

# СБОРНИК ТРУДОВ КОНФЕРЕНЦИИ

28 ноября 2024 г. | Минск, Беларусь | [edaconf.bsuir.by](http://edaconf.bsuir.by)



Министерство образования  
Республики Беларусь



Белорусский государственный  
университет информатики  
и радиоэлектроники



ОАО «ИНТЕГРАЛ» –  
управляющая компания  
холдинга «ИНТЕГРАЛ»



ОАО «ПЛАНАР»

Министерство образования Республики Беларусь  
Учреждение образования  
«Белорусский государственный университет  
информатики и радиоэлектроники»

# **КОМПЬЮТЕРНОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ В ЭЛЕКТРОНИКЕ**

(EDA Conference 2024)

Сборник трудов Международной научно-практической конференции

(Республика Беларусь, г. Минск, 28 ноября 2024 года)

УДК [004.94+621.38]:(082)  
ББК 32.973.3я43+32.85я43  
К63

Редакционная коллегия:

В. Р. Стемпицкий, Л. А. Шичко, И. Ю. Ловшенко, В. А. Лабунов,  
И. И. Абрамов, М. С. Баранова, Н. В. Гапоненко, А. Л. Данилюк,  
Д. Б. Мигас, Е. В. Бакунова, Д. Ч. Гвоздовский, П. Э. Новиков

К63

**Компьютерное** проектирование в электронике = Electronic Design Automation : сб. трудов Междунар. науч.-практ. конф. (Республика Беларусь, г. Минск, 28 ноября 2024 года) / редкол. : В. Р. Стемпицкий [и др.]. – Минск : БГУИР, 2024. – 200 с.  
ISBN 978-985-543-789-6.

Содержит материалы докладов, отобранных программным комитетом Международной научно-практической конференции «Компьютерное проектирование в электронике». Представлены результаты научных исследований и разработок в области электроники, наноматериалов и нанотехнологий, разноуровневого компьютерного моделирования.

УДК [004.94+621.38]:(082)  
ББК 32.973.3я43+32.85я43

ISBN 978-985-543-789-6

© УО «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники», 2024

## ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

<b>БОГУШ</b> <b>Вадим Анатольевич</b>	председатель оргкомитета, д-р физ.-мат. наук, профессор, ректор Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники;
<b>БУЙНЕВИЧ</b> <b>Андрей Сергеевич</b>	сопредседатель оргкомитета, генеральный директор ОАО «ИНТЕГРАЛ» – управляющая компания холдинга «ИНТЕГРАЛ»;
<b>СТЕМПИЦКИЙ</b> <b>Виктор Романович</b>	заместитель председателя оргкомитета, канд. техн. наук, доцент, проректор по научной работе Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники;
<b>АВАКОВ</b> <b>Сергей Мирзоевич</b>	д-р техн. наук, генеральный директор ОАО «Планар»;
<b>ШИЧКО</b> <b>Людмила Александровна</b>	заместитель начальника научно-исследовательской части Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники;
<b>ЛОВШЕНКО</b> <b>Иван Юрьевич</b>	заведующий научно-исследовательской лабораторией «Компьютерное проектирование микро- и наноэлектронных систем», Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники.

## ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

- ЛАБУНОВ**  
**Владимир Архипович**      председатель программного комитета,  
д-р техн. наук, профессор, академик НАН Беларуси,  
иностраный член РАН, научный руководитель научно-  
исследовательской лаборатории «Интегрированные  
микро- и наносистемы», Белорусский государственный  
университет информатики и радиоэлектроники;
- АБРАМОВ**  
**Игорь Иванович**      д-р физ.-мат. наук, профессор, профессор кафедры  
микро- и нанoeлектроники, заведующий научно-  
исследовательской лабораторией «Физика приборов  
микро- и нанoeлектроники», Белорусский  
государственный университет информатики  
и радиоэлектроники;
- БАРАНОВА**  
**Мария Сергеевна**      канд. физ.-мат. наук, заведующий студенческой научно-  
исследовательской лабораторией, Белорусский  
государственный университет информатики  
и радиоэлектроники;
- БОРЗДОВ**  
**Владимир Михайлович**      д-р физ.-мат. наук, профессор, заведующий кафедрой  
физической электроники и нанотехнологий, Белорусский  
государственный университет;
- БОНДАРЕНКО**  
**Анна Витальевна**      д-р. техн. наук, доцент, заведующий научно-  
исследовательской лабораторией «Прикладная  
плазмоника», Белорусский государственный  
университет информатики и радиоэлектроники;
- ВРУБЛЕВСКИЙ**  
**Игорь Альфонсович**      канд. техн. наук, доцент кафедры защиты информации,  
заведующий научно-исследовательской лабораторией  
«Многофункциональные металлооксидные композитные  
материалы», Белорусский государственный университет  
информатики и радиоэлектроники;
- ГАПОНЕНКО**  
**Николай Васильевич**      д-р физ.-мат. наук, профессор, заведующий научно-  
исследовательской лабораторией «Нанофотоника»,  
Белорусский государственный университет  
информатики и радиоэлектроники;
- ГУЛАЙ**  
**Анатолий**  
**Владимирович**      канд. техн. наук, доцент, заведующий кафедрой  
интеллектуальных и мехатронных систем, Белорусский  
национальный технический университет;
- ГУСЕЙНОВА**  
**Сума Сакит**      канд. физ.-мат. наук, доцент, ведущий научный  
сотрудник лаборатории «Физика и техника высоких  
напряжений», Институт физики Национальной академии  
наук Азербайджана;
- ДАНИЛЮК**  
**Александр Леонидович**      канд. физ.-мат. наук, доцент, доцент кафедры микро-  
и нанoeлектроники, Белорусский государственный  
университет информатики и радиоэлектроники;

- КЕРНАСОВСКИЙ  
Юрий Михайлович** директор ОАО «Минский НИИ радиоматериалов»;
- КИСТАНОВ  
Андрей Александрович** канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник лаборатории «Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях», Уфимский университет науки и технологий;
- КОВАЛЬЧУК  
Наталья Станиславовна** канд. техн. наук, доцент, заместитель генерального директора – главный инженер ОАО «ИНТЕГРАЛ» – управляющая компания холдинга «ИНТЕГРАЛ»;
- КОРЗНИКОВА  
Елена Александровна** д-р физ.-мат. наук, профессор, заведующий лабораторией «Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях», Уфимский университет науки и технологий;
- ЛАЗАРУК  
Сергей Константинович** д-р физ.-мат. наук, заведующий научно-исследовательской лабораторией «Интегрированные микро- и наносистемы», Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники;
- ЛИ Инсун** доктор философии, заместитель декана школы электроники и информатики Аньхойского университета;
- ЛИ Цинлянь** профессор, декан факультета электронных наук, Национальный университет оборонных технологий;
- МИГАС  
Дмитрий Борисович** д-р физ.-мат. наук, доцент, профессор, заведующий кафедрой микро- и наноэлектроники, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники;
- НУРУБЕЙЛИ  
Тарана Камил** д-р физ.-мат. наук, доцент, заведующий лабораторией «Физика и техника высоких напряжений», Институт физики Национальной академии наук Азербайджана;
- ПАВЛЮЧИК  
Алексей Арсеньевич** заместитель директора по научной и инновационной работе - начальник НПЦ «Технология»;
- СОЛОВЬЕВ  
Ярослав Александрович** канд. техн. наук, доцент, начальник научно-технического центра – заведующий ОЛНТМ ОАО «ИНТЕГРАЛ» – управляющая компания холдинга «ИНТЕГРАЛ»;
- ШПАКОВСКИЙ  
Сергей Васильевич** канд. физ.-мат. наук, начальник отделения «Т», Филиал НТЦ «Белмикросистемы», ОАО «ИНТЕГРАЛ» – управляющая компания холдинга «ИНТЕГРАЛ»;
- ФАНЬ Хунци** профессор, заместитель декана колледжа электронных наук и инжиниринга, Национальный университет оборонных технологий.

## ГРУППА ТЕХНИЧЕСКОЙ ПОДДЕРЖКИ

<b>БАКУНОВА Елена Валерьевна</b>	начальник отдела маркетинга и научных коммуникаций, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники;
<b>БЕЛАН Светлана Васильевна</b>	ведущий маркетолог отдела маркетинга и научных коммуникаций, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники;
<b>ВОЛЧЁК Владислав Сергеевич</b>	научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории «Компьютерное проектирование микро- и нанoeлектронных систем», Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники;
<b>ГВОЗДОВСКИЙ Дмитрий Чеславович</b>	научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории «Компьютерное проектирование микро- и нанoeлектронных систем», Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники;
<b>КАЛИНУШКИНА Ксения Юрьевна</b>	дизайнер отдела маркетинга и научных коммуникаций, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники;
<b>КАЧАН Ольга Викторовна</b>	маркетолог отдела маркетинга и научных коммуникаций, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники;
<b>КОРСАК Кирилл Витальевич</b>	младший научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории «Компьютерное проектирование микро- и нанoeлектронных систем», Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники;
<b>ЛИХАЧЕВ Артем Андреевич</b>	инженер-электроник научно-исследовательской лаборатории «Компьютерное проектирование микро- и нанoeлектронных систем», Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники;
<b>ЛОБАН Максим Витальевич</b>	переводчик отдела маркетинга и научных коммуникаций, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники;
<b>НОВИКОВ Павел Эдуардович</b>	инженер-электроник научно-исследовательской лаборатории «Компьютерное проектирование микро- и нанoeлектронных систем», Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники.

## ПАРТНЕРЫ



**ОАО «ИНТЕГРАЛ»** – управляющая компания холдинга «ИНТЕГРАЛ», холдинговая компания с 55-летним опытом разработки и производства интегральных схем, дискретных полупроводниковых приборов, систем отображения информации, электронной и медицинской техники. Комплекс предприятий и конструкторских бюро обеспечивает полный цикл создания продукции от стадии проектирования до серийного производства. Холдинг выпускает более 3500 типов интегральных схем и полупроводниковых приборов, 200 типов жидкокристаллических дисплеев и модулей, 150 типов электронного оборудования для медицины и мониторинга здоровья, банковской сферы, торговли, сельского хозяйства и т. д.

«ИНТЕГРАЛ» разрабатывает и производит новые микроэлектронные компоненты для отечественных и зарубежных производителей бытовой и промышленной электроники, а также специализированное оборудование, работающее в экстремальных условиях. Продукция холдинга успешно применяется в космической электронике, в устройствах с высокими требованиями к надежности, в бытовой технике, средствах связи и телекоммуникаций, промышленной автоматике, светодиодной аппаратуре управления, электронных системах идентификации и доступа, платежных системах, автомобильной электронике, и др.



**ОАО «Планар»** является единым научно-техническим комплексом предприятий, который на базе самых современных технологий и достижений науки и техники в различных областях знаний разрабатывает и производит сложнейшее специальное опико-механическое, контрольно-измерительное и сборочное оборудование для производства изделий микроэлектроники.

Холдинг является членом SEMI, SPIE, VACUS, Лазерной ассоциации стран СНГ и Балтии. Оборудование, выпускаемое холдингом, предназначено для реализации технологических процессов в производстве интегральных схем в диапазоне от 0,8 мкм до 45 нм для подложек до 200 мм и фотошаблонов до 9 дюймов.

В настоящее время предприятия холдинга выпускают широкий спектр специального технологического оборудования, которое можно разделить на пять групп: оборудование для формирования и контроля топологических структур на фотошаблонах; оборудование для формирования и контроля топологических структур на полупроводниковых подложках; оборудование для подготовки кристаллов к сборке; сборочное оборудование; механические и оптические компоненты.



## СОДЕРЖАНИЕ

ЛАВИННЫЙ ПРОБОЙ ТРАНЗИСТОРА С ВЫСОКОЙ ПОДВИЖНОСТЬЮ ЭЛЕКТРОНОВ НА ОСНОВЕ НИТРИДА ГАЛЛИЯ С ТЕПЛОТВОДЯЩИМ ЭЛЕМЕНТОМ НА ОСНОВЕ ГРАФЕНА <i>Волчѣк В.С.</i> .....	11
FIRST-PRINCIPLES MODELING OF ELECTRON-PHONON SCATTERING RATES IN HYDROGENATED GRAPHENE <i>Mishchanka V.N.</i> .....	15
КОМПЬЮТЕРНЫЕ ИЗМЕРИТЕЛЬНО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ КОМПЛЕКСЫ ВИБРАЦИОННОГО КОНТРОЛЯ И МОНИТОРИНГА <i>Бранцевич П.Ю.</i> .....	20
MULTISENSORY MICROSYSTEM SIMULATION FOR EARLY DETECTION AND PREVENTION OF THERMAL RUNAWAY IN Li-Ion BATTERIES <i>Fiadosenka U.S., Dong L., Yue C., Gorokh G.G.</i> .....	24
КОМПЬЮТЕРНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ «МОЛЕКУЛЫ ДИАМАНА» И ЕЁ АНАЛОГА ИЗ НИТРИДА БОРА <i>Бауетдинов Ю.А.</i> .....	29
КОМПЬЮТЕРНЫЙ ДИЗАЙН И РАСЧЕТ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СВОЙСТВ МОНОСЛОЕВ $Zn_2(V,Nb,Ta)N_3$ <i>Устюжанина С.В., Кистанов А.А.</i> .....	33
MODELING NETWORK TRAFFIC DYNAMICS UNDER DDoS ATTACKS USING DIFFERENTIAL EQUATIONS <i>Bekiyeva M.B.</i> .....	37
SIMULATING NETWORK CONDITIONS AND DDoS ATTACK SCENARIOS USING NS-3 TECHNOLOGY <i>Orazdurdyeva G.</i> .....	41
ANALYSIS OF TEMPERATURE DEPENDENT PARAMETERS OF GRAPHENE/n-Si HETEROJUNCTION <i>Dronina L.A., Kovalchuk N.G., Danilyuk A.L., Lutsenko E.V., Danilchuk A.V., Prischepa S.L.</i> .....	46
МОДЕЛИРОВАНИЕ МОЩНОГО ПОЛЕВОГО ТРАНЗИСТОРА НА ОСНОВЕ AlGaIn <i>Ворсин Н.Н., Гладыщук А.А., Кушнер Т.Л., Тарасюк Н.П., Чугунов С.В.</i> .....	50
АНИЗОТРОПИЯ ПРОДОЛЬНОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ В (001), (110) И (111)-ОРИЕНТИРОВАННЫХ СЛОИСТЫХ Si/Ge ПЛѢНКАХ <i>Хомец А.Л., Сафронов И.В., Филонов А.Б., Мигас Д.Б.</i> .....	54
АКУСТИЧЕСКИЕ ФОНОНЫ В СТРУКТУРЕ СВЕРХПРОВОДНИК – ДВУХЛИСТНЫЙ ГРАФЕН <i>Кушнир В.Н., Прищепя С.Л.</i> .....	58
ПРОЕКТИРОВАНИЕ УСТРОЙСТВ ОБРАБОТКИ МОДИФИКАЦИЙ КОДОВ БОУЗ-ЧОУДХУРИ-ХОКВИНГЕМА НА ОСНОВЕ РАЗДЕЛЕНИЯ ОШИБОК НА КЛАССЫ <i>Власова Г.А.</i> .....	60
ОПТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТОНКОПЛЕНОЧНОГО ИК-СВЕТОДИОДА НА ОСНОВЕ КОЛЛОИДНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК <i>Туровец У.Е.</i> .....	63
МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОЛЛОИДНЫХ ПЛАЗМОННЫХ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА, ПОКРЫТЫХ СТАБИЛИЗИРУЮЩИМ АГЕНТОМ <i>Борисюк А.А., Бондаренко А.В.</i> .....	67
СПИНОВАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ ЭЛЕКТРОНОВ НА ПОВЕРХНОСТНЫХ СОСТОЯНИЯХ ДИОКСИДА ТИТАНА В ГЕТЕРОСТРУКТУРЕ Si/ФМ/TiO <sub>2</sub> ПРИ ОБЛУЧЕНИИ СОЛНЕЧНЫМ СВЕТОМ <i>Сидорова Т.Н., Данилюк А.Л.</i> .....	71

ЗАРЯДОВЫЕ СВОЙСТВА ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ ПЛЕНКИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК НА КРЕМНИИ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ УЛЬТРАФИОЛЕТОМ <i>Курапцова А.А., Данилюк А.Л.</i> .....	75
РАЗРАБОТКА ЛАВИННЫХ СВЕТОДИОДОВ НА ОСНОВЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОГО КРЕМНИЯ ДЛЯ ГИГАГЕРЦОВОГО ДИАПАЗОНА ЧАСТОТ <i>Лазарук С.К., Лешок А.А., Долбик А.В., Томашевич Л.П., Ключик А.Ю., Дудич В.В., Лабунов В.А., Шабуня А.С., Петлицкий А.Н., Ефименко С.А., Петлицкая Т.В., Ковальчук Н.С., Кицюк Е.П., Рязанов Р.М., Басаев А.С., Светухин В.В.</i> .....	79
МОДЕЛИРОВАНИЕ КОЛЕБАНИЙ НАМАГНИЧЕННОСТИ В НАНОСТРУКТУРЕ CoFeV/Cu/CoFeV ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ СПИН-ПОЛЯРИЗОВАННОГО ТОКА <i>Кухарев А.В., Господарик Е.А.</i> .....	83
THE ELECTRONIC STRUCTURE MODIFICATION AND PHOTOCATALYTIC ABILITY IMPROVEMENT OF TITANIUM DIOXIDE DOPED WITH SILVER AND COPPER ATOMS <i>Azamjonov A.A., Khoroshko L.S., Mamatkulov Sh.I.</i> .....	87
ЗОННАЯ СТРУКТУРА АКСИАЛЬНО-ДЕФОРМИРОВАННОГО В НАПРАВЛЕНИИ (100) МОНОСЛОЯ ДИСУЛЬФИДА РЕНИЯ <i>Козич А.В., Баглов А.В., Хорошко Л.С., Мигас Д.Б.</i> .....	92
РАЗРАБОТКА И РЕАЛИЗАЦИЯ АНАЛИЗАТОРА СТРУКТУРЫ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЗОН ДЛЯ ПАКЕТА КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ OpenMX <i>Баглов А.В., Хорошко Л.С.</i> .....	96
ЭКСПРЕСС-АНАЛИЗ СТРУКТУРНЫХ И ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ НАНОМАТЕРИАЛОВ МЕТОДАМИ BIG DATA, LARGE LANGUAGE MODELS & GENERATIVE AI <i>Шиманский Н.А., Баглов А.В., Хорошко Л.С.</i> .....	100
МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ И ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ НАНОРАЗМЕРНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ С АДСОБИРОВАННЫМИ МОЛЕКУЛАМИ <i>Баглов А.В., Хорошко Л.С., Рuzимурадов О.Н., Парманов А.Б., Нурманов С.Э.</i> .....	104
ПОСТРОЕНИЕ И ВИЗУАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ РЕШЕНИЙ В СИСТЕМЕ ЛОГИЧЕСКОЙ ОПТИМИЗАЦИИ ФУНКЦИОНАЛЬНО-СТРУКТУРНЫХ ОПИСАНИЙ ДИСКРЕТНЫХ УСТРОЙСТВ <i>Логинова И.П.</i> .....	108
МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТИЧЕСКОГО БИОСЕНСОРА НА ОСНОВЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОГО АНОДНОГО ОКСИДА НИОБИЯ <i>Гога А.В.</i> .....	112
ЗАРЯДОВАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ ТРАНЗИСТОРНОЙ СТРУКТУРЫ С ДВУМЕРНЫМ КАНАЛОМ, ВЫЗВАННАЯ ИНТЕРФЕЙСНЫМИ СОСТОЯНИЯМИ <i>Мельникова В.В., Курапцова А.А.</i> .....	116
ПЕРЕПРОЕКТИРОВАНИЕ КМОП СБИС СРЕДСТВАМИ ИНСТРУМЕНТА СИНТЕЗА Yosys <i>Черемисинов Д.И., Черемисинова Л.Д.</i> .....	119
ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ ТЕХНОЛОГИЙ СМЕШАННОЙ РЕАЛЬНОСТИ В СБОРОЧНЫХ ПРОЦЕССАХ НА ПРИМЕРЕ ОЧКОВ HoloLens 2 <i>Лим А.А., Кутин А.А.</i> .....	123
РАЗРАБОТКА БИБЛИОТЕКИ СИСТЕМНЫХ МОДЕЛЕЙ МЭМС РЕЗОНАТОРОВ <i>Соловьев А.А., Певцов Е.Ф., Колчужин В.А.</i> .....	126
МОДЕЛИРОВАНИЕ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ФУНКЦИЙ ОСЕЙ СЛУЧАЙНОЙ АНИЗОТРОПИИ ДВУМЕРНОЙ СИСТЕМЫ ФЕРРОМАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ <i>Назаренко Е.С., Данилюк А.Л.</i> .....	130
CONCEPTS OF MODELING, PROCESSING AND DATA WAREHOUSING <i>Atroshchenko N.A.</i> .....	133

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕМЕНТОВ ИНТЕГРАЛЬНОГО ОПТОЭЛЕКТРОННОГО ОСЦИЛЛЯТОРА С ПЛАВНОЙ ПЕРЕСТРОЙКОЙ ЧАСТОТЫ НА ОСНОВЕ УПРАВЛЕНИЯ ФАЗОЙ В ЕГО ПЕТЛЕ ОБРАТНОЙ СВЯЗИ <i>Воронков Г.С., Степанов И.В., Иванов В.В., Кутлюяров Р.В., Грахова Е.П.</i> .....	136
МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОВ ПОВЫШЕНИЯ ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ ПРОЦЕССОРА С АРХИТЕКТУРОЙ RISC-V <i>Сторожев И.Е., Певцов Е.Ф.</i> .....	140
РАЗРАБОТКА ПОДХОДА К СБОРУ И АННОТИРОВАНИЮ ИЗОБРАЖЕНИЙ КЕРАМИЧЕСКОГО КИРПИЧА ДЛЯ ЗАДАЧ КОМПЬЮТЕРНОГО ЗРЕНИЯ <i>Птуха В.И., Птуха К.И.</i> .....	144
BUILDING A MINIAPP TO MODEL MICROSTRIP ANTENNA ARRAYS USING THE INTEGRAL EQUATIONS METHOD <i>Kizimenko V., Naumovich N.</i> .....	148
РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ШТАМПОВКИ ОПРАВОК ПРОШИВНЫХ СТАНОВ С ЦЕЛЬЮ ПОВЫШЕНИЯ СТОЙКОСТИ ИНСТРУМЕНТА <i>Преображенская Е.В., Мышечкин А.А., Скрипник С.В.</i> .....	152
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СРЕДСТВ МОДЕЛИРОВАНИЯ ХАРАКТЕРИСТИК СОЛНЕЧНЫХ ПАНЕЛЕЙ ПРИ ПРОЕКТИРОВАНИИ ИХ ОТКАЗОУСТОЙЧИВОСТИ <i>Дик К.С.</i> .....	154
МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ ГРАДИЕНТОВ В КРИСТАЛЛАХ АКУСТООПТИЧЕСКИХ ФИЛЬТРОВ <i>Журавлёв В.И., Наумович Н.М., Ревин В.Т.</i> .....	158
ЗОННАЯ СТРУКТУРА И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА КОБАЛЬТ-СОДЕРЖАЩИХ СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА <i>Шапошников В.Л., Кривошеева А.В., Борисенко В.Е.</i> .....	161
ОСНОВНЫЕ МЕТОДИКИ ОБНАРУЖЕНИЯ АППАРАТНЫХ ТРОЯНОВ НА ЭТАПЕ ПРОЕКТИРОВАНИЯ <i>Воронов А.Ю., Стемпицкий В.Р.</i> .....	165
ОБНАРУЖЕНИЕ АППАРАТНОЙ ЗАКЛАДКИ В ПРОСТЫХ ЦИФРОВЫХ УСТРОЙСТВАХ НА ОСНОВЕ АНАЛИЗА ПО СТОРОННЕМУ КАНАЛУ <i>Воронов А.Ю., Стемпицкий В.Р.</i> .....	168
РАЗРАБОТКА УЧЕБНЫХ СТЕНДОВ НА PIC16F887 В EasyEDA <i>Салихов Р.Б., Абдрахманов В.Х., Остальцова А.Д.</i> .....	172
ПОЛЕВЫЕ ТРАНЗИСТОРЫ НА ОСНОВЕ ИННОВАЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ С УГЛЕРОДНЫМИ НАПОЛНИТЕЛЯМИ <i>Салихов Р.Б., Остальцова А.Д., Фахрисламова Д.У.</i> .....	176
ИНТЕГРАЦИЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ И НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ВРЕМЕННЫХ РЯДОВ И СИСТЕМ С ОБРАТНОЙ СВЯЗЬЮ <i>Маметсалиев Р.Р.</i> .....	180
РЕШЕНИЕ НЕКЛАССИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ <i>Назаров С.Г., Рахимов М.Р.</i> .....	185
ВЕРИФИКАЦИЯ МЕТОДИКИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ КОМПАКТНОЙ МОДЕЛИ GaAs ГЕТЕРОПЕРЕХОДНЫХ БИПОЛЯРНЫХ ТРАНЗИСТОРОВ <i>Новиков П.Э., Кратович П.С., Корсак К.В., Ловшенко И.Ю.</i> .....	189
ДВУМЕРНЫЕ МАГНИТНЫЕ МАТЕРИАЛЫ $MX_2$ И $MXY$ (ГДЕ М – ПЕРЕХОДНЫЙ МЕТАЛЛ; X, Y – ХАЛЬКОГЕН, $X \neq Y$ ): ИССЛЕДОВАНИЕ В РАМКАХ DFT <i>Гвоздовский Д.Ч.</i> .....	192
РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕПЛОВОЙ ПОСТОЯННОЙ ВРЕМЕНИ ДЛЯ НЕОХЛАЖДАЕМЫХ ТЕПЛОВЫХ ДЕТЕКТОРОВ БОЛОМЕТРИЧЕСКОГО ТИПА <i>Корсак К.В., Новиков П.Э., Ловшенко И.Ю.</i> .....	196

УДК 621.382.323

ЛАВИННЫЙ ПРОБОЙ ТРАНЗИСТОРА С ВЫСОКОЙ ПОДВИЖНОСТЬЮ ЭЛЕКТРОНОВ  
НА ОСНОВЕ НИТРИДА ГАЛЛИЯ С ТЕПЛОТВОДЯЩИМ ЭЛЕМЕНТОМ НА ОСНОВЕ ГРАФЕНА

Волчѣк В.С.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
Минск, Республика Беларусь, [vlad.volchek@bsuir.by](mailto:vlad.volchek@bsuir.by)

Аннотация: Одной из главных проблем транзисторов с высокой подвижностью электронов на основе нитрида галлия, препятствующих их развитию, является эффект саморазогрева. Неравномерное распределение рассеиваемой мощности и повышение средней температуры приводят к появлению вблизи канала области с очень высокой температурой и деградации прибора. Среди перспективных решений, направленных на снижение влияния эффекта саморазогрева, стоит отметить использование теплоотводящих элементов на основе двумерных материалов с высокой теплопроводностью, таких как графен и гексагональный нитрид бора. Недостатком графенового теплоотводящего элемента является его высокая электрическая проводимость, что ограничивает область его возможного расположения. В данной работе показано, что малое расстояние между затвором и слоями графена приводит к преждевременному пробую, вызванному лавинообразной генерацией носителей заряда.

Ключевые слова: гетероструктурный полевой транзистор, графен, лавинный пробой, модель Чиновета, нитрид галлия, теплоотводящий элемент, транзистор с высокой подвижностью электронов, ударная ионизация.

## I. ВВЕДЕНИЕ

Эффект саморазогрева является одной из основных проблем транзисторов с высокой подвижностью электронов на основе нитрида галлия, препятствующих их развитию. Среди перспективных конструктивно-технологических решений, направленных на снижение влияния эффекта саморазогрева, выделяется использование теплоотводящих элементов на основе двумерных материалов с высокой теплопроводностью, таких как графен [1] и гексагональный нитрид бора [2]. Недостатком графенового теплоотводящего элемента является его высокая электрическая проводимость, что ограничивает область его возможного расположения. В данной работе посредством численного моделирования показано, что малое расстояние между затвором и слоями графена приводит к преждевременному пробую вследствие лавинообразной генерации носителей заряда.

## II. ПРИБОРНАЯ СТРУКТУРА

Объектом исследования является нормально закрытый транзистор с высокой подвижностью электронов на основе нитрида галлия, изображенный на рис. 1. Система теплоотвода включает графитовый теплопоглощающий элемент (ТПЭ), предназначенный для поглощения избыточного тепла, и графеновый теплоотводящий элемент (ТОЭ), задачей которого является создание дополнительного (помимо подложки) маршрута для отведения тепла из активной области транзистора.

Размеры на рисунке указаны в микрометрах. Ширина приборной структуры равна 1 мм.

## III. МОДЕЛЬ УДАРНОЙ ИОНИЗАЦИИ

Если напряженность электрического поля является достаточно высокой, свободные носители заряда могут приобрести кинетическую энергию, необходимую для ионизации нейтральных атомов и переброски электронов и дырок соответственно в зону проводимости и валентную зону. В результате ионизации появляются электронно-дырочные пары, которые в свою очередь ускоряются полем и создают дополнительные носители заряда. Поскольку при этом сами ионизирующие носители остаются в разрешенных зонах, концентрация электронов и дырок будет лавинообразно увеличиваться до тех пор, пока этот процесс не окажется уравновешенным процессом рекомбинации или не произойдет лавинный пробой. Такой механизм генерации свободных носителей называется ударной ионизацией.

Скорость генерации электронно-дырочных пар вследствие ударной ионизации задается уравнением

$$G = \frac{1}{q} (\alpha_n |J_n| + \alpha_p |J_p|), \quad (1)$$

где  $q$  – элементарный заряд, Кл;  $\alpha_n$  и  $\alpha_p$  – коэффициенты ударной ионизации для электронов и дырок,  $1/\text{м}$ ;  $J_n$  и  $J_p$  – плотности электронного и дырочного токов,  $\text{А}/\text{м}^2$ .

Коэффициент ударной ионизации определяется как число электронно-дырочных пар, создаваемых электроном или дыркой на единице пути перемещения. Точное вычисление этого параметра, значение которого очень сильно зависит от напряженности электрического поля, является важным при моделировании различных эффектов, связанных с ударной ионизацией, в том числе лавинного пробоя. Классической моделью, предназначенной для расчета коэффициентов ударной ионизации, является модель Чиновета [3]:

$$\alpha_n = A_n \exp\left(-\frac{E_n}{|\vec{E}|}\right), \quad (2)$$

$$\alpha_p = A_p \exp\left(-\frac{E_p}{|\vec{E}|}\right), \quad (3)$$

где  $A_n$ ,  $A_p$ ,  $E_n$  и  $E_p$  – эмпирические коэффициенты;  $E$  – напряженность электрического поля, В/м.

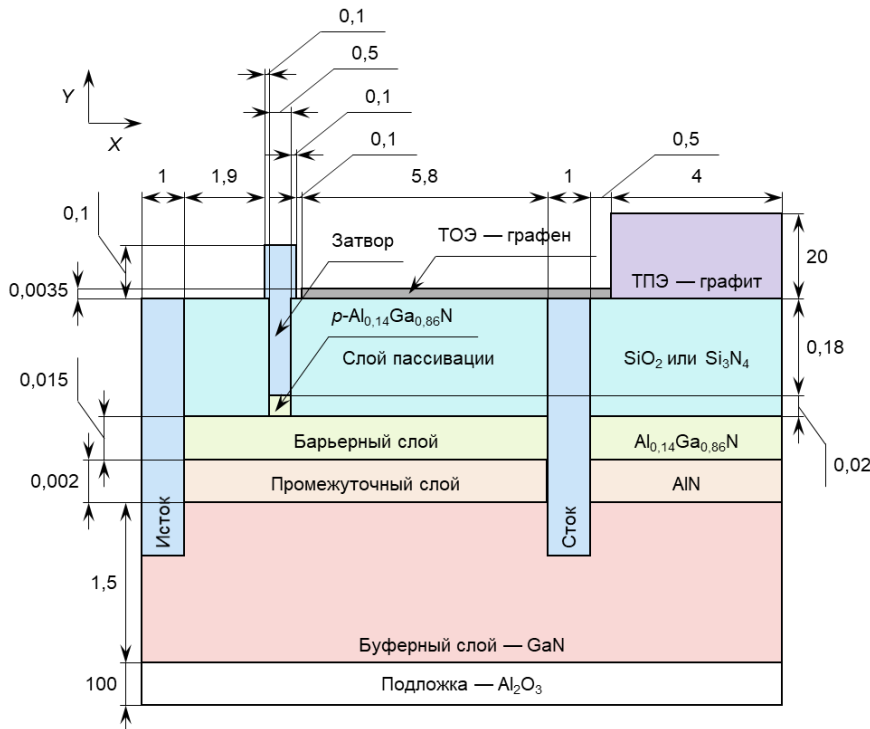


Рисунок 1. Приборная структура

Значения параметров модели ударной ионизации для нитрида галлия перечислены в табл. 1. В данной работе используется первый набор параметров.

Таблица 1. Параметры модели ударной ионизации

Параметр				Источник
$A_n$ (1/см)	$E_n$ (МВ/см)	$A_p$ (1/см)	$E_p$ (МВ/см)	
$2,9 \cdot 10^8$	34	–	–	[4]
$4,48 \cdot 10^8$	33,9	$7,13 \cdot 10^6$	14,6	[5]
$2,11 \cdot 10^9$	36,89	$4,39 \cdot 10^6$	18	[6]
$2,69 \cdot 10^7$	22,7	$4,32 \cdot 10^6$	13,1	[7]

#### IV. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

На рис. 2 показаны профили распределения напряженности электрического поля вдоль канала транзистора при напряжении затвор-исток 0 В и напряжении сток-исток 320 В. Как следует из результатов моделирования, при отдалении от затвора напряженность резко возрастает и достигает максимальной величины на расстоянии около 0,25 мкм от затвора, после чего плавно снижается. При использовании нитрида кремния в качестве материала пассивации верхней поверхности эпитаксиальной структуры напряженность электрического поля намного выше, чем при пассивации

оксидом кремния, поскольку относительная диэлектрическая проницаемость первого материала почти в два раза превышает соответствующее значение для второго. Максимальное значение напряженности в случае нитрида кремния равно 6,7 МВ/см, в то время как для оксида кремния получено значение 5,3 МВ/см.

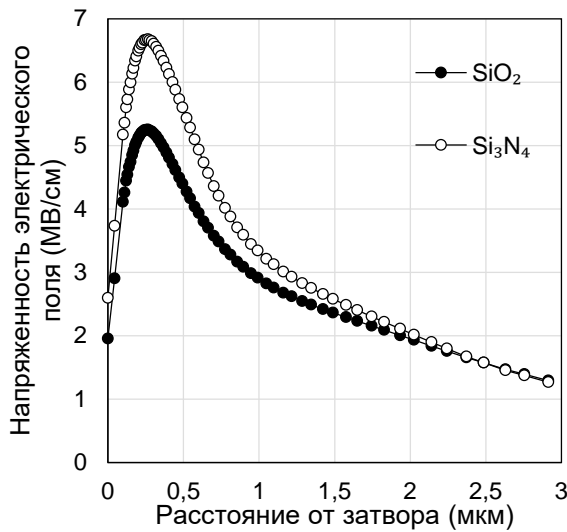


Рисунок 2. Профили распределения напряженности электрического поля вдоль канала

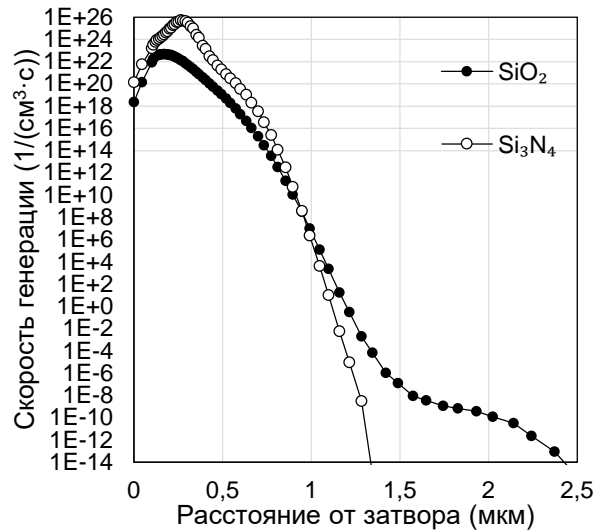


Рисунок 3. Профили распределения скорости генерации электронно-дырочных пар вдоль канала

Возрастание напряженности электрического поля у затвора приводит к увеличению коэффициентов ударной ионизации и, следовательно, лавинообразному увеличению скорости генерации носителей заряда, профили распределения которой вдоль канала показаны на рис. 3. Видно, что вид зависимости скорости генерации электронно-дырочных пар от расстояния до затвора в целом повторяет форму зависимости для напряженности электрического поля. Если материалом пассивации является нитрид кремния, максимальное значение скорости генерации составляет  $5,4 \cdot 10^{25}$  1/(см<sup>3</sup>·с). В случае оксида кремния соответствующая величина на три порядка меньше –  $5,0 \cdot 10^{22}$  1/(см<sup>3</sup>·с).

Так как напряженность электрического поля и скорость генерации электронно-дырочных пар в приборной структуре со слоем пассивации на основе нитрида кремния выше, вполне ожидаемо, что лавинный пробой этой структуры наступает раньше, что подтверждается рассчитанными вольт-амперными характеристиками, представленными на рис. 4. Так, пробой этого транзистора ожидается при напряжении сток-исток 324 В. Эта величина существенно ниже той, которая получена для приборной структуры со слоем пассивации на основе оксида кремния – 443 В.

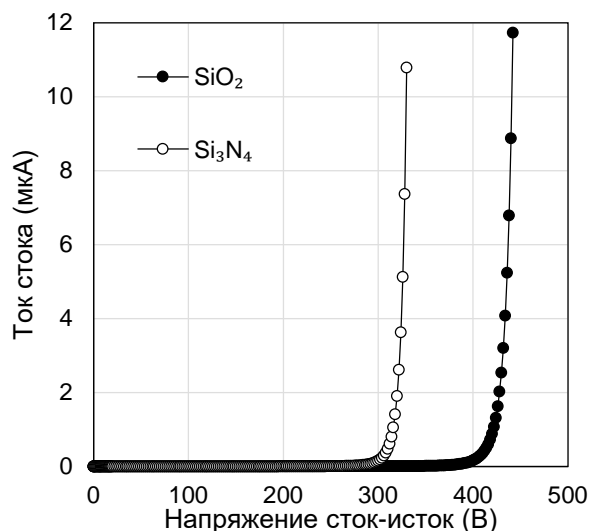


Рисунок 4. Зависимость тока стока от напряжения сток-исток

## V. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Согласно результатам численного моделирования, проведенного в рамках модели ударной ионизации Чиновета, малое расстояние между затвором и графеновым теплоотводящим элементом, используемым для снижения влияния эффекта саморазогрева, транзистора с высокой подвижностью электронов на основе нитрида галлия приводит к преждевременному пробое, вызванному лавинообразной генерацией электронно-дырочных пар. Исходя из рассчитанных значений напряжения пробоя, оксид кремния является более предпочтительным материалом пассивации, чем нитрид кремния.

## БЛАГОДАРНОСТЬ

Исследования проводятся в рамках выполнения заданий 3.1 и 3.9 государственной программы научных исследований «Фотоника и электроника для инноваций».

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] Yan, Z. Graphene Quilts for Thermal Management of High-Power GaN Transistors / Z. Yan, G. Liu, J. M. Khan, A. Balandin // Nature Communications. 2012. Vol. 3. Art. No 827.
- [2] Lin, Z. High Thermally Conductive and Electrically Insulating 2D Boron Nitride Nanosheet for Efficient Heat Dissipation of High-Power Transistors / Z. Lin, C. Liu, Y. Chai // 2D Materials. 2016. Vol. 3, No 4. Art. No 041009.
- [3] Chynoweth, A. G. Ionization Rates for Electrons and Holes in Silicon / A. G. Chynoweth // Physical Review. 1958. Vol. 109, No 5. P. 1537–1540.
- [4] Kunihiro, K. Experimental Evaluation of Impact Ionization Coefficients in GaN / K. Kunihiro, K. Kasahara, Y. Takahashi, Y. Ohno // IEEE Electron Device Letters. 1999. Vol. 20, No 12. P. 608–610.
- [5] Cao, L. Experimental Characterization of Impact Ionization Coefficients for Electrons and Holes in GaN Grown on Bulk GaN Substrates / L. Cao [et al.] // Applied Physics Letters. 2018. Vol. 112. Art. No 262103.
- [6] Ji, D. Experimental Determination of Impact Ionization Coefficients of Electrons and Holes in Gallium Nitride Using Homojunction Structures / D. Ji, B. Ercan, S. Chowdhury // Applied Physics Letters. 2019. Vol. 115. Art. No 073503.
- [7] Maeda, T. Impact Ionization Coefficients and Critical Electric Field in GaN / T. Maeda [et al.] // Journal of Applied Physics. 2021. Vol. 129. Art. No 185702.

## AVALANCHE BREAKDOWN IN GALLIUM NITRIDE HIGH ELECTRON MOBILITY TRANSISTORS ENHANCED BY GRAPHENE HEAT-ELIMINATING ELEMENTS

V. Volchek

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus,  
[vlad.volchek@bsuir.by](mailto:vlad.volchek@bsuir.by)

**Abstract:** One of the main problems that hinder the expansion of high electron mobility transistors based on gallium nitride is the self-heating effect. The non-uniform distribution of dissipated power and the increase in average temperature lead to the formation of a hot spot near the active area, resulting in device degradation. Among the promising solutions for tackling the self-heating issues is the use of heat-eliminating elements based on two-dimensional materials with high thermal conductivity such as graphene and hexagonal boron nitride. A disadvantage of graphene heat-eliminating elements is their high electrical conductivity, which limits the areas of their possible location. In this work, we show that a small spacing between the gate and graphene layers leads to a premature breakdown due to the avalanche-like generation of charge carriers.

**Keywords:** avalanche breakdown, Chynoweth model, gallium nitride, graphene, heat-eliminating element, heterostructure field-effect transistor, high electron mobility transistor, impact ionization.

UDC 621.315.592

## FIRST-PRINCIPLES MODELING OF ELECTRON-PHONON SCATTERING RATES IN HYDROGENATED GRAPHENE

V.N. Mishchanka

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus,  
[mishchenko@bsuir.by](mailto:mishchenko@bsuir.by)

**Abstract:** Graphene has a high mobility of charge carriers, which exceeds the mobility of charge carriers for all known materials, and is currently considering as one of the most promising materials for the creation of new semiconductor devices. The results of modeling of electron scattering rates on acoustic and optical phonons in a single layer of hydrogenated graphene  $C_2H_2$  type without a substrate are presented. When modeling these rates, variants of both emission and absorption of phonons are considered. The obtained dependences of the charge carrier scattering rates will allow us to study the main characteristics of charge carrier transport in semiconductor structures containing different layers by modeling using the Monte Carlo method. Characteristics and parameters of graphene and its modifications can be used to create new heterostructured devices with improved output characteristics.

**Keywords:** graphene, phonon, modelling, semiconductor structure.

### I. INTRODUCTION

Graphene is of great interest as a promising material for the development of new semiconductor devices for various frequency ranges [1-2]. The study of charge carrier transfer processes for semiconductor compounds containing graphene and other semiconductor materials layers is an urgent task, which is associated with the development of fast and powerful devices in the microwave and ultrahigh frequency ranges, as well as in the optical frequency range. The Monte Carlo statistical method is widely used to analyze semiconductor structures. One of the main features of this method is that it allows to take into account the processes of charge carriers scattering in the semiconductor and to study the operation of semiconductor devices in different operating conditions.

Quasi-analytical dependences of electron-phonon (e-ph) coupling matrices for various scattering processes have been developed. They have been used to obtain scattering rates (velocities) based on the Fermi golden rule and thus to describe the charge carrier transport properties [3, 4]. Based on the concept of deformation potential, a number of analytical expressions were proposed to estimate the scattering of electrons on optical and acoustic phonons for different materials (amount then and graphene). However, the semi-empirical expressions obtained in this way have serious limitations because of the simplifications made in their derivation. The main simplification of these expressions is related to the necessity of selecting the value of deformation potentials either from experimental measurements or from the calculated data of other theoretical approaches.

The limitations associated with the use of deformation potentials are largely removed by using density functional perturbation theory (DFPT) and an interpolation scheme using Wannier functions [5]. This approach allows us to fully determine the coupling matrix from ab initio calculations (first-principles calculations), without using empirical values of the deformation potential.

In this work, an ab initio study of scattering rates associated with electron scattering on optical and acoustic phonons in hydrogenated graphene has been carried out. Using Wannier functions, the coupling matrices of electron-phonon interaction were calculated, which are then used to model the rates (velocities) of electron scattering on acoustic and optical phonons. The obtained modeling results allow us to determine the contribution of various electron-phonon interaction components in the overall process of charge carrier scattering.

### II. METHOD AND PECULIARITIES OF MODELING OF ELECTRON-PHONON SCATTERING INTENSITIES IN HYDROGENATED GRAPHENE

First-principles simulations of hydrogenated graphene (graphane)  $C_2H_2$  type were performed with the Quantum Espresso [6] and EPW [7] software packages using the Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) parametrization within the local density approximation (LDA). Initially, self-consistent energy simulations were performed using the Quantum Espresso software complex with program pw.x. Then the calculation of electron-phonon dynamic matrices was performed using the program ph.x. The pseudopotentials of the Norm-conserving type [22] and the following modeling parameters were used in the Quantum Espresso software package: the cutoff energy of the wave function was 60 Ry (1 Ry  $\approx$  13.605 eV), the cutoff energy of the charge density and potentials was



240 Ry. The Brillouin zone (BZ) was represented using a 12 x 12 x 1 Monkhorst-Pack grid. To eliminate possible parasitic energy oscillations during the simulation, a vacuum layer of 20 Å thickness ( $1 \text{ Å} = 1 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ ) was added to the considered structure.

The program epw.x from the EPW software package [7] was used to simulate the scattering rates. This program is permitted to calculate the imaginary part of the eigenenergy

$$\text{Im}(\sum_{n,\mathbf{k}}^{e-ph}) = \pi \cdot \sum_{mv} \int_{\Omega_{BZ}} \frac{d\mathbf{q}'}{\Omega_{BZ}} |g_{mn,\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{q})|^2 \times \{ (n_{q\nu} + f_{mk+q}) \times \delta(\omega - (\varepsilon_{mk+q} - \varepsilon_F) + \omega_{q\nu}) + (n_{q\nu} + 1 - f_{mk+q}) \times \delta(\omega - (\varepsilon_{mk+q} - \varepsilon_F) - \omega_{q\nu}) \}, \quad (1)$$

where  $\omega$  is the phonon frequency,  $\varepsilon_{mk+q}$  is the energy for the band with number  $m$  and wavevector  $\mathbf{k}$  in the Brillouin zone ( $\Omega_{BZ}$ ),  $\omega_{q\nu}$  is the phonon energy with mode  $\nu$  and wave vector  $\mathbf{q}$  in the BZ over which the integration is performed, the parameters  $f_{mk+q}$  and  $n_{q\nu}$  are the Fermi and Bose distributions, respectively, which are estimated at a given temperature,  $g_{mn,\nu}(\mathbf{k}, \mathbf{q})$  is the electron-phonon interaction matrix for the bands with number  $n$  and  $m$ ;  $\varepsilon_F$  is the Fermi energy, the symbol  $\delta$  of the function means the necessity of performing Gaussian smoothing operations during integration.

The total scattering rates of the electron-phonon interaction with phonon absorption and emission were calculated from the imaginary part of the eigenenergy as [7, 8]

$$\tau^{-1} = 2 \cdot \text{Im}(\sum_{n,\mathbf{k}}^{e-ph}), \quad (2)$$

The following values of the modeling parameters were chosen for modeling in the EPW program of the dependences of the scattering rates. So the size of grids of the form  $N_x N_y N_z$ , which corresponded to the conditional directions of coordinates  $x$ ,  $y$ ,  $z$ , for electrons and holes during interpolation procedures, was set by the value of the parameter  $N$ , the value of which was equal to 264. The values of other modeling parameters were taken as follows: the value of the Gaussian smoothing coefficient (parameter "dg") - equal to 0.001 eV; the value of the parameter "fsthick", which determines the value of the range of energies during modeling relative to the Fermi energy level - equal to 4 eV; the number of Wannier functions - equal to the value of 12. The mode of setting the parameters "auto\_projection" and "scdm\_proj" to value "true" was used in modeling. The value of the concentration of electrons and holes for all presented modeling results was taken as  $1 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ .

