—309

Authors guidelines 310

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ ЭЛЕКТРОННЫХ КОМПОНЕНТОВ

MATHEMATICAL MODELING IN MATERIALS SCIENCE OF ELECTRONIC COMPONENTS

Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2019. Т. 22, № 4. С. 241—245.

DOI: 10.17073/1609-3577-2019-4-241-245

УДК 621.365

Исследование тепловых характеристик нагревательного элемента из алюминия с нанопористым оксидом алюминия*

© 2019 г. Е. Н. Муратова^{1,§}, В. А. Мошников¹, К. В. Чернякова², И. А. Врублевский²

¹ Санкт-Петербургский государственный
электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина),
ул. Профессора Попова, д. 5, Санкт-Петербург, 197376, Россия

² Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
ул. П. Бровки, д. 19, Минск, 220072, Беларусь

Аннотация. Одной из актуальных задач в сфере стационарного отопления, на решение которой направлены усилия многочисленных разработчиков, является экономия электрической энергии. Нагревательные системы могут иметь самые разнообразные конструкции, но существуют основные требования к их разработке, а именно: обеспечение высокой надежности при эксплуатации, экономичность, устойчивость к внешним воздействиям и стабильность электрических характеристик. Основным элементом любого нагревательного устройства — нагреватель. В настоящее время плоские резистивные нагреватели нашли широкий спектр применения в нагревательных устройствах, предназначенных для формирования здорового микроклимата в помещениях, поддержания заданных параметров в различных технологических процессах, в системах антиобледенения, в сельском хозяйстве и в промышленности. Исследованы тепловые характеристики плоских нагревателей, изготовленных из алюминия, с ленточным элементом нагрева в виде углеродного волокна. С целью обеспечения необходимой изоляции нагревательного элемента от металлического основания на поверхности алюминия формировали слой пористого анодного оксида алюминия толщиной 20 мкм. Концы нити из углеродного волокна металлизировали слоем меди для последующей пайки в процессе сборки электрического нагревателя. Электрическое сопротивление нагревателя с нитью из углеродного волокна составляло 60 Ом. Исследования распространения тепловых потоков в объеме платы из алюминия с нанопористым оксидом алюминия проводили с использованием тепловизионных измерений. Представлена зависимость изменения температуры на поверхности крышки нагревательного элемента из алюминия и на противоположной теплоотдающей стороне от времени нагрева. Полученные результаты показали, что тепло, генерируемое линейным нагревательным элементом из углеродной нити, быстро перераспределяется по всему объему алюминиевой пластины с нагревательным элементом. Это свидетельствует о высокой теплопроводности алюминиевой основы нагревателя, параметры которой позволяют обеспечить достижение требуемых тепловых характеристик нагревателя.

Ключевые слова: нагревательный элемент, алюминий, пористый анодный оксид алюминия, углеродное волокно, термограмма, тепловизионные исследования

Введение

Количество электронагревателей и их конструкций, применяемых в различных приборах промышленного и бытового назначения, с каждым годом увеличивается. Наиболее часто в конструкциях высокоэкономичных тепловых приборов используется плоский электрический тепловой элемент. Это объясняется более высокой эффективностью передачи тепла методом контактной теплопередачи по сравнению с другими типами нагрева.

Муратова Екатерина Николаевна^{1,§} — канд. техн. наук, научный сотрудник, e-mail: SokolovaEkNik@yandex.ru; **Мошников Вячеслав Алексеевич**¹ — доктор физ.-мат. наук, профессор, кафедра Микро- и наноэлектроники; **Чернякова Катерина Викторовна**² — канд. физ.-мат. наук, доцент, ведущий научный сотрудник; **Врублевский Игорь Альфонсович**² — канд. техн. наук, доцент, заведующий лабораторией

§ Автор для переписки

* Статья подготовлена по материалам доклада, представленного на I-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 21—23 октября 2019 г.

Как известно, одной из актуальных задач в сфере стационарного отопления, на решение которой направлены усилия многочисленных разработчиков, является экономия электрической энергии. Нагревательные системы могут иметь самые разнообразные конструкции, но основными требованиями, предъявляемыми к их разработке, является обеспечение высокой надежности при эксплуатации, экономичность, устойчивость к внешним воздействиям и стабильность электрических характеристик. Основным элементом любого нагревательного устройства является нагреватель. В настоящее время плоские резистивные нагреватели нашли широкий спектр применения в нагревательных устройствах, предназначенных для формирования здорового микроклимата в помещениях, поддержания заданных параметров в различных технологических процессах, в системах антиобледенения, в сельском хозяйстве и в промышленности.

Применение в конструкции нагревателя металлической основы с тонким диэлектрическим слоем создает необходимые условия для быстрой и равномерной передачи тепла к теплопринимающему элементу [1, 2]. Такой подход позволяет создавать элементы быстрого нагрева с равномерным распределением температуры на рабочей поверхности и с высоким коэффициентом полезного действия за счет снижения потерь тепла [3—8].

Цель работы — исследование равномерности нагрева и тепловых характеристик плоских нагревателей, изготовленных на алюминиевых пластинах с ленточным углеродным элементом нагрева.

Экспериментальная часть

Плоский нагревательный элемент (НЭл) из алюминия имел размеры 60×24 мм (рис. 1). Толщина основания и крышки из анодированного алюминия составляла 0,5 и 0,3 мм, соответственно. На образцах анодированного алюминия слой пористого анодного оксида алюминия (ПАОА), сформированный методом электрохимического анодирования алюминия [9—17], имел толщину 20 мкм. ПАОА представляют собой высокоупорядоченные структуры с параллельными вертикальными капиллярами — пора́ми [18—22]. Такая толщина ПАОА обеспечивала необходимую изоляцию НЭл от металлического основания. В конструкции нагревателя в качестве НЭл использовалась углеродная электропроводящая нить на основе вязкой технической нити. Резистивный элемент в виде нити из углеродного волокна металлизировался слоем меди (толщина 30 мкм, гальваническое осаждение) для последующей пайки в процессе сборки электрического нагревателя. Фиксацию углеродной нити на поверхности

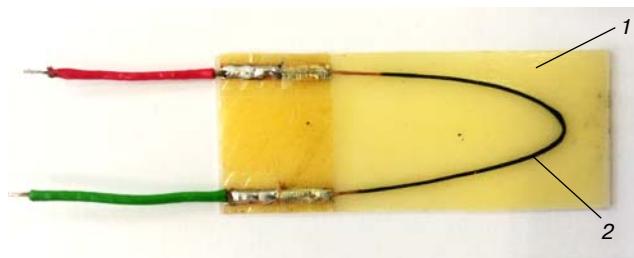


Рис. 1. Верхняя поверхность нагревательного элемента с нанопористым оксидом алюминия (1) и линейным нагревательным элементом из углеродной нити (2)

Fig. 1. The upper surface of the heating element with nanoporous aluminum oxide (1) and a linear heating element made of carbon filament (2)

анодного оксида алюминия и затем ее герметизацию осуществляли с помощью эпоксидного компаунда.

Электрический нагреватель с нитью из углеродного волокна имел электрическое сопротивление 60 Ом. Измерение сопротивления диэлектрической изоляции проводилось с помощью мегаомметра Ф4101. Для получения термограмм поверхности плоского нагревателя использовали тепловизионную камеру MobIR M4.

Результаты и их обсуждение

Важной характеристикой для НЭл является способность обеспечения равномерного нагрева по всей площади нагревателя. В работе проведены детальные исследования тепловых параметров нагревателя при электрической мощности 6 Вт.

На рис. 2 и 3 показаны термограммы поверхности НЭл со стороны крышки и со стороны теплопередающего основания через 10 и 60 с нагрева, соответственно.

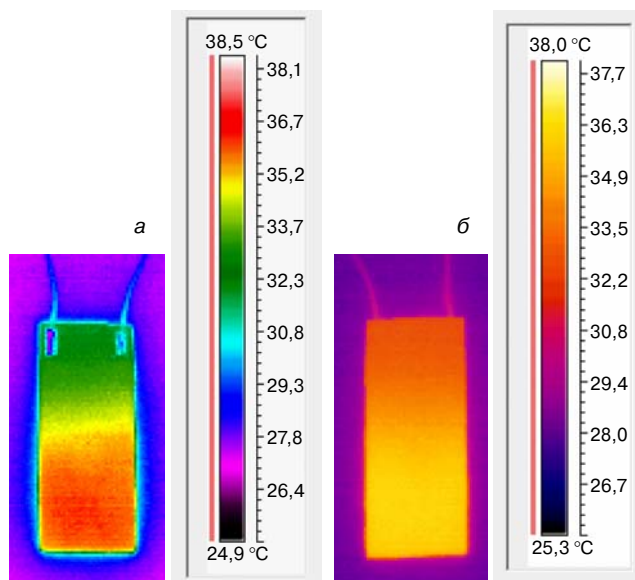


Рис. 2. Термограммы поверхности нагревательного элемента со стороны крышки (а) и с противоположной стороны — теплопередающего основания (б) через 10 с нагрева

Fig. 2. Thermograms of the surface of the heating element from the side of the cover (a) and from the opposite side of the heat transfer base (b) after 10 s of heating

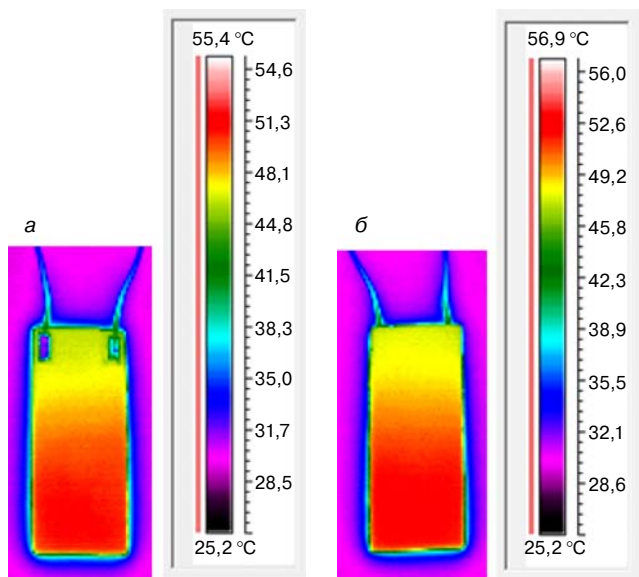


Рис. 3. Термограммы поверхности нагревательного элемента со стороны крышки (а) и с противоположной стороны — теплопередающего основания (б) через 60 с нагрева

Fig. 3. Thermograms of the surface of the heating element from the side of the cover (a) and from the opposite side of the heat transfer base (b) after 60 s of heating

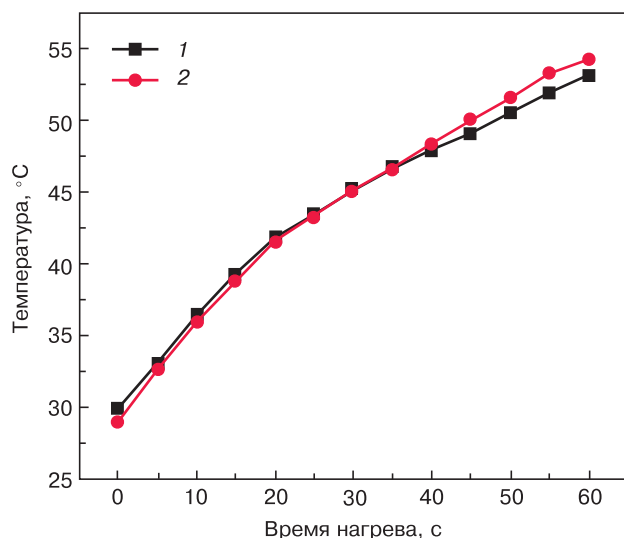


Рис. 4. Изменения температуры на поверхности крышки нагревательного элемента из алюминия (1) и на теплоотдающей стороне (2) от времени нагрева

Fig. 4. Changes in temperature on the surface of the aluminum heating element cover (1) and on the heat-emitting side (2) from heating time

Результаты тепловизионных исследований показали, что на начальных этапах нагрева температура на поверхности алюминия со стороны крышки имеет незначительный разброс. Из-за отвода тепла через контакты и соединительные провода значение средней температуры в рабочей зоне 38 °C снижалось до 33 °C в зоне контактов. Спустя 50 с после начала нагрева температура в контрольных областях достигала следующих значений: средняя температура в рабочей зоне — 52,3 °C и в зоне контактов — 47,5 °C. Температура алюминия

со стороны теплопередающего основания спустя первые 10 с после нагрева в рабочей зоне была равна 38 °C и 32,2 °C в зоне расположения контактов. Через минуту нагрева температура в рабочей зоне была равна 56,5 °C и 52,0 °C в зоне расположения контактов. Таким образом, плоский НЭЛ при приложении электрической мощности 6 Вт за 60 с нагрева в условиях отсутствия отвода тепла выходил на температуру 56 °C на теплоотдающей поверхности.

Зависимости изменения температуры на поверхности крышки НЭЛ и на теплоотдающей стороне от времени нагрева показаны на рис. 4.

Результаты исследований показали, что температура на поверхности нагревателя как со стороны крышки, так и на ее обратной стороне имели близкие значения на всех стадиях нагрева. Это свидетельствует о высокой теплопроводности алюминиевой основы нагревателя, благодаря чему даже в случае ленточного углеродного элемента с малой площадью контакта обеспечивается равномерный профиль распределения температуры с двух сторон нагревателя.

Заключение

Проведенные исследования и испытания показали, что высокая теплопроводность алюминия позволила теплу, генерируемому ленточным элементом нагрева на относительно малом локальном участке поверхности, быстро перераспределиться по всему объему алюминиевой пластины нагревательного элемента и обеспечить достижение требуемых тепловых характеристик нагревателя.

Следовательно, использование линейного НЭЛ из углеродной нити является эффективным способом нагрева алюминиевых НЭЛ, позволяющим получить высокие скорости нагрева и равномерный профиль распределения температуры на поверхности нагревательных элементов из алюминия на всех этапах нагрева.

Библиографический список

1. Динь Х. Т., Лушпа Н. В., Чернякова Е. В., Врублевский И. А. Исследование распространения тепла в плате из алюминия с нанопористым анодным оксидом алюминия тепловизионным методом // Доклады БГУИР. 2019. № 1. С. 45—50.
2. Симин А., Холодняк Д., Вендик И. Многослойные интегральные схемы сверхвысоких частот на основе керамики с низкой температурой обжига // Компон. и технol. 2005. № 5. С. 190—196.
3. Муратова Е. Н., Мошников В. А., Лучинин В. В., Бобков А. А., Врублевский И. А., Чернякова К. В., Теруков Е. И. Теплопроводящие платы на основе алюминия с наноструктурированным слоем Al_2O_3 для изделий силовой электроники // Ж. техн. физ. 2018. Т. 88, Вып. 11. С. 1678—1680. DOI: 10.21883/JTF.2018.11.46629.2480
4. Муратова Е. Н., Врублевский И. А., Чернякова Е. В. и др. // Материалы XIV Международной конференции «Физика диэлектриков» (Диэлектрики-2017). СПб.: Изд-во РГПУ им. А. И. Герцена, 2017. С. 136.
5. Andreev S., Chemyakova K., Tzaneva B., Videkov V., Vrublevsky I. Investigation of the efficiency of the heat dissipation for the heat-conducting circuit boards made of aluminum with the

nanoporous alumina layer // 40th International Spring Seminar on Electronics Technology (ISSE). Sofia (Bulgaria): IEEE, 2017. P. 1—6. DOI: 10.1109/ISSE.2017.8000899

6. Чернякова Е., Врублевский И., Видеков В., Тучковский А. Применение наноструктурированного анодного оксида алюминия при изготовлении теплонагруженных плат для силовых модулей // Научни известия на НТСМ. 2016. Т. XXV, № 12. С. 257—263.

7. Врублевский И., Чернякова Е., Видеков В., Тучковский А. Сравнительный анализ работы плоского нагревательного элемента на основании из анодированного алюминия // Научни известия на НТСМ. 2015. Т. XXIII, № 9. С. 422—428.

8. Vrublevsky I., Chernyakova K., Videkov V., Tuchkovsky A. Improvement of the thermal characteristics of the electric heater in the architecture with aluminum, nanoporous alumina and resistive component of carbon fiber // Nanoscience & Nanotechnology. 2016. N 1. P. 1—2. URL: <https://libelidoc.bsuir.by/handle/123456789/10898>

9. Vorozhtsova M., Drbohlavova Ja., Hubalek Ja. Chemical Microsensors with Ordered Nanostructures // In: Microsensors. Ed. by I. Minin. IntechOpen, 2011. DOI: 10.5772/18066

10. Ersching K., Dorico E., da Silva R. C., Zoldan V. C., Ioppo E. A., Viegas A. D. C., Pasa A. A. Surface and interface characterization of nanoporous alumina templates produced in oxalic acid and submitted to etching procedures // Mater. Chem. and Phys. 2012. V. 137, Iss. 1. P. 140—146. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2012.08.058

11. Муратова Е. Н. Искусственно и естественно упорядоченные микро- и наноразмерные капиллярные мембраны на основе анодного оксида алюминия: дисс. ... канд. техн. наук. СПб.: СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2014. 118 с. URL: <https://etu.ru/assets/files/nauka/dissertacii/2014/Dissertaciya-Muratovoj-EN.pdf>

12. Eftekhari A. Nanostructured Materials in Electrochemistry. Weinheim (Germany): Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2008. 489 p.

13. Александрова О. А., Алексеев П. А., Кононова И. Е., Максимов А. И., Мараева Е. В., Мошников В. А., Муратова Е. Н., Налимова С. С., Пермяков Н. В., Спивак Ю. М., Титков А. Н. Диагностика материалов методами сканирующей зондовой микроскопии: учеб. пособие / Под ред. проф. В. А. Мошникова. СПб.: Изд-во СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2012. 172 с.

14. Muratova E. N., Matyushkin L. B., Moshnikov V. A., Chernyakova K. V., Vrublevsky I. A. Thermal radiation shielding by nanoporous membranes based on anodic alumina // J. Phys.: Conf. Series. 2017. V. 872, N 1. P. 012020. DOI: 10.1088/1742-6596/872/1/012020

15. Врублевский И. А., Дик С. К., Терех А. С., Смирнов А. В., Чернякова К. В. Структура пленок пористого оксида алюминия, формируемых в электролитах на основе органических кислот // Пробл. физ., матем. и техн. 2012. № 3. С. 101—105.

16. Пат. полезн. модель 122385 (РФ). Электрохимическая ячейка для получения пористых анодных оксидов металлов и полупроводников / П. Г. Травкин, Е. Н. Соколова, Ю. М. Спивак, В. А. Мошников, 2012.

17. Муратова Е. Н., Спивак Ю. М., Мошников В. А. Пористые структуры на основе оксидов алюминия для солнечной энергетики и антиотражательных покрытий // В кн.: Наноструктурные оксидные материалы в современной микро-, нано- и оптоэлектронике: монография / Под ред. В. А. Мошникова, О. А. Александровой. СПб.: Изд-во СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2017. С. 32—62.

18. Муратова Е. Н., Спивак Ю. М., Мошников В. А., Петров Д. В., Шемухин А. А., Шиманова В. В. Влияние технологических параметров получения слоев нанопористого Al_2O_3 на их структурные характеристики // Физ. и хим. стекла. 2013. Т. 39. С. 473—480.

19. Yanagishita T., Kato A., Masuda H. Preparation of ideally ordered through-hole anodic porous alumina membranes by two-layer anodization // Jpn. J. Appl. Phys. 2017. V. 56, N 3. P. 035202. DOI: 10.7567/JJAP.56.035202

20. Chen C.-K., Chen S.-H. Multi-electrolyte-step anodic aluminum oxide method for the fabrication of self-organized nanochannel arrays // Nanoscale Res. Lett. 2012. V. 7. Art. No. 122. DOI: 10.1186/1556-276X-7-122

21. Александрова О. А., Алешин А. Н., Белорус А. О., Бобков А. А., Гузь А. В., Кальнин А. А., Кононова И. Е., Левицкий В. С., Мазинг Д. С., Мараева Е. В., Матюшкин Л. Б., Москвин П. П., Мошников В. А., Муратова Е. Н., Налимова С. С., Пономарева А. А., Пронин И. А., Спивак Ю. М. Новые наноматериалы. Синтез. Диагностика. Моделирование: лаб. практикум. СПб.: Изд-во СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2015. 248 с.

22. Афанасьев А. В., Ильин В. А., Мошников В. А., Соколова Е. Н., Спивак Ю. М. Синтез нано- и микропористых структур электрохимическими методами // Биотехносфера. 2011. № 1—2. С. 39—45.

23. Врублевский И. А., Чернякова К. В., Горбачев Д. В., Муратова Е. Н., Мошников В. А. Тепловые и электрические характеристики плоских нагревателей из алюминия с нанопористым анодным оксидом алюминия и резистивным элементом из углеродной нити // Сб. материалов 28-й Международной Крымской конференции «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии». Москва: КНТЦ им. Попова, 2018. С. 1013—1016.

Статья поступила в редакцию 26 декабря 2019 г.

Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = *Materials of Electronics Engineering*. 2019, vol. 22, no. 4, pp. 241—245. DOI: 10.17073/1609-3577-2019-4-241-245

Investigation of the thermal characteristics of a heating element based on aluminum with nanoporous alumina

E. N. Muratova^{1,§}, V. A. Moshnikov¹, K. V. Chernyakova², I. A. Vrublevsky²

¹ Saint Petersburg Electrotechnical University “LETI”,
5 Prof. Popova Str., St. Petersburg 197376 Russia

² Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics,
6 P. Brovka Str., Minsk 220013, Belarus

Abstract. In this work, we studied the thermal characteristics of flat heaters made of aluminum with a strip heating element in the form of carbon fiber. In order to provide the necessary insulation of the heating element from the metal base, a layer of porous anodic aluminum oxide with a thickness of 20 μm was formed on the aluminum surface. The ends of the carbon fiber filament were metallized with a layer of copper for subsequent soldering during the assembly of the electric

Information about authors:

Ekaterina N. Muratova^{1,§}: Cand. Sci. (Eng.), Researcher (SokolovaEkNik@yandex.ru); **Vyacheslav A. Moshnikov**¹: Dr. Sci. (Phys.-Math.), Professor, Department of Micro- and Nanoelectronics; **Katsiaryna V. Chernyakova**²: Cand. Sci. (Phys.-Math.), Associate Professor, Leading Researcher; **Igor A. Vrublevsky**²: Cand. Sci. (Eng.), Associate Professor, Head of the Laboratory.

§ Corresponding author

heater. The carbon fiber filament of electric heater had an electrical resistance of 60 Ohms. Studies of the propagation of heat fluxes in the volume of a board made of aluminum with nanoporous aluminum oxide were carried out using thermal imaging measurements. The paper presents the dependence of temperature changes on the surface of the lid of a heating element made of aluminum and on the opposite side — heat transfer side with heating time. The results showed that the heat generated by a linear heating element of carbon fiber, quickly distributed throughout the entire volume of the aluminum plate of the heating element. This indicates a high thermal conductivity of the aluminum base of the heater, the parameters of which allow to achieve the required thermal characteristics of the heater.

Keywords: heating element, aluminum, porous anodic alumina, carbon fiber, thermogram, thermographic studies

References

1. Dinh H. T., Lushpa N. V., Chernyakova K. V., Vrublevsky I. A. Study of distribution of thermal fluxes in a plate of aluminum with nanoporous aluminum oxide by means of thermal imaging measurements. *Doklady BGUIR*, 2019, no. 1, pp. 45—50. (In Russ.)
2. Simin A., Holodnyak D., Vendik I. Multilayer integrated circuits of ultrahigh frequencies based on ceramics with a low firing temperature. *Komponenty i tekhnologii = Components and technologies*, 2005, no. 5, pp. 190—196. (In Russ.)
3. Muratova E. N., Moshnikov V. A., Luchin V. V., Bobkov A. A., Vrublevsky I. A., Chernyakova K. V., Terukov E. I. Thermal-conductive boards based on aluminum with an Al_2O_3 nanostructured layer for products of power electronics. *Tech. Phys.*, 2018, vol. 63, pp. 1626—1628. DOI: 10.1134/S1063784218110191
4. Muratova E. N., Vrublevsky I. A., Chernyakova E. V. et al. *Materialy XIV Mezhdunarodnoi konferentsii "Fizika dielektrikov" (Dielektriki-2017) = Materials of the XIV International Conference "Physics of Dielectrics" (Dielectrics-2017)*. St. Petersburg: Izd-vo RGPU im. A. I. Gertsena, 2017, p. 136. (In Russ.)
5. Andreev S., Chemyakova K., Tzaneva B., Videkov V., Vrublevsky I. Investigation of the efficiency of the heat dissipation for the heat-conducting circuit boards made of aluminum with the nanoporous alumina layer. *40th International Spring Seminar on Electronics Technology (ISSE)*. Sofia (Bulgaria): IEEE, 2017, pp. 1—6. DOI: 10.1109/ISSE.2017.8000899
6. Chernyakova E., Vrublevsky I., Videkov V., Tuchkovsky A. Application of nanostructured anodic aluminum oxide in the manufacture of heat-loaded boards for power modules. *Scientific Proceedings of STUME*, 2016, vol. XXV, no. 12, pp. 257—263. (In Russ.)
7. Vrublevsky I., Chernyakova E., Videkov V., Tuchkovsky A. Comparative analysis of the operation of a flat heating element based on anodized aluminum. *Scientific Proceedings of STUME*, 2015, vol. XXIII, no. 9, pp. 422—428. (In Russ.)
8. Vrublevsky I., Chernyakova K., Videkov V., Tuchkovsky A. Improvement of the thermal characteristics of the electric heater in the architecture with aluminum, nanoporous alumina and resistive component of carbon fiber. *Nanoscience & Nanotechnology*, 2016, no. 1, pp. 1—2. URL: <https://libeloc.bsuir.by/handle/123456789/10898>
9. Vorozhtsova M., Drbohlavova Ja., Hubalek Ja. Chemical Microsensors with Ordered Nanostructures. In: *Microsensors*. Ed. by I. Minin. IntechOpen, 2011. DOI: 10.5772/18066
10. Ersching K., Dorico E., da Silva R. C., Zoldan V. C., Isoppo E. A., Viegas A. D. C., Pasa A. A. Surface and interface characterization of nanoporous alumina templates produced in oxalic acid and submitted to etching procedures. *Mater. Chem. and Phys.*, 2012, vol. 137, no. 1, pp. 140—146. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2012.08.058
11. Muratova E. N. Artificially and naturally ordered micro- and nanosized capillary membranes based on anodic aluminum oxide: Dis. Cand. Sci. (Eng). St. Petersburg: Saint Petersburg Electrotechnical University "LETI", 2014, 118 p. (In Russ.). URL: <https://etu.ru/assets/files/nauka/dissertacii/2014/Dissertaciya-Muratovoj-EN.pdf>
12. Eftekhari A. *Nanostructured Materials in Electrochemistry*. Weinheim (Germany): Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2008, 489 p.
13. Aleksandrova O. A., Alekseev P. A., Kononova I. E., Maksimov A. I., Maraeva E. V., Moshnikov V. A., Muratova E. N., Nalimova S. S., Permyakov N. V., Spivak Yu. M., Titkov A. N. *Diagnostika materialov metodami skaniruyushchei zondovoi mikroskopii* [Diagnostics of materials by scanning probe microscopy]. Ed. by Prof. V. A. Moshnikov. St. Petersburg: Izd-vo SPbGETU "LETI", 2012, 172 p. (In Russ.)
14. Muratova E. N., Matyushkin L. B., Moshnikov V. A., Chernyakova K. V., Vrublevsky I. A. Thermal radiation shielding by nanoporous membranes based on anodic alumina. *J. Phys.: Conf. Series*, 2017, vol. 872, no. 1, p. 012020. DOI: 10.1088/1742-6596/872/1/012020
15. Vrublevsky I. A., Dick S. K., Tereh A. S., Smirnov A. V., Chernyakova K. V. Structure of the porous aluminium oxide films formed in the solutions of organic acids. *PFMT*, 2012, no. 3, pp. 101—105. (In Russ.)
16. Patent 122385 (RF). *Elektrokhimicheskaya yacheika dlya polucheniya poristyykh anodnykh oksidov metallov i poluprovodnikov* [An electrochemical cell for the production of porous anodic metal and semiconductor oxides]. P. G. Travkin, E. N. Sokolova, Yu. M. Spivak, V. A. Moshnikov, 2012. (In Russ.)
17. Muratova E. N., Spivak Yu. M., Moshnikov V. A. *Poristye struktury na osnove oksidov alyuminiya dlya solnechnoi energetiki i antiotrazhatel'nykh pokrytii* [Porous structures based on aluminum oxides for solar energy and antireflection coatings]. In: *Nanostructured oxide materials in modern micro-, nano- and optoelectronics*. Ed. by V. A. Moshnikov, O. A. Alexandrova. St. Petersburg: Izd-vo SPbGETU "LETI", 2017, pp. 32—62. (In Russ.)
18. Muratova E. N., Spivak Yu. M., Moshnikov V. A., Shimanova V. V., Petrov D. V., Shemukhin A. A. Influence of technological parameters of nanoporous Al_2O_3 layers preparation on their structural characteristics. *Glass Physics and Chemistry*, 2013, vol. 39, no. 3, pp. 320—328. DOI: 10.1134/S1087659613030140
19. Yanagishita T., Kato A., Masuda H. Preparation of ideally ordered through-hole anodic porous alumina membranes by two-layer anodization. *Jpn. J. Appl. Phys.*, 2017, vol. 56, no. 3, p. 035202. DOI: 10.7567/JJAP.56.035202
20. Chen C.-K., Chen S.-H. Multi-electrolyte-step anodic aluminum oxide method for the fabrication of self-organized nanochannel arrays. *Nanoscale Res. Lett.*, 2012, vol. 7, art. no. 122. DOI: 10.1186/1556-276X-7-122
21. Aleksandrova O. A., Aleshin A. N., Belorus A. O., Bobkov A. A., Guz' A. V., Kal'nin A. A., Kononova I. E., Levitsky V. S., Mazing D. S., Maraeva E. V., Matyushkin L. B., Moskvina P. P., Moshnikov V. A., Muratova E. N., Nalimova S. S., Ponomareva A. A., Pronin I. A., Spivak Yu. M. *Novye nanomaterialy. Sintez. Diagnostika. Modelirovanie* [New nanomaterials. Synthesis. Diagnostics. Modeling]. St. Petersburg: Izd-vo SPbGETU "LETI", 2015, 248 p. (In Russ.)
22. Afanasyev A. V., Ilin V. A., Moshnikov V. A., Sokolova Ye. N., Spivak Yu. M. Synthesis of nano- and microporous structures by electrochemical methods. *Biotechnosphere*, 2011, no. 1-2, pp. 39—45. (In Russ.)
23. Vrublevsky I. A., Chernyakova K. V., Gorbachev D. V., Muratova E. N., Moshnikov V. A. Thermal and electrical characteristics of flat heaters made of aluminum with nanoporous anodic aluminum oxide and a resistive element made of carbon filament. *Sb. materialov 28-i Mezhdunarodnoi Krymskoi konferentsii "SVCh-tehnika i telekommunikatsionnye tekhnologii" = Proceedings of 28th International Crimean Conference "Microwave Engineering and Telecommunication Technologies"*. Moscow: KNTTs im. Popova, 2018, pp. 1013—1016. (In Russ.)

Received December 26, 2019

УДК 537.622: 544.015.4

Применение численного моделирования в исследовании мемристивных структур на основе оксидов и халькогенидов*

В. В. Сироткин^{1,§}, Н. А. Тулина²

¹ *Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН,
ул. Академика Осипьяна, д. 6, Черноголовка, Московская обл., 142432, Россия*

² *Институт физики твердого тела РАН,
ул. Академика Осипьяна, д. 2, Черноголовка, Московская обл., 142432, Россия*

Аннотация. Рассмотрены модели, которые описывают биполярные резистивные переключения в планарных микроструктурах, созданных на основе оксидных соединений ($\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$, $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-y}$) и селенида висмута. Исследованы мемристивные гетероструктуры металл—изолятор—металл планарного типа, в которых микроразмер формируется электродом, диаметр которого значительно меньше общего размера структуры (это могут быть и микроконтакты шарвинского типа, и пленочные электрические электроды). Другой важной особенностью этих гетероструктур является наличие поверхностного слоя толщиной несколько десятков нанометров с удельной проводимостью, значительно пониженной относительно объемной. Изменение резистивных свойств подобных гетероструктур обусловлено формированием или разрушением проводящего канала через указанный слой. Численное моделирование показало, что при этом на биполярные резистивные переключения значительное влияние оказывает топология распределения электрического поля. Предложена модель «критического поля» для описания экспериментально наблюдаемых мемристивных эффектов в исследуемых гетероструктурах. В этой модели предполагается, что изменение удельной проводимости происходит в тех частях поверхностного слоя, где напряженность электрического поля превышает некоторое критическое значение. Модель «критического поля» основана на численном расчете распределения электрического потенциала по распределению удельной проводимости в структуре. Кроме того, рассмотрена модель позволяющая проанализировать влияние электродиффузии ионов кислорода на резистивные переключения в гетероструктурах на основе $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$. При численной реализации моделей использовалось сочетание интегро—разностной аппроксимации дифференциальных уравнений, многосеточного подхода для локализации неоднородностей физических характеристик, итерационного метода декомпозиции и составных адаптивных сеток. Это позволило с необходимой точностью отслеживать исследуемые процессы. Приведено сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными.

Ключевые слова: биполярные резистивные переключения, мемристоры, высокотемпературные сверхпроводники, селенид висмута, электродиффузия, математическое моделирование, численные алгоритмы

Введение

Биполярные резистивные переключения (БРП) в гетерогенных структурах металл—изолятор—металл (МИМ) различных соединений рассматриваются и реализуются на практике в качестве элементов памяти нового поколения (мемристоров). Мемристор можно определить как пассивный элемент электрической цепи, сопротивление которого зависит от прошедшего через него заряда. После отключения напряжения в цепи мемристор не изменяет свое состояние, т. е. «запоминает» последнее значение сопротивления (метастабильные высокорезистивное (ВРС) или низкорезистивное (НРС) состояния) [1, 2]. Дальнейшие исследования показали, что свойства мемристора дают возможность применять его и в качестве переключателя, элемента памяти ReRAM [3—5]. Эффект БРП наблюдается

в широком спектре МИМ структур, состоящим как из простых оксидов, халькогенидов, так и сложных соединений [6]. В работах [7—17] было показано, как, используя функциональные свойства высокотемпературных сверхпроводников и селенида висмута, можно формировать мемристивные гетероструктуры. В этих работах также с помощью численного моделирования было изучено влияние неоднородного распределения электрического поля в интерфейсе

Сироткин Вадим Владимирович^{1,§} — канд. физ.—мат. наук, ведущий научный сотрудник, e-mail: sirotkin@iptm.ru; **Тулина Наталья Алексеевна**² — канд. физ.—мат. наук, старший научный сотрудник, e-mail: tulina@issp.ac.ru

§ Автор для переписки

* Статья подготовлена по материалам доклада, представленного на I-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 21—23 октября 2019 г.

гетероконтактов на мемристивные свойства полученных структур.

В данной работе дается обзор математических моделей, разработанных для численного исследования БПП в гетероструктурах, построенных на основе высокотемпературных сверхпроводников $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-y}$ (NCCO), $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$ (BSCCO), и селениде висмута (Bi_2Se_3). Приводятся как результаты моделирования, так и их сравнение с экспериментальными данными.

Особенности моделируемых процессов

Все рассматриваемые в данной работе гетероструктуры являются планарными. Такие структуры представляют собой М(верхний)—И—М(нижний) переходы, в которых нано- или микроразмер формируется электродом (как правило, верхним), имеющим диаметр значительно меньше, чем общие размеры структуры (далее этот электрод обозначается как «контакт 1»). Другой важной особенностью исследуемых гетероструктур является наличие поверхностного слоя толщиной несколько десятков нанометров с удельной проводимостью, значительно пониженной относительно объемной. Изменение резистивных свойств подобных гетероструктур обуславливается формированием или разрушением проводящего канала через указанный слой. Предполагается, что существенную роль при этом играет электродиффузия ионов либо кислорода, либо селена. Наиболее интенсивно этот процесс протекает в зоне, которая расположена в окрестностях края контакта 1 и характеризуется сильным локальным повышением напряженности электрического поля. Таким образом, при моделировании БПП в рассматриваемых гетероструктурах, необходимо учитывать существование трех масштабов: вся гетероструктура (миллиметры – сотни микрон), поверхностный слой + контакт 1 (микроны – сотни нанометров), поверхностный слой + край контакта 1 (десятки нанометров). Далее представлены математические модели, при численной реализации которых проблема многомасштабности решается сочетанием интегро-разностной аппроксимации дифференциальных уравнений [18], многосеточного подхода для локализации неоднородностей [19], специального итерационного метода декомпозиции [20] и составных адаптивных сеток. Использование перечисленных подходов дало возможность создать вычислительно-эффективные компьютерные программы, позволяющие с необходимой точностью отслеживать исследуемые процессы.

Результаты и их обсуждение

На рис. 1, а показана схема гетероструктуры на основе эпитаксиальных пленок NCCO. В этом случае

поверхностный слой (30 нм) состоит из дефектного оксида $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{O}_y$ [11]. При подаче на контакты такой структуры синусоидального сигнала наблюдаются ВАХ, на которых фиксируются БПП (см. рис. 1, б).

В работе [9] для описания подобных БПП была предложена модель «критического поля» (МКП), в которой, без указания конкретного механизма образования проводящего канала, полагается, что изменение удельной проводимости происходит в тех частях поверхностного слоя, где напряженность электрического поля превышает некоторое критическое значение. МКП основана на численном расчете по распределению в структуре удельной проводимости σ распределения электрического потенциала ϕ :

$$\nabla[\sigma(r,z)\nabla\phi(r,z)] = 0. \quad (1)$$

Результаты расчетов по МКП для NCCO гетероструктуры изображены на рис. 2. Видно, что переход гетероструктуры из ВРС (рис. 2, а) в НРС (рис. 2, б) связан с прорастанием проводящего канала от края контакта 1 к слою NCCO (рис. 2, в). Разрушение канала при смене полярности сигнала происходит

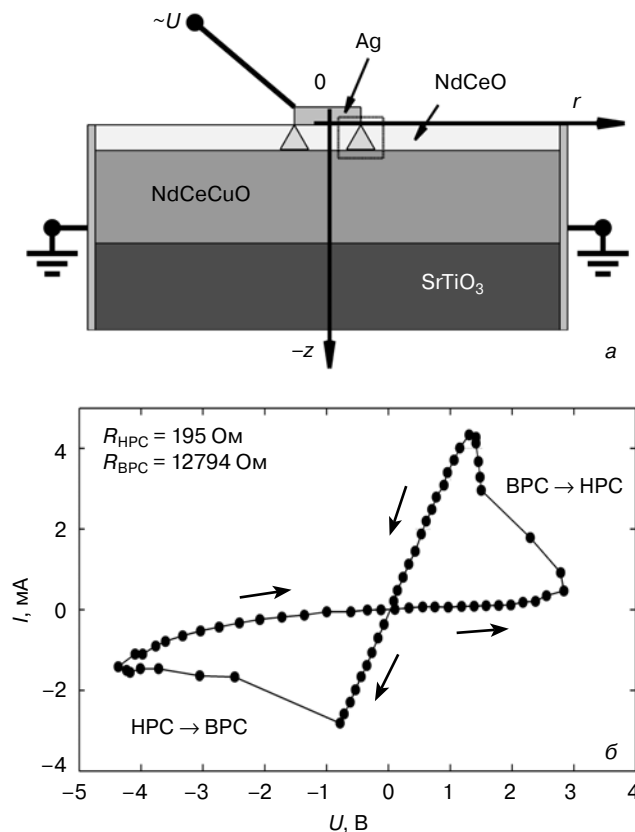


Рис. 1. Схема гетероструктуры на основе NCCO (а) и пример экспериментальной ВАХ для NCCO гетероструктуры при подаче на ее контакты синусоидального сигнала (б) [11]

Fig. 1. Schematic of a heterostructure based on NCCO (а) and an example of an experimental I–V curve for an NCCO heterostructure when a sinusoidal signal is applied to its contacts (б) [11]

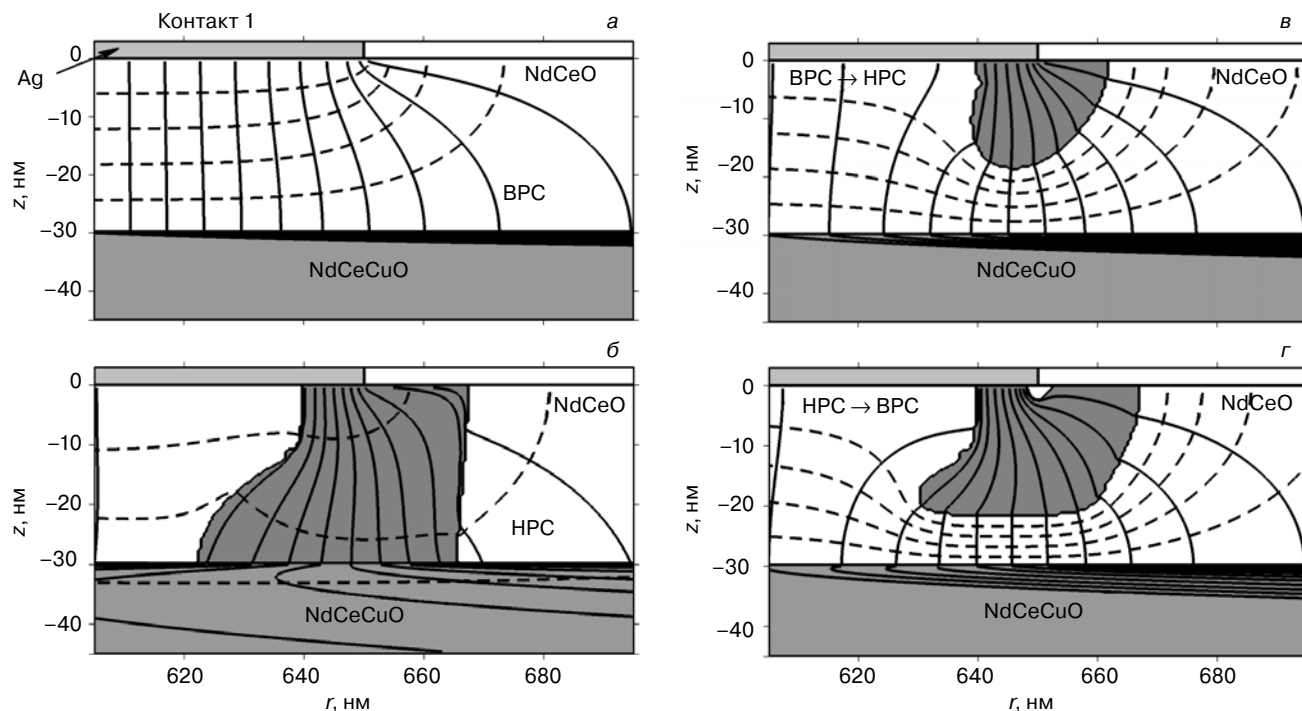


Рис. 2. Результаты расчетов по МКП для NCCO гетероструктуры с параметрами, соответствующими рис. 1, б.

На рисунках проведены эквипотенциалы (пунктирные кривые) и линии тока (сплошные)

Fig. 2. Results of calculations using the «critical field» model for an NCCO heterostructure with parameters corresponding to Fig. 1, б. The figures show equipotentials (dashed curves) and streamlines (solid curves)

в обратном направлении (рис. 2, г). Полученные при моделировании данные о форме и размерах проводящего канала хорошо соответствуют экспериментальным оценкам [11].