### III. RESULTS OF MODELING FROM FIRST PRINCIPLES OF ELECTRON-PHONON SCATTERING RATES IN HYDROGENATED GRAPHENE

The dispersive phonon dependences of single-layer hydrogenated graphene  $\text{C}_2\text{H}_2$  type are considered for modes of the ZA, TA, LA, ZO, TO, LO, LB, TB, LB\*, TB\*, ZS, ZS\* type [9]. The first group of dependencies, denoted as ZA, LA, TA, represents the scattering on acoustic phonons along the conventional longitudinal and transverse directions ( $x$ ,  $y$  coordinates), as well as the  $z$  coordinate orthogonal to them, respectively. The second group of dependencies, denoted as ZO, LO, TO, represents the result of scattering on optical phonons along the conventional longitudinal and transverse directions ( $x$ ,  $y$  coordinates), as well as the  $z$  coordinate orthogonal to them, respectively.

Among the additional modes that appear in hydrogenated graphene (graphane) by comparison with graphene and are related to the processes of bending of the structure, two symmetric modes - longitudinal and transverse LB and TB, and two asymmetric modes LB\* and TB\* can be noted. In the  $z$  direction, two modes associated with stretching processes are formed. One of them is the symmetric mode ZS, and the other is the asymmetric mode ZS\* [9].

The results of modeling the scattering rates for modes TO, LO from energy obtained in the EPW program using formulas (1-2) are presented in Figures 1-2 by lot of the blue and dark green dots, respectively. When modeling these rates, variants of both emission and absorption of phonons are considered.

The obtained point data sets were subjected to approximation using analytic degree functions in the data processing and plotting program ORIGIN when performing Fitting and Polynomial Fit operations in the Analysis section. When performing these operations in the ORIGIN program, analytical dependencies are obtained with minimal approximation errors.

Results of approximation of the first-principles modeling data for the ZA, TA, LA, LB, TB, LB\*, TB\*, ZO, TO, LO, ZS, ZS\* modes are presented by the curve 1 on the Figures 3-6. The total scattering rates  $\tau^{-1}$  have the dimension in  $\text{s}^{-1}$  and the energy  $E$  have dimension in eV. Curve 1 shows the approximated dependences of scattering rates on energy in the case of TO and LO mode in Figure 1 and 2, respectively.

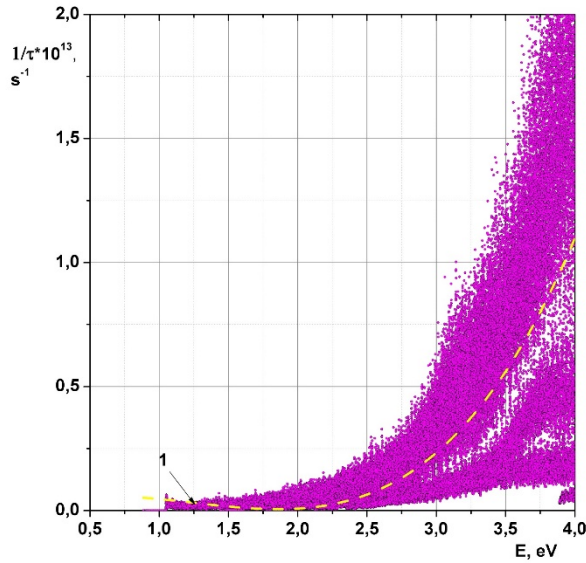


Figure 1. Dependence of the scattering rates for the TO optical mode on energy

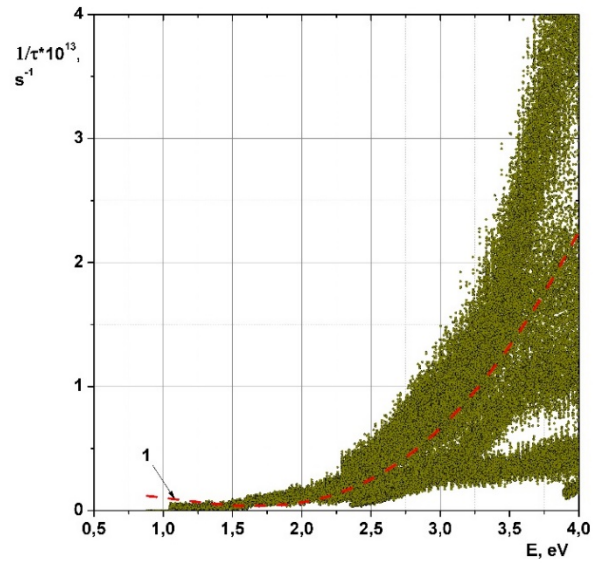


Figure 2. Dependence of scattering rates for LO optical mode on energy

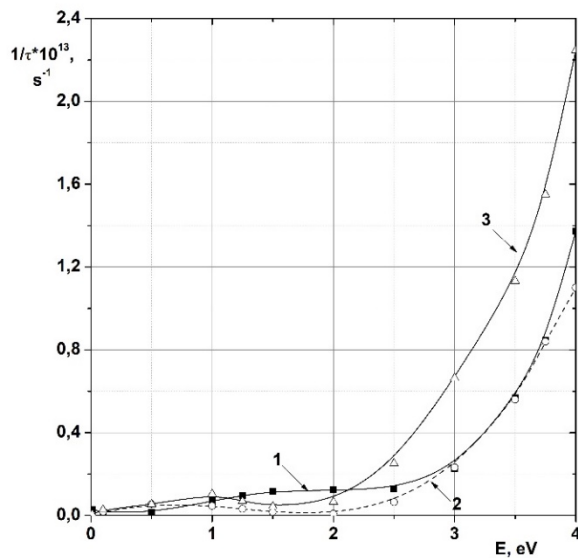


Figure 3. Dependences of scattering rates on energy in the case of ZO (curve 1), TO (curve 2) and LO (curve 3) optical mode

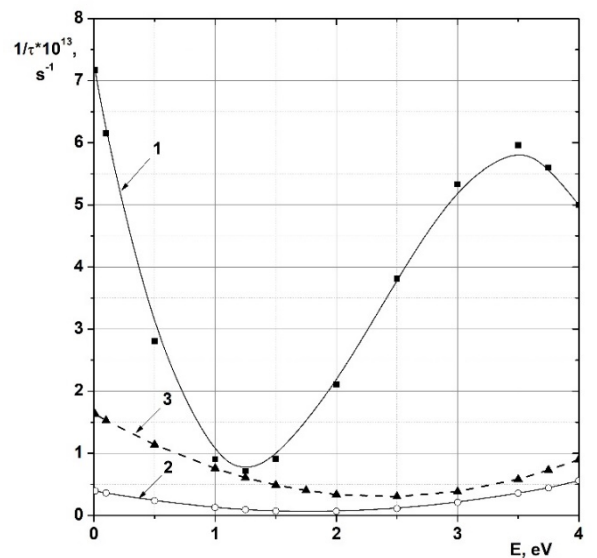


Figure 4. Dependences of scattering rates on energy in the case of ZA (curve 1), TA (curve 2) and LA (curve 3) acoustic mode

The analysis of Figures 3-6 shows that the largest scattering rates are observed for the LB mode for small energy value. ZA, ZO, LO, TO, ZS, ZS\* modes have largest scattering rates at energy near the value 4 eV. The scattering rates for the other modes LB, LB\*, TB, TB\*, TA, LA are significantly smaller than the scattering rates for the above mentioned modes for the energy near 4 eV.

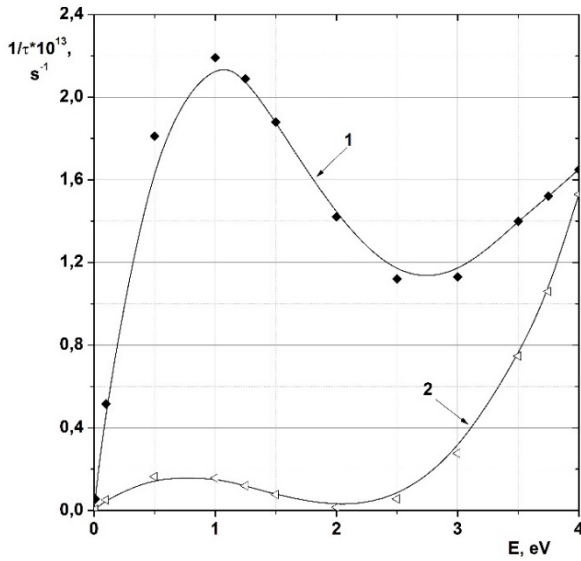


Figure 5. Dependences of scattering rates on energy in the case of ZS (curve 1) and ZS\* (curve 2) mode

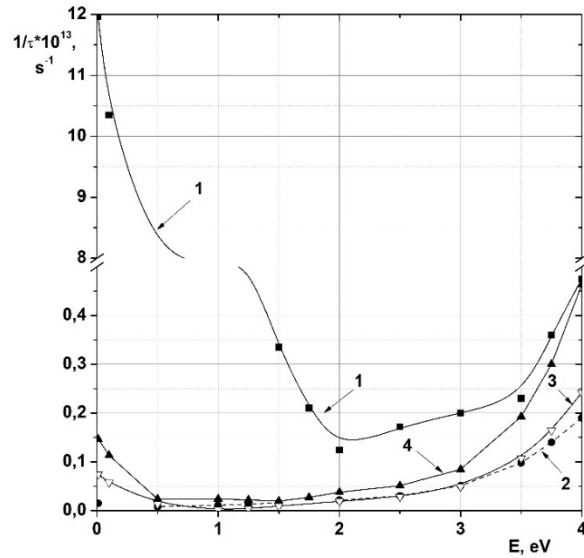


Figure 6. Dependences of scattering rates on energy in the case of LB (curve 1), TB (curve 2), LB\* (curve 3), and TB\* (curve 4) mode

From the presented data, we can see that the scattering rates of mode LO are higher than scattering rates of the modes TO and ZO in energy range from 2 eV up to 4 eV.

#### IV. CONCLUSIONS

The results of the study of electron scattering rates on phonons in a single layer of hydrogenated graphene  $C_2H_2$  type without a substrate are presented. The electron scattering rates for modes of ZA, TA, LA, ZO, TO, LO, LB, TB, LB\*, TB\*, ZS, ZS\* type at modeling from first principles are obtained. The presented dependences and parameters of electron scattering rates on acoustic and optical phonons in hydrogenated graphene can serve as a basis for modeling of new heterostructured devices containing graphene and other semiconductor materials.

#### REFERENCES

- [1] Electric field effect in atomically thin carbon film / K. S. Novoselov, A. K. Geim [et al.] // Science. 2004. Vol. 306. P. 666-669.
- [2] Giant intrinsic carrier mobilities in graphene and its bilayer / V. S. Morozov [et al.] // Phys. Rev. Lett. 2008. 100, P. 016602.
- [3] Hess K., Advanced Theory of Semiconductor Devices / K. Hess // Wiley-IEEE Press, Piscataway, NJ, 1999.
- [4] Lundstrom M., Fundamentals of Carrier Transport / M. Lundstrom // Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2009.
- [5] First-principles calculations of charge carrier mobility and conductivity in bulk semiconductors and two-dimensional materials / S. Ponc e., W. Li, S. Reichardt, and F. Giustino F // Rep. Prog. Phys. 2020; V. 83: 036501.
- [6] QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials / P. Giannozzi, S. Baroni., N. Bonini, M. Calandra [et al.] // J. Phys.: Condens. Matter. 2009. Vol. 21. P. 395502.
- [7] EPW: Electron-phonon coupling, transport and superconducting properties using maximally localized Wannier functions / S. Ponc e S., E.R. Margine, C. Verdi // Computer Physics Communications. 2016. V. 209. P. 116 – 133.
- [8] Ab Initio Study of Hot Carriers in the First Picosecond after Sunlight Absorption in Silicon / M. Bernardi, D. Vigil-Fowler, J. Lischner, J. B. Neaton, and S. G. Louie // Phys. Rev. Lett. 2014. V.112, P. 257402.
- [9] How to resolve a phonon-associated property into contributions of basic phonon modes / Long Cheng, Chenmu Zhang and Yuanyue Liu. // J. Phys.: Mater. 2019. 2. P. 045005.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ ИНТЕНСИВНОСТЕЙ ЭЛЕКТРОННО-ФОНОННОГО  
РАСSEИВАНИЯ В ГИДРИРОВАННОМ ГРАФЕНЕ

Мищенко В.Н.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
Минск, Республика Беларусь, [mishchenko@bsuir.by](mailto:mishchenko@bsuir.by)

Аннотация: Графен обладает высокой подвижностью носителей заряда, превышающей подвижность носителей заряда для всех известных материалов, и в настоящее время рассматривается как один из наиболее перспективных материалов для создания новых полупроводниковых приборов. Представлены результаты моделирования интенсивностей рассеяния электронов на акустических и оптических фононах в однослойном гидрированном графене типа  $C_2H_2$  без подложки. При моделировании этих интенсивностей рассмотрены варианты как испускания, так и поглощения фононов. Полученные зависимости интенсивностей рассеяния носителей заряда позволят исследовать основные характеристики их транспорта в полупроводниковых структурах при моделировании с использованием метода Монте-Карло. Характеристики и параметры гидрированного графена могут быть использованы для создания новых гетероструктурных приборов с улучшенными выходными характеристиками.

Ключевые слова: графен, фонон, моделирование, полупроводниковая структура.

УДК 681.3

## КОМПЬЮТЕРНЫЕ ИЗМЕРИТЕЛЬНО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ КОМПЛЕКСЫ ВИБРАЦИОННОГО КОНТРОЛЯ И МОНИТОРИНГА

Бранцевич П.Ю.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
Минск, Республика Беларусь, [branc@bsuir.by](mailto:branc@bsuir.by)

Аннотация: рассматривается применение компьютерных измерительно-вычислительных комплексов непрерывного вибрационного контроля, мониторинга и автоматики защиты сложных механизмов и агрегатов с вращательным движением, регистрации и обработки длинных временных реализаций вибрационных сигналов. Представлены алгоритмы обработки длинных реализаций вибрационных сигналов с целью определения информативно-значимых параметров и характеристик для дальнейшего их использования в автоматизированных и автоматических системах принятия решений.

Ключевые слова: вибрация, сигнал, цифровая обработка, параметр, характеристика, решение

### I. ВВЕДЕНИЕ

В энергетике, газотранспортной системе, на предприятиях критической инфраструктуры важнейшим требованием является предотвращение аварийных ситуаций. Поэтому в процессе эксплуатации производственного оборудования необходимы оценка и прогнозирование изменения его технического состояния, своевременное предупреждение и обнаружение возникающих дефектов. Для сложных механизмов и агрегатов с вращательным движением вибрационный контроль, мониторинг, диагностика являются основополагающими в решении этих задач [1].

Сложные задачи, возникающие при оценке состояния механизмов и агрегатов, решении задач технической диагностики, проведении испытаний, требуют соответствующего аппаратного, алгоритмического, программного, метрологического и методического обеспечения. Вычислительная мощность современным малогабаритных компьютеров, возможность подключения к ним по стандартизованным интерфейсам аналого-цифровых преобразователей (АЦП) и специализированных устройств позволяют создавать на их основе измерительно-вычислительные комплексы (ИВК), способные решать перечисленные задачи и обладающие при этом гибкостью, модифицируемостью, возможностью функциональной расширяемости и адаптации под новые задачи и условия применения.

Эффективность и круг решаемых задач таких систем в основном определяется возможностями математического и программного обеспечения (ПО). Их роль еще больше возрастает в связи с необходимостью автоматизации ряда сопутствующих задач, связанных с планированием хода испытаний, проведением метрологической аттестации и периодической поверки испытательного и виброизмерительного оборудования, обработкой результатов испытаний и измерений, принятием решений. Компьютерные системы собирают большой объем информации о состоянии контролируемых объектов и по сути являются системами больших данных.

### II. КОМПЬЮТЕРНЫЕ ИВК ВИБРАЦИОННОГО КОНТРОЛЯ

Для решения задач по улучшению вибрационного контроля, мониторинга, оценки технического состояния турбоагрегатов Белорусской энергосистемы была предложена концепция построения компьютерных ИВК. Компьютер является основным элементом такого ИВК, а его функциональность определяется программным обеспечением, разрабатываемым под конкретные производственные задачи и достаточно просто модифицируемым при изменении или расширении функциональных требований. Для преобразования аналоговых сигналов в цифровые используется универсальный модуль АЦП, подключаемый на стандартную шину компьютера и работающий в режиме реального времени. На входы АЦП подаются сигналы от первичных источников информации (датчиков), которые преобразуют изменения физических величин в электрический сигнал тока или напряжения [2].

Предложена структура ИВК для работы в режиме реального времени с групповым переключением каналов для многоточечного контроля многоопорного механизма или агрегата. Разработано несколько модификаций ИВК (серия «Лукомль», «Палессе», «Полоцк-2003»). При работе ИВК «Лукомль» для определения параметров вибрационных сигналов в большинстве случаев используется вибрационный сигнал длиной 200 мс, что соответствует десяти оборотам вала турбоагрегата, вращающегося с частотой 50 Гц [3]. Каждая подшипниковая опора контролируется в трех направлениях: вертикальном, горизонтально-поперечном и горизонтально-осевом. Для каждой точки контроля вычисляется 14 параметров вибрации, а для подшипниковой опоры, соответственно, 42. Для турбоагрегата с восемью

подшипниковыми опорами каждые 2 секунды вычисляются 336 параметров. Следовательно, для турбоагрегата за час получается 604800 значений параметров вибрации, а за сутки – 14515200, которые сохраняются в файлах на жестком диске компьютера. Таким образом, внедрение ИВК «Лукомль» обеспечило получение данных, на основе которых были сформулированы индивидуальные алгоритмы автоматики защиты [4].

Функциональность ИВК серии "Лукомль-2001" определяется программно-алгоритмическими средствами, которые предоставляют возможность пользователю путем установки соответствующих значений настроечных параметров выбрать нужный режим работы. Более тридцати ИВК серии "Лукомль-2001" внедрены на предприятиях энергетики Беларуси и введены в промышленную эксплуатацию [5-7].

Программное средство ИВК «Лукомль-2001» обеспечивает реализацию вибрационного контроля и мониторинга подшипниковых опор турбоагрегатов с определением амплитудных и фазовых параметров вибрации в режимах пуска-останова и штатного стационарного виброконтроля с функциями технологической сигнализации и принятия решений о защитном отключении (рис. 1) [7, 8].

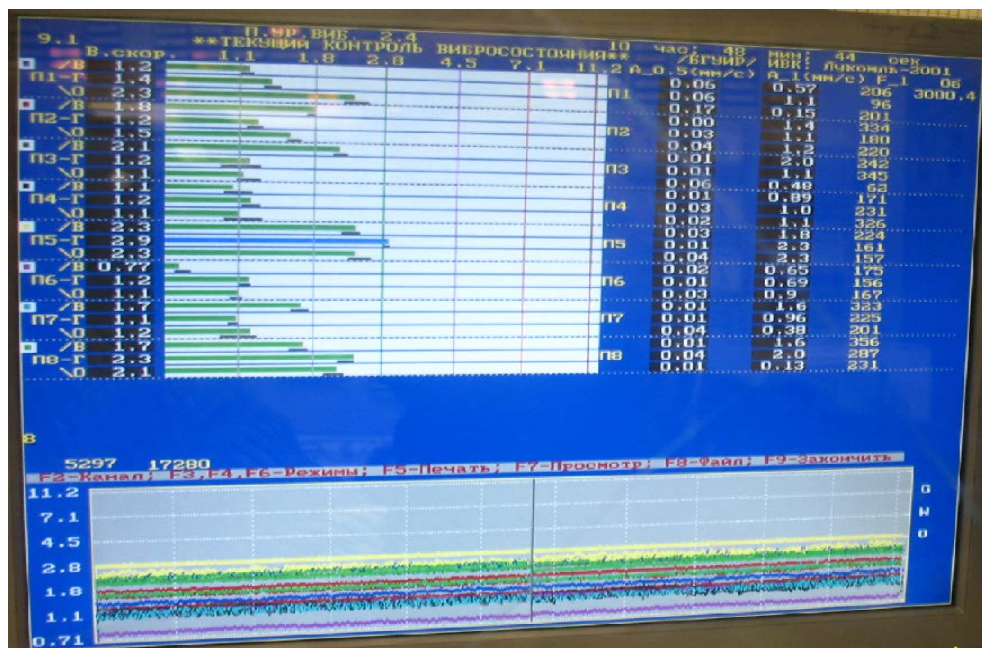


Рисунок 1. Представление результатов вибрационного контроля и мониторинга на экране компьютера

К компьютеру ИВК по RS интерфейсу подключается блок реле для управления щитовой сигнализацией и защитным отключением турбоагрегата. В соответствии с заданными алгоритмами принятия решений о сигнализации и защитном отключении программно формируются управляющие байты, которые передаются в этот блок. Биты этого управляющего байта определяют замыкание (значение бита 1) или размыкание (значение бита 0) контактов соответствующего реле.

В самом простом случае сигнал на защитное отключение выдается при превышении по любому из виброизмерительных каналов, установленных на подшипниковых опорах турбоагрегата СКЗ виброскорости в частотной полосе 10–1000 Гц значения 11,2 мм/с. Более практико-ориентированный алгоритм требует не только превышения СКЗ виброскорости уровня 11,2 мм/с по любому из каналов измерений, но и наличия превышения СКЗ виброскорости по любому из остальных каналов значения 4,5 мм/с.

Системы вибрационного контроля и защиты, построенные на базе компьютерной техники, позволяют реализовать разнообразные и сложные алгоритмы защиты, ориентированные на конкретные типы дефектов и аварийных ситуаций. Это, в свою очередь, позволяет избежать необоснованных («ложная тревога») срабатываний защитного отключения и не допустить «пропуска дефекта». Реализован и прошел апробацию на ряде турбоагрегатов алгоритм защитного отключения по вибрации, в котором учитывается несколько факторов [9, 10].

Если стоит задача создания системы проактивного технического обслуживания оборудования, то возникает потребность тщательного изучения изменений вибрационного состояния технических объектов на разных режимах работы в течение их эксплуатации, обнаружения редких кратковременных изменений структуры вибрационного сигнала и выявления причинно-следственных связей между их появлением и развитием дефектов. Для этого осуществляется регистрация и анализ непрерывных вибрационных сигналов, отражающих состояние объекта, на протяжении длительных временных интервалов (часы и даже сутки). Для практической реализации данного метода исследований разработан 16-канальный ИВК «Тембр» («Тембр-М» для амплитудно-фазовых измерений) на базе ноутбука, модуля АЦП, виброизмерительных каналов с первичными виброизмерительными преобразователями и проблемно-ориентированного программного обеспечения [2, 11].

Измерительно-вычислительный комплекс "Тембр" (рис. 2) содержит следующие функциональные узлы и блоки: канал виброизмерительный двухкомпонентный (до 8), состоящий из двухкомпонентного виброизмерительного преобразователя и согласующих усилителей с полосовой частотной фильтрацией; блок ввода цифровых кодов в компьютер по USB каналу, содержащий 16-и канальный АЦП, аналоговый коммутатор и конвертор питающего напряжения; мобильный компьютер типа Note-Book; соединительные кабели (до 50 метров).



Рисунок 2. ИВК «Тембр» для непрерывной регистрации вибрационных сигналов

Для обеспечения метрологических характеристик производится калибровка виброизмерительных каналов с целью определения их коэффициентов преобразования в единицах измерения  $МВ \cdot с^2/м$ .

Основными функциями комплекса являются: ввод цифровых сигналов, отражающих вибрационные колебания конструкции при импульсном возбуждении или колебания подшипниковых опор и корпусов механизмов с возвратно-поступательным или вращательным движением; запись принятой реализации цифрового вибрационного сигнала в файл(ы); оперативное определение основных параметров вибросигнала; представление вибрационного сигнала в графическом виде в виде временной реализации или амплитудного спектра.

### III. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработаны концептуальные основы современного научного направления «Компьютерные системы и измерительно-вычислительные комплексы цифровой обработки вибрационных сигналов». Предложены структуры ИВК на базе типовых элементов компьютерной техники. Функциональность таких ИВК определяется разработанным прикладным программным обеспечением. Данный подход снижает затраты на производство, модификацию и эксплуатацию комплексов. Обеспечивается многофункциональность и быстрая настройка под тип контролируемого оборудования. В настоящее время выполняются работы по созданию систем распределенного сбора (встроенные компьютерные

модули) и централизованной интеллектуальной обработки (облачные хранилища) вибрационных и иных информативно-значимых сигналов и данных.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Неразрушающий контроль: Справочник: В 7 т. Под общ. ред. В.В. Клюева. Т. 7: В 2 кн. Кн. 2: Ф. Я. Балицкий, А. В. Барков, Н. А. Баркова [и др.]. Вибродиагностика, – М.: Машиностроение, 2005. – 829 с.
- [2] Бранцевич П.Ю. Компьютерные системы и комплексы обработки вибрационных сигналов / П.Ю. Бранцевич. – Минск: Бестпринт, 2023. – 282 с.
- [3] Бранцевич, П.Ю. Цифровая обработка вибрационных сигналов / П.Ю. Бранцевич. – Минск: Бестпринт, 2022. – 297 с.
- [4] Бранцевич П.Ю. ИВК «Лукомль-2001» для вибрационного контроля. Энергетика и ТЭК. – 2008. – № 12 (69). – С. 19–21.
- [5] Бранцевич П.Ю. Измерительно-вычислительный комплекс "Лукомль-2001". Программа вибрационного контроля. Описание программы. 375.ГЛЮИ. 00001-01 13 01 ЛУ. – Минск: БГУИР-БЭРН, 1998. – 29 с.
- [6] Бранцевич П.Ю. Измерительно-вычислительный комплекс "Лукомль-2001". Программа вибрационного контроля с определением амплитудных и фазовых параметров вибрации. Описание программы. 375.ГЛЮИ. 00002-01 13 01 ЛУ. – Минск: БГУИР-БЭРН, 1998. – 60 с.
- [7] Бранцевич П.Ю. Разработать и внедрить комплекс программно – алгоритмических средств непрерывного вибрационного мониторинга опор роторных агрегатов электростанций на базовом образце. – Мн.: БГУИР, Деп. в БелИСА 9.03.1999 г., № Д199920, 92 с.
- [8] Brancevich P. Organization of the vibration-based monitoring and diagnostics system for complex mechanical system / P. Brancevich, X. Miao, Y. Li // 20-th International Congress on Sound and Vibration 2013 (ICSV 20). – NY, USA, Curran Associates, Inc., 2014. – Vol. 1. – P. 612–619.
- [9] Brancevich P.Y. Implementation of Decision-Making Systems Based on a Typical Decisive Element / P.Y. Brancevich // Doklady BGUIR. – 2023. – Vol. 21, – № 5. – С. 96–103
- [10] Бранцевич, П.Ю. Алгоритмы защиты по вибрации для детандер-генераторного агрегата / П.Ю. Бранцевич, В.А. Гузов, И.Е. Ероховец, С.Ф. Костюк // Проблемы вибрации, виброналадки, вибромониторинга и диагностики оборудования электрических станций: сб. докл.; под общ. ред. А.В. Салимона. – Москва: ОАО «ВТИ», 2005. – С. 122–124.
- [11] Бранцевич, П.Ю. Методика применения измерительно-вычислительного комплекса "Тембр-М" при оценке вибрационного состояния механизмов и агрегатов / П.Ю. Бранцевич // Информационные технологии. Радиоэлектроника. Телекоммуникации. – 2014. – № 4. – С. 55–67.

#### COMPUTER MEASURING AND COMPUTING COMPLEXES OF VIBRATION CONTROL AND MONITORING

P. Brancevich

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus, [branc@bsuir.by](mailto:branc@bsuir.by)

**Abstract:** The application of computer measuring and computing complexes of continuous vibration control, monitoring and automatic protection of complex mechanisms and units with rotational motion, registration and processing of long-term implementations of vibration signals is considered. Algorithms for processing long-term implementations of vibration signals are presented in order to determine information-significant parameters and characteristics for their further use in automated and automatic decision-making systems.

**Keywords:** vibration, signal, digital processing, parameter, characteristic, solution.



UDC 681.586; 004.942

## MULTISENSORY MICROSYSTEM SIMULATION FOR EARLY DETECTION AND PREVENTION OF THERMAL RUNAWAY IN Li-Ion BATTERIES

U.S. Fiadosenka<sup>1</sup>, L. Dong<sup>2</sup>, C. Yue<sup>2</sup>, G.G. Gorokh<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus,  
[gorokh@bsuir.by](mailto:gorokh@bsuir.by)

<sup>2</sup>Hangzhou Dianzi University, Hangzhou, China, [donglinxi@hdu.edu.cn](mailto:donglinxi@hdu.edu.cn)

**Abstract:** This article presents the concept and modeling results of a multisensory system designed to prevent thermal runaway in lithium-ion batteries, specifically for LCO, NMC, and NCO types. The system integrates gas, temperature, and pressure sensors on a single crystal, ensuring enhanced reliability and safety by minimizing the risks of fire, explosion, or damage to battery packs. The proposed multisensory system holds significant application potential across various portable devices, including smartphones, tablets, trimmers, and different types of electric vehicles.

**Keywords:** simulation, thermal runaway, lithium-ion batteries, multisensory system.

### I. INTRODUCTION

Lithium-ion batteries (Li-ion or LIBs) have become a ubiquitous power source in various electronic devices due to their high energy density and long service life. However, the occurrence of overheating in these batteries poses a significant safety threat, as it can lead to catastrophic failures such as fires and explosions. The process in which the temperature of the battery increases rapidly, which leads to a chain reaction of increased heat generation, is called thermal runaway (TR). Over the past decade, the issue of TR in lithium-ion batteries has garnered significant attention from both manufacturers and consumers. The processes occurring in a lithium-ion battery that lead to thermal runaway are conventionally divided into 12 stages [1]. They include dissolution of metal ions, decomposition of the SEI (Solid Electrolyte Interphase) film, reaction between lithium and electrolyte, melting of the separator, and combustion of the electrolyte. These stages are accompanied by significant changes in temperature and voltage, illustrating the complex and dangerous progression of thermal runaway.

To protect lithium-ion batteries, there is a Battery Management System (BMS), but such protection is not always effective. Thermocouples used in it to monitor temperature detect a malfunction after at least one cell has entered a state of thermal runaway, which can lead to irreversible processes [2]. An increase in temperature in the battery block leads to gas release and an increase in internal pressure in the battery. To prevent thermal runaway in a lithium-ion battery by detecting its onset at early stages, we propose a design of a multi-sensor system consisting of a gas, temperature and pressure sensor. This paper presents the results of modeling such a multi-sensor system, which can become an effective early warning option for a dangerous terminal runaway.

### II. DESIGN OF MULTISENSORY MICROSYSTEM

#### a. Gas sensor constructions

At temperatures ranging from 70-120°C in a lithium-ion battery, the electrolyte initially starts evaporating, while the salt inside begins decomposing. These changes set off chemical reactions between the decomposed salt and either the solvent or the solid electrolyte interphase (SEI), which plays a crucial role in maintaining battery stability. Such chemical reactions cause accumulation of gases inside the battery and raise internal pressure. This gas buildup leads to an initial venting process and eventually triggers thermal runaway. This venting serves as a safety measure to release the excess pressure that has built up inside the battery. Detecting hydrogen within a lithium-ion battery cell has been highlighted by researchers as the most effective early warning sign for ensuring the safety of LIBs [3]. The concentration of hydrogen gas released during first venting varied from zero to approximately 1000 ppm [4].

Lithium-ion batteries are highly sensitive to temperature variations; therefore, it is imperative for the gas sensor to function without a heater. For the multisensory system, a metal oxide gas sensor was selected due to several advantages it offers, such as high sensitivity, rapid response time, and cost-effectiveness. Although hydrogen is the target gas, it is worth noting that metal oxide gas sensors typically lack high selectivity. However, in this case, this lack of high selectivity is advantageous because the sensor will promptly react to a range of gases that could arise during a thermal runaway event, with hydrogen being the main target.

A multi-sensor system consisting of a gas, temperature and pressure sensor was made on an anodic alumina (AA) substrate with overall dimensions of  $4 \times 4 \times 0.43 \text{ mm}^3$  (Fig. 1). Interdigitated electrodes of gas sensor, consisting of three pairs of electrodes  $100 \text{ }\mu\text{m}$  long,  $30 \text{ }\mu\text{m}$  wide and with a gap of  $15 \text{ }\mu\text{m}$  between them. Gas-sensitive layer of ZnO-GaO with a thickness of  $1 \text{ }\mu\text{m}$  is located on top of the electrodes. The use of AA in modern sensors allows significant reduction in the energy consumption of thin film chemical sensors [5].

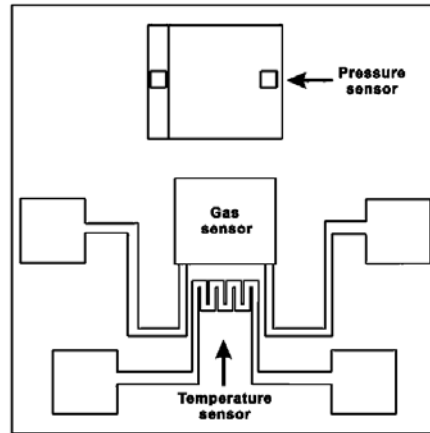


Figure 1. Design of multisensory microsystem

#### b. Pressure sensor constructions

The pressure inside a lithium-ion battery before and during a thermal runaway can be vary, depending on the specific conditions and the design of the battery. For cylindrical batteries, the pressure at the first venting begins to rise to 10-36 bar (1-3.6 MPa), while normal operation pressure is approximately 0.97 bar (97 kPa). Pouch batteries have the thinnest outer shell among the three types of batteries. Therefore, the pressure at the first venting in batch batteries is usually the lowest, approximately 190 kPa when first venting arise. The most common MEMS pressure sensors are piezoresistive, capacitive and resonator sensors. Advantages of a capacitive sensor: high sensitivity to pressure; less temperature sensitivity; less floor power consumption; low costs, easy to manufacture.

The proposed capacitive pressure sensor includes a lower plate of aluminum ( $625 \times 530 \text{ }\mu\text{m}$ ,  $2 \text{ }\mu\text{m}$  thick), a dielectric (air and silicon nitride supporting the sides) between the plates, an upper membrane of polycrystalline silicon ( $530 \times 530 \text{ }\mu\text{m}$ ,  $12 \text{ }\mu\text{m}$ ), and contact pads on the membrane and bottom plate ( $75 \times 75 \text{ }\mu\text{m}$ ) made of aluminum. The layer sizes proposed here are optimal and most effective in terms of modeling results. This design of the pressure sensor allows to accurately measuring pressure by analyzing changes in the capacity caused by the deflection of the membrane under the influence of external influences.

#### c. Temperature sensor design

In this work, we suggested to use a platinum wire as a temperature sensor. Such a non-contact temperature sensor based on platinum resistance thermometers avoids the problem of emissivity error. The platinum temperature sensor in our system is a four-loop platinum meander structure with a thickness of  $0.3 \text{ }\mu\text{m}$ . It is located directly beneath the gas sensor in the system, as shown in Figure 1. The total area of the sensor, including its contacts, is  $0.55682 \text{ mm}^2$ .

The platinum meander-based temperature sensor operates on the principle of measuring the change in electrical resistance of a platinum element as the temperature varies.

The technological process of creating such a microsystem comprising three sensors will involve four stages: 1) substrate formation (the formation of an AA substrate is described in more detail in our previous article [5]); 2) formation of the platinum temperature sensor and platinum counter-pin electrodes for the gas sensor; 3) deposition of the gas-sensitive layer on the counter-pin electrodes for the final formation of the gas sensor; 4) formation of the pressure sensor (which will include several operations for layer formation of the capacitive pressure sensor and electrodes).

### III. SIMULATION RESULTS OF MULTISENSORY MICROSYSTEM

#### a. Sensors simulation

The process of modeling a multisensory system took place in Comsol Multiphysics 6.1 using the finite element method. The list of modules, used and their description are given in the table 1. Parameters of materials such as Young's modulus, thermal conductivity coefficient, relative permittivity, electrical conductivity and material density during modeling were taken from the libraries of materials.

Table 1. The list of modules used in Comsol Multiphysics 6.1

Type of sensor	The Comsol module	Description
Temperature sensor	Electric Currents	Creating electrical boundary conditions of a conductor with electrodes
	Heat Transfer in Solids	Simulation of heat transfer in a sensor
Pressure sensor	Solid Mechanics	Simulation of deformation of the sensor membrane under external pressure
	Electrostatics	Changing the sensor capacity during deformation
Gas sensor	Laminar Flow	Simulation of the gas flow in the system with the laminar flow regime
	Transport of Diluted Species	Modeling the transport of dilute components, with the diffusion of gases in the system
	Reaction Engineering	Initiation of chemical reactions on the surface of the gas sensor

The temperature sensor was simulated by applying a direct current to one of the electrodes. To prevent self-heating of the platinum wire, a low current of 20  $\mu\text{A}$  was utilized. With increasing temperature, the sensor's resistance demonstrated a linear progression (as illustrated in Fig. 2,a). Specifically, at a temperature of 100  $^{\circ}\text{C}$ , the resistance was 35.7 Ohms, while at 200  $^{\circ}\text{C}$ , the resistance increased to 45.35 Ohms. The OriginLab program's linear approximation unveiled the relationship between resistance (R) and temperature (T), delineated by the expression  $R = 26.224 + 0.09454T$ . Thus, using this expression, it is possible to calculate the temperature from the resistance of the sensor.

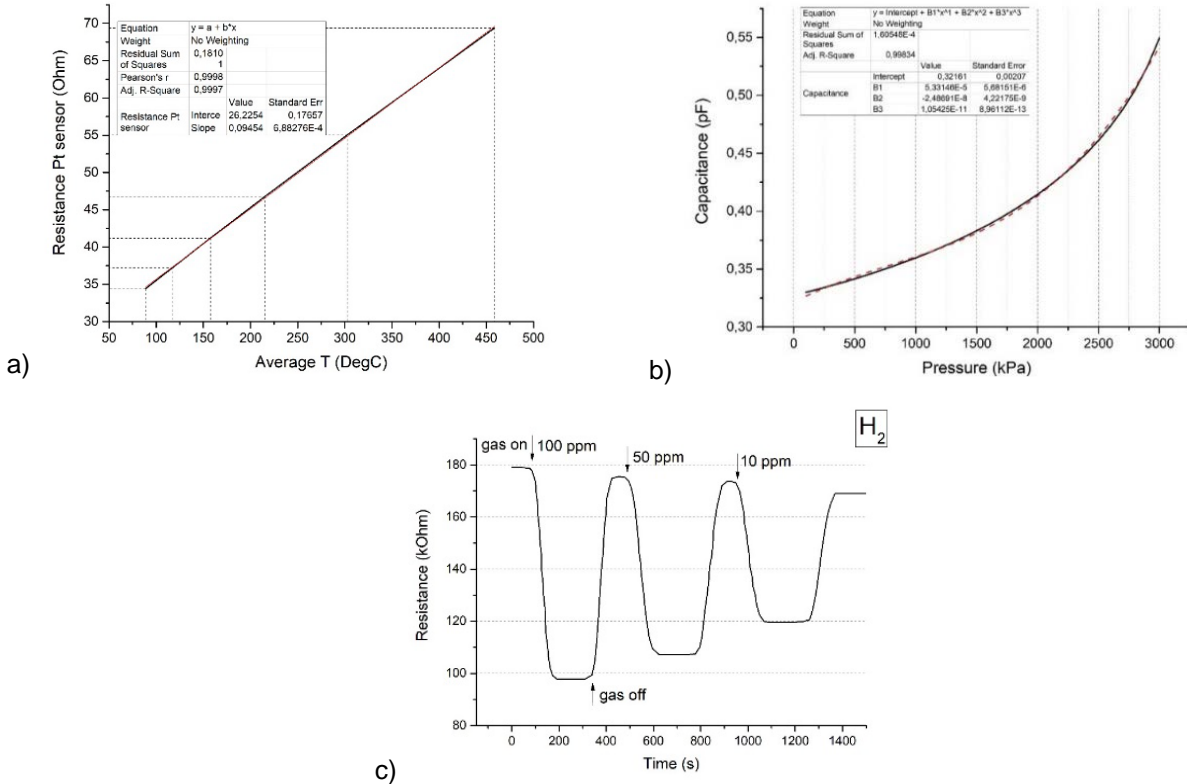


Figure 2. Sensor modeling results: a) – The dependence of Pt sensor resistance on temperature; b – The dependence of capacity on pressure; c – Correlation between gas sensor resistance and hydrogen concentration

The simulations unveiled that with rising pressure, the membrane's deformation and corresponding capacitance both escalate. Figure 2b graphically represents the correlation between capacitance and applied pressure. As previously noted, under normal operating conditions, the pressure inside the cylindrical Li-ion battery is 97 kPa, at this pressure, the sensor capacity was 0.329 pF, when gases begin to be released inside the battery, the pressure inside the battery can rise to 3 MPa. At a pressure of 1 MPa, the capacity was 0.360 pF, at a pressure of 2 MPa, the capacity was 0.415 pF, at a pressure of 2 MPa, the capacity was 0.550 pF.

The polynomial approximation of the OriginLab described the relationship between the sensor capacity and the pressure value as expressions:

$$P = 0.3216 + 5.33 \times 10^{-5}C - 2,494 \times 10^{-8}C^2 + 1,054 \times 10^{-11}C^3$$

For gas sensor modeling in the Comsol, a gas reactor with periodic hydrogen supply at a concentration of ppm from 10, 50 and 100 was created during the time-dependent study. The correction coefficients based on experimental data [6] were used due to the fact that in the Comsol Multiphysics program, the task of describing all chemical reactions on the surface of the gas-sensitive layer is complicated. The change in resistance of the ZnO-GaO gas sensor based on simulation results and is presented in the figure 2.c. The sensitivity of the gas sensor for 100 ppm is determined by the expression below:

$$\frac{R_{air}}{gas} = \frac{179.88 \text{ k}\Omega}{95.68 \text{ k}\Omega} = 1.88$$

For hydrogen concentrations of 50 and 10, the sensitivity of the sensor was 1.66 and 1.47, respectively.

#### b. Concept application and prospects

We propose to determine three modes of battery operation: normal, dangerous and critical using the sensors described in this work (Table 1).

1. Normal safety range. In this range, the battery capacity is within normal operating limit, which depends on the packaging shape of the lithium ion battery. The temperature according to the sensor is within 20°C-50°C, which avoids overheating or hypothermia. The gas concentration level remains at zero or a safe level, without reaching critical levels that could lead to fire or explosion.

2. Dangerous Range: The battery temperature begins to approach dangerous levels (51°C-80°C) where overheating or hypothermia may occur, posing a threat to the safety and stability of the battery. Gas concentration levels may begin to increase, indicating possible problems within the battery, such as overheating or problems that could be a precursor to a fire. In this range, battery capacity may be at the edge of acceptable limits, which may indicate that measures must be taken to prevent deep discharge or overcharging, which can negatively affect the life cycle of the battery.

3. Critical Range. The battery reaches a critical level of discharge or overcharge that may result in structural damage or poor performance. The battery temperature (above 80°C) is outside the safe range, which may cause fire or explosion. The gas concentration reaches critical levels, indicating serious problems within the battery and increasing the risk of fire or explosion. For instance, the table 2 shows possible modes as an example for 18650 li-ion battery.

Table 2. Possible operation modes for 18650 li-ion battery

	Temperature, °C	Pressure, kPa	Gas concentration, ppm
Normal safety	20-50	100	0
Dangerous	51-80	200	20
Critical	above 80	600	500

#### IV. CONCLUSIONS

The results of modeling a complex multisensory system including gas, pressure and temperature sensors are presented. Additionally, we delved into the operational concepts across three modes. The design of the developed multi-sensor system promises to bolster the reliability and safety of various lithium-ion battery types like LCO, NMC, and NCO by mitigating risks associated with fire, explosions, or battery pack damage. This proposed system has a wide array of potential applications, spanning from portable gadgets like smartphones, tablets, laptops, and power tools to modules in electric vehicles.

## REFERENCES

- [1] Experimental Investigation on the Thermal Runaway and Its Propagation in the Large Format Battery Module with  $\text{Li}(\text{Ni}_{1/3}\text{Co}_{1/3}\text{Mn}_{1/3})\text{O}_2$  as Cathode / H. Li [et al.] // J. Hazard. Mater. 2019. Vol. 375. P. 241–254.
- [2] Early Detection for Li-Ion Batteries Thermal Runaway Based on Gas Sensing Ting / T.Cai [et al.] // ECS Trans. 2019. Vol. 89. No 1. P. 85–97.
- [3] Room Temperature Resistive Hydrogen Sensor for Early Safety Warning of Li-Ion Batteries / S. Li [et al.] // Chemosensors. 2023. Vol. 11. No 6. P. 344.
- [4] Detection of micro-scale Li dendrite via  $\text{H}_2$  gas capture for early safety warning / Jin Yang [et al.] // Joule. 2020. Vol. 4. No 8. P.1714-1729.
- [5] Micropowered Chemoresistive Sensor Based on a Thin Alumina Nanoporous Membrane and  $\text{Sn}_x\text{Bi}_k\text{Mo}_y\text{O}_z$  Nanocomposite / G. Gorokh [et al.] // Sensors. 2022. Vol. 22. P. 3640.
- [6] Heterostructure interfaces and dimensionally transformed  $\text{GaO}/\text{ZnO}$  nanostructures for room-temperature hydrogen gas sensors / H. Bohr-Ran [et al.] // International Journal of Hydrogen Energy. 2024. Vol. 64. P. 889-895.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ МУЛЬТИСЕНСОРНОЙ МИКРОСИСТЕМЫ ДЛЯ РАННЕГО ОБНАРУЖЕНИЯ И ПРЕДОТВРАЩЕНИЯ ТЕПЛОВОГО РАЗГОНА В ЛИТИЙ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРАХ

Федосенко В.С.<sup>1</sup>, Донг Л.<sup>2</sup>, Юэ Ц.<sup>2</sup>, Горох Г.Г.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
Минск, Республика Беларусь, [gorokh@bsuir.by](mailto:gorokh@bsuir.by)

<sup>2</sup>Университет Ханчжоу Дяньцзы, Ханчжоу, Китайская Народная Республика, [donglinxi@hdu.edu.cn](mailto:donglinxi@hdu.edu.cn)

Аннотация: В данной статье представлена концепция работы и результаты моделирования мультисенсорной системы, предназначенной для предотвращения теплового разгона в литий-ионных аккумуляторах. Система объединяет датчики газа, температуры и давления на одном кристалле, обеспечивая повышенную надежность и безопасность за счет минимизации рисков возгорания, взрыва или повреждения аккумуляторных батарей. Предлагаемая мультисенсорная система имеет значительный потенциал применения на различных портативных устройствах, включая смартфоны, планшеты, триммеры и различные типы электромобилей.

Ключевые слова: моделирование, тепловой разгон, литий-ионные аккумуляторы, мультисенсорная система.

УДК 538.915

КОМПЬЮТЕРНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ «МОЛЕКУЛЫ ДИАМАНА» И ЕЁ АНАЛОГА ИЗ НИТРИДА БОРА

Бауетдинов Ю.А.

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Российская Федерация,  
[yabauetdinov@gmail.com](mailto:yabauetdinov@gmail.com)

Аннотация: при помощи теории функционала плотности исследованы молекулы  $C_{12}H_6$  и  $B_6N_6H_6$ , представляющие собой минимально возможные двухслойные молекулярные структуры, состоящие из ковалентно связанных углеродных или бор-нитридных колец. Определены структурные и энергетические характеристики этих молекул. Рассчитаны инфракрасные и Рамановские спектры, необходимые для идентификации рассматриваемых молекул. Термическая устойчивость и механизмы распада молекул определены с использованием молекулярной динамики и исследования координаты реакции. Установлено, что молекула алмазана устойчива при нормальных условиях, а её аналог из нитрида бора устойчив только при криогенных температурах.

Ключевые слова: молекулярная динамика, теория функционала плотности, алмазан, двухслойные молекулярные структуры.

## I. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы исследуются многослойные углеродные структуры, такие как двухслойный графен с ковалентными межслоевыми связями. В 2009 году была предсказана структура  $C_2H$ , известная как алмазан — двухслойная алмазоподобная пленка толщиной менее 1 нм [1]. В 2017 году индуцированное давлением межслоевое связывание в двухслойном графене было подтверждено спектроскопией Рамана, однако для обеспечения стабильности использовалась химическая функционализация [2]. Были синтезированы F-алмазан и H-алмазан, которые нашли широкое применение в электронике и нанотехнологии благодаря возможности настройки их свойств [3].

Алмазаны используются в полевых транзисторах, суперконденсаторах, литиевых батареях, а также в термоэлектрических и оптоэлектронных устройствах [4]. Их функционализация водородом, фтором и хлором улучшает полупроводниковые свойства, что делает их подходящими для применения в нанотехнологии и оптических устройствах. Также рассматривается недавно предложенный материал — гекса-тетра-углерод (НТС), представляющий собой двухслойную структуру из шестиугольных колец  $C_{12}$ . НТС является полупроводником с запрещенной зоной 2.20 эВ и обладает высокой стабильностью [5].

## II. МЕТОДЫ РАСЧЁТА

Для исследования молекул  $C_{12}H_6$  и  $B_6N_6H_6$ , представляющих собой два параллельных шестиугольника с межслоевыми C-C или B-N связями (рис. 1), использовалась теория функционала плотности (DFT) с функционалом B3LYP и базисным набором 6-311G\* [6]. Расчёты были выполнены с использованием программного пакета GAMESS-US [7], который позволяет проводить квантово-химическое моделирование, включая оптимизацию геометрии и анализ колебательных мод [8].

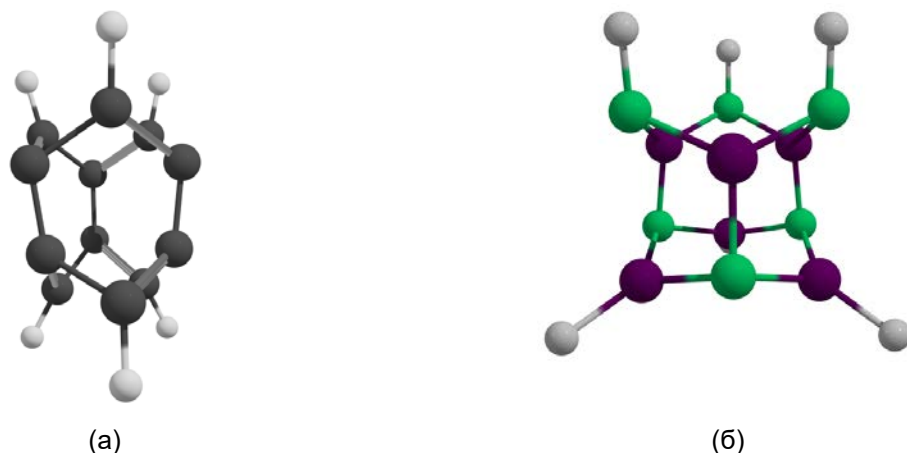


Рисунок 1. Структура молекулярных аналогов алмазана (а) и борнитрана (б)

Термическая устойчивость и механизмы распада молекул были исследованы методом молекулярной динамики с использованием неортогональной модели сильной связи, реализованной в пакете NTBM [9]. Моделирование проводилось в микроканоническом ансамбле NVE, обеспечивая эффективность по сравнению с молекулярной динамикой на основе первых принципов (AIMD) [10]. Путь распада, определенный с помощью NTBM, был затем пересчитан с использованием DFT для точного определения энергетического барьера стабильности.

## II. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

### а. Структурные, энергетические и квантово-химические характеристики

Молекулы  $C_{12}H_6$  и  $B_6N_6H_6$  представляют собой параллельные шестиугольные структуры, соединенные межслоевыми связями. Межслоевые связи C-C в  $C_{12}H_6$  составляют 1.39 Å, а связи B-N в  $B_6N_6H_6$  — 1.44 Å, что несколько меньше аналогичных связей в алмазе и борнитране (1.52 Å и 1.49 Å) [11]. Внутрислоевые связи в  $C_{12}H_6$  варьируются от 1.44 до 1.57 Å, что больше, чем в графене, где связи C-C составляют 1.42 Å [12]. В  $B_6N_6H_6$  длины внутрислоевых связей B-N варьируются от 1.48 до 1.50 Å, а длины связей B-H и N-H составляют 1.18 Å и 1.02 Å соответственно. Эти параметры важны для понимания особенностей устойчивости и реакционной способности молекул.

Для оценки электронных свойств молекул рассчитывались квантово-химические дескрипторы, такие как ионизационный потенциал (IP), сродство к электрону (EA), химическая твердость ( $\eta$ ), мягкость (S), электроотрицательность ( $\chi$ ) и индекс электрофильности ( $\omega$ ) (табл. 1).

Таблица 1. Квантово-химические дескрипторы реактивности молекул алмаза  $C_{12}H_6$  и борнитрана  $B_6N_6H_6$

	$E_{HOMO}, eV$	$E_{LUMO}, eV$	$\eta, eV$	$S, eV^{-1}$	$\omega, eV$	$\chi, eV$
$C_{12}H_6$	-4.74	-2.88	0.93	0.54	7.80	3.81
$B_6N_6H_6$	-6.76	-2.72	2.02	0.25	5.56	4.74

Согласно этим данным, молекула  $B_6N_6H_6$  характеризуется почти вдвое большей твердостью по сравнению с  $C_{12}H_6$ , что характерно для полярных соединений из нитрида бора. Энергетическая щель между высшей занятой и низшей незанятой молекулярными орбиталями (HOMO-LUMO) составляет 1.86 eV для  $C_{12}H_6$  и 4.04 eV для  $B_6N_6H_6$ , что свидетельствует о различиях в их реакционной способности.

### б. Спектральные характеристики и термическая устойчивость

Для подтверждения структуры молекул были рассчитаны их инфракрасные (ИК) и Рамановские спектры (рис. 2). В ИК-спектре молекулы  $C_{12}H_6$  пик на  $304\text{ см}^{-1}$  отражает колебания межслоевой связи C-C, а полоса при  $958\text{ см}^{-1}$  соответствует колебаниям внутрислоевых связей. В рамановском спектре пик на  $3090\text{ см}^{-1}$  соответствует колебаниям связей C-H. Для  $B_6N_6H_6$  характерен пик в ИК-спектре на  $1034\text{ см}^{-1}$ , который связан с колебаниями B-N, и пик на  $1232\text{ см}^{-1}$ , который отражает межслоевые колебания.

Термическая устойчивость молекул оценивалась методом молекулярной динамики при температуре 1500 К. Процесс распада для молекулы алмаза начинается с разрыва внутрислоевых связей C-C, в то время как для  $B_6N_6H_6$  аналогичный процесс инициируется разрывом B-N связей, приводя к образованию полициклической структуры. Высота энергетического барьера, препятствующего распаду, составляет 1.23 eV для  $C_{12}H_6$  и 0.84 eV для  $B_6N_6H_6$ , что указывает на высокую стабильность алмаза по сравнению с борнитраном. Оценка времени жизни молекул при комнатной температуре показала, что  $C_{12}H_6$  обладает временем жизни около 16 лет, в то время как  $B_6N_6H_6$  — всего около 2.5 минут, что требует криогенных условий для стабильности.

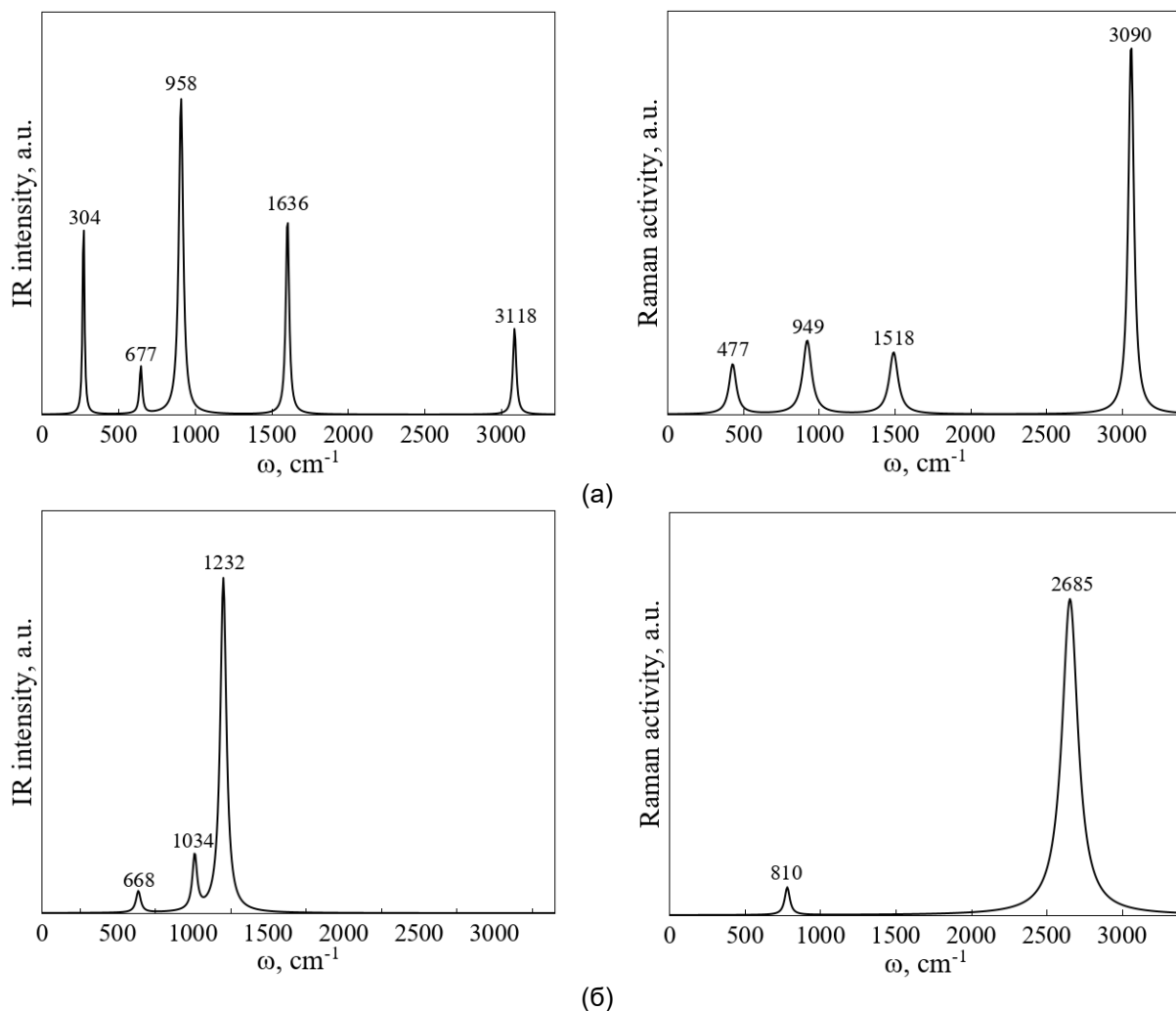


Рисунок 2. Инфракрасные и Рамановские спектры для молекулы C<sub>12</sub>H<sub>6</sub>(а) и B<sub>6</sub>N<sub>6</sub>H<sub>6</sub>(б)

### III. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Двухслойные 2D материалы с ковалентными межслоевыми связями обладают уникальными свойствами, значительно отличающимися от традиционных 2D материалов, и открывают новые возможности для применения в нанoeлектронике. В данной работе были исследованы молекулы C<sub>12</sub>H<sub>6</sub> и B<sub>6</sub>N<sub>6</sub>H<sub>6</sub>, что позволило охарактеризовать их структурные, энергетические и спектральные свойства, а также термическую устойчивость и механизмы распада. Полученные результаты могут быть использованы для обобщения на более крупные двухслойные материалы, а также для разработки перспективных нанотехнологий. В дальнейшем предполагается исследовать влияние формы и размера молекул на их свойства, а также изучить более крупные модели графеновых материалов.

### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Chernozatonskii, L. A., Sorokin, P. B., Kvashnin, A. G., & Kvashnin, D. G. E. (2009). Diamond-like C<sub>2</sub>H nanolayer, diamane: Simulation of the structure and properties. *Jetp Letters*, 90, 134-138.
- [2] Mortazavi, B., Shojaei, F., Javvaji, B., Azizi, M., Zhan, H., Rabczuk, T., & Zhuang, X. (2020). First-principles investigation of mechanical, electronic and optical properties of H-, F- and Cl-diamane. *Applied Surface Science*, 528, 147035.
- [3] Georgakilas, V., Gournis, D., Tzitzios, V., Pasquato, L., Guldi, D. M., & Prato, M. (2007). Decorating carbon nanotubes with metal or semiconductor nanoparticles. *Journal of Materials Chemistry*, 17(26), 2679-2694.
- [4] Momeni, K., Ji, Y., Wang, Y., Paul, S., Neshani, S., Yilmaz, D. E., & Chen, L. Q. (2020). Multiscale computational understanding and growth of 2D materials: a review. *npj Computational Materials*, 6(1), 22.



- [5] Naseri, M., Jalilian, J., Salahub, D. R., Lourenço, M. P., & Rezaei, G. (2022). Hexatetra-Carbon: A Novel Two-Dimensional Semiconductor Allotrope of Carbon. *Computation*, 10(2), 19.
- [6] Becke, A. D. (1992). Density-functional thermochemistry. I. The effect of the exchange-only gradient correction. *The Journal of chemical physics*, 96(3), 2155-2160.
- [7] Schmidt, M. W., Baldridge, K. K., Boatz, J. A., Elbert, S. T., Gordon, M. S., Jensen, J. H., ... & Montgomery Jr, J. A. (1993). General atomic and molecular electronic structure system. *Journal of computational chemistry*, 14(11), 1347-1363.
- [8] Guest\*, M. F., Bush, I. J., Van Dam, H. J., Sherwood, P., Thomas, J. M., Van Lenthe, J. H., ... & Kendrick, J. (2005). The GAMESS-UK electronic structure package: algorithms, developments and applications. *Molecular physics*, 103(6-8), 719-747.
- [9] Katin, K. P., Grishakov, K. S., Podlivaev, A. I., & Maslov, M. M. (2020). Molecular hyperdynamics coupled with the nonorthogonal tight-binding approach: Implementation and validation. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 16(4), 2065-2070.
- [10] Pearson, E. M., Halicioglu, T., & Tiller, W. A. (1985). Laplace-transform technique for deriving thermodynamic equations from the classical microcanonical ensemble. *Physical Review A*, 32(5), 3030.
- [11] Chernozatonskii, L. A., Katin, K. P., Kochaev, A. I., & Maslov, M. M. (2022). Moiré and non-twisted sp<sup>3</sup>-hybridized structures based on hexagonal boron nitride bilayers: Ab initio insight into infrared and Raman spectra, bands structures and mechanical properties. *Applied Surface Science*, 606, 154909.
- [12] Карпенко, О. С., Лобанов, В. В., & Картель, Н. Т. (2016). Строение и свойства гексагональных углеродных нанокластеров C<sub>95</sub>N графеноподобной структуры. *Хімія, фізика та технологія поверхні*, (7, № 2), 157-166.

#### COMPUTER STUDY OF THE «DIAMINE MOLECULE» AND IT'S BORON NITRIDE ANALOGUE

Yu.A. Bauetdinov

National Research Nuclear University MEPhI, Moscow, Russian Federation, [yabauetdinov@gmail.com](mailto:yabauetdinov@gmail.com)

**Abstract:** Using density functional theory, molecules C<sub>12</sub>H<sub>6</sub> and B<sub>6</sub>N<sub>6</sub>H<sub>6</sub>, which are minimal possible bilayer molecular structures consisting of covalently bonded carbon or boron-nitride rings, have been studied. The structural and energetic characteristics of these molecules have been determined. The infrared and Raman spectra necessary for the identification of the considered molecules have been calculated. The thermal stability and decay mechanisms of the molecules have been determined using molecular dynamics and reaction coordinate studies. It was found that the diamane molecule is stable under normal conditions, while its boron nitride analogue is stable only at cryogenic temperatures.

**Keywords:** molecular dynamics, density functional theory, diamane, bilayer molecular structures.

УДК 620.3

КОМПЬЮТЕРНЫЙ ДИЗАЙН И РАСЧЕТ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СВОЙСТВ МОНОСЛОЕВ  $Zn_2(V,Nb,Ta)N_3$

Устюжанина С.В.<sup>1</sup>, Кистанов А.А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа, Российская Федерация

<sup>2</sup>Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Российская Федерация,  
[andrei.kistanov.ufa@gmail.com](mailto:andrei.kistanov.ufa@gmail.com)

Аннотация: В настоящее время наноразмерные тройные нитриды активно изучаются различными методами, в том числе методами компьютерного моделирования. В данной работе, с помощью первопринципных расчетов, изучена возможность существования монослоев  $Zn_2(V,Nb,Ta)N_3$ . Показано, что исследуемые монослои стабильны, а монослой  $Zn_2VN_3$  является наиболее простым для синтеза, он также обладает самой высокой прочностью и эластичностью. Монослои  $Zn_2(V,Nb,Ta)N_3$  являются полупроводниками с почти равными прямой и непрямой запрещенными зонами порядка 2,7-3,4 эВ. При этом, монослой  $Zn_2NbN_3$  имеет аномально высокую подвижность электронов  $1,67 \times 10^4$  см<sup>2</sup>/В·с. Таким образом, исследуемые монослои  $Zn_2(V,Nb,Ta)N_3$ , в особенности монослой  $Zn_2NbN_3$ , перспективны для применения в светодиодных устройствах и солнечных элементах.

Ключевые слова: тернарный нитрид; ДФТ; электронная структура; структурная стабильность; моделирование.

## I. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время спрос на технологии на основе новых функциональных материалов, в частности, двумерных (2D) материалах, неуклонно растет. Двумерные материалы, благодаря своим уникальным свойствам, могут использоваться в различных областях, таких как электроника, фотоника, сенсорика и т. д. Одними из таких 2D материалов являются тройные соединения [1]. Например, на основе предсказаний из первых принципов монослой  $Sb_2TeSe_2$  был предложен в качестве материала для солнечных элементов из-за его умеренной ширины запрещенной зоны и высокой подвижности носителей заряда [2]. Первопринципные расчеты показали, что монослой  $V_3C_2P_3$  обладает высокой чувствительностью и селективностью по отношению к газам  $NO_2$  и  $NO$  [3]. Результаты моделирования также показали увеличение проводимости зарядов в пленках  $CoMnN$  при умеренном повышении концентрации Mn [4].

Совсем недавно большое внимание стало уделяться тройным нитридам. Например, тонкая пленка  $TiZnN_2$  была предложена в качестве гидрофобного, высокостабильного и экономически эффективного активного слоя в солнечных элементах [5]. Кроме того, были обнаружены тонкие пленки  $Zn_2VN_3$ ,  $Zn_2NbN_3$  и  $Zn_2TaN_3$ . Эти тонкие пленки демонстрируют высокую стабильность в окружающей среде, имеют умеренную ширину запрещенной зоны и высокое значение светопоглощения, что делает их перспективными для применения в качестве барьерного слоя в тандемных солнечных элементах [6-8].

В данной работе, с использованием моделирования на основе теории функционала плотности (DFT), изучена возможность существования новых монослоев  $Zn_2(V,Nb,Ta)N_3$ . Показана их структурная стабильность путем расчета энергии образования; смоделирован процесс синтеза и формирования структуры методом *ab initio* молекулярной динамики и показаны основные функциональные свойства.

## II. РЕЗУЛЬТАТЫ

Модель монослоев  $Zn_2(V,Nb,Ta)N_3$  разработана на основе структуры их объемных аналогов, полученных в предыдущих работах [6-8]. Эти монослои имеют орторомбическую решетку с параметрами решетки  $a = b = 5,63$  Å,  $a = b = 5,77$  Å и  $a = b = 5,78$  Å соответственно. На рис. 1а, на примере монослоя  $Zn_2VN_3$ , показаны оптимизированные элементарные ячейки монослоев  $Zn_2(V,Nb,Ta)N_3$ , которые получились путем отсечения атомарного слоя от объемного материала вдоль направление (001).

Энергия образования  $E_{обр}$  монослоев  $Zn_2(V,Nb,Ta)N_3$  рассчитана как:

$$E_{обр} = (E_{tot} - n_{Zn}E_{Zn} - n_{(V,Nb,Ta)}E_{(V,Nb,Ta)} - n_N E_N) / n_{tot} \quad (1)$$

где  $E_{tot}$ , — свободные энергии монослоев  $Zn_2(V,Nb,Ta)N_3$ ;  $E_{Zn}$ ,  $E_{(V,Nb,Ta)}$  и  $E_N$  — энергии изолированных атомов Zn, (V,Nb,Ta) и N в стабильной фазе, соответственно;  $n_{Zn}$ ,  $n_{(V,Nb,Ta)}$ ,  $n_N$  и  $n_{tot}$  — количество атомов Zn, (V,Nb, Ta), N и общее количество атомов структуры.  $E_{обр}$  монослоев  $Zn_2(V,Nb,Ta)N_3$  составляет -3,60 эВ на атом, -3,82 эВ на атом и -3,91 эВ на атом, что говорит об их способности к самосборке.

Теоретическая оценка «потенциально расслаивающихся» двумерных систем может быть получена с помощью энергии расслаивания  $E_{\text{exf}}$ , которая не должна превышать  $200 \text{ мэВ/Å}^2$  [9]. Рассчитанная  $E_{\text{exf}}$  для монослоев  $\text{Zn}_2(\text{V},\text{Nb},\text{Ta})\text{N}_3$  составляет  $105 \text{ мэВ/Å}^2$ ,  $117 \text{ мэВ/Å}^2$  и  $125 \text{ мэВ/Å}^2$ , соответственно, что позволяет предположить, что эти монослои могут быть получены при определенных условиях. Кроме того, недавно был описан еще один подход к осаждению тонкой пленки  $\text{Zn}_2\text{VN}_3$ , при котором испаренные  $\text{Zn}_3\text{N}_2$  и  $\text{VN}$  в ионизированном азоте при температуре  $390\text{-}490 \text{ К}$  образуют тонкую пленку  $\text{Zn}_2\text{VN}_3$  в результате реакции  $\text{Zn}_3\text{N}_2 + \text{VN} \rightarrow (\text{N}^+) \text{Zn}_2\text{VN}_3 + \text{Zn}$  (испарение) [6]. Исходя из этих экспериментальных данных, проведены *ab initio* молекулярно-динамические (AIMD) расчеты для моделирования процесса формирования монослоев  $\text{Zn}_2(\text{V},\text{Nb},\text{Ta})\text{N}_3$ . Как показано на рис. 1б, при AIMD моделировании, выполненном при вышеупомянутых условиях, было обнаружено, что шестиугольники  $\text{Zn}_2\text{VN}_3$  действительно формируются при  $\sim 180^\circ \text{C}$  в течение  $\sim 4 \text{ пс}$ . Следовательно, контролируя определенные параметры, такие как скорость испарения  $\text{Zn}$  и скорость ионизированного азота или температуры синтеза, возможно синтезировать монослои  $\text{Zn}_2(\text{V},\text{Nb},\text{Ta})\text{N}_3$ .

Для оценки механических свойств монослоев  $\text{Zn}_2(\text{V},\text{Nb},\text{Ta})\text{N}_3$ , рассчитана пространственная зависимость их модуля Юнга, модуля сдвига и коэффициента Пуассона, как показано на рис. 1в. Модуль Юнга монослоев  $\text{Zn}_2(\text{V},\text{Nb},\text{Ta})\text{N}_3$  практически изотропен и равен  $96,4 \text{ Н/м}$ ,  $89,0 \text{ Н/м}$  и  $88,3 \text{ Н/м}$ , соответственно. В свою очередь, модуль сдвига и коэффициент Пуассона монослоев  $\text{Zn}_2(\text{V},\text{Nb},\text{Ta})\text{N}_3$  обладают небольшой изотропией. Ниболее высокие значения модуля сдвига  $35,7 \text{ Н/м}$  (монослой  $\text{Zn}_2\text{VN}_3$ ),  $33,0 \text{ Н/м}$  (монослой  $\text{Zn}_2\text{NbN}_3$ ) и  $32,8 \text{ Н/м}$  (монослой  $\text{Zn}_2\text{Ta}_3\text{N}_3$ ) и самые высокие значения коэффициента Пуассона  $0,43$  (монослой  $\text{Zn}_2\text{VN}_3$ ),  $0,37$  (монослой  $\text{Zn}_2\text{NbN}_3$ ) и  $0,40$  (монослой  $\text{Zn}_2\text{Ta}_3\text{N}_3$ ).

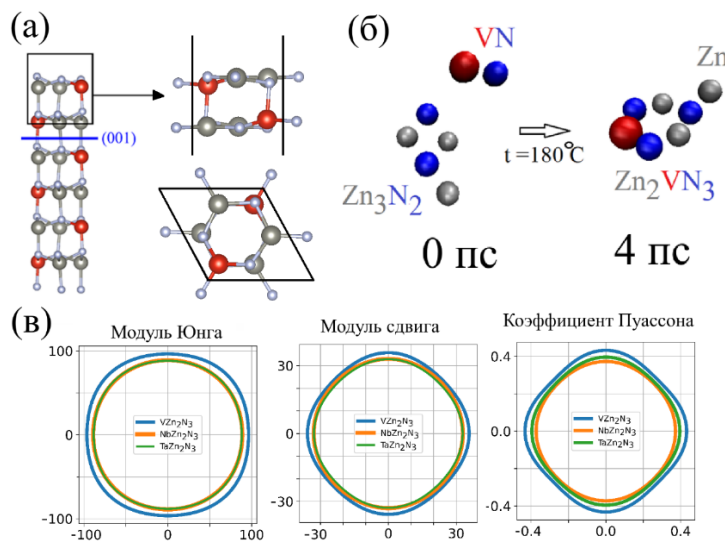


Рисунок 1. (а) Схема превращения  $\text{Zn}_2\text{VN}_3$  из объемного состояния в двумерное и элементарная ячейка монослоя  $\text{Zn}_2\text{VN}_3$ . (б) Результат AIMD моделирования формирования монослоев  $\text{Zn}_2(\text{V},\text{Nb},\text{Ta})\text{N}_3$ . (в) Пространственные зависимости модуля Юнга (Н/м), модуля сдвига (Н/м) и коэффициента Пуассона для монослоев  $\text{Zn}_2(\text{V},\text{Nb},\text{Ta})\text{N}_3$ .

На рис. 2а представлена зонная структура монослоев  $\text{Zn}_2(\text{V},\text{Nb},\text{Ta})\text{N}_3$ , полученная с использованием обменно-корреляционного функционала Heyd–Scuseria–Ernzerhof (HSE06) [10]. Монослой  $\text{Zn}_2\text{VN}_3$  имеет непрямую запрещенную зону  $2,75 \text{ эВ}$  и прямую запрещенную зону  $2,85 \text{ эВ}$ , а монослои  $\text{Zn}_2\text{NbN}_3$  и  $\text{Zn}_2\text{Ta}_3\text{N}_3$  имеют прямую запрещенную зону (которая равна неямой запрещенной зоне) равную  $3,38 \text{ эВ}$  и  $3,33 \text{ эВ}$ , соответственно. Поскольку монослой  $\text{Zn}_2\text{VN}_3$  имеет непрямую запрещенную зону, прямое фотовозбуждение невозможно, что может снижать его коэффициент поглощения и делает устройства светопоглощения на основе монослоя  $\text{Zn}_2\text{VN}_3$  менее эффективными, по сравнению с таковыми на основе монослоев  $\text{Zn}_2\text{NbN}_3$  и  $\text{Zn}_2\text{Ta}_3\text{N}_3$ .

Далее был определен механизм переноса носителей заряда в монослоях  $\text{Zn}_2(\text{V},\text{Nb},\text{Ta})\text{N}_3$ . Пространственная структура волновых функций в  $k$  точках, соответствующих минимуму валентной зоны (VBM) и максимуму зоны проводимости (CBM) для монослоев  $\text{Zn}_2(\text{V},\text{Nb},\text{Ta})\text{N}_3$ , на примере монослоя  $\text{Zn}_2\text{VN}_3$ , показана на рис. 2б. Видно, что CBM и VBM в монослое  $\text{Zn}_2\text{VN}_3$  локализованы в направлениях  $x$  и  $y$ , что аналогично в случаях монослоев  $\text{Zn}_2\text{NbN}_3$  и  $\text{Zn}_2\text{Ta}_3\text{N}_3$ . Примечательно, что CBM в монослоях  $\text{Zn}_2(\text{V},\text{Nb},\text{Ta})\text{N}_3$  сильно делокализован в направлении вне плоскости, что предполагает повышенную подвижность электронов по сравнению с подвижностью дырок в этих монослоях. При этом рассчитано, что монослой  $\text{Zn}_2\text{NbN}_3$  имеет самую высокую подвижность электронов  $1,67 \times 10^4 \text{ см}^2/\text{В с}$ .

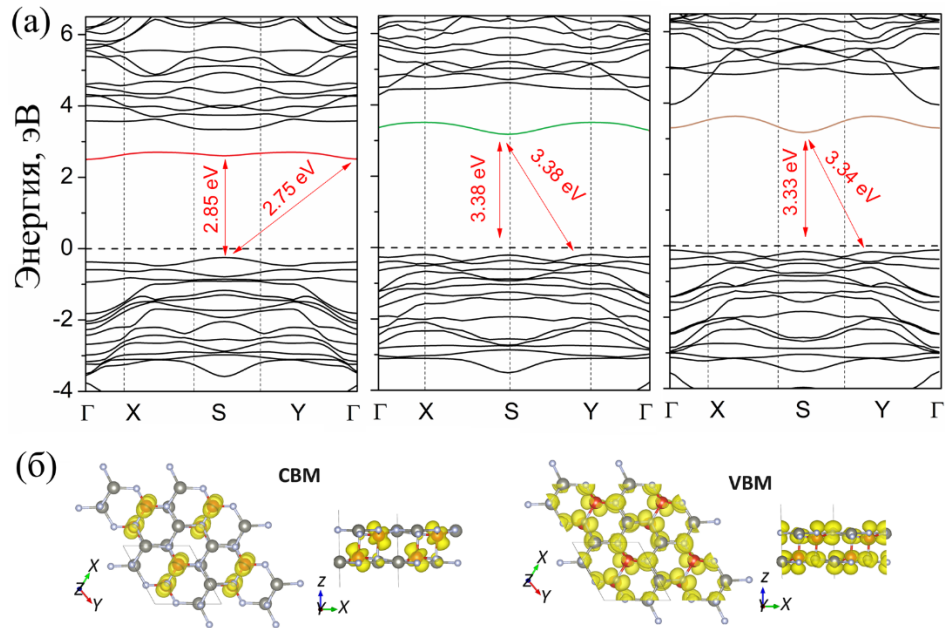


Рисунок 2. (а) Зонная структура монослоев  $Zn_2(V,Nb,Ta)N_3$ . (б) Пространственная структура волновых функций в  $k$  точках, соответствующих VBM и CBM, на примере монослоя  $Zn_2VN_3$

### III. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методами компьютерного моделирования предсказаны новые функциональные материалы, монослои  $Zn_2(V,Nb,Ta)N_3$ . Экспериментальное получение данных структур весьма вероятно благодаря низкой энергии отслоения, гораздо ниже  $200 \text{ мэВ}/\text{\AA}^2$ . Также предполагается, что для синтеза монослоев  $Zn_2(V,Nb,Ta)N_3$  может быть использован подход химического осаждения из газовой фазы, аналогично производству объемного  $Zn_2VN_3$  [7]. Стоит отметить монослой  $Zn_2NbN_3$ , который имеет прямую запрещенную зону равную  $3,38 \text{ эВ}$  и высокую подвижность электронов  $1,67 \times 10^4 \text{ см}^2/\text{В с}$ , при этом демонстрирует умеренные механические свойства. Все это делает монослой  $Zn_2NbN_3$  кандидатом для применения в оптоэлектронных устройствах и солнечных элементах.

### БЛАГОДАРНОСТЬ

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-73-01001, <https://rscf.ru/project/23-73-01001/>.

### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Hvezdouski, D. Ch. Search on stable binary and ternary compounds of two-dimensional transition metal halides. // D. Ch. Hvezdouski, M. S. Baranova, E. A. Korznikova, A. A. Kistanov, V. R. Stempitsky. 2D Mater. 2024. Vol. 11, P. 025022.
- [2] Wang, C.  $Sb_2TeSe_2$  monolayers: promising 2D semiconductors for highly efficient excitonic solar cells. // C. Wang, Y. Jing, X. Zhou, Y. F. Li. ACS Omega 2021. Vol. 6, No 31. P. 20590–20597.
- [3] Yuan, X.  $B_3C_2P_3$  monolayers based highly sensitive and selective room-temperature gas sensors for reusable  $NO$  and  $NO_2$  detection. // X. Yuan, Y. Yong, Q. Hou, H. Cui, K. Tian, W. Ju, X. Li, X. Li. Vacuum 2024. Vol. 220. P. 112874.
- [4] Tan, Zh. From binary to ternary transition-metal nitrides: a boost toward nitrogen magneto-ionics. // Zh. Tan, S. Martins, M. Escobar, J. de Rojas, F. Ibrahim, M. Chshiev, A. Quintana, A. Lopeandia, J. L. Costa-Krämer, E. Menéndez, J. Sort. ACS Appl. Mater. Interfaces 2022. Vol. 14, No 39. P. 44581-44590.
- [5] George, J. Novel ternary nitride thin film-based self-powered, broad spectral responsive photodetector with a high detectivity for weak. // J. George, H. K. Vikraman, R. P. Reji, K. M. Ghanashyam, S. V. Jayaraman, Y. Sivalingam, K. M. S. R. Narasimha. Light. Adv. Mater. Technol. 2023. Vol. 8. P. 2200645.
- [6] Zakutayev, A. Synthesis of  $Zn_2NbN_3$  ternary nitride semiconductor with wurtzite-derived crystal structure. // A. Zakutayev. J. Phys.: Condens. Matter. 2021. Vol. 33. P. 354003.

[7] Zhuk, S. Synthesis and characterization of the ternary nitride semiconductor  $Zn_2VN_3$ : theoretical prediction, combinatorial screening, and epitaxial stabilization. // S. Zhuk, A.A. Kistanov, S.C. Boehme, N. Ott, F. La Mattina, M. Stiefel, M.V. Kovalenko, S. Siol. Chem. Mater. 2021. Vol. 33, No 23. P. 9306-9316.

[8] Zhuk, S. Combinatorial reactive sputtering with auger parameter analysis enables synthesis of wurtzite  $Zn_2TaN_3$ . // S. Zhuk, A. Wiczorek, A. Sharma, J. Patidar, K. Thorwarth, J. Michler, S. Siol. Chem. Mater. 2023. Vol. 35, No 17. P. 7069–7078.

[9] Barnowsky, T. A new group of 2D non-van der Waals materials with ultra-low exfoliation energies. // T. Barnowsky, A. V. Krasheninnikov, R. Friedrich. Adv. Electron. Mater. 2023. Vol. 9. P. 2201112.

[10] Heyd, J. Hybrid functionals based on a screened coulomb potential. // J. Heyd, G. E. Scuseria, M. Ernzerhof. J. Chem. Phys. 2003. Vol. 118. P. 8207.

#### COMPUTATIONAL DESIGN AND FUNCTIONAL PROPERTIES OF $Zn_2(V,Nb,Ta)N_3$ MONOLAYERS

S.V. Ustiuzhanina<sup>1</sup>, A.A. Kistanov<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Institute for Metals Superplasticity Problems, Russian Academy of Sciences, Ufa, Russian Federation

<sup>2</sup>Ufa University of Science and Technology, Ufa, Russian Federation, [andrei.kistanov.ufa@gmail.com](mailto:andrei.kistanov.ufa@gmail.com)

Abstract: Currently, nanosized ternary nitrides are actively studied by various methods, including computational modeling. In this work, the possibility of the existence of  $Zn_2(V,Nb,Ta)N_3$  monolayers is studied using first-principles calculations. It is shown that the studied monolayers are stable, and the  $Zn_2VN_3$  monolayer is the easiest to synthesize, it also has the highest strength and elasticity.  $Zn_2(V,Nb,Ta)N_3$  monolayers are semiconductors with almost equal direct and indirect band gaps in the range of 2.7-3.4 eV. And  $Zn_2NbN_3$  monolayer shows an abnormally high electron mobility of  $1.67 \times 10^4$  cm<sup>2</sup>/V s. Thus, the studied  $Zn_2(V,Nb,Ta)N_3$  monolayers, specifically the  $Zn_2NbN_3$  monolayer, are promising for use in LED devices and solar cells.

Keywords: ternary nitride; DFT; electronic structure; structural stability; modeling.

UDC 538.9

MODELING NETWORK TRAFFIC DYNAMICS UNDER DDoS ATTACKS  
USING DIFFERENTIAL EQUATIONS

M.B. Bekiyeva

Oguz han Engineering and Technology University of Turkmenistan, Ashgabat, Turkmenistan,  
[successbmb@gmail.com](mailto:successbmb@gmail.com)

**Abstract:** In this paper, we develop a set of differential equations to model the network traffic dynamics under DDoS (Distributed Denial of Service) attacks by analyzing active connections and server response times. Focusing on packet loss and degradation of legitimate traffic, our model illustrates the changing behavior over time during DDoS attacks. Numerical simulations implemented using the Runge-Kutta method in Python provide insight into the effectiveness of mitigation strategies. By studying the relationship between attack traffic and legitimate traffic, our findings highlight the impact of DDoS attacks on network performance and the importance of robust security mechanisms to ensure service availability and quality in the face of cyber threats.

**Keywords:** DDoS Attacks, Network Traffic Modeling, Differential Equations, Server Performance, Active Connections, Numerical Simulations, Cybersecurity, Mathematical Modeling.

## I. INTRODUCTION

DDoS attacks pose significant threats to network availability and performance, leading to service interruptions for legitimate users. These attacks overwhelm target servers with excessive traffic from multiple sources, resulting in unacceptable delays or complete service denial. Mathematical modeling is pivotal in understanding and predicting the impact of these attacks on network systems. This research aims to develop a set of differential equations that describe the changing dynamics of network traffic during a DDoS attack, thereby contributing to the understanding of potential mitigation strategies.

## II. DIFFERENTIAL EQUATIONS MODEL

### a. Definitions

In our modeling framework, we define the following variables:

Where:

$N(t)$  – Number of active connections at time  $(t)$ ;

$A(t)$  – Rate of incoming attack traffic (packets/second);

$L(t)$  – Rate of legitimate traffic, under normal conditions, the server may operate with a traffic rate of  $\beta = 100$  (packets/second);

$R(t)$  – Server processing rate (requests/second);

$C$  – Server capacity (maximum number of connections);

$P(t)$  – Rate of packet loss (packets/second);

$\beta$  – Incoming rate of legitimate traffic, a value of  $\beta = 100$  indicates the average load from legitimate users under normal operating conditions (packets/second);

$d$  – Decay factor representing natural completion or timeout of legitimate connections;

$\mu$  – Processing speed (requests/second);

$\alpha$  – Packet loss coefficient, indicating how rapidly packets are lost above capacity.

### b. Dynamic Model

The dynamics of active connections in the system can be modeled by the following differential equation:

It looks like you're dealing with a system of differential equations that models the flow of network traffic through a server. Let's break down the given equations and their components:

#### 1. Overall Traffic Dynamics:

$$\frac{dN(t)}{dt} = L(t) + A(t) - R(t) - P(t)$$

Here,  $N(t)$  represents the total number of connections or traffic at time  $t$ . The rate of change in  $N(t)$  depends on four components:

$L(t)$ : The rate of incoming legitimate traffic.

$A(t)$ : The rate of attack traffic or unwanted traffic.

$R(t)$ : The rate at which the server processes traffic.

$P(t)$ : The rate of traffic being dropped due to exceeding capacity.

2. Dropping Rate Function:

$$P(t) = \begin{cases} 0 & \text{if } N(t) \leq C \\ \alpha \cdot (N(t) - C) & \text{if } N(t) > C \end{cases}$$

This function models how traffic is dropped when the total number of connections exceeds the server's capacity  $C$ . If  $N(t) \leq C$ , no traffic is dropped ( $P(t) = 0$ ). If  $N(t) > C$ , the excess traffic is dropped at a rate proportional to  $N(t) - C$ , with  $\alpha$  as the proportionality constant.

3. Legitimate Traffic Rate:

$$\frac{dL(t)}{dt} = \beta - dL(t)$$

The rate of change of legitimate traffic depends on a constant incoming rate  $\beta$  and a decay factor  $d$ , which could represent the natural completion or timeout of traffic.

4. Server Processing Rate:

$$R(t) = \mu \cdot \min(N(t), C)$$

The server processes traffic at a rate determined by  $\mu$ , which is the processing speed, and the minimum of the total traffic  $N(t)$  and the server's capacity  $C$ . This ensures that the server cannot process more than its capacity. These equations describe a traffic model with legitimate traffic growth, attack traffic, server processing, and congestion control through traffic dropping.

### III. METHODOLOGY

In this section, we provide a detailed description of the methodology employed to simulate the dynamics of network traffic under DDoS attacks using differential equations. The approach consists of several key steps, including the formulation of the mathematical model, selection of numerical methods, parameterization, implementation, and evaluation of results. Each of these steps is critical to ensuring that the simulation accurately reflects the complexities of network behavior during such attacks.

#### a. Mathematical Modeling

Mathematical modeling forms the foundation of our approach. The first step involved defining the system components and establishing the relationships between them. We identified essential variables, such as active connections, legitimate and attack traffic, server processing rate, capacity, and packet loss. Guided by these variables, we formulated a system of differential equations representing how these factors evolve over time during a DDoS attack:

#### b. Numerical Methods

Given that our model consists of ordinary differential equations that cannot easily be solved analytically, we employed numerical methods for simulation. The **Runge-Kutta method**, specifically the fourth-order Runge-Kutta method (RK4), was chosen for its robustness and accuracy in estimating solutions of differential equations.

The RK4 method is particularly effective because it approximates the value of the next step based on the current value and the slope (derivative) calculated at multiple points within the interval. For each time step ( $t$ ):

1. Calculate the slopes (derivatives) ( $k_1$ ), ( $k_2$ ), ( $k_3$ ), and ( $k_4$ ) based on the current state and intermediate values
2. Update the state variable ( $N(t)$ ) using a weighted average of these slopes to achieve the next value.

#### c. Parameter Settings

Parameters must be carefully selected to ensure that the model accurately reflects realistic network conditions. Several parameters were set for the simulation based on typical network performance characteristics.

- **Attack Traffic Rate ( $(A(t))$ ):** A constant of 200 packets/second was chosen, representing a sustained and aggressive DDoS attack on the server.
- **Legitimate Traffic Rate ( $(\beta)$ ):** Set at 100 packets/second, this reflects a typical level of legitimate incoming traffic under normal operating conditions.
- **Server Capacity ( $(C)$ ):** The server's capacity was defined as 300 connections. This value is a point where the system experiences significant degradation in service quality due to limited processing capability.
- **Processing Rate ( $(\mu)$ ):** A processing efficiency of (0.9) requests per second indicates the server's capability to handle incoming connections effectively without delay under ideal circumstances.

- **Packet Loss Coefficient ( $\alpha$ ):** We set ( $\alpha$ ) at (0.5) to model the rate of packet loss as a function of the overflow connections. This parameter is crucial for understanding how aggressively the system responds to congestion.

#### d. Implementation

The model was implemented using Python, leveraging libraries such as NumPy and Matplotlib for numerical operations and data visualization, respectively. The implementation includes:

- **Time Discretization:** The continuous time range from (0) to (60) seconds was discretized into 1000 intervals to maintain high resolution during simulation.
- **Initialization:** Active connections ( $(N_{\text{active}})$ ) were initialized to zero, reflecting a clear system before the attack.
- **Time Loop:** A loop was created to simulate time progression, where active connections were calculated based on the previous state and the parameters set. Conditions checked if connections exceeded capacity, applying the appropriate packet loss function.
- **Data Collection:** As the simulation progressed, active connections and packet loss data were collected to visualize and analyze the impact of the DDoS attack on network performance.

#### e. Evaluation of Results

After running the simulation, a range of analyses was conducted to evaluate the model's behavior:

- **Plotting Results:** Graphical visualizations were created to present the changes in active connections and packet loss over time, particularly highlighting the effects of the DDoS attack initiated at the 10-second mark.
- **Interpretation:** Each plot was analyzed to identify trends in the data, specifically looking for increases in active connections and corresponding packet loss during the attack period.
- **Insights on Mitigation:** The results were further analyzed to derive insights into how various parameters affect the robustness of networks under DDoS attacks, facilitating discussions on effective mitigation strategies based on observed trends.

## IV. RESULTS

### a. Active Connections Over Time

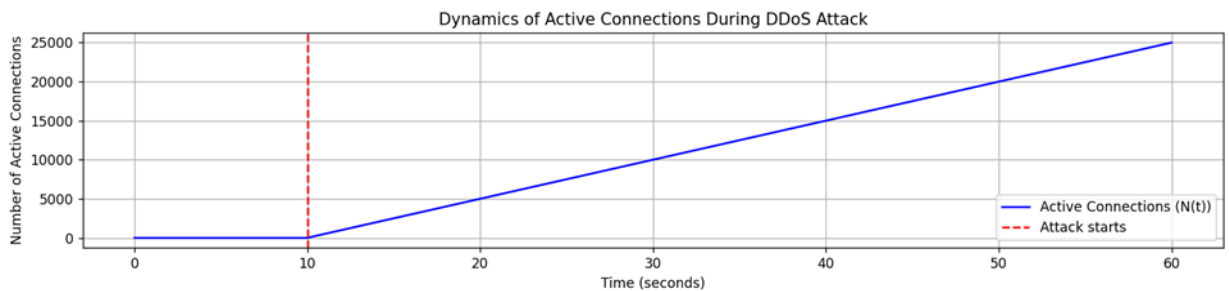


Figure 1. illustrates the dynamics of active connections in the network during a DDoS attack

### b. Packet Loss

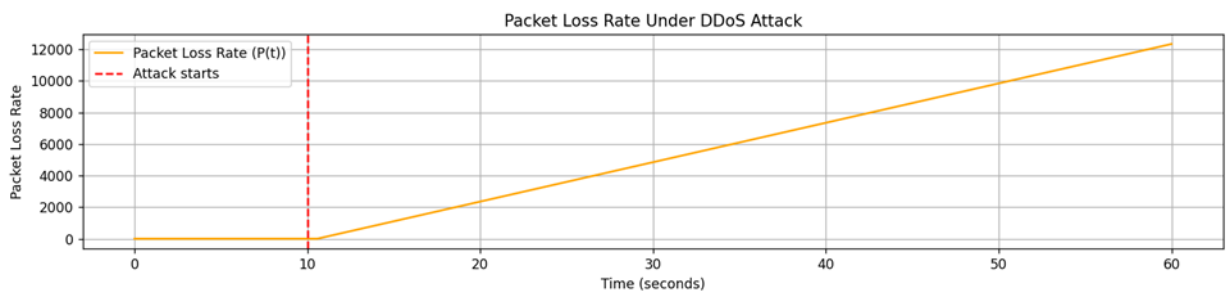


Figure 2. Shows the relationship between packet loss and the number of active connections



## V. CONCLUSIONS

The mathematical model developed in this study illustrates the intricate dynamics of network traffic during DDoS attacks through differential equations. The simulation results reveal how rapidly increasing attack traffic can lead to severe congestion, resulting in high packet loss and degradation of legitimate traffic. These findings underscore the importance of proactive measures and robust security systems to mitigate the effects of DDoS attacks and ensure network performance and availability. Future work will focus on exploring various mitigation strategies and their effectiveness in reducing the impact of such attacks on network traffic dynamics. By utilizing advanced modeling techniques, network administrators and cybersecurity professionals can better understand, predict, and respond to the challenges posed by DDoS attacks.

## REFERENCES

- [1] Kadane, J. B. Theory of Network Traffic Modeling Under DDoS Attacks / J. B. Kadane, A. R. Smith. New York: Springer, 2020. 312 p.
- [2] Roberts, K. J. Attacks on Internet Infrastructures: Theory and Practice / K. J. Roberts, L. M. Bennett. Seattle: University of Washington Press, 2021. 280 p.
- [3] Garner, L. H. Mathematical Modeling of Network Traffic Dynamics / L. H. Garner, E. A. Wilson. Chicago: University of Chicago Press, 2022. 350 p.
- [4] Miller, F. N. Game Theory and Its Applications in Network Security / F. N. Miller. Los Angeles: California State University Press, 2023. 200 p.
- [5] Bekiyeva, M. B. Numerical solution of a mathematical model that predicts a change in water pressure using the example of a real scale of groundwater / Ashgabat, 2022.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ СЕТЕВОГО ТРАФИКА ПРИ DDoS АТАКАХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

Бекиева М.Б.