Для описания БПИ в BSCCO гетероструктуре (рис. 3) использовалась модель, основанная на самоогласованном решении уравнения Пуассона (1) и диффузионно-дрейфового уравнения для концентрации «подвижных» ионов кислорода N

$$N_t(r, z, t) = \nabla [D \nabla N(r, z, t)] - \left(\frac{q}{kT} \right) \nabla [DN(r, z, t) \nabla \phi(r, z, t)], \quad (2)$$

D — коэффициент диффузии [12]. В модели предполагается, что при приложении к контакту положительного потенциала уменьшение удельного сопротивления в данной точке поверхностного слоя происходит при превышении некоторой концентрации N_a и при наличии поперечного электрического поля напряженностью $|E_a|$ и более. Считается, что сопротивление изменяется пропорционально величине «избыточной» концентрации n . Исходно эта концентрация равна 0, что соответствует ВРС. При ее максимальном значении n_f реализуется НРС. Накопление n происходит за счет избытка $N - N_a$. При отрицательном потенциале условия роста локального удельного сопротивления следующие: уменьшение концентрации до значения менее N_a и наличие поперечного электрического поля напря-

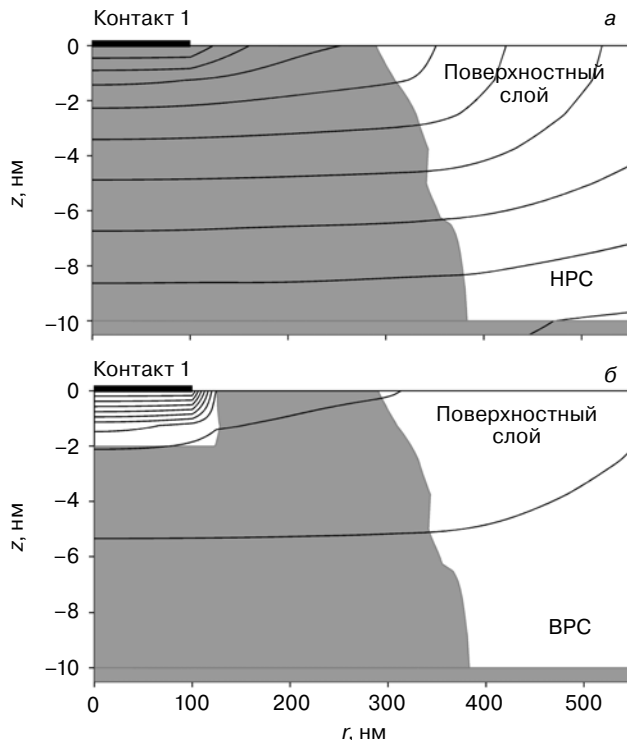


Рис. 3. Результаты моделирования для BSCCO гетероструктуры. Гетероструктура показана в НРС (а) и ВРС (б). На рисунках проведены эквипотенциалы. Серым цветом отмечен проводящий канал, возникший после электроформинга

Fig. 3. Simulation results for the BSCCO heterostructure. The heterostructure is shown in LRS (a) and HRS (б). Equipotentials are plotted in the figures. The conductive channel after electroforming is marked in gray

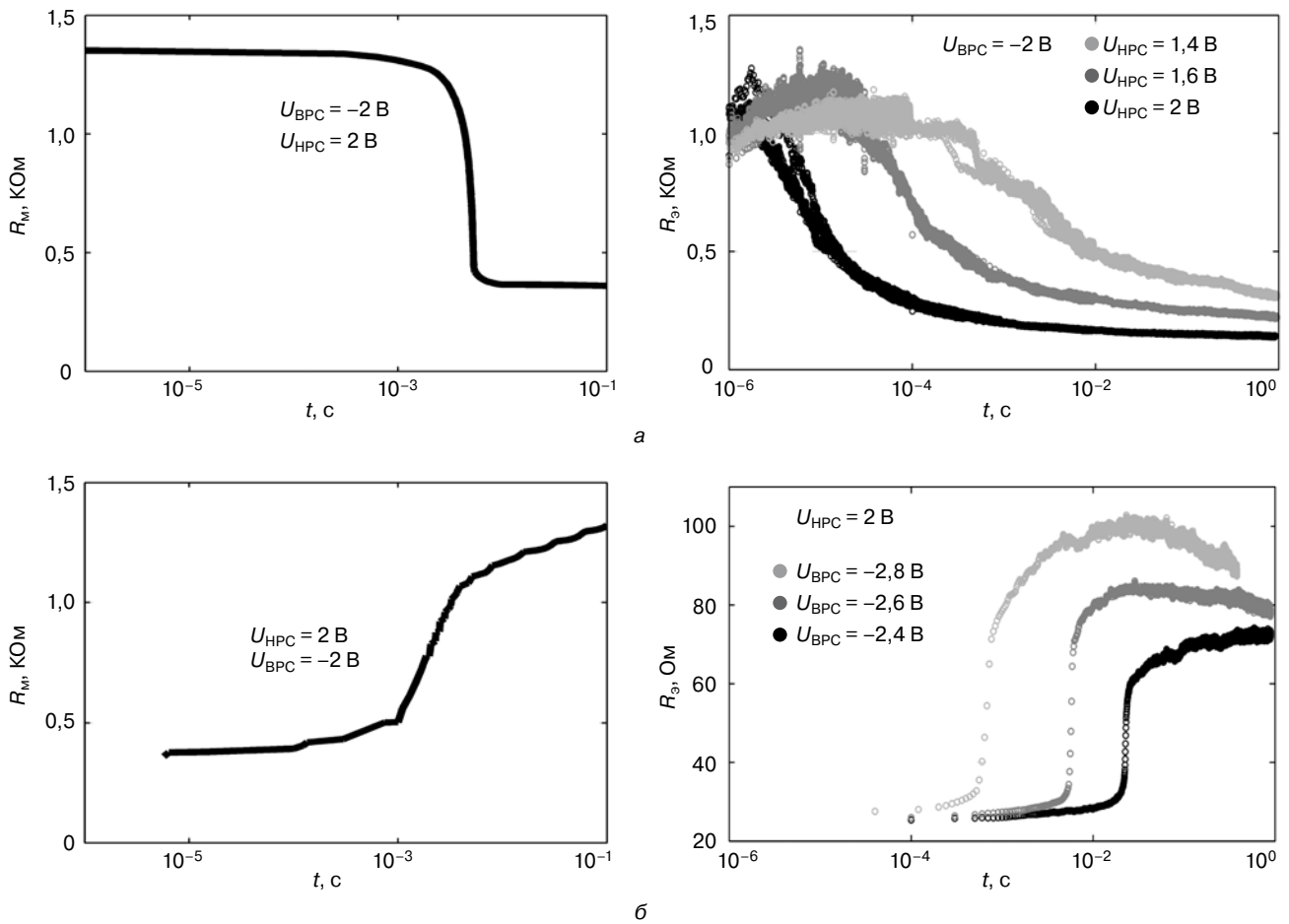


Рис. 4. Временные зависимости перехода BSCCO гетероструктуры:

а — из ВРС в НРС; б — из НРС в ВРС.

Расчетные зависимости (слева), получены после трехкратного переключения (с промежутками 0,1 с) напряжения на контакте ± 2 В. Экспериментальные переходные зависимости (справа) при разных соотношениях переключающих напряжений [12]

Fig. 4. Time dependences of the BSCCO transition of the heterostructure: (a) from LRS to LDC, (б) from LRS to HRS.

Calculated dependences (left), obtained after triple switching (with intervals of 0.1 s) voltage at the contact ± 2 V. Experimental transient dependences (right) for different ratios of switching voltages [12]

женностью $|E_a|$ и более. В этом случае n уменьшается на величину $N_a - N$, пока не достигнет 0.

Модель (1), (2) позволила рассчитать временные зависимости перехода BSCCO гетероструктуры из ВРС в НРС и обратно (рис. 4). Из анализа численных результатов следует, что время переключения существенно зависит как от геометрических размеров структуры, анизотропии ее резистивных свойств, так и от величины приложенного напряжения, что подтверждается экспериментальными исследованиями [12]. Кроме того, моделирование показало, что значительные задержки на переходных характеристиках могут быть связаны с формированием вокруг контакта протяженной области, в которой концентрация «подвижных» ионов кислорода имеет максимально возможное значение. В данном случае скорость переключения задается медленным преимущественно диффузионным переносом ионов на периферии этой области, а не их быстрым дрейфом в зоне контакта.

Большинство соединений, в которых наблюдается эффект резистивных переключений — оксидные соединения. Поэтому изучение БРП в гетероструктурах на основе селенида висмута интересно, прежде всего, с точки зрения наблюдения БРП в неоксидных соединениях. Bi_2Se_3 является узкозонным полупроводником, селеновые вакансии и легирование по катиону меняют в нем число носителей в довольно широком диапазоне, при этом тип носителей изменяется от электронного к дырочному. В математической модели для этого типа мемристивных структур было учтено служебное свойство Bi_2Se_3 — легко переходить из монокристаллического в многофазное состояние при небольших перегревах.

В Bi_2Se_3 гетероструктуре (рис. 5, а) поверхностный слой формирует дефектная фаза, возникающая вокруг контакта 1 при предварительном электроформинге. При моделировании этой гетероструктуры, основанном на совместном решении уравне-

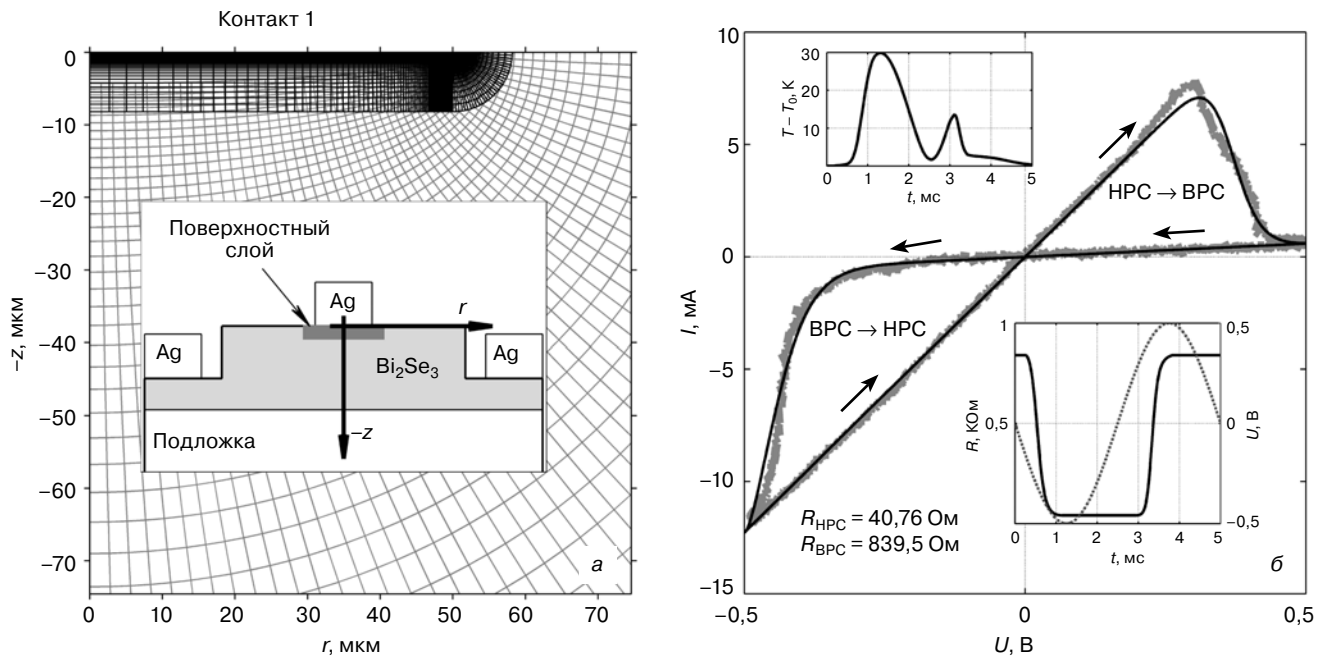


Рис. 5. Схема Bi_2Se_3 гетероструктуры (врезка) и фрагмент составных адаптивных сеток, используемых при моделировании, (а), а также экспериментальная [13] (серая линия) и расчетная (черная линия) ВАХ (б). Врезки (рис. 5, б) — рассчитанные по модели (1), (3) изменение во времени максимального перегрева (верхняя) и сопротивления структуры (нижняя)

Fig. 5. Schematic diagram of Bi_2Se_3 heterostructure (inset) and a fragment of composite adaptive grids used in modeling (a), as well as experimental [13] (gray) and calculated (black) I-V curve (b). Insets (Fig. 5, b) is calculated according to the model (1), (3) time variation of the maximum superheat (upper) and the resistance of the structure (bottom)

ния (1) и уравнения теплопроводности

$$\begin{aligned} \nabla[\lambda(r, z, T) \nabla T(r, z, t)] = \\ = c_p(T) T_t(r, z, t) - \sigma(r, z, T) [\nabla \phi(r, z, t)]^2, \end{aligned} \quad (3)$$

здесь T — температура, λ — удельная теплопроводность, c_p — удельная теплоемкость, исследовалось влияние локального перегрева и частоты переключающего напряжения на НРС и ВРС гетероструктуры [13].

При расчетах предполагалось, что изначально в окрестностях контакта 1 расположен слой с удельной проводимостью, пониженной относительно объемной σ_b . Свойства этого слоя задавались следующим образом

$$\begin{aligned} \sigma(P, T, s) = \frac{\sigma_b(P, T)}{C(s)}, \\ C(s) = \begin{cases} C_{\max} + (1 - C_{\max}) \frac{s}{z_L}, & s \leq z_L, \\ 1, & s > z_L, \end{cases} \end{aligned}$$

где s — кратчайшее расстояние от точки P до верхнего контакта; $C_{\max}$ — понижающий коэффициент. Скорость разрушения низкопроводящего слоя выбиралась в виде экспоненты, спадающей со временем, а скорость восстановления — возрастающей.

Учет локального перегрева позволил численными методами описать ВАХ с БРП при физических параметрах, совпадающих с экспериментальными

(рис. 5, б). При этом было обнаружено, что по мере повышения частоты подгоночные параметры модели, обеспечивающие совпадение расчетных данных с экспериментом, заметно меняются. Это указывает на то, что при моделировании необходимо учитывать влияние переменного электрического поля на свойства материала [13].

Заключение

Проведен обзор математических моделей, разработанных для изучения биполярных резистивных переключений в планарных гетероструктурах, выполненных на основе высокотемпературных сверхпроводников $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-y}$ и $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$, а также селениде висмута. Продемонстрировано, что предложенные модели позволяют объяснять некоторые особенности исследуемых процессов, а полученные с их помощью результаты, хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Библиографический список

1. Strukov D. B., Snider G. S., Stewart D. R., Williams R. S. The missing memristor found // *Nature*. 2008. V. 453. P. 80—83. DOI: 10.1038/nature06932
2. Ventra M. D., Pershin Yu. V., Chua L. O. Circuit elements with memory: memristors, memcapacitors, and meminductors // *Proc. IEEE*. 2009. V. 97, Iss. 10. P. 1717—1724. DOI: 10.1109/JPROC.2009.2021077
3. Jeong D. S., Thomas R., Katiyar R. S., Scott J. F., Kohlstedt H., Petraru A., Hwang Ch. S. Emerging memories: resistive switching mechanisms and current status // *Rep. Prog. Phys.* 2012. V. 75, N 7. Art. No. 076502. DOI: 10.1088/0034-4885/75/7/076502

4. Yang J. J., Strukov D. B., Stewart D. R. Memristive devices for computing // *Nature Nanotech.* 2013. V. 8. P. 13—24. DOI: 10.1038/nnano.2012.240
5. Петров А., Алексеева Л., Иванов А., Лучинин В., Романов А., Чиков Т., Набатам Т. На пути к нейроморфной мемристорной компьютерной платформе // *Наноиндустрия.* 2016. Вып. 1. С. 94—109. DOI: 10.22184/1993-8578.2016.63.1.94.109
6. Pershin Yu. V., Ventra M. D. Memory effects in complex materials and nanoscale systems // *Adv. Phys.* 2011. V. 60. P. 145—227. DOI: 10.1080/00018732.2010.544961
7. Tulina N. A., Sirotkin V. V. Electron instability in doped-manganites-based heterojunctions // *Physica C: Superconductivity.* 2004. V. 400, Iss. 3–4. P. 105—110. DOI: 10.1016/j.physc.2003.07.002
8. Tulina N. A., Borisenko I. Yu., Sirotkin V. V. Reproducible resistive switching effect for memory applications in heterocontacts based on strongly correlated electron systems // *Phys. Lett. A.* 2008. V. 372, Iss. 44. P. 6681—6686. DOI: 10.1016/j.physleta.2008.09.015
9. Tulina N. A., Borisenko I. Yu., Sirotkin V. V. Bipolar resistive switchings in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ // *Solid State Communications.* 2013. V. 170. P. 48—52. DOI: 10.1016/j.ssc.2013.07.023
10. Tulina N. A., Rossolenko A. N., Shmytko I. M., Kolesnikov N. N., Borisenko D. N., Bozhko S. I., Ionov A. M. Rectification and resistive switching in mesoscopic heterostructures based on Bi_2Se_3 // *Materials Letters.* 2015. V. 158. P. 403—405. DOI: 10.1016/j.matlet.2015.06.060
11. Tulina N. A., Rossolenko A. N., Ivanov A. A., Sirotkin V. V., Shmytko I. M., Borisenko I. Yu., Ionov A. M. $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-y}/\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{O}_y$ boundary and resistive switchings in mesoscopic structures on base of epitaxial $\text{Nd}_{1.86}\text{Ce}_{0.14}\text{CuO}_{4-y}$ films // *Physica C: Superconductivity and its Applications.* 2016. V. 527. P. 41—45. DOI: 10.1016/j.physc.2016.05.015
12. Сироткин В. В., Тулина Н. А., Россоленько А. Н., Борисенко И. Ю. Исследование методом численного моделирования влияния анизотропии на резистивные переключения в гетероструктурах на основе оксидных соединений // *Известия РАН, сер. Физическая.* 2016. Т. 80, № 5. С. 551—553. DOI: 10.7868/S0367676516050197
13. Тулина Н. А., Россоленько А. Н., Шмытько И. М., Колесников Н. Н., Борисенко Д. Н., Сироткин В. В., Борисенко И. Ю. Частотные свойства гетероструктур на основе селенида висмута в эффектах резистивных переключений. Эксперимент, численное моделирование // *Известия РАН, сер. Физическая.* 2016. Т. 80, № 6. С. 741—743. DOI: 10.7868/S0367676516060387
14. Tulina N. A. Memristor properties of high temperature superconductors. URL: <https://arxiv.org/abs/1801.09428>
15. Tulina N. A., Rossolenko A. N., Shmytko I. M., Ivanov A. A., Sirotkin V. V., Borisenko I. Yu., Tulin V. A. Properties of percolation channels in planar memristive structures based on epitaxial films of a $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ high temperature superconductor // *Supercond. Sci. Technol.* 2018. V. 32, N 1. Art. No. 015003. DOI: 10.1088/1361-6668/aae966
16. Тулина Н. А., Россоленько А. Н., Шмытько И. М., Колесников Н. Н., Борисенко Д. Н., Сироткин В. В., Борисенко И. Ю., Тулин В. А. Исследование динамических эффектов в мемристорных структурах на основе селенида висмута. Нужен ли мемристору «хвост шаттла» // *Известия РАН, сер. Физическая.* 2019. Т. 83, № 6. С. 813—817. DOI: 10.1134/S0367676519060358
17. Тулина Н. А., Россоленько А. Н., Шмытько И. М., Иванов А. А., Ионов А. М., Божко С. И., Сироткин В. В., Борисенко И. Ю., Тулин В. А. Функциональные свойства анизотропных перовскитных соединений в мемристорных структурах для применения в электронике // *Наноиндустрия.* 2019. N S. С. 237—240. DOI: 10.22184/NanoRus.2019.12.89.237.240; URL: http://www.nanoindustry.su/files/article_pdf/7/article_7591_5.pdf
18. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1977. 456 с.
19. Trottenberg U., Oosterlee C. W., Schüller A. Multigrid. London: Acad. Press, 2001. 631 p.
20. Сироткин В. В. Высокоэффективный декомпозиционный алгоритм для моделирования тепловых режимов мощных транзисторов // *Фундаментальные проблемы радиоэлектронного приборостроения.* 2016. Т. 16, № 3. С. 181—183.

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

Статья поступила в редакцию 26 декабря 2019 г.

Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering. 2019, vol. 22, no. 4, pp. 246—252.
DOI: 10.17073/1609-3577-2019-4-246-252

Application of numerical simulation in investigation of memristor structures based on oxides and chalcogenides

V. V. Sirotkin^{1,§}, N. A. Tulina²

¹ *Institute of Microelectronics Technology and High Purity Materials of RAS,
6 Academician Ossipyan Str., Chernogolovka, Moscow Region 142432, Russia*

² *Institute of Solid State Physics of RAS,
2 Academician Ossipyan Str., Chernogolovka, Moscow Region 142432, Russia*

Abstract. Models that describe bipolar resistive switching in planar microstructures based on oxide compounds ($\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$, $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-y}$) and bismuth selenide are considered. Metal–isolator–metal planar–type memristor heterostructures were investigated, in which the micro–size is formed by an electrode whose diameter is much smaller than the total size of the structure (it can be both Chervinsky–type microjunctions and film electric electrodes). Another important feature of these heterostructures is the presence of a surface layer several tens of nanometers thick with specific conductivity significantly reduced relative to volume. The change in the resistive properties of such heterostructures is caused by the formation or destruction of the conductive channel through the above–mentioned layer. Numerical simulation has shown that the bipolar resistive switching is significantly influenced by the electrical field distribution topology. A “critical field” model is

Information about authors:

Vadim V. Sirotkin^{1,§}: Cand. Sci. (Phys.–Math.), Leading Researcher (sirotkin@iptm.ru); **Nataliya A. Tulina²:** Cand. Sci. (Phys.–Math.), Senior Researcher (tulina@issp.ac.ru)

§ Corresponding author

proposed to describe experimentally observed memristor effects in investigated heterostructures. In this model it is assumed that the change in specific conductivity occurs in those parts of the surface layer where the electric field strength exceeds some critical value. The model of the “critical field” is based on the numerical calculation of the distribution of electrical potential on the distribution of specific conductivity in the structure. In addition, the model allowing to analyze the influence of electrodiffusion of oxygen ions on resistive switching in heterostructures based on $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$ is considered. At numerical realization of the models a combination of the integro-differential approximation of the differential equations, the multi-grid approach for localization of heterogeneities of physical characteristics, the iterative decomposition method and composite adaptive meshes was used. It allowed tracking the processes under investigation with necessary accuracy. The comparison of simulation results with experimental data is presented.

Keywords: bipolar resistive switching, memristors, high-temperature superconductors, bismuth selenide, electrodiffusion, mathematical simulation, numerical algorithms

References

1. Strukov D. B., Snider G. S., Stewart D. R., Williams R. S. The missing memristor found. *Nature*, 2008, vol. 453, pp. 80–83. DOI: 10.1038/nature06932
2. Ventra M. D., Pershin Yu. V., Chua L. O. Circuit elements with memory: memristors, memcapacitors, and meminductors. *Proc. IEEE*, 2009, vol. 97, no. 10, pp. 1717–1724. DOI: 10.1109/JPROC.2009.2021077
3. Jeong D. S., Thomas R., Katiyar R. S., Scott J. F., Kohlstedt H., Petraru A., Hwang Ch. S. Emerging memories: resistive switching mechanisms and current status. *Rep. Prog. Phys.*, 2012, vol. 75, no. 7, art. no. 076502. DOI: 10.1088/0034-4885/75/7/076502
4. Yang J. J., Strukov D. B., Stewart D. R. Memristive devices for computing. *Nature Nanotech.*, 2013, vol. 8, pp. 13–24. DOI: 10.1038/nnano.2012.240
5. Petrov A., Alekseeva L., Ivanov A., Luchinin V., Romanov A., Chikyov T., Nabatame T. On the way to a neuromorphic memristor computer platform. *Nanoindustry*, 2016, no. 1, pp. 94–109. DOI: 10.22184/1993-8578.2016.63.1.94.109
6. Pershin Yu. V., Ventra M. D. Memory effects in complex materials and nanoscale systems. *Adv. Phys.*, 2011, vol. 60, pp. 145–227. DOI: 10.1080/00018732.2010.544961
7. Tulina N. A., Sirotkin V. V. Electron instability in doped-manganites-based heterojunctions. *Physica C: Superconductivity*, 2004, vol. 400, no. 3–4, pp. 105–110. DOI: 10.1016/j.physc.2003.07.002
8. Tulina N. A., Borisenko I. Yu., Sirotkin V. V. Reproducible resistive switching effect for memory applications in heterocontacts based on strongly correlated electron systems. *Phys. Lett. A*, 2008, vol. 372, no. 44, pp. 6681–6686. DOI: 10.1016/j.physleta.2008.09.015
9. Tulina N. A., Borisenko I. Yu., Sirotkin V. V. Bipolar resistive switchings in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$. *Solid State Communications*, 2013, vol. 170, pp. 48–52. DOI: 10.1016/j.ssc.2013.07.023
10. Tulina N. A., Rossolenko A. N., Shmytko I. M., Kolesnikov N. N., Borisenko D. N., Bozhko S. I., Ionov A. M. Rectification and resistive switching in mesoscopic heterostructures based on Bi_2Se_3 . *Materials Letters*, 2015, vol. 158, pp. 403–405. DOI: 10.1016/j.matlet.2015.06.060
11. Tulina N. A., Rossolenko A. N., Ivanov A. A., Sirotkin V. V., Shmytko I. M., Borisenko I. Yu., Ionov A. M. $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-y}/\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{O}_y$ boundary and resistive switchings in mesoscopic structures on base of epitaxial $\text{Nd}_{1.86}\text{Ce}_{0.14}\text{CuO}_{4-y}$ films. *Physica C: Superconductivity and its Applications*, 2016, vol. 527, pp. 41–45. DOI: 10.1016/j.physc.2016.05.015
12. Sirotkin V. V., Tulina N. A., Rossolenko A. N., Borisenko I. Yu. Numerical simulation of resistive switching in heterostructures based on anisotropic oxide compounds. *Bull. Russ. Acad. Sci. Phys.*, 2016, vol. 80, no. 5, pp. 497–499. DOI: 10.3103/S1062873816050191
13. Tulina N. A., Rossolenko A. N., Shmytko I. M., Kolesnikov N. N., Borisenko D. N., Sirotkin V. V., Borisenko I. Y. Frequency properties of heterostructures based on bismuth selenide upon bipolar resistive switching: Experiments and numerical simulation. *Bull. Russ. Acad. Sci. Phys.*, 2016, vol. 80, no. 6, pp. 672–674. DOI: 10.3103/S1062873816060381
14. Tulina N. A. Memristor properties of high temperature superconductors. URL: <https://arxiv.org/abs/1801.09428>
15. Tulina N. A., Rossolenko A. N., Shmytko I. M., Ivanov A. A., Sirotkin V. V., Borisenko I. Yu., Tulin V. A. Properties of percolation channels in planar memristive structures based on epitaxial films of a $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ high temperature superconductor. *Supercond. Sci. Technol.*, 2018, vol. 32, no. 1, art. no. 015003. DOI: 10.1088/1361-6668/aae966
16. Tulina N. A., Rossolenko A. N., Shmytko I. M., Kolesnikov N. N., Borisenko D. N., Sirotkin V. V., Borisenko I. Y., Tulin V. A. Studying the dynamic effects in memristive structures based on bismuth selenide: does a memristor need a shuttle tail? *Bull. Russ. Acad. Sci. Phys.*, 2019, vol. 83, no. 6, pp. 740–744. DOI: 10.3103/S1062873819060340
17. Tulina V. A., Rossolenko A. N., Shmytko I. M., Ivanov A. A., Ionov A. M., Bozhko S. I., Borisenko I. Yu., Sirotkin V. V., Tulin V. A. Functional properties of anisotropic perovskite compounds in memristor structures for application in electronics. *Nanoindustry*, 2019, no. 5, pp. 237–240. URL: http://www.nanoindustry.su/files/article_pdf/7/article_7591_5.pdf
18. Marchuk G. I. *Metody vychislitel'noi matematiki* [Methods of Computational Mathematics]. Moscow: Nauka, 1977, 456 p. (In Russ.)
19. Trottenberg U., Oosterlee C. W., Schüller A. Multigrid. London: Acad. Press, 2001. 631 p.
20. Sirotkin V. V. Highly efficient decomposition algorithm for modeling thermal modes of powerful transistors. *Fundamental'nye problemy radioelektronnogo priborostroeniya*, 2016, vol. 16, no. 3, pp. 181–183. (In Russ.)

Acknowledgments. This work was supported by the RFBR grants No. 19–29–03011mk and No. 19–29–03021mk.

Received December 26, 2019

УДК 537.622:544.015.4

Нелинейно—динамический подход в анализе неустойчивости параметров мемристора*

© 2019 г. И. В. Матюшкин§

*АО «НИИ молекулярной электроники»,
1-й Западный проезд, д. 12/1, Зеленоград, Москва, 124460, Россия*

Аннотация. Представлен общий комплекс идей, связанных с моделированием мемристоров. Мемристор рассматривается как частично упорядоченная физико—химическая система, находящаяся, согласно нелинейной динамики, в пределах «края хаоса». Логико—историческая взаимосвязь физики мемристоров, нелинейной динамики и нейроморфных систем иллюстрируется в виде схемы. Нелинейность разделена нами на внешнюю, когда описывается поведение электрической цепи, содержащей мемристор, и внутреннюю, обусловленную процессами в объеме филамента. В рамках имитационного моделирования обращается внимание на коннекционистский подход, известный в теории нейронных сетей, но применимый для описания эволюции филамента как динамики сети ловушек, связанных электрически и квантово—механически. Состояние каждой ловушки дискретно, а сама она называется «осциллятор». Указывается на прикладное значение теории решеток связанных осцилляторов. Протекание через филамент тока большой плотности может приводить к необходимости учета и дискретных процессов (генерация ловушек), и непрерывных процессов (введение в модель элементов зонной теории твердого тела).

Однако далее развивается компактная модель, в которой состояние такой сети агрегировано до трех фазовых переменных: длина филамента, его суммарный заряд и локальная температура. Несмотря на кажущийся физический смысл, все переменные имеют формальный характер, присущий обычно параметрам компактных моделей. Модель состоит из одного алгебраического уравнения, двух дифференциальных и одного уравнения интегральной связи и наследована из простейшей модели Струкова. Поэтому в ней используется подход функции окна. Указывается, что, согласно теореме Пуанкаре—Бендиксона, этого достаточно для объяснения неустойчивости четырех ключевых параметров (напряжений переключения и сопротивлений) при циклировании мемристора. На небольшой выборке экспериментальных данных проанализированы Фурье—спектры временного ряда этих параметров. Данные относятся к структуре $\text{TiN}/\text{HfO}_x/\text{Pt}$ ($0 < x < 2$). Предварительный вывод, требующий дальнейшей проверки, заключается в преобладании низких частот и стохастичности появления частот.

Ключевые слова: мемристор, нелинейная динамика, коннекционизм, компактная модель, циклирование

Введение

В настоящее время активно расширяется сфера применения мемристоров в СБИС, в частности, в перспективных нейроморфных системах [1—3]. Мемристоры на основе резистивного эффекта используются и для формирования весовых коэффициентов синаптических связей, и в составе «тела» искусственного нейрона, что сдерживается пока слабой воспроизводимостью [3] свойств мемристора (от ячейки к ячейке и при циклировании одной).

Матюшкин Игорь Валерьевич§ — канд. физ.—мат. наук, старший научный сотрудник отдела функциональной электроники, e-mail: imatyushkin@niime.ru

§ Автор для переписки

* Статья подготовлена по материалам доклада, представленного на I-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 21—23 октября 2019 г.

Тем не менее за последние десять лет уже накоплен определенный опыт создания как точных, так и компактных моделей мемристора [4—6]. Компактные модели допускают присутствие абстрактных параметров, далеких от физической интерпретации, и удобны для схемотехнических расчетов, требующих быстрой.

Целью статьи является: во—первых, развитие идей по моделированию внутренней нелинейной динамики мемристора; во—вторых, в рамках разработанной компактной модели учет неустойчивости его параметров при циклировании; в—третьих, выявление закономерностей в Фурье—спектре дискретного временного ряда, полученного из эксперимента.

Под циклированием мы понимаем (отклик мемристора на) такой подаваемый с периодом T сигнал напряжения, что мемристор проходит все свои мультистабильные состояния. Физическая реали-

зация мемристоров часто дается в виде структуры «металл—диэлектрик—металл» (МДМ, рис. 1). Строго говоря, следует делать различие между мемристором и мемристивным элементом, поскольку первый есть элемент электрической цепи, подразумевающий средства подачи напряжения и периферию, а второй лишь входит в состав первого. Для простоты пренебрежем этим различием в пользу узкого понимания.

Междисциплинарные связи. Мультистабильность. Хаос

По нашему мнению, вполне допустимо, а иногда даже полезно, рассматривать отдельно друг от друга мемристоры, нелинейную динамику и нейроморфные вычисления. Мемристор определяем, по Википедии, «как пассивный элемент в микроэлектронике, способный изменять свое сопротивление в зависимости от протекавшего через него заряда (интеграла тока за время работы)» и анализируем только электронно-ионные процессы, обеспечивающие такое его поведение. Нелинейную динамику считаем «зонтичной» конструкцией, придуманной математиками для обобщения экзотических решений в области систем обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающих «по недоразумению» какие-то физические процессы. Область нейроморфных вычислений сосредоточена сугубо на информационных аспектах искусственных нейронных сетей и пренебрегает вопросами физической реализации.

Однако существует взаимосвязь этих областей, олицетворенная в фигуре Леона Онг Чуа [7]. Поэтому уместно составить с учетом географии персонализированную логико-историческую схему такой взаимосвязи, как она представляется автору (рис. 2).

Внешняя нелинейность проявляется через динамику той электрической цепи [8], в состав которой введен мемристор — это один из истоков идею Чуа. Но возможна и внутренняя нелинейность, связанная с динамикой одиночного филамента и проявляющаяся через циклирование [9]. Эту нелинейность в смысле «среднего по времени» на формальном уровне и при некоторых конкретизациях рассмотрели Першин и Слипко в совсем недавних работах [10, 11]. Безусловно, внутренняя нелинейность порождает внешнюю.

По нашему мнению, мемристор является хорошим примером системы, находящейся на «краю хаоса» (*Edge of Chaos*) [12], т. е. поведение которой балансирует между абсолютным порядком и непредсказуемым хаосом — в данном случае из-за наличия мультистабильности. Данная мультистабильность, которую часто объясняют на примере кривой энергии Гиббса с несколькими неглубоки-

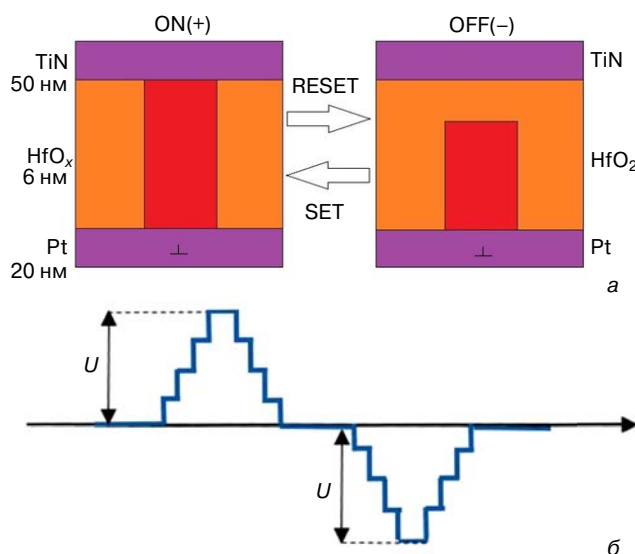


Рис. 1. Мемристивный элемент, взятый за типовой, и схема его циклирования:

а — общая геометрия с указанием области филамента и состояний ON-OFF; б — схема переключения состояний

Fig. 1. The memristive element, taken as a typical one, and its cycling scheme:

(a) general geometry with indication of the filament area and ON-OFF states, (b) state switching diagram

ми локальными минимумами, проистекает из-за частичной упорядоченности физико-химической системы (аналогия с частично упорядоченным множеством в математике). В качестве примера приведем стекло или, если взять микроэлектронику, SiO_2 , субоксиды SiO_x или оксинитридные слои $\text{Si}_3\text{N}_{4-x}\text{O}_x$. Для оксидов переходных металлов, используемых в резистивной памяти или сегнетоэлектриках, она связана как с переменной валентностью атома металла, так и нарушениями на расстояниях среднего порядка в, как правило, поликристаллической структуре пленки. Область филамента можно рассматривать как распределенную структуру ловушек и неоднородностей, и для создания точных моделей принципиально важно учитывать этот подход (рис. 3). Есть примеры, наподобие инженерии точечных дефектов, когда неоднородности искусственно вводятся в слой диэлектрика, чтобы приблизить его к краю хаоса. Удобно назвать такие неоднородности «осцилляторами» [13, 14]. Получается сеть, связанная прежде всего путем туннелирования; отсюда релевантность механизма прыжковой проводимости, модели Пула—Френкеля. Однако следует предостеречь от чрезмерной абсолютизации; при больших плотностях тока скорее всего более предпочтительна концепция зонной диаграммы, и уже само протекание тока влияет на количество ловушек. По-видимому, необходим синтез обеих точек зрения.

С формальной точки зрения мультистабильность представляет собой особое свойство коннекционистской системы, связанной с множественностью конфигураций [16] сети и вероятностной динамикой

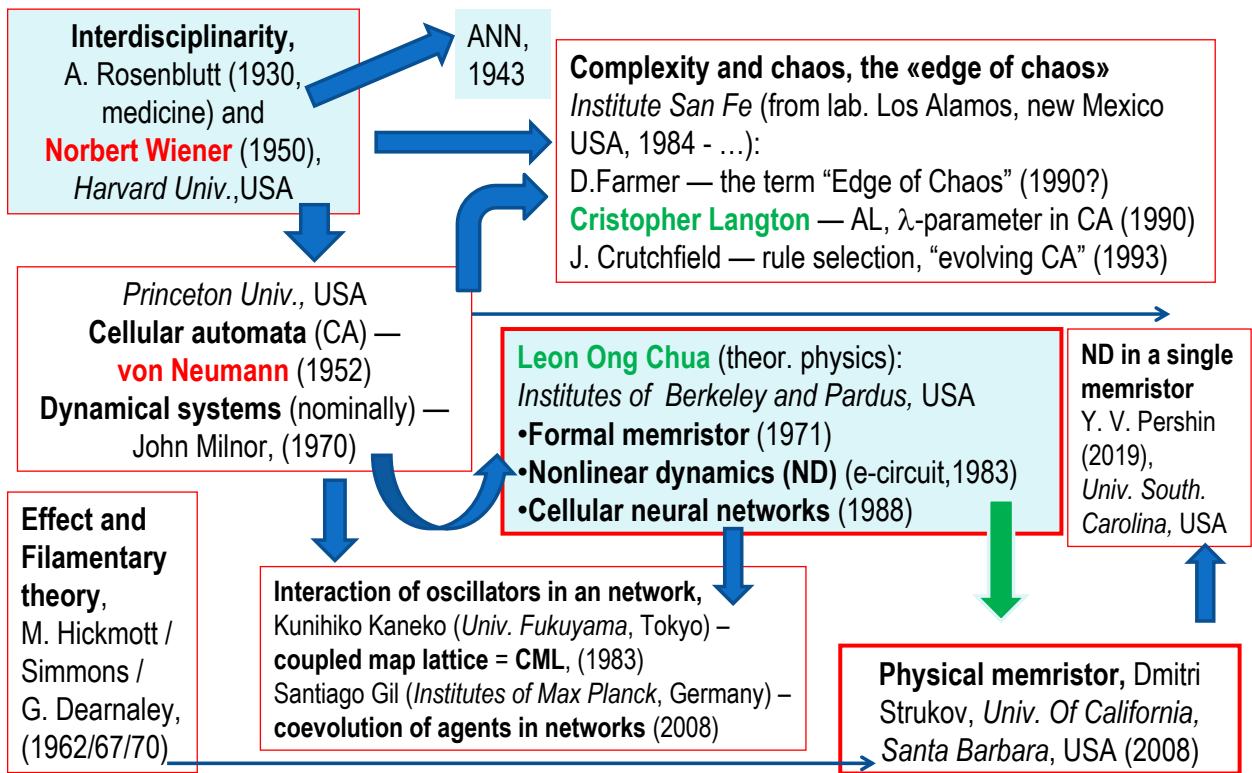


Рис. 2. Взаимосвязи нелинейной динамики, мемристоров и нейроморфных вычислений.

ANN — искусственная нейронная сеть, 1943 г. отсылает к формальному нейрону МакКаллока—Питса. При этом первые модели нейронов, разработанные физиологами, следует датировать 1908 г. В СССР механизм обратимого переключения проводимости исследовался в конце 1970–х гг. В области нелинейной динамики, начиная со времен Пуанкаре, работало множество ученых; мы выделили John Willard Milnor за его учебник по голоморфной динамике, т. е. динамике комплекснозначных переменных, акцентированный на вопросы топологии; AL — искусственная жизнь. Красным выделены великие ученые, зеленым — ученые, имеющие яркие достижения

Fig. 2. Interconnections of nonlinear dynamics, memristors and neuromorphic computations.

ANN is Artificial Neural Network, 1943 refers to the formal McCulloch—Pitts neuron. At the same time, the first models of neurons developed by physiologists should be dated to 1908. In the USSR, the mechanism of reversible conduction switching was studied in the late 1970s. Many scientists have worked in the field of nonlinear dynamics since the time of Poincaré; we singled out John Willard Milnor for his textbook on holomorphic dynamics, that is, dynamics of complex-valued variables, with a focus on topology; AL is Artificial Life.

Great scientists are highlighted in red, scientists with outstanding achievements are highlighted in green

переходов в них, что выводит нас на проблематику информационной и физической энтропий. По Креффилду [12], «a system that is on the edge of chaos has the largest information capacity, and therefore the highest speed/efficiency of calculations». В случае нейроморфной системы на основе мемристоров мы имеем дело с внешней мультистабильностью, а в случае одиночно мемристора — с внутренней. Развиваемое представление об «осцилляторах» близко к модели Курамото (см., например, [17]). Нелинейная динамика такой системы может быть как регулярной, так и хаотической, а также принадлежать в узкой области значений параметров к промежуточному случаю «края хаоса» (рис. 4).

Не следует думать, что область нелинейной динамики оторвана от физико–технической практики микроэлектроники. Физический пример «удвоения периода» был недавно найден Эверхартом [18] в титанате бария, т. е. в материале, близком к сегнетоэлектричеству и резистивной памяти.

Важную роль играет феномен детерминированного, или динамического, хаоса. Из обилия примеров

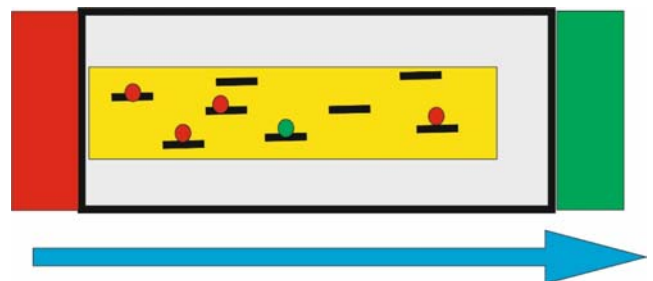


Рис. 3. Коннекционистский взгляд на структуру филамента.

Желтым цветом маркирована его область между двумя электродами, условно показанными красным и зеленым прямоугольниками. «Осциллятор» принимает дискретные значения 0,1 или –1,0,1 (анион, нейтральный атом, катион), или больше (6, согласно [15]). Красный кружок — избыточный электрон, зеленый — отсутствующий. Синяя стрелка — направление тока электронов между электродами

Fig. 3. Connectionist view of the filament structure.

Its area between two electrodes, conventionally shown by red and green rectangles, is marked in yellow. The “oscillator” takes discrete values of 0.1 or –1,0,1 (anion, neutral atom, cation), or more (6, according to [15]). Red circle is excess electron, green is missing. Blue arrow is the direction of the electron current between the electrodes

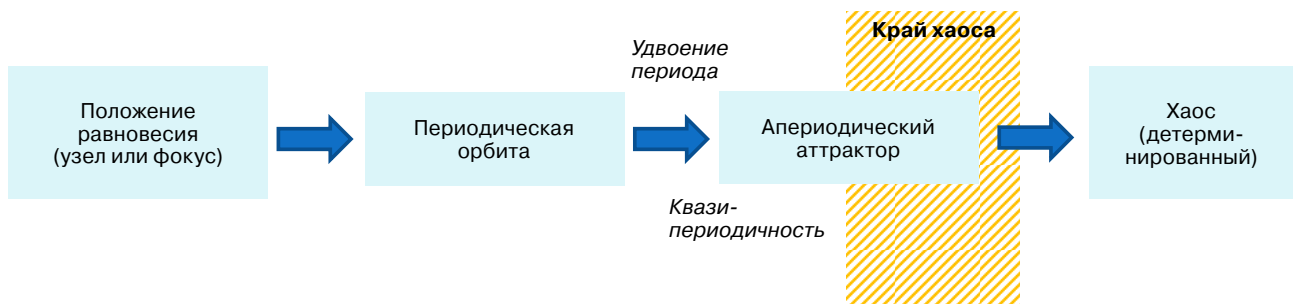


Рис. 4. Режимы поведения динамической системы. «Край хаоса» как граница регулярного и хаотического поведения
Fig. 4. Modes of behavior of a dynamic system. "Edge of chaos" as the border of regular and chaotic behavior

выберем в качестве иллюстрации псевдослучайную последовательность (знак {} означает операцию взятия дробной части числа):

$$x_{n+1} = f(x_n), \quad f(x) = \left\{ \frac{ax}{x+b} \right\}, \quad \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 2 \end{pmatrix}, \quad x_0 = 0,9$$

При таких начальных данных имеет место детерминированный хаос, причем Фурье-разложение (точнее, быстрое дискретное преобразование) временного ряда также выглядит хаотическим. Заметим, что для другого начального условия $x_0 = 1/2$ динамика регулярна: $x_n \rightarrow 0$.

Из такого банального вывода нелинейной динамики следует практическое следствие — управление мемристором за счет выбора начального состояния (процедура постформовки, или тренировки) делает достижимой воспроизводимость его работы. В частности, как показано Лебедевым [19] (метод «Reset Verify»), подача каскада импульсов напряжения делает при дальнейшем циклировании поведение четырех ключевых его параметров стабильным. По сообщениям двух независимых исследователей, А. Н. Михайлова (Нижегородский университет) и А. М. Маркеева (МФТИ), для мемристивного элемента, созданного на основе Ta_2O_5 , стабилизация, т.е. достижение устойчивого положения, достигается примерно за 200 циклов переключения.