Инженерно-технологический университет Туркменистана имени Огуз хана,  
Ашхабад, Туркменистан, [successbmb@gmail.com](mailto:successbmb@gmail.com)

Аннотация: В этой статье мы разрабатываем набор дифференциальных уравнений для моделирования динамики сетевого трафика при атаках DDoS (Distributed Denial of Service) путем анализа активных соединений и времени отклика сервера. Наша модель, фокусирующаяся на потере пакетов и ухудшении легитимного трафика, иллюстрирует изменение поведения с течением времени во время DDoS атак. Численное моделирование, реализованное с использованием метода Рунге-Кутты в Python, дает представление об эффективности стратегий смягчения последствий. Изучая взаимосвязь между атакующим и легитимным трафиком, наши результаты подчеркивают влияние DDoS атак на производительность сети и важность надежных механизмов безопасности для обеспечения доступности и качества услуг перед лицом киберугроз.

Ключевые слова: DDoS атаки, моделирование сетевого трафика, дифференциальные уравнения, производительность сервера, активные соединения, численное моделирование, кибербезопасность, математическое моделирование.

UDC 681.3

## SIMULATING NETWORK CONDITIONS AND DDoS ATTACK SCENARIOS USING NS-3 TECHNOLOGY

G. Orazdurdyeva

Oguz han Engineering and Technology University of Turkmenistan, Ashgabat, Turkmenistan,  
[gulshatorazdurdyewa3@gmail.com](mailto:gulshatorazdurdyewa3@gmail.com)

**Abstract:** The growing dependency on networked systems has made understanding and mitigating Distributed Denial of Service (DDoS) attacks increasingly vital. NS-3 (Network Simulator 3) is a widely-used discrete-event network simulator that enables researchers and practitioners to model, analyze, and evaluate networking protocols and scenarios. This article outlines the methods to simulate network conditions and DDoS attack scenarios using NS-3, providing a framework for testing network resilience and security protocols.

**Keywords:** NS-3, Network simulation, DDoS attacks, Performance metrics, Throughput, Packet loss, Network topology, Traffic patterns.

### 1. INTRODUCTION

**DDoS** The increasing frequency and sophistication of DDoS attacks pose significant threats to organizations operational capabilities and financial stability. A DDoS attack occurs when multiple systems flood targeted services with a high volume of traffic, rendering them unable to respond to legitimate requests. According to industry reports, the scale of DDoS attacks has grown exponentially, with some attacks reaching bandwidth levels of over 1 terabit per second.

Understanding the impact of DDoS attacks under various network conditions is essential for developing effective defense mechanisms. This research employs NS-3, a popular discrete-event network simulator, to provide a controlled environment for simulating network conditions and DDoS attack scenarios. NS-3 allows for the modeling of intricate network architectures and facilitates the experimentation of diverse traffic patterns and attack methodologies.

### 2. METHODOLOGY

#### 2.1 Defining Network Topology

Defining the network topology is a critical step in simulating realistic scenarios. The following describes how to set up the network elements:

**Nodes:**

*Client Nodes:* Represent users or compromised devices that will send requests to the server.

*Server Node:* The service that handles client requests, vulnerable to DDoS attacks.

*Attacker Nodes:* These represent malicious users or compromised nodes that will generate attack traffic.

*Switch/Router:* Facilitate data transfer between clients and server, providing structure and control to the network.

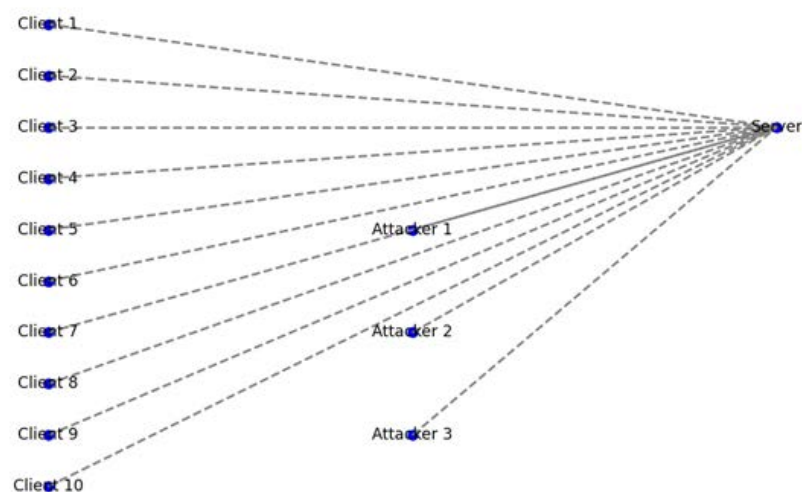


Figure 1. Network topology diagram

## Creating a Topology:

Use the NS-3 scripting interface to create and configure nodes programmatically, assigning their roles and interconnections. For example, (Figure-1):

```
NodeContainer clients;  
clients.Create (10); // Create 10 client nodes  
NodeContainer server;  
server.Create (1); // Create 1 server node  
NodeContainer attackers;  
attackers.Create (5); // Create 5 attacker nodes
```

### 2.2 Node Configuration and traffic generation

Each node in the simulation very much plays a specific role, and they need to be configured accordingly:

*Client Nodes:* Generate normal traffic to the server, simulating user behavior, such as sending HTTP requests.

*Server Node:* Responds to requests and handles incoming traffic from both legitimate clients and attackers.

*Attacker Nodes:* Execute DDoS attacks by flooding the server with malicious requests, testing the resilience of the network under duress.

*Switch/Router:* Responsible for directing traffic between clients and servers and may have additional features such as queuing or load balancing.

Normal traffic generation simulates typical user behavior, enabling researchers to establish a baseline for network performance. This can be configured using NS-3 applications:

*OnOffApplication:* Commonly used to simulate traffic flows, allowing users to configure the rate of data transmission:

```
OnOffHelper onoff ("ns3::TcpSocketFactory", InetSocketAddress (serverIp, server Port));  
onoff.SetConstantRate(DataRate("448kb/s")); // Set the data rate for normal traffic
```

### 2.3 DDoS Attack Traffic

DDoS attack traffic simulates malicious activity designed to overwhelm the server:

*UDP Flood:* Simulating DDoS attacks can begin with a UDP flood, targeting the server to exhaust its resources by rapidly sending a high volume of UDP packets:

```
for (int i = 0; i < numAttackers; i++) {  
    // Attack traffic generation here, looping to create high traffic}
```

*SYN Flood:* Exploits the TCP handshake mechanism by sending a flood of SYN packets that the server must respond to, causing resource exhaustion.

## 2.4. Performance Metrics

### 2.4.1. Throughput

Throughput is defined as the rate of successful message delivery over a communication channel within a specific time frame.

*Measurement:* Typically measured in bits per second (bps) or packets per second (pps), throughput can be monitored using built-in NS-3 tracing capabilities to log how much data the server successfully processes during the simulation.

### 2.4.2. Packet Loss

Packet loss is an essential metric that indicates the percentage of packets that are sent but never reach their destination, which is critical in assessing overall network performance.

*Significance:* High packet loss can signal network congestion or an ineffective attack mitigation strategy, directly impacting user experience. This is measured using NS-3's packet tracing functionality to compare sent vs. received packets.

### 2.4.3. Latency

Latency represents the time taken for a packet to traverse from the source node to the destination node.

Recording: Latency is typically recorded in milliseconds and can be monitored using timestamps in NS-3, allowing for analysis of how DDoS attacks impact response times.

### 2.4.4. Resource Utilization

Monitoring CPU and memory usage on the server provides insights into how effectively it handles traffic loads during normal operations and DDoS attacks.

Monitoring Tools: NS-3 provides features to track resource consumption, helping researchers understand the limits of their systems and the efficacy of any mitigative measures implemented during the simulation.

## 3. RESULTS AND DISCUSSION

### 3.1. Data Collection

During the simulation, various performance metrics were systematically logged to evaluate the network's behavior under normal and DDoS attack conditions. The following steps were taken to ensure comprehensive data collection:

#### *Tracing and Logging:*

NS-3 allows for extensive tracing functionalities. Specific event tracing options were enabled within the simulation scripts to capture relevant statistics, including throughput, packet loss, latency, and resource utilization.

For example, packet transmission and reception events were logged using built-in trace functions:

Config: `Connect ("/NodeList/*/ApplicationList/*/Tx", MakeCallback(&MyTxCallback));`

Config: `Connect ("/NodeList/*/ApplicationList/*/Rx", MakeCallback(&MyRxCallback));`

#### *Output Files:*

The results of the logged metrics were written to output files at the end of each simulation run. This allows for easy analysis post-simulation. The metrics were recorded in a structured format that simplifies the importation into data analysis tools or visualization libraries.

Additionally, tools like gnuplot can be utilized to visualize the results directly from the output files.

#### *Performance Metrics:*

Metrics captured included:

Throughput (Kbps)

Packet Loss (Percentage)

Latency (Milliseconds)

CPU and Memory Utilization (Percentage)

### 3.2. Throughput analysis and packet loss analysis

Throughput is a critical measure of network performance that represents the rate at which data is successfully delivered to the server. In the conducted simulations, the following observations were made:

*Normal Conditions:* Under standard operating conditions, clients successfully transmitted data to the server at rates reaching up to *500 Kbps*.

*Under Attack:* During DDoS attack scenarios where a UDP flood was initiated, throughput dropped significantly. For instance, throughput plummeted to approximately *50 Kbps* during peak attack times due to congestion and server resource exhaustion.

Packet loss occurs when packets of data sent across the network fail to reach their destination. In the simulation.

Normal Conditions: Packet loss was minimal, averaging around 1%.

During DDoS Attacks: Significant increases in packet loss were observed, spiking to approximately 70% when the server was under sustained UDP flood attacks.

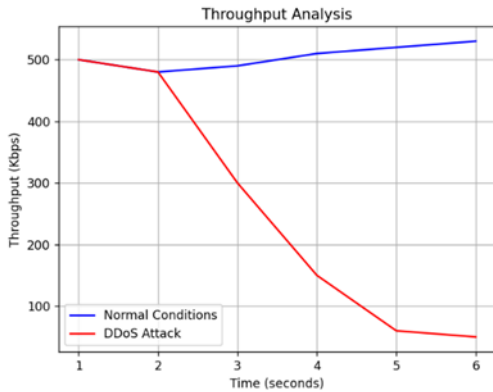


Figure 2. Example throughput data

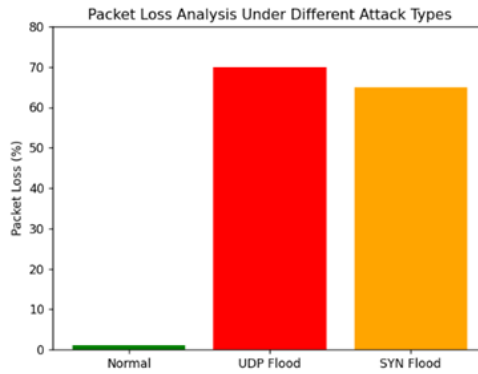


Figure 3. Packet loss example data

### 3.3 Latency Comparison and Resource utilization

Latency measures the delay in packet delivery from source to destination. This is crucial for user experience and network performance.

**Normal Latency:** Latency remained consistent at around 20 ms under normal conditions. **During DDoS Attacks:** Latency increased sharply, reaching over 300 ms, indicating substantial delays in service response times during attack scenarios.

Monitoring CPU and memory utilization provided insights into how the server copes with varying traffic loads:

**Normal Scenario:** CPU utilization averaged around 20%, with memory usage stable.

**During Attacks:** CPU utilization surged to over 85%, and memory consumption increased under extreme DDoS circumstances, reflecting the additional processing required to cope with attack traffic.

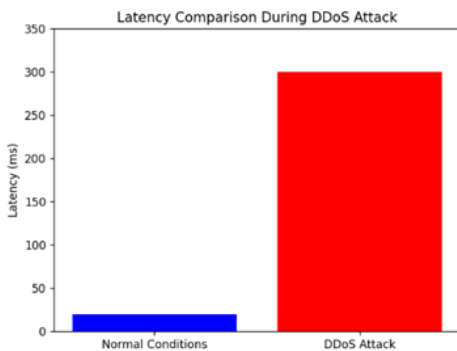


Figure 4. Latency data example

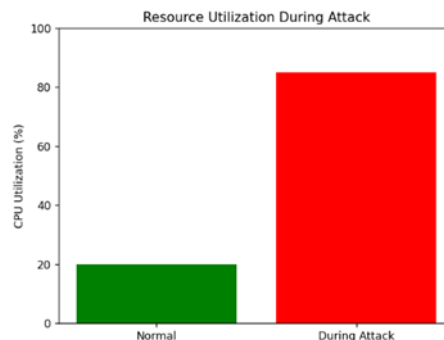


Figure 5. CPU Usage example data

### 3.4. Insights and Implications

The results obtained from the simulations provided valuable insights into the resilience of the network under various attack scenarios:

**Network Vulnerabilities:** The drastic drops in throughput and spikes in latency and packet loss indicate that unprepared networks are highly vulnerable to DDoS attacks, which can significantly impair service delivery.

**Need for Defensive Strategies:** The findings underline the necessity for robust DDoS mitigation strategies, such as:

Overall, the results obtained from these simulations provide a deeper understanding of the vulnerabilities faced by network architectures in the face of DDoS attacks and prompt a re-evaluation of current strategies to enhance resilience and security.

## 4. CONCLUSIONS

This article has effectively demonstrated the capabilities of NS-3 as a powerful tool for simulating network conditions and assessing the impact of Distributed Denial of Service (DDoS) attacks on network performance. Through the structured approach of designing various network topologies, generating representative traffic

patterns, and implementing realistic attack scenarios, we gained vital insights into the vulnerabilities that modern networks face.

#### REFERENCES

- [1] Kadane, J. B. Theory of Network Traffic Modeling Under DDoS Attacks / J. B. Kadane, A. R. Smith. New York: Springer, 2020. 312 p.
- [2] Roberts, K. J. Attacks on Internet Infrastructures: Theory and Practice / K. J. Roberts, L. M. Bennett. Seattle: University of Washington Press, 2021. 280 p.
- [3] Mirkovic, D. Distributed Denial of Service (DDoS) Attacks: Understanding and Mitigation Strategies / D. Mirkovic, P. Reiher. San Francisco: Morgan Kaufmann, 2017. 250 p.
- [4] Chen, W. Advanced Persistent Denial-of-Service Attacks: An In-Depth Analysis / W. Chen, L. Zhang. Boston: Elsevier, 2019. 224 p.
- [5] Vasudevan, G. Cybersecurity for Networked Systems: Defense Mechanisms Against DDoS Attacks / G. Vasudevan, R. Sharma. Chicago: Wiley, 2022. 300 p.
- [6] Anantharam, V. P. Network Simulation and Security Analysis Using NS-3 / V. P. Anantharam, R. B. Kumar. New Jersey: Wiley & Sons, 2018. 320 p.

#### МОДЕЛИРОВАНИЕ УСЛОВИЙ СЕТИ И СЦЕНАРИЯ DDoS АТАК С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТЕХНОЛОГИИ NS-3

Ораздурдыева Г.

Инженерно-технологический университет Туркменистана имени Огуз хана,  
Ашхабад, Туркменистан, [gulshatorazdurdyewa3@gmail.com](mailto:gulshatorazdurdyewa3@gmail.com)

Аннотация: Растущая зависимость от сетевых систем делает понимание и смягчение атак Distributed Denial of Service (DDoS) все более важными. NS-3 (Network Simulator 3) – это широко используемый сетевой симулятор дискретных событий, который позволяет исследователям и практикам моделировать, анализировать и оценивать сетевые протоколы и сценарии. В этой статье описываются методы моделирования сетевых условий и сценариев DDoS атак с использованием NS-3, предоставляющих фреймворк для тестирования устойчивости сети и безопасности протоколов.

Ключевые слова: NS-3, сетевое моделирование, DDoS атаки, показатели производительности, пропускная способность, потеря пакетов, топология сети, шаблоны трафика.

UDC 621.396.677

## ANALYSIS OF TEMPERATURE DEPENDENT PARAMETERS OF GRAPHENE/n-Si HETEROJUNCTION

L.A. Dronina<sup>1</sup>, N.G. Kovalchuk<sup>1</sup>, A.L. Danilyuk<sup>1</sup>, E.V. Lutsenko<sup>2</sup>, A.V. Danilchuk<sup>2</sup>, S.L. Prischepa<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus,  
[lizadronina@yandex.by](mailto:lizadronina@yandex.by)

<sup>2</sup>Stepanov Institute of Physics of NAS Belarus, Minsk, Republic of Belarus

**Abstract:** In this study, the forward bias  $I$ - $V$  characteristics of graphene/n-Si heterojunctions were studied in the wide temperature range of 10–320 K in order to get detailed information on the barrier heights distribution ( $\varphi_B$ ). The Schottky parameters ( $\varphi_B$ ,  $\eta$ ) are estimated in the framework of the thermoelectron emission theory using Cheung-Cheung method considering the presence of the interface native oxide layer. At room temperature, we obtain an ideality factor of about 2.5 and a Schottky barrier height of ~0.22 eV, which reduces at lower temperatures. A quantitative analysis of the inhomogeneity in Schottky barrier heights is presented using the potential fluctuation model proposed by Werner and Guttler.

**Keywords:** graphene, chemical vapor deposition, Schottky diode parameters, barrier heights distribution.

### I. INTRODUCTION

Graphene has been widely studied as a promising next generation optoelectronic material due to potential advantages such as ultrahigh carrier mobility, ambipolar behavior, inherent good chemical stability and good compatibility with other semiconductor materials [1].

At the same time,  $I$ - $V$  measurements performed in a wide temperature range are an effective way to evaluate the quality of contacts and for the extraction of fundamental parameters such as the Schottky barrier height (SBH) and ideality factor ( $\eta$ ).

Also, the accuracy of determining the main parameters of the heterojunction in a wide temperature range is determined by an adequate choice of the method of elaboration of the experimental data, taking into account the quality of the metal/semiconductor interface. For graphene/silicon heterojunctions, this is especially relevant, since the charge states arising at the interface, surface roughness, loose contact of graphene with the material, and natural inhomogeneity of the oxide introduce distortions into the ideal picture of graphene contact with another material.

### II. RESULTS AND DISCUSSION

For the device fabrication, graphene growth was performed through the atmospheric pressure chemical vapor deposition using methane as a precursor. After the growth graphene was transferred onto structured n-Si substrates with metallic contacts by a wet-chemical process without using polymeric frame. The area of the heterojunction  $A$  formed was  $A = 0.087 \text{ cm}^2$ . More details about samples fabrication and characterization can be found elsewhere [2,3].

Figure 1 shows the dark  $I$ - $V$  characteristics of the graphene/Si heterojunctions under a voltage bias from –5 to +5 V (40 mV steps) plotted in a semilogarithmic scale. The experimental data follows the typical Schottky heterojunction dependency (inset to Fig. 1).

To determine the Schottky heterojunction parameters over wide temperature range, the experimental forward biased  $I$ - $V$  curves at low voltages were analyzed at each temperature within the Cheung-Cheung method, considering the presence of the interface native oxide layer [4]. In this case, the forward biased  $I$ - $V$  characteristic can be expressed according to the following expression,

$$I = AA^*T^2 e^{-\sqrt{\chi}\delta} e^{-\frac{\varphi_B}{kT}} \left[ e^{\frac{q(V-IR_S)}{\eta kT}} - 1 \right], \quad (1)$$

where  $A^*$  is the Richardson constant ( $\approx 112 \text{ A}\cdot\text{cm}^{-2}\cdot\text{K}^{-2}$  for n-Si),  $k$  is the Boltzmann constant,  $q$  is an elementary charge,  $\chi$  (in eV) is the mean tunneling barrier height and  $\delta$  (in Å) is the interface oxide thickness which was assumed to be 2–3 nm. For  $V - IR_S \gg \eta kT/q$  Eq. (1) provides

$$\frac{dV}{d(\ln J)} = R_S A J + \frac{\eta kT}{q}. \quad (2)$$

where  $J = I/A$  is the current density. From Eq.(2) it follows that the derivative  $dV/d(\ln J)$  should be directly proportional to the current density  $J$ . From the fitting procedure the  $R_S$  and the  $\eta$  values are obtained.

Employing the estimated from Eq. (2) the  $\eta$  values, the SBH ( $\varphi_B$ ) and again the  $R_s$  can be deduced by an additional Cheung's equation, defined as [4]:

$$H(J) \equiv V - \frac{\eta kT}{q} \ln \left( \frac{J}{A^* T^2 e^{-\sqrt{\chi} \delta}} \right) = R_s A J + \eta \varphi_B / q. \quad (3)$$

Obviously, plot  $H(J)$  also obeys a straight linear relationship.

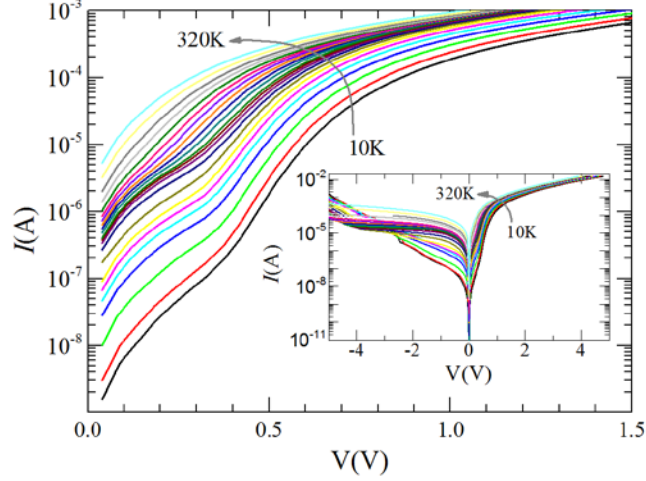


Figure 1. Forward biased  $I$ - $V$  characteristics of the graphene/Si heterojunction under dark conditions measured in the  $T$  range of 10 – 320 K. The inset shows the experimental data of the graphene/Si heterojunction under a voltage bias from  $-5$  to  $+5$  V plotted in a semilogarithmic scale

The analysis of the measured temperature-dependent  $I$ - $V$ - $T$  characteristics of the heterojunctions by using the thermionic emission theory reveals a decrease in the zero-bias SBH and an increase in the  $\eta$  with the decrease of the temperature (Figure 2a). Such temperature dependencies of both  $\eta$  and SBH indicate the influence of inhomogeneities at the graphene/n-Si interface, which are also mentioned in several studies [5,6]. In order to explain the origin of anomalous temperature behavior of SBH and  $\eta$ , the temperature dependent barrier inhomogeneities were evaluated assuming the Gaussian distributions of the SBH [5]. As per this method, the total forward bias current flowing over all possible barrier heights is then given by

$$J(V) = \int_0^{+\infty} J(\varphi_B, V) P(\varphi_B) d\varphi_B, \quad (4)$$

Gaussian distribution expression of the barrier heights with a mean value of  $\varphi_{Bm}$  and standard deviation  $\sigma_B$  has the form

$$P(\varphi_B) = \frac{1}{\sigma_B \sqrt{2\pi}} e^{-\left(\frac{(\varphi_B - \varphi_{Bm})^2}{2\sigma_B^2}\right)}, \quad (5)$$

The apparent barrier height ( $\varphi_{ap}$ ) has the form [7]

$$\varphi_{ap} = \varphi_{Bm} - \frac{\sigma_B^2}{2kT} + kT \ln \left[ 1 + \operatorname{erf} \left( \frac{\varphi_{Bm}}{\sqrt{2}\sigma_B} \right) \right] - kT \ln \left[ 1 + \operatorname{erf} \left( \frac{\varphi_{Bm} - \frac{\sigma_B^2}{kT}}{\sqrt{2}\sigma_B} \right) \right], \quad (6)$$

where erf denotes the error function.

The plot of  $\varphi_{ap}$  versus  $1/2kT$  of studied heterojunction is shown in Figure 2b. Utilizing a model tailored to thermionic emission over a Gaussian distribution of barriers, both the mean barrier height ( $\varphi_{Bm}$ ) and the standard deviation ( $\sigma_B$ ) in the distribution were extracted from experimental data via multiple linear regression (Figure 2b). The obtained graphene/Si heterojunction parameters are summarized in Table 1.

To obtain more accurate values, the conventional activation energy equation can be modified under the assumption of Gaussian distribution of barrier heights, as follows

$$\ln \left( \frac{I_0}{T^2 A A_{eff}^*} \right) = -\frac{\varphi_B}{kT} + \left( \frac{\sigma_B^2}{2k^2 T^2} \right), \quad (7)$$

where saturation current ( $I_0$ ) can be extracted from the experiment by linear fitting of the forward  $I$ - $V$ - $T$  characteristics.



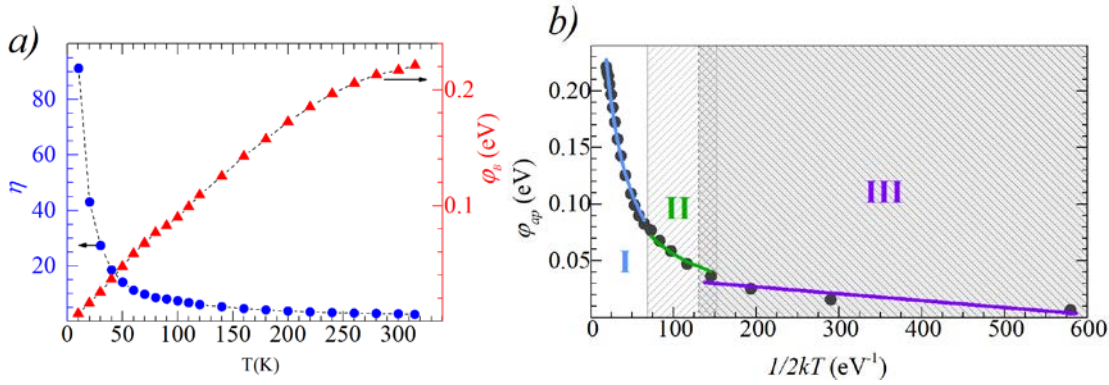


Figure 2. a) Ideality factor (circles, left Y-axis) and SBH (triangles, right Y-axis) as a function of  $T$  obtained using Cheung's method. b) Apparent SBH as a function of  $1/2kT$  of the graphene/Si heterojunction

The modified Richardson plot for the graphene/Si heterojunction is shown in Figure 3b. From the fitting procedure the values of  $\phi_{Bm}$  and effective Richardson constant ( $A_{eff}^*$ ) were extracted. It should be noted that in the calculations of the effective Richardson constant ( $A_{eff}^*$ ) the full contact area between graphene and Si was taken as a constant ( $A = 0.087cm^2$ ).

The presence of three different linear fits indicates that there are effective three Gaussian distributions of barrier heights. These values are listed in Table 1. The variations in the values of effective Richardson constants ( $A_{eff}^*$ ) for three temperature regions are lower than the known value for  $n$ -Si, that is assumed to be  $\approx 112 A \cdot cm^{-2} \cdot K^{-2}$ .

Table 1. Temperature-dependent parameters of graphene/n-Si heterojunction

Temperature range, $T$ (K)	Cheung's method		Werner and Guttler method		Modified Richardson plot	
	$\eta$	$\phi_B$ (eV)	$\phi_{Bm}$ (eV)	$\sigma_B$ (eV)	$A_{eff}^*$ ( $A \cdot cm^{-2} \cdot K^{-2}$ )	$\phi_{Bm}$ (eV)
III (10–40)	91-18.6	0.0067-0.037	0.039	0.008	0.00012	0.048
II (40–80)	18.6-8.5	0.037-0.077	0.160	0.038	29.500	0.275
I (90–320)	8.0-2.5	0.08-0.22	0.385	0.095	67.823	0.736

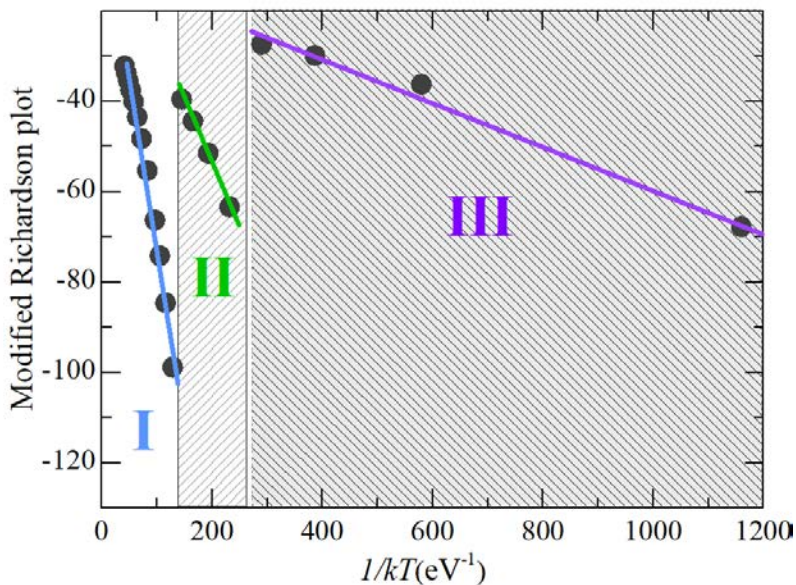


Figure 3. Modified Richardson plot for graphene/Si heterojunction. The solid lines represents the best fit to the experimental data in each region.

### III. CONCLUSIONS

The parameters of graphene/Si heterojunction, such as ideality factor, Schottky barrier height and effective Richardson constant values over a wide temperature range of 10–320 K are presented. The obtained results, which were based on thermoelectron emission theory, exhibited an increase of  $\eta$  and a decrease of  $\varphi_B$  with the decreasing temperature and  $A_{eff}^*$  was found to be much lower than its theoretical value (for  $n$ -Si  $\approx 112 \text{ A}\cdot\text{cm}^{-2}\cdot\text{K}^{-2}$ ). The differences in the  $A_{eff}^*$  values can be caused by spatially inhomogeneous SBHs and potential fluctuations at the interface that consist of low and high barrier areas. In this case, inhomogeneities of SBH can be caused by poor interface quality, inhomogeneity of surface states and dislocations, as well as inhomogeneous thickness of the dielectric interfacial layer. Besides, inhomogeneities and/or residual contamination in the interfacial region may be introduced during the copper etching and subsequent transfer process of the graphene film onto  $n$ -Si substrates.

### REFERENCES

- [1] Shin D. H., Choi S. H. Graphene-based semiconductor heterostructures for photodetectors // *Micromachines*. 2018. Vol. 9, No. 7. P. 350.
- [2] Femtosecond light pulse response of photodetectors based on Graphene /  $n$ -Si heterojunctions. M. Scagliotti [et al.] // *Carbon*. 2019. Vol. 152. P. 643–651.
- [3] Shottky barrier and ideality factor of CVD graphene- $n$ -Si heterojunction/ I. V. Komissarov [et al.] // 19th International Workshop on New Approaches to High-Tech. NDTCS. 2021.– P. 91-93.
- [4] Forward-bias diode parameters, electronic noise, and photoresponse of graphene/silicon Schottky junctions with an interfacial native oxide layer/ An Y. [et al.] // *Journal of Applied Physics*. 2015. Vol. 118, No. 11. P. 114307.
- [5] Werner J. H. Barrier inhomogeneities at Schottky contacts / J. H. Werner, H. H. Güttler // *Journal of applied physics*. 1991. Vol. 69, No. 3. P. 1522-1533.
- [6] Tung R. T. The physics and chemistry of the Schottky barrier height/ R. T. Tung // *Applied Physics Reviews*. 2014. Vol. 1, No. 1. P. 011304.
- [7] Numerical modeling of Schottky barrier diode characteristics / Splith D. [et al.] // *Physica Status Solidi A*. 2021. Vol. 218, No. 12. P. 2100121.

### АНАЛИЗ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ ПАРАМЕТРОВ ГЕТЕРОПЕРЕХОДА ГРАФЕН/ $n$ -Si

Дроница Е.А.<sup>1</sup>, Ковальчук Н.Г.<sup>1</sup>, Данилюк А.Л.<sup>1</sup>, Луценко Е.В.<sup>2</sup>, Данильчик А.В.<sup>2</sup>, Прищепа С.Л.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
Минск, Республика Беларусь, [lizadronina@yandex.by](mailto:lizadronina@yandex.by)

<sup>2</sup>Институт физики имени Б.И. Степанова НАН Беларуси, Минск, Республика Беларусь

Аннотация: В данной работе исследовались прямые темновые вольтамперные характеристики гетероперехода графен/ $n$ -Si в широком температурном диапазоне 10-320 К с целью получения детальной информации о распределении высоты барьеров ( $\varphi_B$ ). Основные параметры диода Шоттки ( $\varphi_B$ ,  $\eta$ ) оценены в рамках теории термоэлектронной эмиссии по методу Чунгов с учетом наличия межфазного оксидного слоя. Установлено, что при комнатной температуре коэффициент неидеальности достигает значения  $\sim 2,5$ , а высота барьера Шоттки  $\sim 0,22$  эВ. Количественный анализ неоднородности высоты барьера Шоттки представлен с использованием модели предложенной Вернером и Гуттлером.

Ключевые слова: графен, химическое парофазное осаждение, параметры диода Шоттки, распределение высоты барьеров.

УДК 621.383.52

## МОДЕЛИРОВАНИЕ МОЩНОГО ПОЛЕВОГО ТРАНЗИСТОРА НА ОСНОВЕ AlGaN

Ворсин Н.Н., Гладышук А.А., Кушнер Т.Л., Тарасюк Н.П., Чугунов С.В.

Брестский государственный технический университет, Брест, Республика Беларусь, [phys@bstu.by](mailto:phys@bstu.by)

Аннотация: Тройное соединение AlGaN с шириной запрещенной зоны от 3,4 до 6,2 эВ является перспективным материалом для построения различных электронных приборов: диодов, транзисторов, лазеров, СВЧ микросхем. Замена кремния на GaN позволяет повысить рабочую температуру, граничную частоту, уменьшить в несколько раз потери переключения и проводимости в силовых приборах. Компьютерное моделирование физических процессов является необходимым элементом освоения новых электронных устройств. В настоящей работе представлены результаты моделирования мощного полевого транзистора на основе полупроводникового соединения AlGaN.

Ключевые слова: гетеропереходный транзистор, нитрид галлия, нитрид алюминия, диффузионно-дрейфовая модель, градиент электронной плотности, поляризация, вольтамперная характеристика.

### I. ВВЕДЕНИЕ

Гетеропереходные полевые транзисторы (в англоязычной литературе – HEMT) на основе нитрида галлия обладают определенными характеристиками, которые недостижимы для приборов на основе кремния [1]. Наличие у полупроводника GaN запрещенной зоны величиной 3,4 эВ позволяет устройствам на основе этого соединения работать при высоких температурах. Кроме того, GaN имеет высокое значение напряженности поля пробоя, примерно 3,3 МВ/см. Это на порядок выше по сравнению с аналогичным параметром у кремния, что позволяет создавать на основе GaN так называемые высоковольтные приборы. Гетеропереход на границе AlGaN/GaN создает двумерный электронный газ (далее – ДЭГ) высокой плотности, порядка  $10^{13}$  см<sup>-2</sup>. Высокая подвижность электронов, образующих ДЭГ позволяет утверждать, что гетеропереходные полевые транзисторы (далее – ГПТ) на основе AlGaN/GaN могут быть использованы для создания мощных высокоскоростных приборов, так как обладают низким сопротивлением канала и высокой плотностью тока [2]. В настоящей работе описана созданная компьютерная модель ГПТ AlGaN/GaN с простым плоским затвором и размерами, использованными в опытном производстве.

### II. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Структура и размеры (в микронах) моделируемого транзистора показана на рисунке 1. Она состоит из канального слоя GaN толщиной 0,4 мкм, который через промежуточный слой AlN опирается на подложку. Толщина этого слоя должна быть сравнительно большой для уменьшения механических напряжений в верхней его части, обусловленных рассогласованием кристаллической структуры его решетки в нижней части с решеткой подложки.

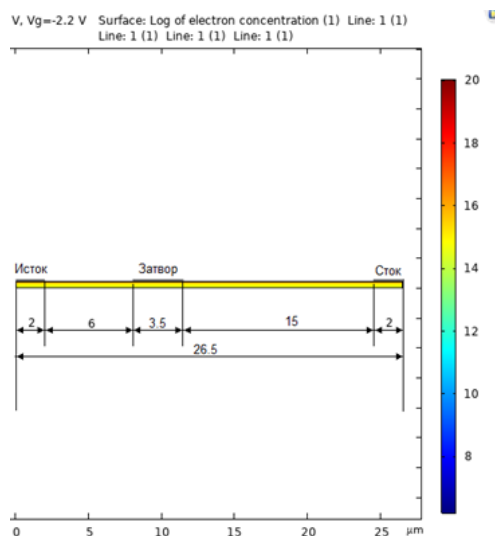


Рисунок 1. Размеры структуры гетеропереходного полевого транзистора

Сверху на каналный слой нанесен барьерный слой AlGaIn толщиной 0,02 мкм. На рисунке 1 каналный слой обозначен желтым цветом, барьерный слой – красным (почти незаметным). Рисунок 2 иллюстрирует структуру в увеличенном виде у правого края затвора.

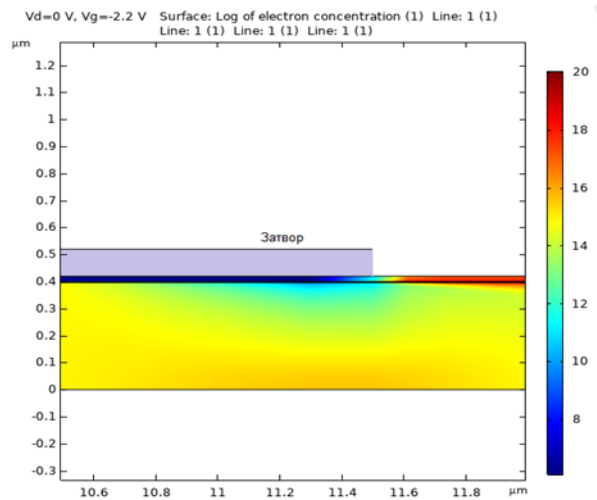


Рисунок 2. Цветовая картина электронной плотности у правого края затвора

Из-за разности ширины запрещенной зоны барьерного и каналного слоев на границе их соприкосновения образуется двумерный слой электронного газа, выполняющий роль канала транзистора. На рисунках с цветовым представлением концентрации свободных электронов этот слой окрашен в темно-красный цвет. Над каналом расположен металлический затвор Шоттки с достаточной работой выхода (предполагается никелевый).

Гексагональная структура кристаллической решетки GaN приводит к эффектам внутренней поляризации в материале и появлению внутреннего электрического поля [3]. Эти эффекты учитываются в модели путем введения в нее связанных зарядов на поверхностях раздела. Предварительно рассчитываются модули векторов собственной и пьезоэлектрической поляризации, затем в модель вводится соответствующий поверхностный заряд [4].

Результаты моделирования представлены ниже в виде графиков некоторых зависимостей. На рисунке 3 показана зависимость концентрации свободных электронов от вертикальной координаты. Видно, что на вершине каналного слоя имеет резкий пик, соответствующий наличию в этой области ДЭГ. Если проинтегрировать распределение плотности свободных электронов по всей высоте структуры, то получим так называемую листовую плотность электронного газа. Этот параметр легко измеряется, и его экспериментальное значение составляет  $9,0 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ . Значение этой же физической величины, получаемое путем интегрирования, равно  $7,3 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ , что можно считать хорошим соответствием экспериментальному результату.

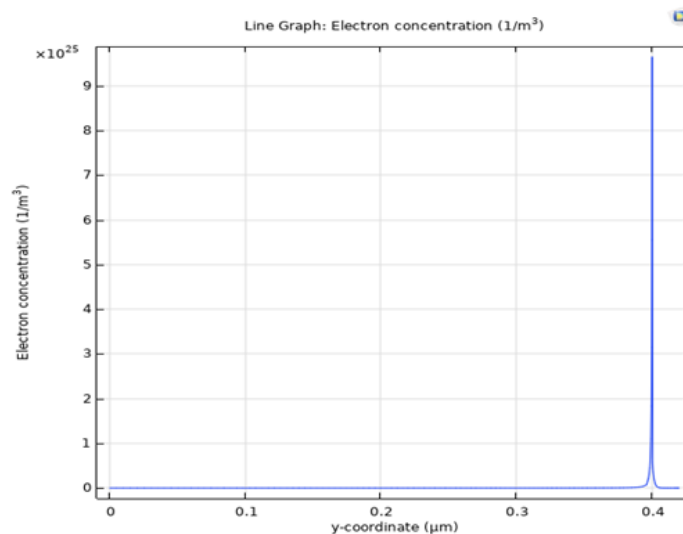


Рисунок 3. Распределение плотности свободных электронов по вертикальной координате

На рисунке 4 показаны графики плотности канального (стокового) тока, как функции вертикальной координаты. Поскольку представлены графики для всех возможных напряжений смещения, вся область двумерного газа оказывается «заполненной» функциональными зависимостями. Однако, видно, что ток присутствует только в области двумерного газа.

Оценить точность моделирования позволяют также вольтамперные характеристики транзистора, поскольку являются легко измеряемыми. На рисунке 5 представлены графики выходных ВАХ, выдаваемых моделью. Форма кривых типична для транзисторов, величины стокового тока несколько отличаются от полученных экспериментальных данных, однако, погрешность не превышает 20 %.

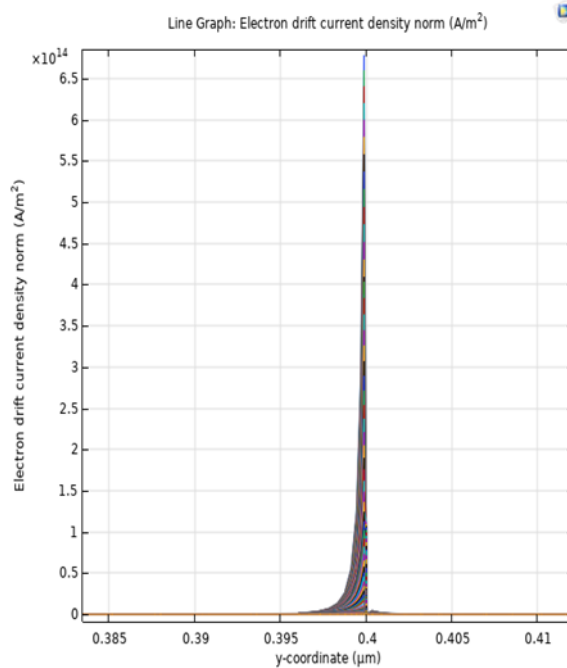


Рисунок 4. Распределение плотности канального тока по вертикальной координате

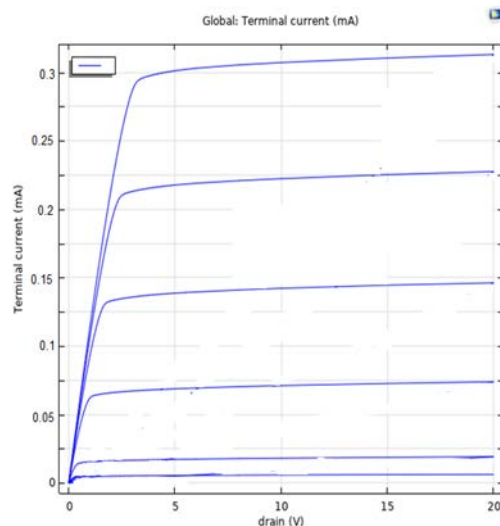


Рисунок 5. Графики семейства выходных ВАХ, рассчитанных компьютерной моделью

Модуль «Полупроводники» программного обеспечения COMSOL Multiphysics содержит мини модели контактов металла с полупроводником, что избавляет исследователей от специального их моделирования. Используются два типа контактов: невыпрямляющие контакты для истока и стока, а также контакт Шоттки – для затвора. Отметим, что высота барьера Шоттки для гетероструктуры AlGaIn/GaN с «напряженным» слоем AlGaIn отличается от значений, измеренных для их соответствующих объемных «ненапряженных» аналогов. В гетероструктурах AlGaIn/GaN происходит

снижение высоты барьера Шоттки за счет поляризационных эффектов. Более того, обычная теория термоэлектронной эмиссии не может быть применена из-за сильной пьезоэлектрической поляризации в напряженном слое AlGa<sub>N</sub>.

### III. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Созданная компьютерная модель гетеропереходного полевого транзистора на основе соединения AlGa<sub>N</sub> дает результаты, близкие к экспериментальным данным, что позволяет оптимизировать изготовление таких приборов по параметрам размеров и изучить влияние легирования областей структуры на некоторые физические характеристики. Применение моделирования на этапе подготовки опытных образцов, элементной базы электроники, является эффективным как в области фундаментальных, так и прикладных исследований. Моделирование и оптимизация играют существенную роль в физике и технологиях при создании новых материалов, гетероструктур, электронных устройств на их основе [5].

### БЛАГОДАРНОСТЬ

Исследования проводятся при выполнении НИР «Моделирование физических процессов в p-i-n и Шоттки диодах и транзисторах на основе гетероструктур AlGa<sub>N</sub>», по заданию 2.1 «Разработка и исследование технологий роста нитридных гетероструктур, технологий изготовления компонентов и устройств опто-, СВЧ- и силовой электроники на основе полупроводниковых материалов и структур» в рамках ГПНИ «Фотоника и электроника для инноваций», подпрограммы «Опто- и СВЧ- электроника» на 2021-2025 годы. Финансирование осуществляет Министерство образования Республики Беларусь.

### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Электроника на основе нитрида галлия / Р. Куэй: пер. с англ. под ред. А. Г. Васильева. – М.: Техносфера, 2011. 592 с.
- [2] Design and analysis of 10 nm T-gate enhancement-mode MOS-HEMT for high power microwave applications. / T. Zine-eddine [et al.] // J. of Sci.: Adv. Mater. Devices. 2019. № 4. P. 180–187.
- [3] Исследование поляризаций нитридных соединений (Al, Ga, AlGa)<sub>N</sub> и зарядовой плотности различных интерфейсов на их основе / И. А. Супрядкина [и др.] // Физика и техника полупроводников. 2013. Том 47, вып. 12. С. 1647–1652.
- [4] Моделирование и разработка AlGa<sub>N</sub> гетеропереходного полевого транзистора / Н. Н. Ворсин [и др.] // Вестник Брестского государственного технического университета. 2023. № 1 (130). С. 76–82.
- [5] Vorsin, N. Modeling AlGa<sub>N</sub> p-i-n photodiodes / N. Vorsin, A. Gladyschuk, T. Kushner [et al.] // Doklady BGUIR.. – Vol. 19, No 8. – 2021. – С. 50–57.

### MODELING AlGa<sub>N</sub> HETEROJUNCTION FIELD-EFFECT TRANSISTOR

N. Vorsin, A. Gladyschuk, T. Kushner, N. Tarasiuk, S. Chugunov

Brest State Technical University, Brest, Republic of Belarus, [phys@bstu.by](mailto:phys@bstu.by)

Abstract: AlGa<sub>N</sub> ternary alloys with a band gap of 3.4 to 6.2 eV are promising materials for the construction of various electronic devices: diodes, transistors, lasers, microwave circuits. Replacing silicon with GaN allows several times to increase the operating temperature, the cutoff frequency, and to reduce several times the switching and conduction losses in power devices. A necessary element in the development of new electronic devices is computer modeling of physical processes in them. In this work, a model of a heterojunction field-effect transistor (FET) based on Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N was developed using the COMSOL Multiphysics software, including its CVC and other parameters.

Keywords: Heterojunction field-effect transistor, gallium nitride, aluminum nitride, diffusion-drift model, electron density gradient, polarization, current-voltage characteristic.

УДК 536.21

АНИЗОТРОПИЯ ПРОДОЛЬНОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ  
В (001), (110) И (111)-ОРИЕНТИРОВАННЫХ СЛОИСТЫХ Si/Ge ПЛЁНКАХ

Хомец А.Л.<sup>1</sup>, Сафронов И.В.<sup>2</sup>, Филонов А.Б.<sup>1</sup>, Мигас Д.Б.<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
Минск, Республика Беларусь, [migas@bsuir.by](mailto:migas@bsuir.by)

<sup>2</sup>Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь

<sup>3</sup>Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Российская Федерация

Аннотация: В работе с помощью метода молекулярной динамики проведено исследование влияния поверхности и границ раздела на анизотропию продольной теплопроводности слоистых Si/Ge плёнок с (001), (110) и (111) ориентациями. Показано, что анизотропный тепловой транспорт в слоистых Si/Ge плёнках характерен для (001) и (110) ориентаций, в то время как в Si/Ge сверхрешётках анизотропия сохраняется только в случае (110) ориентации. Обсуждено изменение фононных дисперсионных кривых, а также влияние фонон-поверхностного и фонон-интерфейсного рассеяния в возникновении анизотропии.

Ключевые слова: термоэлектрические материалы, кремний, германий, тонкие плёнки, поверхность, молекулярная динамика, фононная теплопроводность.

## I. ВВЕДЕНИЕ

В современной кремниевой микро- и нанoeлектронике большое тепловыделение является одной из главных проблем, что требует поиска или разработки новых материалов с высокой теплопроводностью. В то же время разработка материалов с низкой теплопроводностью необходима для эффективного термоэлектрического преобразования [1]. В последнем случае необходимо значительно уменьшать фононную составляющую теплопроводности ( $\kappa_l$ ), что в настоящее время является одним из основных подходов для увеличения термоэлектрической эффективности при использовании структур пониженной размерности, таких как тонкие плёнки или сверхрешётки [1]. В подобных структурах происходит существенное изменение фононного теплового транспорта, что связано с различными эффектами (например, изменение фононных дисперсионных кривых [2], локализацией поверхностных фононов [3], эффект фононного обеднения [4] и др.). Из-за этого структуры пониженной размерности характеризуются существенным снижением теплопроводности без существенного снижения электропроводности.

С момента появления данного подхода большие усилия были направлены на исследование теплового транспорта в структурах пониженной размерности на основе Si. Например, для улучшения термоэлектрической эффективности 2D структур за счет снижения теплопроводности предлагаются следующие стратегии: формирование Si плёнок с толщиной от 1 до 100 нм [4, 5] (дополнительный механизм рассеяния фононов на поверхности), создание Si/Ge сверхрешёток с небольшой длиной периода [6] (механизм рассеяния фононов на границе раздела), а также изменение структурного совершенства границ раздела (интерфейсов) за счет диффузионного перемешивания (диффузионно-сплавной механизм рассеяния фононов) [5]. Помимо этого, внимание уделялось исследованию влияния кристаллографической ориентации на теплопроводность в Si плёнках с учетом поверхностной реконструкции [7]. Следует отметить, что продольная фононная теплопроводность слоистых Si/Ge плёнок с небольшим числом периодов не исследовалась. В наших предыдущих работах теоретически изучалось влияние ориентации поверхности и границ раздела на поперечную [8] и продольную теплопроводность [8-10] слоистых Si/Ge плёнок. Однако, не уделялось должного внимания появлению анизотропии в случае продольной теплопроводности для плёнок с тремя основными низкоиндексными ориентациями. Цель данной работы заключается в теоретическом исследовании анизотропии продольной теплопроводности (001), (110) и (111) ориентированных слоистых Si/Ge плёнок.

## II. МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

В работе были рассмотрены (001), (110) и (111)-ориентированные симметричные слоистые Si/Ge плёнки с резкими границами раздела. Проводилась  $p(2 \times 1)$ ,  $p(1 \times 1)$  и  $p(2 \times 1)$  реконструкция свободных поверхностей для (001), (110) и (111) ориентаций, соответственно. Длина периода для (001), (110) и (111) ориентаций отличалась и составляла 1.1, 1.6 и 1.9 нм, соответственно. Число Si/Ge периодов ( $n$ ) варьировалось от 1 до 48. Дополнительно рассматривались Si/Ge сверхрешётки (без свободных поверхностей) с аналогичными кристаллографическими ориентациями и длинами периода.

Для всех рассматриваемых структур проводилась оптимизация структуры с помощью метода молекулярной статики, реализованного в программном пакете LAMMPS [11]. Использовались трехмерные периодические граничные условия с вакуумным зазором около 5 нм над плоскостью укладки слоёв для имитации тонкоплёночной структуры. Для описания межатомного взаимодействия использовался потенциал Терсоффа. Решеточная теплопроводность для всех рассматриваемых структур рассчитывалась с помощью метода неравновесной молекулярной динамики по закону Фурье, реализованного в программном пакете LAMMPS.

Расчет фононных дисперсионных кривых, групповых скоростей и колебательных плотностей состояний в гармоническом приближении проводился с использованием программы Phonopy [12]. Силовые константы второго порядка для оптимизированных супер-ячеек рассчитывались с помощью метода конечных смещений с использованием программы phonoLAMMPS. Применялись непримитивные элементарные ячейки, ограниченные толщиной в случае слоистой Si/Ge плёнки и одним периодом в случае Si/Ge сверхрешётки. Расчет групповых скоростей фононов проводился из соответствующих дисперсионных кривых как:  $v_g = d\omega/dq$ , где  $\omega$  – частота фононов,  $q$  - волновой вектор. Колебательные плотности состояний (VDOS) рассчитывались для различных областей слоистой структуры (поверхность, граница раздела и объем) с использованием метода тетраэдров путем интегрирования по зоне Бриллюэна с использованием равномерной  $15 \times 15 \times 15$   $q$ -сетки. Колебательные плотности состояний проецировались на определенное транспортное направление.

### III. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В соответствии с результатами расчетов теплопроводности [8-10] было обнаружено, что продольная теплопроводность слоистых Si/Ge плёнок зависит от толщины, при этом наименьшие значения теплопроводности во всём диапазоне рассматриваемых толщин характерны для (001)/ $[\bar{1}10]$  и 110/[001] по сравнению с (001)/[110] и (110)/ $[\bar{1}10]$  транспортными направлениями соответственно, в то время как для (111)/ $[\bar{1}\bar{1}2]$  и (111)/ $[\bar{1}10]$  случаев значения теплопроводности сопоставимы. Также было установлено, что анизотропия продольной теплопроводности обусловлена не только транспортным направлением, но и толщиной пленки. Наибольшие значения коэффициента анизотропии ( $\gamma$ ) наблюдались при наименьших толщинах плёнок (1,1-1,9 нм) и составляли 3,1 для (001), 2,5 для (110) и 1,1 для (111) ориентаций, соответственно. По мере увеличения толщины (или числа периодов  $n$ )  $\gamma$  снижается, и, в случае Si/Ge сверхрешётки, полностью подавляется для (001) и (111) ориентаций, а для (110) ориентации – оказался равным 1,5.

При увеличении толщины плёнки уменьшается доля поверхностных атомов, что будет приводить к перераспределению механизмов фононного рассеяния с фонон-поверхностного на фонон-интерфейсное и фонон-фононное рассеяния. Различное значение  $\gamma$  в случае слоистых Si/Ge плёнок может свидетельствовать об отличающемся влиянии поверхности для различных ориентаций и направлений. В то же время сохранение анизотропии в случае (110) ориентации указывает на различное влияние границ раздела на продольный тепловой транспорт. Для качественного обоснования данных выводов на рисунке 1 представлены фононные дисперсионные кривые, групповые скорости и колебательные плотности состояний для слоистых Si/Ge плёнок и сверхрешёток всех рассматриваемых низкоиндексных ориентаций вдоль различных транспортных направлений.

Анализ дисперсионных кривых для слоистых Si/Ge плёнок выявил различную степень симметрии ветвей для всех ориентаций, что может свидетельствовать об отличающейся групповой скорости фононов. Наиболее существенное отличие групповой скорости акустических фононов характерно для (001) и (110) ориентаций, в то время как в случае (111) ориентации отличие несущественное, что может быть обусловлено симметричной формой изознергетической поверхности для фононов [7]. Помимо этого, для (001)/ $[\bar{1}10]$  и 110/[001] транспортных направлений характерно наличие акустико-оптического сцепления [8], что является причиной сильного резонансного рассеяния [13]. Анализируя колебательные плотности состояний можно отметить наличие рассогласования спектров поверхностных и объемных атомов в низкочастотной области (около 2,5 ТГц) в случае (001)/ $[\bar{1}10]$  и 110/[001] транспортных направлений, что может быть причиной более сильного фонон-поверхностного рассеяния по отношению к (001)/[110] и (110)/ $[\bar{1}10]$  транспортным направлениям, соответственно. Для (111)/ $[\bar{1}\bar{1}2]$  и (111)/ $[\bar{1}10]$  транспортных направлений такого рассогласования колебательных спектров не наблюдается, а сами спектры подобны.



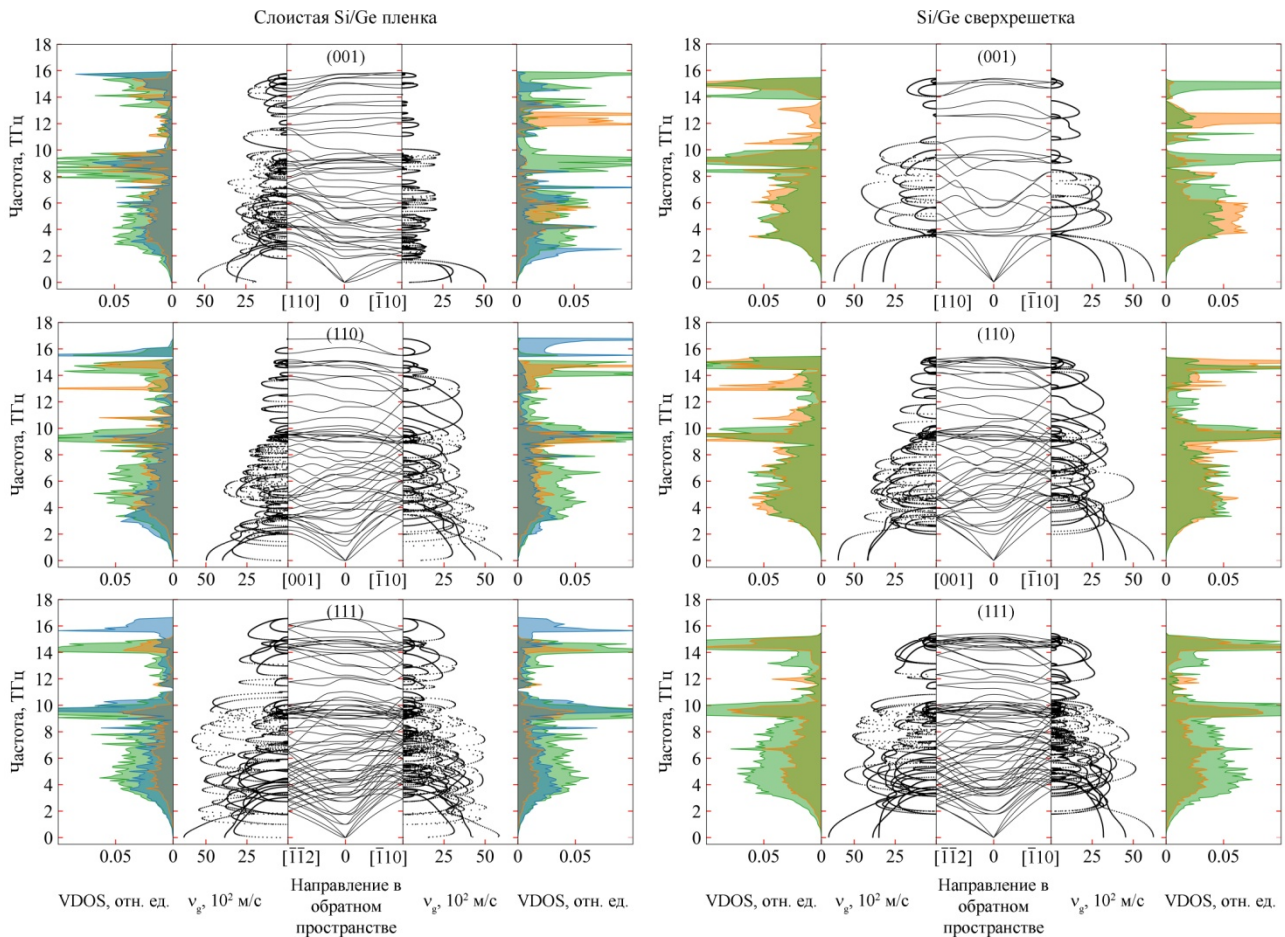


Рисунок 1. Фононные дисперсионные кривые, групповые скорости и колебательные плотности состояний (VDOS) для различных транспортных направлений (001), (110) и (111)-ориентированных слоистых Si/Ge плёнок и сверхрешёток. На VDOS зеленый, оранжевый и синий цвета соответствуют объемным, интерфейсным и поверхностным атомам соответственно.

В случае Si/Ge сверхрешёток, степень симметрии ветвей увеличивается. В то же время из частотных зависимостей групповой скорости фононов можно отметить, что групповая скорость фононов существенно отличается в случае (110)/ $[\bar{1}10]$  и 110/[001] транспортных направлений. Менее существенное отличие групповой скорости фононов характерно для (111)/ $[\bar{1}\bar{1}2]$  и (111)/ $[\bar{1}10]$  транспортных направлений, как и в случае плёнок. Анализируя колебательные плотности состояний для Si/Ge сверхрешёток можно отметить более сильное увеличение амплитуды и рассогласование спектров объемных и интерфейсных атомов в широком диапазоне частот в случае (001)/ $[\bar{1}10]$  и 110/[001] транспортных направлений, по отношению к (001)/[110] и (110)/ $[\bar{1}10]$  транспортным направлениям, что может являться причиной более сильного фонон-интерфейсного рассеяния.

#### IV. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено теоретическое исследование влияния поверхности и границ раздела на анизотропию продольной теплопроводности (001), (110) и (111)-ориентированных слоистых Si/Ge плёнок. Установлено, что анизотропия продольной теплопроводности обусловлена как различием групповых скоростей фононов, так и отличающимся влиянием фонон-поверхностного и фонон-интерфейсного рассеяния для различных ориентаций и транспортных направлений. В случае слоистых Si/Ge плёнок и сверхрешёток, отличие групповых скоростей фононов является наибольшим для (001) ориентаций и наименьшим для (111) ориентаций. Помимо этого, для (001)/ $[\bar{1}10]$  и 110/[001] транспортных направлений характерно наличие акустико-оптического сцепления и поверхностной локализации низкочастотных фононов, что может являться причиной более сильного фонон-поверхностного рассеяния.

## БЛАГОДАРНОСТЬ

Исследование выполнялось в рамках задания «Низкоразмерные и наноструктурированные материалы для преобразования и аккумуляции энергии» в ГПНИ «Материаловедение, новые материалы и технологии» 6.1. подпрограмма «Наноструктурные материалы, нанотехнологии, нанотехника («Наноструктура»)» на 2021-2025 годы.

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] Review of Si-Based Thin Films and Materials for Thermoelectric Energy Harvesting and Their Integration into Electronic Devices for Energy Management Systems / C.R. Ascencio-Hurtado [et. al] // Eng. – 2023. – Vol. 4. P – 1409–1431.
- [2] In-plane and out-of-plane Thermal Conductivity of Silicon Thin Films Predicted by Molecular Dynamics / C. Gomes [et. al] // Journal of Heat Transfer. – 2006. – Vol. 128. №. – 5. P – 1114–1121.
- [3] Sansoz, F. Surface faceting dependence of thermal transport in silicon nanowires / F. Sansoz // Nano Lett. – 2011. – Vol. 11. – P. 5378–5382.
- [4] Wang, X. Computational Study of In-plane Phonon Thermal Conductivity in Si Thin Films / X. Wang, B. Huang // Scientific Reports. – 2014. – Vol. 4. № – 1. P. 6399.
- [5] Maldovan, M. Specular Reflection leads to maximum reduction in cross-plane thermal conductivity / M. Maldovan // J. Appl. Phys. – 2019. – Vol. 125. – P. 224301.
- [6] Thermal conductivity engineering of bulk and one-dimensional Si-Ge nanoarchitectures / A. Kandemir [et al.] // Sci. Technol. Adv. Mater. – 2017. – Vol. 18. – № 1. – P. 187–196.
- [7] Karamitaheri, H. Ballistic phonon transport in ultra-thin silicon layers: Effects of confinement and orientation / H. Karamitaheri [et. al] // J. Appl. Phys. – 2013. – Vol. 113. – P. 204305.
- [8] Orientation and size effects on phonon thermal conductivity in silicon/germanium multilayer structures / A.L. Khamets [et. al] // Japanese Journal of Applied Physics. – 2023. – Vol. 62. – C. SD0804.
- [9] Влияние поверхности и границ раздела на продольный тепловой транспорт в слоистых тонкопленочных структурах Si/Ge / А.Л. Хомец [и др.] // Физика твердого тела. – 2022. – Т. 64. - №. 5. – С. 564–569.
- [10] Влияние морфологии поверхности и границ раздела на продольную фононную теплопроводность в тонкопленочных структурах Ge(001) и Si/Ge(001) / А.Л. Хомец [и др.] // Физика и техника полупроводников. – 2023. – Т. 57. - №. 3. – С. 131–137.
- [11] Plimpton, S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics / S. Plimpton // J. Comp. Phys. – 1995. – Vol. 117. – № 1 – P. 1–19.
- [12] Togo, A. First principles phonon calculations in materials science / A. Togo, I. Tanaka // Scripta Materialia. – 2015. – Vol. 108. – P. 1-5.
- [13] Xie, H. The Role of Off-centring Behavior and Acoustic-Optical Phonon Coupling in Heat Transport / H. Xie // Materials Lab. – 2022. – Vol. 1. P. 220051.

## ANISOTROPY OF IN-PLANE THERMAL CONDUCTIVITY OF (001), (110) AND (111)-ORIENTED LAYERED Si/Ge THIN-FILMS

A.L. Khamets<sup>1</sup>, I.V. Safronov<sup>2</sup>, A.B. Filonov<sup>1</sup>, D.B. Migas<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus,  
[migas@bsuir.by](mailto:migas@bsuir.by)

<sup>2</sup>Belarus State University, Minsk, Republic of Belarus

<sup>3</sup>National Nuclear Research University MEPhI, Moscow, Russian Federation

Abstract: In this work by means molecular dynamics method the effect of surface and interfaces on the anisotropy of the in-plane thermal conductivity of layered Si/Ge films with (001), (110) and (111) orientations were studied. It was shown that the anisotropic thermal transport in layered Si/Ge thin-films is typical of (001) and (110) orientations, while in Si/Ge superlattices anisotropy is retained only in the case of (110) orientation. The change in phonon dispersion curves and the influence of phonon-surface and phonon-interface scattering on the occurrence of anisotropy was studied.

Keywords: Thermoelectric materials, molecular dynamics, silicon, germanium, thin-film, surface, phonon thermal conductivity.

УДК 538.945

## АКУСТИЧЕСКИЕ ФОНОНЫ В СТРУКТУРЕ СВЕРХПРОВОДНИК – ДВУХЛИСТНЫЙ ГРАФЕН

Кушнир В.Н.<sup>1,2</sup>, Прищепа С.Л.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
Минск, Республика Беларусь, [vnkushnir@gmail.com](mailto:vnkushnir@gmail.com)

<sup>2</sup> Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь

Аннотация: В данной работе оценивается влияние «дыхательных» мод спектра колебаний графена на фононный спектр ниобия в структуре ниобий – графен. Учитывается влияние диэлектрической прослойки, образованной оксидами ниобия. Обоснован эффект смягчения фононного спектра, имеющий следствием увеличение критической температуры пленки ниобия.

Ключевые слова: сверхпроводящая пленка, фононный спектр.

### I. ВВЕДЕНИЕ

Проблема разработки методов модификации фононного спектра сверхпроводящей пленки с целью увеличения и, в большей степени, контроля ее критической температуры, сформулированная в 1960-х годах, актуализируется, во-первых, по причине усовершенствования технологии изготовления тонких сверхпроводящих пленок и, во-вторых, ввиду увеличения быстродействия компьютерной техники [1]. Принцип решения данной проблемы достаточно понятен для сверхпроводящих материалов, характеризуемых структурной функцией Элиашберга  $\alpha^2 F(\omega)$ , пропорциональной, в широкой области частот, спектральной функции фононной подсистемы,  $F(\omega)$ . В таком случае критическая температура пленки возрастает при «смягчении» фононного спектра, то есть, при увеличении спектральной плотности в области низких частот [2]. Способ реализации данного принципа, эффективный и контролируемый, был предложен в [3]. Суть способа состоит в формировании на поверхности пленки сверхпроводника (ниобия) кристаллической структуры, состоящей из двулистного графена (G). Nb удовлетворяет оговоренному условию  $\alpha^2 F(\omega) \sim F(\omega)$ ; существенно, что фононный спектр графена известен (ссылки см. в обзоре [1]). Известно также, что критическая температура пленки Nb резко падает с уменьшением ее толщины, начиная с некоторого значения (подробности приведены в монографии [4]). Полученный эффект – стабилизация критической температуры пленки [3].

### II. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В работе [3] предложена простая численная модель эффекта. Здесь мы показываем, что в рамках данной модели эффект смягчения фононного спектра имеет разумное объяснение. В первую очередь, обращаем внимание на то, что из всех ветвей фононного спектра 2-листного графена наиболее существенное влияние на динамику кристаллической решетки Nb оказывает акустическая ветвь колебаний в направлении ортогональном плоскостям графена – диапазон частот этой ветви сильно перекрывается с частотным спектром акустических волн в ниобии. Оптические фононы демпфируются при распространении в Nb, благодаря наличию диэлектрической прослойки (I) между Nb и G из оксидов Nb, представляющей собой хаотическую среду. Между тем, длинные волны менее чувствительны к данной среде. В результате, структура Nb/G может моделироваться структурой Nb/I/Gr (Gr – графен с редуцированным фононным спектром) со слабой связью  $\alpha$  между слоями. Далее, сопоставляя модельной структуре динамическую матрицу с формулировкой задачи о ее спектре, мы видим, что результирующие нормальные колебания происходят на всей совокупности частот, однако априори нельзя дать какого-либо заключения о вектор-функциях состояний. Здесь следует привлечь еще два важных обстоятельства: во-первых, оба листа графена оказываются слабо связанными [5]; во-вторых, основной вклад во взаимодействие с кристаллической решеткой ниобия дают т.н. «breathing modes» («дыхательные моды»), или (более точный термин) – трансляционные моды. Слабое взаимодействие между двумя плоскостями графена приводит к перенормировке их положений равновесия. Появление трансляционных мод, из которых существенна та, которая направлена ортогонально плоскостям, обусловлено очевидным нарушением трансляционной инвариантности в этом направлении. В результате в динамике полной структуры фигурирует взаимодействие центров масс двух плоскостей графена и центра масс ниобия. Сразу же становится понятным, с этой позиции, исчезновение эффекта смягчения фононного спектра при увеличении толщины пленки Nb (отношение масс плоскости G и Nb стремится к нулю). Подчеркнем также, что малая масса плоскостей графена по сравнению с Nb обеспечивает «устойчивость» эффекта – амплитуда колебаний атомов углерода соотносится с таковой для Nb как  $(M_{\text{Nb}}/M_{\text{C}})^{1/2}$ .

Приведенные соображения позволяют полагать, что приведенная на рисунке 1 дисперсионная характеристика модели (смещение собственных частот решетки Nb вдоль направления 001) отражает суть исследуемого эффекта.

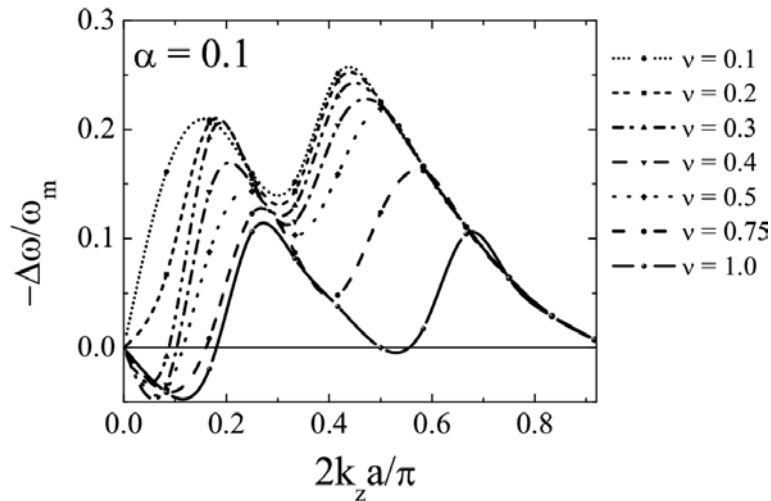


Рисунок 1. Отклонения собственных частот упругой цепочки «тяжелых» атомов с присоединенными легкими атомами, моделирующие взаимодействие «трансляционных» мод G и решетки Nb

### III. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, существуют достаточные основания считать, что эффект смягчения фоннного спектра ниобия в структуре Nb – двулистный графен обусловлен колебаниями плоскостей графена («дыхательными», или «трансляционными», модами).

### БЛАГОДАРНОСТЬ

Работа выполнялась при финансовой поддержке по проекту ГПНИ «Конвергенция-2025» (2021–2025).

### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Prischepa, S. L. Phonon softening in nanostructured phonon-mediated superconductors (review) / S. L. Prischepa, V. N. Kushnir // J. Phys.: Condens. Matter. 2023. Vol. 35 P. 313003-1–54.
- [2] McMillan, W. L. Transition temperature of strong-coupled superconductors / W. L. McMillan // Phys. Rev. 1968. Vol. 167, No. 2. P. 331 – 344.
- [3] Superconducting critical temperature and softening of the phonon spectrum in ultrathin Nb and NbN/graphene hybrids / S. L. Prischepa [et al.] // Supercond. Sci. Technol. 2021. Vol. 34. P. 115021-1–15.
- [4] Кушнир, В. Н. Сверхпроводимость слоистых структур / В.Н. Кушнир // БНТУ – Минск, 2010.
- [5] Cocemasov, A. I. Phonons in twisted bilayer graphene / A. I. Cocemasov [et al.] // Phys. Rev. B. 2013. Vol. 88. P. 035428-1–12.

## ACOUSTIC PHONONS IN THE SUPERCONDUCTOR – TWO-SHEET GRAPHENE STRUCTURE

V. N. Kushnir<sup>1,2</sup>, S. L. Prischepa<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus,  
[vnkushnir@gmail.com](mailto:vnkushnir@gmail.com)

<sup>2</sup>Belarusian State University, Minsk, Republic of Belarus

Abstract: In this paper, the influence of "breathing" modes of the graphene vibration spectrum on the phonon spectrum of niobium in the niobium-graphene structure is estimated. The influence of the dielectric layer formed by niobium oxides is taken into account. The effect of softening the phonon spectrum, which results in an increase in the critical temperature of the niobium film, is substantiated.

Keywords: superconducting film, phonon spectrum.

УДК 621.391

ПРОЕКТИРОВАНИЕ УСТРОЙСТВ ОБРАБОТКИ МОДИФИКАЦИЙ КОДОВ  
БОУЗА-ЧОУДХУРИ-ХОКВИНГЕМА НА ОСНОВЕ РАЗДЕЛЕНИЯ ОШИБОК НА КЛАССЫ

Власова Г.А.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
Минск, Республика Беларусь, [g.vlasova@bsuir.by](mailto:g.vlasova@bsuir.by)

Аннотация: рассмотрены алгоритмы и устройства пошаговой и параллельной обработки модификаций кодов Боуза-Чоудхури-Хоквингема. На примере кодов, корректирующих одиночные и двойные независимые ошибки, показано, что разделение ошибок на классы позволяет уменьшить сложность селектора: пропорционально кратности корректируемых ошибок при пошаговом декодировании и пропорционально длине кода при параллельном декодировании. На основе разделения ошибок на классы с использованием программного обеспечения Logisim разработаны устройства декодирования, оценены их сложность и быстродействие.

Ключевые коды Боуза-Чоудхури-Хоквингема, классы ошибок, параметры идентификации, устройства декодирования.

### I. ВВЕДЕНИЕ

Увеличение объемов и скоростей передаваемой информации приводит к усложнению помеховой обстановки. В этой связи растет запрос на обнаружение, идентификацию и коррекцию ошибок в сообщениях, передаваемых в пространстве (связь) и во времени (хранение). Эффективным средством борьбы с помехами и обеспечения сохранности информации является помехоустойчивое кодирование [1,2]. При этом требуется обеспечить контроль ошибок все большей кратности с приемлемыми аппаратными и временными затратами.

### II. РАЗДЕЛЕНИЕ ОШИБОК НА КЛАССЫ

Среди всего многообразия известных кодов, контролирующих ошибки, широкое применение находят коды Боуза-Чоудхури-Хоквингема (БЧХ) [1,2]. Данные коды исправляют кратные ошибки и относятся к циклическим. Линейный код называется циклическим, если циклический сдвиг кодового слова также принадлежит коду [1,2]. В [3,4] было показано, что все ошибки можно разделить на классы, характеризующиеся весом ошибок (количеством ошибочных разрядов в кодовой последовательности) и расстоянием между ошибочными разрядами. Например, ошибки в разрядах (0,1), (1,2), (2,3), ..., ((n-1),0), где n – длина слова, относятся к одному классу двойных ошибок. Таким образом, все множество двойных ошибок объемом  $n(n-1)/2$  можно разделить на  $(n-1)/2$  не пересекающихся класса. Очевидно, что одиночные ошибки образуют один класс. Для тройных ошибок количество классов равно  $(n-1)(n-2)/6$  и т.д. Ниже будет показано, какие преимущества дает разделение ошибок на классы при проектировании устройств обработки БЧХ-кодов.

Поскольку рассматриваемые коды относятся к циклическим, алгоритмы их обработки можно разделить на параллельные (в том числе прямые табличные) и пошаговые [2].

### III. УСТРОЙСТВА ПОШАГОВОГО ДЕКОДИРОВАНИЯ КОДОВ БОУЗА-ЧОУДХУРИ-ХОКВИНГЕМА

Согласно [2] обобщенная структурная схема декодера циклического кода содержит буферный регистр, в который за n тактов записывается анализируемая последовательность. Одновременно кодовое слово поступает в контрольное устройство, представляющее собой устройство деления на порождающий полином кода. За n тактов в контрольном устройстве происходит вычисление синдрома (т. е. остатка от деления принятой последовательности на порождающий полином). Ненулевой синдром является признаком ошибки, по виду синдрома можно идентифицировать ошибку. Селектор выдает корректирующий сигнал в тот момент, когда ошибочный символ покидает буферный регистр. Коррекция ошибок происходит за 2n тактов. Сложность реализации устройства определяется сложностью селектора, который должен обеспечить коррекцию всех возможных ошибок. Так, для коррекции одиночных и двойных независимых ошибок необходимо селектировать  $n + n(n-1)/2$  синдромов. Используя теорему Меггитта, можно в качестве селектируемых использовать только синдромы тех ошибок, в которых один из ошибочных символов расположен в старшем разряде [2]. Число таких комбинаций для одиночных и двойных ошибок составляет  $1 + (n-1)$ . Декодирование по-прежнему происходит за 2n тактов. В схеме декодера Меггитта с модификацией синдрома (с вылавливанием ошибок) достаточно селектировать в два раза меньше синдромов двойных ошибок,

однако, коррекция ошибок при этом занимает  $3n$  тактов [2]. Кроме того, метод вылавливания ошибок применим только к низкоскоростным кодам, а подобные коды редко применяются на практике.

Разделение ошибок на классы и использование модификации синдрома позволяет реализовать исправление двойных ошибок не более чем за  $2,5n$  тактов при сокращенном числе селективируемых комбинаций [3]. Достаточно селективировать синдромы образующих классов ошибок, число которых при исправлении одиночных и двойных ошибок совпадает с числом комбинаций, селективируемых в декодере Меггитта с вылавливанием ошибок. Дополнительно уменьшить время декодирования позволит использование реверсивных однородных кодов, которые относятся к модифицированным кодам БЧХ. Однако при этом возрастут аппаратные затраты поскольку устройство должно состоять из двух каналов [5].

Разработана схема одноканального устройства декодирования реверсивного БЧХ-кода длины 31, корректирующего одиночные и двойные ошибки, с использованием разделения ошибок на классы [5]. Сложность одноканального устройства составляет не более 835 условных логических элементов GE (Gate Equivalent, единица измерения для определения размеров микросхем; площадь, занимаемая универсальным двухвходовым логическим элементом – элементом NAND с двумя входами [6]). Такая реализация устройства называется «ультралегкой», поскольку требует менее 1000 GE. Моделирование работы схемы с использованием программного обеспечения Logisim подтвердило, что коррекция всех возможных одиночных и двойных ошибок происходит не более, чем за  $2,5n$  тактов.

#### IV. УСТРОЙСТВА ПАРАЛЛЕЛЬНОГО ДЕКОДИРОВАНИЯ КОДОВ БОУЗА-ЧОУДХУРИ-ХОКВИНГЕМА

При необходимости минимизации временных затрат на исправление ошибок, декодирование реализуется по параллельным алгоритмам. В этом случае синдром определяется как произведение принятого кодового слова  $X$  на проверочную матрицу  $H^T$ . Затем селектор по виду синдрома определяет вид ошибки. Коррекция поступившего сообщения реализуется путем суммирования по модулю два вектора ошибки с декодируемым словом [1,2]. Основные аппаратные затраты приходятся на селектор, реализуемый на запоминающем устройстве.

Разделение ошибок на классы позволяет в  $n$  раз сократить количество хранимых векторов одиночных и двойных ошибок. Можно показать, что каждый класс характеризуется не только весом ошибки и расстоянием между ошибочными разрядами, но и параметром идентификации  $N$ , определяемым видом проверочной матрицы кода [3]. Например, реверсивный БЧХ-код, корректирующий две независимые ошибки, задается проверочной матрицей вида  $H = (\alpha^i, \alpha^{-i})^T$ , где  $\alpha$  – примитивный элемент поля Галуа  $GF(2^m)$ ,  $m \geq 3$ ,  $0 \leq i \leq (n-1)$ ,  $n = (2^m - 1)$  [8]. При декодировании вычисляется значение синдрома  $S = XH^T = (\alpha^p, \alpha^q)$  и параметр идентификации  $N = (p + q) \bmod (2^m - 1)$  [3,7]. По значению параметра идентификации определяется образующий класса, которому соответствует синдром  $S_0 = X_0 H^T = (\alpha^{p_0}, \alpha^{q_0})$ . По значению сдвига  $(p - p_0) \bmod (2^m - 1)$  определяется фактическая ошибка [7]. Данный алгоритм декодирования можно применить к модифицированным БЧХ-кодам, предложенным в [9]. В данной работе показано, что перестановка в лексикографическом порядке столбцов проверочной матрицы реверсивного БЧХ-кода позволяет дополнительно к одиночным и двойным независимым ошибкам корректировать одиночные модули ошибок длины четыре и пакеты ошибок длины три.

Разработано устройство декодирования модифицированного БЧХ-кода длины 128 с дополнительными корректирующими возможностями по контролю модульных и пакетных ошибок. Сложность устройства составляет 9500 GE. Быстродействие определяется максимальным числом последовательно соединенных элементов схемы и составляет 31. Максимальную задержку вносит идентификация и коррекция двойной независимой ошибки. Схема, реализующая данный алгоритм, представлена на рисунке 1.

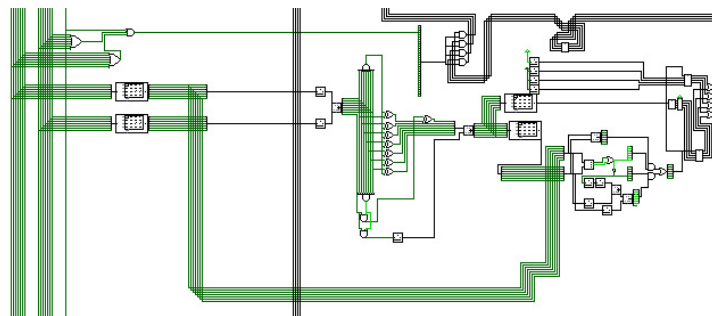


Рисунок 1. Идентификация и коррекция двойной ошибки модифицированным (128; 113)-кодом БЧХ

## V. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разделение ошибок на классы позволяет значительно снизить аппаратные затраты при проектировании устройств обработки циклических помехоустойчивых кодов. Для БЧХ-кодов, корректирующих одиночные и двойные независимые ошибки, сложность селектора уменьшается в два раза при пошаговой обработке, при этом на 16% снижаются временные затраты на декодирование. Кроме того, данный алгоритм применим не только к низкоскоростным кодам. При параллельном декодировании сложность селектора может быть уменьшена пропорционально длине кода. Кроме того, алгоритм декодирования, основанный на вычислении и анализе параметра идентификации класса ошибок, позволяет применить в схеме запоминающие устройства с меньшей разрядностью адреса и данных, что также повышает быстродействие. Данный алгоритм можно использовать при разработке устройств обработки модифицированных БЧХ-кодов с дополнительными корректирующими возможностями. Следует отметить, что метод разделения на классы может быть применен при проектировании устройств коррекции независимых ошибок кратности больше двух.

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] Морелос-Сарагоса, Р. Искусство помехоустойчивого кодирования: методы, алгоритмы, применение / Р. Морелос-Сарагоса. М.: Техносфера, 2005. 320 с.
- [2] Блейхут, Р. Теория и практика кодов, контролируемых ошибки / Р. Блейхут. М.: Мир, 1986. 576 с.
- [3] Власова, Г. А. Разработка методов и устройств идентификации и коррекции ошибок кодами Боуза – Чоудхури – Хоквингема: автореф. дис. ... канд. техн. наук : 05.12.21 / Г. А. Власова; Белор. гос. ун-т информатики и радиоэлектроники. Минск, 1996. 18 с.
- [4] Устройство декодирования для коррекции двойных ошибок : пат. Респ. Беларусь 3907 / В. К. Конопелько, Г. А. Власова. – Опубл. 14.12.2000
- [5] Власова, Г.А. Устройства пошагового декодирования кодов Боуза-Чоудхури-Хоквингема / Г. А. Власова // Материалы Восьмого Белорусского космического конгресса: в 2 т. Минск: ОИПИ НАН Беларуси, 2022. Том 1. с.141-144.
- [6] Жуков, А.Е. Легковесная криптография. Часть 1. / А.Е. Жуков // Вопросы кибербезопасности. 2010. №1(9). С. 26-46.
- [7] Власова, Г.А. Устройство декодирования реверсивных кодов Боуза-Чоудхури-Хоквингема с дополнительными корректирующими возможностями для контроля целостности информации / Г. А. Власова // Материалы XXVI научно-практической конференции «Комплексная защита информации». Минск: Издатель Владимир Сивчиков, 2021. с.240-242.
- [8] Мак-Вильямс, Ф. Дж. Теория кодов, исправляющих ошибки / Ф. Дж. Мак-Вильямс, Н. Дж. А. Слоэн. М.: Связь, 1979. 744с.
- [9] Липницкий, В. А. Двоичные реверсивные коды для контроля байтовых ошибок / В. А. Липницкий, В. К. Конопелько, Г. А. Власова, А. Н. Осипов // Известия национальной академии наук Беларуси. Серия физико-математических наук. 2000. №1. С. 127-131.

## DESIGN OF DEVICES FOR PROCESSING BOSE-CHAUDHURI-HOCQUENGHEM CODES MODIFICATIONS BASED ON DIVIDING ERRORS INTO CLASSES

G. Vlasova

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus,  
[g.vlasova@bsuir.by](mailto:g.vlasova@bsuir.by)

Abstract: algorithms and devices for step-by-step and parallel processing of Bose-Chaudhuri-Hocquenghem codes modifications are considered. Using the example of codes that correct single and double independent errors, it is shown that dividing errors into classes can reduce the complexity of the selector: proportional to the multiplicity of corrected errors during step-by-step decoding and proportional to the code length during parallel decoding. Based on the division of errors into classes using Logisim software, decoding devices were developed, their complexity and performance were assessed.

Keywords: Bose-Chaudhuri-Hocquenghem codes, error classes, identification parameters, decoding devices.

УДК 535.376; 535-15; 628.9.038; 628.9.037

## ОПТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТОНКОПЛЕНОЧНОГО ИК-СВЕТОДИОДА НА ОСНОВЕ КОЛЛОИДНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК

Туровец У.Е.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
Минск, Республика Беларусь, [u.turovets@bsuir.by](mailto:u.turovets@bsuir.by)

Аннотация: В данной работе проведено моделирование оптических процессов в структуре тонкопленочного ИК-светодиода методом конечной разности во временной области. Исследованы такие параметры, как пропускание, эффективность распространения электромагнитных волн в диапазоне 1,25–1,35 мкм. Показано, что коэффициент пропускания уменьшается при прохождении функциональных слоев до 35%. В заключение предложены стратегии оптимизации функциональных слоев.

Ключевые слова: QLED, FDTD-моделирование, напряженность поля, пропускание, эффективность извлечения света.

### I. ВВЕДЕНИЕ

Внешняя квантовая эффективность (ВКЭ) – один из важнейших параметров ИК-светодиодов (ИКС) на основе коллоидных квантовых точек (ККТ). Ограничение значений ВКЭ может быть связано с низким коэффициентом эффективности излучения света (ЭИС). Для не только качественного, но и количественного анализа данного параметра прибегают к оптическому моделированию, позволяющему рассчитывать рассеиваемую мощность и оценивать степень извлечения света из устройства [1, 2]. Эти параметры служат для первичной оценки эффективности работы функциональных слоев устройства. Для моделирования различных светоизлучающих элементов, как правило, используют 2D моделирование, так как оно выполняется значительно быстрее и требует меньших вычислительных мощностей [3].

### II. МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

#### а. Теоретическое обоснование

Для оценки распределения электромагнитных волн в структуре ИКС производили расчет распределения интенсивности дальнего поля, равное  $(В \cdot м^{-1})^2$ . Данные параметры служат для первичной оценки производительности ИКС. Все характеристики были рассчитаны путем решения уравнений Максвелла с использованием метода конечной разности во временной области (FDTD) на базе программного комплекса Ansys Lumerical.

Конструкция ИКС представляет собой полученные ранее [4] тонкопленочные функциональные слои. На рис. 1 приведена 3D модель структуры ИКС в соответствии с порядком слоев, их толщины приведены в табл. 1. Значения комплексного показателя преломления для ближнего ИК диапазона были взяты из открытых баз данных [5, 6].

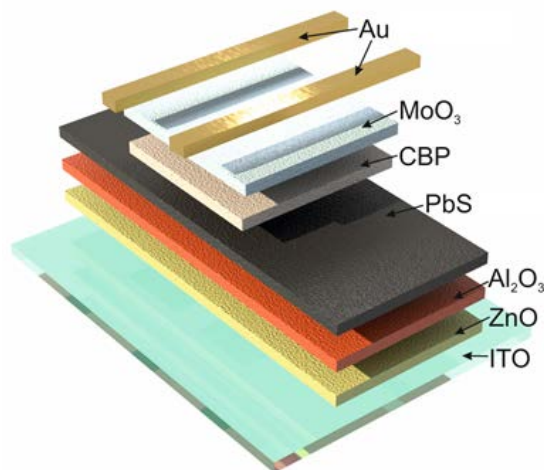


Рисунок 1. Схематическое представление конструкции ИКС на коллоидных квантовых точках PbS



Таблица 1. Параметры функциональных слоев ИКС

Функциональный слой	Материал	Толщина, нм
Катод	Au	100
Дырочно-инжекционный слой (ДИС)	MoO <sub>3</sub>	3
Дырочно-транспортный слой (ДТС)	4,4'-N,N'-дикарбазолил-бифенил (CBP)	60
Активный слой (ККТ)	PbS	47,5
Электронно-блокирующий слой (ЭБС)	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	3
Электронно-транспортный слой (ЭТС)	ZnO	25
Анод	ITO	70
Подложка	SiO <sub>2</sub>	>1000

Для оценки характеристик сравнивали такие параметры, как эффективность излучения света (ЭИС), оптическое пропускание и распределение электромагнитных волн в структуре ИКС для предполагаемых функциональных слоев и их толщин. Параметр ЭИС выражается из значений внешней квантовой эффективности (ВКЭ) и внутренней квантовой эффективности (ВнКЭ) [1] и определяет отношение фотонов, испускаемых светодиодом, ко всем фотонам, испускаемых активной областью:

$$ВКЭ = ЭИС \cdot ВнКЭ, \quad (1)$$

где упрощенно ЭИС =  $1 - \sqrt{1 - \left(\frac{n_{ЭТС}^2}{n_{акт.сл.}^2}\right)}$  [2], сильно зависящая от коэффициента преломления активного слоя и ЭТС, т. е. в данном случае, ККТ PbS и ZnO. Учитывая значения  $n$ , с учетом ЭБС ЭИС = 0,34%, без ЭБС ЭИС = 0,64%. Таким образом, ЭБС будет препятствовать распространению света на выходе из устройства. Однако, по полученным экспериментальным данным, использование ЭБС необходимо для выравнивания неравномерной подвижности носителей заряда в активную область [4], что значительно улучшает выходные электрические характеристики. Стратегия выбора слоев для ИКС требует комплексного решения и компромисса при оптимизации слоев.

#### б. Параметры моделирования

Область симуляции составляла  $4 \times 1$  мкм<sup>2</sup> в плоскости  $x - y$  (длина – ширина) и 0,5 мкм в направлении  $z$  – координаты (толщина). В качестве граничных условий области симуляции по  $x - y$  координатам выбраны идеально сочетающиеся слои (perfectly matched layers – PML). Количество слоев PML – 24. По координате  $z$  для верхнего слоя катода были установлены граничные условия металла (для отражения излучения обратно в область симуляции), а для нижнего слоя анода – стандартные PML. Границы PML поглощают почти все входящее излучение с минимальными отражениями, и, поскольку в реальной жизни свет выходит за пределы этих границ, было важно, чтобы излучение не отражалось обратно в область симуляции. Границы симуляции по координате  $z$  были установлены по середине слоев ITO и Au. Для моделирования люминесцирования в активном слое использовался точечный источник излучения (dipole source) [2], излучающий на длине волны 1300 нм, что соответствует длине волны излучения ККТ PbS. Чтобы смоделировать угловое распределение волн, а также оценить изменение коэффициента пропускания, был задан минимальный диапазон для длин волн ИК излучения 1,25–1,35 мкм. Чтобы создать эффект произвольного направления излучения (т. к. процессы рекомбинации с последующим направлением излучения носят случайный характер), точечный источник имел случайную ориентацию в пространстве активного слоя. Для упрощения вычисления и оптимизации использовался доступный официальный скрипт (sweep width and position) [3], суммирующий результаты для каждого положения точечного источника в пространстве активного слоя и направления его излучения. Шаг вычисления составил 0,25 нм, время симуляции 1200 фс. Для увеличения точности вычислений ультратонких слоев ЭБС и ДИС установлен индивидуальный шаг сетки с шагом 1 нм. Экран детектирования падающего излучения (пропускания) расположен по  $z$  – координате.

### III. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Анализ углового распределения  $E$  (рис. 2) показывает, что распространение излучения происходит преимущественно в пределах  $60^\circ$  за его пределами в дальнем поле.

По характеру распределения поля  $E$  (рис. 3) можно заметить, что ультратонкий слой оксида алюминия (ЭБС) выступает как барьер, в некоторой степени препятствующий прохождению излучения. Ввиду стремления электромагнитного излучения к распространению в более плотных средах, происходит

частичная потеря излучения в активном слое, а также в ДТС и ЭТС. В конечном итоге, в результате отражения от золотого электрода, путем множественного переотражения волны распространяются преимущественно в направлении прозрачного проводящего электрода (ППЭ).