Компактная модель

Далее отойдем от точной модели мемристора в сторону создания компактной однофилламентарной модели для простейшего мемристора с двумя уровнями сопротивления. Сразу обратим внимание на следствие из теоремы Пуанкаре—Бендиксона — в системе автономных дифференциальных уравнений хаотическая динамика возможна лишь при ее размерности $m \geq 3$. Следовательно, если мы хотим описать систему «осцилляторов» в области филамента какими-то агрегированными переменными, то для объяснения неустойчивости при циклировании необходимо использовать 2, а лучше 3, внутренних переменных (ослабление ограничения до 2 мы относим на дискретность отсчетов $\langle (V_{\text{SET}}, V_{\text{RESET}}, R_{\text{ON}}, R_{\text{OFF}})(n) \rangle$, где n — номер цикла, V_{SET} — напряжение

записи, V_{RESET} — напряжение стирания, R_{ON} — низкий уровень сопротивления, R_{OFF} — высокий уровень сопротивления). Сформулируем основные положения, лежащие в основе разработанной компактной модели:

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

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

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

P4. Общей причиной изменения «фиксированного» заряда есть суммарный электронный заряд, протекший через мемристор в обоих направлениях

за время от начала цикла, т.е. $Q(t) = Q(0) + F \left(\int_0^t I(t) dt \right)$,

$t \in [0; T]$, где $Q(0)$ — первоначальный заряд, накопленный в начале периода; допускается, что заряд Q дискретная величина, т.е. может измеряться в единицах элементарного заряда $Q = Ne$;

P5. Весь заряд Q сосредоточен в центре филамента;

P6. Третьей фазовой переменной является локальная температура филамента.

Два последних положения представляются дополнениями к ядру компактной модели, чрезмерной идеализацией. Во-первых, некорректно применять равновесные понятия (локальная температура θ) для наноразмерной области. Во-вторых, очевид-

но, заряд распределен по всей области филамента, и, скорее всего, неравномерно. Наша модель основана на модели Струкова [20], — назовем ее стандартной, — ничего не добавляя к формальному отражению физических процессов, кроме положений P1÷P6. Следует отметить, что первая переменная в общем известна, а семантика второй переменной дискуссионна. В частности, авторы [21] взяли за нее диаметр филамента; на наш взгляд, поскольку очевидна корреляция длины и ширины филамента при его росте, такое решение, напрашивающееся на первый взгляд, неверно.

Выпишем формальные соотношения модели. Пусть D, w_{form} — толщина оксидного слоя и неснижаемый размер филамента после электроформовки; $0 \leq x \leq 1$ — мера длины филамента ($x = 1$ в состоянии ON и $x = 0$ при наибольшем зазоре, т. е. $w = w_{\text{form}}$), $R_{\text{form}}, R_{\text{ON}}(0), R_{\text{OFF}}(0)$ — сопротивления соответственно остова филамента, в состояниях ON и OFF до начала циклирования. Тогда фазовая переменная $x(t)$ определит текущее значение сопротивления по формуле последовательного соединения проводников для трех участков

$$R(t) = R_{\text{form}} + (R_{\text{ON}}(0) - R_{\text{form}})x(t) + (R_{\text{OFF}}(0) - R_{\text{form}})(1 - x(t)). \quad (1)$$

Текущее значение протекающего через мемристор тока задается законом Ома, но при сдвиге напряжения на некоторую величину, зависящую от текущего заряда филамента $N(t)$ и имеющую вид кулоновского барьера

$$I(t) = \frac{1}{R(t)} \left(V(t) - k_1 \frac{N(t)}{\frac{x(t)}{2} + k_0} \right), \quad (2)$$

$$k_1 \equiv \alpha \frac{e}{4\pi\epsilon_0(D - w_{\text{form}})}, \quad k_0 \equiv \frac{w}{D - w_{\text{form}}},$$

e — элементарный заряд; $0 < \alpha < 1$ — поправочный коэффициент; $V(t), t \in (T(n-1); nT)$ — развертка напряжения. Это самый простой способ учета P5. Другой путь учета заряда связан с идеей, что линии тока искривляются, обтекая заряд Q по сторонам, и, таким образом, уменьшается эффективная площадь филамента, что приводит к возрастанию его сопротивления. Уравнение стандартной модели на внутреннюю переменную расщепляется на два, по форме сходных друг с другом:

$$\left\{ \frac{dx}{dt} = k_2 f_w(x(t)) I(t), \frac{dN}{dt} = k_3 v(N) I(t) \right\}, \quad (3)$$

f_w — функция окна, стандартное выражение для которой степенное $f_w(x) = 1 - (2x - 1)^{2p}$, $p \in \mathbb{N}$; $v(N)$ — вводимая нами впервые функция захвата, удовлетворяющая условиям (4) и которую можно задать в виде (5)

$$0 \leq v(N) \leq 1, v(N_{\text{max}}) = 0, v(0) = v_0 < 1, \quad (4)$$

$$v(N) = v_0 \left(1 - \frac{N}{N_{\text{max}}} \right) \Leftrightarrow v(N) = v_0 \left[\exp \left(1 - \frac{N}{N_{\text{max}}} \right) - 1 \right]. \quad (5)$$

Постулируется, что существует максимальная величина N_{max} заряда накопления в объеме филамента. Для функции захвата целесообразно ввести параметрическую асимметрию по отношению к знаку заряда, особенно с учетом характерной асимметрии кривой гистерезиса (рис. 5) для биполярного мемристора. Коэффициенты функции захвата имеют квантово-механическую природу и связаны с локальной температурой филамента θ предположительно по закону Аррениуса. Поэтому выпишем дополнительное соотношение на третью фазовую переменную, динамика которой является «долговременной» по сравнению с динамикой тока и заряда

$$\theta_{n+1} = \theta_n + \int_0^T \kappa I(t, N)^2 R(x(t), N) dt - k_4 (\theta_n - \theta_0). \quad (6)$$

Оно основано на законах Фурье (θ_0 — температура подложки) и Джоуля—Ленца. Локальная температура представлена отсчетами в начале цикла, т. е. $t = 0, T, 2T, 3T, \dots$ Таким образом, компактная модель состоит из одного алгебраического уравнения (2), двух дифференциальных (3) и одного интегральной связи (6).

Методика экстракции при циклировании. Фурье-спектры

Важно обратить внимание на сочетание кратковременных и долговременных факторов, что определяет характерное время изменения напряжения при циклировании. Например, атомарно-ионные процессы, такие как диффузия кислородных вакансий (отражена в (3), первое уравнение), по постоянной времени должны быть сравнимы с электрическими и электронными. Если же это не так, и динамика филамента не успевает за вариациями напряжения, то появляются биения и вогнутость кривой гистерезиса (рис. 5).

Существует также асимметрия в точности определения пары $R_{\text{ON/OFF}}$. Принятая нами за стандарт методика заключается в поиске экстремума на участках гистерезисной кривой $I(V)$ для dI/dV . Эту методику можно принять и для расчетных данных.

Обратим внимание на переход от внутренних переменных модели к внешним, экспериментально наблюдаемым, т. е. $\langle V_{\text{SET}}, V_{\text{RESET}}, R_{\text{ON}}, R_{\text{OFF}} \rangle(n)$. Ме-

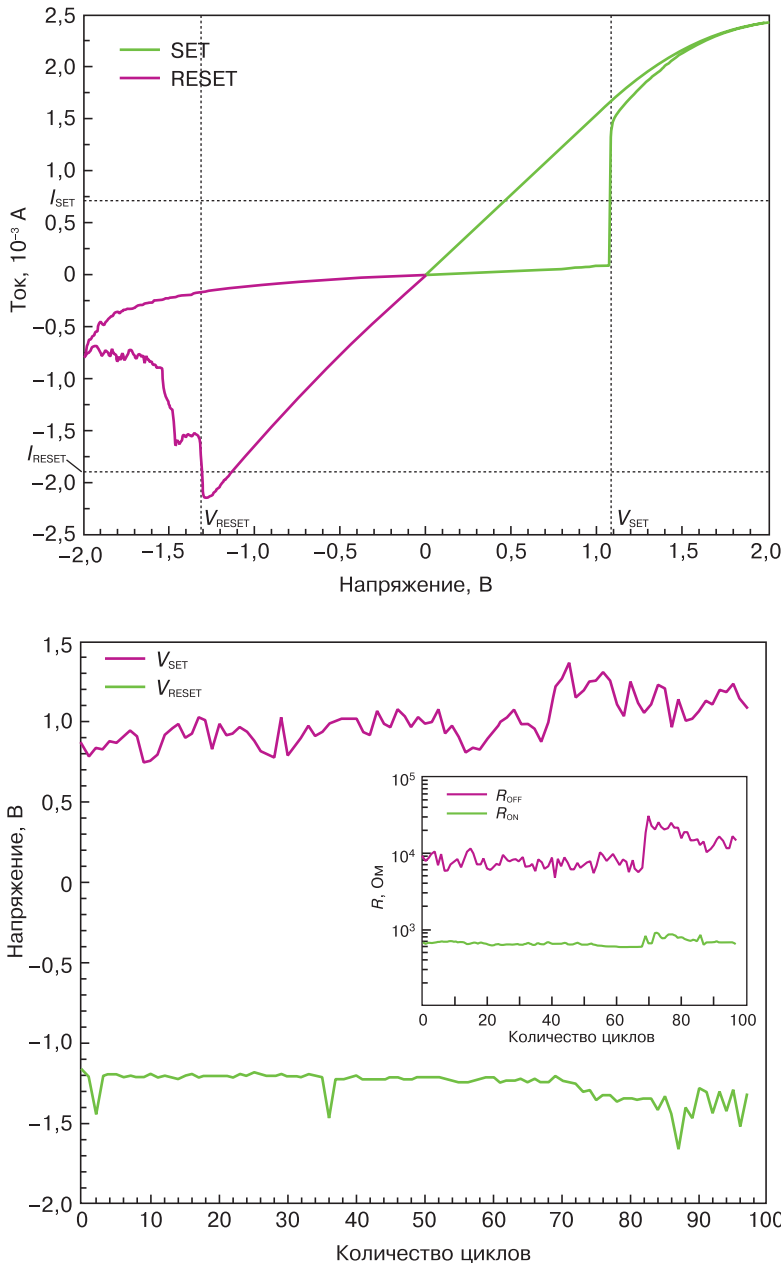


Рис. 6. Динамика «от цикла к циклу» напряжений переключения и сопротивлений (вставка). Данные эксперимента

Fig. 6. Dynamics «from cycle to cycle» of switching voltages and resistances (insert). Experiment data

тодика измерений и одновременно такого перехода формализуется так

$$t_{\text{SET,RESET}}^*: \min, \max_{0 \leq t \leq T} \left[\left| \frac{1}{a(t)} \frac{dI}{dt} \right| \right], a(t) \equiv \frac{dV}{dt}, t: a(t) \neq 0,$$

$$t_{\text{SET,RESET}}^* \rightarrow \begin{pmatrix} x \\ N \end{pmatrix}_{t=t^*} \rightarrow \begin{pmatrix} R(t^*) = R_{\text{ON,OFF}} \\ V(t^*) = V_{\text{SET,RESET}} \end{pmatrix}, \theta(T). \quad (7)$$

Модель (1—6) можно испытывать в непрерывном времени, проводя процедуру (7) в каждом цикле и порождая дискретную последовательность отсчетов. Эту последовательность, полученную либо экспериментально, либо теоретически, можно под-

Рис. 5. Типичная и реалистичная кривая гистерезиса на одном цикле переключения (100-й цикл). Точные модели обязаны учитывать особенности негативной нагрузки и электронно-ионных процессов, компактные модели могут их не предсказывать. Значение V_{RESET} имеет худшую точность, чем V_{SET}

Fig. 5. Typical and realistic hysteresis curve for one switching cycle (100th cycle). Exact models must take into account the peculiarities of negative loading and electron-ion processes, compact models may not predict them. V_{RESET} has poorer accuracy than V_{SET}

вергать обработке и анализу, например, используя дискретное преобразование Фурье.

Приведем пример для одной из структур (рис. 1) с толщиной оксидного слоя 4 нм, биполярном переключении и циклировании треугольными импульсами со следующими параметрами:

- амплитуда по напряжению: $U = 2,0$ В;
- шаг по напряжению: 0,01 В;
- всего измерений на один ступенчатый импульс: 4000;
- всего измерений на цикл считывания: 16000;
- длительность измерения одной точки (одной ступеньки): ~5,4 мс;
- длительность цикла считывания: $5,4 \text{ мс} \cdot 16000 = 86,4 \text{ с}$;

Для взятия Фурье-образа нормализованного сигнала, т. е. $u \rightarrow \frac{(u - \bar{u})}{(u_{\text{max}} - u_{\text{min}})}$,

где $u = u(n)$, $n = 1, \dots, m \sim 100+150$ — исходный временной ряд, использовали быстрое преобразование Фурье (команда **fft** MATLAB). Единице на шкале частот соответствует естественная частота $\omega_1 = 2\pi/m$. Заметим, что нет возможности отслеживать иррациональные частоты, прежде всего в промежутке низких частот $\omega \in (\omega_1; \omega_2 = 2\omega_1)$. Низкие частоты преобладают (рис. 7), однако это

отвечает теории рядов Фурье. Является ли данный феномен артефактом метода или действительным феноменом, нам сложно сказать из-за недостаточной выборки. Для разных ячеек спектры Фурье многообразны, не подчиняясь какой-либо общей закономерности. Еще раз отметим, что для кривой V_{RESET} погрешность методики экстракции сравнима с величиной девиации.

Несмотря на отрицательный результат (поскольку закономерности не обнаружено), на основании экспериментальных данных можно сделать предварительный вывод о том, что не наблюдается ни периодических, ни квазипериодических колебаний, т. е. режим динамики хаотический.

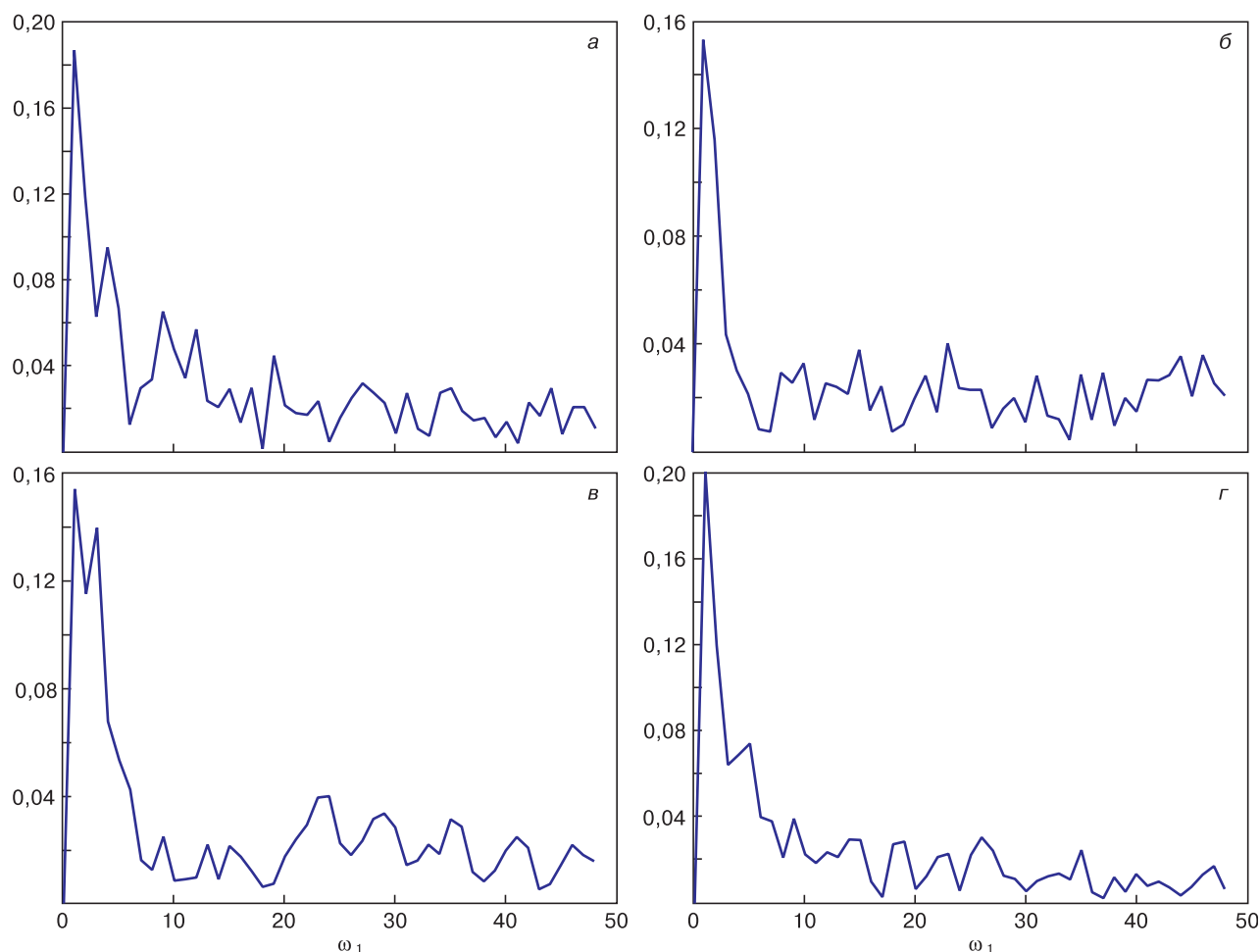


Рис. 7. Фурье-спектры на основе данных рис. 6 (100 циклов): а — V_{SET} ; б — V_{RESET} ; в — R_{ON} ; г — R_{OFF}

Fig. 7. Fourier spectra based on the data in Fig. 6 (100 cycles): (a) V_{SET} , (б) V_{RESET} , (в) R_{ON} , (г) R_{OFF}

Заключение

Впервые выдвинут абстрактный тезис о том, мемристивный элемент представляет пример частично упорядоченной структуры, поведение которой лежит в пределах «края хаоса». Экспериментально наблюдаемая величина протекающего через мемристор тока зависит, но не определяется полностью, от системой ловушечных уровней, заполняющих объем области филамента. Поэтому модели мемристора, стремящиеся к точности и физическим обоснованиям, должны учитывать особенности коннекционистского подхода, его синтеза с нелинейно-динамическим и энтропийно-информационное описание коннекционистских систем.

Мы впервые рассмотрели работу одиночного мемристивного MDM-элемента при циклировании с точки зрения нелинейной динамики и феномена детерминированного хаоса. Предложенные модельные соотношения не отражают в полной мере сложность электрохимических превращений в тонком активном слое и ориентированы на вычислительную эффективность. Наша модель не учитывает деградационных изменений. С другой стороны, мы

допускаем, что при правильном выборе функций окна и захвата модель сможет продемонстрировать перехода в режим «*fatigue*», наступающем на практике обычно после десятка тысяч циклов. Развитие модели позволит более осмысленно подходить к симуляции циклирования мемристивного элемента без привлечения усеченного распределения Гаусса или другого, взятого «по умолчанию».

Сделанный спектральный анализ относится к ограниченному числу образцов, требует дополнения (например, для мемристивных элементов, изготовленных по различным технологиям и толщинами слоев) и имеет лишь иллюстративный характер. Он не позволяет ни доказать, ни опровергнуть основную посылку доклада. Нами не было выявлено каких-то явных закономерностей в Фурье-спектрах. Единственный вывод, который, предположительно, можно сделать, состоит в доминировании низкочастотной области спектра.

Библиографический список

1. Тарков М. С. Реализация нейронной WTA-сети на мемристивном кроссбаре // Прикладная дискретная математика. Приложение. 2015. Вып 8. С. 151—154. DOI: 10.17223/2226308X/8/59
2. Wang Z., Wu H., Burr G. W., Hwang C. S., Wang K. L., Xia Q., Yang J. J. Resistive switching materials for information processing

// Nature Rev. Mater. 2020. V. 5. P. 173—195. DOI: 10.1038/s41578-019-0159-3

3. Zhao M., Gao B., Tang J., Qian H., Wu H. Reliability of analog resistive switching memory for neuromorphic computing // Appl. Phys. Rev. 2020. V. 7, Iss. 1. P. 011301(16pp.). DOI: 10.1063/1.5124915

4. Benderli S., Wey T. A. On SPICE macromodeling of TiO_2 memristors // Electronics Lett. 2009. V. 45, N 7. P. 377—379. DOI: 10.1049/EL.2009.3511

5. Pickett M. D., Strukov D. B., Borghetti J. L., Yang J. J., Snider G. S., Stewart D. R., Williams R. S. Switching dynamics in titanium dioxide memristive devices // J. Appl. Phys. 2009. V. 106, Iss. 7. P. 074508. DOI: 10.1063/1.3236506

6. Yakopcic C., Taha T. M., Subramanyam G., Pino R. E., Rogers S. A memristor device model // IEEE Electron Device Letters. 2011. V. 32, Iss. 10. P. 1436—1438. DOI: 10.1109/LED.2011.2163292

7. Chua L. Memristor. The missing circuit element // IEEE Transactions on Circuit Theory. 1971. V. 18, Iss. 5. P. 507—519. DOI: 10.1109/TCT.1971.1083337

8. Chang H., Song Q., Li Y., Wang Z., Chen G. Unstable limit cycles and singular attractors in a two-dimensional memristor-based dynamic system // Entropy. 2019. V. 21, N 4. P. 415 (10pp.). DOI: 10.3390/e21040415

9. Mikhayev R., Teplov G., Matyushkin I. Compact model of nonlinear dynamics while the cycling of a memristor // 2019 IEEE Conference of Russian Young Researchers in Electrical and Electronic Engineering (EIConRus). St. Petersburg; Moscow (Russia), 2019. P. 2057—2061. DOI: 10.1109/EIConRus.2019.8657191

10. Pershin Y. V., Slipko V. A. Dynamical attractors of memristors and their networks // EPL (Europhysics Letters). 2019. V. 125, N 2. P. 20002. DOI: 10.1209/0295-5075/125/20002

11. Pershin Y. V., Slipko V. A. Bifurcation analysis of a TaO memristor model // J. Phys. D: Appl. Phys. 2019. V. 52, N 50. P. 505304. DOI: 10.1088/1361-6463/ab4537

12. Crutchfield J. P., Young K. Computation at the onset of chaos // Entropy, Complexity, and the Physics of Information. Ed. by W. Zurek. Addison-Wesley, Reading, 1990. P. 223—269. URL: <http://csc.ucdavis.edu/~cmg/papers/CompOnset.pdf>

13. Csaba G., Porod W. Coupled oscillators for computing: A review and perspective // Appl. Phys. Rev. 2020. V. 7, Iss. 1. P. 011302. DOI: 10.1063/1.5120412

14. Malagarriga D., García-Vellisca M. A., Villa A. E. P., Buldú J. M., García-Ojalvo J., Pons A. J. Synchronization-based computation through networks of coupled oscillators // Front. Comput. Neurosci. 2015. V. 9. P. 97(13pp.). DOI: 10.3389/fncom.2015.00097

15. Islamov D. R., Gritsenko V. A., Perevalov T. V., Pustovarov V. A., Orlov O. M., Chernikova A. G., Markeev A. M., Slesazek S., Schroeder U., Mikolajick T., Krasnikov G. Ya. Identification of the nature of traps involved in the field cycling of $\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ -based ferroelectric thin films // Acta Materialia. 2019. V. 166. P. 47—55. DOI: 10.1016/j.actamat.2018.12.008

16. Panda D., Sahu P. P., Tseng T. Y. A collective study on modeling and simulation of resistive random access memory // Nanoscale Res. Lett. 2018. V. 13, N 1. Art. No. 8. DOI: 10.1186/s11671-017-2419-8

17. Miritello G., Pluchino A., Rapisarda A. Central limit behavior in the Kuramoto model at the «Edge of Chaos» // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 2009. V. 388, Iss. 23. P. 4818—4826. DOI: 10.1016/j.physa.2009.08.023

18. Everhardt A. S., Damerio S., Zorn J. A., Zhou S., Domingo N., Catalan G., Salje E. K. H., Chen L.-Q., Noheda B. Periodicity-doubling cascades: direct observation in ferroelastic materials // Phys. Rev. Lett. 2019. V. 123, Iss. 8. P. 087603(6pp.). DOI: 10.1103/PhysRevLett.123.087603

19. Orlov O., Murashev V., Lebedev A., Orlov V., Ivanov S. Features of the improving of the HfO_2 ReRAM cells characteristics reproducibility // 2019 IEEE Conference of Russian Young Researchers in Electrical and Electronic Engineering (EIConRus). St. Petersburg; Moscow (Russia), 2019. P. 2087—2089. DOI: 10.1109/EIConRus.2019.8657230

20. Strukov D. B., Snider G. S., Stewart D. R., Williams R. S. The missing memristor found // Nature. 2008. V. 453. P. 80—83. DOI: 10.1038/nature06932

21. Kim S., Kim H.-D., Choi S.-J. Compact two-state-variable second-order memristor model // Small. 2016. V. 12, Iss. 24. P. 3320—3326. DOI: 10.1002/smll.201600088

Выражаю благодарность сотрудникам АО НИИМЭ О. М. Орлову и А. О. Лебедеву за предоставленные экспериментальные данные по циклированию мемристорных структур на основе оксида гафния.

Статья поступила в редакцию 26 декабря 2019 г.

Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering. 2019, vol. 22, no. 4, pp. 253—261. DOI: 10.17073/1609-3577-2019-4-253-261

Nonlinear dynamic approach to the analysis of memristor parameters instability

I. V. Matyushkin^{1,§}

¹ JSC Molecular Electronics Research Institute,
12/1 1st Zapadny Proezd, Zelenograd, Moscow 124460, Russia

Abstract. A general set of ideas related to the memristors modeling is presented. The memristor is considered to be a partially ordered physical and chemical system that is within the “edge of chaos” from the point of view of nonlinear dynamics. The logical and historical relationship of memristor physics, nonlinear dynamics, and neuromorphic systems is illustrated in the form of a scheme. We distinguish the nonlinearity into external ones, when we describe the behavior of an electrical circuit containing a memristor, and internal ones, which are caused by processes in filament region. As a simulation model, the attention is drawn to the connectionist approach, known in the theory of neural networks, but applicable to describe the evolution of the filament as the dynamics of a network of traps connected electrically and quantum-mechanically. The state of each trap is discrete, and it is called an “oscillator”. The applied meaning of the theory of coupled maps lattice is indicated. The high-density current through the filament can lead to the need to take into account both discrete processes (generation of traps) and continuous processes (inclusion of some constructions of solid body theory into the model).

Information about author:

Igor V. Matyushkin^{1,§}: Cand. Sci. (Phys.-Math.), Senior Researcher (imatyushkin@niime.ru)

[§] Corresponding author

However, a compact model is further developed in which the state of such a network is aggregated to three phase variables: the length of the filament, its total charge, and the local temperature. Despite the apparent physical meaning, all variables have a formal character, which is usually inherent in the parameters of compact models. The model consists of one algebraic equation, two differential equations, and one integral connection equation, and is derived from the simplest Strukov's model. Therefore, it uses the "window function" approach. It is indicated that, according to the Poincaré—Bendixon theorem, this is sufficient to explain the instability of four key parameters (switching voltages and resistances ON/OFF) at a cycling of memristor. The Fourier spectra of the time series of these parameters are analyzed on a low sample of experimental data. The data are associated with the TiN/HfO_x/Pt structure ($0 < x < 2$). A preliminary conclusion that requires further verification is the predominance of low frequencies and the stochasticity of occurrence ones.

Keywords: memristor, nonlinear dynamics, connectionism, compact model, cycling

References

1. Tarkov M. S. Implementation of a neural WTA-network on the memristor crossbar. *Prikl. Diskr. Mat. Suppl.*, 2015, no. 8, pp. 151—154. (In Russ.). DOI: 10.17223/2226308X/8/59
2. Wang Z., Wu H., Burr G. W., Hwang C. S., Wang K. L., Xia Q., Yang J. J. Resistive switching materials for information processing. *Nature Rev. Mater.*, 2020, vol. 5, pp. 173—195. DOI: 10.1038/s41578-019-0159-3
3. Zhao M., Gao B., Tang J., Qian H., Wu H. Reliability of analog resistive switching memory for neuromorphic computing. *Appl. Phys. Rev.*, 2020, vol. 7, no. 1, p. 011301(16pp). DOI: 10.1063/1.5124915
4. Benderli S. Wey T. A. On SPICE macromodeling of TiO₂ memristors. *Electronics Lett.*, 2009, vol. 45, no. 7, pp. 377—379. DOI: 10.1049/EL.2009.3511
5. Pickett M. D., Strukov D. B., Borghetti J. L., Yang J. J., Snider G. S., Stewart D. R., Williams R. S. Switching dynamics in titanium dioxide memristive devices. *J. Appl. Phys.*, 2009, vol. 106, no. 7, p. 074508. DOI: 10.1063/1.3236506
6. Yakopcic C., Taha T. M., Subramanyam G., Pino R. E., Rogers S. A memristor device model. *IEEE Electron Device Letters*, 2011, vol. 32, no. 10, pp. 1436—1438. DOI: 10.1109/LED.2011.2163292
7. Chua L. Memristor. The missing circuit element. *IEEE Transactions on Circuit Theory*, 1971, vol. 18, no. 5, pp. 507—519. DOI: 10.1109/TCT.1971.1083337
8. Chang H., Song Q., Li Y., Wang Z., Chen G. Unstable limit cycles and singular attractors in a two-dimensional memristor-based dynamic system. *Entropy*, 2019, vol. 21, no. 4, p. 415 (10pp). DOI: 10.3390/e21040415
9. Mikhaylov R., Teplov G., Matyushkin I. Compact model of nonlinear dynamics while the cycling of a memristor. In: *2019 IEEE Conference of Russian Young Researchers in Electrical and Electronic Engineering (EIConRus)*. St. Petersburg; Moscow (Russia), 2019, pp. 2057—2061. DOI: 10.1109/EIConRus.2019.8657191
10. Pershin Y. V., Slipko V. A. Dynamical attractors of memristors and their networks. *EPL (Europhysics Letters)*, 2019, vol. 125, no. 2, p. 20002. DOI: 10.1209/0295-5075/125/20002
11. Pershin Y. V., Slipko V. A. Bifurcation analysis of a TaO memristor model. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 2019, vol. 52, no. 50, p. 505304. DOI: 10.1088/1361-6463/ab4537
12. Crutchfield J. P., Young K. Computation at the onset of chaos. In: *Entropy, Complexity, and the Physics of Information*. Ed. by W. Zurek. Addison-Wesley, Reading, 1990, pp. 223—269. URL: <http://csc.ucdavis.edu/~cmg/papers/CompOnset.pdf>
13. Csaba G., Porod W. Coupled oscillators for computing: A review and perspective. *Appl. Phys. Rev.*, 2020, vol. 7, no. 1, p. 011302. DOI: 10.1063/1.5120412
14. Malagarriga D., García-Vellisca M. A., Villa A. E. P., Buldú J. M., García-Ojalvo J., Pons A. J. Synchronization-based computation through networks of coupled oscillators. *Front. Comput. Neurosci.*, 2015, vol. 9, p. 97(13pp). DOI: 10.3389/fncom.2015.00097
15. Islamov D. R., Gritsenko V. A., Perevalov T. V., Pustovarov V. A., Orlov O. M., Chernikova A. G., Markeev A. M., Slesazek S., Schroeder U., Mikolajick T., Krasnikov G. Ya. Identification of the nature of traps involved in the field cycling of Hf_{0.5}Zr_{0.5}O₂-based ferroelectric thin films. *Acta Materialia*, 2019, vol. 166, pp. 47—55. DOI: 10.1016/j.actamat.2018.12.008
16. Panda D., Sahu P. P., Tseng T. Y. A collective study on modeling and simulation of resistive random access memory. *Nanoscale Res. Lett.*, 2018, vol. 13, no. 1, art. no. 8. DOI: 10.1186/s11671-017-2419-8
17. Miritello G., Pluchino A., Rapisarda A. Central limit behavior in the Kuramoto model at the «Edge of Chaos». *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 2009, vol. 388, no. 23, pp. 4818—4826. DOI: 10.1016/j.physa.2009.08.023
18. Everhardt A. S., Damerio S., Zorn J. A., Zhou S., Domingo N., Catalan G., Salje E. K. H., Chen L.-Q., Noheda B. Periodicity-doubling cascades: direct observation in ferroelastic materials. *Phys. Rev. Lett.*, 2019, vol. 123, no. 8, p. 087603(6pp). DOI: 10.1103/PhysRevLett.123.087603
19. Orlov O., Murashev V., Lebedev A., Orlov V., Ivanov S. Features of the improving of the HFO₂ ReRAM cells characteristics reproducibility. In: *2019 IEEE Conference of Russian Young Researchers in Electrical and Electronic Engineering (EIConRus)*. St. Petersburg; Moscow (Russia), 2019, pp. 2087—2089. DOI: 10.1109/EIConRus.2019.8657230
20. Strukov D. B., Snider G. S., Stewart D. R., Williams R. S. The missing memristor found. *Nature*, 2008, vol. 453, pp. 80—83. DOI: 10.1038/nature06932
21. Kim S., Kim H.-D., Choi S.-J. Compact two-state-variable second-order memristor model. *Small*, 2016, vol. 12, no. 24, pp. 3320—3326. DOI: 10.1002/smll.201600088

Acknowledgments. Thanks to O. M. Orlov and A. O. Lebedev, employees of JSC Molecular Electronics Research Institute for the provided experimental data on the cycling of memristor structures based on hafnium oxide.

Received December 26, 2019

УДК 621.365

Основные научно–технические проблемы применения гибридных высокопроизводительных вычислительных комплексов в материаловедении*

© 2019 г. К. И. Волович[§], С. А. Денисов

*Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление»
Российской академии наук,
ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Россия*

Аннотация. В статье рассматриваются вопросы применения гибридных высокопроизводительных комплексов для исполнения программных систем, предназначенных для расчета электронной структуры и моделирования материалов на атомном уровне. Современные программные системы, предназначенные для решения задач материаловедения используют для увеличения производительности возможности различных аппаратных ускорителей вычислений. Использование таких вычислительных технологий требуют адаптации программного кода приложений к гибридным вычислительным архитектурам, включающим в себя классические центральные процессоры (CPU) и специализированные графические ускорители (GPU). Применение крупных вычислительных гибридных комплексов требует разработки методов обеспечения загрузки таких вычислительных комплексов, которые позволят эффективно использовать вычислительные ресурсы и избегать простоя оборудования. В первую очередь данные методы должны позволять обеспечивать параллельное выполнение пользовательских приложений, использующих ускорители вычислений. Однако, на практике программные среды, предназначенные для решения прикладных задач не могут быть развернуты в одной вычислительной среде из-за несовместимости программного обеспечения. С целью преодоления этого ограничения и обеспечения параллельного выполнения разнотипных задач материаловедения создание индивидуальных сред исполнения заданий на основе технологий виртуализации и облачных технологий. Развитием технологий виртуализации и предоставления облачных сервисов является построение цифровых платформ. В статье предлагается использование цифровой платформы для размещения научных сервисов материаловедения, которые обеспечивают расчеты с использованием различных прикладных программных систем. Цифровые платформы позволяют предоставить единый интерфейс пользователей к научным сервисам материаловедения. Платформа предоставляет возможности по поиску необходимых научных сервисов, передаче исходных данных и результатов между пользователями, платформой и гибридными высокопроизводительными комплексами.

Ключевые слова: высокопроизводительный вычислительный комплекс, гибридная архитектура, графический ускоритель, electronic structure calculations, quantum–mechanical molecular dynamics, VASP, Quantum ESPRESSO

Введение

Современной тенденцией в науке является возрастающая роль компьютерных расчетов [1]. Современные программные системы, предназначенные для решения задач материаловедения и других областей науки, требуют огромных вычислительных ресурсов [2—5]. Наибольшую эффективность они

проявляют при развертывании в высокопроизводительных комплексах, которые обладают высокой производительностью и позволяют решать задачи за приемлемое время с достаточной точностью [6, 7].

В высокопроизводительных комплексах происходит активное внедрение гибридных архитектур. В вычислительные системы добавляются специальные компоненты — специализированные графические ускорители — GPU, которые позволяют значительно повысить производительность вычислений и сократить время научных расчетов.

Программные системы материаловедения используют графические ускорители для проведения расчетов. В качестве примера можно привести программные системы VASP (*The Vienna Ab initio Simulation Package*) и Quantum ESPRESSO.

Волович Константин Иосифович^{1,§} — канд. техн. наук, старший научный сотрудник, e-mail: KVolovich@frccsc.ru; **Денисов Сергей Анатольевич**¹ — ведущий инженер, e-mail: SDenisov@frccsc.ru

[§] Автор для переписки

* Статья подготовлена по материалам доклада, представленного на I-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 21—23 октября 2019 г.

Эти программные системы проявляют наибольшую эффективность при монопольном использовании вычислительных ресурсов: RAM (оперативное запоминающее устройство), CPU (классический центральный процессор), GPU.

Отметим, что при эксплуатации гибридного высокопроизводительного комплекса возникает задача управления ресурсами и разделения их между группой пользователей. Необходимо разработать технологии, которые обеспечивают выделение ресурсов приложениям материаловедения для разных пользователей и научных коллективов.

Современным подходом в организации вычислительного процесса является использование технологий виртуализации и облачных технологий. Облачные технологии позволяют предоставлять пользователям услуги SaaS и PaaS. Целесообразно предоставлять научным командам прикладные системы материаловедения как облачные сервисы.

Цель работы — рассмотрение основных проблемы и подходов к предоставлению программного обеспечения материаловедения в среде гибридного высокопроизводительного комплекса с использованием облачных технологий.

Аспекты применения облачных технологий в гибридном высокопроизводительном комплексе при выполнении задач материаловедения

Применение облачных технологий является сегодня актуальной тенденцией во всех областях, связанных с информационными технологиями [7, 8]. Предоставление сервисов гибридных высокопроизводительных вычислений в области материаловедения не является исключением.

В настоящее время существует ряд программных систем, выполняющих решение задач в разных областях материаловедения. Такие системы как ABINIT, VASP, Quantum ESPRESSO, LAMMPS, MEER, MPB, OpenFOAM могут выполняться на гибридных высокопроизводительных комплексах, однако требуют подготовки среды исполнения, настройки системы организации вычислительного процесса, организации параллельных вычислений [9].

От вычислительной среды требуется большая гибкость и адаптивность к изменяющимся требованиям со стороны приложений и задач пользователей. При этом можно выделить основные проблемы, возникающие при применении облачных технологий:

- проблема развертывания кода программной системы материаловедения в среде гибридного высокопроизводительного комплекса;
- проблема адаптации программного кода пользователя к гибридному вычислителю;
- проблема создания индивидуальной среды исполнения заданий [10].

Для решения указанных проблем необходима

разработка методов и алгоритмов адаптации и исполнения прикладных задач пользователей на гибридном вычислительном кластере, использующем для выполнения вычислений специализированные ускорители вычислений. Решения по адаптации программного кода на языках различных уровней к целевой платформе гибридного вычислительного кластера, алгоритмы предоставления задачам вычислительных ресурсов в условиях многозадачной среды, а также методы создания адаптированной среды исполнения заданий с использованием технологий виртуализации требуют научной проработки и являются актуальными на сегодняшней стадии развития теории и практики предоставления вычислительных ресурсов гибридной архитектуры научным коллективам.

Применение облачных технологий, с одной стороны, обеспечивает ряд преимуществ, связанных с единым подходом по предоставлению сервисов пользователям, а, с другой стороны, порождает проблемы, вызываемые необходимостью предоставлять широкий спектр услуг и адаптировать исполняющую среду вычислителя к потребностям каждой пользовательской задачи.

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

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

В результате решения проблем по созданию индивидуальной среды исполнения и развертывания в ней системного программного обеспечения, программного пакета материаловедения и пользовательских приложений могут быть созданы сервисы типа SaaS и PaaS. На рис. 1 показан пример обращения научных коллективов к сервисам материаловедения. Для каждого запроса к сервису создается индивидуальная вычислительная среда, в которой разворачивается программная система для проведения научных расчетов. Технологии виртуализации обеспечивают независимое параллельное функционирование расчетных задач в гибридном высокопроизводительном комплексе.

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

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

Повышение производительности задач материаловедения на основе графических акселераторов

Использование графических ускорителей существенно повышает производительность решения научных задач и снижает время выполнения приложений. Необходимо отметить, что степень повышения производительности зависят от типа ускорителя и типа прикладной задачи [11]. Однако, в общем случае, применение гибридных высокопроизводительных комплексов приводит к повышению качества вычислительных сервисов.

В работе [12] рассматриваются вопросы предоставления высокопроизводительных ресурсов как облачного сервиса, проводится анализ открытых облачных платформ (Amazon, IBM, Google), приводятся подходы к использованию специализированных вычислительных ускорителей для повышения производительности вычислительных комплексов для расширения услуг облачных платформ, что требует применения гибридных архитектур построения вычислительных систем. Применительно к задачам материаловедения, можно отметить, что большинство программных систем, предназначенных для проведения расчетов, используют ресурсы GPU для ускорения вычислений.

Также наблюдается тенденция адаптации алгоритмов решения прикладных задач к условиям выполнения на вычислительных средствах гибридной архитектуры, оснащенных ускорителями вычислений.

Вычислительные алгоритмы отличаются в зависимости от прикладной задачи, но для всех областей характерно использование механизмов гибридных высокопроизводительных комплексов:

– MPI — технология, позволяющая задействовать одновременный параллельный запуск процессов и организовать обмен данными между ними;

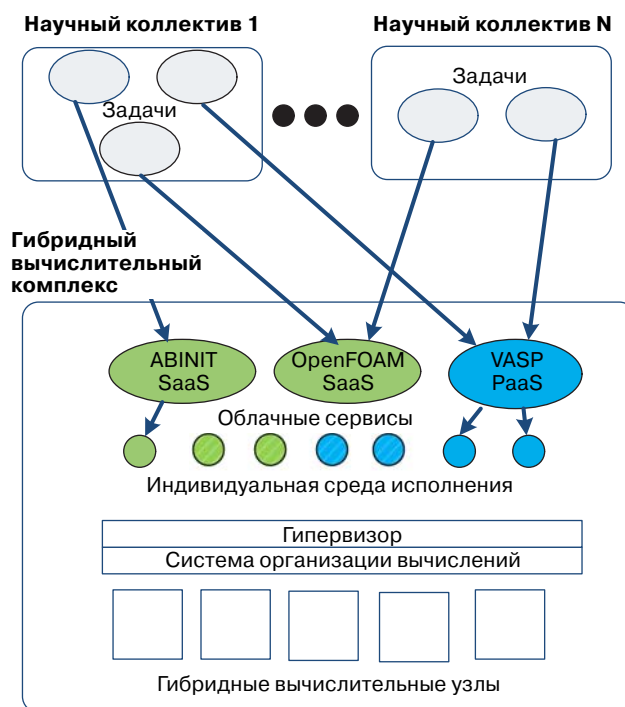


Рис. 1. Облачные сервисы в гибридном комплексе

Fig. 1. Cloud services for materials science in hybrid HPC

– CUDA — технология доступа и выполнения вычислений на графических ускорителях.

Таким образом, имеющиеся у научных коллективов разработки, направленные на решение прикладных задач могут быть перенесены на средства гибридного высокопроизводительного вычислительного комплекса, однако требуется доработка с учетом использования новых технологий.

При доработке, естественно, должен учитываться фактор целесообразности, показывающий, насколько эффективно будет решаться задача с использованием гибридных технологий и каких затрат потребует переработка кодов и алгоритмов.

Однако тенденция внедрения гибридных технологий показывает, что преимущества, предоставляемые гибридными вычислителями настолько велики, что происходит миграция имеющегося программного обеспечения и алгоритмов на эти технологии.

Интеграция сервисов материаловедения с помощью цифровой платформы

Современной тенденцией предоставления вычислительных сервисов являются облачные вычисления и платформенный подход к предоставлению сервисов.

Цифровая платформа для научных исследований представляется собой информационный объект, позволяющий поставщикам услуг размещать информацию о научных услугах предоставлять доступ к этим услугам через единый информационный портал цифровой платформы. Соответственно, потребители научных услуг могут получать информацию

об имеющихся услугах из единого реестра цифровой платформы и осуществлять заказ, исполнение и получение результатов через портал цифровой платформы. Подробно построение цифровых платформ для научных исследований описано в [13, 14].

Таким образом, предоставление услуг гибридных вычислительных комплексов как сервиса цифровой платформы является логичным развитием концепции облачных вычислений и платформенных технологий [15, 16].

В области материаловедения данная модель позволяет пользователю реестр сервисов, обеспечивающих решение прикладных задач в этой области.

На рис. 2 показан пример доступа пользователя к облачным вычислительным ресурсам цифровой платформы материаловедения.

Сервис поиска обеспечивает поиск в реестре готовых сервисов, разработанных по технологии, описанной выше. Возможен доступ к этим сервисам через единую точку входа цифровой платформы с использованием общей аутентификации технологии SSO.

Услуга PaaS очень удобна для *research teams* для развертывания и эксплуатации собственного программного обеспечения на платформе, а также *frameworks* и интегрированных сред.

В качестве примеров использования PaaS в области материаловедения можно привести примеры создания и эксплуатации сервисов расчета

электронной структуры на основе средств Quantum ESPRESSO [17].