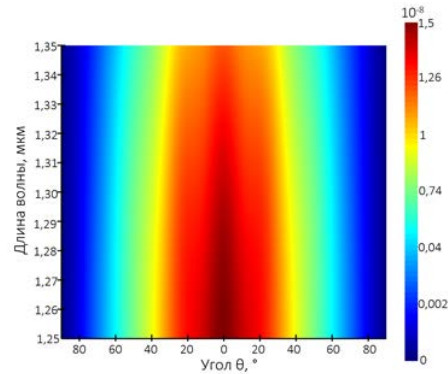


Рисунок 2. 2D представление углового распределения E от длины волны излучения с использованием заданного коэффициента преломления за пределами границы устройства в дальнем поле

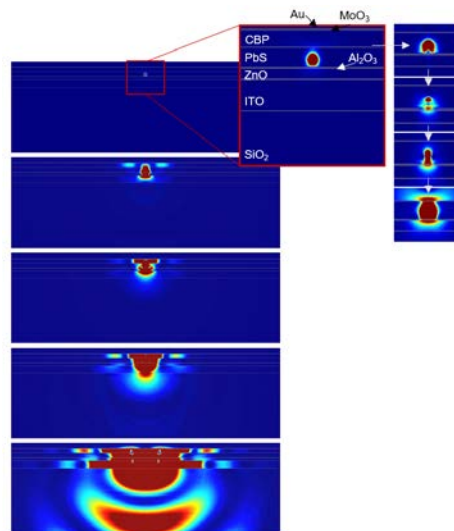


Рисунок 3. 2D срез распределения поля E во временной области с 15 до 60 фс

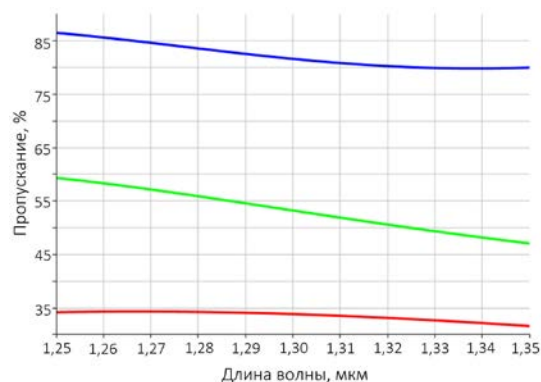


Рисунок 4. Оптическое пропускание излучения в различных слоях устройства: ЭТС (синий), ITO (зеленый) и на границе стекло-воздух (красный)

Из рис. 4 видно, что коэффициент пропускания значительно уменьшается после прохождения функциональных слоев на выходе из устройства. Это может быть связано с тем, что в ближней ИК области происходит значительное поглощение излучения слоем ITO. ITO по-прежнему занимает

лидирующие позиции в качестве ППЭ ввиду низкого поверхностного сопротивления и высокой прозрачности в видимом диапазоне, однако в ИК области происходит заметное ухудшение пропускания [7].

#### IV. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате моделирования и первичной оценки параметров ЭИС выявлены несовершенства устройства, которые предлагается решать с помощью оптимизации функциональных слоев. Основные выводы по результатам моделирования: ITO непрозрачен в ИК области, за счет чего блокирует прохождение излучения; в качестве ППЭ предлагается использование FTO как более подходящего материала, сохраняющего прозрачность в ИК области на уровне 70%, в сравнении с ITO, пропускание которого находится в пределах 35% [8]. Кроме того, материал FTO показывает не сильное ухудшение проводимости, что играет существенную роль при выборе материала ППЭ; в качестве решения проблемы блокирования излучения на границе уровня ЭБС предлагается замена  $Al_2O_3$  на  $Ta_2O_5$  [5], обладающий более высокой диэлектрической проницаемостью, и, в свою очередь, более высоким показателем преломления.

#### БЛАГОДАРНОСТЬ

Исследование проведено при поддержке Белорусского фонда фундаментальных исследований (БРФФИ) по теме гранта №Т23М-040 «Неорганические инфракрасные светодиоды на коллоидных квантовых точках PbS с улучшенными характеристиками».

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Optical Tunneling to Improve Light Extraction in Quantum Dot and Perovskite Light-Emitting Diodes / G. Mei [et. al.] // IEEE Photonics Journal. 2020. Vol. 12, No 6. P. 1–14. Art No 1600314.
- [2] Photonics design theory enhancing light extraction efficiency in quantum dot light emitting diodes / Diyar D. Othman [et al.] // Journal of Physics: Materials. 2022. Vol. 5, No 4. Art No 044009.
- [3] OLED (2D) [Electronic Resource] // Ansys Optics. Mode of access : <https://optics.ansys.com/hc/en-us/articles/360042225934-OLED-2D>. Date of access : 17.09.2024.
- [4] Bright infra-red quantum dot light-emitting diodes through efficient suppressing of electrons / M. Marus [et al.] // Appl. Phys. Lett., 2020. Vol. 116, No 19. Art No 191103.
- [5] Refractive index [Electronic Resource] // Mode of access: <https://refractiveindex.info>. Date of access : 26.09.2024.
- [6] Filmmetrics [Electronic Resource] // Mode of access: <https://www.filmmetrics.com>. Date of access : 29.09.2024.
- [7] Pasquarelli, R. M. Solution processing of transparent conductors: from flask to film / R. M. Pasquarelli, D. S. Ginley, R. O'Hayre // Chemical Society Reviews, 2011. Vol. 40, No 11. P. 5406–5441.
- [8] Effect of transparent conductive layers on the functionality of liquid crystal devices: Comparison of AZO, FTO and ITO / V. Marinova [et al.] // Optical Materials: X. 2024. Vol. 22. Art No 100330.

#### OPTICAL MODELING OF THIN FILM IR QUANTUM DOT LIGHT EMITTING DIODE

U. Turavets

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus,  
[u.turovets@bsuir.by](mailto:u.turovets@bsuir.by)

Abstract: In this work, optical processes in the structure of a thin-film IR QLED were modeled using the FDTD method. Parameters such as transmission and propagation efficiency of electromagnetic waves in the range of 1.25–1.35 microns have been studied. It is shown that the transmission coefficient decreases with the passage of functional layers up to 35%. In conclusion, strategies for optimizing functional layers are proposed.

Keywords: QLED, FDTD modeling, E-field, transmission, light extraction efficiency.

УДК 53.06

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОЛЛОИДНЫХ ПЛАЗМОННЫХ  
НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА, ПОКРЫТЫХ СТАБИЛИЗИРУЮЩИМ АГЕНТОМ

Борисюк А.А., Бондаренко А.В.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
Минск, Республика Беларусь, [a.borisuk@bsuir.by](mailto:a.borisuk@bsuir.by)

Аннотация: Проведено моделирование сферических наночастиц серебра диаметром 31 нм с оболочкой, соответствующей оптико-электрическим параметрам янтарной кислоты, в среде фосфатно-солевого буфера. Установлено, что такие наночастицы способны усиливать электрическое поле вблизи поверхности до 37 раз. Коэффициент усиления напряженности электрического поля сильно зависит от расстояния между наночастицами и уменьшается в 10 раз при изменении расстояния от 1 до 30 нм. Показано, что увеличение толщины оболочки из сукцинат-ионов янтарной кислоты приводит к смещению резонансной длины волны наночастиц серебра в более длинноволновую область.

Ключевые слова: наночастицы серебра, стабилизирующий агент, распределение электрического поля, плазмонный резонанс, электропорация клеток.

## I. ВВЕДЕНИЕ

Несмотря на то, что наночастицы являются довольно хорошо изученным объектом нанотехнологий, до сих пор существуют некоторые сложности в измерении отдельных параметров таких структур. В первую очередь это связано с их размерами, т. к. для получения наиболее достоверных данных требуется выделить отдельный объект для проведения измерений, что становится весьма сложной задачей [1]. Еще одним лимитирующим фактором является высокая чувствительность наночастиц к изменениям окружающей среды и влиянию внешних воздействий (температура, давление, свет и др.) [2], что также осложняет получение объективных данных. Однако наиболее значимым фактором, влияющим на измерения, особенно когда речь идет о плазмонных наночастицах, является невозможность прецизионного контроля их формы и размеров. Это критично сказывается на свойствах наночастиц [2–4].

Указанные ограничения не снижают высокую потребность в установлении различных свойств наночастиц, в частности наночастиц благородных металлов (серебро, золото, платина и др.), для которых характерно проявление эффекта локального поверхностного плазмонного резонанса (ЛППР) при воздействии внешнего электромагнитного излучения оптического диапазона. Эффект плазмонного резонанса заключается в резонансных осцилляциях электронного газа в металле. При этом стоит отметить, что для сферических наночастиц данный эффект приобретает локальный характер, т. к. в результате осцилляций формируется диполь, что приводит к возникновению электрического поля высокой интенсивности у поверхности наноструктуры. Наряду с этим происходит усиленное поглощение излучения, что приводит к нагреву наночастиц. Эффект ЛППР нашел широкое применение в оптической спектроскопии, включая спектроскопию поверхностно-усиленного рамановского рассеяния (SERS – от англ. surface-enhanced Raman scattering) и поверхностно-усиленной флуоресценции (SEF – от англ. surface-enhanced fluorescence), фотокатализе, таргетной терапии в онкологии, создании антибактериальных покрытий, солнечной энергетике и др. [5].

Целью настоящей работы был теоретический анализ электродинамических свойств наночастиц серебра, синтезированных коллоидным методом в присутствии стабилизирующего агента [6], для оценки возможности их применения в фотоиндуцированной электропорации бактериальных клеток.

## II. ПОСТРОЕНИЕ 3D-МОДЕЛИ

Для построения модели наночастиц серебра были предварительно определены их форма и размеры по изображениям, полученным на сканирующем электронном микроскопе (СЭМ) Hitachi 4800 и обработанным в программе ImageJ. Было установлено, что наночастицы имеют форму, близкую к сферической, и имеют эффективный диаметр порядка 31 нм. Результаты анализа были подтверждены измерениями дзета-потенциала с помощью системы Zetasizer Nano ZSP. На рисунке 1 представлено СЭМ-изображение полученных наночастиц серебра, а также гистограмма распределения наночастиц по размерам. Несмотря на то что форма наночастиц стремится к сферической, для каждой из них характерна определенная огранка. При этом стоит иметь в виду, что именно структура поверхности наночастиц играет наибольшее значение, когда речь идет об их электродинамических свойствах [7],

Однако для упрощения построения модели была выбрана именно сферическая форма наночастиц без выраженных граней, которые имели эффективный диаметр 31 нм.

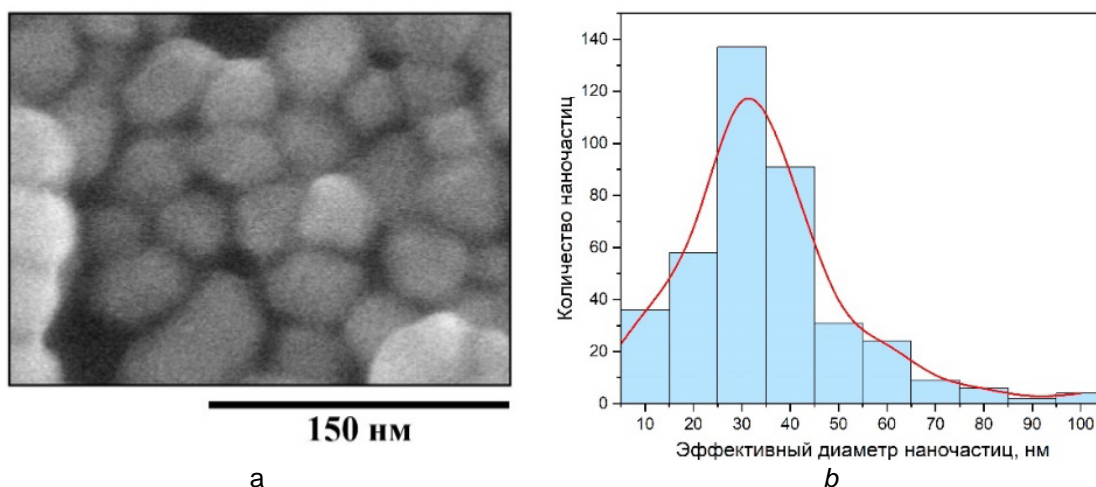


Рисунок 1. СЭМ-изображение наночастиц серебра (а) и гистограмма их распределения по величине эффективного диаметра (b)

Оригинальность выполненного исследования заключается в том, что при моделировании была принята во внимание оболочка из стабилизирующего агента на поверхности наночастиц, которая состояла из сукцинат-ионов янтарной кислоты. Для изучения влияния данной оболочки были произведены измерения электрических и оптических характеристик янтарной кислоты, которые были использованы для создания пользовательского материала. Помимо этого, для моделирования электродинамических свойств наночастиц был разработан пользовательский материал, включающий в себя зависимости констант коэффициентов отражения ( $n$  и  $k$ ) от длины волны излучения (данные были заимствованы из статьи Джонсона и Кристи [8]). Также при симуляции было учтено, что наночастицы находятся в среде фосфатно-солевого буфера (ФСБ), оптимальной для жизни бактериальных клеток. Соответствующий материал был добавлен вручную в результате измерений требуемых для моделирования параметров.

### III. ПОЛУЧЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Моделирование электродинамических свойств, а именно распределения напряженности электрического поля вблизи наночастиц, производилось при различных расстояниях между ними и толщинах оболочки стабилизирующего агента. При этом для удобства были подобраны параметры для получения возбуждающего излучения, которое формирует поле напряженностью равной 1 В/м, что позволило получать распределения для значений коэффициента усиления напряженности электрического поля. Было выяснено, что степень усиления напряженности электрического поля вблизи частоты возбуждения поверхностного плазмонного резонанса лежит в пределах от 8 до 10 раз, а электрическое поле локализуется на расстоянии вплоть до 10 нм от поверхности наночастиц. При этом на частоте поверхностного плазмонного резонанса усиление напряженности электрического поля достигает пикового значения в 36–37 раз. Результаты моделирования также коррелируют с выводами, которые можно сделать при анализе экспериментальных спектров поглощения наночастиц, сделанных на спектрофотометре МС 122. По спектрам определено, что длина волны, соответствующая максимуму поглощения света коллоидными наночастицами серебра, совпадает с длиной волны, при которой достигается максимум усиления электрического поля при моделировании наночастиц с оболочкой из сукцинат-ионов янтарной кислоты толщиной 0,3 нм.

Помимо этого, был проведен параметрический анализ зависимости степени усиления электрического поля от расстояния между наночастицами. Увеличение расстояния от 1 до 30 нм приводит к резкому убыванию коэффициента усиления с 86 до 8 раз. Наблюдается 2 области резкого убывания коэффициента усиления в диапазоне от 1 до 3 нм (снижение с 86 до 35 раз) и от 10 до 20 нм (снижение с 27 до 10 раз) соответственно. При этом стоит отметить, что при расстояниях между наночастицами от 1 до 5 нм область усиления электрического поля носит очень локальный характер (усиление наблюдается в области размером порядка  $3 \times 1$  нм). На рисунке 2 представлены зависимость степени усиления электрического поля от расстояния между наночастицами, а также профиль распределения напряженности электрического поля вблизи наночастиц.

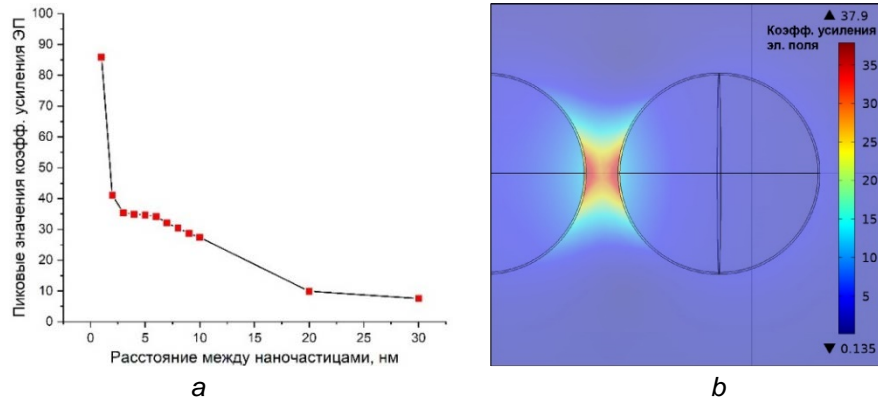


Рисунок 2. Зависимость коэффициента усиления электрического поля от расстояния между наночастицами (а), профиль распределения напряженности электрического поля вблизи поверхности наночастиц (б)

Было установлено, что наличие оболочки приводит к незначительному изменению характера распределения электрического поля вблизи наночастиц. При этом происходит уменьшение степени усиления электрического поля вблизи наночастицы с 14 до 10 раз. На рисунке 3 представлены зависимости пиковых значений степени усиления электрического поля от толщины оболочки янтарной кислоты в диапазоне длин волн около возбуждения ЛППР. Как следует из зависимостей, при увеличении толщины оболочки из сукцинат-ионов янтарной кислоты положение полосы ЛППР смещается в длинноволновую область, что может быть связано с возникновением новой среды с отличным от ФСБ коэффициентом преломления.

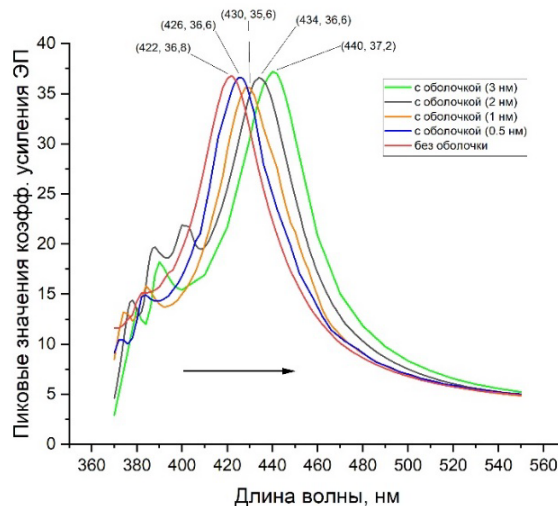


Рисунок 3. Зависимость коэффициента усиления электрического поля в области ЛППР от толщины оболочки стабилизирующего агента

#### IV. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Модель сферических наночастиц серебра диаметром 31 нм, покрытых оболочкой из янтарной кислоты (сукцинат-ионов), показала их способность к усилению напряженности электрического поля вблизи поверхности в 37 раз.
2. Степень усиления напряженности электрического поля очень чувствительна к расстоянию между наночастицами и убывает от 86 до 8 раз при его увеличении от 1 до 30 нм.
3. Оболочка из стабилизирующего агента незначительно влияет на характер распределения напряженности электрического поля вблизи наночастиц, однако приводит к его ослаблению. Увеличение толщины оболочки из сукцинат-ионов янтарной кислоты смещает положение полосы ЛППР в длинноволновую область.

Полученные результаты в дальнейшем могут быть использованы для предсказания поведения коллоидных наночастиц в растворах, а также для оценки возможности их применения в качестве генераторов высокоинтенсивных локальных электрических полей для проведения фотоиндуцированной электропорации бактериальных клеток.

## БЛАГОДАРНОСТЬ

Авторы выражают благодарность УО «Унитехпром БГУ» за проведение измерений дзета-потенциала наночастиц. Исследования выполнены в рамках гранта Министерства образования Республики Беларусь ГБЦ № 23–3171 М.

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] Nanoparticle Characterization: What to Measure? / M. M. Modena [et. al.] // *Advanced Materials*. 2019. Vol. 31 No 32. P. 1901556.
- [2] What Does Nanoparticle Stability Mean? / H. T. Phan, A. J. Haes // *Journal of Physical Chemistry C*. 2019. Vol. 123 No 27. PP. 16495–16507.
- [3] A review on nanoparticles: characteristics, synthesis, applications, and challenges / K. A. Altammar // *Frontiers in Microbiology*. 2023. Vol. 14. P. 1155622.
- [4] Influence of Morphology on the Optical Properties of Metal Nanoparticles / A. L. González, C. Noguez // *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*. 2006. Vol. 4 No 2. PP. 231–238.
- [5] Plasmonics brings the molecular world into sharper focus [Electronic Resource] // *Knowable Magazine*. Mode of access : <https://knowablemagazine.org/content/article/physical-world/2019/plasmonics-brings-molecular-world-sharper-focus>. Date of access : 17.11.2024.
- [6] Synthesis silver nanoparticles using trisodium citrate and development in analysis method / M. S. Arif [et. al.] // *AIP Conference Proceedings*. 2021. Vol. 2360 No 1.
- [7] Optical Properties and Applications of Plasmonic-Metal Nanoparticles / L. Wang [et. al.] // *Advanced Functional Materials*. 2020. Vol. 30 No 51. P. 2005400.
- [8] Optical Constants of the Noble Metals / P. B. Johnson, R. W. Christy // *Physical Review B*. 1972. Vol. 6 No 12. P. 4370.

## MODELING OF ELECTRODYNAMIC PROPERTIES OF COLLOIDAL PLASMONIC SILVER NANOPARTICLES COATED WITH A STABILIZING AGENT

A. Borysiuk, H. Bandarenka

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus,  
[a.borisuk@bsuir.by](mailto:a.borisuk@bsuir.by)

**Abstract:** Here, we report on a simulation of spherical nanoparticles of a 31-nm diameter coated with a shell that has optical and electrical parameters of succinic acid in a phosphate buffer. It was found that such nanoparticles can enhance the electric field strength near the surface up to 37 times. The coefficient of amplification of the electric field strength strongly depends on the distance between the nanoparticles and decreases by 10 times once the distance changes from 1 to 30 nm. It is shown that an increase in the thickness of the succinic acid shell leads to a shift of the localized surface plasmon resonance band of silver nanoparticles to longer wavelengths.

**Keywords:** silver nanoparticles, stabilizing agent, electric field distribution, plasmon resonance, cell electroporation.

УДК 539.21

СПИНОВАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ ЭЛЕКТРОНОВ НА ПОВЕРХНОСТНЫХ СОСТОЯНИЯХ ДИОКСИДА  
ТИТАНА В ГЕТЕРОСТРУКТУРЕ Si/ФМ/TiO<sub>2</sub> ПРИ ОБЛУЧЕНИИ СОЛНЕЧНЫМ СВЕТОМ

Сидорова Т.Н., Данилюк А.Л.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
Минск, Республика Беларусь, [sharsu\\_antea@bk.ru](mailto:sharsu_antea@bk.ru)

Аннотация: Рассмотрены процессы спиновой инжекции при спин-зависимом туннелировании электронов на поверхностные состояния диоксида титана, образованные адсорбированными органическими соединениями. Доказано, что чем выше величина спиновой поляризации, тем больше значение обменной длины, а зависимость от концентрации электронов характеризуется наличием максимума. Данные взаимосвязи позволяют конструировать фотокаталитические покрытия на основе Si/ферромагнетик (ФМ)/TiO<sub>2</sub> гетероструктур, что может способствовать реализации процессов спинового катализа для увеличения эффективности разложения органических соединений на поверхности диоксида титана.

Ключевые слова: диоксид титана, гетероструктура, солнечное излучение, спиновая поляризация, обменная длина.

## I. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время активно изучаются процессы создания структур на основе TiO<sub>2</sub>, обладающих фотокаталитической активностью в видимой части спектра солнечного излучения. Одним из них является использование гетероструктур, состоящих из чередующихся слоёв TiO<sub>2</sub> и кремния (Si). Для возникновения спинового фотокатализа, эффективность которого определяется обменной длиной  $L_{ex}$ , на поверхности TiO<sub>2</sub> необходимо обеспечить спиновую инжекцию электронов, генерированных в кремнии. В данной работе такая спиновая инжекция рассматривается в гетероструктуре кремний/ферромагнетик/диоксид титана.

## II. МОДЕЛЬ

Рассмотрим процессы, происходящие в гетероструктуре TiO<sub>2</sub>/ферромагнетик (ФМ)/Si. Поскольку в гетероструктуре Si/TiO<sub>2</sub>, облучаемой поляризованным солнечным светом, степень спиновой поляризации носителей заряда не высока, то нами в качестве источника спин-поляризованных электронов между Si и TiO<sub>2</sub> используется металлический спиновый инжектор (CoFe, Co и т.п.), который может обеспечить необходимую величину спиновой поляризации. Потенциальная диаграмма такой структуры представлена на рисунке 1 [1]. Дырки, сгенерированные в кремнии, отталкиваются от потенциального барьера на границе со спиновым инжектором и рекомбинируют с электронами в кремнии. Электроны, генерируемые в кремнии, ввиду отсутствия потенциального барьера на границе со спиновым инжектором переходят в него. Далее электроны, приобретая определенную спиновую поляризацию, переходят в TiO<sub>2</sub> и далее туннелируют на его поверхностные состояния.

Потенциальный рельеф поверхности TiO<sub>2</sub>, обусловленный поверхностными состояниями, образованными адсорбированными на поверхности TiO<sub>2</sub> химическими компонентами в общем случае имеет достаточно сложную форму. Потенциальный рельеф включает локальные энергетические максимумы и минимумы, отражающие определенные поверхностные состояния и возможные переходы электронов между ними. Прохождение электронов на поверхностные состояния происходит путем их туннелирования из объема TiO<sub>2</sub>.

В соответствии с предложенной моделью на основе метода фазовых функций [1,2] рассчитаны параметры двух возможных потенциальных рельефов в TiO<sub>2</sub> и коэффициенты их туннельной прозрачности для электронов, генерируемых солнечным светом в Si и туннелирующих на поверхностные состояния TiO<sub>2</sub>, образованные адсорбированными органическими соединениями.



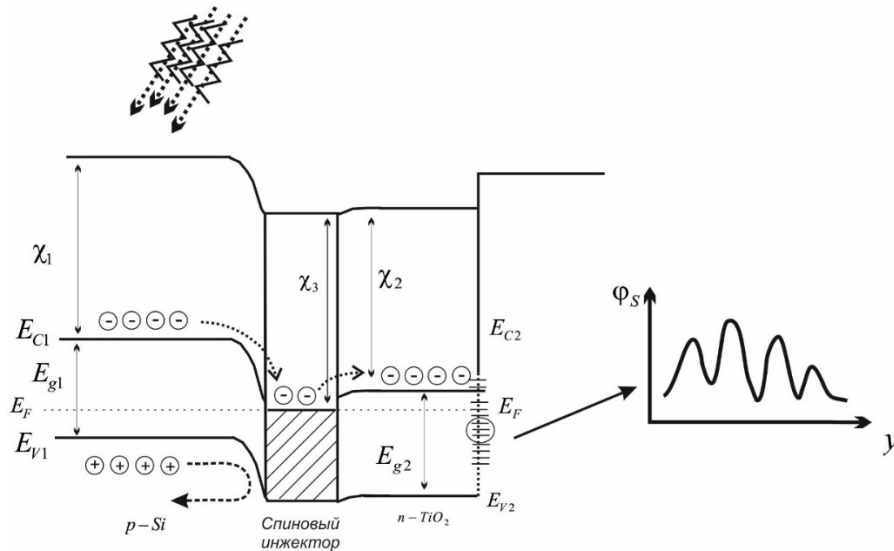


Рисунок 1. Потенциальная диаграмма структуры TiO<sub>2</sub>/спиновый инжектор/Si с учетом поверхностных состояний на TiO<sub>2</sub> [1]

На основании полученных результатов отметим, что степень спиновой поляризации электронов на поверхности всегда ниже их спиновой поляризации в инжекторе, что в данном случае связано с наличием отражения части электронов от потенциального барьера. На основе полученных результатов можно заключить, что чем уже барьер, тем больше вероятность туннелирования и повышения когерентности (уменьшение фазовых сдвигов). Кроме этого, передняя часть профиля при увеличении потенциала попадает в область сильного снижения части барьера. Указанные два фактора приводят как к существенному росту степени поляризации, так и к насыщению ее. В случае узкой потенциальной ямы наблюдается первоначальный порог и дальнейший резкий рост степени поляризации до 25% [1]. При увеличении ширины потенциальной ямы наблюдается иной характер зависимостей – появляется область насыщения. Поляризованные электроны на поверхности TiO<sub>2</sub> способствуют протеканию реакции окисления. Ее ускорение влияет на протекание спинового катализа.

Спиновый катализ – это стимулирование химических реакций за счёт изменения электронного углового момента (спина) реагентов. Его источником является фундаментальный закон сохранения спина: разрешены только те направления реакции, в которых спин продуктов идентичен спину реагентов; все остальные реакционные каналы строго запрещены.

Физический смысл и назначение спинового катализа состоит в том, чтобы снимать спиновый запрет, изменять спин реагентов и открывать каналы реакции, закрытые по спину. Эти функции выполняет спиновый катализатор – частица, несущая собственный электронный спин (атом, радикал или ион). Взаимодействуя с реагирующей системой, спиновый катализатор обобществляет свой спин со спином реагирующей системы; в такой обобщённой спиновой системе ранее закрытые реакционные каналы становятся открытыми, т.е. разрешенными по спину. Одним из основных параметров, определяющих протекание спинового катализа, является обменная длина.

### III. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОБМЕННОЙ ДЛИНЫ

Обменная длина определяется выражением [3]

$$L_{ex} = \sqrt{D_{ex} \tau_s}, \quad (1)$$

где  $D_{ex}$  – коэффициент спиновой диффузии,  $\tau_s$  - время корреляции электронного спина. Величина коэффициента спиновой диффузии равна:

$$D_{ex} = \frac{1}{3} r_s^2 \frac{J(n_s)}{\hbar}, \quad (2)$$

где среднее расстояние между электронами на поверхности  $r_s = (1/\pi n_s)^{1/2}$ ,  $n_s$  – концентрация электронов на поверхности диоксида титана, энергия обменного взаимодействия [3]

$$J(n_s) = 0.82 \frac{f(p)}{2} \frac{q^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 a_B} \left(\frac{r_s}{a_B}\right)^{5/2} \exp\left(-\frac{r_s}{a_B}\right). \quad (3)$$

Здесь функция  $f(p) = (1+p)^{3/2} + (1-p)^{3/2}$ ,  $a_B$  - боровский радиус электрона на доноре,  $p$  – спиновая поляризация.

С помощью выражений (1)–(3) можно рассчитать обменную длину в зависимости от концентрации электронов, времени корреляции электронного спина и степени поляризации. На основе полученных выражений была рассчитана обменная длина в зависимости от концентрации  $n_s$  при различных значениях борковского радиуса электрона на доноре (рис. 2a), времени корреляции электронного спина (рис.2b), степени поляризации (рис. 3).

На рисунке 2a представлена зависимость обменной длины от концентрации  $n_s$  при различных значениях борковского радиуса электрона на доноре. Видно, что значение обменной длины увеличивается при увеличении значения концентрации. Когда значение концентрации достигает величины (1-5)  $10^6 \text{ м}^{-2}$ , значение обменной длины начинает постепенно уменьшаться. Поведение зависимости качественно совпадает для всех рассматриваемых значений борковского радиуса электрона на доноре.

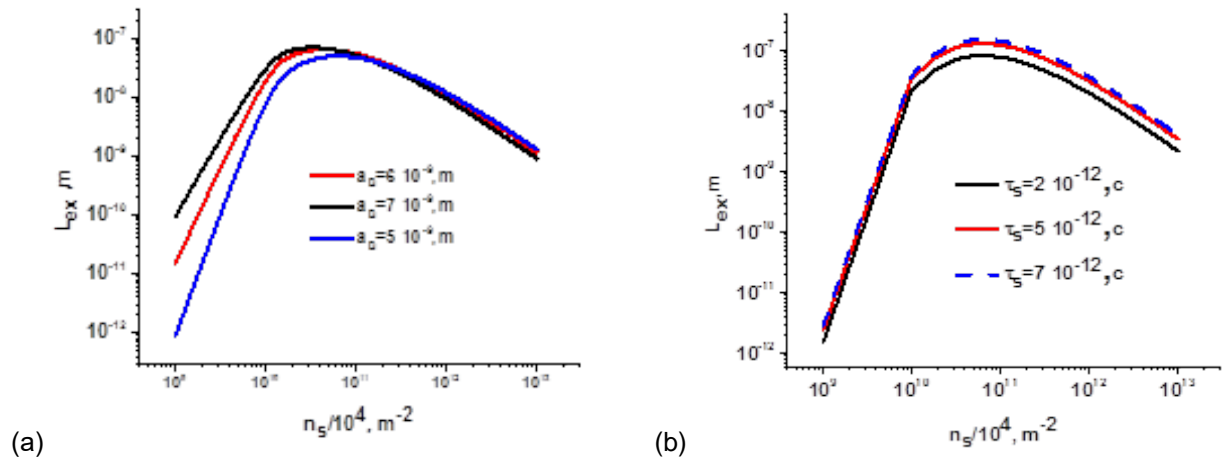


Рисунок 2. Обменная длина в зависимости от концентрации  $n_s$  при различных значениях борковского радиуса электрона на доноре (a) и при различных значениях времени корреляции электронного спина (b)

При увеличении значения борковского радиуса электрона на доноре значение обменной длины также увеличивается. Численное значение  $L_{ex}$  меняется незначительно в зависимости от значения времени корреляции электронного спина. Когда значение концентрации достигает величины  $1 \cdot 10^7 \text{ м}^{-2}$ , значение обменной длины начинает постепенно уменьшаться. При увеличении времени корреляции электронного спина значение обменной длины также увеличивается.

Также была рассчитана обменная длина в зависимости от концентрации при различных значениях степени поляризации (Рисунок 3). Показано, что чем выше величина степени поляризации  $p$ , тем больше значение обменной длины.

Расчёт обменной длины показал, что ее величина немонотонно меняется с увеличением концентрации электронов на поверхности диоксида титана, рисунок 2b. С ростом концентрации в диапазоне  $10^{10}$ - $10^{12} \text{ см}^{-2}$  при данных параметрах ( $a_B=5 \text{ нм}$ ,  $\tau_s=1 \text{ пс}$ ) обменная длина достигает максимума 50-60 нм в области концентраций электронов  $(6-8) \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ .

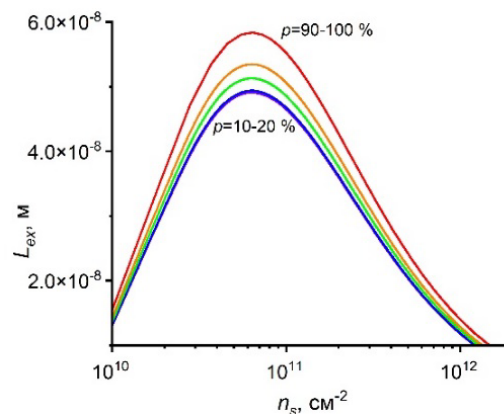


Рисунок 3. Обменная длина в зависимости от концентрации  $n_s$  при различных значениях степени поляризации

Таким образом, значение обменной длины увеличивается при увеличении времени корреляции пропорционально  $\tau_s^{1/2}$  и уменьшается со снижением  $a_B$ . Рост обменной длины в зависимости от увеличения степени спиновой поляризации составляет при  $p=50\%$  в 1,05 раза, а при  $p=90-100\%$  в 1,2 раза. Поэтому для увеличения обменной длины необходимо применять спиновые инжекторы с высокой степенью спиновой поляризации, например, сплавы Гейслера, а также управлять концентрацией электронов на поверхности диоксида титана.

#### IV. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Было установлено, что зависимость обменной длины от концентрации электронов имеет немонотонный характер. При увеличении степени поляризации, времени корреляции электронного спина, боровского радиуса электрона на поверхностных состояниях диоксида титана величина обменной длины в максимуме растет. Данные взаимосвязи позволяют конструировать фотокаталитические покрытия на основе Si/ферромагнетик(ФМ)/TiO<sub>2</sub> гетероструктур для повышения эффективности процесса спинового фотокатализа.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Сидорова, Т. Н. Спин-зависимое туннелирование на поверхностные состояния диоксида титана / Т.Н.Сидорова, А.Л.Данилюк, В.Е.Борисенко // М.: Доклады НАН РБ, – 2020.
- [2] Метод фазовых функций в квантовой механике / В.В.Бабилов // М.: Наука, 1976. – 224 с.
- [3] С. Herring [и др.] Phys. Rev. 34 (1964) 362.

#### SPIN POLARISATION ON THE SURFACE STATES OF THE TITANIUM DIOXIDE IN THE Si/FM/TiO<sub>2</sub> HETEROSTRUCTURE AT THE SUN EXPOSURE

T. Sidorova, A. Danilyuk

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus,  
[sharsu\\_antea@bk.ru](mailto:sharsu_antea@bk.ru)

Abstract: Processes of the spin injection at the spin –dependent tunneling of the electrons to the titanium dioxide surface states, created by the organic compounds, were observed. It was proved that the higher is spin polarization, then more is exchange length. Dependence from the electron concentration is characterized by the Maximum availability. Current interconnections permit to create photocatalytic covers based on Si/ferromagnetic(FM)/TiO<sub>2</sub> heterostructures. It can assist to the realization of the spin catalysis processes for the increasing of the efficiency of the decomposition of organic compounds on the TiO<sub>2</sub> surface states.

Keywords: titanium dioxide, heterostructure, sun exposure, spin polarization, exchange length.

УДК 535.015, 53.06

## ЗАРЯДОВЫЕ СВОЙСТВА ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ ПЛЕНКИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК НА КРЕМНИИ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ УЛЬТРАФИОЛЕТОМ

Курапцова А.А., Данилюк А.Л.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
Минск, Республика Беларусь, [anku21qwerty@gmail.com](mailto:anku21qwerty@gmail.com)

Аннотация: В работе путем компьютерного моделирования с помощью программного пакета Comsol Multiphysics исследуются зарядовые свойства гетероструктуры пленка одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ) на кремнии в условиях падающего на гетероструктуру излучения длиной волны 300 нм. В результате моделирования были обнаружены зависимости поверхностной плотности электрического заряда  $\sigma$  и потенциала  $V_s$  от энергии  $E_i$  ловушечных состояний на поверхности пленки, монотонное уменьшение данных значений с ростом  $E_i$ , а также отличие в значениях данных величин в условиях наличия падающего излучения и его отсутствия. Наибольшая разница в значениях  $\sigma$  при наличии излучения и его отсутствии была обнаружена при  $E_i=0$  эВ и составила  $10^{-6}$  мкКл/см<sup>2</sup>. Различие в значениях  $V_s$  слабо отличалось для каждого значение энергии  $E_i$  и составляло примерно 47 мВ.

Ключевые слова: углеродные нанотрубки, кремний, гетероструктура, пленка, ультрафиолетовое излучение.

### I. ВВЕДЕНИЕ

Углеродные наноматериалы представляют широкий класс соединений: графен, фуллерены, нанотрубки, нановолокна и другие. Одна из таких макроструктур – пленки, составленные из углеродных нанотрубок, которые ориентированы в случайном порядке. Пленка ОУНТ состоит из переплетенных нанотрубок, каждая из которых характеризуется своими свойствами, такими как диаметр, длина, хиральность и т.д. Однако пленку ОУНТ можно рассматривать, как целостный объект, что упрощает интерпретацию данных [1].

Среди потенциальных применений гетероструктур на основе углеродных композитов в различных областях электроники следует особо отметить их перспективность в оптоэлектронике. Перспективной для оптоэлектроники является гетероструктура пленка ОУНТ/кремний, зарядовые свойства которой рассматриваются в данной работе. Это связано с рядом отличительных особенностей ОУНТ, таких как низкое удельное сопротивление, высокая прозрачность в видимом и ближнем ИК-диапазоне, возможность гибкой настройки свойств материала за счет изменения параметров роста или химического легирования, стабильность при температурах, значительно превышающих комнатную, прямая запрещенная зона [1]. В работах последнего десятилетия продемонстрирована перспективность использования гетеропереходов ОУНТ/кремний в качестве солнечных элементов для преобразования энергии, а также эффективных сверхбыстрых широкополосных фотодетекторов [2]. Свойства и, в частности, электропроводность ОУНТ зависит от множества факторов их формирования [3], что позволяет создавать углеродные нанотрубки с заранее заданными свойствами.

Ультрафиолетовое излучение – электромагнитное излучение, занимающее спектральный диапазон между видимым и рентгеновским излучениями. Длины волн УФ-излучения лежат в интервале от 10 до 400 нм ( $7,5 \cdot 10^{14}$ - $3 \cdot 10^{16}$  Гц), что соответствует энергии излучения 124 – 3,1 эВ. Подавляющая часть УФ-излучения, испускаемого Солнцем, поглощается озоном, парами воды, кислородом и углекислым газом. Но благодаря созданию и совершенствованию искусственных источников УФ-излучения сейчас возможно получение излучения с длиной волны начиная от десятка нанометров, что находит применение в различных областях, таких как медицина, обеззараживание воздуха и поверхностей, косметология, криптография, хроматографический анализ, биотехнологии, масс-спектропия, сельское хозяйство и многих других [4].

### II. МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

В данной работе рассматривается гетероструктура пленка одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ) на кремнии. Целью данной работы является моделирование зарядовых свойств гетероструктуры пленка ОУНТ толщиной 50 нм на кремниевой подложке толщиной 2 мкм. В процессе формирования пленки ОУНТ на кремнии образуется тонкий слой оксида кремния SiO<sub>2</sub>, в исследуемой модели толщина слоя SiO<sub>2</sub> составляла 2 нм.

Моделирование было проведено с помощью программного пакета Comsol Multiphysics на основании решения модели Андерсона для полупроводниковых гетеропереходов, решения уравнения Пуассона,

уравнений непрерывности для электронов и дырок и уравнений Максвелла для электромагнитных волн. Моделирование проводилось на основании двумерной модели.

Длина волны падающего на структуру излучения  $\lambda=300$  нм. Плотность мощности излучения составляла  $1000$  Вт/м<sup>2</sup>. Для ОУНТ, кремния и оксида кремния задавался комплексный показатель преломления, его действительная  $n$  и мнимая  $k$  части [5,6,7].

Основные свойства использованных материалов представлены в табл. 1.

Таблица 1. Параметры материалов

	n-Si	SiO <sub>2</sub>	n-ОУНТ
Ширина запрещенной зоны, эВ	1,124	8	0,3
Сродство к электрону, эВ	4,05	0,75	4,2
Относительная диэлектрическая проницаемость	11,7	3,9	4,75
Время жизни электронов, мкс	10	0,012	0,0004
Время жизни дырок, мкс	10	0,012	0,0004
Концентрация примеси, см <sup>-3</sup>	10 <sup>16</sup>	-	10 <sup>18</sup>
Подвижность электронов, см <sup>2</sup> /(В·с)	1450	21	56
Подвижность дырок, см <sup>2</sup> /(В·с)	500	0,0001	56
Показатель преломления:			
- действительная часть $n$	4,976	1,46	1,51288
- мнимая часть $k$	4,234	0,0019	0,64472

В процессе формирования пленки ОУНТ на поверхности возникают различные ловушки носителей заряда. В основном они вызваны адсорбцией ионов кислорода O<sup>-</sup>, что обеспечивает n-тип проводимости ОУНТ [1]. Ловушечные состояния возникают также в оксиде кремния на поверхности кремниевой подложки. На поверхности ОУНТ были заданы ловушечные состояния донорного типа плотностью  $10^{12}$  см<sup>-2</sup> и с энергией  $E_t$  от 0 до 0,1 эВ считая от дна зоны проводимости [1], в объеме SiO<sub>2</sub> были заданы ловушки донорного типа плотностью  $10^{12}$  см<sup>-3</sup> и энергией 0,34 эВ считая от дна зоны проводимости [8].

В результате моделирования гетероструктуры была получена зависимость плотности электрического заряда  $\sigma$  на поверхности пленки ОУНТ от энергии ловушечных состояний  $E_t$  (рис. 1) при облучении светом длиной волны 300 нм.

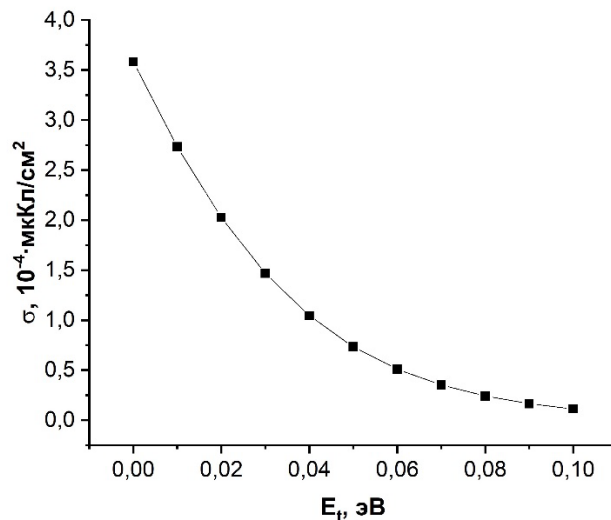


Рисунок 1. Зависимость поверхностной плотности заряда на поверхности ОУНТ от энергии  $E_t$

При наличии падающего на гетероструктуру излучения длиной волны 300 нм плотность заряда  $\sigma$  на поверхности пленки с увеличением значения  $E_t$  монотонно уменьшается от  $\sigma=3,6 \cdot 10^{-4}$  мкКл/см<sup>2</sup> при  $E_t=0$  эВ до  $\sigma=1,1 \cdot 10^{-5}$  мкКл/см<sup>2</sup> при  $E_t=0,1$  эВ. При отсутствии падающего излучения  $\sigma$  также монотонно уменьшается при росте  $E_t$  и незначительно превосходит значения  $\sigma$  в условиях наличия излучения, при  $E_t=0$  эВ на  $10^{-6}$  мкКл/см<sup>2</sup> и при  $E_t=0,1$  эВ на  $1,5 \cdot 10^{-9}$  мкКл/см<sup>2</sup>.

Также была получена зависимость электрического напряжения  $V_s$  от энергии ловушечных состояний  $E_t$ . Как при наличии излучения, так и при его отсутствии значение  $V_s$  монотонно уменьшалось при росте  $E_t$  на величину 0,5 мВ и 0,17 мВ, соответственно. Но в условиях падающего излучения значения  $V_s$  были существенно выше, чем при его отсутствии, при  $E_t=0$  эВ 119,7 и 72,4 мВ, соответственно. Для всех значений  $E_t$  различие  $V_s$  оставалось приблизительно одинаковым, 47,4 мВ для  $E_t=0$  эВ и 47,04 мВ для  $E_t=0,1$  эВ.

Для объяснения полученных результатов была построена энергетическая диаграмма структуры по оси перпендикулярной поверхности пленки (рис. 2). Разрыв между зонами проводимости кремния и пленки ОУНТ, препятствующий току электронов из пленки ОУНТ в кремний, составил 0,22 эВ. Разрыв между валентной зоной кремния и пленки ОУНТ составил 0,6 эВ, и также блокировал протекание дырок из пленки ОУНТ в кремний.

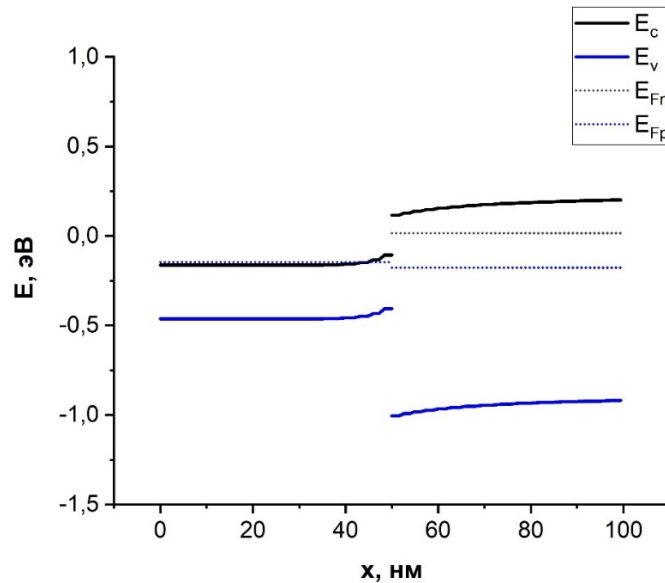


Рисунок 2. Энергетическая диаграмма гетероструктуры Si/ОУНТ

Плотность тока электронов через границу раздела кремний/ОУНТ при облучении структуры излучением длиной волны 300 нм составила приблизительно  $47 \text{ A/cm}^2$  в направлении из кремния в пленку ОУНТ, в то же время при отсутствии облучения плотность тока электронов составляла  $527 \text{ A/cm}^2$ . Плотность тока дырок через границу кремний/ОУНТ составила приблизительно  $0,006 \text{ мкА/см}^2$  при отсутствии излучения, а при его наличии показала зависимость от энергии  $E_t$ , монотонно снижаясь от  $2,9 \text{ мкА/см}^2$  при  $E_t=0$  эВ до  $0,55 \text{ мкА/см}^2$  при  $E_t=0,1$  эВ.

Скорость генерации носителей заряда у поверхности пленки ОУНТ равняется  $2,72 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}\text{с}^{-1}$ , а в кремнии около границы раздела кремний/ОУНТ  $1,37 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}\text{с}^{-1}$ . Концентрация дырок в кремнии около границы раздела равна  $740 \text{ см}^{-3}$  при отсутствии падающего излучения и  $1,3 \cdot 10^5 \text{ см}^{-3}$  при его наличии. Концентрация дырок в пленке ОУНТ около границы раздела кремний/ОУНТ достигала  $5,4 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$  при отсутствии падающего излучения и  $3,4 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$  при его наличии.

Плотность тока дырок, в отличие от плотности тока электронов, через пленку ОУНТ показала зависимость от энергии  $E_t$ , около поверхности пленки  $0,19 \text{ мА/см}^2$  при  $E_t=0$  эВ и  $2,7 \text{ мкА/см}^2$  при  $E_t=0,1$  эВ. При n-типе легирования кремниевой подложки уменьшение толщины пленки ОУНТ вероятно позволит увеличить концентрацию дырок на границе раздела кремний/ОУНТ за счет увеличения скорости генерации носителей заряда в кремнии.

### III. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты моделирования зарядовых процессов в гетероструктуре кремний/пленка ОУНТ при облучении электромагнитными волнами с длиной волны 300 нм показали зависимость зарядовых свойств гетероструктуры от параметров ловушечных состояний на поверхности пленки ОУНТ.

Полученные результаты продемонстрировали возможность управления работой фотоэлектрических устройств в ультрафиолетовой области электромагнитного излучения, а также необходимость разработки методов формирования пленок ОУНТ с гибким контролем их свойств, в частности параметров ловушечных состояний.

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] Infrared photodetectors based on multiwalled carbon nanotubes: Insights into the effect of nitrogen doping / R. Kumar [et al.] // *Applied Surface Science*. – 2021. – Vol. 538. – P. 148187-148197
- [2] Hu, X. Carbon nanotube/silicon heterojunctions for photovoltaic applications / X. Hu, P. Hou, C. Liu, H. Cheng // *Nano Materials Science*. 2019. Vol. 1. P. 156–172.
- [3] Шандаков, С. Д. Допирование углеродных нанотрубок и графена / С. Д. Шандаков, А. И. Вершинина, М. В. Ломакин, А. В. Кособуцкий, А. Г. Насибулин // *Вестник Кемеровского государственного университета*. – 2015. - № 2 (62) Т. 5. – С. 127-131.
- [4] Evaluation of the Degradation of Materials by Exposure to Germicide UV-C Light Through Colorimetry, Tensile Strength and Surface Microstructure Analyses / O. Mitxelena-Iribarren [et al.] // *Materials Today Communications*. Elsevier. 2022. Vol. 31. P. 103690.
- [5] Green, M. A. Self-consistent optical parameters of intrinsic silicon at 300K including temperature coefficients / M. A. Green // *Solar Energy Materials & Solar Cells*. 2008. Vol. 92. P. 1305-1310.
- [6] Express determination of thickness and dielectric function of single-walled carbon nanotube films / G. A. Ermolaev [et al.] // *Appl. Phys. Lett.* 2020. Vol. 116. P. 231103.
- [7] Rodríguez-de Marcos, L. V. Self-consistent optical constants of SiO<sub>2</sub> and Ta<sub>15</sub> films / L. V. Rodríguez-de Marcos, J. I. Larruquert, J. A. Méndez, J. A. Aznárez // *Opt. Mater. Express*. 2016. Vol. 6, No. 11. P. 3622-3637.
- [8] Дементьев, П.А. Ловушки в нанокompозитном слое кремний-диоксид кремния и их влияние на люминесцентные свойства / П. А. Дементьев, Е. В. Иванова, М. В. Загорянская // *ФТТ*. 2019. № 61(8). С. 1448-1454.

## CHARGE PROPERTIES OF A HETEROSTRUCTURE OF CARBON NANOTUBES FILM ON SILICON UNDER ULTRAVIOLET IRRADIATION

A. Kuraptsova, A. Danilyuk

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus,  
[anku21qwerty@gmail.com](mailto:anku21qwerty@gmail.com)

**Abstract:** In this work, the charge properties of a heterostructure of a single-wall carbon nanotubes (SWCNT) film on silicon under irradiation of 300 nm wavelength are investigated by using computer modeling with the Comsol Multiphysics software package. As a result of modeling, the dependences of the surface electric charge density  $\sigma$  and the potential  $V_s$  on the energy  $E_t$  of trap states on the film surface, a monotonic decrease in these values with increasing  $E_t$ , as well as a difference in these values under conditions of the presence of incident irradiation and its absence were found. The greatest difference in the  $\sigma$  values in the presence and absence of irradiation was found at  $E_t=0$  eV and was  $10^{-6}$   $\mu\text{C}/\text{cm}^2$ . The difference in the  $V_s$  values was slightly different for each value of the energy  $E_t$  and was approximately 47 mV.

**Key words:** carbon nanotubes, silicon, heterostructure, film, ultraviolet radiation.

УДК 621.315.592

## РАЗРАБОТКА ЛАВИННЫХ СВЕТОДИОДОВ НА ОСНОВЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОГО КРЕМНИЯ ДЛЯ ГИГАГЕРЦОВОГО ДИАПАЗОНА ЧАСТОТ

Лазарук С.К.<sup>1</sup>, Лешок А.А.<sup>1</sup>, Долбик А.В.<sup>1</sup>, Томашевич Л.П.<sup>1</sup>, Ключцкий А.Ю.<sup>1</sup>, Дудич В.В.<sup>1</sup>, Лабунов В.А.<sup>1</sup>,  
Шабуня А.С.<sup>2</sup>, Петлицкий А.Н.<sup>2</sup>, Ефименко С.А.<sup>2</sup>, Петлицкая Т.В.<sup>2</sup>, Ковальчук Н.С.<sup>2</sup>, Кицюк Е.П.<sup>3</sup>,  
Рязанов Р.М.<sup>3</sup>, Басаев А.С.<sup>3</sup>, Светухин В.В.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск,  
Республика Беларусь, [serg@nano.bsuir.edu.by](mailto:serg@nano.bsuir.edu.by)

<sup>2</sup>ОАО «ИНТЕГРАЛ» – управляющая компания холдинга «ИНТЕГРАЛ», Минск, Республика Беларусь

<sup>3</sup>НПК «Технологический центр», Москва, Российская Федерация

Аннотация: Разработаны конструкция и технология изготовления лавинных светодиодов на основе наноструктурированного кремния. Сформированы матрицы светодиодов с различной рабочей площадью. Измерение емкости светодиодов показало, что уменьшение рабочей площади светодиодов позволяет снизить суммарную емкость устройства до десятых долей пикофарад, что позволяет лавинным светодиодам функционировать в гигагерцовом диапазоне частот. Даны рекомендации по дальнейшему увеличению быстродействия лавинных светодиодов вплоть до терагерцового диапазона частот.

Ключевые слова: наноструктурированный кремний, лавинные светодиоды, кремниевая фотоника, оптические межсоединения.

### I. ВВЕДЕНИЕ

Быстродействие современных интегральных схем ограничивается резистивно-емкостными задержками их электрических межсоединений, что не позволяет им функционировать на частотах более 10 ГГц. Данная проблема может быть решена за счет замены электрических межсоединений быстродействующими оптическими межсоединениями [1-6]. При этом главные трудности связаны с разработкой источников света на кремнии, который является основным материалом, используемым в интегральной электронике при изготовлении ИС. Ранее нами была разработана технология изготовления лавинных светодиодов на основе наноструктурированного кремния [7-13]. Ключевым преимуществом лавинных светодиодов является их высокое быстродействие, так как время лавинного отклика для кремния находится в фемтосекундном диапазоне, что теоретически обеспечивает функционировать приборов во всем гигагерцовом диапазоне частот. Однако, на практике быстродействие ограничивается емкостными задержками, обусловленными барьерной емкостью обратносмещенного перехода. В данной работе представлена конструкция лавинных светодиодов на основе наноструктурированного кремния, характеризующаяся низким значением барьерной емкости, что позволяет приборам функционировать в гигагерцовом диапазоне частот.

### II. ПРОЕКТИРОВАНИЕ, ИЗГОТОВЛЕНИЕ МАТРИЦ ЛАВИННЫХ СВЕТОДИОДОВ И ИЗМЕРЕНИЕ ИХ ПАРАМЕТРОВ

Лавинные светодиоды на основе наноструктурированного кремния проектировали с различными размерами светоизлучающих элементов, которые варьировались в диапазоне от единиц до сотен микрометров. Светодиоды формировали по технологии, совмещенной с технологией КМОП ИС, а именно, кремниевые пластины проходили все операции типового маршрута изготовления КМОП ИС, включая операцию создания n-карманов в окнах межкомпонентного диэлектрика SiO<sub>2</sub> [14]. Далее следовали ключевые операции изготовления лавинных светодиодов: осаждение алюминиево-кремниевой нанокompозитной пленки, состоящей из 75 ат.% алюминия и 25 ат.% кремния; фотолитография, определяющая геометрию электродов светодиодов и разделительного диэлектрика Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>; локальное сквозное электрохимическое анодирование алюминиево-кремниевой пленки, при котором алюминий полностью переходил в оксид алюминия, а кремниевые наноструктуры окислялись частично, в результате чего формировались кремниевые кластеры, встроенные в оксидную матрицу.

Далее сформированные светодиодные матрицы на кремниевых подложках проводили по стандартному маршруту изготовления КМОП ИС с двухуровневой алюминиевой металлизацией и с межуровневым диэлектриком на основе SiO<sub>2</sub>. Более подробно технология изготовления представлена в [14].



Сформированные светодиодные матрицы на кремниевых подложках разделяли на отдельные кристаллы при помощи скрайбирования. Далее проводились операции посадки полученных кристаллов в алюмооксидные корпуса и последующей разварки контактных площадок и выводов корпуса при помощи алюминиевой проволоки.

При исследовании характеристик сформированных светодиодных структур измерялась зависимость их емкости от напряжения смещения в диапазоне от 0 до 10 В. Также световой сигнал измерялся при подаче напряжения смещения синусоидальной формы различной частоты. При этом регистрировалась частота, на которой интенсивность светового сигнала уменьшалась в два раза относительно величины, характерной для низких частот. Уменьшение интенсивности светового сигнала свидетельствовало о временных задержках резистивно-емкостного характера, препятствующих внешней модуляции [1].

### III. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рисунке 1 представлены фотографии кристаллов со светодиодными матрицами сформированными согласно разработанной технологии. Светодиодная матрица с минимальными размерами светодиодов представлена дважды (рис. 1б – фотография всего чипа, рис. 1в – фотография светодиодной матрицы при увеличении 250 крат). Фотография с оптического микроскопа высокого разрешения показывает минимальные размеры светоизлучающих структур – квадраты со стороной 10 мкм. Для всех исследуемых образцов структура светодиодных матриц состояла из набора светодиодов  $5 \times 7$ , расположенных в форме прямоугольника, как это видно на рисунке 1а. Диапазон исследуемой рабочей площади светодиодов составляет от  $10 \text{ мкм}^2$  до  $4 \cdot 10^5 \text{ мкм}^2$ .

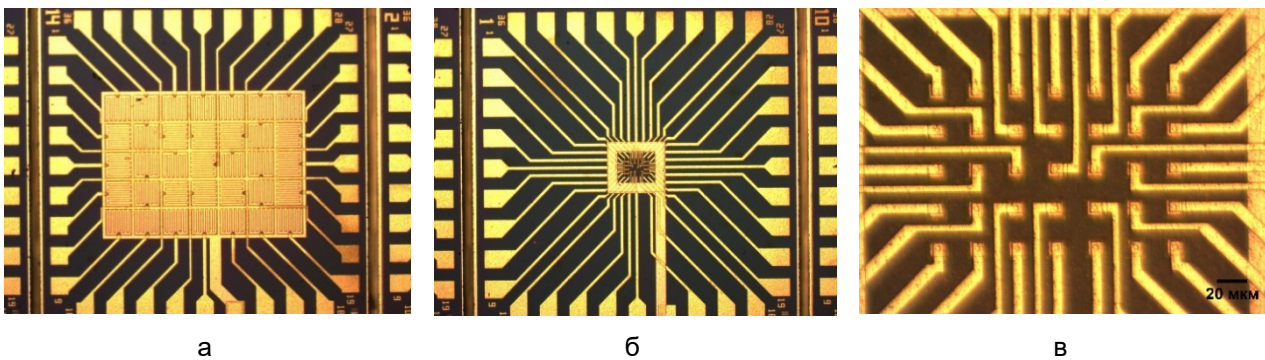


Рисунок 1. Фотографии матриц лавинных светодиодов на основе наноструктурированного кремния; а – светодиоды с рабочей площадью  $10^4 \text{ мкм}^2$ , б – светодиоды с рабочей площадью  $100 \text{ мкм}^2$ , в – светодиоды с рабочей площадью  $100 \text{ мкм}^2$  (увеличение 250 крат)

Емкость светодиодов для всех исследуемых образцов, измеренная при напряжении смещения 10 В, представлена на рисунке 2. Величина обратного смещения 10 В была выбрана в связи с тем, что при данном смещении на всех исследуемых образцах наблюдалось излучение светового сигнала, различимого невооруженным глазом.

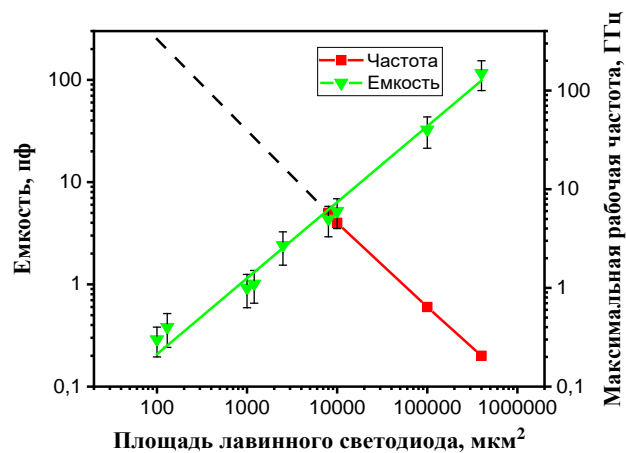


Рисунок 2. Зависимости емкости лавинных светодиодов и их максимальной частоты модуляции от рабочей площади различных конструкций светодиодов

Результаты, представленные на рисунке 2, свидетельствуют о том, что зависимость емкости светодиодов от их площади имеет практически линейный характер. Небольшое отклонение от линейности в области малых рабочих площадей светодиодов объясняется суммарным вкладом двух составляющих: барьерной емкостью обратно смещенного контакта Шоттки и емкостью разделительного диэлектрика  $Al_2O_3$ , расположенного между алюминиевыми электродами межсоединений. При этом барьерная емкость обратносмещенного контакта Шоттки вносит основной вклад в измеряемую суммарную емкость. На рисунке 2 также представлена зависимость предельной частоты модуляции светодиодов от их рабочей площади. Частотные данные были получены для светодиодов с рабочей площадью от  $4 \cdot 10^5$  до  $10^4$  мкм<sup>2</sup>.

Предельная частота при этом увеличивалась от 200 МГц до 6 ГГц. Измерения для более высоких частот модуляции были ограничены техническими возможностями используемого оборудования. Принимая во внимание линейную зависимость предельной частоты модуляции от рабочей площади светодиодов на графике представлены результаты экстраполяции предельной частоты модуляции светодиодов с площадью менее  $10^4$  мкм<sup>2</sup>. На рисунке 2 результаты экстраполяции представлены прерывистой линией.

Результаты экстраполяции экспериментальных данных свидетельствуют о том, что при уменьшении рабочей емкости светодиодов до долей пикофарад предельная частота функционирования лавинных светодиодов будет составлять более 100 ГГц. Эти результаты подтверждаются исследованиями других авторов по работе лавинных светодиодов в диапазоне частот от 10 до 100 ГГц [15-19]. Также можно предположить, что, уменьшая размер рабочей площади лавинного светодиода до 1 мкм<sup>2</sup>, будет достигнуто функционирование лавинных светодиодов во всем гигагерцовом диапазоне частот, что согласуется с известным свойством лавинного пробоя в кремнии, имеющим временную задержку менее 0,1 пс [20], что позволяет модулировать световой сигнал на частотах вплоть до терагерцового диапазона.

#### IV. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведение исследования показали, что лавинные светодиоды на основе наноструктурированного кремния открывают новые возможности для развития кремниевой фотоники [1, 21], в частности, для создания быстродействующих оптических межсоединений, способных функционировать в гигагерцовом диапазоне частот, а при дальнейшем уменьшении размеров лавинных светодиодов возможно их функционирование и в терагерцовом диапазоне частот.

#### БЛАГОДАРНОСТЬ

Работа выполнена при финансовой поддержке БРФФИ (проект № T23MЭ-018, № проект № T24B-009).

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] 3D silicon photonic structures based on avalanche LED with interconnections through optical interposer / S.K. Lazarouk [et al.] // International Journal of Nanoscience. 2019. Vol. 18 (03n04). P. 1940091.
- [2] Si-based optoelectronic couple / P. Jaguiro [et al.] // Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. 2009. Vol. 41, No. 6. P. 1094-1096.
- [3] On the Route Towards Si-based Optical Interconnects / S. Lazarouk [et al.] // Microelectronic Engineering, 2000. Vol. 50., No 1-4, P. 81-86.
- [4] Integrated Optoelectronic Unit Based on Porous Silicon / S. Lazarouk, P. Jaguiro, V. Borisenko // Physica of Status Solidi (a). 1998. Vol. 165. P. 87-90.
- [5] Reverse biased porous silicon light-emitting diodes for optical intra-chip interconnects / S.K. Lazarouk [et al.] // Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures. 2003. Vol. 16. P. 495-498.
- [6] Progress in the field of integrated optoelectronics based on porous silicon / S. La Monica [et al.] // Thin Solid Films. 1997. Vol. 297. P. 261-264.
- [7] Stable electroluminescence of nanostructured silicon embedded into anodic alumina / P. Katsuba [et al.] // Low-dimensional Systems and Nanostructures. 2009. Vol. 41, No. 6. P. 931-934.
- [8] Efficiency of Avalanche Light-Emitting Diodes Based on Porous Silicon / S.K. Lazarouk [et al.] // Semiconductors. 2005. Vol. 39, No. 1, P. 136-138.
- [9] Electroluminescence from aluminum-porous silicon reverse-biased Schottky diodes formed on the base of highly doped n-type polysilicon / S. Lazarouk [et al.] // Thin Solid Films. 1996. Vol. 276, No. 1, P. 296-298.

- [10] Visible electroluminescence from Al-porous silicon reverse bias diodes formed on the base of degenerate n-type silicon AF / S. Lazarouk [et al.] // MRS Online Proceedings Library Archive. 1996. Vol. 358, P. 659-664.
- [11] Porous silicon avalanche LEDs and their applications in optoelectronics and information displays / P. Jaguero, [et al.] // Acta Physica Polonica A. 2007. Vol. 112, No. 5. P. 1031-1036.
- [12] Electroluminescence from nanostructured silicon embedded in anodic alumina / S. Lazarouk [et al.] // Semiconductors. 2007. Vol. 41, No 9. P. 1109-1112.
- [13] Optical characterization of reverse biased porous silicon light emitting diode / S. Lazarouk [et al.] // Materials Science and Engineering. 2000. Vol. 69-70, P. 114-117.
- [14] Influence of anodic alumina used as separating dielectric of silicon avalanche LEDs on diode characteristics / Le Dinh Vi [et al.] // Doklady BGUIR. 2019. Vol. 7-8, No 126. P. 165-172.
- [15] High-speed light modulation in avalanche breakdown mode for Si diodes / A. Chatterjee, B. Bhuvu, R. Schrimpf // IEEE Electron Device Letters. 2004. Vol. 25, No 9. P. 628-630.
- [16] Xu K. Electro-optical modulation processes in Si-PMOSFET LEDs operating in the avalanche light emission mode. IEEE Transactions on Electron Devices. 2014. Vol. 61, No 6. P. 2085-2092.
- [17] Xu K. Silicon MOS optoelectronic micro-nano structure based on reverse-biased PN junction *Physica Status Solidi*. 2019. Vol. 216, No 7. P. 1800868.
- [18] Towards 10-40 GHz on-chip micro-optical links with all integrated Si Av LED optical sources, Si N based waveguides and Si-Ge detector technology / K.A. Ogudo [et al.] // Proc. SPIE 8991, Optical Interconnects XIV. 2014. Vol. 8991. P. 1-16.
- [19] Avalanche leds based on nanostructured silicon for optical interconnections / Le Dinh Vi [et al.] // Doklady BGUIR. 2020. Vol. 18, No 3. P. 63-71.
- [20] Physics of Semiconductor Devices: Print ISBN:9780471143239 / S. M. Sze, K. K. Ng. Pub. 10.04.2006.
- [21] Anodic nanoporous titania for electro-optical devices / S. Lazarouk [et al.] // Japanese Journal of Applied Physics. 2007. Vol. 46, No. 7R. P. 4390.

#### DEVELOPMENT OF AVALANCHE LEDS BASED ON NANOSTRUCTURED SILICON FOR THE GIGAHERTZ FREQUENCY RANGE

S. Lazarouk<sup>1</sup>, A. Leshok<sup>1</sup>, A. Dolbik<sup>1</sup>, L. Tomashevich<sup>1</sup>, A. Klyutsky<sup>1</sup>, V. Dudich<sup>1</sup>, V. Labunov<sup>1</sup>, A. Shabunya<sup>2</sup>, A. Petlitsky<sup>2</sup>, S. Efimenko<sup>2</sup>, T. Petlitskaya<sup>2</sup>, N. Kovalchuk<sup>2</sup>, E. Kitsyuk<sup>3</sup>, R. Ryazanov<sup>3</sup>, A. Basaev<sup>3</sup>, V. Svetukhin<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus,  
[serg@nano.bsuir.edu.by](mailto:serg@nano.bsuir.edu.by)

<sup>2</sup>JSC "INTEGRAL" – managing company of the holding "INTEGRAL", Minsk, Republic of Belarus

<sup>3</sup>NPC "Technological Center", Moscow, Russian Federation

Abstract: The design and manufacturing technology of avalanche LEDs based on nanostructured silicon have been developed. LED matrices with different working areas have been formed. The investigation of the LEDs capacity has shown that decreasing their working area allows to reduce the total capacity of the structure to tenths of picofarads, which allows avalanche LEDs to operate in the gigahertz frequency range. Recommendations for further increasing the speed of avalanche LEDs up to their operation in the terahertz frequency range are given.

Keywords: avalanche LEDs, nanostructured silicon, silicon photonics, optical interconnects.

УДК 537.612

МОДЕЛИРОВАНИЕ КОЛЕБАНИЙ НАМАГНИЧЕННОСТИ В НАНОСТРУКТУРЕ CoFeB/Cu/CoFeB  
ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ СПИН-ПОЛЯРИЗОВАННОГО ТОКА

Кухарев А.В., Господарик Е.А.

Витебский государственный университет имени П.М. Машерова, Витебск, Республика Беларусь,  
[kukharev.av@gmail.com](mailto:kukharev.av@gmail.com)

Аннотация: Получены результаты моделирования колебаний намагниченности, возникающие в наноструктуре CoFeB/Cu/CoFeB (5 нм/2 нм/5 нм) цилиндрической формы с перпендикулярной намагниченности закрепленного ферромагнитного слоя за счет эффекта переноса спина при больших плотностях пропускаемого электрического тока в отсутствие и наличии внешнего магнитного поля. В результате было показано, что в отсутствие внешнего магнитного поля зависимость частоты колебаний от плотности пропускаемого тока в такой структуре близка к линейной в диапазоне до 17 ГГц.

Ключевые слова: спинтронный наноосциллятор; колебания намагниченности; ферромагнетная наноструктура.

## I. ВВЕДЕНИЕ

Эффект переноса спина, открытый Слончевским и Берже [1-2], наблюдается в многослойных наноструктурах ферромагнетик/диамангнитный металл/ферромагнетик при пропускании через них электрического тока. За счет поляризации потока электронов в первом ферромагнитном слое с закрепленной намагниченностью и рассеивании этого потока на кристаллической решетке второго ферромагнитного слоя со свободной намагниченностью происходит передачи спиного крутящего момента атомам решетки этого слоя. В результате в ферромагнитном слое могут возбуждаться колебания намагниченности. На основе эффекта переноса спина могут разрабатываться такие приборы как спинтронные наноосцилляторы (spin torque nano-oscillator) с возможностью генерации электромагнитного излучения в микроволновом диапазоне узкой полосы [3], а также элементы магнитной памяти с переключением намагниченности электрическим током. Спинтронные наноосцилляторы позволяют генерировать электромагнитное излучение в микроволновом диапазоне узкой полосы.

В ранних исследованиях эффекта переноса спина устойчивые периодические колебания намагниченности удавалось получить только при приложении к структуре некоторого постоянного внешнего магнитного поля, которое служит для задания ориентации прецессии вектора намагниченности. Позже была предложена конфигурация структуры с перпендикулярной намагниченности закрепленного ферромагнитного слоя, в которой генерация колебаний возможна и в отсутствие внешнего магнитного поля [4-5]. В такой структуре ориентация прецессии вектора намагниченности определяется направлением магнитной кристаллографической анизотропии.

Одним из важных вопросов при разработке спинтронных наноосцилляторов на основе эффекта переноса спина является управление частотой колебаний намагниченности, а также синхронизация отдельных наноосцилляторов для получения сигнала достаточной мощности. На частоту колебаний могут влиять как внутренние параметры самой структуры, так и внешние факторы, например напряженность внешнего магнитного поля.

Целью настоящего исследования является установление зависимости частоты колебаний намагниченности в наноструктуре CoFeB/Cu/CoFeB цилиндрической формы с перпендикулярной намагниченности закрепленного ферромагнитного слоя от плотности пропускаемого через структуру спин-поляризованного тока, а также определение максимальной и минимальной плотности тока, при которой возможны устойчивые колебания намагниченности.

## II. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Исследуемая наноструктура представляет собой многослойную структуру вида ферромагнетик/диамангнитный металл/ферромагнетик (Ф1/ДМ/Ф2) со слоями в форме дисков нанометровой толщины. Через структуру пропускается электрический ток перпендикулярно слоям. Направление намагниченности слоя Ф1 закреплено с помощью вспомогательного антиферромагнитного слоя АФ. Направление намагниченности слоя Ф2 считается свободным. Поток электронов, проходя через слой Ф1, приобретает спиновую поляризацию. При попадании в слой Ф2 спины электронов проводимости адаптируются к направлению намагниченности этого слоя, что благодаря локальному сохранению момента количества движения приводит к возникновению вращающего момента, действующего на

атомы слоя Ф2. Нанометровая диамагнитная прослойка ДМ служит для уменьшения обменного взаимодействия между ферромагнитными слоями.

Моделирование изменения направления намагниченности свободного слоя Ф2 под действием поляризованного по спину тока будем проводить в приближении макроспина (когерентного вращения магнитных моментов) с использованием уравнения Ландау-Лифшица-Гильберта-Слончского-Берже [6], записанного в сферической системе координат  $(r, \theta, \varphi)$  следующим образом:

$$\begin{cases} \sin \theta \frac{d\varphi}{d\tau} = \frac{\alpha h_\varphi - h_\theta}{1 + \alpha^2} - g(\theta, \varphi) J s_\theta \\ \frac{d\theta}{d\tau} = \frac{h_\varphi + \alpha h_\theta}{1 + \alpha^2} - g(\theta, \varphi) J s_\varphi \end{cases}$$

где

$$s_\theta = s_x \cos \theta \cos \varphi + s_y \cos \theta \sin \varphi - s_z \sin \theta, \\ s_\varphi = -s_x \sin \varphi + s_y \cos \varphi.$$

Здесь  $\alpha$  – параметр затухания Гильберта,  $\mathbf{h}$  – суммарное магнитное поле,  $\mathbf{s}$  – единичный вектор вдоль направления намагниченности закрепленного слоя Ф1. Выражения для  $h_\theta$  и  $h_\varphi$  в сферической системе координат имеют такой же вид как и для  $s_\theta$  и  $s_\varphi$ . Безразмерная величина  $J = j\hbar/(\mu_0 e d M^2)$  пропорциональна плотности тока  $j$  ( $\mu_0$  – магнитная постоянная,  $e$  – элементарный заряд,  $d$  – толщина слоя Ф2,  $M$  – намагниченность насыщения).

Функция

$$g(\theta, \varphi) = [(3 + \mathbf{m}(\theta, \varphi) \cdot \mathbf{s})\beta - 4]^{-1}$$

называется коэффициентом передачи спина Слончского-Берже [1], где  $\beta = (1 + P)^3 / (4P^{3/2})$ ,  $P$  – степень спиновой поляризации ферромагнетика закрепленного слоя.

Магнитное поле  $\mathbf{h}$  включает в себя размагничивающее поле и поле магнитной кристаллографической анизотропии  $\mathbf{h}_a = k_a(\mathbf{n} \cdot \mathbf{m})\mathbf{n}$ , где  $k_a = 2K_a/(\mu_0 M^2)$ ,  $K_a$  – константа магнитной кристаллографической анизотропии и  $\mathbf{n}$  – направление оси легкого намагничивания ферромагнетика Ф2.

В ходе моделирования в качестве ферромагнитного материала свободного слоя Ф2 использовался  $(\text{Co}_{35}\text{Fe}_{65})_{85}\text{B}_{15}$  с намагниченностью насыщения  $M = 1,08 \times 10^6$  А/м, степенью спиновой поляризации  $P = 0,5$  и нормированной константой магнитокристаллической анизотропии  $k_a = 0,0088$ , рассчитанной по данным экспериментальной работы [7]. Толщина ферромагнитного слоя Ф2 – 5 нм. Материал промежуточного диамагнитного слоя – медь, толщина слоя – 2 нм. Параметр затухания  $\alpha$  зависит от материала и от размеров образца. Для материала CoFeB значение  $\alpha$  лежит в пределах от 0,002 до 0,2 [7].

## II. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Результаты моделирования показывают, что устойчивые колебания намагниченности в свободном ферромагнитном слое Ф2 при отсутствии внешних магнитных полей возникают в том случае, когда направление намагниченности закрепленного слоя Ф1 и направление кристаллографической анизотропии слоя Ф2 параллельны и направлены вдоль оси структуры. Поэтому моделирование частоты колебаний будем проводить только для такой конфигурации. В других случаях колебания намагниченности являются неустойчивыми и быстро затухают.

На рис. 1 показана зависимость частоты  $F$  колебаний намагниченности от плотности пропускаемого тока  $j$  при параметрах затухания  $\alpha$ , равном 0,02 и 0,2, в структуре CoFeB/Cu/CoFeB (5 нм/2 нм/5 нм). Видно, что зависимость частоты колебаний намагниченности от плотности пропускаемого тока в такой структуре близка к линейной при плотностях тока ниже некоторого критического значения. При  $\alpha = 0,02$  максимальная частота колебания составляет 16,7 ГГц и достигается при плотности тока  $0,025 \times 10^{12}$  А/м<sup>2</sup>, а при  $\alpha = 0,2$  соответственно 17,3 ГГц при плотности тока  $0,204 \times 10^{12}$  А/м<sup>2</sup>. При этом колебания являются устойчивыми и близки к гармоническим. Однако при дальнейшем увеличении плотности тока колебания намагниченности перестают быть гармоническими, а их частота начинает уменьшаться. При некоторой максимальной критической плотности тока устойчивых колебаний намагниченности не возникает вовсе. Это объясняется тем, что структура переходит в режим переключения направления намагниченности, когда эффективного магнитного поля оказывается достаточно для удерживания вектора намагниченности в определенном положении.

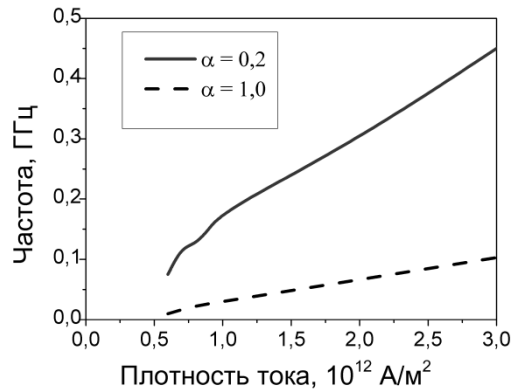


Рисунок 1. Зависимость частоты колебаний намагниченности от плотности пропускаемого тока в наноструктуре CoFeB/Cu/CoFeB при значениях параметра затухания 0,02 и 0,2

Такое поведение частоты колебаний намагниченности наблюдается при разных значениях параметра затухания Гильберта. Значение параметра затухания влияет только на угол наклона линейной части графика функции  $F(j)$ . При малых значениях параметра затухания для достижения максимальной частоты колебаний требуются меньшие плотности тока.

Изучено также влияние внешнего магнитного поля на колебания намагниченности при фиксированном параметре  $J = 0,01$ . Приложение внешнего магнитного поля вдоль оси  $y$  приводит к потере устойчивости колебательного процесса, в результате чего колебания намагниченности становятся затухающими. Периодические колебания имеют место только при приложении внешнего магнитного вдоль осей  $x$  и  $z$ .

При приложении внешнего магнитного поля вдоль оси  $x$  периодические колебания намагниченности наблюдаются при параметре затухания  $\alpha = 0,02$  и не наблюдаются при  $\alpha = 0,2$ . При этом частота колебаний растет линейно от 8 до 62 ГГц при изменении величины магнитного поля от 0 до 1 отн. ед. При дальнейшем увеличении напряженности поля периодических колебаний намагниченности не наблюдается. При приложении внешнего магнитного поля вдоль оси  $z$  возможны колебания намагниченности от 0 до 62 ГГц. При этом при параметре затухания  $\alpha = 0,02$  частота колебаний растет линейно при изменении величины поля от 1 до 3 отн. ед., а при дальнейшем увеличении напряженности поля частота колебаний остается постоянной. При параметре же затухания  $\alpha = 0,02$  зависимость частоты колебаний намагниченности от величины поля имеет более сложный характер и требует дальнейшего изучения.

### III. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Из полученных результатов следует, что в наноструктуре CoFeB/Cu/CoFeB (5 нм/2 нм/5 нм) могут возникать устойчивые гармонические колебания намагниченности в отсутствие внешних магнитных полей при пропускании через структуру электрического тока за счет механизма переноса спина Слончевского-Берже. При этом частота колебаний намагниченности растет линейно с увеличением плотности пропускаемого тока до некоторого порогового значения. Максимальная частота колебаний составляет  $17,0 \pm 0,3$  ГГц. При дальнейшем увеличении плотности тока частота колебаний начинается уменьшаться, а при плотности тока выше некоторого критического значения колебаний намагниченности не возникает. При приложении внешнего магнитного поля и фиксированном параметре  $J = 0,01$  максимальная частота колебаний намагниченности для данной ферромагнитной структуры составила 62 ГГц.

Полученные результаты о частотных характеристиках колебаний намагниченности в многослойных ферромагнитных наноструктурах могут использоваться при разработке передатчиков микроволнового излучения на основе эффекта переноса спина. Наличие верхнего предела частоты колебаний намагниченности накладывает определенные ограничения на область применения таких устройств.

### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Slonczewski, J. C. Current-driven excitation of magnetic multilayers / J. C. Slonczewski // J. Magn. Magn. Mater. – 1996. – Vol. 159. – P. L1–L7.
- [2] Berger, L. Emission of spin waves by a magnetic multilayer traversed by a current / L. Berger // Phys. Rev. B. – 1996. – Vol. 54, № 13. – P. 9353–9358.

- [3] Lv, G. Modeling of magnetization precession in spin-torque nano-oscillators with a tilted polarizer / G. Lv [et al.] // AIP Advances. – 2015. – Vol 5. – P. 077171.
- [4] Micromagnetic modeling of nanocontact spin-torque oscillators with perpendicular anisotropy at zero bias field / V. Puliafito [et al.] // IEEE Trans. Magn. – 2008. – Vol. 44. – P. 2512–2515.
- [5] Кухарев, А. В. Колебания намагниченности в наноструктуре ферромагнетик/ немагнитный металл/ ферромагнетик под действием поляризованного по спину тока / А. В. Кухарев, А. Л. Данилюк, В. Е. Борисенко // Микроэлектроника. – 2012. – Т. 41, № 1. – С. 9–19.
- [6] Звездин, А. К. Обобщенное уравнение Ландау–Лифшица и процессы переноса спинового момента в магнитных наноструктурах / А. К. Звездин, К. А. Звездин, А. В. Хвальковский // УФН. – 2008. – Т. 178, № 4. – С. 436–442.
- [7] Sato, R. Current-dependent linewidth of a spin-transfer nano-oscillator / R. Sato, Y. Saito, K. Mizushima // JMMM. – 2009. – Vol. 321. – P. 990–995.

SIMULATION OF MAGNETIZATION OSCILLATIONS IN CoFeB/Cu/CoFeB NANOSTRUCTURE  
UNDER THE INFLUENCE OF SPIN-POLARIZED CURRENT

A. Kukharev, E. Gaspodarik

Vitebsk State University named after P.M. Masherov, Vitebsk, Republic of Belarus, [kukharev.av@gmail.com](mailto:kukharev.av@gmail.com)

Abstract: The simulation results of magnetization oscillations occurring in a cylindrical CoFeB/Cu/CoFeB (5 nm/2 nm/5 nm) nanostructure with perpendicular magnetization of the pinned ferromagnetic layer due to the spin-transfer effect at high current densities in the absence and presence of an external magnetic field have been obtained. The results showed that, in the absence of an external magnetic field, the dependence of the oscillation frequency on the current density in such a structure is nearly linear in the range up to 17 GHz.

Keywords: spintronic nano-oscillator; magnetization oscillations; ferromagnet nanostructure.

UDC 544.225.22/.23+544.183.24/.25:538.911+538.915

## THE ELECTRONIC STRUCTURE MODIFICATION AND PHOTOCATALYTIC ABILITY IMPROVEMENT OF TITANIUM DIOXIDE DOPED WITH SILVER AND COPPER ATOMS

A.A. Azamjonov<sup>1,2</sup>, L.S. Khoroshko<sup>3</sup>, Sh.I. Mamatkulov<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Institute of Materials Science, Uzbekistan Academy of Sciences, Tashkent, Uzbekistan, [sh.mamatkulov@imssolar.uz](mailto:sh.mamatkulov@imssolar.uz)

<sup>2</sup>National Research Institute of Renewable Energy Sources, Ministry of Energy of the Republic of Uzbekistan, Tashkent, Uzbekistan, [a.azamjonov@imssolar.uz](mailto:a.azamjonov@imssolar.uz)

<sup>3</sup>Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus

**Abstract:** This research employed density functional theory (DFT) calculations to investigate the electronic structure, band characteristics, and bonding properties of pure titanium dioxide (TiO<sub>2</sub>) and its silver (Ag)- and copper (Cu)-doped counterparts. The potential of these materials for photocatalytic water splitting to produce hydrogen was assessed. The calculated band gaps were 3.18 eV, 2.3 eV, and 2.1 eV for TiO<sub>2</sub>, Ag-TiO<sub>2</sub>, and Cu-TiO<sub>2</sub>, respectively. Crucially, localized impurity states appeared within the band gap of the doped semiconductors. For Ag-TiO<sub>2</sub>, the conduction band edge (-0.73 eV) and valence band edge (1.53 eV) were favorably positioned relative to the redox potentials for water splitting, suggesting promising photocatalytic activity.

**Keywords:** Ag- and Cu-doped titanium dioxide, DFT, band gap, photocatalysis, electronic characteristics, mobility and lifetime of charge carriers.

### I. INTRODUCTION

Titanium dioxide (TiO<sub>2</sub>) has been extensively explored as a photocatalyst due to its chemical stability, non-toxic nature, and environmental abundance. However, TiO<sub>2</sub> has limitations that hinder its efficiency under visible light, primarily because of its large intrinsic bandgap (~3.2 eV for anatase phase and ~3.0 eV for rutile) which restricts its absorption to the ultraviolet (UV) region, constituting only a small fraction (~4%) of the solar spectrum. To address this issue, researchers have employed various strategies, including bandgap engineering through doping, surface modifications, and coupling with co-catalysts. Among these approaches, transition metal doping is one of the most promising techniques for enhancing visible-light-driven photocatalysis by altering the electronic properties of TiO<sub>2</sub>. In particular, the doping of TiO<sub>2</sub> with silver (Ag) and copper (Cu) has drawn considerable attention due to their unique electronic contributions.

The incorporation of Ag or Cu atoms into the TiO<sub>2</sub> lattice introduces impurity levels within the bandgap, thereby enabling visible-light absorption. Studies report that Ag doping forms shallow donor states close to the conduction band, which lowers the bandgap and enhances light absorption. Moreover, Ag-doped TiO<sub>2</sub> improves electron-hole separation, as silver acts as an electron sink, reducing the recombination of charge carriers and facilitating more efficient photocatalysis [1]. On the other hand, Cu-doping creates mid-gap states, which also reduce the effective bandgap, though the photocatalytic improvement is often limited by issues such as photo-corrosion and reduced long-term stability [2]. These dopants modify not only the optical properties but also influence surface reactions by enhancing adsorption of water and oxygen molecules, which are critical intermediates in photocatalytic processes.

Density Functional Theory (DFT) has become an indispensable tool for understanding the structural and electronic modifications introduced by dopants in semiconductors. Standard DFT calculations often underestimate the bandgap, which can be corrected by employing Hubbard U-corrections or hybrid functionals. In recent studies, DFT has been used to model the effects of Ag and Cu doping on the electronic band structure, density of states (DOS), and charge transfer dynamics in TiO<sub>2</sub> systems [3]. These calculations provide insights into the spatial distribution of charge densities and the interaction between dopant atoms and the TiO<sub>2</sub> host lattice. For instance, Ag-doping shifts the Fermi level closer to the conduction band, resulting in an n-type semiconductor behavior [4]. In contrast, Cu-doping introduces localized states that promote p-type conductivity, a desirable feature for applications in photocatalytic hydrogen production. Charge density analysis obtained through DFT simulations has shown that Cu atoms preferentially bind with oxygen atoms in the TiO<sub>2</sub> lattice, further stabilizing the material and facilitating enhanced surface reactions under visible light [5].

### II. COMPUTATIONAL DETAILS

To accurately capture the electronic structure of both pure and doped TiO<sub>2</sub> systems, we employed a comprehensive DFT framework. Geometry optimizations were conducted using the generalized gradient



approximation (GGA) exchange-correlation functional parameterized by Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE), renowned for its robustness and accuracy in describing a wide range of materials. This initial optimization step ensured that the atomic positions of each system were relaxed to their equilibrium configurations, providing a reliable foundation for subsequent electronic structure calculations.

For an accurate description of the electronic wavefunctions, we utilized a plane-wave basis set with an energy cutoff of 450 eV, determined through rigorous convergence tests to ensure sufficient precision in our calculations. The Brillouin zone integration, essential for sampling the reciprocal space, was performed using a 9x9x14 k-point mesh, chosen to adequately capture the electronic band structure of the tetragonal anatase TiO<sub>2</sub> lattice. The atomic positions and cell parameters for the pure TiO<sub>2</sub> structure were optimized using the quasi-Newton method, specifically the LBFGS (Limited-memory Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno) algorithm, achieving a force convergence criterion of 0.03 eV/Å for unconstrained atoms. The optimized structure was then compared with experimental data to ensure accuracy. The lattice dimensions of pure TiO<sub>2</sub> and doped structures, as obtained using the LDA + U method, are presented in Table 1. The calculated lattice parameters of pure TiO<sub>2</sub> ( $a = 3.776$  Å,  $b = 3.776$  Å,  $c = 9.484$  Å) are in good agreement with the experimental values reported in [6] ( $a = 3.785$  Å,  $b = 3.785$  Å,  $c = 9.514$  Å). In the optimized TiO<sub>2</sub> geometry, selected titanium atoms were substituted with silver and copper atoms, and the resulting structures were further optimized using the LBFGS algorithm.

Table 1. Optimized structures and the deviation with experimental results

Unit cell parameter, Å	TiO <sub>2</sub>	Ti <sub>1-x</sub> Ag <sub>x</sub> O <sub>2</sub>	Ti <sub>1-x</sub> Cu <sub>x</sub> O <sub>2</sub>	Experiment [23]	Deviation (%)
a	3.776	3.775	3.776	3.785	+0.23
b	3.776	3.775	3.776	3.785	+0.23
c	9.484	9.486	9.484	9.514	+0.31

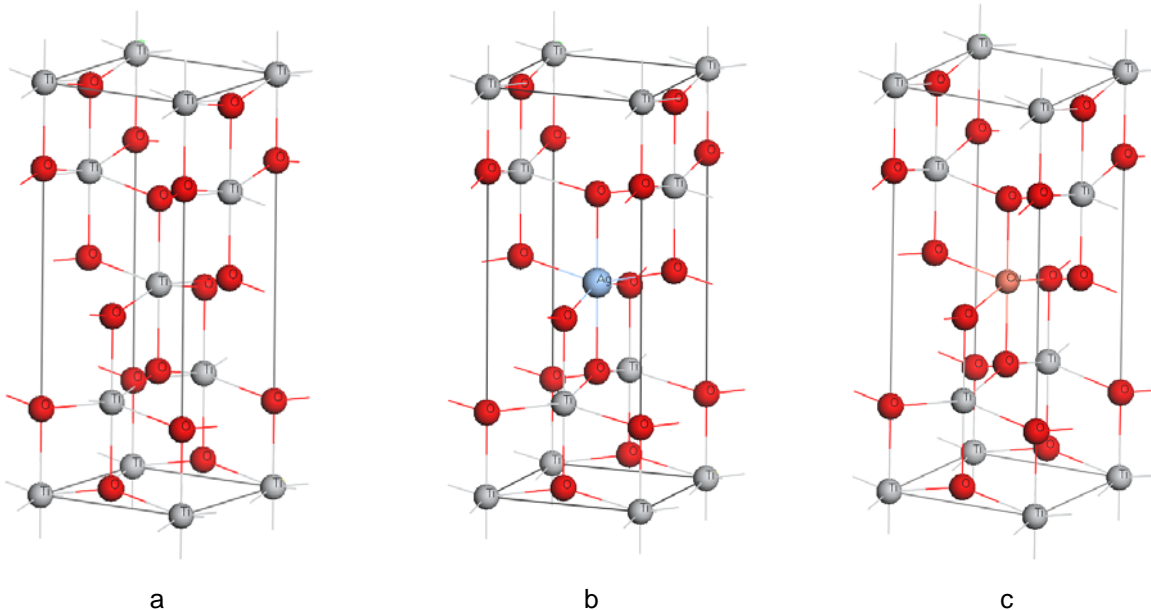


Figure 1. Crystal structures of **a)** TiO<sub>2</sub>, **b)** Ag-doped TiO<sub>2</sub>, **c)** Cu-doped TiO<sub>2</sub> used in the calculations. Titanium, oxygen, silver and copper atoms are indicated in grey, red, blue and brown, respectively.

In order to mitigate the well-known band gap underestimation issue inherent in standard DFT, we implemented the LDA+U method, a widely adopted approach to correct for the self-interaction error in strongly correlated systems. In this method, the Hubbard U parameter, set to 8.0 eV for the Ti 3d states, accounts for the on-site Coulomb interactions between the localized d electrons of titanium. This correction significantly improves the accuracy of the calculated band gap, bringing it closer to experimental values. To incorporate the effects of valence electrons, we employed ultrasoft pseudopotentials, which significantly reduce the computational cost while maintaining accuracy.

### III. RESULTS AND DISCUSSION

The calculated electronic band structures and density of states (DOS) reveal a profound impact of Ag and Cu doping on the electronic properties of  $\text{TiO}_2$  (Figure 2). In pure  $\text{TiO}_2$ , the valence band is dominated by O 2p states, while the conduction band primarily consists of Ti 3d states, consistent with previous theoretical and experimental studies. This clear separation results in a wide band gap of 3.18 eV, limiting the material's ability to absorb visible light.