В области предоставления научных сервисов ярким примером PaaS является предоставление услуг гибридных высокопроизводительных вычислительных комплексов для выполнения расчетов, требующих больших вычислительных мощностей. Такие расчеты используются во многих областях современной науки и услуги суперкомпьютерных центров востребованы со стороны научных коллективов самых разных областей знания [18]. Оговоримся, что в общем случае услугу суперкомпьютерного центра по предоставлению вычислителей нельзя в явном виде считать PaaS именно в терминах облачных вычислений. Алгоритмы распределения ресурсов, выделения вычислителей и обслуживания пользователей суперкомпьютеров отличаются от классической работы облачных провайдеров. В частности, для ускорения процессов вычислений в суперкомпьютерах не используется виртуализация и параллельная работа одного вычислительного блока в интересах группы пользователей. Используется пакетная обработка заданий, очереди заданий и другие методы организации вычислительного процесса, позволяющие оптимизировать работу супервычислителя [19].

Публикация и предоставление услуг гибридных вычислительных комплексов в цифровой платформе осуществляется путем реализации протоколов информационного взаимодействия, предусмотренных в цифровой платформе. Для этого разрабатываются специализированные интерфейсные модули — адаптеры, позволяющие производить обмен данными между сервисами управления цифровой платформой и вычислительного комплекса. При этом необходимо иметь в виду, что сервис управления цифровой платформой не выполняет функций управления вычислительным процессом, а предоставляет задания на вычисления и исходные данные, полученные цифровой платформой. Также через средства цифровой платформы может осуществляться он-лайн доступ пользователя к инструментальным средствам вычислительного комплекса для выполнения подготовки и тестирования расчетных задач.

Таким образом, пользователь гибридного вычислительного комплекса получает облачные услуги вычислительного комплекса (SaaS, PaaS) через унифицированные

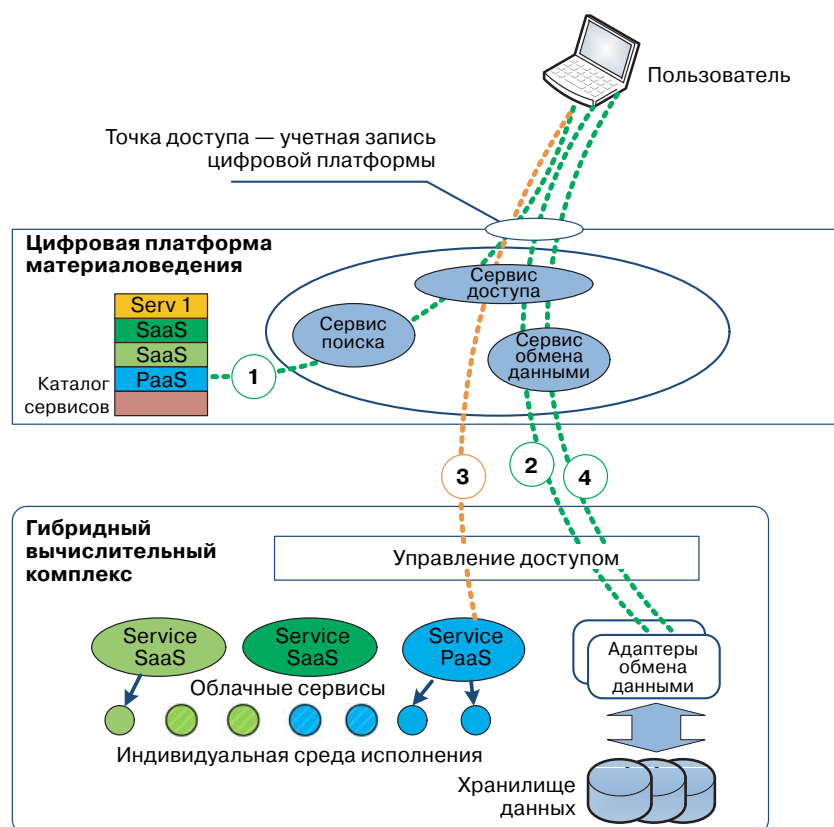


Рис. 2. Доступ к вычислительному комплексу через цифровую платформу
Fig. 2. Access to the HPC cluster through the digital platform

интерфейс цифровой платформы для научных исследований.

Заключение

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

Предпочтительным режимом предоставления ресурсов гибридного высокопроизводительного комплекса для решения задач материаловедения является PaaS на основе технологии контейнеров. В этом случае наиболее полно и гибко могут быть использованы ресурсы кластера, а также возможности программного обеспечения материаловедения по работе с графическими ускорителями [20].

Библиографический список

- Абрамов С. М., Лилитко Е. П. Состояние и перспективы развития вычислительных систем сверхвысокой производительности // Информационные технологии и вычислительные системы. 2013. № 2. С. 6—22.
- Журавлев А. А., Ревизников Д. Л., Абгарян К. К. Метод дискретных элементов с атомарной структурой. Материалы XXI международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2019). Москва, 2019. С. 59—61.
- Микурова А. В., Скворцов В. С. Создание обобщенной модели предсказания ингибирования нейраминидазы вируса гриппа различных штаммов // Биомедицинская химия. 2018. Т. 64, Вып. 3. С. 247—252. DOI: 10.18097/BMCS20186403247
- Микурова А. В., Скворцов В. С., Раевский О. А. Компьютерная оценка селективности ингибирования мускариновых рецепторов M1–M4 // Biomedical Chemistry: Research and Methods. 2018. Т. 1, № 3. С. e00072. DOI: 10.18097/BMCRM00072
- Vouzis P. D., Sahinidis N. V. GPU-BLAST: using graphics processors to accelerate protein sequence alignment // Bioinformatics. 2011. V. 27, Iss. 2. P. 182—188. DOI: 10.1093/bioinformatics/btq644
- Горчаков А. Ю., Малкова В. У. Сравнение процессоров Intel Core-i7, Intel Xeon, Intel Xeon Phi и IBM Power 8 на примере задачи восстановления начальных данных // International Journal of Open Information Technologies. 2018. Т. 6, № 4.
- Volkov S., Sukhoroslov O. V. Simplifying the use of clouds for scientific computing with Everest // Procedia Computer Science. 2017. V. 119. P. 112—120. DOI: 10.1016/j.procs.2017.11.167
- Волович К. И., Зацаринный А. А., Кондрашев В. А., Шабанов А. П. О некоторых подходах к представлению научных исследований как облачного сервиса // Системы и средства информ. 2017. Т. 27, № 1. С. 73—84. DOI: 10.14357/08696527170105
- Горчаков А. Ю. Использование OPENMP для реализации многопоточного метода неравномерных покрытий // Перспективные информационные технологии (ПИТ 2018). Тр. Международной научно-технической конференции. Самара: Изд-во Самарского научного центра РАН, 2018. С. 613—616.
- Волович К. И., Денисов С. А., Мальковский С. И. Формирование индивидуальной среды моделирования в гибридном высокопроизводительном вычислительном комплексе // Материалы I международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. МММЭК-2019». М.: МАКС-Пресс, 2019. С. 21—24.
- Afanasyev I., Voevodin V. The comparison of large-scale graph processing algorithms implementation methods for Intel KNL and NVIDIA GPU //) Supercomputing. RuSCDays 2017. Communications in Computer and Information Science. Springer, Cham, 2017. V. 793. P. 80—94. DOI: 10.1007/978-3-319-71255-0_7
- Ding F., Mey D., Wienke S., Zhang R., Li L. A Study on today's cloud environments for HPC applications // Third International Conference, CLOSER 2013. Cloud Computing and Services Science. Berlin (Germany): Springer, 2014. P. 114—127. DOI: 10.1007/978-3-319-11561-0_8
- Zatsarinny A. A., Gorshenin A. K., Kondrashev V. A., Volovich K. I., Denisov S. A. Toward high performance solutions as services of research digital platform // Procedia Computer Science. 2019. V. 150. P. 622—627. DOI: 10.1016/j.procs.2019.02.078
- Зацаринный А. А., Горшенин А. К., Волович К. И., Колин К. К., Кондрашев В. А., Степанов П. В. Управление научными сервисами как основа национальной цифровой платформы «Наука и образование» // Стратегические приоритеты. 2017. № 2. С. 103—113.
- Кондрашев В. А., Волович К. И. Управление сервисами цифровой платформы на примере услуги высокопроизводительных вычислений // Материалы Международной научной конференции. Воронеж, 2018.
- Карцев А., Мальковский С. И., Волович К. И., Сорокин А. А. Исследование производительности и масштабируемости пакета Quantum ESPRESSO при изучении низкоразмерных систем на гибридных вычислительных системах // Материалы I международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. МММЭК-2019». М.: МАКС-Пресс, 2019. С. 18—21.
- Berriman G. B., Deelman E., Juve G., Rynge M., Vöckler J.-S. The application of cloud computing to scientific workflows: a study of cost and performance // Phil. Trans. R. Soc. A. 2013. V. 371, Iss. 1983. DOI: 10.1098/rsta.2012.0066
- Якобовский М. В., Бондаренко А. А., Выродов А. В., Григорьев С. К., Корнилина М. А., Плотников А. И., Поляков С. В., Попов И. В., Пузырьков Д. В., Суков С. А. Облачный сервис для решения многомасштабных задач нанотехнологии на кластерах и суперкомпьютерах // Известия ЮФУ. Технические науки. 2016. № 12. С. 103—114. DOI: 10.18522/2311-3103-2016-12-103114
- Горчаков А. Ю., Посыпкин М. А. Сравнение вариантов многопоточной реализации метода ветвей и границ для многоядерных систем // Современные информационные технологии и ИТ-образование. 2018. Т. 14, № 1. С. 138—148. DOI: 10.25559/SITITO.14.201801.138-148
- Положение о ЦКП «Информатика». URL: <http://www.frccsc.ru/ckp> (дата обращения: 22.01.2020).

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (проекты №№ 18-29-03100, 19-29-03051).

Эксперименты по разворачиванию индивидуальных сред исполнения для программных пакетов материаловедения проведены с использованием вычислительных ресурсов ЦКП «Информатика» ФИЦ ИУ РАН.

*Статья поступила в редакцию
26 декабря 2019 г.*

Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering. 2019, vol. 22, no. 4, pp. 262—267.
DOI: 10.17073/1609-3577-2019-4-262-267

The main scientific and technical problems of using hybrid HPC clusters in materials science

K. I. Volovich^{1,§}, S. A. Denisov^{1,§}

¹ Federal Research Centre “Information and Control” of the Russian Academy of Sciences,
44 Vavilov Str., Moscow 119333, Russia

Abstract. The article discusses the use of hybrid HPC clusters for the execution of software designed to calculate the electronic structure and atomic scale materials modeling. Modern software systems, which are designed to solve the problems of materials science, use the capabilities of various hardware computing accelerators to increase productivity. The use of such computing technologies requires the adaptation of application program code to hybrid computing architectures, which include classic central processing units (CPUs) and specialized graphics accelerators (GPUs).

The use of large computing hybrid systems requires the development of methods for ensuring the workloading of such computing systems that will allow efficient use of computing resources and avoid equipment downtime.

First of all, these methods should allow parallel execution of user applications using computational accelerators. However, in practice, software environments designed to solve application problems cannot be deployed in the same computing environment due to software incompatibility. In order to overcome this limitation and ensure the parallel execution of diverse types of materials science tasks, the creation of individual task execution environments based on virtualization technologies and cloud technologies.

The continuation of virtualization technologies and the provision of cloud services is the construction of digital platforms. The article proposes the use of a digital platform for hosting scientific materials science services that provide calculations using various application software systems. Digital platforms make it possible to provide a unified user interface to scientific materials science services. The platform provides opportunities for finding the necessary scientific services, transferring source data and results between users, the platform and hybrid high-performance clusters.

Keywords: high-performance computing cluster; hybrid architecture; graphics accelerator; electronic structure calculations, quantum-mechanical molecular dynamics, VASP, Quantum ESPRESSO

References

1. Abramov S. M., Lilitko E. P. Current state and development prospects of high-end HPC system. *Information Technologies and Computation Systems*, 2013, no. 2, pp. 6—22. (In Russ.)
2. Zhuravlev A. A., Reviznikov D. L., Abgaryan K. K. The method of discrete elements with an atomic structure. In: *Proceedings of the XXI international conference on computational mechanics and modern applied software systems (VMSPSPS'2019)*. Moscow, 2019, pp. 59—61. (In Russ.)
3. Mikurova A. V., Skvortsov V. S. A generalized prediction model of inhibition of neuraminidase of influenza virus of various strains. *Biochem. Moscow Suppl. Ser. B*, 2018, vol. 12, pp. 322—329. DOI: 10.1134/S1990750818040054
4. Mikurova A. V., Skvortsov V. S., Raevsky O. A. Computational evaluation of selectivity of inhibition of muscarinic receptors M1–M4. *Biomedical Chemistry: Research and Methods*, 2018, vol. 1, no. 3, p. e00072. (In Russ.). DOI: 10.18097/BMCRM00072
5. Vouzis P. D., Sahinidis N. V. GPU-BLAST: using graphics processors to accelerate protein sequence alignment. *Bioinformatics*, 2011, vol. 27, no. 2, pp. 182—188. DOI: 10.1093/bioinformatics/btq644
6. Gorchakov A. Yu., Malkova V. U. Comparison of Intel Core-i7, Intel Xeon, Intel Xeon Phi and IBM Power 8 processors using the example of initial data recovery. *International Journal of Open Information Technologies*, 2018, vol. 6, no. 4, pp. 12—17. (In Russ.)
7. Volkov S., Sukhoroslov O. V. Simplifying the use of clouds for scientific computing with Everest. *Procedia Computer Science*, 2017, vol. 119, pp. 112—120. DOI: 10.1016/j.procs.2017.11.167
8. Volovich K. I., Zatsarinnyy A. A., Kondrashev V. A., Shabanov A. P. Scientific research as a cloud service. *Sistemy i Sredstva Inform.*, 2017, vol. 27, no. 1, p. 73—84. (In Russ.). DOI: 10.14357/08696527170105
9. Gorchakov A. Yu. Using OPENMP to implement the multithreaded method of uneven coatings // *Advanced Information Technologies (PIT 2018). Proceedings of the International Scientific and Technical Conference*. Samara: Izdatel'stvo Samarskogo nauchnogo tsentra RAN, 2018. 613—616. (In Russ.)
10. Volovich K. I., Denisov S. A., Malkovsky S. I. Formation of an individual modeling environment in a hybrid high-performance computing complex. In: *Proc. of the I Intern. Conf. “Mathematical Modeling in Materials Science of Electronic Components. MMMEK-2019”*. Moscow: MAKS-Press, 2019, pp. 21—24. (In Russ.)
11. Afanasyev I., Voevodin V. The comparison of large-scale graph processing algorithms implementation methods for Intel KNL and NVIDIA GPU. In: *Supercomputing. RuSCDays 2017. Communications in Computer and Information Science*. Springer, Cham, 2017, pp. 80—94. DOI: 10.1007/978-3-319-71255-0_7
12. Ding F., Mey D., Wienke S., Zhang R., Li L. A Study on today's cloud environments for HPC applications. In: *Third International Conference, CLOSER 2013. Cloud Computing and Services Science*. Berlin (Germany): Springer, 2014, pp. 114—127. DOI: 10.1007/978-3-319-11561-0_8
13. Zatsarinnyy A. A., Gorshenin A. K., Kondrashev V. A., Volovich K. I., Denisov S. A. Toward high performance solutions as services of research digital platform. *Procedia Computer Science*, 2019, vol. 150, pp. 622—627. DOI: 10.1016/j.procs.2019.02.078
14. Zatsarinnyy A. A., Gorshenin A. K., Volovich K. I., Kolin K. K., Kondrashev V. A., Stepanov P. V. Management of scientific services as the basis of the national digital platform “Science and Education”. *Strategicheskie priority*, 2017, no. 2, pp. 103—113. (In Russ.)
15. Kondrashev V. A., Volovich K. I. Service management of a digital platform on the example of high-performance computing services. In: *Materials of the International Scientific Conference*. Voronezh, 2018. (In Russ.)
16. Kartsev A., Malkovsky S. I., Volovich K. I., Sorokin A. A. Research of the performance and scalability of the Quantum ESPRESSO package in the study of low-dimensional systems on hybrid computing systems. In: *Proc. of the I Intern. Conf. “Mathematical Modeling in Materials Science of Electronic Components. MMMEK-2019”*. Moscow: MAKS-Press, 2019, pp. 18—21. (In Russ.)
17. Berriman G. B., Deelman E., Juve G., Rynge M., Vöckler J.-S. The application of cloud computing to scientific workflows: a study of cost and performance. *Phil. Trans. R. Soc. A*, 2013, vol. 371, no. 1983. DOI: 10.1098/rsta.2012.0066
18. Yakobovskiy M. V., Bondarenko A. A., Vyrodov A. V., Grigoriev S. K., Kornilina M. A., Plotnikov A. I., Polyakov S. V., Popov I. V., Puzyrkov D. V., Soukov S. A. Cloud service for solving multiscale nanotechnology problems of on clusters and supercomputers. *Izvestiya YuFU. Tekhnicheskie nauki*, 2016, no. 12, pp. 103—114. (In Russ.). DOI: 10.18522/2311-3103-2016-12-103114
19. Gorchakov A. Yu., Posypkin M. A. Comparison of variants of multithreading realization of method of branches and borders for multi-core systems. *Modern Information Technologies and IT-Education*, 2018, vol. 14, no. 1, pp. 138—148. (In Russ.). DOI: 10.25559/SITITO.14.201801.138-148
20. Regulations on the of the Center for Shared Use «Informatics». URL: <http://www.frccsc.ru/ckp> (accessed: 02.12.2019). (In Russ.)

Acknowledgements. The research is partially supported by the Russian Foundation for Basic Research (projects Nos. 18-29-03100, 19-29-03051). The experiments on the deployment of individual runtime environments for software packages of materials science were carried out using computing resources of the Center for Shared Use “Informatics” of FRCCSC.

Information about authors:

Konstantin I. Volovich^{1,§}: Cand. Sci. (Eng.), Senior Researcher (KVolovich@frccsc.ru); Sergey A. Denisov¹: Lead Engineer (SDenisov@frccsc.ru)

§ Corresponding author

Received December 26, 2019

УДК 621;004.21,004.94

Математическое моделирование перспективных структур оксидов металлов*

© 2019 г. П. А. Сеченых^{1,2,§}

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

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

Аннотация. Данные о структуре и свойствах материалов особенно важны при работе с объектами микро- и наноразмеров из-за высокой сложности их получения. Это делает актуальным применение компьютерного моделирования для прогнозирования требуемых характеристик материалов. Электронные, магнитные, механические и другие свойства кристаллических веществ обусловлены особенностью их строения – периодичностью решетки и симметрией элементарной ячейки. В данной статье рассмотрены оксиды металлов с общими химическими формулами MeO (металлы: Ca, Cd, Mg), MeO₂ (металлы: Hf, Ce, Zr), Me₂O₃ (металлы: Er, Nd, Sc, Mn, Ti) и Me₃O₄ (на примере Fe) и кристаллической решеткой кубического типа симметрии — структурные типы NaCl (каменная соль), Fluorite (флюорит), Bixbyite (биксбиит), Spinel (шпинель) соответственно. В работе приводится описание модели ионно-атомных радиусов, которая широко применяется при моделировании кристаллических оксидов металлов. Показано применение алгоритма имитации отжига для вычисления метрических параметров рассматриваемых соединений. Представленная в работе программная реализация алгоритма позволяет по заданным химической формуле и пространственной группе симметрии определить координаты атомов, входящих в элементарную ячейку кристаллической решетки вычислить постоянную решетки и плотность упаковки атомов в ячейке кристалла. Перечисленные структурные характеристики могут быть использованы как входные параметры при определении электронных, магнитных и других свойств. В статье приведено сравнение значений постоянных решетки, полученных в результате моделирования, с экспериментальными данными.

Ключевые слова: моделирование кристаллических структур, пространственные группы симметрии, плотная упаковка, алгоритм имитации отжига

Введение

Широкое распространение оксидов металлов в микроэлектронике определяет необходимость использовать математическое моделирование для прогнозирования их электронных свойств. В работе рассматривались оксиды металлов, реализуемые в следующих структурных типах [1]:

- NaCl (пространственная группа симметрии $Fm\bar{3}m$);
- Fluorite (пространственная группа симметрии $Fm\bar{3}m$);
- Bixbyite (пространственная группа симметрии $Ia\bar{3}$);

– Spinel (пространственная группа симметрии $Fd\bar{3}m$).

Определение метрических параметров кристаллических структур является важным этапом расчета характеристик материалов с заданной химической формулой и пространственной группой симметрии. К таким параметрам относятся: постоянная кристаллической решетки и углы элементарной ячейки, а также координаты атомов, входящих в ячейку.

Данная статья посвящена определению постоянной кристаллической решетки и координат атомов, входящих в элементарную ячейку, для оксидов металлов, реализуемых в пространственных группах с кубической симметрией.

Сеченых Полина Алексеевна^{1,2,§} — младший научный сотрудник (1), старший преподаватель (2), e-mail: p-sechenyh@mail.ru

§ Автор для переписки

* Статья подготовлена по материалам доклада, представленного на I-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 21–23 октября 2019 г.

Описание модели

Для расчета метрических параметров и плотности упаковки рассмотренных оксидов металлов была применена модель ионно-атомных радиусов, подробно изложенная в [2, 3].

Согласно данной модели, атомы химических элементов представляют собой твердые шары с заданными радиусами. Пусть (x_i, y_i, z_i) — координаты центра i -го шара, r_i — его радиус, $i \in [1, N_b]$, N_b — количество атомов в ячейке. Тогда $S = \{s_k\}$, $k \in [1, \infty]$ — множество состояний ячейки, s_k — набор координат всех атомов, входящих в ячейку, в текущий момент времени.

Плотность упаковки [4—6]

$$\rho = \frac{V_a}{V},$$

где V_a — суммарный объем атомов, входящих в ячейку; V — объем элементарной ячейки кристаллической решетки.

Максимальное значение плотности упаковки достигается при минимальном объеме ячейки

$$V = V(s^*) = \min_{s_k \in S} V(s_k).$$

Необходимо найти конфигурацию атомов элементарной ячейки, при которой будет достигнуто минимальное значение объема ячейки. При поиске следует учитывать следующие условия:

- каждый атом элементарной ячейки находится в определенной позиции Уайкова, допустимой для рассматриваемой пространственной группы симметрии [7, 8], поэтому перемещения координат центров атомов в кристаллической решетке осуществляются с учетом ограничений, накладываемых позицией Уайкова, в которой находится данный атом.

- атомы несжимаемы, поэтому их радиусы не перекрываются, т. е., $d(i, j) \geq r_i + r_j$, где r_i и r_j — радиусы атомов i и j ; $d(i, j)$ — расстояние между центрами атомов i и j , $i \in [1, N_b]$, $i \neq j$.

Если значение $\rho \in [0,47, 0,74]$, то структура считается устойчивой в рамках рассматриваемой модели [2].

Описание алгоритма

Для решения поставленной задачи в рамках данной модели был применен алгоритм имитации отжига (*Simulated Annealing*) [9].

Введем следующие обозначения: t — температура, $F(s_i)$ — функция перехода из одного состояния в другое, $F: S \rightarrow S$, $E(s_i)$ — целевая функция (в случае кубической симметрии — постоянная решетки a), $E: S \rightarrow R$, s_i — состояние ячейки на i -ой итерации, s_c — текущее состояние ячейки; S — множество состояний; R — множество действительных чисел.

Базовым параметром алгоритма является убывание температуры t . Процесс предлагается моделировать дискретным набором состояний системы атомов s_i и функцией перехода $F(s_i)$. В зависимости от изменения целевой функции ΔE либо происходит переход в новое состояние, либо анализируется

попадание величины случайной генерации r в интервал $[0, 1]$. При этом переход в новое состояние осуществляется только при условии $r \in [0, P(\Delta E)]$,

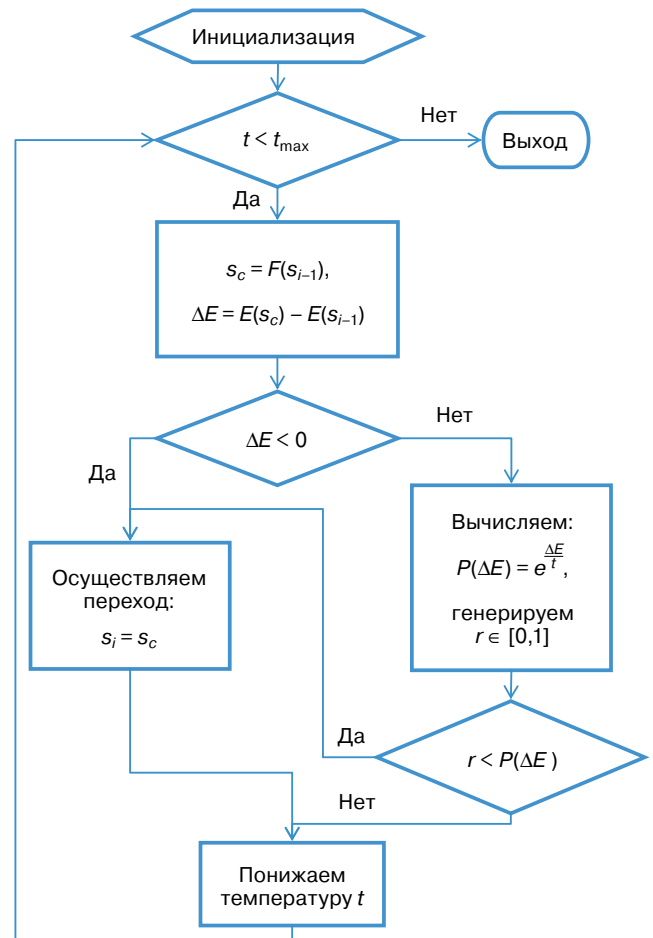
где величина $P(\Delta E) = e^{-\frac{\Delta E}{t}}$ — вероятность перехода. В результате определяется конечное состояние, которое будет соответствовать необходимой конфигурации атомов.

Блок-схема алгоритма представлена на рисунке.

На языке С# [10] был реализован вычислительный модуль, входными данными для которого служат:

- химическая формула соединения;
- пространственная группа симметрии;
- радиусы атомов химических элементов;
- справочная кристаллографическая информация — пространственные группы симметрии, позиции Уайкова и т. д. [11, 12]

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



Алгоритм имитации отжига
Simulated annealing algorithm

Структурные характеристики оксидов металлов [Structural characteristics of metal oxides]

Формула	Группа симметрии	Плотность упаковки ρ	Постоянная решетки a (выч.), нм	Постоянная решетки a (эксп.), нм [17, 18]	Относительная погрешность
CaO	$Fm\bar{3}m$	0,53	0,48	0,481	0,0021
CdO		0,53	0,47	0,4695	0,0011
MgO		0,58	0,424	0,4212	0,0066
HfO ₂		0,60	0,504	0,511	0,0137
CeO ₂		0,54	0,556	0,5411	0,0275
ZrO ₂		0,61	0,504	0,517	0,0251
Er ₂ O ₃	$Ia\bar{3}$	0,46	1,061	1,055	0,0057
Nd ₂ O ₃		0,45	1,098	1,114	0,0144
Sc ₂ O ₃		0,52	0,982	0,9844	0,0017
Mn ₂ O ₃		0,56	0,944	0,9411	0,0031
Tl ₂ O ₃		0,47	1,066	1,057	0,0085
Fe ₃ O ₄	$Fd\bar{3}m$	0,54	0,8252	0,8394	0,0169

Результаты расчетов

Для хранения и подготовки входных данных вычислительного модуля (справочная кристаллографическая информация) использовалась реляционная модель данных, ранее описанная в [13–15]. Радиусы атомов химических элементов были взяты из [16].

Результаты расчетов приведены в таблице.

Приведенные в таблице данные показывают, что результаты расчета с помощью разработанного вычислительного модуля структурных характеристик рассмотренных оксидов близки к экспериментальным данным [17, 18].

Заключение

Полученные характеристики могут служить входными данными при проведении квантомеханических расчетов на базе теории функционала электронной плотности [19, 20], с помощью которых можно рассчитать полную энергию системы атомов, уточнить ее структуру, электронные, магнитные, механические и другие свойства оксидов металлов.

Библиографический список

1. Crystal Lattice Structures. URL: <https://homepage.univie.ac.at/michael.leitner/lattice/prototype.html> (дата обращения: 02.11.2019).
2. Абгарян К. К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. М.: МАКС Пресс, 2017. 284 с.
3. Абгарян К. К. Вычислительные алгоритмы в задачах математического моделирования устойчивых структур кристаллических материалов. М.: МАКС Пресс, 2017. 100 с.
4. Шаскольская М. П. Кристаллография: учебник для вузов. М.: Высшая школа, 1976. 390 с.
5. Загальская Ю. Г., Литвинская Г. П., Егоров–Тисменко Ю. К. Геометрическая кристаллография. М.: Изд-во МГУ, 1986. 168 с.

6. Белов Н. В. Структура ионных кристаллов и металлических фаз. М.: Изд-во Академии Наук СССР, 1947. 237 с.
7. De Graef M., McHenry M. Structure of materials. Cambridge University Press, 2012. 767 p.
8. Солодовников С. Ф. Основные термины и понятия структурной кристаллографии и кристаллохимии (словарь-пособие). Новосибирск: ИНХ СО РАН, 2005. 113 с.
9. Metropolis N., Ulam S. The Monte Carlo method // J. American Statistical Association. 1949. V. 44, N 247. P. 335–341. DOI: 10.2307/2280232
10. Документация по C#. URL: <https://docs.microsoft.com/ru-ru/dotnet/csharp/> (дата обращения: 02.11.2019).
11. Hahn Th. International Tables for Crystallography. Vol. A: Space-group symmetry. Berlin; New York: Springer-Verlag, 2002. 938 p. DOI: 10.1107/97809553602060000100
12. Space Group Diagrams and Tables. URL: <http://img.chem.ucl.ac.uk/sgp/large/sgp.htm> (дата обращения: 02.11.2019).
13. Абгарян К. К., Сеченых П. А., Гаврилов Е. С. Объектно-реляционный подход к разработке системы компьютерного моделирования многомасштабной схемы расчета многослойных полупроводниковых наноструктур // Программная инженерия. 2015. № 8. С. 9–17.
14. Сеченых П. А., Абгарян К. К. Реляционная модель хранения данных информационной поддержки задач структурного материаловедения // Труды Второй молодежной научной конференции «Задачи современной информатики». М.: ФИЦ ИУ РАН, 2015. С. 181–186.
15. Абгарян К. К., Бажанов Д. И., Сеченых П. А. Компьютерное моделирование кристаллической структуры и электронных свойств GaAs, GaP, GaAs_{0.75}N_{0.25}, GaAs_{0.25}P_{0.75} (F43m) // Сб. тезисов докладов Первого Российского кристаллографического конгресса (РКК'2016). СПб.: ООО «НП-ПРИНТ», 2016. С. 52.
16. Хьюи Дж. Неорганическая химия. Строение вещества и реакционная способность // Под ред. Б. Д. Степина, Р. А. Лидина. М.: Химия, 1987. 696 с.
17. ChemSpider. URL: <https://www.chemspider.com/> (дата обращения: 20.09.2019).
18. Crystallography Open Database. URL: <http://www.crystallography.net/cod/> (дата обращения: 20.09.2019).
19. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas // Phys. Rev. B. 1964. V. 136, Iss. 3. P. 864–871. DOI: 10.1103/PhysRev.136.B864
20. Kohn W., Sham L. J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects // Phys. Rev. A. 1965. V. 140, Iss. 4. P. 1133–1138. DOI: 10.1103/PhysRev.140.A1133

Статья поступила в редакцию
26 декабря 2019 г.

Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering. 2019, vol. 22, no. 4, pp. 268—271.
DOI: 10.17073/1609-3577-2019-4-268-271

Mathematical modeling of perspective structures of metal oxides

P. A. Sechenykh^{1,2,§}

¹ *Federal Research Centre “Information and Control” of the Russian Academy of Sciences,
44 Vavilov Str., Moscow 119333, Russia*

² *Moscow Aviation Institute (National Research University),
4 Volokolamskoe shosse, 4, Moscow 125993, Russia*

Abstract. Information about the structure and properties of materials is especially important when working with micro- and nanoscale objects due to the high complexity of their obtaining. This makes it relevant to use computer modeling to predict the required characteristics of materials. Electronic, magnetic, mechanical, and other properties of crystalline substances are determined by their structure—the periodicity of the lattice and the symmetry of the unit cell. This article discusses metal oxides with the general chemical formulas MeO (metals: Ca, Cd, Mg), MeO₂ (metals: Hf, Ce, Zr), Me₂O₃ (metals: Er, Nd, Sc, Mn, Ti) and Me₃O₄ (using Fe as an example) and a cubic symmetry type crystal lattice — structural types NaCl (rock salt), Fluorite, Bixbyite, Spinel accordingly. The paper describes the model of ion-atomic radii, which is widely used in the modeling of crystalline metal oxides. The application of the annealing simulation algorithm for calculating the metric parameters of the compounds under consideration is shown. The software implementation of the algorithm presented in this paper allows us to determine the coordinates of the atoms that are included in the elementary cell of the crystal lattice, calculate the lattice constant and the density of the packing of atoms in the crystal cell using the specified chemical formula and the space group symmetry. These structural characteristics can be used as input parameters for determining electronic, magnetic, and other properties. The article compares the values of lattice constants obtained as a result of modeling with experimental data.

Keywords: modeling of crystal structures, space group symmetry, close packing, annealing simulation algorithm

References

1. Crystal Lattice Structures. URL: <https://homepage.univie.ac.at/michael.leitner/lattice/prototype.html> (accessed: 02.11.2019).
2. Abgaryan K. K. *Mnogomasshtabnoe modelirovanie v zadachakh strukturnogo materialovedeniya* [Multiscale modeling in problems of structural materials science]. Moscow: MAKSS Press, 2017, 284 p. (In Russ.)
3. Abgaryan K. K. *Vychislitel'nye algoritmy v zadachakh matematicheskogo modelirovaniya ustoychivyykh struktur kristallicheskikh materialov* [Computational algorithms in problems of mathematical modeling of stable structures of crystalline materials]. Moscow: MAKSS Press, 2017, 100 p. (In Russ.)
4. Shaskolskaya M. P. *Kristallografiya* [Crystallography]. Moscow: Vysshaya shkola, 1976, 390 p. (In Russ.)
5. Zagalskaya Yu. G., Litvinskaya G. P., Egorov-Tismenko Yu. K. *Geometricheskaya kristallografiya* [Geometric crystallography]. Moscow: Izd-vo MGU, 1986, 168 p. (In Russ.)
6. Belov N. V. *Struktura ionnykh kristallov i metallicheskikh faz* [Structure of ionic crystals and metallic phases]. Moscow: Izd-vo Akademii Nauk SSSR, 1947, 237 p. (In Russ.)
7. De Graef M., McHenry M. *Structure of materials*. Cambridge University Press, 2012, 767 p.
8. Solodovnikov S. F. *Osnovnye terminy i ponyatiya strukturnoi kristallografii i kristallokhimii* [Basic terms and concepts of structural crystallography and crystal chemistry]. Novosibirsk: INKh SO RAN, 2005, 113 p. (In Russ.)
9. Metropolis N., Ulam S. The Monte Carlo method. *J. American Statistical Association*, 1949, vol. 44, no. 247, pp. 335—341. DOI: 10.2307/2280232
10. Documentation on C#. URL: <https://docs.microsoft.com/ru-ru/dotnet/csharp/> (access: 02.11.2019).
11. Hahn Th. *International Tables for Crystallography. Vol. A: Space-group symmetry*. Berlin; New York: Springer-Verlag, 2002, 938 p. DOI: 10.1107/978095536020600000100
12. Space Group Diagrams and Tables. URL: <http://img.chem.ucl.ac.uk/sgp/large/sgp.htm> (accessed: 02.11.2019).
13. Abgaryan K. K., Sechenykh P. A., Gavrilov E. S. The object-relational approach to the development of a system of computer simulation of multiscale computational scheme of multilayer semiconductor nanostructures. *Programmnaya inzheneriya*, 2015, no. 8, pp. 9—17. (In Russ.)
14. Sechenykh P. A., Abgaryan K. K. Relational data storage model for information support of structural materials science problems. In: *Proceedings of the Second Youth Scientific Conference “Problems of Modern Informatics”*. Moscow: FITs IU RAN, 2015, pp. 181—186. (In Russ.)
15. Abgaryan K. K., Bazhanov D. I., Sechenykh P. A. Computer modeling of the crystal structure and electronic properties of GaAs, GaP, GaAs_{0.75}N_{0.25}, GaAs_{0.25}P_{0.75} (F43m). In: *Proceedings of the First Russian Crystallographic Congress (RKK'2016)*. Saint Petersburg: NP-PRINT LLC, 2016, p. 52. (In Russ.)
16. Huheey J. E. *Neorganicheskaya khimiya. Stroenie veshchestva i reaktivnaya sposobnost'* [Inorganic chemistry. The structure of matter and reactivity]. Ed. by B. D. Stepina, R. A. Lidina. Moscow: Khimiya, 1987, 696 p. (In Russ.)
17. ChemSpider. URL: <https://www.chemspider.com/> (accessed: 20.09.2019).
18. Crystallography Open Database. URL: <http://www.crystallography.net/cod/> (accessed: 20.09.2019).
19. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas. *Phys. Rev. B*, 1964, vol. 136, no. 3, pp. 864—871. DOI: 10.1103/PhysRev.136.B864
20. Kohn W., Sham L. J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys. Rev. A*, 1965, vol. 140, no. 4, pp. 1133—1138. DOI: 10.1103/PhysRev.140.A1133

Received December 26, 2019

Information about authors:

Polina A. Sechenykh^{1,2,§}: Junior Researcher (1), Senior Lecturer (2) (p-sechenykh@mail.ru)

§ Corresponding author

УДК 004.3:004.93

Вопросы реализации нейросетевых алгоритмов на мемристорных кроссбарах*

© 2019 г. А. Ю. Морозов^{1,2}, Д. Л. Ревизников^{1,2}, К. К. Абгарян^{1,2,§}

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

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

Аннотация. Присущее мемристорным кроссбарам свойство естественной параллелизации матрично-векторных операций создает возможности для их эффективного использования в нейросетевых вычислениях. Аналоговые вычисления производятся на порядки быстрее по сравнению с вычислениями на центральном процессоре и на графических ускорителях. Кроме того, значительно ниже энергозатраты на проведение математических операций. При этом существенной особенностью аналоговых вычислений является небольшая точность. В связи с этим актуальным является исследование зависимости качества работы нейронной сети от точности задания ее весов. Рассмотрены две сверточные нейронные сети, обученные на наборах данных MNIST (рукописные цифры) и CIFAR_10 (самолеты, лодки, машины и т. д.). Первая состоит из двух сверточных слоев, одного слоя подвыборки и двух полносвязанных слоев, а вторая — из четырех сверточных слоев, двух слоев подвыборки и двух полносвязанных слоев. Вычисления в сверточных и полносвязных слоях выполняются через матрично-векторные операции, которые эффективно реализуются на мемристорных кроссбарах. Слои подвыборки подразумевают операцию нахождения максимального значения из нескольких, которая также может быть реализована на аналоговом уровне. Процесс обучения нейронной сети происходит отдельно от анализа данных. Как правило, на этапе обучения используются градиентные методы оптимизации, реализацию которых целесообразно выполнять на центральном процессоре. Показано, что для получения приемлемого качества распознавания в случае с сетью, обученной на MNIST, требуется 3—4 бита точности при задании ее весов, а в случае с сетью, обученной на CIFAR_10, — 6—8 бит.

Ключевые слова: мемристор, кроссбар, точность, нейросеть, свертка, MNIST, CIFAR_10

Введение

В последние десять лет активно идет развитие технологий, в основе которых лежит электрический элемент — мемристор. Мемристор — это сопротивление, проводимость которого меняется в зависимости от суммарного протекшего через него электрического заряда. При этом установившиеся сопротивление в отсутствие тока не изменяется со временем. То есть, мемристор является элементарной ячейкой долговременной энергонезависимой памяти [1, 2].

Мемристорный кроссбар — это объединение мемристоров в матрицу. Благодаря закону Ома и закону Кирхгофа, на основе кроссбара можно выполнять аналоговое произведение матрицы на вектор. Аналоговые вычисления производятся на порядки быстрее по сравнению с вычислениями на центральном процессоре и на графических ускорителях. Кроме того, существенно ниже энергозатраты на проведение математических операций. При этом в связи с ограниченностью количества

уровней проводимости мемристора возникает проблема точности представления чисел. Корпорация Hewlett-Packard уже создала в «железе» мемристорный кроссбар, на котором реализована операция матрично-векторного умножения [3, 4]. На данный момент точность задания матрицы ограничивается 6 битами (для каждого мемристора выделяется 64 уровня проводимости).

Поскольку матрично-векторное умножение — важнейший элемент работы нейронных сетей, появляется возможность эффективной аналого-

Морозов Александр Юрьевич^{1,2} — канд. физ.-мат. наук, научный сотрудник, e-mail: morozov@infway.ru; **Ревизников Дмитрий Леонидович**^{1,2} — доктор физ.-мат. наук, профессор, e-mail: reviznikov@gmail.com; **Абгарян Каринэ Карленовна**^{1,2,§} — доктор физ.-мат. наук, заведующая отделом, e-mail: kristal83@mail.ru

§ Автор для переписки

* Статья подготовлена по материалам доклада, представленного на I-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 21—23 октября 2019 г.

вой реализации нейросетевых алгоритмов. Одной из наиболее востребованных задач искусственных нейронных сетей является задача распознавания изображений. За счет естественной параллелизации матрично-векторных операций на кроссбарах имеется возможность существенно ускорить работу нейронных сетей. При этом, в связи с ограниченностью точности, важно понимать, как дискретизация весов нейронной сети будет влиять на качество ее работы. Этому вопросу посвящена настоящая статья.

В работе описывается общая проблематика аналоговой реализации нейросетевых алгоритмов и рассматривается архитектура сверточных нейронных сетей. На примере двух нейронных сетей, обученных на наборах данных MNIST и CIFAR_10, исследуется зависимость качества распознавания от точности задания весов. Рассмотрены возможности применения мемристормых кроссбаров для аналоговой реализации нейросетевых алгоритмов.

Цель работы — исследование влияния дискретизации весов нейронной сети на качество ее работы, что позволяет оценивать возможность реализации нейросетевых алгоритмов на мемристормых кроссбарах.

Нейронные сети

Можно выделить два основных подхода к построению аналоговых нейросетей. Первый подход предполагает обучение сети непосредственно на «железном» уровне, что в наибольшей мере соответствует аналоговой парадигме нейроморфных сетей. Наиболее простой вариант может быть представлен двухслойной полносвязной сетью с одним слоем мемристормых элементов (синапсов). В этом случае соответствие синаптического веса (проводимости мемристора) интенсивности входного сигнала, подаваемого на нейрон, обеспечивает достаточно высокую точность решения задачи классификации [5]. В последнее время усиливается интерес к импульсным нейронным сетям, обучение которых организуется с использованием правила Хебба и

синаптической пластичности (метод STDP [6], согласно которому изменение весов синапсов нейрона зависит от разницы во времени между входным и выходным импульсом) [7—11]. Однако такой подход трудно реализуем применительно к сложным многослойным сетям.

Другой подход предполагает разделение этапов обучения и анализа данных. Как правило, на этапе обучения используются градиентные методы оптимизации, реализацию которых целесообразно выполнять на центральном процессоре (или на графических ускорителях). Этап анализа данных состоит в прямом распространении сигнала по сети, что, учитывая возможности параллельного выполнения матрично-векторных умножений, идеально ложится на архитектуру мемристормого кроссбара [12]. Таким образом, этап анализа данных эффективно реализуется в аналоговом режиме.

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

Другой проблемой является возможное несовершенство мемристормого элемента [13], ведущее к неконтролируемому изменению уровня проводимости в ходе функционирования системы или инициации. В этой связи актуальным является анализ влияния дефектов мемристормых элементов на точность решения задач обработки данных. Отметим, что модель мемристора можно описать как динамическую систему с неопределенностями и использовать для ее исследования соответствующие методы [14—17].

В настоящей работе рассматривается второй подход к реализации многослойных нейронных

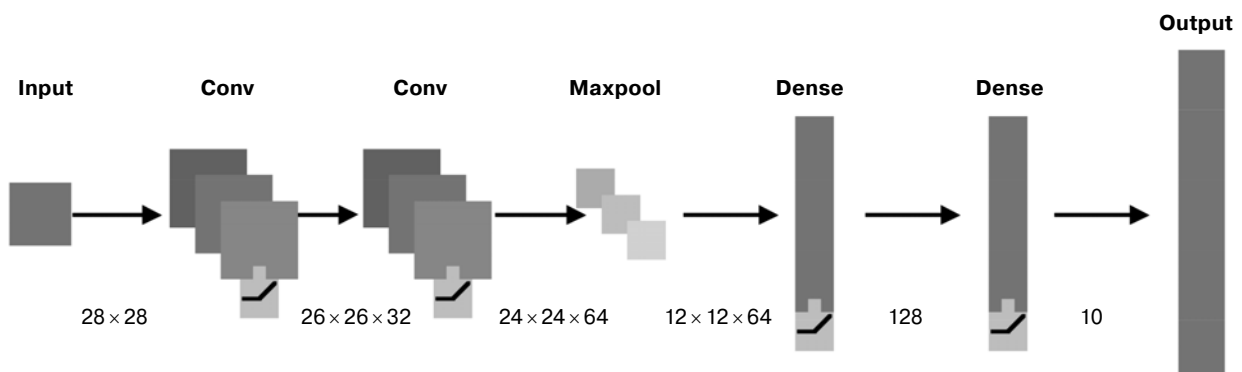


Рис. 1. Архитектура сверточной нейронной сети (MNIST)

Fig. 1. Convolutional Neural Network Architecture (MNIST)

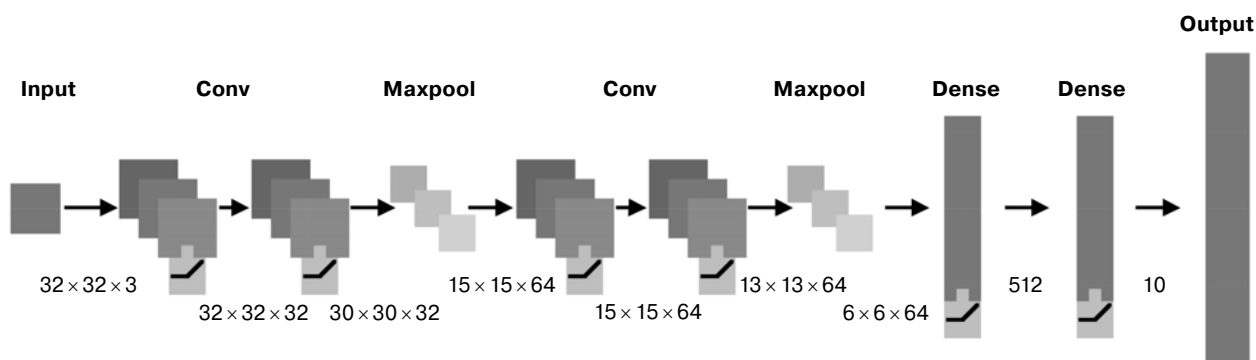


Рис. 2. Архитектура сверточной нейронной сети (CIFAR_10)

Fig. 2. Convolutional neural network architecture (CIFAR_10)

сетей. Вычисления в каждом слое сети включают перемножение матрицы весов на входной вектор, прибавление вектора смещения и применение нелинейной функции активации. Все эти действия возможно выполнить в аналоговом представлении.

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

Рассматриваются две сверточные нейронные сети. Первая состоит из двух сверточных слоев (*conv*), одного слоя подвыборки (*maxpool*) и двух полносвязанных слоев (*dense*) (рис. 1), а вторая из четырех сверточных слоев, двух слоев подвыборки и двух полносвязанных слоев (рис. 2).

Сверточный слой (*conv*) состоит из набора ядер (рис. 3). Каждое ядро это матрица (в общем случае тензор) небольшого размера (в представленных сетях, размером 3×3 и $3 \times 3 \times 3$) которая «накладывается» с перехлестом на входные данные с последую-

щим перемножением соответствующих элементов и суммированием. Например, такие операции как размытие изображения или выделение контуров являются сверткой. Если представить входные данные в виде вектора, а ядра свертки в виде больших разреженных матриц, то получение результата сверточного слоя сведется к перемножению матрицы на вектор, что в свою очередь эффективно реализуется на мемристивных кроссбарах.

Слой подвыборки (*maxpool*) применяется для уменьшения размера данных (рис. 3). В рассмотренных сетях из каждых четырех промежуточных значений оставляется только одно — максимальное. Здесь подразумевается, что операция выбора максимального элемента из нескольких может быть реализована на аналоговом уровне. Отметим, что если для уменьшения размера данных использовать не выбор максимального элемента, а усреднение, тогда данный слой можно представить как сверточный слой, в котором ядра покрывают входные данные без перехлеста.

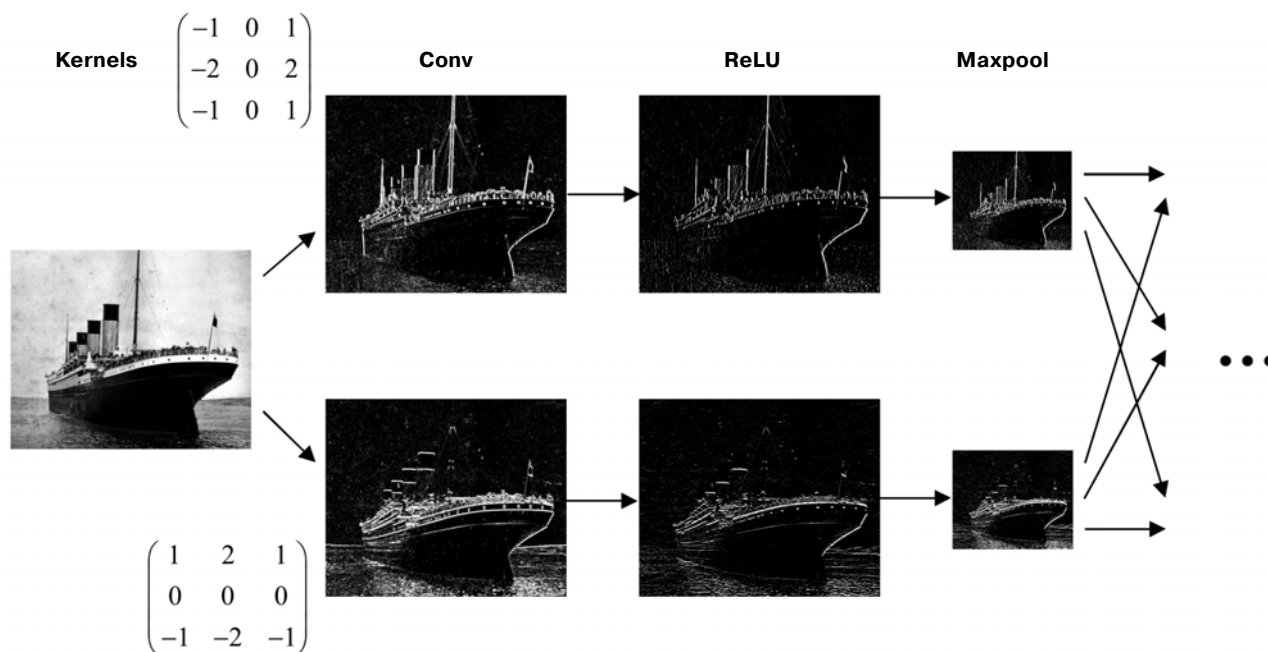
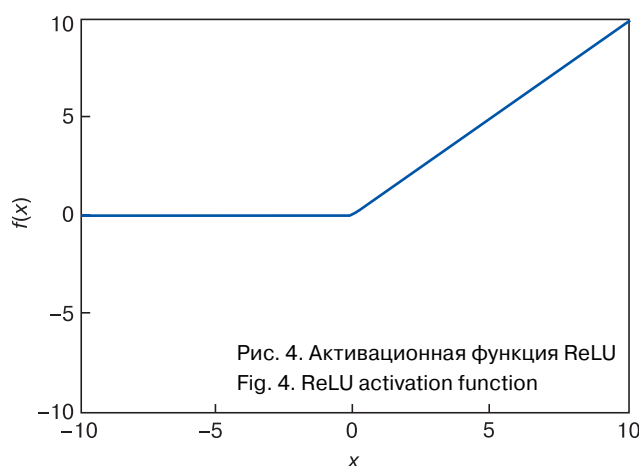


Рис. 3. Часть сверточной нейронной сети

Fig. 3. Part of a convolutional neural network



К результату каждого слоя (кроме слоя подвыборки) поэлементно применяется активационная функция ReLU (рис. 4):

$$f(x) = \max(0, x).$$

Данная функция представляется на железном уровне в виде полупроводникового диода.

В целом все элементы рассмотренных нейронных сетей возможно реализовать на аналоговых электронных компонентах.



Рис. 5. Набор данных MNIST
Fig. 5. MNIST dataset



Рис. 6. Набор данных CIFAR_10
Fig. 6. Dataset CIFAR_10

Результаты и их обсуждение

Для обучения и работы с сетями использовалась библиотека Keras, написанная на языке Python, которая является надстройкой над фреймворками DeepLearning4j, TensorFlow и Theano [18].

Первая нейронная сеть (см. рис. 1) была обучена на наборе данных MNIST состоящем из изображений рукописных цифр (рис. 5) [19]. Вторая нейронная сеть (см. рис. 2) обучалась на CIFAR_10, состоящем из самолетов, автомобилей, животных и т. д. (рис. 6) [20]. Точность распознавания на тестовых выборках обученной нейронной сети составила: для MNIST — 99,16 % и для CIFAR10 — 74,86 %. Отметим, что для CIFAR_10 возможна реализация с более высокой точностью, однако целью данной работы является не достижение точности искусственной нейронной сети, а оценка погрешности вследствие дискретизации весов.

Далее была выполнена дискретизация весов: начиная с 2-х значений (1 бит точности) и до

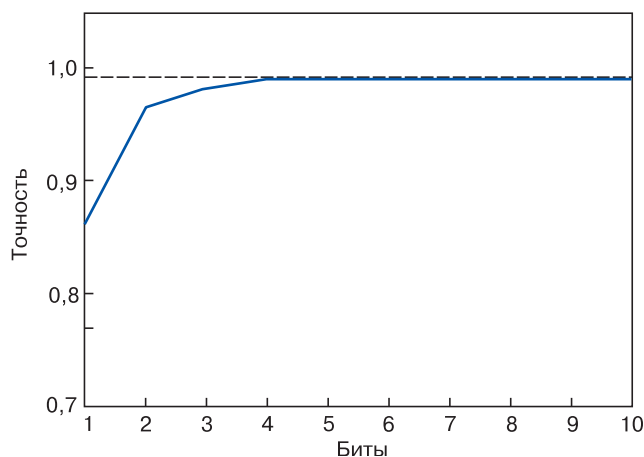


Рис. 7. Зависимость качества нейронной сети от точности задания весов (MNIST)

Fig. 7. Dependence of the quality of the neural network on the accuracy of setting the weights (MNIST)

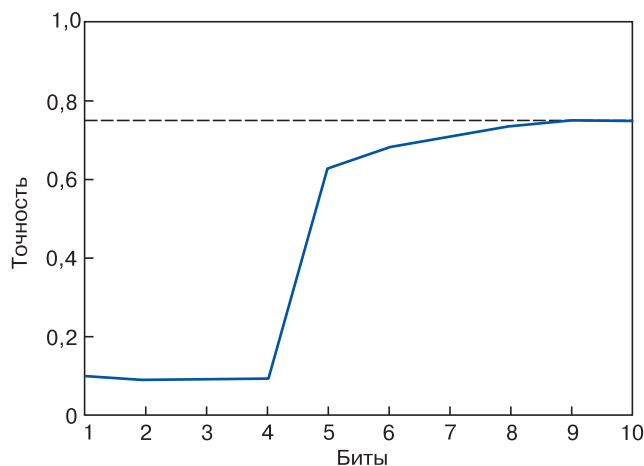


Рис. 8. Зависимость качества нейронной сети от точности задания весов (CIFAR_10)

Fig. 8. Dependence of the quality of the neural network on the accuracy of setting the weights (CIFAR_10)

1024 значений (10 бит точности). Дискретизация выполнялась в рамках каждого слоя отдельно. На рис. 7 и 8 показаны зависимости качества распознавания от количества бит точности задания весов сети. Пунктирной линией показана исходная точность распознавания.

Для сети, обученной на MNIST'e, для достижения приемлемой точности (98—99 %) требуется 3—4 бита точности. А для нейронной сети, обученной на CIFAR_10, нужно 6—8 бит.

Заключение

В работе рассмотрены некоторые вопросы реализации нейросетевых алгоритмов на мемристорных кроссбарах. В связи с ограниченностью точности аналоговых вычислений исследовано влияние дискретизации весов нейронных сетей на качество распознавания. На примере двух сверточных сетей, обученных на наборах данных MNIST и CIFAR_10 показано, что возможно применять мемристорные кроссбары для аналоговой реализации нейросетевых алгоритмов. Для сети, обученной на MNIST'e, для достижения приемлемой точности (98—99 %) требует 3—4 бита точности. А для нейронной сети, обученной на CIFAR_10, нужно 6—8 бит.

Библиографический список

1. Wong H.-S. P., Lee H.-Y., Yu S., Chen Y.-S., Wu Y., Chen P.-S., Lee B., Chen F. T., Tsai M.-J. Metal-oxide RRAM // *Proceedings of the IEEE*. 2012. V. 100, Iss. 6. P. 1951—1970. DOI: 10.1109/JPROC.2012.2190369
2. Yang J. J., Strukov D. B., Stewart D. R., Memristive devices for computing // *Nature Nanotechnology*. 2013. V. 8, N 1. P. 13—24. DOI: 10.1038/nnano.2012.240
3. Li C., Hu M., Li Y., Jiang H., Ge N., Montgomery E., Zhang J., Song W., Dávila N., Graves C. E., Li Z., Strachan J. P., Lin P., Wang Z., Barnell M., Wu Q., Williams R. S., Yang J. J., Xia Q. Analogue signal and image processing with large memristor crossbars // *Nature Electronics*. 2018. V. 1, N 1. P. 52—59. DOI: 10.1038/s41928-017-0002-z
4. Hu M., Graves C. E., Li C., Li Y., Ge N., Montgomery E., Dávila N., Jiang H., Williams R. S., Yang J. J., Xia O., Strachan J. P. Memristor-based analog computation and neural network classification with a dot product engine // *Advanced Materials*. 2018. V. 30, Iss. 9. P. 1705914. DOI: 10.1002/adma.201705914
5. Тарков М. С. Реализация нейронной WTA-сети на мемристормом кроссбаре // *ПДМ. Приложение*, 2015, Вып. 8. С. 151—154. DOI: 10.17223/2226308X/8/59
6. Diehl P. U., Cook M. Unsupervised learning of digit recognition using spike-timing-dependent plasticity // *Front. Comput. Neurosci.* 2015. V. 9. Art. No. 99. P. 9. DOI: 10.3389/fncom.2015.00099
7. Ambrogio S., Balatti S., Milo V., Carboni R., Wang Z.-Q., Calderoni A., Ramaswamy N., Ielmini D. Neuromorphic learning and recognition with one-transistor-one-resistor synapses and bistable metal oxide RRAM // *IEEE Transactions on Electron Devices*. 2016. V. 63, N 4. P. 1508—1515. DOI: 10.1109/TED.2016.2526647
8. Guo Y., Wu H., Gao B., Qian H. Unsupervised learning on resistive memory array based spiking neural networks // *Front. Neurosci.* 2019. V. 13, Art. No. 812. DOI: 10.3389/fnins.2019.00812
9. Milo V., Pedretti G., Laudato M., Bricalli A., Ambrosi E., Bianchi S., Chicca E., Ielmini D. Resistive switching synapses for unsupervised learning in feed-forward and recurrent neural networks // *IEEE International Symposium on Circuits and Systems (ISCAS)*. Florence (Italy): IEEE, 2018. P. 1—5. DOI: 10.1109/ISCAS.2018.8351824
10. Pedretti G., Bianchi S., Milo V., Calderoni A., Ramaswamy N., Ielmini D. Modeling-based design of brain-inspired

spiking neural networks with RRAM learning synapses // IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM). San Francisco (CA, USA): IEEE, 2017. P. 28.1.1—28.1.4. DOI: 10.1109/IEDM.2017.8268467

11. Milo V., Ielmini D., Chicca E. Attractor networks and associative memories with STDP learning in RRAM synapses // IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM). San Francisco (CA, USA): IEEE, 2017. P. 11.2.1—11.2.4. DOI: 10.1109/IEDM.2017.8268369

12. Li B., Shan Y., Hu M., Wang Y., Chen Y., Yang H., Memristor-based approximated computation // International Symposium on Low Power Electronics and Design (ISLPED). Beijing (China): IEEE, 2013. P. 242—247. DOI: 10.1109/ISLPED.2013.6629302

13. Теплов Г. С., Горнев Е. С. Модель на языке Verilog—А многоуровневого биполярного мемристора с учетом девиаций параметров переключения // Микроэлектроника. 2019. Т. 48, № 3. С. 163—175. DOI: 10.1134/S0544126919030104

14. Morozov A. Yu., Reviznikov D. L. Adaptive interpolation algorithm based on a kd-tree for numerical integration of systems of ordinary differential equations with interval initial conditions // Differential Equations. 2018. V. 54, N 7. P. 945—956. DOI: 10.1134/S0012266118070121

15. Morozov A. Yu., Reviznikov D. L., Gidasov V. Yu. Adaptive interpolation algorithm based on a kd-tree for the problems of chemical kinetics with interval parameters // Mathematical Models and Computer Simulations. 2019. V. 11, N 4. P. 622—633. DOI: 10.1134/S2070048219040100

16. Morozov A. Yu., Reviznikov D. L. Modelling of dynamic systems with interval parameters on graphic processors // Программная инженерия. 2019. Т. 10, № 2. С. 69—76. DOI: 10.17587/prin.10.69-76

17. Морозов А. Ю., Ревизников Д. Л. Методы компьютерного моделирования динамических систем с интервальными параметрами. М.: Изд-во МАИ, 2019. 160 с.

18. Gulli A., Pal S. Deep learning with Keras: implement neural networks with Keras on Theano and TensorFlow. Birmingham; Mumbai: Packt Publishing Ltd., 2017. 490 p.

19. MNIST CNN. URL: https://keras.io/examples/mnist_cnn/ (дата обращения: 01.10.2019).

20. Train a simple deep CNN on the CIFAR10 small images dataset. URL: https://keras.io/examples/cifar10_cnn/ (дата обращения: 01.10.2019).

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

Статья поступила в редакцию 26 декабря 2019 г.

Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering. 2019, vol. 22, no. 4, pp. 272—278. DOI: 10.17073/1609-3577-2019-4-272-278

Issues of implementing neural network algorithms on memristor crossbars

A. Yu. Morozov^{1,2}, D. L. Reviznikov^{1,2}, K. K. Abgaryan^{1,2,§}

¹ Federal Research Centre “Information and Control” of the Russian Academy of Sciences,
44 Vavilov Str., Moscow 119333, Russia

² Moscow Aviation Institute (National Research University),
4 Volokolamskoe shosse, 4, Moscow 125993, Russia

Abstract. The property of natural parallelization of matrix–vector operations inherent in memristor crossbars creates opportunities for their effective use in neural network computing. Analog calculations are orders of magnitude faster in comparison to calculations on the central processor and on graphics accelerators. Besides, mathematical operations energy costs are significantly lower. The essential feature of analog computing is its low accuracy. In this regard, studying the dependence of neural network quality on the accuracy of setting its weights is relevant. The paper considers two convolutional neural networks trained on the MNIST (handwritten digits) and CIFAR_10 (airplanes, boats, cars, etc.) data sets. The first convolutional neural network consists of two convolutional layers, one subsample layer and two fully connected layers. The second one consists of four convolutional layers, two subsample layers and two fully connected layers. Calculations in convolutional and fully connected layers are performed through matrix–vector operations that are implemented on memristor crossbars. Sub-sampling layers imply the operation of finding the maximum value from several values. This operation can be implemented at the analog level. The process of training a neural network runs separately from data analysis. As a rule, gradient optimization methods are used at the training stage. It is advisable to perform calculations using these methods on CPU. When setting the weights, 3—4 precision bits are required to obtain an acceptable recognition quality in the case the network is trained on MNIST. 6—10 precision bits are required if the network is trained on CIFAR_10.

Keywords: memristor, crossbar, accuracy, neural network, convolution, MNIST, CIFAR_10

References

1. Wong H.-S. P., Lee H.-Y., Yu S., Chen Y.-S., Wu Y., Chen P.-S., Lee B., Chen F. T., Tsai M.-J. Metal-oxide RRAM. *Proceedings of the IEEE*, 2012, vol. 100, no. 6, pp. 1951—1970. DOI: 10.1109/JPROC.2012.2190369

2. Yang J. J., Strukov D. B., Stewart D. R., Memristive devices for computing. *Nature Nanotechnology*, 2013, vol. 8, no. 1, pp. 13—24. DOI: 10.1038/nnano.2012.240

3. Li C., Hu M., Li Y., Jiang H., Ge N., Montgomery E., Zhang J., Song W., Dávila N., Graves C. E., Li Z., Strachan J. P., Lin P., Wang Z.,

Barnell M., Wu Q., Williams R. S., Yang J. J., Xia Q. Analogue signal and image processing with large memristor crossbars. *Nature Electronics*, 2018, vol. 1, no. 1, pp. 52—59. DOI: 10.1038/s41928-017-0002-z

Information about authors:

Alexander Yu. Morozov^{1,2}: Cand. Sci. (Phys.–Math.), Researcher (morozov@infway.ru); Dmitry L. Reviznikov^{1,2}: Dr. Sci. (Phys.–Math.), Professor (reviznikov@gmail.com); Karine K. Abgaryan^{1,2,§}: Dr. Sci. (Phys.–Math.), Head of the Department (kristal83@mail.ru)

§ Corresponding author

4. Hu M, Graves C. E., Li C., Li Y., Ge N., Montgomery E., Dávila N., Jiang H., Williams R. S., Yang J. J., Xia O., Strachan J. P. Memristor-based analog computation and neural network classification with a dot product engine. *Advanced Materials*, 2018, vol. 30, no. 9, p. 1705914. DOI: 10.1002/adma.201705914
5. Tarkov M. S. Implementation of a neural WTA-network on the memristor crossbar. *Prikl. Diskr. Mat. Suppl.*, 2015, no. 8, pp. 151—154. (In Russ.). DOI: 10.17223/2226308X/8/59
6. Diehl P. U., Cook M. Unsupervised learning of digit recognition using spike-timing-dependent plasticity. *Front. Comput. Neurosci.*, 2015, vol. 9, art. 99, p. 9. DOI: 10.3389/fncom.2015.00099
7. Ambrogio S., Balatti S., Milo V., Carboni R., Wang Z.-Q., Calderoni A., Ramaswamy N., Ielmini D. Neuromorphic learning and recognition with one-transistor-one-resistor synapses and bistable metal oxide RRAM. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 2016, vol. 63, no. 4, pp. 1508—1515. DOI: 10.1109/TED.2016.2526647
8. Guo Y., Wu H., Gao B., Qian H. Unsupervised learning on resistive memory array based spiking neural networks. *Front. Neurosci.*, 2019, vol. 13, art. 812. DOI: 10.3389/fnins.2019.00812
9. Milo V., Pedretti G., Laudato M., Bricalli A., Ambrosi E., Bianchi S., Chicca E., Ielmini D. Resistive switching synapses for unsupervised learning in feed-forward and recurrent neural networks. In: *IEEE International Symposium on Circuits and Systems (ISCAS)*. Florence (Italy): IEEE, 2018, pp. 1—5. DOI: 10.1109/ISCAS.2018.8351824
10. Pedretti G., Bianchi S., Milo V., Calderoni A., Ramaswamy N., Ielmini D. Modeling-based design of brain-inspired spiking neural networks with RRAM learning synapses. In: *IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)*. San Francisco (CA, USA): IEEE, 2017, pp. 28.1.1—28.1.4. DOI: 10.1109/IEDM.2017.8268467
11. Milo V., Ielmini D., Chicca E. Attractor networks and associative memories with STDP learning in RRAM synapses. In: *IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)*. San Francisco (CA, USA): IEEE, 2017, pp. 11.2.1—11.2.4. DOI: 10.1109/IEDM.2017.8268369
12. Li B., Shan Y., Hu M., Wang Y., Chen Y., Yang H., Memristor-based approximated computation. In: *International Symposium on Low Power Electronics and Design (ISLPED)*. Beijing (China): IEEE, 2013, pp. 242—247. DOI: 10.1109/ISLPED.2013.6629302
13. Teplov G. S., Gornev E. S. Multilevel bipolar memristor model considering deviations of switching parameters in the Verilog-A language. *Russ. Microelectron.*, 2019, vol. 48, no. 3, pp. 131—142. DOI: 10.1134/S1063739719030107
14. Morozov A. Yu., Reviznikov D. L. Adaptive interpolation algorithm based on a kd-tree for numerical integration of systems of ordinary differential equations with interval initial conditions. *Differential Equations*, 2018, vol. 54, no. 7, pp. 945—956. DOI: 10.1134/S0012266118070121
15. Morozov A. Yu., Reviznikov D. L., Gidasov V. Yu. Adaptive interpolation algorithm based on a kd-tree for the problems of chemical kinetics with interval parameters. *Mathematical Models and Computer Simulations*, 2019, vol. 11, no. 4, pp. 622—633. DOI: 10.1134/S2070048219040100
16. Morozov A. Yu., Reviznikov D. L. Modelling of dynamic systems with interval parameters on graphic processors. *Programmnaya Ingeneria = Software Engineering*, 2019, vol. 10, no. 2, pp. 69—76. DOI: 10.17587/prin.10.69-76
17. Morozov A. Yu., Reviznikov D. L. *Metody komp'yuternogo modelirovaniya dinamicheskikh sistem s interval'nymi parametrami* [Methods for computer modeling of dynamic systems with interval parameters]. Moscow: Izd-vo Moskovskogo aviatsionnogo instituta, 2019, 160 p. (In Russ.)
18. Gulli A., Pal S. Deep learning with Keras: implement neural networks with Keras on Theano and TensorFlow. Birmingham; Mumbai: Packt Publishing Ltd., 2017, 490 p.
19. MNIST CNN. URL: https://keras.io/examples/mnist_cnn/ (accessed: 01.10.2019).
20. Train a simple deep CNN on the CIFAR10 small images dataset. URL: https://keras.io/examples/cifar10_cnn/ (accessed: 01.10.2019).

Acknowledgments. *This work was supported by the RFBR grant No. 19-29-03051 MK.*

Received December 26, 2019

УДК 621.382

Основные подходы к моделированию формирования фоторезистивной маски в вычислительной литографии*

© 2019 г. Н. Н. Балан[§], В. В. Иванов, А. В. Кузовков, Е. В. Соколова, Е. С. Шамин*АО «Научно-исследовательский институт молекулярной электроники»,
1-й Западный проезд, д. 12, стр. 1, Москва, Зеленоград, 124460, Россия*

Аннотация. В статье дан обзор основных моделей формирования фоторезистивной маски, используемых в настоящее время, и задач, в которых они применяются. Кратко рассмотрены этапы «полного» моделирования формирования маски, основанного на физико-химических принципах, в случае как традиционных нафтохинондиазидовых фоторезистов, так и фоторезистов с химическим усилением. Рассмотрена концепция основных применяемых в настоящее время компактных моделей, предсказывающих контур фоторезистивной маски для полноразмерной топологии изделия, а именно, моделей VT5 (Variable Threshold 5) и CM1 (Compact Model 1). Приводятся примеры некоторых расчетов с использованием как полного моделирования формирования маски, так и компактных моделей. При помощи полного моделирования формирования фоторезистивной маски был оптимизирован литографический стек для перспективного технологического процесса. Найдены оптимальные соотношения толщин для бинарного антиотражающего слоя, применяемого в литографическом процессе с водной иммерсией. При калибровке компактной модели VT5 решена задача определения оптимальной выборки калибровочных структур, максимально охватывающих пространство параметров оптического изображения, используя при этом минимальное количество структур. Для решения указанной задачи использовался кластерный анализ. Кластеризация проводилась методом *k*-средних. Оптимальный размер выборки составил от 300 до 350 структур, среднеквадратичная ошибка при этом составляет 1,4 нм, что незначительно превышает шум технологического процесса для 100 нм структур. Использование СЭМ-контуров при калибровке модели VT5 позволяет снизить среднеквадратическую ошибку по 40 структурам до 1,18 нм.

Ключевые слова: фоторезист, проекционная фотолитография, VT5, CM1, кластеризация методом *k*-средних

Введение

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

$$F = \frac{k_1 \lambda}{NA},$$

где λ — длина волны экспонирующего излучения; $NA = n \sin \theta$ — числовая апертура проекционного объектива (θ — апертурный угол; n — показатель преломления среды); k_1 — коэффициент, зависящий от факторов технологического процесса. В клас-

сической рэлеевской формуле для разрешающей способности оптических систем он равен 0,61 [2]. Разнообразные технические приемы, направленные на уменьшение k_1 , как правило, именуются в литературе термином «RET» (*Resolution Enhancement Techniques*). К указанным приемам, реализуемым при помощи методов т.н. вычислительной литографии [3], можно отнести:

- применение внеосевого освещения [4];
- введение фазовых элементов на фотошаблоне [5—7];
- коррекцию оптической близости [8].

Корректное использование RET позволяет довести значение k_1 до 0,28 (и даже менее), добиваясь пропечатывания в резисте элементов с размерами

Балан Никита Николаевич[§] — кандидат техн. наук, инженер-конструктор 1 категории, e-mail: nbalan@niime.ru; **Иванов Владимир Викторович** — заместитель начальника Отдела проектирования фотошаблонов, e-mail: vlaivanov@niime.ru; **Кузовков Алексей Валерьевич** — магистр, инженер-конструктор 1 категории, e-mail: akuzovkov@niime.ru; **Соколова Евгения Васильевна** — магистр, инженер-конструктор 2 категории, e-mail: evsokolova@niime.ru; **Шамин Евгений Сергеевич** — бакалавр, младший научный сотрудник, e-mail: eshamin@niime.ru

[§] Автор для переписки

* Статья подготовлена по материалам доклада, представленного на I-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 21—23 октября 2019 г.

значительно менее длины волны используемого излучения.

Важнейшим разделом вычислительной литографии является моделирование процесса формирования фоторезистивной маски (**ФРМ**). Это моделирование, так или иначе всегда выполняемое при реализации перечисленных выше методик, направленных на уменьшение технологического коэффициента k_1 , реализуется в двух видах:

- «полное» моделирование, основанное на физико-химических принципах. Полное моделирование позволяет рассчитать трехмерную конфигурацию фоторезистивной маски на сравнительно небольших участках пластины (единицы или десятки мкм) (рис. 1, а);

- аппроксимационно-эмпирическое моделирование, дающее возможность относительно быстро рассчитать конфигурацию (как правило, только контур) получаемой маски для полноразмерной топологии кристалла при помощи ряда упрощенных интерполяционных моделей, называемых также «компактными» [9] (рис. 1, б). Этот вид моделирования по сути представляет собой различной степени сложности (в зависимости от решаемой задачи) пороговую обработку рассчитанного оптического изображения, формируемого в слое резиста проекционной системой литографической установки. Правила обработки изображения определяются путем анализа экспериментальных данных, полученных в результате измерения тестовых структур, пропечатанных на пластине в условиях реального производства (таким образом производится калибровка модели). Возможен также вариант модельного эксперимента, производимого при помощи полного моделирования пропечатки калибровочных структур.

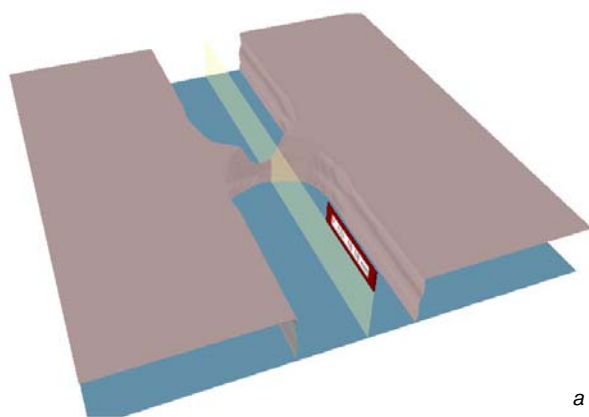
В данной работе делается обзор основных используемых в настоящее время моделей формиро-

вания фоторезистивной маски и задач, в которых они применяются. Приводятся примеры некоторых расчетов для существующих и перспективных технологических процессов.

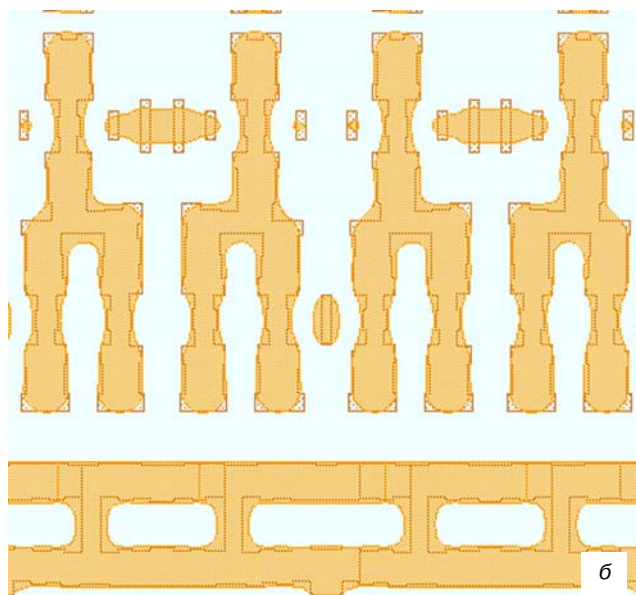
«Полное» моделирование формирования фоторезистивной маски на основе физико-химических принципов

«Полное» моделирование описывает с некоторой степенью подробности все этапы формирования фоторезистивной маски (рис. 2) — от нанесения пленок резистивного стека до экспонирования и проявления маски, пред- и постэкспозиционных термообработок и т. д. (см. рис. 2). Оно реализовано, как правило, в так называемых «процессных» САПР (KLA Prolith, GenISys Lab, Panoramic Hyperlith и др.), используемых при отработке технологических процессов фотолитографии, например, для подбора оптимальных параметров литографического стека, формы осветителя и т. п. Полное моделирование на основе физико-химических принципов используется при настройке процедуры коррекции оптической близости, при разработке правил расстановки вспомогательных непропечатываемых структур [10], определении правил введения фазового сдвига [5, 6, 11, 12]. В процессе разработки новых модификаций фоторезиста такой вид моделирования позволяет предсказывать зависимость конфигурации формируемой маски от концентрации отдельных составляющих исследуемой композиции.

Основным процессом, рассматриваемым при полном моделировании формирования фоторези-



а



б

Рис. 1. Примеры результатов моделирования формирования фоторезистивной маски:

а — расчет трехмерной конфигурации фоторезистивной маски при помощи «полного» моделирования, основанного на физических принципах (САПР KLA Prolith); б — расчет контура фоторезистивной маски при помощи компактных моделей (САПР Mentor Graphics Calibre)

Fig. 1. Resist mask formation simulation examples: (a) 3D resist configuration computation using “full” simulation based on physical fundamentals (KLA Prolith CAD); (b) resist contour computation using compact models (Mentor Graphics Calibre CAD)

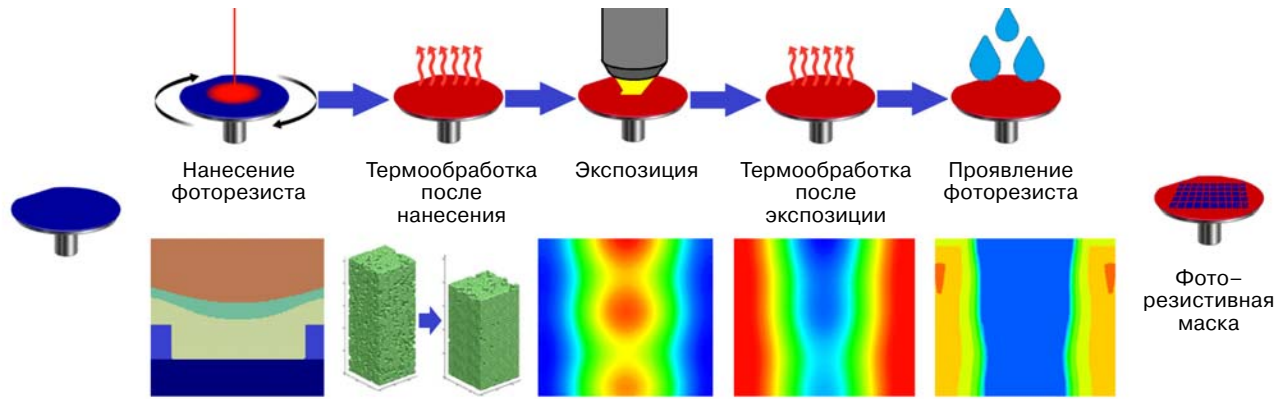


Рис. 2. Процесс формирования фоторезистивной маски

Fig. 2. Resist mask formation process

стивной маски, является образование скрытого изображения в слое фоторезиста при экспозиции.

Двумерное распределение интенсивности в плоскости пластины при освещении фотошаблона протяженным пространственно-некогерентным источником излучения (так называемое «воздушное» изображение) рассчитывается, как правило, методом Хопкинса [1, 13]

$$I(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} TCC(f_x, \tilde{f}_x) T_m(f_x) T_m^*(\tilde{f}_x) e^{2\pi i(f_x - \tilde{f}_x)x} df_x d\tilde{f}_x,$$

где $TCC(f_x, \tilde{f}_x) = \int_{-\infty}^{\infty} P(f_x + f'_x) P^*(\tilde{f}_x + f'_x) \tilde{S}(f'_x) df'_x$ — так

называемый «передаточный кросс-коэффициент» (transmission cross-coefficient), зависящий только от свойств оптической системы и формы освеще-

тителя; $P(f_x) = \begin{cases} 1, f_x \leq \frac{NA}{\lambda}; \\ 0, f_x > \frac{NA}{\lambda} \end{cases}$ — функция зрачка;

$\tilde{S}(f_x)$ — нормализованная функция осветителя; $T_m(f_x) = F\{E_i(x)t_m(x)\}$ — фурье-образ произведения амплитуды падающего на фотошаблон излучения на функцию пропускания фотошаблона (в общем случае комплексную), собственно и являющуюся исходным изображением. Для простоты рассмотрен одномерный случай.

Главное достоинство метода Хопкинса состоит в том, что передаточный кросс-коэффициент TCC (в двумерном дискретном случае это четырехмерная матрица) может быть определен единственный раз, после чего можно производить расчеты распределения интенсивности для абсолютно различных исходных изображений с использованием уже посчитанного TCC , что значительно сокращает время расчета.

Следующим этапом является определение объемного распределения интенсивности светового излучения в пленке фоторезиста. Оно может быть рассчитано с использованием ряда приближений,

простейшим из которых является представление распределения интенсивности в форме

$$I(x, z) = I_I(x) I_S(z),$$

где $I_I(x)$ — интенсивность «воздушного» изображения, определенная, например, методом Хопкинса; $I_S(z)$ — распределение интенсивности по толщине пленки, рассчитываемое с использованием соотношений Френеля [1, 2] в предположении нормального падения плоской волны на поверхность резиста. Это простейшее приближение было использовано Ф. Диллом в 1975 г. в работе [14] при выводе известных уравнений, описывающих формирование скрытого изображения в слое фоторезиста. Распределение интенсивности по толщине пленки часто имеет осциллирующий характер в силу интерференции прошедшей и отраженной волн. Применение антиотражающих слоев (BARC — *Bottom Anti-Reflecting Coating*), согласованных по толщинам и показателям преломления с пленкой резиста, позволяет свести к минимуму осцилляции интенсивности. К сожалению, рассмотренное приближение удовлетворительно работает лишь для малых числовых апертур, в случае же $NA > 0,35$ необходимо использовать более сложные и точные модели, подробно описанные в работе [1].

Далее необходимо произвести моделирование формирования скрытого изображения в слое фоторезиста в процессе его засветки. Здесь используется закон Гротгуса—Дрейпера (первый закон фотохимии), согласно которому химическую реакцию в веществе может вызвать только поглощенная часть падающего на него света. Поглощение же света, в свою очередь описывается законом Бугера—Ламберта, определяющим падение интенсивности при прохождении излучения в поглощающей среде

$$I(z) = I_0 \exp(-\alpha z),$$

где I_0 — интенсивность падающего на материал излучения; z — координата внутри материала с на-

чалом осчета на поверхности резистивной пленки; α — коэффициент поглощения [1].

Важно понимать, что каждая составляющая светочувствительной композиции имеет свой молярный коэффициент поглощения, и, в общем случае, значение α зависит от концентраций этих компонент. Для типовых позитивных фоторезистов, предназначенных для работы на длинах волн 436 и 365 нм, основными компонентами являются новолачная смола и фотоувствительная составляющая на нафтохинондиазидах (НХД или DNQ) (рис. 3). Кроме того, присутствуют органический растворитель и продукты фотохимической реакции (рис. 4).

Процесс преобразования оптического изображения в скрытое (то есть кинетика фотохимической реакции) описывается упомянутой ранее системой дифференциальных уравнений Дилла [14]

$$\frac{\partial I(z,t)}{\partial z} = -I(z,t)[AM(z,t) + B];$$

$$\frac{\partial I(z,t)}{\partial t} = -I(z,t)M(z,t)C,$$

где t — время; $M(z,t)$ — относительная концентрация фотоувствительной составляющей; A — часть коэффициента поглощения, зависящая от экспозиции; B — постоянная часть коэффициента поглощения; C — скорость разрушения фотоувствительной составляющей резиста. Параметры A , B и C , называемые также параметрами Дилла, определяются экспериментально (см., например, [15, 16] или [1]). Разрушение фотоувствительной составляющей (см. рис. 4) приводит к резкому увеличению растворимости резистивной пленки в щелочных растворах.

В ходе моделирования засветки и проявления НХД фоторезистов должны быть учтены эффекты, вызываемые предварительной термообработкой, а также влияние остаточного растворителя на диффузию продуктов реакции в ходе постэкспозиционной термообработки. Основное назначение предварительной термообработки (или термообработки после нанесения (см. рис. 2) состоит в испарении и диффузии растворителя, кроме того, происходит частичное

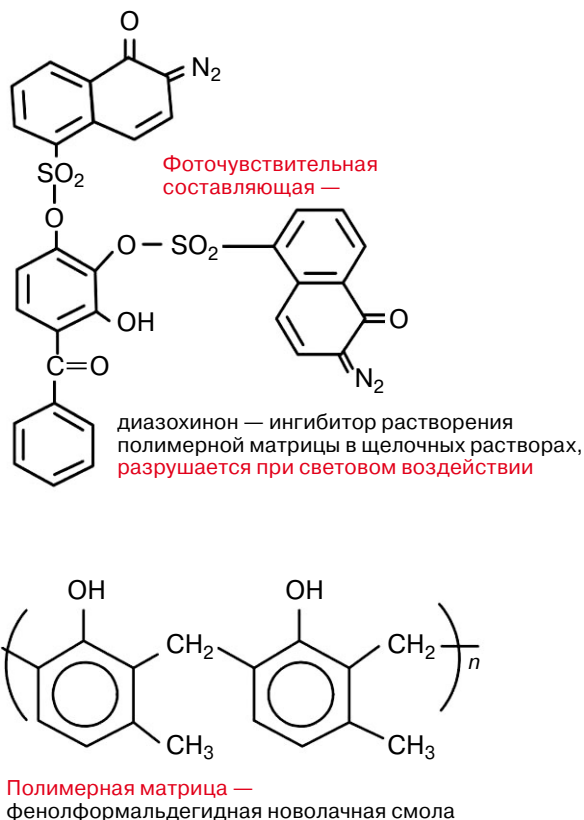


Рис. 3. Основные компоненты НХД-фоторезистов

Fig. 3. Main DNQ photoresist components

разложение светочувствительной составляющей. Эти явления в конечном итоге приводят к некоторой вариации параметров Дилла.

При использовании рабочих длин волн от 248 нм и менее традиционные фоторезисты перестают эффективно работать по причине сильного поглощения света новолачной смолой. Соответственно, были созданы так называемые «химически усиленные» фоторезисты, в которых с излучением реагирует фотокислотный генератор (PAG — *Photo Acid Generator*) (рис. 5). Выделенная при экспозиции кислота модифицирует полимерную матрицу при постэкспозиционной термообработке, делая полимер растворимым (рис. 6) и практически не расходуясь в процессе реакции. Здесь реализуется принцип

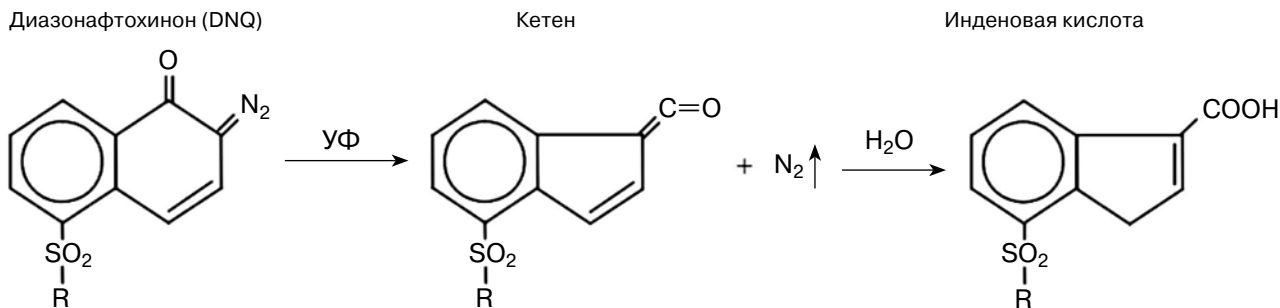


Рис. 4. Разрушение НХД в процессе засветки УФ-излучением

Fig. 4. DNQ resist UV decomposition

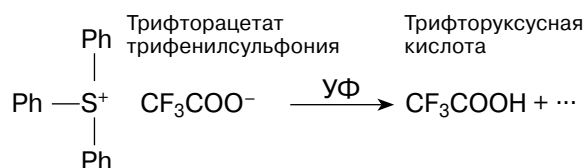


Рис. 5. Разложение фотокислотного генератора под действием УФ-излучения в химически усиленных фоторезистах

Fig. 5. Photoacid generator UV decomposition in chemically enhanced resists

катализа: индуцированная нагреванием кислота диффундирует внутрь полимера и реагирует с макромолекулами, вызывая разрушение защитных гидрофобных групп с образованием гидрофильных, после чего вновь высвобождается [17]. Число реакционных актов на один поглощенный квант света составляет около сотни.

Кроме того, в химически усиленные резисты вводятся в небольшой концентрации специальные замедлители реакции — гидроксиды, призванные нейтрализовать кислоту, выделенную на низких дозах экспозиции. Это позволяет добиться необходимой пороговой характеристики резиста, уменьшить чувствительность резиста к диффузии кислоты в неэкспонированные участки, а также к его загрязнению основаниями из атмосферы.

Процесс экспонирования химически усиленных резистов также описывается системой уравнений Дилла, однако в данном случае ключевое значение приобретает моделирование кинетики процесса постэкспозиционной термообработки, значительно более химически сложного в сравнении с НХД-фоторезистами.

Далее экспонированные участки удаляются в щелочном проявителе, в качестве которого для обоих видов фоторезистов используется, как правило, раствор гидроксида тетраметиламмония. Существует ряд методов моделирования процесса проявления экспонированного фоторезиста, использующих достаточно сложные и ресурсоемкие модели, основанные на теории клеточных автоматов [18], однако

зачастую применяется простое эмпирическое соотношение для скорости проявления [17]

$$D(M) = \exp(E_1 + E_2M + E_3M^2),$$

где $M(x,z)$ — скрытое изображение или концентрация светочувствительной составляющей; E_1 , E_2 , E_3 — коэффициенты, определяемые экспериментально.

Возможность расчета профиля ФРМ в процессе полного моделирования позволяет прогнозировать возникновение стоячих волн, получать так называемые «колебательные кривые» — зависимости какого-либо параметра (например, критического размера или дозы полной засветки) от толщины фоторезистивной маски, а также оценивать так называемые «окна процесса» — области в координатах доза-дефокусировка, в которых формируемая фоторезистивная маска сохраняет геометрические параметры, приемлемые для технологического процесса.

Применение «компактных» моделей при расчете контура ФРМ для полноразмерной топологии изделия

Основное предназначение аппроксимационно-эмпирического моделирования при расчете контура ФРМ состоит, как правило, в быстром получении двумерной геометрии фоторезистивной маски на полноразмерной топологии литографического слоя в процессе реализации топологической коррекции искажений, обусловленных эффектом оптической близости. Как уже отмечалось выше, такое моделирование по сути является пороговой обработкой двумерного воздушного изображения, рассчитанного методом Хопкинса.

Так называемые «конструкторско-технологические» САПР, реализующие такое моделирование, демонстрируют колоссальный выигрыш по времени расчета контура ФРМ в сравнении с про-

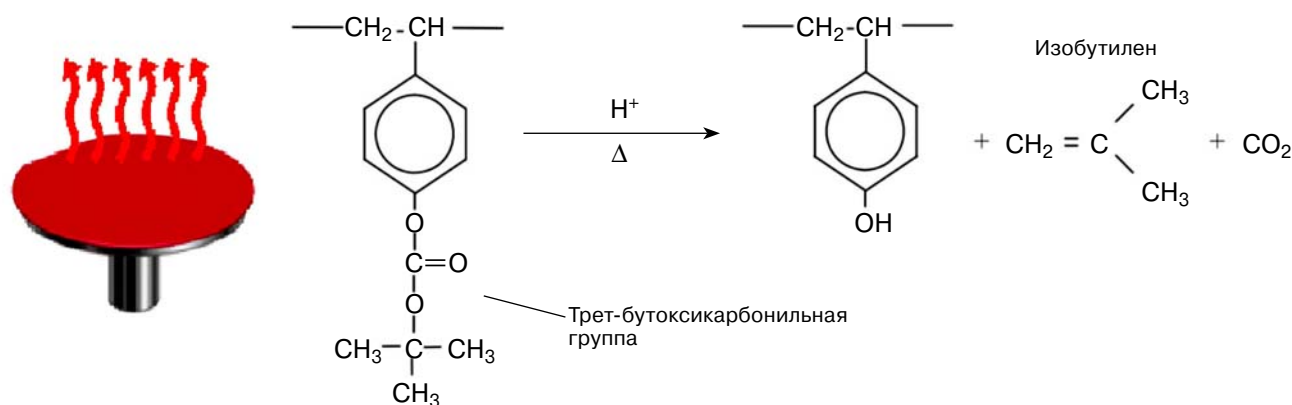


Рис. 6. Разрушение гидрофобных групп полимерной матрицы химически усиленных фоторезистов в процессе постэкспозиционной термообработки

Fig. 6. Polymer matrix hydrophobic group decomposition in chemically enhanced resists during post-exposure heat treatment

цессными [19], однако точность в данном случае находится в сильной зависимости от количества и качества калибровочных данных, которые, помимо экспериментов, в некоторых случаях могут быть получены при помощи процессных САПР.

Иногда становится целесообразным применение компактных моделей формирования ФРМ для задач процессного моделирования. Таким образом, например, может быть произведена оптимизация формы осветителя [4] или экспресс-оценка площади окна процесса [20], опираясь по сути лишь на рассчитанное оптическое изображение.

Существует несколько видов компактных моделей, применяемых для расчета двумерной конфигурации ФРМ для полноразмерной топологии изделия. Наиболее популярными в настоящее время являются модели VT5 (Variable Threshold 5) и CM1 (Compact Model 1), в частности, реализованные в САПР Mentor Graphics Calibre.

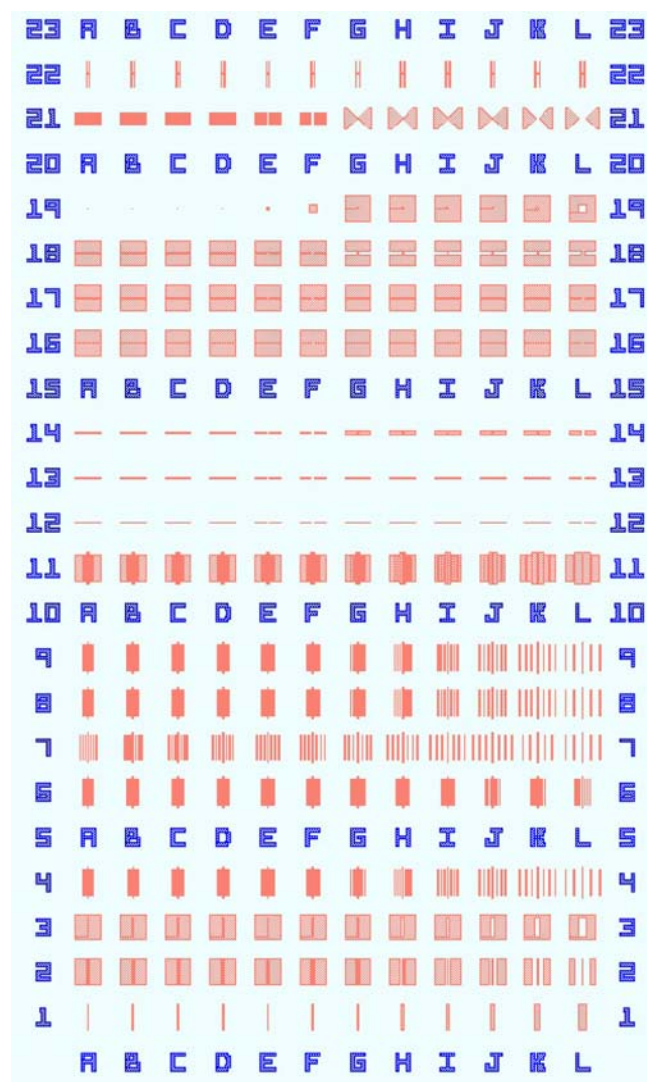


Рис. 7. Пример тестовой калибровочной матрицы (упрощенной), предназначенной для калибровки компактных моделей формирования ФРМ

Fig. 7. Example of test calibration matrix (simplified) for compact model calibration

Модель VT5 является результатом развития более простых моделей переменного порога, таких как VTR и VTRE, и функционирует по следующему принципу. На границах полигонов топологии расставляются контрольные метки, для которых определяются параметры изображения: максимальная и минимальная интенсивность вдоль метки, а также первая и вторая производная интенсивности по координате в точке, где интенсивность равна значению, называемому «опорным» порогом (*reference threshold*). Положение стенки фоторезиста определяется через значение порога T , зависящее в свою очередь от установленных параметров воздушного изображения $T = T(I_{\max}, I_{\min}, dI/dx, dI^2/dx^2)$. Функция определения порога T представляет собой, как правило, полином первого или второго порядка. Точность моделирования положения стенки фоторезиста в рамках рассматриваемой модели может быть увеличена, если вместо исходного изображения использовать результат его свертки с предварительно определенным набором ядер и уже к полученному распределению применять функцию порога. Такой подход позволяет учесть эффекты диффузии компонент фоторезиста и эффекты травления [21].

Калибровка модели сводится к определению коэффициентов полинома T в процессе анализа результатов пропечатки так называемой тестовой калибровочной матрицы, содержащей набор простых структур (рис. 7), обеспечивающих максимально возможный охват пространства параметров воздушного изображения.

Более совершенная модель CM1 дает в качестве результата контур, полученный срезом на постоянном пороге поверхности $R(x, y)$, соответствующей скрытому изображению в резисте [22]. Поверхность $R(x, y)$ определяется линейной комбинацией

$$R(x, y) = \sum_i c_i M_i(x, y), \quad (4)$$

где c_i — коэффициенты, определяемые при калибровке модели, $M_i(x, y)$ — члены, получаемые преобразованиями оптического изображения $I(x, y)$:

$$M(x, y) = \left[\left(\nabla^k I_{\pm b}(x, y) \right)^n \otimes G_{s, p}(x, y) \right]^{1/n}, \quad (5)$$

где $G_{s, p}(x, y)$ — функция Гаусса—Лагерра, параметры k , n и p для каждого слагаемого задаются пользователем, а b и s вычисляются в процессе калибровки модели. Параметр b определяет кусочно-линейное преобразование функции $I(x, y)$ и соответствует характеру взаимодействия кислот и оснований в слое фоторезиста, а s — длине диффузии активных составляющих.

Модель CM1 демонстрирует большую точность по отношению к VT5 в технологиях уровня 65 нм и менее, в частности, по причине того, что в ней опо-

средовано используется моделирование на основе физических принципов.

Подбор оптимальных толщин слоев литографического стека

В настоящем разделе описывается пример применения «полного» моделирования формирования ФРМ на основе физических принципов в задаче подбора оптимальных толщин слоев литографического стека для перспективного технологического процесса.

В ситуации, когда слои литографического стека не согласованы по толщинам и показателям преломления, общий коэффициент отражения стека квазипериодически меняется в диапазоне 20—60 % с изменением первоначальной толщины пленки резиста. Поэтому примерно в таких же пределах меняется эффективное значение энергии, поглощаемой в слое резиста, а, следовательно, — и обрабатываемый критический размер структуры. Кривая, описывающая подобную зависимость, называется в литературе «колебательной кривой» (*Swing Curve*) [1]. Варьирование толщин и показателей преломления слоев стека (в особенности, антиотражающих слоев), как правило, позволяет добиться минимума амплитуды описанной колебательной зависимости путем минимизации длины колебательной кривой

$$L = \int_{h_{\min}}^{h_{\max}} \sqrt{1 + \left(\frac{dCD(h)}{dh} \right)^2} dh = \min.$$

В данном случае моделировался литографический процесс на длине волны 193 нм в иммерсионной среде с показателем преломления 1,44 с ослабляющим фазовым фотошаблоном с коэффициентом пропускания темных областей 0,06 и вращением фазы 180°. Тон фотошаблона предполагался темным. Параметры осветителя: Quasar, ориентация Cross, угол выреза = 34°, $\sigma_{\text{внеш.}} = 0,9$, и $\sigma_{\text{внут.}} = 0,8$. Исследовалась периодическая линейчатая структура, состоящая из светлых линий шириной 50 нм, расположенных с периодом 100 нм. На рис. 8, а изображены колебательная CD-кривая и профиль ФРМ высотой 120 нм на дозе 21,398 мДж/см² для неоптимизированного литографического стека. Из рис. 8 видно, что рассмотренный литографический стек не является оптимальным.

Варьирование толщин нижних антиотражающих слоев с одновременным расчетом и анализом получаемых колебательных CD-кривых дает возможность подобрать оптимальные параметры литографического стека.

Наилучшими значениями толщин нижних антиотражающих слоев оказались

hB1 = 22 нм и hB2 = 26 нм. Соответствующие данным значениям толщин колебательная CD-кривая стека и профиль резистной маски высотой 120 нм на дозе 21,398 мДж/см² приведены на рис. 8, б. Видно, что в профиле резиста отсутствуют стоячие волны. Данный литографический стек был признан приемлемым. Толщины слоев стека, а также действительные и мнимые компоненты показателей преломления материалов пленок стека приведены в таблице.

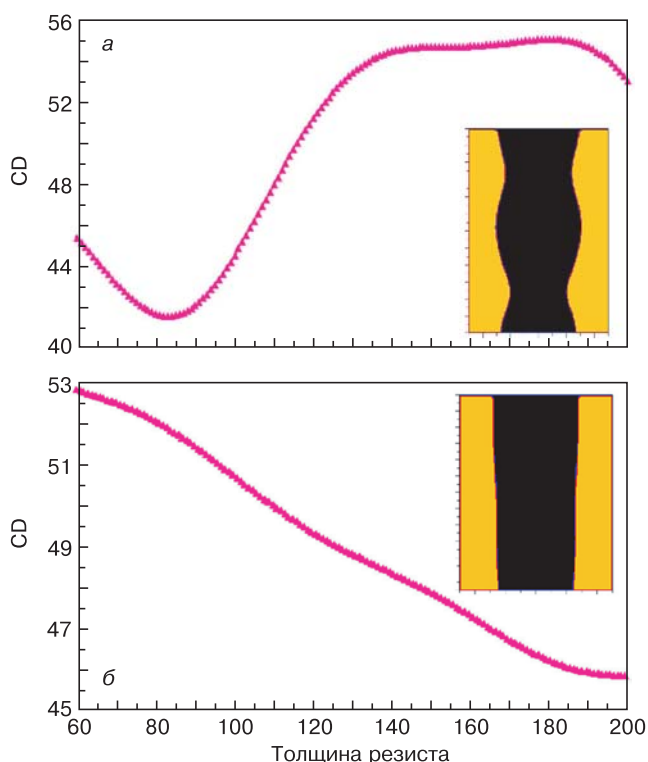


Рис. 8. Колебательные CD-кривые и профили резистной маски (высота 120 нм, доза 21,398 мДж/см²): а — для неоптимизированного литографического стека; б — для оптимизированного литографического стека

Fig. 8. CD swing curves and resist profiles (120 nm height, 21,298 mJ/cm² dose): (a) non-optimized lithographic stack; (b) optimized lithographic stack

Параметры литографических стеков [Lithographic stack parameters]

Литографический стек	Обозначение	Неоптимальный	Оптимальный
Иммерсия	nI	1,44	1,44
BARC1	hB1, нм	16	22
	nB1	1,9064	1,9064
	kB1	0,6711	0,6711
BARC2	hB2, нм	23	26
	nB2	1,7021	1,7021
	kB2	0,196	0,196
Резист	hR, нм	120	120
	nR	1,706	1,706
	kR	0,00922	0,00922
Иммерсионное защитное покрытие	hI, нм	90	90
	nI	1,53	1,53

Калибровка модели VT5 при разработке процедуры топологической коррекции

Наиболее длительным этапом в процедуре калибровки компактных моделей является сбор измерений, если не принимать во внимание изготовление образцов. В случае неавтоматизированных измерений сбор данных может занимать десятки часов, что существенно задерживает время разработки ОРС-модели и ОРС-решения в целом. Необ-

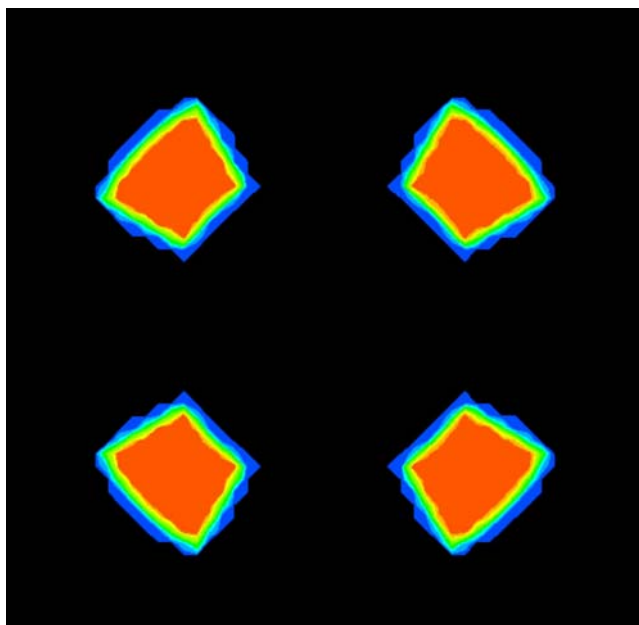


Рис. 9. Форма осветителя (Quasar, $\sigma_{\text{внут.}} = 0,5$, $\sigma_{\text{внеш.}} = 0,8$, угол выреза = 30°), используемая в литографическом процессе, для которого калибровалась модель VT5

Fig. 9. The shape of the illuminator (Quasar, $\sigma_{\text{int}} = 0,5$, $\sigma_{\text{ext}} = 0,8$, cut angle = 30°) used in the lithographic process for which the VT5 model was calibrated

ходимость снижения количества измерений ставит нетривиальную задачу определения оптимального набора структур, подлежащих измерению. Как уже было отмечено, оптимальная выборка должна максимально охватывать пространство параметров оптического изображения, включая при этом минимальное количество структур.

Используемая калибровочная площадка включала 3300 тестовых периодических линейчатых структур с размером от 60 до 200 нм и с периодом от 140 до 1200 нм. Целью исследования являлось определение минимального количества структур, обеспечивающего приемлемую точность модели, которая оценивалась сравнением результатов моделирования с результатами измерений для 50 структур различной геометрии, не использовавшихся при калибровке. Характеристикой точности было выбрано среднее квадратическое значение ошибки результатов моделирования.

Длина волны рабочего излучения $\lambda = 193$ нм, $NA = 0,75$. Источник освещения — Quasar, $\sigma_{\text{внут.}} = 0,5$, $\sigma_{\text{внеш.}} = 0,8$, угол выреза = 30° (рис. 9).

В ходе исследования формировались различные наборы данных, включавшие от 40 до 360 структур с шагом 40. Каждой тестовой структуре соответствует точка в пространстве параметров изображения (рис. 10, а). При отборе точек, необходимо обеспечить максимальный охват области пространства, которую охватывает весь набор из 3300 структур. Провести такую фильтрацию позволяет кластерный анализ [23]: точки пространства группируются в кластеры, в каждом из которых геометрически выбирается одна точка — центроид (рис. 10, б). Центроиды соответствуют тестовым структурам, включаемым в

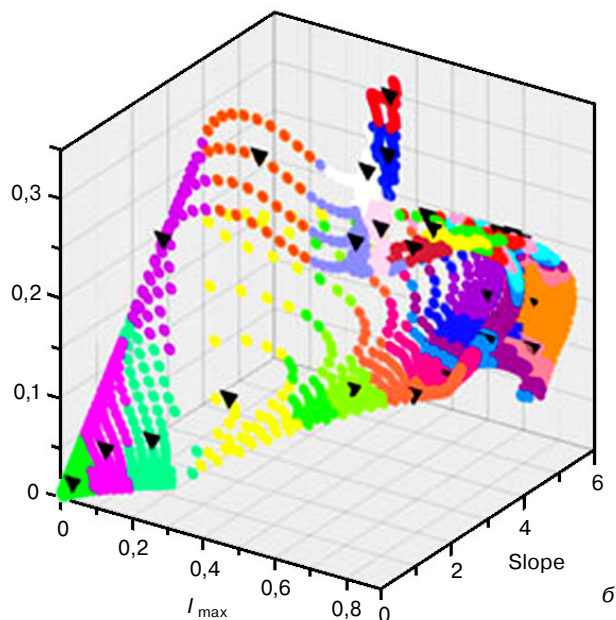
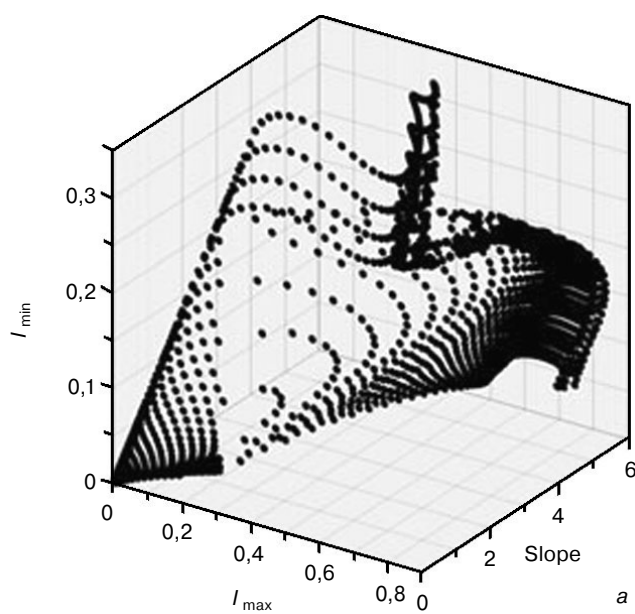


Рис. 10. Кластеризация точек в пространстве параметров изображения

Fig. 10. Point clustering in image parameters space

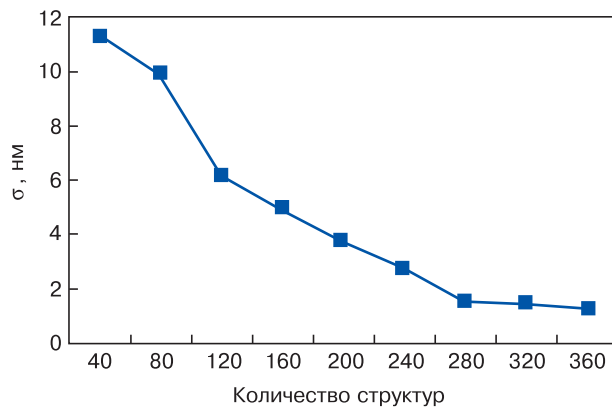


Рис. 11. Зависимость точности модели от числа измерений
Fig. 11. Model accuracy vs number of measurements

конечный набор. В данной работе кластеризация производилась методом k -средних.

Для каждого из сформированных наборов данных при помощи САПР Calibre (*Mentor Graphics*) была откалибрована модель VT5 и исследована её точность. Результат представлен на рис. 11.

Как и ожидалось, наборы, состоящие из 40 и 80 структур, дают большую ошибку, которая монотонно уменьшается с увеличением количества измерений. После 280 спад отклонения уменьшается и выходит почти на постоянный уровень 1,4 нм. Таким образом, можно заключить, что оптимальным вариантом будет использование для калибровки от 300 до 350 тестовых структур, при условии формирования выборки методом кластерного анализа. Использование СЭМ-контуров при калибровке модели VT5 позволяет снизить среднеквадратическую ошибку по 40 структурам до 1,18 нм. Результат моделирования показан на рис. 12.

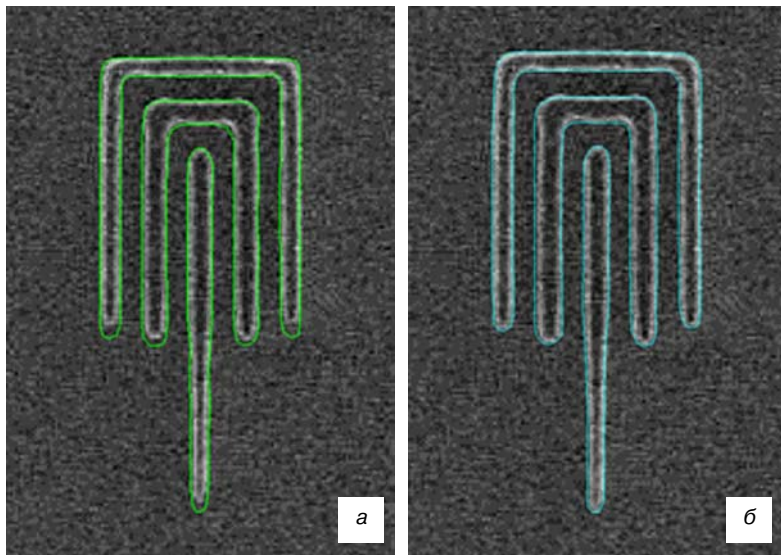


Рис. 12. Моделирование контура ФРМ:
а — модель откалибрована без использования СЭМ изображений;
б — калибровка проведена с использованием СЭМ контуров нескольких тестовых структур

Fig. 12. Resist contour simulation: (a) model calibrated without SEM images;
(б) calibrated with SEM images of contours for several test structures

Заключение

В настоящей работе были описаны оба существующих подхода к моделированию процесса формирования фоторезистивной маски и продемонстрировано их применение в задачах разработки технологических процессов проекционной фотолитографии и методов топологической коррекции. При помощи полного моделирования формирования фоторезистивной маски был оптимизирован литографический стек для перспективного технологического процесса. Калибровка пороговой модели VT5 по различным наборам данных показала, что кластерный анализ является эффективным средством формирования выборки, а оптимальный размер выборки составляет от 300 до 350 структур.

Библиографический список

1. Mack C. A. Fundamental Principles of Optical Lithography: The Science of Microfabrication. John Wiley & Sons, 2007. 534 p.
2. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. М.: Наука, 1973. 722 с.
3. Ma X., Arce G. R. Computational lithography. John Wiley & Sons, Inc, 2010. 226 p. DOI: 10.1002/9780470618943
4. Балан Н. Н., Иванов В. В., Кузовков А. В. Форма осветителя как ключевой фактор при разработке методики дифракционной коррекции изображения в проекционной фотолитографии для технологий уровня 65 нм и менее. HOLOEXPO 2019. XVI Международная конференция по голографии и прикладным оптическим технологиям. Тезисы докладов. 2019. С. 208—215.
5. Балан Н. Н., Иванов В. В., Кузовков А. В., Шамин Е. С. Место фазосдвигающих фотошаблонов в современной полупроводниковой технологии // Электронная техника. Сер. 3. Микроэлектроника. 2019. № 2. С. 54—63.
6. Горнев Е. С., Гушин О. П., Мячин Л. М. Технология субмикронной оптической проекционной литографии с использованием фотошаблонов с фазовым сдвигом // Тезисы докладов Всероссийской НТК «Микро- и нанoeлектроника 2001». Звенигород, 2001. Т. 1. С. 2—5.
7. Machin M., Savinskii N., Gutchin O., Prosii A., Gornev E. An integrated framework for aerial image simulation and proximity correction // Software Development for Process and Materials Design, Satellite Symposium of Nano and Giga Challenges in Microelectronics, Satellite (NGCM 2002). Moscow, 2002.
8. Красников Г. Я., Синюков Д. В. Проблемы и перспективы развития методов коррекции оптической близости для современных уровней технологии // Труды научного совета РАН «Новые материалы с заданными функциями и высококачественные наноматериалы для создания элементной базы информационно-вычислительных и управляющих машин». М., 2018. Т. 2. С. 17—22.
9. Родионов И. А., Шахнов В. А. Расчет значений весовых коэффициентов топологических структур для калибровки литографических моделей // Вестник Московского государственного технического университета им. Н. Э. Баумана. Сер. Приборостроение. 2010. № 5. С. 149—160.
10. Шамин Е. С., Ипатова Е. В., Кузовков А. В., Иванов В. В., Балан Н. Н. Генерация Rule-based SRAF для двумерных топологических структур с учетом правил MRC: проблемы и решения // Электронная техника. Сер. 3: Микроэлектроника. 2019. Вып. 2(174). С. 36—41.
11. Савинский Н. Г., Берников А. Е., Курчидис В. А., Горнев Е. С., Гушин О. П., Просий А. Д. Оптическая субмикронная литография с фазосдвигающими шаблонами // Сб. трудов Юбилейной 2-й научно-технической конференции АОТ «НИИМЭ и Микрон» «Разработка, технология и производство полупроводниковых микросхем». М.; Зеленоград: Микрон-принт, 1999. С. 53—55.

12. Горнев Е. С., Гушин О. П., Просий А. Д., Савинский Н. Г. Фазосдвигающие маски для низкоапертурных степперов // Сб. трудов 3-й научно-технической конференции АООТ «НИИМЭ и Микрон» «Разработка, технология и производство полупроводниковых микросхем». М., Зеленоград: АООТ «НИИМЭ и Микрон», 2000. Т. 1. С. 115.
13. Hopkins H. H. On the diffraction theory of optical images // Proc. R. Soc. Lond. A. Mathematical and Physical Sciences. 1953. V. 217, Iss. 1130. P. 408—432. DOI: 10.1098/rspa.1953.0071
14. Dill F. H., Neureuther A. R., Tuttle J. A., Walker E. J. Modeling projection printing of positive photoresists // IEEE Transactions on Electron Devices. 1975. V. 22, Iss. 7. P. 456—464. DOI: 10.1109/T-ED.1975.18161
15. Mack C. A. Process Specification: Measurement of the Positive Photoresist Parameters A, B, and C // Department of Defense, Fort Meade. MD 20755, 1985.
16. Mack C. A. Inside PROLITH: A Comprehensive Guide to Optical Lithography Simulation. Austin (TX, USA): FINLE Technologies, 1997. 179 p. URL: http://www.lithoguru.com/scientist/litho_papers/Inside_PROLITH.pdf
17. Зеленцов С. В., Зеленцова Н. В. Современная фотолитография. Учебно-методический материал по программе повышения квалификации «Новые материалы электроники и оптоэлектроники для информационно-телекоммуникационных систем». Нижний Новгород, 2006. 57 с.
18. Karafyllidis I., Hagouel P. I., Thanailakis A., Neureuther A. An efficient photoresist development simulator based on cellular automata with experimental verification // IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing. 2000. V. 13, Iss. 1. P. 61—75. DOI: 10.1109/66.827346
19. Амирханов А. В., Гладких А. А., Глушко А. А., Михальцов Е. П., Родионов И. А., Столяров А. А. Особенности методов проектирования СВИС с учетом результатов моделирования технологического процесса // Труды НИИСИ РАН. 2013. Т. 3, № 1. С. 10—19.
20. Харченко Е. Л., Шамин Е. С., Кузовков А. В., Иванов В. В. Разработка и применение экспресс-метода для увеличения окна литографического процесса // Наноиндустрия. 2020. № S96—2. С. 730—732. DOI: 10.22184/1993-8578.2020.13.3s.730.732
21. Calibre® WORKbench™. User's and Reference Manual, Software Version 2013.2. Mentor Graphics Corporation, 2013. URL: <https://www.mentor.com/products/ic-manufacturing/computational-lithography/calibre-workbench>
22. Granik Y., Medvedev D., Cobb N. Toward standard process models for OPC // Proc. SPIE 6520, Optical Microlithography XX. 2007. V. 6520. P. 1447—1452. DOI: 10.1117/12.712229
23. Vengertsev D., Kim K., Yang S., Shim S., Moon S., Shamsuarov A., Lee S., Choi S.-W., Choi J. H., Kang H.-K. The new test pattern selection method for OPC model calibration, based on the process of clustering in a hybrid space // Proc. SPIE 8522. Photomask Technology 2012. 2012. V. 8522. P. 387—394. DOI: 10.1117/12.953827

Статья поступила в редакцию 26 декабря 2019 г.

Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = *Materials of Electronics Engineering*. 2019, vol. 22, no. 4, pp. 279—289. DOI: 10.17073/1609-3577-2019-4-279-289

Basic approaches to photoresist mask formation modeling in computational lithography

N. N. Balan^{1,§}, V. V. Ivanov¹, A. K. Kuzovkov¹, E. V. Sokolova¹, E. S. Shamin¹

¹ *Molecular Electronics Research Institute (JSC MERI)
12/1 1st Zapadnyi Proezd, Zelenograd, Moscow 124460, Russia*

Abstract. The article gives an overview of the main currently used models for the formation of photoresist masks and the problems in which they are applied. The main stages of “full physical” modeling of mask formation are briefly considered in the case of both traditional DNQ photoresists and CA photoresists. The concept of compact models (VT5 and CM1), which predict the contour of the resist mask for a full-sized device topology is considered. Examples of some calculations using both full physical modeling and compact models are given. Using a full physical modeling of the resist mask formation the lithographic stack was optimized for a promising technological process. The optimum thickness ratios for the binary BARC used in the water immersion lithographic process are found. The problem of determining the optimal number of calibration structures that maximally cover the space of aerial image parameters was solved. To solve this problem, cluster analysis was used. Clustering was carried out using the *k*-means method. The optimal sample size was from 300 to 350 structures, the mean square error in this case is 1.4 nm, which slightly exceeds the noise of the process for 100 nm structures. Using SEM images for calibrating the VT5 model allows reducing the standard error of 40 structures to 1.18 nm.

Keywords: photoresist, projection photolithography, VT5, CM1, *k*-means clustering

References

1. Mack C. A. Fundamental Principles of Optical Lithography: The Science of Microfabrication. John Wiley & Sons, 2007, 534 p.
2. Born M., Wolf E. *Osnovy optiki* [Fundamentals of Optics]. Moscow: Nauka, 1973, 722 p. (In Russ.)
3. Ma X., Arce G. R. Computational lithography. John Wiley & Sons, Inc, 2010, 226 p. DOI: 10.1002/9780470618943
4. Balan N. N., Ivanov V. V., Kuzovkov A. V. Illuminator shape as a key factor in the development of methods for diffraction image correction in projection photolithography for technologies of 65 nm and less. *HOLOEXPO 2019. XVI International Conference on Holography and Applied Optical Technologies*, 2019, pp. 208—215. (In Russ.)

Information about authors:

Nikita N. Balan^{1,§}: Cand. Sci. (Eng.), Design Engineer of the 1st category (nbalan@niime.ru); **Vladimir V. Ivanov**¹: Deputy Head of the Photomask Design Department (vivanov@niime.ru); **Alexey V. Kuzovkov**¹: Design Engineer of the 1st category (akuzovkov@niime.ru); **Evgenia V. Sokolova**¹: Design Engineer of the 2nd category (evsokolova@niime.ru); **Evgeniy S. Shamin**¹: Junior Researcher (eshamin@niime.ru)

§ Corresponding author

5. Balan N. N., Ivanov V. V., Kuzovkov A. V., Shamin E. C. The place of phase-shifting photomasks in modern semiconductor technology. *Electronic engineering. Series 3. Microelectronics*, 2019, no. 2, pp. 54—63. (In Russ.)
6. Gornev E. S., Gushchin O. P., Myachin L. M. Technology of submicron optical projection lithography using photomasks with a phase shift. *Abstracts of the All-Russian Scientific and Technical Complex «Micro- and Nanoelectronics 2001»*. Zvenigorod, 2001, vol. 1, pp. 2—5. (In Russ.)
7. Machin M., Savinskii N., Gutchin O., Prosii A., Gornev E. An integrated framework for aerial image simulation and proximity correction. *Software Development for Process and Materials Design, Satellite Symposium of Nano and Giga Challenges in Microelectronics. Satellite (NGCM 2002)*. Moscow, 2002.
8. Krasnikov G. Ya., Sinyukov D. V. Problems and prospects of development of optical proximity correction methods for modern levels of technology. *Proceedings of the Scientific Council of the Russian Academy of Sciences "New materials with specified functions and high-purity nanomaterials for creating an element base of information-computing and control machines"*. Moscow, 2018, vol. 2, pp. 17—22. (In Russ.)
9. Rodionov I. A., Shakhnov V. A. Calculation of the values of the weight coefficients of topological structures for the calibration of lithographic models. *Herald of the Bauman Moscow State Technical University. Series Instrument Engineering*, 2010, no. S, pp. 149—160. (In Russ.)
10. Shamin E. S., Ipatova E. V., Kuzovkov A. V., Ivanov V. V., Balan N. N. Rule-based SRAF generation for two-dimensional topological structures with MRC rules being considered: problems and solutions. *Electronic engineering. Series 3: Microelectronics*, 2019, no. 2, pp. 36—41. (In Russ.)
11. Savinsky N. G., Bernikov A. E., Kurchidis V. A., Gornev E. S., Gushchin O. P., Prosy A. D. Optical submicron lithography with phase-shifting templates. *Proceedings of the Jubilee 2nd Scientific and Technical Conference of OJSC NIIME and Mikron «Development, Technology and Production of Semiconductor Microcircuits»*. Moscow; Zelenograd: Mikron-print, 1999, pp. 53—55. (In Russ.)
12. Gornev E. S., Gushchin O. P., Prosy A. D., Savinsky N. G. Phase-shifting masks for low-aperture steppers. *Proceedings of the 3rd scientific and technical conference of OJSC NIIME and Mikron «Development, technology and production of semiconductor microcircuits»*. Moscow; Zelenograd: OJSC NIIME and Mikron, 2000, vol. 1, pp. 115. (In Russ.)
13. Hopkins H. H. On the diffraction theory of optical images. *Proc. R. Soc. Lond. A. Mathematical and Physical Sciences*, 1953, vol. 217, no. 1130, pp. 408—432. DOI: 10.1098/rspa.1953.0071
14. Dill F. H., Neureuther A. R., Tuttle J. A., Walker E. J. Modeling projection printing of positive photoresists. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 1975, vol. 22, no. 7, pp. 456—464. DOI: 10.1109/T-ED.1975.18161
15. Mack C. A. Process Specification: Measurement of the Positive Photoresist Parameters A, B, and C. Department of Defense, Fort Meade. MD 20755, 1985.
16. Mack C. A. Inside PROLITH: A Comprehensive Guide to Optical Lithography Simulation. Austin (TX, USA): FINLE Technologies, 1997, 179 p. URL: http://www.lithoguru.com/scientist/litho_papers/Inside_PROLITH.pdf
17. Zelentsov S. V., Zelentsova N. V. *Sovremennaya fotolitografiya* [Modern photolithography]. Nizhny Novgorod, 2006, 57 p. (In Russ.)
18. Karafyllidis I., Hagouel P. I., Thanailakis A., Neureuther A. An efficient photoresist development simulator based on cellular automata with experimental verification. *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, 2000, vol. 13, no. 1, pp. 61—75. DOI: 10.1109/66.827346
19. Amirkhanov A. V., Gladkikh A. A., Glushko A. A., Mikhaletsov E. P., Rodionov I. A., Stolyarov A. A. Features of VLSI design methods taking into account the results of technological process modeling. *Proceedings NIISI RAS*, 2013, vol. 3, no. 1, pp. 10—19. (In Russ.)
20. Kharchenko E. L., Shamin E. S., Kuzovkov A. V., Ivanov V. V. Developing and using an express method of increasing the lithography process window. *Nanoindustry*, 2020, no. S96–2, pp. 730—732. (In Russ.) DOI: 10.22184/1993-8578.2020.13.3s.730.732
21. Calibre® WORKbench™. User's and Reference Manual, Software Version 2013.2. Mentor Graphics Corporation, 2013. URL: <https://www.mentor.com/products/ic-manufacturing/computational-lithography/calibre-workbench>
22. Calibre® WORKbench™. User's and Reference Manual, Software Version 2013.2. Mentor Graphics Corporation, 2013. URL: <https://www.mentor.com/products/ic-manufacturing/computational-lithography/calibre-workbench>
23. Granik Y., Medvedev D., Cobb N. Toward standard process models for OPC. *Proc. SPIE 6520, Optical Microlithography XX*, 2007, vol. 6520, pp. 1447—1452. DOI: 10.1117/12.712229
24. Vengertsev D., Kim K., Yang S., Shim S., Moon S., Shamsuarov A., Lee S., Choi S.-W., Choi J. H., Kang H.-K. The new test pattern selection method for OPC model calibration, based on the process of clustering in a hybrid space. *Proc. SPIE 8522. Photomask Technology 2012*, 2012, vol. 8522, pp. 387—394. DOI: 10.1117/12.953827

Received December 26, 2019

УДК 621.315.592:001.891.57

Осцилляции Ааронова—Бома и распределения равновесных токов в открытой квантовой точке и кольцевом интерферометре*

© 2019 г. О. А. Ткаченко¹, Д. Г. Бакшеев², В. А. Ткаченко^{1,2,§}¹ *Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева, д. 13, Новосибирск, 630090, Россия*² *Новосибирский государственный университет,
ул. Пирогова, д. 1, Новосибирск, 630090, Россия*

Аннотация. Методом неравновесных функций Грина промоделирован магнитотранспорт в двух субмикронных устройствах, сформированных на основе структур GaAs/AlGaAs. В одночастичном приближении рассмотрено влияние перпендикулярного магнитного поля на квантовый транспорт в квазиодномерной квантовой точке и в интерферометре Ааронова—Бома. Численным расчетом найдены магнитополевые осцилляции двухтерминального контактанса устройств, распределения равновесных (персистентных) токов и магнитный момент, генерируемый в этих устройствах персистентными токами. Прослежены корреляции между магнитным моментом, магнитополевыми осцилляциями контактанса и резонансами по энергии в заданном магнитном поле. Для квазиодномерной квантовой точки в диапазоне низких магнитных полей (0,05—0,4 Тл) обнаружены более или менее регулярные осцилляции контактанса, подобные осцилляциям Ааронова—Бома. В случае кольцевого интерферометра вклад в полный равновесный ток и магнитный момент при заданной энергии может резко меняться как по величине, так и по знаку при изменении магнитного поля в пределах одной осцилляции Ааронова—Бома. Показано, что контактанс интерферометра определяется, скорее, не числом распространяющихся в кольцо мод, а влиянием треугольных квантовых точек на входах в кольцо, вызывающих сильное отражение. Период вычисленных осцилляций Ааронова—Бома соответствует измеренным для этих устройств.

Ключевые слова: баллистическая квантовая точка, кольцевой электронный интерферометр, контактанс, равновесный ток, магнитный момент, осцилляции Ааронова—Бома

Введение

Гибко управляемые субмикронные устройства, созданные на основе высокоподвижного двумерного электронного газа (ДЭГ) в гетероструктурах GaAs/AlGaAs, были и остаются основным объектом экспериментальной квантовой нанофизики. Например, эффекты одночастичной интерференции в контактансе G изучаются главным образом в малых открытых баллистических наносистемах, имеющих форму кольца либо квантовой точки [1—3] и связанных с двумерными резервуарами через два узких входа.

Контактанс нанорезистора есть $G = I/V$, где I — неравновесный ток, вызванный малым напряжением V между электронными резервуарами.

Наблюдение осцилляций Ааронова—Бома (ОАБ) в контактансе G с изменением перпендикулярного магнитного поля B является средством измерения эффективной площади S устройств. Обычно для оценки S используется формула, которую подсказывают простые одномерные модели кольца и краевых токовых состояний: $S = \Phi_0/\Delta B$, где ΔB — период ОАБ; $\Phi_0 = h/e$ — квант магнитного потока. В случае колец размером ~ 1 мкм в ДЭГ данная оценка хорошо согласуется с электронно-микроскопическим изображением внешнего вида областей травления или систем металлических затворов, формирующих электронную наносистему в реальном твердотельном устройстве [1]. В то же время для описания магнитополевых осцилляций контактанса квантовой точки при малых B применимость этой формулы никак не обоснована, поскольку краевые токовые состояния в виде тонких линий еще не сформированы, и в этом режиме магнитополевые осцилляции в точках являются менее регулярны-

Ткаченко Ольга Александровна¹ — канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник, e-mail: otkach@isp.nsc.ru; Бакшеев Дмитрий Георгиевич² — канд. физ.-мат. наук, ассистент, e-mail: bd@mail.ru; Ткаченко Виталий Анатольевич^{1,2,§} — канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник, e-mail: vtach@isp.nsc.ru

§ Автор для переписки

* Статья подготовлена по материалам доклада, представленного на I-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 21—23 октября 2019 г.

ми [2, 3], чем в кольцах. Тем не менее, благодаря высокому качеству субмикронных колец и квантовых точек в ДЭГ гетероструктур GaAs/AlGaAs, удается реалистичным моделированием связать данные о трехмерной конструкции устройств с наблюдаемым поведением кондактанса [4—6].

В этом отношении показательны два примера. Первый из них — это интерферометр Ааронова—Бомы с эффективным диаметром кольца 0,7 мкм, сформированный в Институте физики полупроводников СО РАН электронной литографией и реактивно-ионным травлением [7—9]. Второй пример — это открытая квантовая точка размером около 0,7 мкм, созданная в Кавендишской лаборатории (Англия) с использованием трехслойной системы субмикронных и ультратонких (60 нм) металлических затворов [10—14]. Для создания этих устройств в ИФП СО РАН и в Кавендишской лаборатории были улучшены параметры технологии молекулярно-лучевой эпитаксии структур GaAs/AlGaAs и получены, соответственно, ДЭГ с подвижностью $0,5 \cdot 10^6$ и $2,5 \cdot 10^6$ см²/(В·с) при низких температурах. В этих случаях имелась надежная основа для реалистического моделирования в виде детальной информации об основных особенностях изготовления твердотельных устройств (состав материалов, толщины слоев, трехмерная геометрия). Не самые малые размеры этих устройств, высокое качество ДЭГ и нанолитографии позволили в первом приближении не учитывать беспорядок. Самосогласованным решением задачи трехмерной электростатики были найдены близкие к реальным простые формы двумерного эффективного потенциала $U(x,y)$, используемые при расчетах кондактанса устройств в нулевом магнитном поле [7, 12—14]. Вычисленный потенциал $U(x,y)$ для этих структур симметричен относительно линий $x = 0$, $y = 0$ (см. рис. 1 и 2 [7], рис. 1 [12], рис. 4—6 [13]). В выбранном кольцевом интерферометре диаметром 0,7 мкм имеется аксиальная симметрия за исключением небольших (0,2 мкм) областей соединения кольцевого канала шириной 100 нм с подводящими квантовыми проволоками той же ширины. Потенциал выбранной квантовой точки отличается особенной простотой от потенциала других квантовых точек, поскольку допускает разделение переменных x, y при решении задачи квантового рассеяния в нулевом магнитном поле. Расчетами $U(x,y)$ и моделированием измеренных затворных характеристик в [7] были открыты треугольные квантовые точки на входе и выходе из баллистического кольца, а в [12—14] обнаружено, что квантовая точка из работы [10, 11] является квазиодномерной, т.е. по сравнению с обычными баллистическими квантовыми точками межподзонаное рассеяние в ней подавлено. Благодаря этим находкам удалось объяснить экспериментально обнаруженные необычные физические эффекты.

Тем не менее, для указанных двух устройств отсутствовали вычисления магнитотранспортных свойств. К этим свойствам относятся магнитопольные осцилляции двухтерминального кондактанса G , а также распределения равновесного (персистентного) тока, текущего без диссипации энергии при всех разрешенных энергиях ниже общего уровня Ферми. Такие замкнутые токи наводятся внешним магнитным полем в любых проводящих, в том числе, бесконтактных, системах произвольных размеров и размерностей и существуют в термодинамическом равновесии. Теоретическое рассмотрение равновесных токов в перпендикулярном магнитном поле ранее проводилось только для некоторых идеализированных форм латерального потенциала квантовой точки и кольца и в основном для замкнутых систем [15—22]. Для понимания результатов первых измерений персистентных токов этого было достаточно. В эксперименте об этих токах можно судить лишь по интегральной характеристике — намагниченности или магнитному моменту M . Вызванные персистентными токами магнитные поля являются лишь слабой добавкой к внешнему магнитному полю. Соответствующие измерения наведенного магнитного момента для субмикронных полупроводниковых колец и квантовых точек крайне редки [23—25], поскольку намагниченность даже для ДЭГ [26, 27] гораздо сложнее измерить, чем для 3D макроскопических однородных проводников. Для последних осцилляции магнитного момента хорошо известны как эффект де Гааза—ван Альфена.

Цель настоящей работы в том, чтобы на примере устройств с кольцом и с квантовой точкой дополнить реалистическое моделирование не только расчетом магнитопольных осцилляций кондактанса, но также вычислением персистентных токов и магнитного момента. Вычисленные осцилляции кондактанса можно сравнить с ранее измеренными, а расчет равновесных токов и соответствующего магнитного момента необходим для понимания квантовых явлений и для оценки перспектив будущих экспериментов.

Метод моделирования

Полный равновесный ток для заданных значений энергии Ферми E_F и B определяется суммой вкладов $d\mathbf{J}(x,y)/dE$ по состояниям с энергиями $E \leq E_F$. Для расчетов $d\mathbf{J}(x,y)/dE$ и неравновесного тока $\mathbf{I}(x,y)$ и кондактанса использован алгоритм из работы [28]. Полный магнитный момент вычисляется как векторное произведение радиус вектора $\mathbf{r} = (x,y)$ на ток: $\mathbf{M} = 0,5\mathbf{r} \times \mathbf{J}(x,y)$. Обычно равновесный ток теоретически и численно изучают в закрытых системах с дискретным спектром E_i [15—22], но мы рассматриваем открытые субмикронные системы с непрерывным спектром, которые соединены

с электронными резервуарами через проницаемые плавные потенциальные барьеры [4—14]. Заметим, что метод неравновесных функций Грина, кратко описанный в [28], идеально подходит для моделирования открытых систем, поскольку в определении функции Грина есть малая мнимая добавка к энергии, и не только резонансы, но даже глубокие уровни энергии, проявляются в плотности состояний в виде пиков конечной ширины по E . Среди открытых систем мы выбрали для моделирования близкие к идеальным по геометрии кольцевой интерферометр и квантовую точку, изученные измерениями и расчетами в работах [7—14]. Сначала по структурным данным для этих устройств вычислялись трехмерный электростатический потенциал и эффективный удерживающий потенциал $U(x,y)$ в ДЭГ. Затем по найденному $U(x,y)$ и заданному B определялись полный неравновесный ток I через устройство при заданных E_F и тянущем напряжении V (кондактанс $G = I/V$) [7, 12—14]. В настоящей работе для состояний с данной энергией E вычисляются зависимости $G(B)$, а также распределения $d\mathbf{J}(x,y)/dE$ и вклады dM/dE в полный магнитный момент M .

Квантовая точка: результаты и обсуждение

На рис. 1—4 в качестве примера мы показываем полученные результаты для квазиодномерной квантовой точки. Из графика $G(B)$ (см. рис. 1), вычисленного для энергии на уровне Ферми $E_F = 0,1$ мэВ видно, что более или менее регулярные осцилляции охватывают интервал от 0,05 до 0,4 Тл. Отметим, что в экспериментах с такой квантовой точкой регистрировались ОАБ с периодом $\Delta B = 15$ мТл [10], что позволило оценить площадь электронной системы квантовой точки по простой формуле $S = \Phi_0/\Delta B$. Для сравнения с измеренными ОАБ полезно сгладить осцилляции на вычисленной зависимости $G(B)$. Осцилляции на сглаженной кривой $\Delta G_{\text{smooth}}(B)$ имеют период 19 мТл. Отсутствие строгой периодичности пиков на исходной кривой $G(B)$ объясняется влиянием магнитного поля на квазидискретные уровни энергии квазиодномерной квантовой точки.

Пикам на зависимости $G(B)$ отвечают узкие положительные, либо отрицательные особенности dM/dE . Области подводящих каналов при вычислении dM/dE и M игнорировались.

Вычисленная картина равновесного тока в квазиодномерной квантовой

точке для резонансного пика при умеренном магнитном поле $B = 0,3345$ Тл (см. рис. 2) дает представление о геометрии открытой точки, включая входные сужения между точкой и областями подводящих электронных резервуаров (см. $U(x,y)$, рис. 1 [12]). Заметим, что периоду магнитопольевых осцилляций соответствует эффективная площадь $S = \Phi_0/\Delta B$, которая немного меньше площади квантовой точки. Это относится не только к расчетному $\Delta B = 19$ мТл, что показано пунктирным овалом на рис. 2, но и к измеренному $\Delta B = 15$ мТл. Основной ток течет в резервуарах и по широкому кольцу на периферии квантовой точки. Формальный путь электрона, охватывающий эффективную площадь S , одинаково отстоит от внешней и внутренней границы вычисленного кольца равновесного тока при $B = 0,3345$ Тл.

Область размером $\sim 200 \times 400$ нм² в центре точки почти свободна от токов. Напротив, для резонансно-

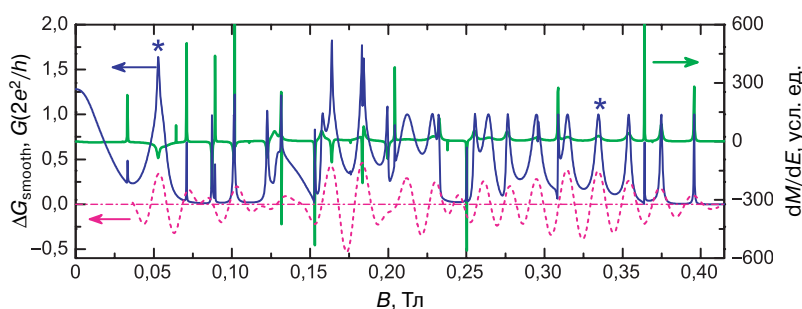


Рис. 1. Вычисленные магнитопольевые характеристики квазиодномерной квантовой точки при $E_F = 0,1$ мэВ: зависимости кондактанса и производной магнитного момента dM/dE от B . Звездочкой отмечены состояния, проявляемые на рис. 2—4. Нижняя кривая — результат полосовой фильтрации $G(B)$

Fig. 1. The calculated magnetic field characteristics of the quasi-one-dimensional quantum dot at $E_F = 0.1$ meV: the dependences of the conductance and the derivative of the magnetic moment dM/dE on B . The states clarified in Fig. 2—4 are marked with an asterisk. The lower curve is the result of band-pass filtering of $G(B)$

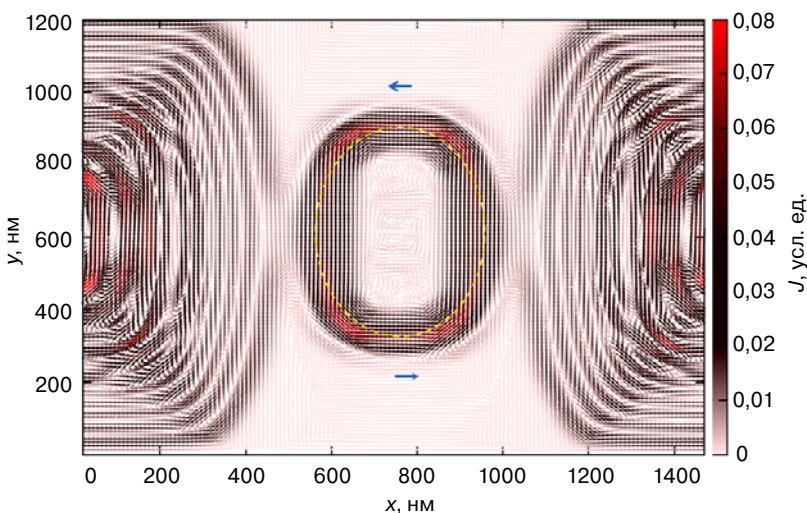


Рис. 2. Распределение полного равновесного тока $\mathbf{J}$ в квантовой точке и подводящих каналах при $B = 0,3345$ Тл. Стрелки указывают направление тока. Желтый пунктир охватывает эффективную площадь S

Fig. 2. Distribution of total equilibrium current $\mathbf{J}$ in the quantum dot and in the channels at $B = 0.3345$ T. The arrows indicate the direction of the current. The yellow dotted line encircles the effective area S

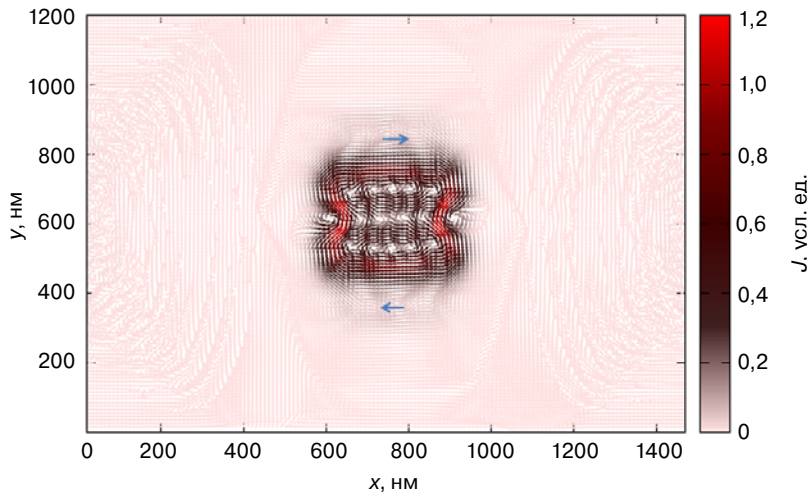


Рис. 3. Полный равновесный ток $\mathbf{J}$ в квантовой точке при $B = 53$ мТл. Стрелки указывают направление тока

Fig. 3. The total equilibrium current $\mathbf{J}$ at the quantum dot at $B = 53$ mT. The arrows indicate the direction of the current

го пика $G(B)$ в слабом магнитном поле $B = 0,053$ Тл равновесный ток J при той же самой E_F сосредоточен возле центра квантовой точки (см. рис. 3) и так велик, что на его фоне почти не заметен ток в электронных резервуарах.

Отметим, что равновесный ток в квантовой точке на рис. 3 и 2 идет по и против часовой стрелки соответственно. Эти качественно разные картины полного равновесного тока J и дополнительные расчеты распределений $d\mathbf{J}(x,y)/dE$ показывают, что внутри квантовой точки при повышенных значениях B возникает область изоляции, связанная с формированием краевых токовых состояний, но такой области нет при малых B . С этим обстоятельством

мы связываем заметное различие регулярности осцилляций $G(B)$ на рис. 1 на отрезках $(0, 0,2$ Тл) и $(0,2, 0,4$ Тл).

Расчеты равновесного тока $\mathbf{J}(x,y)$ проводились на интервале от $E = -3$ мэВ (потенциал в центре квантовой точки) до $E_F = 0,1$ мэВ, но определяющий вклад в полный магнитный момент вносят некоторые резонансные состояния по E , находящиеся недалеко от уровня Ферми, которые отвечают пикам в $G(E)$ на рис. 4.

В случае $B = 0,3345$ Тл на рис. 4, а видны три таких состояния, и вместе они обеспечивают положительное значение полного магнитного момента M при $E_F = 0,1$ мэВ, что соответствует направлению полного равновесного тока J в квантовой точке против часовой стрелки на рис. 2. Напротив, в случае

$B = 0,053$ Тл одно доминирующее состояние с $E = -0,77$ мэВ обеспечивает большое по модулю отрицательное значение полного магнитного момента M при $E_F = 0,1$ мэВ (см. рис. 4, б), что соответствует направлению тока J в квантовой точке по часовой стрелке на рис. 3.

Отметим регулярность в расположении основных и дополнительных (узких) пиков на зависимости коэффициента прохождения от полной энергии электрона $G(E)$ (рис. 4). Почти повторяющееся чередование этих пиков с ростом E при фиксированном B объясняется квазиодномерностью квантовой точки, т.е. раздельным квантованием движения электрона вдоль осей x и y при $B = 0$ (см. рис. 7—10 [13], рис. 1 и 2 [14]).

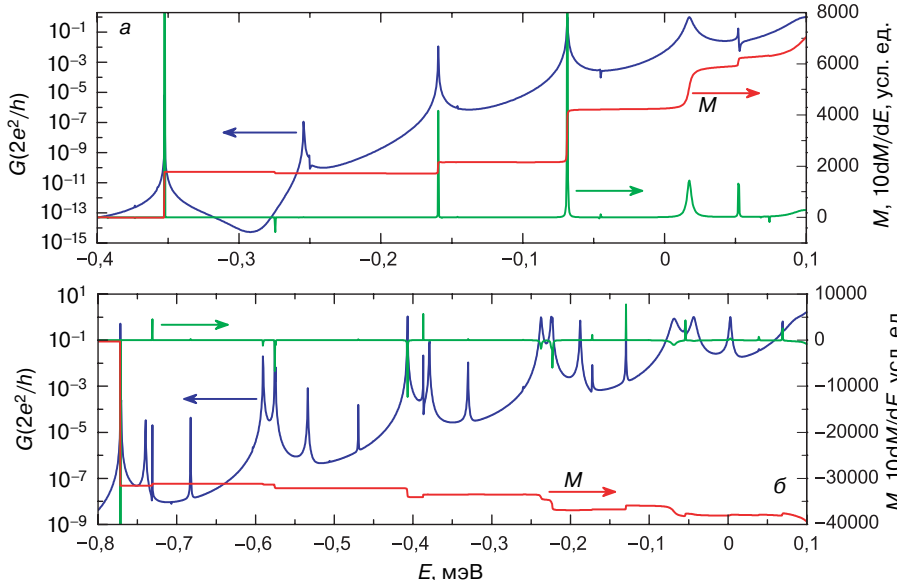


Рис. 4. Зависимости коэффициента прохождения электрона $G(E)$, магнитного момента $M(E)$ и $10dM(E)/dE$ для квазиодномерной квантовой точки в случаях $B = 0,3345$ (а) и $0,053$ (б) Тл

Fig. 4. Dependences of the electron transmission coefficient $G(E)$, magnetic moment $M(E)$, and $10 \times dM(E)/dE$ for the quasi-one-dimensional quantum dot in the cases $B = 0.3345$ T (a) and $B = 0.053$ T (б)

Кольцо: результаты и обсуждение

На рис. 5 для кольцевого интерферометра из работ [7—9] показаны результаты расчета магнитопольных осцилляций кондактанса на уровне Ферми вместе с вычисленной зависимостью dM/dE от B . Видно, что в данном случае осцилляции Ааронова—Бома являются более однородными, чем в случае квантовой точки. На интервале от $0,07$ до $0,12$ Тл заметно удвоение частоты осцилляций при фиксированном E , т.е. более сильное расщепление между сдвоенными пиками кондактанса по сравнению с отрезком от $B = 0$ до $0,06$ Тл. Заметим,

что эффект удвоения частоты наблюдался в эксперименте, но только при изменении энергии Ферми [8], а не магнитного поля. В измерениях осцилляции имеют меньшую амплитуду и являются более плавными, чем в расчетах. Они примерно такие, как на сглаженной кривой $\Delta G_{\text{smooth}}(B)$. Период вычисленных ОАБ хорошо согласуется с измерениями в работах [8, 9]. Расчет потенциала и уровней поперечного квантования в рукавах кольца и подводящих квантовых проволоках [7] показывает, что на уровне Ферми ($E_F = 0$) в этих каналах могут распространяться по три моды электронных волн. Однако вычисленный кондактанс устройства, аналогично измеренному в [8, 9], почти не превышает единицы (рис. 5). Это подавление кондактанса объясняется существованием треугольных квантовых точек в местах соединения кольца с подводящими квантовыми проволоками и сильным обратным рассеянием электронных волн в этих точках [7].

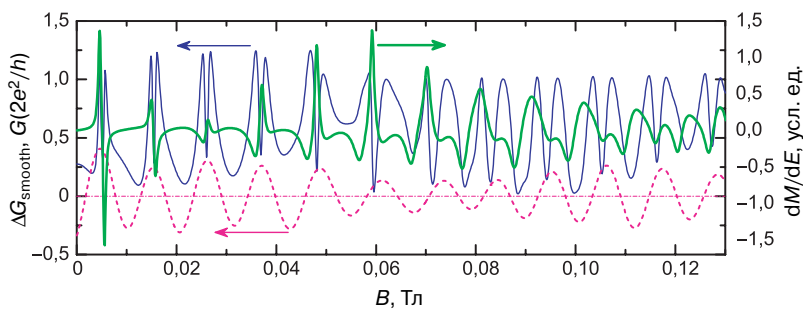


Рис. 5. Вычисленные магнитополевые характеристики кольцевого интерферометра на уровне Ферми ($E = 0$): осцилляции кондактанса и производной магнитного момента dM/dE . Нижняя кривая — результат полосовой фильтрации $G(B)$ для имитации измерений

Fig. 5. The calculated magnetic field characteristics of the ring interferometer at the Fermi level ($E = 0$): conductance oscillations and derivative of the magnetic moment dM/dE . For comparison with the experiment, band-pass filtering of $G(B)$ was performed (lower curve)

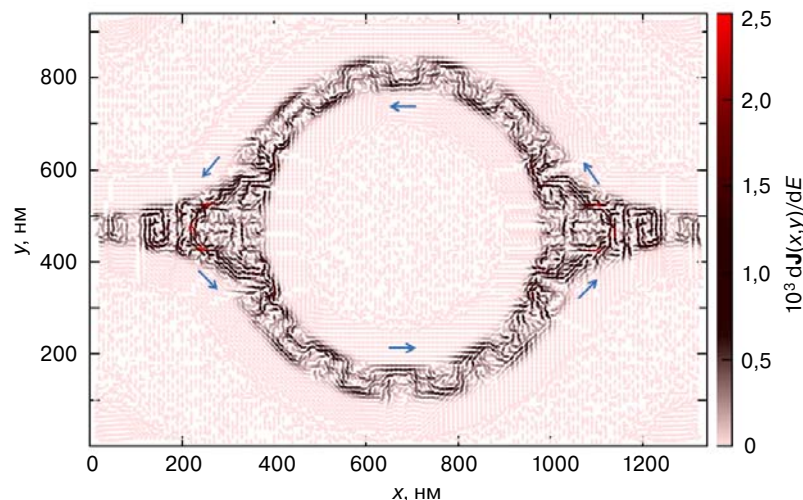


Рис. 6. Вклад $d\mathbf{J}(x,y)/dE$ в равновесный ток для первого узкого пика dM/dE на рис. 5 при $B = 0,0046$ Тл. Вихревому току против часовой стрелки в кольце отвечает положительный знак dM/dE

Fig. 6. The contribution of $d\mathbf{J}(x,y)/dE$ to the equilibrium current for the first narrow peak dM/dE in Fig. 5 at $B = 0.0046$ T. The eddy current counterclockwise in the ring corresponds to the positive sign dM/dE

Обратное рассеяние электронов, падающих из подводящих проволок, ведет к появлению на картинах тока $d\mathbf{J}(x,y)/dE$ (рис. 6) сложных вихрей внутри треугольных квантовых точек. Трехмодовость каналов проявляется на этой картине регулярными смещениями основного тока $d\mathbf{J}(x,y)/dE$ (прямоугольными зубцами) между краями каждого из рукавов кольца. Если просуммировать $d\mathbf{J}(x,y)/dE$ по y в любом вертикальном сечении x , внутри кольца, то полученные персистентные токи J_{up} , J_{down} , текущие по верхнему и нижнему рукаву кольца, зависят только от E и B , равны по величине и противоположны по знаку. В данном случае $d\mathbf{J}(x,y)/dE$ показано для первого узкого резонанса в $G(B)$. Вихревой ток в кольце при данном значении B течет против часовой стрелки.

На рис. 5 рядом с этим квазидискретным уровнем еще один узкий пик в $G(B)$, т. е. узкий провал в dM/dE при $B = 0,0053$ Тл. Для такого B ток на картине $d\mathbf{J}(x,y)/dE$ идет по часовой стрелке, но распределение по абсолютной величине $d\mathbf{J}(x,y)/dE$ мало меняется по сравнению с рис. 6 (не показано).

Отметим, что расчеты полного равновесного тока и магнитного момента осложняются присутствием узких по энергии квазиуровневых состояний, которые могут вносить большой вклад, поэтому вычисления выполняются с малым шагом и затратны по времени, но легко распараллеливаются [29].

Заключение

По результатам расчета трехмерного электростатического потенциала в устройствах с баллистической квантовой точкой и кольцевым интерферометром вычислены магнитополевые осцилляции кондактанса наносистем, распределения равновесных (персистентных) токов и индуцированный этим током магнитный момент.

Прослежена корреляция между поведением кондактанса и магнитного момента. Показано сходство магнитополевых осцилляций кондактанса квантовой точки с осцилляциями Ааронова—Бома. Вычисленный период ОАБ соответствует измеренному для этих устройств. Поскольку представленные результаты получены на основе экспериментальных данных об изготовлении и функционировании мезоскопических нанорезонаторов [7—14], они существенно дополняют прежнее реалистическое моделирование квантовых

явлений в твердотельных затворно-управляемых структурах.

Библиографический список

1. Bykov A. A., Kvon Z. D., Ol'shanetskii E. B., Litvin L. V., Nastaushchev Yu. V., Mansurov V. G., Migal' V. P., Moshchenko S. P., Plyukhin V. G. Quasiballistic electronic interferometer // JETP Letters. 1993. V. 57, Iss. 9. P. 613—616.
2. Persson M., Pettersson J., von Sydow B., Lindelof P. E., Kristensen A., Berggren K. F. Conductance oscillations related to the eigenenergy spectrum of a quantum dot in weak magnetic fields // Phys. Rev. B. 1995. V. 52, Iss. 12. P. 8921—8933. DOI: 10.1103/PhysRevB.52.8921
3. Micolich A. P., See A. M., Scannell B. C., Marlow C. A., Martin T. P., Pilgrim I., Hamilton A. R., Linke H., Taylor R. P. Is it the boundaries or disorder that dominates electron transport in semiconductor 'billiards'? // Fortschr. Phys. 2013. V. 61, Iss. 2–3. P. 332—347. DOI: 10.1002/prop.201200081
4. Tkachenko O. A., Tkachenko V. A., Kvon Z. D., Latyshev A. V., Aseev A. L. Introscopy of quantum nanoelectronic devices // Nanotechnologies in Russia. 2010. V. 5, N 9–10. P. 676—695. DOI: 10.1134/S1995078010090132
5. Tkachenko V. A., Tkachenko O. A., Kvon Z. D., Latyshev A. V., Aseev A. L. Introscopy of nano- and mesoscopic physics: single electronics and quantum ballistics // Optoelectronics, instrumentation and data processing. 2016. V. 52, N 5. P. 518—528. DOI: 10.3103/S8756699016050149
6. Tkachenko O. A., Tkachenko V. A., Kvon Z. D., Sherglov D. V., Aseev A. L. Modeling of quantum transport and single-electron charging in GaAs/AlGaAs-nanostructures // In: Advances in Semiconductor Nanostructures. Growth, Characterization, Properties and Applications. Ed. by: A. V. Latyshev, A. V. Dvurechenskii, A. L. Aseev. Elsevier, 2017, Ch. 6. P. 131—155. DOI: 10.1016/B978-0-12-810512-2.00006-8
7. Tkachenko O. A., Tkachenko V. A., Baksheev D. G., Kvon Z. D., Portal J. C. Electrostatic potential, energy spectrum, and Fano resonances in a ballistic ring interferometer based on an AlGaAs/GaAs heterojunction // JETP Letters. 2000. V. 71, N 6. P. 255—258. DOI: 10.1134/1.568328
8. Olshanetsky E. B., Cassé M., Kvon Z. D., Gusev G. M., Litvin L. V., Plotnikov A. V., Maude D. K., Portal J. C. Symmetric, gated, ballistic rings as tunable electron interferometers // Physica E. 2000. V. 6, Iss. 1–4. P. 322—326. DOI: 10.1016/S1386-9477(99)00160-5
9. Cassé M., Kvon Z. D., Gusev G. M., Olshanetskii E. B., Litvin L. V., Plotnikov A. V., Maude D. K., Portal J. C. Temperature dependence of the Aharonov–Bohm oscillations and the energy spectrum in a single-mode ballistic ring // Phys. Rev. B. 2000. V. 62, Iss. 4. P. 2624—2629. DOI: 10.1103/PhysRevB.62.2624
10. Liang C.-T., Simmons M. Y., Smith C. G., Kim G. H., Ritchie D. A., Pepper M. Experimental evidence for Coulomb charging effects in an open quantum dot at zero magnetic field // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 81, Iss. 16. P. 3507—3510. DOI: 10.1103/PhysRevLett.81.3507
11. Liang C.-T., Simmons M. Y., Smith C. G., Kim G. H., Ritchie D. A., Pepper M. Multilayered gated lateral quantum dot devices // Appl. Phys. Lett. 2000. V. 76, N 9. P. 1134—1136. DOI: 10.1063/1.125961
12. Baksheev D. G., Tkachenko O. A., Tkachenko V. A. The role of intersubband mixing in single-electron charging of open quantum dot // Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. 2000. V. 6, Iss. 1–4. P. 414—417. DOI: 10.1016/S1386-9477(99)00204-0
13. Tkachenko O. A., Tkachenko V. A., Baksheev D. G., Liang C.-T., Simmons M. Y., Smith C. G., Ritchie D. A., Kim Gil-Ho, Pepper M. Coulomb charging effects in an open quantum dot device // J. Phys.: Condens. Matter. 2001. V. 13, N 42. P. 9515—9534. DOI: 10.1088/0953-8984/13/42/312
14. Tkachenko V. A., Tkachenko O. A., Baksheev D. G., Liang C.-T. Coulomb oscillations of the ballistic conductance in a quasi-one-dimensional quantum dot // JETP Letters. 2001. V. 74, N 4. P. 209—212. DOI: 10.1134/1.1413551
15. Büttiker M., Imry Y., Landauer R. Josephson behavior in small normal one-dimensional rings // Phys. Lett. A. 1983. V. 96, Iss. 7. P. 365—367. DOI: 10.1016/0375-9601(83)90011-7
16. Büttiker M. Small normal-metal loop coupled to an electron reservoir // Phys. Rev. B. 1985. V. 32, Iss. 3. P. 1846—1849. DOI: 10.1103/PhysRevB.32.1846
17. Sivan U., Imry Y. de Haas–van Alphen and Aharonov–Bohm-type persistent current oscillations in singly connected quantum dots // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 61, Iss. 8. P. 1001—1004. DOI: 10.1103/PhysRevLett.61.1001
18. Jayannavar A. M., Deo P. S. Persistent currents and conductance of a metal loop connected to electron reservoirs // Phys. Rev. B. 1994. V. 49, Iss. 19. P. 13685—13690. DOI: 10.1103/PhysRevB.49.13685
19. Fogler M. M., Levin E. I., Shklovskii B. I. Chemical potential and magnetization of a Coulomb island // Phys. Rev. B. 1994. V. 49, Iss. 19. P. 13767—13775. DOI: 10.1103/PhysRevB.49.13767
20. Tan W.-C., Inkson J. C. Magnetization, persistent currents, and their relation in quantum rings and dots // Phys. Rev. B. 1999. V. 60, Iss. 8. P. 5625—5635. DOI: 10.1103/PhysRevB.60.5626
21. Bremme L., Ihn T., Ensslin K. Magnetization of a two-dimensional electron gas and the role of one-dimensional edge currents // Phys. Rev. B. 1999. V. 59, Iss. 11. P. 7305—7307. DOI: 10.1103/PhysRevB.59.7305
22. Aldea A., Moldoveanu V., Nita M., Manolescu A., Gudmundsson V., Tanatar B. Orbital magnetization of single and double quantum dots in a tight-binding model // Phys. Rev. B. 2003. V. 67, Iss. 3. P. 035324 (10pp). DOI: 10.1103/PhysRevB.67.035324
23. Mailly D., Chapelier C., Benoit A. Experimental observation of persistent currents in a GaAs–AlGaAs single loop // Phys. Rev. Lett. 1993. V. 70, Iss. 13. P. 2020—2023. DOI: 10.1103/PhysRevLett.70.2020
24. Rabaud W., Saminadayar L., Mailly D., Hasselbach K., Benoit A., Etienne B. Persistent Currents in mesoscopic connected rings // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 86, Iss. 14. P. 3124—3127. DOI: 10.1103/PhysRevLett.86.3124
25. Schwarz M. P., Grundler D., Wilde M. A., Heyn Ch., Heitmann D. Magnetization of semiconductor quantum dots // J. Appl. Phys. 2002. V. 91, Iss. 10. P. 6875—6877. DOI: 10.1063/1.1450762
26. Schwarz M. P., Wilde M. A., Groth S., Grundler D., Heyn Ch., Heitmann D. Sawtoothlike de Haas–van Alphen oscillations of a two-dimensional electron system // Phys. Rev. B. 2002. V. 65, Iss. 24. P. 245315 (9pp). DOI: 10.1103/PhysRevB.65.245315
27. Usher A., Elliott M. Magnetometry of low-dimensional electron and hole systems // J. Phys.: Condens. Matter. 2009. V. 21, P. 103202 (31pp). DOI: 10.1088/0953-8984/21/10/103202
28. Cresti A., Farchioni R., Grosso G., Parravicini G. P. Keldysh–Green function formalism for current profiles in mesoscopic systems // Phys. Rev. B. 2003. V. 68, Iss. 7. P. 075306 (8pp). DOI: 10.1103/PhysRevB.68.075306
29. Ткаченко О. А., Ткаченко В. А. Суперкомпьютерное моделирование полупроводниковых квантовых наносистем // Выч. методы и программирование. 2012. Т. 13, Вып. 1. С. 253—262.

Работа поддержана грантом № 19–72–30023 Российского научного фонда. Расчеты с использованием вычислительных ресурсов МСЦ РАН выполнялись по Гос. заданию № 0306–2019–0011.

Статья поступила в редакцию 26 декабря 2019 г.

Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = *Materials of Electronics Engineering*. 2019, vol. 22, no. 4, pp. 290—297.
DOI: 10.17073/1609-3577-2019-4-290-297

Aharonov—Bohm oscillations and distributions of equilibrium current in open quantum dot and ring interferometer

O. A. Tkachenko¹, D. G. Baksheev², V. A. Tkachenko^{1,2,§}

¹ *Rzhanov Institute of Semiconductor Physics, Siberian Branch, Russian Academy of Sciences,
13 Akad. Lavrent'eva Ave., Novosibirsk 630090, Russia*

² *Novosibirsk State University,
1 Pirogova Str., Novosibirsk 630090, Russia*

Abstract. Magnetotransport in submicron devices formed on the basis of GaAs/AlGaAs structures is simulated by the method of nonequilibrium Green functions. In the one-particle approximation, the influence of a perpendicular magnetic field on electron transmission through a quasi-one-dimensional quantum dot and the Aharonov—Bohm interferometer is considered. Two-terminal conductance and magnetic moment of the devices are calculated. Two-dimensional patterns of equilibrium (persistent) currents are obtained. The correlations between energy dependences of magnetic moment and conductance are considered. For the quasi-one-dimensional quantum dot, regular conductance oscillations similar to the ABOs were found at low magnetic fields (0.05—0.4 T). In the case of a ring interferometer, the contribution to the total equilibrium current and magnetic moment at a given energy can change sharply both in magnitude and in sign when the magnetic field changes within the same Aharonov—Bohm oscillation. The conductance through the interferometer is determined not by the number of propagating modes, but rather by the influence of triangular quantum dots at the entrances to the ring, causing back scattering. Period of calculated ABOs corresponds to that measured for these devices.

Keywords: ballistic quantum dot, electron ring interferometer, conductance, equilibrium current, magnetic moment, Aharonov—Bohm oscillations

References

1. Bykov A. A., Kvon Z. D., Ol'shanetskii E. B., Litvin L. V., Nastaushv Yu. V., Mansurov V. G., Migal' V. P., Moshchenko S. P., Plyukhin V. G. Quasiballistic electronic interferometer. *JETP Letters*, 1993, vol. 57, no. 9, pp. 613—616.
2. Persson M., Pettersson J., von Sydow B., Lindelof P. E., Kristensen A., Berggren K. F. Conductance oscillations related to the eigenenergy spectrum of a quantum dot in weak magnetic fields. *Phys. Rev. B*, 1995, vol. 52, no. 12, pp. 8921—8933. DOI: 10.1103/PhysRevB.52.8921
3. Micolich A. P., See A. M., Scannell B. C., Marlow C. A., Martin T. P., Pilgrim I., Hamilton A. R., Linke H., Taylor R. P. Is it the boundaries or disorder that dominates electron transport in semiconductor 'billiards'? *Fortschr. Phys.*, 2013, vol. 61, no. 2-3, pp. 332—347. DOI: 10.1002/prop.201200081
4. Tkachenko O. A., Tkachenko V. A., Kvon Z. D., Latyshev A. V., Aseev A. L. Introscopy of quantum nanoelectronic devices. *Nanotechnologies in Russia*, 2010, vol. 5, no. 9-10, pp. 676—695. DOI: 10.1134/S1995078010090132
5. Tkachenko V. A., Tkachenko O. A., Kvon Z. D., Latyshev A. V., Aseev A. L. Introscopy in nano- and mesoscopic physics: single electronics and quantum ballistics. *Optoelectronics, instrumentation and data processing*, 2016, vol. 52, no. 5, pp. 518—528. DOI: 10.3103/S8756699016050149
6. Tkachenko O. A., Tkachenko V. A., Kvon Z. D., Sheglov D. V., Aseev A. L. Modeling of quantum transport and single-electron charging in GaAs/AlGaAs-nanostructures. In: *Advances in Semiconductor Nanostructures. Growth, Characterization, Properties and Applications*. Ed. by: A. V. Latyshev, A. V. Dvurechenskii, A. L. Aseev. Elsevier, 2017, ch. 6, pp. 131—155. DOI: 10.1016/B978-0-12-810512-2.00006-8
7. Tkachenko O. A., Tkachenko V. A., Baksheev D. G., Kvon Z. D., Portal J. C. Electrostatic potential, energy spectrum, and Fano resonances in a ballistic ring interferometer based on an AlGaAs/GaAs heterojunction. *JETP Letters*, 2000, vol. 71, no. 6, pp. 255—258. DOI: 10.1134/1.568328
8. Olshanetsky E. B., Cassé M., Kvon Z. D., Gusev G. M., Litvin L. V., Plotnikov A. V., Maude D. K., Portal J. C. Symmetric, gated, ballistic rings as tunable electron interferometers. *Physica E*, 2000, vol. 6, no. 1-4, pp. 322—326. DOI: 10.1016/S1386-9477(99)00160-5
9. Cassé M., Kvon Z. D., Gusev G. M., Olshanetsky E. B., Litvin L. V., Plotnikov A. V., Maude D. K., Portal J. C. Temperature dependence of the Aharonov—Bohm oscillations and the energy spectrum in a single-mode ballistic ring. *Phys. Rev. B*, 2000, vol. 62, no. 4, pp. 2624—2629. DOI: 10.1103/PhysRevB.62.2624
10. Liang C.-T., Simmons M. Y., Smith C. G., Kim G. H., Ritchie D. A., Pepper M. Experimental evidence for Coulomb charging effects in an open quantum dot at zero magnetic field. *Phys. Rev. Lett.*, 1998, vol. 81, no. 16, pp. 3507—3510. DOI: 10.1103/PhysRevLett.81.3507
11. Liang C.-T., Simmons M. Y., Smith C. G., Kim G. H., Ritchie D. A., Pepper M. Multilayered gated lateral quantum dot devices. *Appl. Phys. Lett.*, 2000, vol. 76, no. 9, pp. 1134—1136. DOI: 10.1063/1.125961
12. Baksheev D. G., Tkachenko O. A., Tkachenko V. A. The role of intersubband mixing in single-electron charging of open quantum dot. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 2000, vol. 6, no. 1-4, pp. 414—417. DOI: 10.1016/S1386-9477(99)00204-0
13. Tkachenko O. A., Tkachenko V. A., Baksheev D. G., Liang C.-T., Simmons M. Y., Smith C. G., Ritchie D. A., Kim Gil-Ho, Pepper M. Coulomb charging effects in an open quantum dot device. *J. Phys.: Condens. Matter*, 2001, vol. 13, no. 42, pp. 9515—9534. DOI: 10.1088/0953-8984/13/42/312
14. Tkachenko V. A., Tkachenko O. A., Baksheev D. G., Liang C.-T. Coulomb oscillations of the ballistic conductance in a quasi-one-dimensional quantum dot. *JETP Letters*, 2001, vol. 74, no. 4, pp. 209—212. DOI: 10.1134/1.1413551
15. Büttiker M., Imry Y., Landauer R. Josephson behavior in small normal one-dimensional rings. *Phys. Lett. A*, 1983, vol. 96, no. 7, pp. 365—367. DOI: 10.1016/0375-9601(83)90011-7
16. Büttiker M. Small normal-metal loop coupled to an electron reservoir. *Phys. Rev. B*, 1985, vol. 32, no. 3, pp. 1846—1849. DOI: 10.1103/PhysRevB.32.1846
17. Sivan U., Imry Y. de Haas-van Alphen and Aharonov—Bohm-type persistent current oscillations in singly connected quantum dots. *Phys. Rev. Lett.*, 1988, vol. 61, no. 8, pp. 1001—1004. DOI: 10.1103/PhysRevLett.61.1001

Information about authors:

Olga A. Tkachenko¹: Cand. Sci. (Phys.—Math.), Senior Researcher (otkach@isp.nsc.ru); **Dmitry G. Baksheev**²: Cand. Sci. (Phys.—Math.), Assistant Lecturer (bd@mail.ru); **Vitaly A. Tkachenko**^{1,2,§}: Cand. Sci. (Phys.—Math.), Senior Researcher (vtkach@isp.nsc.ru)

§ Corresponding author

18. Jayannavar A. M., Deo P. S. Persistent currents and conductance of a metal loop connected to electron reservoirs. *Phys. Rev. B*, 1994, vol. 49, no. 19, pp. 13685—13690. DOI: 10.1103/PhysRevB.49.13685
19. Fogler M. M., Levin E. I., Shklovskii B. I. Chemical potential and magnetization of a Coulomb island. *Phys. Rev. B*, 1994, vol. 49, no. 19, pp. 13767—13775. DOI: 10.1103/PhysRevB.49.13767
20. Tan W.-C., Inkson J. C. Magnetization, persistent currents, and their relation in quantum rings and dots. *Phys. Rev. B*, 1999, vol. 60, no. 8, pp. 5625—5635. DOI: 10.1103/PhysRevB.60.5626
21. Bremme L., Ihn T., Ensslin K. Magnetization of a two-dimensional electron gas and the role of one-dimensional edge currents. *Phys. Rev. B*, 1999, vol. 59, no. 11, pp. 7305—7307. DOI: 10.1103/PhysRevB.59.7305
22. Aldea A., Moldoveanu V., Nita M., Manolescu A., Gudmundsson V., Tanatar B. Orbital magnetization of single and double quantum dots in a tight-binding model. *Phys. Rev. B*, 2003, vol. 67, no. 3, p. 035324 (10pp). DOI: 10.1103/PhysRevB.67.035324
23. Mailly D., Chapelier C., Benoit A. Experimental observation of persistent currents in a GaAs-AlGaAs single loop. *Phys. Rev. Lett.*, 1993, vol. 70, no. 13, pp. 2020—2023. DOI: 10.1103/PhysRevLett.70.2020
24. Rabaud W., Saminadayar L., Mailly D., Hasselbach K., Benoit A., Etienne B. Persistent Currents in mesoscopic connected rings. *Phys. Rev. Lett.*, 2001, vol. 86, no. 14, pp. 3124—3127. DOI: 10.1103/PhysRevLett.86.3124
25. Schwarz M. P., Grundler D., Wilde M. A., Heyn Ch., Heitmann D. Magnetization of semiconductor quantum dots. *J. Appl. Phys.*, 2002, vol. 91, no. 10, pp. 6875—6877. DOI: 10.1063/1.1450762
26. Schwarz M. P., Wilde M. A., Groth S., Grundler D., Heyn Ch., Heitmann D. Sawtoothlike de Haas—van Alphen oscillations of a two-dimensional electron system. *Phys. Rev. B*, 2002, vol. 65, no. 24, p. 245315 (9pp). DOI: 10.1103/PhysRevB.65.245315
27. Usher A., Elliott M. Magnetometry of low-dimensional electron and hole systems. *J. Phys.: Condens. Matter*, 2009, vol. 21, p. 103202 (31pp). DOI: 10.1088/0953-8984/21/10/103202
28. Cresti A., Farchioni R., Grosso G., Parravicini G. P. Keldysh—Green function formalism for current profiles in mesoscopic systems. *Phys. Rev. B*, 2003, vol. 68, no. 7, p. 075306 (8pp). DOI: 10.1103/PhysRevB.68.075306
29. Tkachenko O. A., Tkachenko V. A. Supercomputer modeling of semiconductor quantum nanosystems. *Vychislitel'nyye metody i programmirovaniye = Numerical methods and programming*, 2012, vol. 13, no. 1, pp. 253—262. (In Russ.)

Acknowledgments. This work was supported by the Russian Science Foundation, grant No. 19-72-30023. Calculations using the computing resources of the Joint Supercomputer Center of the Russian Academy of Sciences were carried out in accordance with State Order No. 0306-2019-0011.

Received December 26, 2019

* * *

ОБЩИЕ ВОПРОСЫ

GENERAL QUESTIONS

Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2019. Т. 22, № 4. С. 298—301.
DOI: 10.17073/1609-3577-2019-4-298-301

УДК 621.365

Факторы, определяющие актуальность создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках реализации приоритетов научно-технологического развития России*

© 2019 г. А. А. Зацаринный¹, К. К. Абгарян^{1,2,§}

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

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

Аннотация. В современном мире знания и высокие технологии определяют эффективность экономики, позволяют кардинально повысить качество жизни людей, модернизировать инфраструктуру и государственное управление, обеспечить правопорядок и безопасность. Создание исследовательской инфраструктуры, базирующейся на высокопроизводительном гибридном кластере, позволило проводить детальные расчеты сложных явлений и процессов без натурных экспериментов. Стало возможным наиболее результативно применять современные методы многомасштабного компьютерного моделирования при разработке прототипов новых материалов с заданными свойствами для их дальнейшего синтеза. Такие подходы позволяют существенно удешевить и ускорить процессы разработки современных технологий получения новых полупроводниковых материалов для нанoeлектроники, композитных материалов для авиационно-космической отрасли и других. Так использование методов многомасштабного моделирования в сочетании с применением высокопроизводительных программных средств позволило создать компьютерную модель наноразмерной гетероструктуры, разработать средства для предсказательного компьютерного моделирования физической структуры приборов нанoeлектроники, нейроморфной архитектуры многоуровневых устройств памяти и изучать процессы дефектообразования в композитных материалах.

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

Введение

В современном мире знания и высокие технологии определяют эффективность экономики, позволяют кардинально повысить качество жизни людей, модернизировать инфраструктуру и государственное управление, обеспечить правопорядок и безопасность [1]. В условиях, когда процессы обще-

мировой глобализации очевидно затормозились, в сфере науки и технологий они продолжают активно развиваться. Эти тенденции подтверждены итогами работы 49-го Всемирного экономического форума в Давосе, который прошел под знаком де-глобализации экономики [2].

При этом, ключевой национальной целью России в настоящее время становится цифровая транс-

Зацаринный Александр Алексеевич¹ — доктор техн. наук, главный научный сотрудник, заместитель директора, e-mail: alex250451@mail.ru; **Абгарян Каринэ Карленовна**^{1,2,§} — доктор физ.-мат. наук, главный научный сотрудник, зав. отделом (1), зав. кафедрой (2), e-mail: kristal83@mail.ru

§ Автор для переписки

* Статья подготовлена по материалам доклада, представленного на I-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 21—23 октября 2019 г.

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

Факторы, определяющие актуальность создания исследовательской инфраструктуры

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

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

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

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

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

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

6. Создание современной исследовательской инфраструктуры должно стать мощным толчком для развития различных отраслей российской нау-

ки, которая находится в условиях концептуального перехода к новой парадигме в научных исследованиях, основанной на анализе накопленных больших данных в конкретных предметных областях [3].

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

Так, в настоящее время в ФИЦ ИУ РАН создана современная исследовательская цифровая платформа с гибридной вычислительной архитектурой. Ресурсы исследователям предоставляются как в виде традиционных облачных сервисов, так и с помощью разработанных специфических технологий применения, называемых научным сервисом (в виде предметно-ориентированных программ [7,8]). Кроме того, разработаны:

- актуальные методы организации индивидуальной среды исполнения задач предсказательного моделирования, на основе технологий виртуализации;

- методы управления вычислительным процессом с целью обеспечения параллельности исполнения разнотипных задач, требующих выделения различных вычислительных ресурсов из состава гибридного высокопроизводительного кластера.

Появление высокопроизводительных вычислительных комплексов открыло новый этап в развитии компьютерных наук и компьютерного моделирования и позволило проводить детальные расчеты сложных явлений и процессов без натурных экспериментов. Это в свою очередь дало возможность существенно удешевить и ускорить процессы разработки современных технологий получения новых материалов. Кроме того, многие сложные физические процессы стали более доступными для детального научного исследования.

Применение и развитие новых методов многомасштабного математического моделирования является одним из основных инструментов для проведения исследований в современной науке о материалах. В настоящее время на базе цифровой платформы ФИЦ ИУ РАН решается ряд практических

задач, связанных с синтезом новых композиционных материалов с заданными свойствами. Обоснованы и сформулированы системные решения для проведения исследований с использованием ресурсов цифровой платформы, включая разработку средств предсказательного компьютерного моделирования физической структуры приборов наноэлектроники, нейроморфной архитектуры многоуровневых устройств памяти, дефектообразования в композитных материалах и другие [9—11].

На базе созданной цифровой платформы стало возможным размещать высокопроизводительные программные системы иерархической архитектуры. Использование методов многомасштабного компьютерного моделирования в сочетании с применением высокопроизводительных программных средств позволило создать компьютерную модель наноразмерной гетероструктуры с заданными параметрами и прогнозируемыми свойствами. Сложность задачи состоит в том, что при моделировании всей многослойной гетероструктуры и расчете ее свойств необходимо воспроизвести каждый из составляющих ее основных слоев (*bulk*, приповерхностный, надповерхностный слой) и интерфейсные слои, находящиеся на границе соседствующих основных слоев.

В работе [9] представлен многомасштабный подход к решению данной задачи. Он основан на последовательном иерархическом рассмотрении и хранении данных во взаимосвязи «структура–свойство» на различных уровнях структурной иерархии. Для решения конкретных задач используются созданные расчетные модули по разноразмерным математическим моделям, базы данных по материалам, пакетные приложения, а также методы многомасштабного моделирования, в которых на каждом уровне применяются соответствующие подходы и приближения (квантово–механические, квантово–химические, молекулярно–динамические, дискретно–элементные, сплошносредные, статистические и т.д.). Кроме того, в ходе моделирования задействуются различные вычислительные средства включая центральные (**CPU**) и графические процессоры (**GPU**).

В настоящее время искусственные нейронные сети стали мощным инструментом интеллектуального анализа данных, построения аппроксимационных моделей сложных технических систем и процессов, распознавания образов, классификации и кластеризации. Сдерживающим фактором развития в данном направлении является высокие вычислительные затраты, что приводит к необходимости компьютерной реализации таких систем на высокопроизводительных вычислительных комплексах. Весомой альтернативой в этом плане являются аналоговые реализации, элементная база которых строится на использовании матриц энергонезависимой резистивной памяти. Прогно-

зирование по данному перспективному направлению, диктует необходимость применения методов многомасштабного моделирования на высокопроизводительных гибридных кластерах для создания нового поколения мемристоров (двухполюсных устройств, электрическое сопротивление которых меняется в зависимости от протекшего через них заряда) на базе оксидов металлов. Данные устройства лежат в основе матриц энергонезависимой резистивной памяти. Актуальной является задача подбора состава и структуры оксидов металлов, лежащих в основе мемристоров таким образом, чтобы достижение стабильного эффекта резистивного переключения обеспечивалось в течении длительного промежутка времени в реальной жизни.

Заключение

В настоящее время в ФИЦ ИУ РАН разработана оригинальная архитектура высокопроизводительного программного комплекса, которая позволит осуществить решение существующих проблем, возникающих при проектировании элементов мемристора на основе магнитных туннельных переходов (**МТП**) при их последовательной миниатюризации. Такой подход дает возможность спроектировать и создать системы с механизмом параллельных вычислений, которые необходимы для построения основы новых аналоговых нейроморфных сетей.

Библиографический список

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

10. Abgaryan K. K. Optimization problems of nanosized semiconductor heterostructures // *Russ. Microelectron.* 2018. V. 47, N 8. P. 583—588. DOI: 10.1134/S1063739718080024

11. Абгарян К. К. Информационная технология построения многомасштабных моделей в задачах вычислительного материаловедения // *Системы высокой доступности*. 2018. Т. 15, № 2. С. 9—15.

12. Абгарян К. К. Многомасштабное моделирование работы многоуровневых элементов памяти, применяемых для создания нейроморфных сетей // *Материалы I Международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (ММЭК-2019)*. М.: МАКС Пресс, 2019. С. 53—55. DOI: 10.29003/m682.MMMSEC-2019

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (проекты №№ 18-29-03091, 19-29-03051 мк).

Статья поступила в редакцию 26 декабря 2019 г.

Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering. 2019, vol. 22, no. 4, pp. 298—301. DOI: 10.17073/1609-3577-2019-4-298-301

Factors determining the relevance of creation research infrastructure for the synthesis of new materials in the framework of the implementation of the priorities of scientific and technological development of Russia

A. A. Zatsarinny¹, K. K. Abgaryan^{1,2,*}

¹ *Federal Research Centre “Information and Control” of the Russian Academy of Sciences, 44 Vavilov Str., Moscow 119333, Russia*

² *Moscow Aviation Institute (National Research University), 4 Volokolamskoe shosse, 4, Moscow 125993, Russia*

Abstract. In the modern world, knowledge and high technologies determine the effectiveness of the economy, can radically improve the quality of life of people, modernize infrastructure and public administration, and ensure law and order and security. The creation of a research infrastructure based on a high-performance hybrid cluster enabled detailed calculations of complex phenomena and processes without full-scale experiments. It has become possible to most efficiently apply modern methods of multiscale computer modeling when developing prototypes of new materials with desired properties for their further synthesis. Such approaches can significantly reduce the cost and speed up the development of modern technologies for producing new semiconductor materials for nanoelectronics, composite materials for the aerospace industry and others. Thus, the use of multiscale modeling methods in combination with the use of high-performance software tools made it possible to create a computer model of a nanoscale heterostructure, develop tools for predictive computer modeling of the physical structure of nanoelectronic devices, the neuromorphic architecture of multilevel memory devices, defect formation in composite materials, and others.

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

References

1. From the speech of Russian President Vladimir Putin at the VI International Forum for Technological Development “Techno-prom-2018” (August 27, 2018). (In Russ.). URL: <http://www.kremlin.ru/events/president/news/58391>
2. About Davos. (In Russ.). URL: <https://www.gazeta.ru/business/2019/01/25/12143185.shtml>
3. Zatsarinny A. A., Kolin K. K. Theory and practice of digital transformation of society in the framework of the priorities of scientific and technological development of Russia. In: *Proektirovanie budushchego. Problemy tsifrovoy real'nosti* [Designing the future. Problems of digital reality]. Moscow: IPM im. M. V. Keldysh, 2019, pp. 29—40. (In Russ.)
4. Malinetskiy G. G. Digital reality at the point of bifurcation and strategic objectives of the Union State in the context of the humanitarian and technological revolution. In: *Proektirovanie budushchego. Problemy tsifrovoy real'nosti* [Designing the future. Problems of digital reality]. Moscow: IPM im. M. V. Keldysh, 2019, pp. 12—27. (In Russ.)
5. Zatsarinny A. A., Kiselev E. V., Kozlov S. V., Kolin K. K. *Informatsionnoe prostranstvo tsifrovoy ekonomiki Rossii. Kontseptual'nye osnovy i problemy formirovaniya* [Information space of the digital economy of Russia. Conceptual foundations and problems of formation]. Moscow: FITs IU RAN, 2018, 236 p. (In Russ.)

Information about authors:

Aleksandr A. Zatsarinny¹: Dr. Sci. (Eng.), Chief Researcher, Deputy Director (azatsarinny@frcsc.ru); **Karine K. Abgaryan**^{1,2,*}: Dr. Sci. (Phys.-Math.), Chief Researcher, Head of the Department (1), Head of the Department (2) (kristal83@mail.ru)

* Corresponding author

6. World Research Institutions Ranking (WRIR). URL: <http://eurochambres.org/wrir/wrir-2018/informatsionnye-tehnologii/>

7. Zatsarinny A. A. Digital platform for scientific research // *Mathematical modeling and information technology in engineering and business applications*. In: *Proc. of the Intern. Sci. Conf. “Mathematical modeling and information technology in engineering and business applications”*. Voronezh: Voronezh State University, 2018, pp. 104—113. (In Russ.)

8. Zatsarinny A. A., Gorshenin A. K., Kondrashev V. A., Volovich K. I., Denisov S. A. Ward high performance solutions as services of research digital platform. *XIIIth International Symposium «Intelligent Systems», INTELS'18*. St. Petersburg, 2018.

9. Abgaryan K. K. *Mnogomasshtabnoe modelirovanie v zadachakh strukturnogo materialovedeniya* [Multiscale modeling in problems of structural materials science]. Moscow: MAKS Press, 2017, 284 p. (In Russ.)

10. Abgaryan K. K. Optimization problems of nanosized semiconductor heterostructures. *Russ. Microelectron.*, 2018, vol. 47, no. 8, pp. 583—588. DOI: 10.1134/S1063739718080024

11. Abgaryan K. K. Information technology is the construction of multi-scale models in problems of computational materials science. *Highly available systems*, 2018, vol. 15, no. 2, pp. 9—15. (In Russ.)

12. Abgaryan K. K. Multiscale modeling of the work of multilevel memory elements used to create neuromorphic networks. In: *Proc. of the I Intern. Conf. “Mathematical Modeling in Materials Science of Electronic Components” (MMEK-2019)*. Moscow: MAKS-Press, 2019, pp. 53—55. DOI: 10.29003/m682.MMMSEC-2019

Acknowledgments. This work was partially supported by the Russian Foundation for Basic Research (projects Nos. 18-29-03091, 19-29-03051mk).

Received December 26, 2019

УДК 621

Методы консолидации научных сервисов*

© 2019 г. А. А. Зацаринный¹, В. А. Кондрашев^{1,§}, А. А. Сорокин², С. А. Денисов¹

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

² *Вычислительный центр Дальневосточного отделения Российской академии наук,
ул. Ким Ю Чена, д. 65, Хабаровск, 680000, Россия*

Аннотация. В работе рассматриваются методы консолидации научных сервисов цифровой платформы для интеграции совокупности научных услуг из различных областей науки для проведения междисциплинарных исследований. Решения для создания консолидированных сервисов могут найти широкое применение для многоуровневого, многомасштабного моделирования в области материаловедения, предусматривающего комплексное моделирование на нескольких уровнях иерархии. В настоящее время эта задача решается созданием многокомпонентных иерархических программных комплексов на корпоративных вычислительных средствах. С появлением высокопроизводительных облачных вычислительных платформ появится возможность получать услуги по решению частных задач моделирования в виде научных сервисов. Задачи комплексного иерархического моделирования в этом случае будут решаться консолидированным сервисом — сервисом, обеспечивающим последовательно-параллельное выполнение компонентов комплексного моделирования в виде специализированных научных сервисов. Описание процессов выполнения научного сервиса основано на методике исследования и представляет собой план исследования (технологическую карту исследования), описывающий необходимый для выполнения сервиса взаимоувязанный по времени набор операций и перечень ресурсов для их выполнения. В современных условиях развития микросервисного подхода к созданию вычислительных систем, эволюции сервис-ориентированных архитектур и децентрализации корпоративных интеграционных шин проблемам эффективной интеграции платформенных сервисов уделяется особое внимание. В работе предлагается дополнить существующее описание научного сервиса возможностью заказа стороннего сервиса на основе механизмов гибкой (agile) интеграции. Этот подход позволит на современном этапе развития сервисных архитектур преодолеть недостатки централизованных систем типа корпоративных интеграционных шин и воспользоваться преимуществами эластичности облачных вычислений и микросервисного подхода к созданию информационно-вычислительных систем.

Ключевые слова: консолидированный сервис, многомасштабное моделирование, многоуровневое моделирование, цифровая платформа, облачные вычисления, научный сервис, интеграция сервисов

Введение

Концепция многомасштабного моделирования, интегрирующая разноуровневые методы моделирования поведения материалов, широко используется в материаловедении и технологии новых материалов [1]. Необходимость комплексного моделирования на нескольких уровнях иерархии требует создания многокомпонентных иерархических программных комплексов для решения задач многомасштабного компьютерного моделирования структурных свойств различных материалов. В комплексах ис-

пользуются различные программные инструменты, обеспечивающие эффективное моделирование свойств материалов на определенном уровне. Важной задачей в этих комплексах является развитие технологий связывания программных инструментов и комплексной интерпретации результатов моделирования [2]. Одновременно с процессом создания иерархических программных комплексов многомасштабного моделирования идет развитие технологии цифровых платформ, предлагающих сервисы, в том числе в области математического моделирования свойств материалов.

Зацаринный Александр Алексеевич¹ — доктор техн. наук, заместитель директора, e-mail: azatsarinny@frccsc.ru; **Кондрашев Вадим Адольфович**^{1,§} — канд. техн. наук, заместитель директора, e-mail: vkondrashev@frccsc.ru; **Сорокин Алексей Анатольевич**² — канд. техн. наук, главный научный сотрудник, e-mail: alsor@febras.net; **Денисов Сергей Анатольевич**¹ — ведущий инженер, e-mail: sdenisov@frccsc.ru

§ Автор для переписки

* Статья подготовлена по материалам доклада, представленного на I-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 21—23 октября 2019 г.

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

В целом, проблемам интеграции ресурсов для научных исследований и сервисов в рамках цифровой платформы, в частности, представлению процессов научного исследования в виде облачного сервиса цифровой платформы, не уделяется достаточного внимания. Большинство провайдеров предлагают несвязанные средства моделирования по технологии SAAS (*software-as-a-service*) для решения одной задачи моделирования. В настоящей работе предлагаются методы представления консолидированных сервисов в среде облачных вычислений на основе теоретической и практической проработки цифровой процессной модели представления процессов многомасштабного моделирования в виде научных сервисов цифровой платформы. В качестве основного инструмента интеграции сервисов моделирования предлагается гибкая (*agile*) интеграции сервисов [3], которая позволяет в современных условиях развития сервис-ориентированной модели взаимодействия программных компонентов преодолеть недостатки корпоративной шины предприятия и в полной мере воспользоваться достоинствами облачных вычислений [4].

Консолидированный научный сервис

Под научным сервисом цифровой платформы понимается совокупность процессов и ресурсов для выполнения работ научно-исследовательского характера путем предоставления потребителю оборудования, расходных материалов, информационно-коммуникационных и обеспечивающих ресурсов, продуктов интеллектуальной научной деятельности, человеческих ресурсов, результатом которых является научная (исследовательская) услуга [5].

Для описания процессов, связанных с выполнением научного сервиса, платформой предусматривается инструмент, обеспечивающий формирование технологической карты исследования с перечислением необходимых для выполнения сервиса операций, их длительности, последовательности выполнения и потребляемых ресурсов, а также информационные формы для оформления заявки на выполнение научного сервиса и его заказа. В простейшем случае процесс исследования описывается диаграммой Ганта (или ее аналогом) с указанием графика выполнения операций и необходимых для их выполнения ресурсов — оборудования, материа-

лов и трудозатрат. В настоящее время множество цифровых платформ этим и ограничивается. Однако, очевидно, что сложное исследование использует результаты работы нескольких коллективов исследователей, которые можно оформить в виде отдельных научных сервисов и интегрировать их в консолидированный сервис. Для этого предлагается предусмотреть в технологической карте исследования указание ссылок на используемые научные сервисы.

С развитием архитектур информационных систем от монолитных систем до микросервисных [6, 7] решениям для интеграции облачных сервисов и проблемам описания консолидации сервисов в информационной системе уделяется повышенное внимание. В современных условиях успех моделирования (и исследования в целом) зависит от способности информационной системы качественно и заданный срок обрабатывать объемные потоки информации эволюционирующей структуры. Модели извлекают информацию из множества источников, интегрируя ее для необходимой предметной обработки и получения требуемого результата. Вместе с развитием модели сервис-ориентированной архитектуры [8] развиваются инструменты интеграции информационных систем. В настоящее время наблюдается постепенный переход от концепции централизованной сервисной шины предприятия (ESB, Enterprise Service Bus) [9] к концепции гибкой интеграции [10].

Основу концепции гибкой интеграции составляет децентрализация ESB, использование современных инструментов интеграции сервисов на основе программных интерфейсов (API), применяемых в микросервисных архитектурах (REST, gRPC и др.) [11]. Среда интеграции при этом создается в соответствии передовыми контейнерными технологиями виртуализации и управления инфраструктурой облачных вычислений. Основными свойствами гибкой интеграции являются:

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

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

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

Используя свойства гибкой интеграции, облачная цифровая платформа должна обеспечить комплексные сетевые формы организации научной, научно-технической и инновационной деятельности. Цифровая платформа, в данном случае, это со-

вокупность автоматизированных процессов взаимодействия участников научно-технического процесса на основе использования научных сервисов и методов их консолидации, обеспечивающих повышение эффективности научных исследований за счет применения цифровых технологий, оптимизации и стандартизации данных процессов и обеспечения общего информационного пространства.

Система консолидации сервисов в цифровой платформе

По результатам анализа процессов многомасштабного моделирования можно предложить следующую методику для организации работ по созданию консолидированного научного сервиса.

Шаг 1. Разработка целевой функции для потребителя консолидированного научного сервиса, которая содержит описание того, что требуется от научного сервиса с точки зрения его потребителя. На этом этапе необходимо:

- определить основные цели потребителя моделирования (и исследования в целом);
- специфицировать задачи, требующие решения;
- сформулировать предложения по консолидации существующих облачных сервисов.

Шаг 2. Разработка модели организации работ для получения результата, структуры потребления ресурсов и затрат. Модель должна содержать решения по использованию основных ресурсов — персонала, используемых технологий, оборудования, информационных ресурсов, каналов взаимодействия с партнерами и потребителями и т.д. Помимо этого в модели должны быть представлены решения по ключевым процессам организации исследования, направленные на то, чтобы можно было постоянно в требуемом объеме предлагать научный сервис в соответствии с определенной системой функциональных показателей, правилами и нормами организации процессов.

Шаг 3. Анализ разработанной модели функционирования консолидированного научного сервиса, сравнение с существующей моделью проведения исследований. Обоснование решения о том, что научная услуга может быть оказана в существующей организационной структуре цифровой платформы, либо проработанная альтернатива формирования новой структуры в цифровой платформе для оказания консолидированной научной услуги.

В этих условиях комплексной обработки больших потоков информации в рамках цифровой платформы облачных вычислений для связывания одного или нескольких сервисов в один консолидированный научный сервис возможны два способа.

В первом случае процесс подачи заявки на оказание консолидированной услуги осуществляется

от имени ее потребителя по всем научным сервисам, входящим в состав консолидированного научного сервиса. Потребитель заполняет формы заказа и согласует план исследования с каждым из поставщиков услуг самостоятельно.

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

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

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

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

Технологическая карта научного сервиса должна позволять включать в нее операции предоставления стороннего научного сервиса с указанием метода консолидации и атрибутов заказа сервиса

и получения его результатов, а также процессы использования этих результатов при выполнении консолидированного сервиса.

С учетом приведенных рассуждений цифровая платформа, консолидирующая научные сервисы, должна создаваться как иерархия микросервисов, функционирующих в среде облачной интеграционной платформы. Это позволяет использовать преимущества облачных вычислений, обеспечивая эластичность интеграционной информационной системы, высокую степень адаптивности к меняющимся условиям функционирования, для снижения сроков моделирования и повышения его эффективности.

С учетом вышеизложенных аспектов определим состав цифровой платформы многомасштабного моделирования как совокупности следующих компонентов:

- система описания научного сервиса;
- система публикации научного сервиса;
- система классификация научных сервисов;
- система поиска научного сервиса;
- система заказа научного сервиса;
- система планирования и учета ресурсов;
- система учета результатов и экспертных оценок;
- система доступа пользователей;
- интеграционная подсистема.

Система описания научного сервиса является основой системы предоставления научных сервисов и предназначена для спецификации шаблона научного сервиса, определяющей следующие его основные характеристики:

- идентификационные данные;
- данные поставщика сервиса;
- форму заказа сервиса;
- технологическую карту (методику, основные процессы) выполнения исследования с указанием потребляемых ресурсов и использования других научных сервисов;
- процедуры заказа сервиса и согласования изменений в технологической карте (методике) исследования.

Система публикации научного сервиса в рамках портала получает доступ к реестру научных сервисов, доступных для заказа, обеспечивает систематизацию «близких» научных сервисов.

Система классификации научных сервисов предназначена для группировки научных сервисов в соответствии с заданными критериями (область исследования, методики исследования, приборная база, территориальная и организационная принадлежность и т. д.) с целью обеспечения быстрого релевантного поиска и систематизации научных сервисов. С учетом динамичности научных исследований систему классификации целесообразно создавать с изменяемым списком критериев и динамически перестраиваемой системой группировки.

Система поиска научного сервиса предназначена для нахождения «близких» научных сервисов с использованием системы классификации научных сервисов и данных систем описания научного сервиса, учета результатов и экспертных оценок. В системе целесообразно спроектировать блоки поиска «близких» сервисов с использованием методов искусственного интеллекта с элементами самообучения.

Система заказа научного сервиса предназначена для оформления договорных отношений на оказание научной услуги в ходе выполнения процесса выбора и заказа научной услуги во взаимодействии с системами публикации, поиска, описания научного сервиса, планирования и учета ресурсов.

Система планирования и учета ресурсов предназначена для ведения реестра ресурсов (персонала, приборной базы, расходных материалов) и их состояния, а также календаря загрузки и резервирования ресурсов.

Система учета результатов и экспертных оценок предназначена для накопления научных результатов, получаемых пользователями платформы, а также для объективного расчета их наукометрических показателей.

Система доступа пользователей предназначена для учета, идентификации и авторизации пользователей.

Интеграционная подсистема предназначена для реализации сквозных бизнес-процессов в едином информационном пространстве цифровой платформы и, в том числе, для обеспечения функционирования консолидированных сервисов.

Последняя подсистема является базисом цифровой платформы, связывающим все ее системы, а также обеспечивающим функционирование цифровой процессной модели представления ряда процессов научного исследования в виде облачного сервиса или комплекса сервисов, интегрированного в консолидированный сервис. Предлагаемый механизм комплексирования научных сервисов обеспечивает, в частности, потребности многомасштабного моделирования в высокопроизводительной вычислительной среде цифровой платформы [12, 13]. Достоинством подхода является использование концепции гибкой интеграции, которая позволяет в современных условиях развития сервис-ориентированной модели взаимодействия программных компонентов в полной мере воспользоваться свойствами эластичности облачных вычислений.

Заключение

Предоставление консолидированного сервиса, предназначенного для решения научной задачи, требует комплексного подхода, который включает: описание атомарных микросервисов; метаданные,

описывающие способы получения сервисов и передачи результатов; средства оркестровки взаимодействия сервисов. Предложенная архитектура цифровой платформы и ее система интеграции сервисов может быть базовой основой для создания консолидированного сервиса. Использование единого реестра сервисов, средств управления интеграцией обработки и внутреннего обмена данными позволяют создавать цепочки сервисов. Такие цепочки или сети сервисов могут предоставлять принципиально новую услугу по обработке данных и получению научных результатов.

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

Библиографический список

1. Абгарян К. К. Информационная технология построения многомасштабных моделей в задачах вычислительного материаловедения // Системы высокой доступности. 2018. Т. 15, № 2. С. 9—15.
2. Абгарян К. К., Гаврилов Е. С., Марасанов А. М. Информационная поддержка задач многомасштабного моделирования композиционных материалов // International Journal of Open Information Technologies. 2017. Т. 5, № 12. С. 24—28.
3. Kim Clark, Tony Curcio, Nick Glowacki. Agile integration architecture. IBM, 2018. 73 p. URL: <https://www.ibm.com/downloads/cas/J7E0VLDY> (дата обращения: 11.03.2020).
4. Mell P., Grance T. NIST SP 800-145. The NIST definition of cloud computing. Recommendations of the National Institute of Standards and Technology. Gaithersburg, 2011. 7 p. URL: <https://nvlpubs.nist.gov/nistpubs/Legacy/SP/nistspecialpublication800-145.pdf> (дата обращения: 11.03.2020).
5. Зацаринный А. А., Горшенин А. К., Волович К. И., Колин К. К., Кондрашев В. А., Степанов П. В. Управление научными сервисами как основа национальной цифровой платформы «Наука и образование» // Стратегические приоритеты. 2017. № 2. С. 103—113.
6. Lewis J., Fowler M. Microservices. URL: <https://martinfowler.com/articles/microservices.html> (дата обращения: 11.03.2020).
7. Newman S. Building Microservices: Designing Fine-Grained Systems. O'Reilly Media, 2015. 262 p.
8. Kreger H., Brunssen V., Sawyer R., Arsanjani A., High R. The IBM advantage for SOA reference architecture standards // In: IBM developerWorks, 2012. 18 p. URL: <https://www.ibm.com/developerworks/webservices/library/ws-soa-ref-arch/ws-soa-ref-arch-pdf.pdf> (дата обращения: 01.03.2020).
9. Keen M. et al. Patterns: Implementing an SOA using an Enterprise Service Bus // IBM Redbooks, 2004. 386 p. URL: <https://www.redbooks.ibm.com/redbooks/pdfs/sg246346.pdf> (дата обращения: 11.03.2020).
10. Clark K. The fate of the ESB // IBM Developer, 2018. URL: <https://developer.ibm.com/articles/cl-lightweight-integration-1/> (дата обращения: 11.03.2020).
11. Clark K. Comparing web APIs with service-oriented architecture and enterprise application integration // IBM Developer, 2015. URL: <https://developer.ibm.com/technologies/web-development/articles/comparing-web-apis-with-service-oriented-architecture-and-enterprise-application-integration/> (дата обращения: 11.03.2020).
12. Волович К. И. Некоторые системотехнические вопросы предоставления вычислительных ресурсов для научных исследований в гибридной высокопроизводительной облачной среде // Системы и средства информатики. 2018. Т. 28, Вып. 4. С. 97—108. DOI: 10.14357/08696527180410
13. Федеральный исследовательский центр Информатика и управление РАН, ЦКП «Информатика». URL: <http://ckp.frcsc.ru> (дата обращения: 11.03.2020).

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (проекты №№ 18-29-03091, 19-29-03051) с использованием ресурсов гибридного высокопроизводительного вычислительного комплекса Центра коллективного пользования «Информатика» ФИЦ ИУ РАН.

Статья поступила в редакцию 11 марта 2020 г.

Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering. 2019, vol. 22, no. 4, pp. 302—307. DOI: 10.17073/1609-3577-2019-4-302-307

Scientific services consolidation methods

A. A. Zatsarinny¹, V. A. Kondrashev^{1,§}, A. A. Sorokin², S. A. Denisov¹

¹ *Federal Research Centre “Information and Control” of the Russian Academy of Sciences,
44 Vavilov Str., Moscow 119333, Russia*

² *Computing Center of the Far Eastern Branch of the Russian Academy of Sciences,
65 Kim Yu Chen Str., Khabarovsk 680000, Russia*

Abstract. The article discusses methods of consolidating scientific services of a digital platform for integrating a set of scientific services for various fields of science for conducting interdisciplinary research. Solutions for creating consolidated services can be widely used for multilevel, multiscale modeling in the field of materials science, which provides complex modeling at several levels of the hierarchy. Currently, this problem is being solved by creating multicomponent hierarchical

Information about authors:

Aleksandr A. Zatsarinny¹: Dr. Sci. (Eng.), Chief Researcher, Deputy Director (azatsarinny@frcsc.ru); **Vadim A. Kondrashev^{1,§}:** Cand. Sci. (Eng.), Deputy Director (vkondrashev@frcsc.ru); **Alexey A. Sorokin²:** Cand. Sci. (Eng.), Chief Researcher (alsor@febras.net); **Sergey A. Denisov¹:** Lead Engineer (sdenisov@frcsc.ru)

[§] Corresponding author

software systems on corporate computing systems. With the advent of high-performance cloud computing platforms, it will be possible to order services for solving particular modeling problems as a scientific service. In this case, the tasks of complex hierarchical modeling will be solved by a consolidated service - a service providing sequential-parallel execution of complex modeling components in the form of specialized scientific services. The description of the processes for the provision of scientific services is based on the research methodology and is a research plan (the work process mapping), which describes a set of operations related to time and includes a list of necessary resources for their implementation. In modern conditions of the development of a microservice approach to the creation of computing systems and the evolution of the Service Oriented Architecture and of the Enterprise Service Bus integration, special attention is paid to the problems of efficient integration of platform services. The paper proposes to supplement the existing description of a scientific service with the possibility of ordering a third-party service based on agile integration. This approach will allow at the present stage of development of service architectures to overcome the shortcomings of centralized systems such as Enterprise Service Bus and take advantage of the elasticity of cloud computing and a microservice approach to creating information and computing systems.

Keywords: consolidated service, multiscale modeling, multilevel modeling, digital platform, cloud computing, scientific service, service integration

References

1. Abgaryan K. K. Information technology is the construction of multi-scale models in problems of computational materials science. *Highly available systems*, 2018, vol. 15, no. 2, pp. 9–15. (In Russ.)
2. Abgaryan K. K., Gavrilov E. S., Marasanov A. M. Multiscale modeling for composite materials computer simulation support. *International Journal of Open Information Technologies*, 2017, vol. 5, no. 2, pp. 24–28. (In Russ.)
3. Kim Clark, Tony Curcio, Nick Glowacki. Agile integration architecture. IBM, 2018, 73 p. URL: <https://www.ibm.com/downloads/cas/J7E0VLDY> (accessed: 11.03.2020).
4. Mell P., Grance T. NIST SP 800–145. The NIST definition of cloud computing. Recommendations of the National Institute of Standards and Technology. Gaithersburg, 2011, 7 p. URL: <https://nvlpubs.nist.gov/nistpubs/Legacy/SP/nistspecialpublication800-145.pdf> (accessed: 11.03.2020).
5. Zatsarinny A. A., Gorshenin A. K., Volovich K. I., Kolin K. K., Kondrashev V. A., Stepanov P. V. Management of scientific services as the basis of the national digital platform “Science and Education”. *Strategicheskie priority = Strategic Priorities*, 2017, no. 2, pp. 103–113. (In Russ.)
6. Lewis J., Fowler M. Microservices. URL: <https://martinfowler.com/articles/microservices.html> (accessed: 11.03.2020).
7. Newman S. Building Microservices: Designing Fine-Grained Systems. O'Reilly Media, 2015, 262 p.
8. Kreger H., Brunssen V., Sawyer R., Arsanjani A., High R. The IBM advantage for SOA reference architecture standards. In: *IBM developerWorks*, 2012, 18 p. URL: <https://www.ibm.com/developerworks/webservices/library/ws-soa-ref-arch/ws-soa-ref-arch-pdf.pdf> (accessed: 11.03.2020).
9. Keen M. et al. Patterns: Implementing an SOA using an Enterprise Service Bus. IBM Redbooks, 2004, 386 p. URL: <https://www.redbooks.ibm.com/redbooks/pdfs/sg246346.pdf> (accessed: 11.03.2020).
10. Clark K. The fate of the ESB. IBM Developer, 2018. URL: <https://developer.ibm.com/articles/cl-lightweight-integration-1/> (accessed: 11.03.2020).
11. Clark K. Comparing web APIs with service-oriented architecture and enterprise application integration. IBM Developer, 2015. URL: <https://developer.ibm.com/technologies/web-development/articles/comparing-web-apis-with-service-oriented-architecture-and-enterprise-application-integration/> (accessed: 11.03.2020).
12. Volovich K. I. Organization of calculations in a hybrid high-performance computing cluster for parallel execution of heterogeneous tasks. *Sistemy i Sredstva Inform.*, 2018, vol. 28, no. 4, pp. 98–109. (In Russ.). DOI: 10.14357/08696527180410
13. Federal Research Center Computer Science and Control of Russian Academy of Sciences. (In Russ.). URL: <http://ckp.frcsc.ru> (accessed: 11.03.2020).

Acknowledgments. This work was partially supported by the Russian Foundation for Basic Research (projects Nos. 18–29–03091, 19–29–03051) using the resources of the hybrid high-performance computing complex of the Federal Research Centre “Information and Control” of the Russian Academy of Science.

Received March 11, 2020

* * *

Список статей, опубликованных в 2019 г.

**А. М. Кислюк, Т. С. Ильина, И. В. Кубасов,
Д. А. Киселев, А. А. Темиров, А. В. Турутин,
М. Д. Малинкович, А. А. Полисан,
Ю. Н. Пархоменко**

Формирование стабильных индуцированных доменов в области заряженной междоменной границы в ниобате лития с помощью зондовой микроскопии..... 1 5—17

**А. К. Федотов, С. Л. Прищепа, А. С. Федотов,
В. Э. Гуменник, И. В. Комиссаров,
А. О. Конаков, С. А. Воробьева, О. А. Ивашкевич,
А. А. Харченко**

Влияние осаждения частиц кобальта на квантовые поправки к проводимости Друде в твистированном CVD графене 2 73—83

**Н. А. Каланда, А. Л. Гурский, М. В. Ярмолич,
И. А. Бобриков, О. Ю. Иваньшина,
С. В. Сумников, А. В. Петров, Ф. Маia,
А. Л. Желудкевич, С. Е. Демьянов**

Фазовые превращения при кристаллизации $\text{Sr}_2\text{CrMoO}_{6-\delta}$ 3 149—157

МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И ТЕХНОЛОГИЯ. ПОЛУПРОВОДНИКИ

**В. Е. Асадчиков, И. Г. Дьячкова, Д. А. Золотов,
Ю. С. Кривоносов, В. Т. Бублик, А. И. Шихов**

О связи протонного облучения и термической обработки монокристаллического кремния с его структурой 1 18—26

Т. В. Критская, В. Н. Журавлёв, В. С. Бердников

Возможность использования потока инертного газа для управления качественными характеристиками выращиваемых монокристаллов кремния 3 158—167

МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ И ТЕХНОЛОГИЯ. ДИЭЛЕКТРИКИ

**В. М. Касимова, Н. С. Козлова, О. А. Бузанов,
А. П. Козлова, Е. В. Забелина**

Влияние солегирирования Ca^{2+} и Zr^{4+} на оптические характеристики монокристаллов $\text{Gd}_3\text{Al}_2\text{Ga}_3\text{O}_{12} : \text{Ce}$ 1 27—34

В. М. Тимохин, В. М. Гармаш, В. А. Теджетов

Спектральная диагностика колебательных центров в кристаллах с водородными связями 1 35—44

**Е. В. Забелина, Н. С. Козлова, Ж. А. Гореева,
В. М. Касимова**

Многоугловые спектрофотометрические методы отражения для определения коэффициентов преломления 3 168—178

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ И МАТЕРИАЛОВ

В. В. Сиксин

Алгоритм работы электронного тракта детектора телевизионного типа и теоретические модели для описания модифицированной кривой Брэгга 1 45—52

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ ЭЛЕКТРОННЫХ КОМПОНЕНТОВ

А. И. Простомолотов, Н. А. Вerezуб

Математическое моделирование тепловых процессов при каскадной кристаллизации халькогенидов 3 179—189

К. К. Абгарян, И. С. Колбин

Вычисление эффективного коэффициента теплопроводности сверхрешетки на основе кинетического уравнения Больцмана с использованием первопринципных расчетов 3 190—196

К. И. Волович, С. А. Денисов, С. И. Мальковский

Формирование индивидуальной среды моделирования в гибридном высокопроизводительном вычислительном комплексе 3 197—201

**Е. Н. Муратова, В. А. Мошников, К. В. Чернякова,
И. А. Врублевский**

Исследование тепловых характеристик нагревательного элемента из алюминия с нанопористым оксидом алюминия 4 241—245

В. В. Сироткин, Н. А. Тулина

Применение численного моделирования в исследовании мемристивных структур на основе оксидов и халькогенидов 4 246—252

И. В. Матюшкин

Нелинейно-динамический подход в анализе неустойчивости параметров мемристора 4 253—261

К. И. Волович, С. А. Денисов

Основные научно-технические проблемы применения гибридных высокопроизводительных вычислительных комплексов в материаловедении 4 262—267

П. А. Сеченых

Математическое моделирование перспективных структур оксидов металлов 4 268—271

А. Ю. Морозов, Д. Л. Ревизников, К. К. Абгарян

Вопросы реализации нейросетевых алгоритмов на мемристорных кроссбарах 4 272—278

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

Основные подходы к моделированию формирования фоторезистивной маски в вычислительной литографии 4 279—289

О. А. Ткаченко, Д. Г. Бакшеев, В. А. Ткаченко

Осцилляции Ааронова—Бома и распределения равновесных токов в открытой квантовой точке и кольцевом интерферометре 4 290—296

ЭПИТАКСИАЛЬНЫЕ СЛОИ И МНОГОСЛОЙНЫЕ КОМПОЗИЦИИ

**К. Л. Енишерлова, Э. М. Темпер,
Ю. В. Колковский, Б. К. Медведев, С. А. Капилин**

Пленки ALD Al_2O_3 , SiN_x и SiON в качестве пассивирующих покрытий в AlGaIn/GaN HEMT 3 202—211

НАНОМАТЕРИАЛЫ И НАНОТЕХНОЛОГИИ

И. В. Талызин, В. М. Самсонов

О перспективе создания элементов памяти на основе наночастиц кремния 2 84—91

**Е. В. Якушко, Л. В. Кожитов, Д. Г. Муратов,
Д. Ю. Карпенков, А. В. Попкова**

Управление магнитными свойствами нанокмполитов NiCo/C 2 92—103

**М. С. Галков, Н. П. Степина,
М. Р. Предтеченский, А. Е. Безродный,
В. В. Кириенко, А. В. Двуреченский**

Транспортные свойства ориентированной и изотропной бумаги из одностенных углеродных нанотрубок 2 104—111

**В. В. Слепцов, Л. В. Кожитов, А. О. Дителева,
Д. Ю. Кукушкин, А. А. Нагаев**

Новое поколение нанокмполитных материалов на основе углерода и титана для использования в суперконденсаторных накопителях энергии 3 212—218

ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

**Ю. С. Гайдук, А. А. Хорт, М. А. Моховиков,
А. А. Савицкий**

Структура и газочувствительные свойства оксидных композиций $\text{WO}_3\text{—In}_2\text{O}_3$ и $\text{WO}_3\text{—CO}_3\text{O}_4$ 1 53—66

Ю. О. Куланчиков, П. С. Вергелес, Е. Б. Якимов

Влияние облучения пучком низкоэнергетических электронов на вольт—фарадные характеристики структуры Al/SiO₂/Si 2 112—117

В. В. Сиксин

Пилотная установка по очистке «теплой жидкости» тетраметилсилана и проведения «неускорительных экспериментов» 2 118—127

**И. Н. Ганиев, А. П. Абулаков,
Дж. Х. Джайлоев, Ф. А. Алиев, А. Р. Рашидов**

Коррозионно—электрохимическое поведение алюминиевого проводникового сплава E—AlMgSi (алдрей) с оловом в среде электролита NaCl 2 128—134

**И. Н. Ганиев, Ф. А. Алиев, Х. О. Одиназода,
А. М. Сафаров, Дж. Х. Джайлоев**

Теплоемкость и термодинамические функции алюминиевого проводникового сплава E—AlMgSi (алдрей), легированного галлием 3 219—227

В. В. Сиксин

Детектор на «теплой жидкости» для измерения дозных профилей от ионизирующих излучений 3 228—236

АТОМНЫЕ СТРУКТУРЫ И МЕТОДЫ СТРУКТУРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Е. Артюх, Г. Суханек

Оценка степени кристаллографического упорядочения магнитоактивных ионов в $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_{6-\delta}$ с помощью интенсивности рентгеновского пика (101) 2 135—142

ОБЩИЕ ВОПРОСЫ

А. А. Зацаринный, К. К. Абгарян

Факторы, определяющие актуальность создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках реализации приоритетов научно—технологического развития России 4 298—301

**А. А. Зацаринный, В. А. Кондрашев,
А. А. Сорокин, С. А. Денисов**

Методы консолидации научных сервисов .. 4 302—307

ПОЗДРАВЛЯЕМ С ЮБИЛЕЕМ!

Юрию Николаевичу

Пархоменко — 70 лет! 1 67—68

К сведению авторов 2 144

К сведению авторов 4 310

Список статей, опубликованных в 2019 году 4 308—309

МОРДКОВИЧ ВИКТОР НАУМОВИЧ

(1936—2019) 2 143

К сведению авторов

Научно-технический журнал «Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники» публикует на русском языке оригинальные и обзорные (заказные) статьи.

Адресован российским и зарубежным специалистам в области материаловедения и технологии полупроводниковых, диэлектрических и других материалов электронной техники.

Статья представляется в следующем виде:

1. Должна быть подготовлена на компьютере в редакторе, позволяющем набирать текст с формулами и таблицами. Представляется распечатанной через 2 интервала с размером шрифта не меньше 12 пунктов, на белой бумаге формата А4 (210 × 297 мм) в 2 экз.; с левой стороны страницы должно быть свободное поле шириной 30 мм, с правой — шириной 15 мм.

2. К распечатке необходимо приложить дискету 3,5" или компакт-диск с текстом статьи, подготовленным в MS Word с соблюдением правил:

а) текст форматируется только по левому краю (без выравнивания по правому), это касается и заголовков, переносы не ставятся, красная строка отсутствует;

б) абзацы отделяются друг от друга пустой строкой, все слова внутри абзацев разделяются только одним пробелом;

в) между словом и знаком препинания после слова пробел не ставить. После знака препинания должен быть пробел. Скобки снаружи отделяются пробелом, внутри — без пробела;

г) никакие разрядки слов не допускаются;

д) не надо украшать текст линейками и прочей псевдографикой.

3. Для ускорения подготовки журнала следует избегать перегрузки статей большим количеством формул, дублирования результатов в формулах, таблицах и рисунках.

4. Ориентировочный объем публикаций: для статьи — не более 16 стр. (включая рисунки, таблицы, аннотацию и список литературы), для краткого сообщения — не более 2 стр.

5. Первая страница статьи оформляется следующим образом:

– название статьи (должно быть лаконичным, как можно точнее отражать ее содержание);

– фамилия, имя, отчество авторов (полностью); место работы каждого автора в именительном падеже; должность; ученая степень;

– контактная информация (телефон, почтовый адрес, e-mail) для каждого автора при ее наличии;

– аннотация;

– ключевые слова (каждое ключевое слово или словосочетание отделяется от другого запятой или точкой с запятой);

Эти данные должны приводиться на русском и английском языках.

6. В статье должны сжато и четко излагаться современное состояние вопроса, цель работы,

описание методики исследования и обсуждение полученных данных. Рекомендуется стандартизировать структуру статьи, используя подзаголовки: **Введение, Теоретический анализ, Методика, Экспериментальная часть, Результаты и их обсуждение, Библиографический список.** Единицы измерения физико-технических величин давать по Международной системе (СИ).

7. Иллюстрации:

– чертежи должны быть четкими, пригодными для компьютерного воспроизведения. Не следует перегружать рисунки второстепенными данными, не имеющими прямого отношения к тексту статьи.

– представленные в электронном виде, должны быть в формате TIF (с разрешением не меньше 300 dpi), EPS, WMF или PSD; другие форматы по согласованию с редакцией.

– должны быть обязательно упомянуты в тексте и пронумерованы. (Подписанные подписи (если они имеются) прилагаются на отдельном листе).

8. Формулы в распечатках должны быть тщательно выверены автором, который несет за них полную ответственность.

9. Таблицы должны иметь тематический заголовок и последовательно пронумерованы. В тексте должны быть ссылки на все таблицы.

10. Библиографический список в конце статьи должны содержать следующие сведения:

– при ссылке на журнальную статью: фамилию и инициалы автора, название статьи, полное название журнала, год издания, том, номер, страницы начала и конца статьи;

– для книг: фамилию и инициалы автора, название произведения, место издания, издательство, год издания, общее количество страниц в книге;

– для статей в сборнике: название сборника, название работы, номер выпуска (или тома), место издания, издательство (или издающая организация), страницы начала и конца статьи.

Номер литературной ссылки дается в квадратных скобках в соответствующем месте текста.

11. К статье прилагается разрешение на публикацию, сопроводительное письмо. На отдельной странице помещается список авторов. В этом списке указать автора, ответственного за прохождение статьи в редакции. Статья должна быть подписана всеми авторами.

12. За опубликованные материалы гонорар не выплачивается.