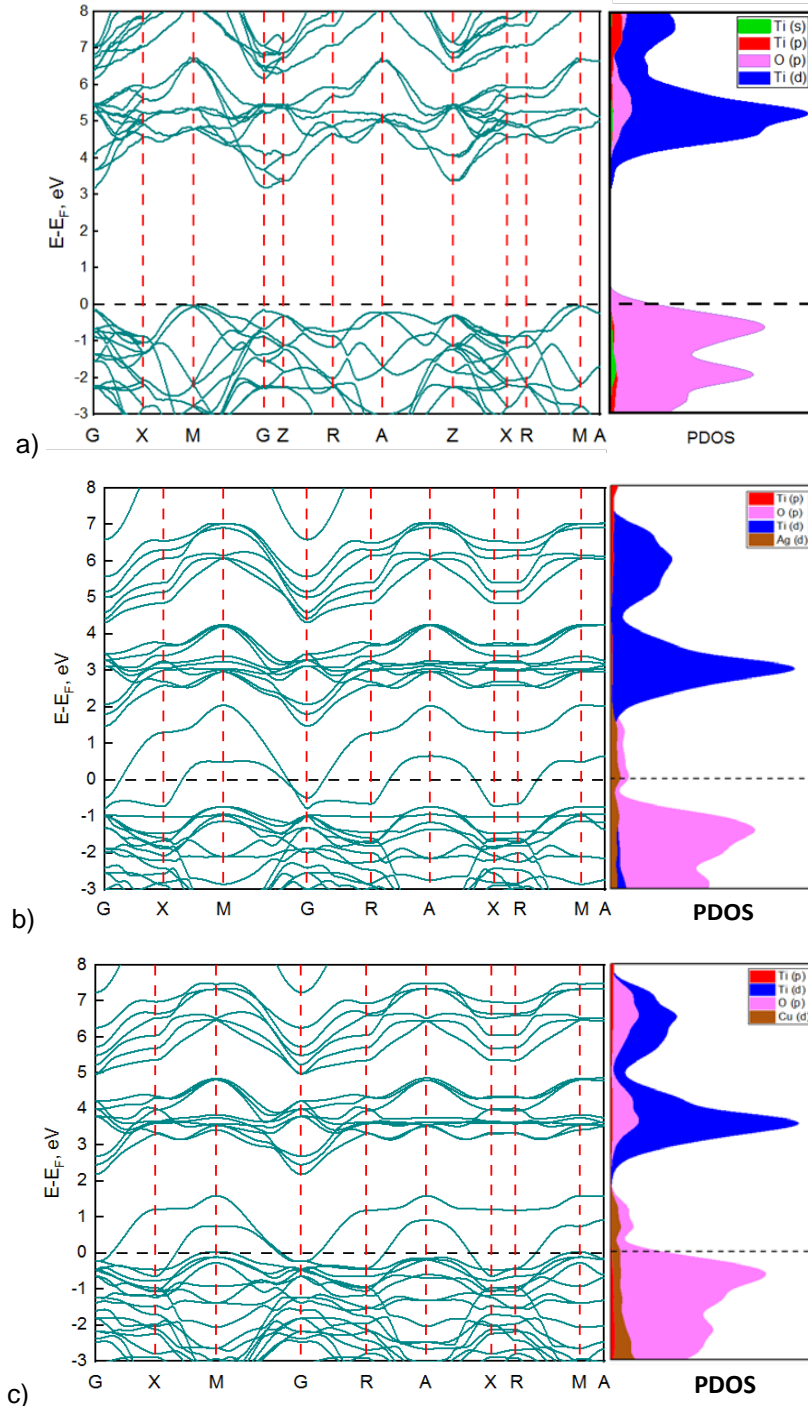


Figure 2. Structure of energy bands and partial density of states of a)  $\text{TiO}_2$ , b) Ag-doped  $\text{TiO}_2$ , c) Cu-doped  $\text{TiO}_2$  structures

Upon doping with Ag, we observe a notable decrease in the band gap to 2.3 eV. The Ag 4d states hybridize with the O 2p states, forming localized impurity states within the band gap. These new states effectively narrow the band gap and introduce additional energy levels that can facilitate the absorption of photons with lower energies, extending the absorption spectrum into the visible range. Additionally, the presence of these

localized states can act as traps for photogenerated electrons and holes, potentially enhancing charge carrier separation and reducing recombination rates, thereby improving photocatalytic efficiency.

Similarly, Cu doping also leads to a reduction in the band gap, albeit to a slightly lower value of 2.1 eV. The Cu 3d states contribute to the formation of impurity states near the valence band edge, further modifying the electronic structure. This band gap narrowing, coupled with the potential for enhanced charge carrier separation due to the impurity states, suggests that Cu-doped TiO<sub>2</sub> could also exhibit improved photocatalytic activity under visible light irradiation.

The band edge positions of the doped systems are of particular interest for photocatalytic water splitting. The calculated conduction band edge of Ag-TiO<sub>2</sub> (-0.73 eV) lies above the H<sup>+</sup>/H<sub>2</sub> reduction potential, while the valence band edge (1.53 eV) is below the O<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O oxidation potential. This favorable alignment suggests that Ag-TiO<sub>2</sub> possesses the thermodynamic potential to drive both the reduction and oxidation half-reactions of water splitting, a crucial requirement for efficient photocatalytic hydrogen production.

Furthermore, the effective masses of charge carriers are a critical factor influencing carrier mobility and transport properties. Our calculations reveal a decrease in the effective masses of both electrons and holes upon doping with Ag and Cu, indicating enhanced carrier mobility. This improved mobility can facilitate faster charge transport to the surface reaction sites, thereby promoting efficient charge separation and reducing recombination losses.

#### IV. CONCLUSION

In this comprehensive DFT investigation, we have elucidated the intricate electronic structure modifications induced by Ag and Cu doping in TiO<sub>2</sub>. Our findings unequivocally demonstrate the ability of these dopants to engineer the band gap, introduce localized impurity states, and modulate charge carrier dynamics. These alterations hold profound implications for the photocatalytic performance of TiO<sub>2</sub>, particularly in the context of water splitting for hydrogen generation.

Specifically, Ag-doping emerges as a promising strategy, significantly narrowing the band gap of TiO<sub>2</sub> and creating favorable band edge alignments for both hydrogen and oxygen evolution reactions. The introduction of localized states within the band gap not only enhances visible light absorption but also promotes charge carrier separation, potentially leading to improved photocatalytic efficiency. Additionally, the reduced effective masses of charge carriers in Ag-doped TiO<sub>2</sub> suggest enhanced mobility, facilitating faster charge transport and further mitigating recombination losses.

While Cu-doping also exhibits a beneficial band gap narrowing effect, the resulting band edge positions may not be as optimal for water splitting as those observed in Ag-doped TiO<sub>2</sub>. However, the presence of localized states and reduced effective masses still suggest the potential for improved photocatalytic performance compared to pure TiO<sub>2</sub>.

To further optimize the photocatalytic activity of doped TiO<sub>2</sub>, future research could explore the effects of varying dopant concentrations, co-doping with multiple elements, and investigating alternative dopants with different electronic configurations. Moreover, experimental validation of these theoretical predictions is essential to assess the practical feasibility and long-term stability of doped TiO<sub>2</sub> photocatalysts.

#### ACKNOWLEDGEMENT

The research was carried out with the financial support of the Agency of Innovative Development under the Ministry of Higher Education, Science and Innovation within the framework of research project No. FL-7923051799.

#### REFERENCES

- [1] Chen, X., & Mao, S. S. (2007). Titanium dioxide nanomaterials: Synthesis, properties, modifications, and applications. *Chemical Reviews*, 107 (7), 2891-2959.
- [2] M. Li, J. Zhang, W. Dang, S.K. Cushing, D. Guo, N. Wu, P. Yin, Photocatalytic hydrogen generation enhanced by band gap narrowing and improved charge carrier mobility in AgTaO<sub>3</sub> by compensated co-doping, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 15 (2013) 16220–16226.
- [3] Grimme, S. (2011). Density functional theory with London dispersion corrections. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, 1 (2), 211-228.
- [4] W. Zhao, L. Wen, I.P. Parkin, X. Zhao, B. Liu, Fermi-level shift, electron separation, and plasmon resonance change in Ag nanoparticle-decorated TiO<sub>2</sub> under UV light illumination, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 25 (2023) 20134–20144.

[5] Li, Y., Zhang, H., & He, X. (2011). Enhanced visible light photocatalytic activity of Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-graphene oxide nanocomposites. *Materials Research Bulletin*, 46 (10), 1871-1875.

[6] Burdett JK, Hughbanks T, Miller GJ, Richardson JW Jr, Smith JV: Structural electronic relationships in inorganic solids: powder neutron diffraction studies of the rutile and anatase polymorphs of titanium dioxide at 15 and 295 K. *J Am Chem Soc* 1987, 109:3639–3646.

МОДИФИКАЦИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ И ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ ДИОКСИДА ТИТАНА (TiO<sub>2</sub>), ЛЕГИРОВАННОГО АТОМАМИ СЕРЕБРА И МЕДИ: ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

Азамжонов А.А.<sup>1,2</sup>, Хорошко Л.С.<sup>3</sup>, Маматкулов Ш.И.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт материаловедения Академии наук Республики Узбекистан, Ташкент, Узбекистан, [sh.mamatkulov@imssolar.uz](mailto:sh.mamatkulov@imssolar.uz)

<sup>2</sup>Национальный научно-исследовательский институт возобновляемых источников энергии Министерства энергетики Республики Узбекистан, Ташкент, Узбекистан, [a.azamjonov@imssolar.uz](mailto:a.azamjonov@imssolar.uz)

<sup>3</sup>Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск, Республика Беларусь

Аннотация: В этом исследовании использовались расчеты теории функционала плотности (DFT) для изучения электронной структуры, характеристик зон и свойств связей чистого диоксида титана (TiO<sub>2</sub>) и его аналогов, легированных серебром (Ag) и медью (Cu). Была оценена способность этих материалов к фотокалалитическому расщеплению воды с получением водорода. Рассчитанные ширины запрещенных зон составили 3,18 эВ, 2,3 эВ и 2,1 эВ для TiO<sub>2</sub>, Ag-TiO<sub>2</sub> и Cu-TiO<sub>2</sub> соответственно. Важно отметить, что локализованные примесные состояния появились в запрещенной зоне легированных полупроводников. Для Ag-TiO<sub>2</sub> край зоны проводимости (-0,73 эВ) и край валентной зоны (1,53 эВ) были выгодно расположены относительно окислительно-восстановительных потенциалов для расщепления воды, что предполагает многообещающую фотокалалитическую активность.

Ключевые слова: Диоксид титана, легированный серебром и медью, DFT, запрещенная зона, фотокалализ, электронные характеристики, подвижность и время жизни носителей заряда.

УДК 517, 519.6

## ЗОННАЯ СТРУКТУРА АКСИАЛЬНО-ДЕФОРМИРОВАННОГО В НАПРАВЛЕНИИ (100) МОНОСЛОЯ ДИСУЛЬФИДА РЕНИЯ

Козич А.В.<sup>1,2</sup>, Баглов А.В.<sup>1,3</sup>, Хорошко Л.С.<sup>1,3</sup>, Мигас Д.Б.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
Минск, Республика Беларусь, [aliaksandrakozich@yandex.ru](mailto:aliaksandrakozich@yandex.ru)

<sup>2</sup>Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Российская Федерация

<sup>3</sup>Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь

Аннотация: путем численного квантово-механического моделирования методами из первых принципов исследована зонная структура монослоя дисульфида рения в условиях его аксиального деформирования растяжением в направлении (100). Установлено, в области исследованных деформаций (до 5% с шагом 0,5%) сохраняется кристаллическая структура с пространственной группой  $P\bar{1}$  с небольшим компенсирующим растяжение изменением углов и длин межатомных связей. Показано, что в области исследованных деформаций материал сохраняет полупроводниковые свойства с равномерным уменьшением ширины запрещенной зоны на 0,32 эВ. Ожидается, что дальнейшая деформация будет приводить к переходу в непрямозонный полупроводник с уменьшением ширины запрещенной зоны.

Ключевые слова: электронная структура, дисперсия зоны, энергетическая щель, стрейнэлектроника, дисульфиды, рений, теория функционала плотности, моделирование.

### I. ВВЕДЕНИЕ

С момента получения графена двумерные материалы привлекают к себе внимание большого количества исследователей из различных областей науки и техники. Среди двумерных материалов особое место занимают дихалькогениды тугоплавких металлов (ДТМ), преимущественно молибдена и вольфрама, благодаря уникальному сочетанию слоистой структуры и электронных свойств, что делает их перспективными для различных приложений: от катализаторов и газовых сенсоров до транзисторов субнанометровой «пост-кремниевой» электроники [1–3]. Перспективным для микро- и наноэлектроники является также дисульфид рения, ультратонкие пленки которого были использованы в конструкциях высокочувствительного детектора поляризованного света, полевого и фототранзисторов [4–6]. В контексте становления и развития стрейнэлектроники – нового направления в физике конденсированного состояния, основанного на использовании методов деформационной инженерии для наблюдения физических эффектов и реализации нового поколения устройств информационных, сенсорных и энергосберегающих технологий, исследование аксиально деформированных монослоев дисульфида рения представляется особенно актуальной научно-практической задачей [7]. Целью данной работы является исследование зонной структуры аксиально деформированного в направлении (100) монослоя дисульфида рения с использованием численного квантово-механического моделирования методом из первых принципов.

### II. МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЯ

Численное моделирование проводили в рамках теории функционала плотности, теории псевдопотенциала и базиса численных атомно-центрированных орбиталей, реализованных в пакете OpenMX [8–10]. Исходную элементарную ячейку строили по данным, ранее нами опубликованным в работе [11]. Деформирование монослоя реализовали растяжением ячейки вдоль направления (100) на величину до 5% с шагом 0,5% с одновременным сжатием вдоль направления (010). Значение коэффициента Пуассона для  $ReS_2$  выбирали равным 0,19, что близко к значению для  $MoS_2$  и  $WS_2$  [11]. Для деформированной ячейки проводили структурную оптимизацию (релаксацию) позиций ионов до тех пор, пока любая компонента сил, действующих на них, не становилась менее 0,01 эВ/Å. Критерий сходимости расчета самосогласованного поля составлял  $10^{-6}$  эВ/ион и  $10^{-9}$  эВ/ион для структурной релаксации и несамосогласованных (зонных) расчетов соответственно. Интегрирование в первой зоне Бриллюэна проводили по  $\Gamma$ -центрированной регулярной сетке k-точек размером  $4 \times 4 \times 1$ . Сетку для численного интегрирования выбирали такой, чтобы среднее значение энергии обрезания было близким к 2900 эВ. Псевдопотенциалы включали в качестве валентных: 5s-, 5p-, 5d- и 6s-электроны для рения, а также 3s- и 3p-электроны для серы. Базисный набор строили в виде линейной комбинации псевдоатомных орбиталей с использованием двух оптимизированных базисных функций для каждого валентного электрона с одной дополнительной оптимизированной базисной функцией в качестве

поляризационной для более аккуратного учета химической связи в кристалле и корректного воспроизведения дисперсии энергетических зон. Численное моделирование проводили в рамках приближения локальной плотности (ГЛП) и обменно-корреляционного функционала Ceperley-Alder предложенного в работе [12]. Выбор данных параметров обусловлен возможностью достаточно корректного описания структурных свойств  $\text{ReS}_2$  [13].

### III. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Внешний вид монослоя дисульфида рения до и после деформации показан на рис. 1. Стрелками обозначены направления изменения параметров решетки, при этом углы сохраняются. Как можно заметить характерная искаженная структура, присущая исходному материалу также наблюдается для деформированной ячейки при небольшом изменении длин межатомных связей. Отметим, что для  $\text{ReS}_2$  не известны величины деформации, приводящей к необратимому разрушению структуры, однако известно, что для  $\text{WS}_2$  эта величина превосходит 15%, что заметно больше максимальной величины 5% используемой в данной работе [2]. Симметрия данной структуры сохраняется во всем диапазоне исследованных деформаций, что подтверждается анализом процесса структурной релаксации в режиме подавленной симметрии. Это позволяет с достаточной точностью считать, что при растяжении монослоя  $\text{ReS}_2$  в направлении (100) до 5% не происходит политипных преобразований атомарной укладки. Деформации ожидаемо приводят к увеличению полной энергии системы, и для максимально деформированного случая прирост энергии составляет 0,62 эВ по сравнению с недеформированным.

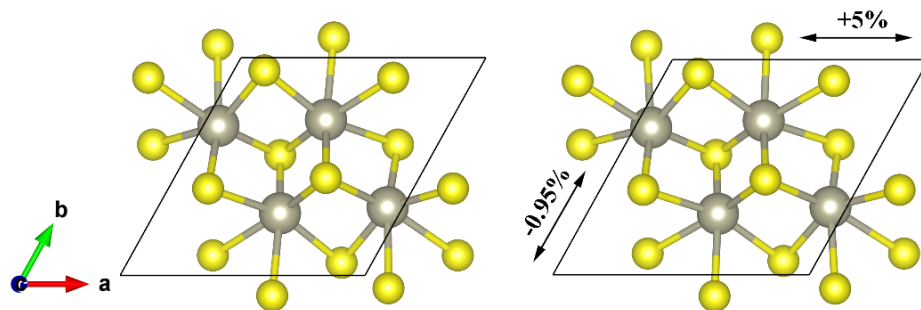


Рисунок 1. Структура монослоя дисульфида рения без деформации (слева) и аксиально-деформированного (растяжение) в направлении (100) на 5% (справа). Вид сверху

Характерная энергетическая структура исходного и аксиально-деформированных монослоев  $\text{ReS}_2$  представлена на рис. 2.

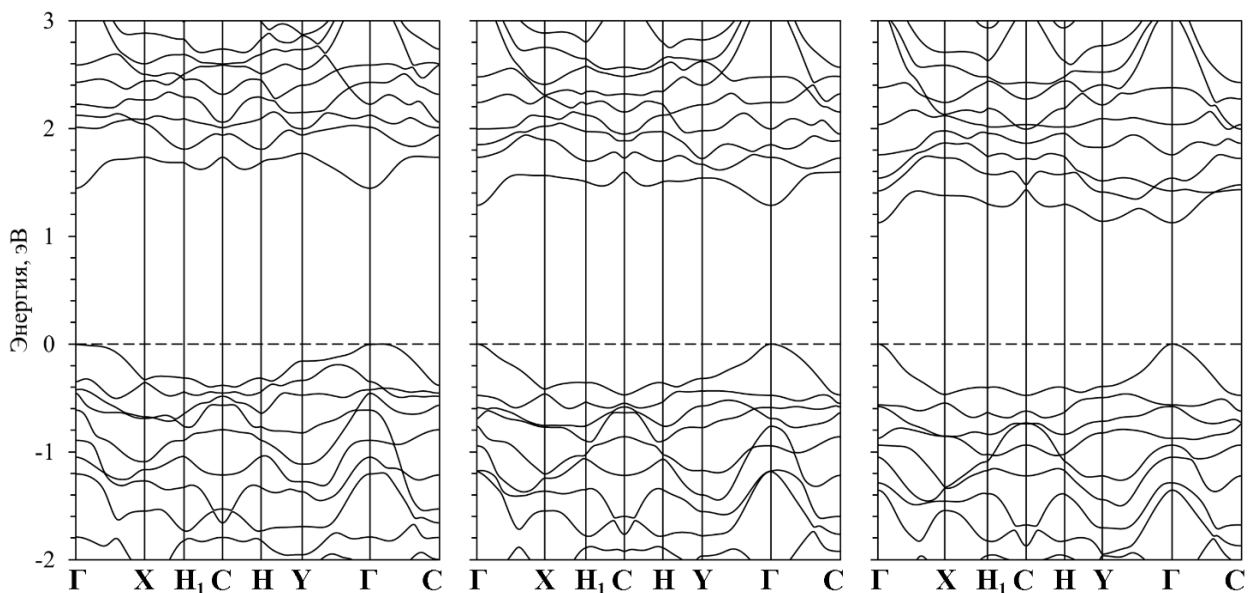


Рисунок 2. Зонная структура аксиально-деформированного в направлении (100) монослоя дисульфида рения при различных значениях растяжения: 0,0% (слева); 2,5% (в центре); 5% (справа)

Во всех случаях материал представляет собой полупроводник с шириной запрещенной зоны 1,446 и 1,126 эВ для недеформированного и максимально деформированного случаев соответственно. Выраженный прямозонный характер для недеформированного варианта с переходом в точке Г сменяется квазипрямозонным для максимально деформированного случая. Деформация монослоя ReS<sub>2</sub> приводит уширению валентных зон, а верхняя из них отщепляется от остальных небольшим зазором (до 14 мэВ). Зона проводимости претерпевает более выраженные изменения с ростом величины деформации: увеличивается число долин и изменяется дисперсия низколежащих зон вдоль точек симметрии, особенно сильно в окрестностях точки Y. Монотонный характер на участке Y–Г изменяется таким образом, что при величине деформации 5 % формируется две долины около точек Y и Г, что может быть востребовано в волитронике (англ. «valleytronics»). При последующем растяжении следует ожидать дальнейшего сужения энергетической щели и изменение первого прямого перехода с прямого на непрямой. Зависимость ширины запрещенной зоны от величины деформации продемонстрирована на рис. 3, а значения представлены в табл. 1.

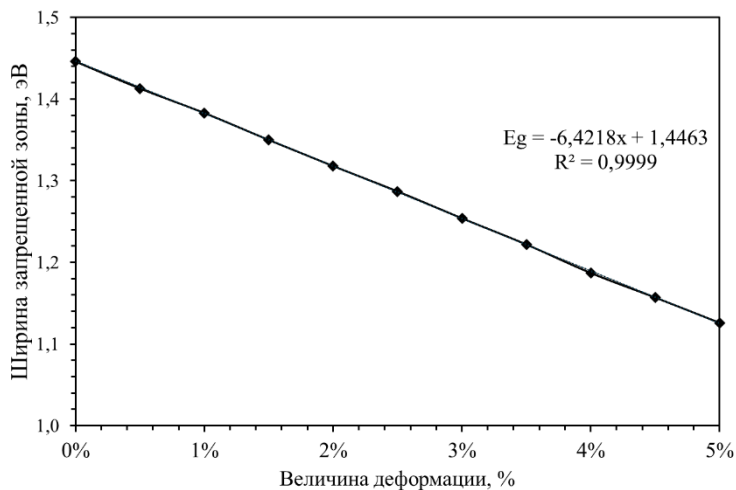


Рисунок 3. Зависимость ширины запрещенной зоны от величины деформации аксиально-деформированного в направлении (100) монослоя дисульфида рения

Таблица 1. Ширина запрещенной зоны монослоя ReS<sub>2</sub> при различных величинах деформации

Величина деформации, %	Ширина запрещенной зоны, эВ
0,0	1,446
0,5	1,413
1,0	1,383
1,5	1,350
2,0	1,318
2,5	1,287
3,0	1,254
3,5	1,222
4,0	1,187
4,5	1,157
5,0	1,126

#### IV. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследована зонная структура аксиально-деформированного на величину до 5% с шагом 0,5% вдоль направления (100) монослоя дисульфида рения путем численного квантово-механического моделирования методами из первых принципов. Установлено, что симметрия материала сохраняется во всей исследованной области деформаций, также сохраняется полупроводниковый характер материала. С ростом величины деформации наблюдается линейное уменьшение ширины запрещенной зоны с 1,446 до 1,126 эВ. Также наблюдается выраженное смещение положения зоны проводимости в точке Y, приводящее к квазипрямозонному характеру материала в случае максимальной степени деформации. Полученные результаты представляют интерес для стрейнтронных и наноэлектронных приложений.

## БЛАГОДАРНОСТЬ

А. Баглов И Л. Хорошко выражают благодарность ГПНИ «Материаловедение, новые материалы и технологии» за частичную поддержку исследований в рамках задания 2.14.3.

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] Enhanced hydrogen evolution catalysis from chemically exfoliated metallic MoS<sub>2</sub> nanosheets / M.A. Lukowski [et al.] // J. American Chem. Soc. 2013. Vol. 135, No 28. P. 10274–10277.
- [2] Atomically thin WS<sub>2</sub> nanosheets based gas sensor / D.J. Late [et al.] // Sensor Letters. 2016. Vol. 14, No 12. P. 1249–1254.
- [3] Vertical MoS<sub>2</sub> transistors with sub-1-nm gate lengths / F. Wu [et al.] // Nature. 2022. Vol. 603, No 7900. P. 259–264.
- [4] Highly sensitive detection of polarized light using anisotropic 2D ReS<sub>2</sub> / F. Liu [et al.] // Advanced Functional Materials. 2016. Vol. 26, No 8. P. 1169–1177.
- [5] High responsivity phototransistors based on few-layer ReS<sub>2</sub> for weak signal detection / E. Liu [et al.] // Advanced Functional Materials. 2016. Vol. 26. P. 1938–1944.
- [6] Field effect transistors with current saturation and voltage gain in ultrathin ReS<sub>2</sub> / C.M. Corbet [et al.] // ACS nano. 2015. Vol. 9. P. 363–370.
- [7] Straintronics: a new trend in micro- and nanoelectronics and materials science / A.A. Bukharaev [et al.] // Physics-Uspekhi. 2018. Vol. 61. P. 1175.
- [8] Ozaki, T. Variationally optimized atomic orbitals for large-scale electronic structures / T. Ozaki // Physical Review B. 2003. Vol. 67. P. 155108.
- [9] Ozaki, T. Numerical atomic basis orbitals from H to Kr / T. Ozaki, H. Kino // Physical Review B. 2004. Vol. 69. P. 195113.
- [10] Ozaki, T. Efficient projector expansion for the ab initio LCAO method / T. Ozaki, H. Kino // Physical Review B. 2005. Vol. 72. P. 045121.
- [11] Evolution of structural and electronic properties standardized description in rhenium disulfide at the bulk-monolayer transition / A.V. Baglov [et al.] // Heliyon. 2024. Vol. 10. P. e28646.
- [12] Ceperley, D.M. Ground state of the electron gas by a stochastic method / D.M. Ceperley, B.J. Alder // Physical review letters. 1980. Vol. 45, No 7. P. 566.
- [13] Baglov, A. V. Crystal structure and electronic properties of rhenium disulfide / A.V. Baglov., L.S. Khoroshko // Journal of Applied Spectroscopy. 2022. Vol. 89. P. 860–864.

## BAND STRUCTURE OF AXIALLY DEFORMED (100) RHENIUM DISULPHIDE MONOLAYER

A. Kozich<sup>1,2</sup>, A. Baglov<sup>1,3</sup>, L. Khoroshko<sup>1,3</sup>, D. Migas<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus,  
[aliaksandrakozich@yandex.ru](mailto:aliaksandrakozich@yandex.ru)

<sup>2</sup>National Research Nuclear University MEPhI, Moscow, Russian Federation

<sup>3</sup>Belarusian State University, Minsk, Republic of Belarus

**Abstract:** The band structure of a rhenium disulfide monolayer was studied under axial deformation by stretching in the (100) direction within numerical modelling of quantum-mechanical from first-principles methods. It was found that within the range of the investigated deformations (up to 5% with a step of 0.5%), the crystal structure with the space group  $P\bar{1}$  is maintained with a minor stretch-compensating alteration in the angles and lengths of interatomic bonds. The material maintains its semiconductor characteristics, exhibiting a consistent reduction in the band gap by 0.32 eV within the range of deformations examined. It is expected that further deformation will lead to the transition to an indirect-gap semiconductor, accompanied by a reduction in the band gap.

**Keywords:** electronic structure, band dispersion, band gap, straintronics, disulfides, rhenium, density functional theory, modelling.



УДК 004.457

РАЗРАБОТКА И РЕАЛИЗАЦИЯ АНАЛИЗАТОРА СТРУКТУРЫ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЗОН  
ДЛЯ ПАКЕТА КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ OpenMX

Баглов А.В.<sup>1,2</sup>, Хорошко Л.С.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, [baglov@bsu.by](mailto:baglov@bsu.by)

<sup>2</sup>Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
Минск, Республика Беларусь

Аннотация: обсуждаются коммерческие пакеты для анализа и обработки данных, получаемых в программах для квантово-механического моделирования материалов. Показано, что идеальным дополнением к пакету OpenMX является программа-анализатор для обработки результатов расчетов строения зонной структуры материалов. Обсуждаются практические задачи анализа расчетов зонной структуры материалов и функциональность такой программы, а также формулируются требования к ее реализации. Продемонстрирована функциональность текущей версии разрабатываемой авторами программы-анализатора на примере тестового файла.

Ключевые слова: электронная структура, дисперсия зоны, анализ, обработка, программирование, C++, OpenMX.

## I. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время в физике конденсированного состояния и наноматериаловедении активно используется численное моделирование как эффективный подход для исследования широкого спектра свойств различных материалов. Получаемые в таких численных экспериментах результаты в значительной степени расширяют и дополняют традиционные экспериментальные исследования. В случаях, когда проведение экспериментальных исследований серьезно затруднено, численные эксперименты являются предпочтительным методом исследования, (например, фазовая диаграмма состояния вещества в области экстремальных давлений, зонная структура соединений дорогостоящих и редких химических элементов и т.д.). Исследования зонной структуры материалов проводят с использованием специализированных пакетов для численного квантово-механического моделирования методами из первых принципов, наиболее известными из которых являются Quantum ESPRESSO, VASP, CASTEP [1–3]. Как правило, взаимодействие со всеми программами в таких пакетах осуществляется через CLI (Command Line Interface – интерфейс командной строки). С целью упрощения планирования, проведения и анализа результатов численного эксперимента, в т.ч. «на лету», существуют пакеты, включающие привычный большинству GUI (Graphical User Interface – графический пользовательский интерфейс), например, продвинутые коммерческие пакеты SCM [4], QuantumATK [5], Medea [6]. Такой подход не является принципиально отличным, т.к. фактически GUI является лишь фронтендом, автоматизирующим подготовку входных файлов для CLI-бэкенда, реализующего непосредственно численное моделирование с последующим анализом выходных результатов, организуемых в удобном для исследователя виде. К сожалению, для менее популярных и полукommerческих пакетов вспомогательное программное обеспечение (ПО) развито относительно слабо, либо отсутствует совсем. Авторы данной работы, как и многие исследовательские группы по всему миру, применяют для численного квантово-механического моделирования методами из первых принципов пакет OpenMX, использующий теорию функционала плотности, теорию псевдопотенциала и базис численных атомно-центрированных орбиталей [7–12], бесплатно распространяемый под лицензией GPLv3.

Одним из важнейших аспектов исследования электронного строения материалов, особенно пониженной размерности, является изучение структуры энергетических зон (или зонной структуры) – спектра собственных значений оператора энергии электрона в пространстве волновых векторов в одночастичном приближении вдоль особых точек высокой симметрии зоны Бриллюэна. Особенность проведения такого расчета состоит в том, что большинство пакетов, в т.ч. и OpenMX, получают собственные значения запрошенного числа состояний для каждой k-точки и в таком же виде предоставляют ее пользователю для дальнейшего анализа и визуализации зонной структуры. В составе пакета OpenMX присутствует программа bandgnu13, которая считывает «сырые» данные и приводит их к формату, удобному для графического построения, а также подготавливает скрипт для пакета Gnuplot, позволяя быстро визуализировать полученный результат в операционной системе Linux.

К сожалению, этого недостаточно для полноценного, эффективного и быстрого анализа данных, востребованных в работе исследователя. Таким образом разработка специализированного ПО для проведения анализа «сырых» данных о структуре энергетических зон, и эффективному представлению его результатов в удобном для исследователя формате является актуальной задачей.

## II. ОПИСАНИЕ И ТРЕБОВАНИЯ К ФУНКЦИОНАЛЬНОСТИ

Исходя из строения «сырых» данных, получаемых в результате моделирования, можно выделить 2 направления для анализа: подсистема, связанная с геометрией обратной решетки или пространственная подсистема, и подсистема энергетического спектра электронных состояний или электронная подсистема.

Результат анализа пространственной подсистемы должен включать в себя информацию о векторах трансляции обратной решетки и координаты точек высокой симметрии, вдоль которых рассчитываются промежуточные точки. Координаты точек следует представлять как во внутренних координатах (в единицах решетки), так и в обычных декартовых в ортогональном репере. Обычно при расчетах программы используют атомную систему единиц, где единица измерения энергии – Хартри, а длин – Боры, т.е. следует предусмотреть возможность конвертации в привычные большинству и удобные для опубликования электронвольты и ангстремы, соответственно.

Результат анализа электронной подсистемы должен включать в себя информацию о количестве рассчитанных состояний, в том числе занятых и не занятых, энергии Ферми, количестве спиновых каналов, участвующих в расчете. Как известно, в случае металлов некоторое число зон пересекает уровень Ферми. Необходимо получить информацию о числе таких зон и определить их индексы, что необходимо для визуализации поверхности Ферми в специализированном ПО. В случае наличия щели в энергетическом спектре электронов (в случае полупроводников и диэлектриков), необходимо сразу предоставить информацию о ширине этой щели в электронвольтах, так же должны быть получены значения минимума зоны проводимости и максимума валентной зоны. Помимо анализа, программа должна конвертировать «сырые» данные в двухколоночный формат и записывать их в текстовый файл, удобный для последующего импорта и построения графиков силами специализированного ПО, такого как MS Excel, IBM SPSS, Originlab OriginPro и т.д. Основываясь на результатах анализа, исследователь должен иметь возможность сдвигать энергетический спектр на произвольную величину, что необходимо для совмещения максимума (потолка) валентной зоны с нулевым уровнем – часто используемого в научных публикациях варианта визуализации зонной структуры материалов, а также для построения зонных диаграмм гетеропереходов. При построении зонной структуры наиболее часто используется та часть энергетического спектра, которая расположена вблизи уровня Ферми, поэтому более глубоко- и высоколежащие состояния могут быть отброшены, т. обр. исследователь должен иметь возможность выбора индекса зон, которые должны быть конвертированы и записаны в выходной файл. Наконец, следует иметь возможность анализа ширины зон, и записывать результат в отдельный выходной файл. Все возможности должны быть реализованы в режиме по требованию и совмещаться между собой без логических противоречий. В случае обработки спин-поляризованных расчетов анализ должен быть проведен для каждого спинового канала отдельно, а вывод информации совмещен, что необходимо для описания систем с магнитным упорядочением. Поддержка работы с пакетом визуализации Gnuplot также должна быть сохранена.

Учитывая, что подавляющая часть пакетов для моделирования работает под операционной системой Linux (или другими UNIX-подобными операционными системами), то следует придерживаться таких правил разработки, которые позволят органично использовать разрабатываемое ПО в рамках философии UNIX, т.е. руководствоваться принципами Макилроя [13].

Разрабатываемый анализатор должен быть компактным, обладать высокой скоростью работы и являться кроссплатформенным решением. Учитывая описанные требования для разработки, был выбран язык C++, преимущественно ввиду наличия контейнерных классов в стандартной библиотеке шаблонов STL. Взаимодействие осуществляется через командную строку. В качестве сборочной системы используем make под Linux и переносимый диалект, поддерживаемый nmake под Windows. Сборка может быть осуществлена любым компилятором с поддержкой стандарта C++11. Работоспособность и тестирование под Linux проведены с использованием компиляторов проектов GCC (g++), LLVM (clang++) и Intel (icpc), под Windows с использованием MSVC.

## III. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Все описанные требования реализованы в полном объеме в текущей версии 0.3.2 разрабатываемого анализатора, который поставляется в виде единственного исполняемого файла для Linux или Windows, включающего в себя справочную информацию и примеры задания параметров и опций. Запуск

осуществляется стандартным образом: `PROGNAME <PARAMS AND OPTIONS> FILE`. Здесь `PROGNAME` имя программы, `PARAMS AND OPTIONS` – параметры и их опции, `FILE` – файл с «сырыми» данными, генерируемый пакетом `OpenMX`. По умолчанию файл с «сырыми» данными имеет расширение `Band`, например `TEST.Band`. Программа устроена таким образом, что программе достаточно указать только `TEST` или `TEST.` (с точкой). Полное имя также поддерживается, но его разумнее задавать, когда оно отличается от стандартного. В текущей версии доступны следующие параметры:

- h выводит информацию помощь по использованию программы;
- v выводит информацию о версии программы;
- i проводит анализ запрошенного файла и выдает результат в эмулятор терминала;
- w проводит анализ зон и записывает индекс зоны, ее максимум, минимум и ширину в файл `seedname-BS-WIDTH.out`;
- t Выводит информацию о времени, затраченном на чтение, запись файлов, а также полное время с учетом анализа;
- g Создает файлы, необходимые для работы пакета визуализации `Gnuplot`;
- s Задаёт сдвиг в электронвольтах для зон;
- b Выбирает зоны в диапазоне указанных индексов для обработки и записи в выходной файл `seedname-BS.out`;
- vbm Выводит значение максимума валентной зоны с повышенной точностью.

Запуск программы без параметров конвертирует все зоны из исходного файла и записывает их в выходной файл без дополнительных уведомлений. Пример работы программы показан на рис. 1.

```
f:\EDACONF>PROGNAME -i TEST

ELECTRONIC STATES ANALYZER

Fermi energy : -5.003 eV
Spin-polarized : FALSE
Total calculated states : 102
Valence band states : 26
Conductance band states : 76
Valence band maximum : -0.383 eV (below of the Fermi level)
Conductance band minimum : 0.285 eV (above of the Fermi level)
Band gap : 0.668 eV

RECIPROCAL LATTICE ANALYZER

Reciprocal cell vectors (bohr)
1.0639434 0.6142681 -0.0000000
0.0000000 1.2285361 0.0000000
0.0000000 -0.0000000 0.2757001

K-PATH (fractional)
40 0.000000 0.000000 0.000000 0.500000 0.000000 0.000000 G M
40 0.500000 0.000000 0.000000 0.000000 0.333333 0.000000 M K
40 0.333333 0.333333 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 K G
40 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.500000 G A
40 0.000000 0.000000 0.500000 0.500000 0.000000 0.500000 A L
40 0.500000 0.000000 0.500000 0.000000 0.333333 0.500000 L H
40 0.333333 0.333333 0.500000 0.000000 0.000000 0.500000 H A

K-PATH (cartesian (bohr))
40 0.000000 0.000000 0.000000 0.5319717 0.3071340 0.000000 G M
40 0.5319717 0.3071340 0.000000 0.3546478 0.6142681 0.000000 M K
40 0.3546478 0.6142681 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 K G
40 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.1378501 G A
40 0.000000 0.000000 0.1378501 0.5319717 0.3071340 0.1378501 A L
40 0.5319717 0.3071340 0.1378501 0.3546478 0.6142681 0.1378501 L H
40 0.3546478 0.6142681 0.1378501 0.000000 0.000000 0.1378501 H A
```

Рисунок 1. Результат работы анализатора программы на тестовом файле `TEST.Band` в командной строке Windows

Размер исполняемого файла составляет 74 Кбайт для Windows и 63 Кбайт для Linux. Потребление ресурсов зависит от размера анализируемого файла и составляет обычно менее 1 Мбайта оперативной памяти. Типичное время работы анализатора составляет десятки миллисекунд. Исходный код компактен и имеет менее 900 строк. Для работы кода нужны библиотеки, присутствующие в любой операционной системе, а именно стандартная библиотека и рантайм C++. В данный момент рассматривается расширение возможностей для анализа и внедрение нового функционала. Используемая архитектура программы позволяет обеспечить поддержку анализа для других пакетов.

### III. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрены основные принципы работы научного программного обеспечения для исследования материалов моделирования и практические задачи анализа результатов расчета зонной структуры. Обсуждена функциональность разрабатываемого анализатора, выработаны требования к его реализации. Показано, что использование языка C++ и стандартной библиотеки шаблонов позволяет разработать и реализовать эффективное кроссплатформенное решение, компиляция которого осуществляется с помощью систем инкрементальной сборки `make` и `ptake`. Разработанный анализатор имеет компактную кодовую базу, малый размер исполняемого файла, высокую скорость работы и низкое

потребление вычислительных ресурсов. Архитектура проекта позволяет расширить функциональность анализатора и добавить поддержку форматов других пакетов для квантово-механического моделирования.

#### БЛАГОДАРНОСТЬ

Авторы благодарят А.В. Козич и А.С. Сиротюка за их вклад в тестирование разработанного ПО.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials / P. Giannozzi [et al.] // Journal of physics: Condensed matter. 2009. V. 21, No. 39. P. 395502.
- [2] Kresse, G. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set / G. Kresse, J. Furthmüller // Physical Review B. 1996. V. 54, No. 16. P. 11169.
- [3] First principles methods using CASTEP / S.J. Clark [et al.] // Zeitschrift für kristallographie-crystalline materials. 2005. V. 220. No. 5–6. P. 567-570.
- [4] Chemistry with ADF / G. Te Velde [et al.] // Journal of Computational Chemistry. 2001. V. 22, No. 9. P. 931–967.
- [5] QuantumATK: an integrated platform of electronic and atomic-scale modelling tools / S. Smidstrup [et al.] // Journal of Physics: Condensed Matter. 2019. V. 32, No. 1. P. 015901.
- [6] Computational materials engineering: Recent applications of VASP in the MedeA® software environment / E. Wimmer [et al.] // Journal of the Korean Ceramic Society. 2016. V. 53, No. 3. P. 263–272.
- [7] Ozaki, T. Variationally optimized atomic orbitals for large-scale electronic structures / T. Ozaki // Physical Review B. 2003. Vol. 67. P. 155108.
- [8] Ozaki, T. Numerical atomic basis orbitals from H to Kr / T. Ozaki, H. Kino // Physical Review B. 2004. Vol. 69. P. 195113.
- [9] Ozaki, T. Efficient projector expansion for the ab initio LCAO method / T. Ozaki, H. Kino // Physical Review B. 2005. Vol. 72. P. 045121.
- [10] Baglov, A.V. Atom species energy dependence on magnetic configurations in the perovskite yttrium orthoferrite / A.V. Baglov, L.S. Khoroshko // Doklady BGUIR. 2021. Vol. 19(8). P. 63-67.
- [11] Baglov, A. V. Crystal structure and electronic properties of rhenium disulfide / A.V. Baglov., L.S. Khoroshko // Journal of Applied Spectroscopy. 2022. Vol. 89. P. 860–864.
- [12] Evolution of structural and electronic properties standardized description in rhenium disulfide at the bulk-monolayer transition / A.V. Baglov [et al.] // Heliyon. 2024. Vol. 10. P. e28646.
- [13] Raymond, E.S. Basics of the Unix Philosophy. The Art of Unix Programming / E.S. Raymond // Addison-Wesley Professional. 2004.

#### DEVELOPMENT AND IMPLEMENTATION OF A BAND STRUCTURE ANALYZER FOR THE QUANTUM-MECHANICAL SIMULATION PACKAGE OpenMX

A. Baglov<sup>1,2</sup>, L. Khoroshko<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Belarusian State University, Minsk, Republic of Belarus, [baglov@bsu.by](mailto:baglov@bsu.by)

<sup>2</sup>Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus

**Abstract:** Commercial packages for analysis and processing of data obtained in programs for quantum mechanical modeling of materials are reviewed. The analyzer program for processing the results of calculations of the properties of the band structure of materials as an ideal complement to the OpenMX package is presented. Practical problems of analyzing calculations of the band structure of materials and the functionality of such a program are discussed. The requirements for the implementation of analyzer programs have been formulated. The functionality of the current version of the analyzer program developed by the authors was demonstrated by a test file.

**Keywords:** electronic structure, band dispersion, analysis, treatment, programming, C++, OpenMX.

УДК 004.65+004.85

ЭКСПРЕСС-АНАЛИЗ СТРУКТУРНЫХ И ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ  
НАНОМАТЕРИАЛОВ МЕТОДАМИ BIG DATA, LARGE LANGUAGE MODELS & GENERATIVE AI

Шиманский Н.А.<sup>1,2</sup>, Баглов А.В.<sup>2,3</sup>, Хорошко Л.С.<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>ООО «АндерсенБел» (ПВТ), Минск, Республика Беларусь, [nikita.shymanski@gmail.com](mailto:nikita.shymanski@gmail.com)

<sup>2</sup>Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь

<sup>3</sup>Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
Минск, Республика Беларусь

Аннотация: В данной работе рассматривается возможность использования генеративного машинного обучения и методов работы с большими данными для предиктивного анализа электронных свойств сверхтонких наноструктур на основе полупроводниковых материалов, не ограничивая при этом общность данного подхода для иных кристаллических материалов.

Ключевые слова: машинное обучение, нейронные сети, большие языковые модели, большие данные, наноматериалы, предсказательный анализ.

## I. ВВЕДЕНИЕ

Успешное развитие науки в области синтеза и исследования современных и перспективных наноматериалов на сегодняшний день практически невозможно без использования вычислительных средств и компьютерной автоматизации. Стремительное развитие нейронных сетей и программных интерфейсов для них (Machine Learning, Discriminative AI, Generative AI) позволяет анализировать в кратчайшие сроки значительные объемы экспериментальных данных и не только исследовать, но и с высокой достоверностью предсказывать интересующие свойства исследуемых материалов, например, стехиометрический состав, электронные свойства и влияние на них дефектов и др. Современные инструменты BigData и Advanced Analytics могут быть привлечены для оптимизации подобных задач, сокращения времени обработки больших массивов данных, автоматизации анализа полученных результатов и т.д. В частности, в области материаловедения такие подходы предоставляют исследователям возможности генерации новых экспериментальных моделей наноструктур с предиктивным анализом их электронных свойств фактически в режиме реального времени, в отличие от «ручных» режимов моделирования. В данной работе рассмотрен пример решения специальной исследовательской задачи – моделирования и анализа структуры и свойств выбранного полупроводникового материала, который может быть использован также для изучения свойств объемных и сверхтонких наноструктур из практически любых неаморфных материалов.

## II. АНАЛИЗ И ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Эффективность вычислительных экспериментов для исследования и определения структур и электронных свойств наноматериалов в значительной мере обусловлена качеством программной реализации и используемыми вычислительными моделями компьютерного моделирования. Хорошо зарекомендовали себя, например, такие общедоступные программные комплексы как VESTA (Visualisation for Electronic and Structural Analysis) и OpenMX (Open source package for Material eXplorer) [1–3]. Первый используется для моделирования пространственных структур и визуализации их электронных свойств, второй – для определения электронных свойств (зонная структура и т.д.) на основе теорий функционала плотности (DFT), нормосохраняющих псевдопотенциалов и псевдоатомных локализованных базисных функций. Результаты моделирования в OpenMX позволяют учесть электронные свойства исследуемых материалов для анализа возможности использования в полупроводниковой наноэлектронике, что востребовано для проведения предварительных вычислительных экспериментов с новыми материалами. Практическая трудность реализации данного подхода обусловлена широким разнообразием параметров полупроводниковых структур, характеризующих их морфологические свойства (такие как симметрия кристаллической ячейки, взаимное расположение кристаллографических плоскостей и пространственная ориентация интерфейса в случае двумерных материалов, деформация и взаимодействие слоев для слоистых структур и др.). Аккуратное описание всех этих параметров требует значительных временных затрат и осуществляется на этапе формирования входного файла, задающего параметры вычислений, преимущественно в ручном режиме. Процесс моделирования в различных программных пакетах в совокупности с подготовкой исходных данных может занимать значительное время, при этом

прогнозная или вероятностная оценка результата проводимого исследования практически невозможна.

Для решения описанных проблем требуется комплексный подход, сочетающий в себе возможности оптимизации и ускорения процессов моделирования и анализа наноструктур с помощью инструментов Big Data & Machine Learning. Авторы данной работы уже применяли подобные подходы для оценки и анализа результатов одного из базовых методов исследований свойств и структуры кристаллических материалов – дифракции рентгеновских лучей [4, 5]. Предиктивное машинное обучение было применено для предварительного прогнозирования свойств наноструктур и включало в себя создание нейронной сети и её обучение с помощью эталонных образцов дифрактограмм наноструктур с описанными свойствами. В случае появления задачи исследования структурных свойств кристаллических материалов такая нейросеть смогла бы предложить вероятностное определение их характеристик с определенной степенью точности, зависящей от количества циклов обучения и степени подробности обучающего материала. Однако, реализация данного подхода для прогнозирования электронных свойств весьма трудоемка, что обусловлено появлением неочевидных зависимостей электронных свойств от структурной конфигурации в материалах с понижением размерности, а также, как уже упоминалось ранее, большим количеством варьируемых параметров для двумерных и сверхтонких (до 10 монослоев) наноструктур. Обработка таких зависимостей с использованием универсального алгоритма является проблематичной, а порой и невозможной, в результате чего вероятностный (предиктивный) прогноз свойств с применением нейросети снижается вплоть до получения недостоверного результата [6].

### III. ОПИСАНИЕ РЕШЕНИЯ

Использование больших языковых моделей (Generative AI, LLM – Large Language Models) для решения описанной проблемы может быть использовано как принципиально новый подход к использованию нейронных сетей и машинного обучения в физике и материаловедении наноструктур [4]. Для использования LLM в специализированных областях предлагается специальная методология “обогащения” контекста и, соответственно, расширения области знаний нейронной сети, которая носит название генерации дополненного поиска (Retrieval-Augmented Generation, RAG). Данный метод представляет собой оптимизацию выходных данных большой языковой модели, в результате которой она ссылается на “обогащенную” (дополненную) базу знаний, т.е. перед генерацией ответа выходит за пределы своих источников обучающих данных (рис. 1). RAG дополнительно расширяет возможности LLM на определенные домены или внутреннюю базу данных организации, при этом переобучения модели не требуется. Примером быстроразвивающихся языковых моделей с поддержкой RAG на сегодняшний день могут являться Meta Llama 3, Anthropic Claude, Amazon Titan и ряд других менее популярных у широкого круга специалистов.

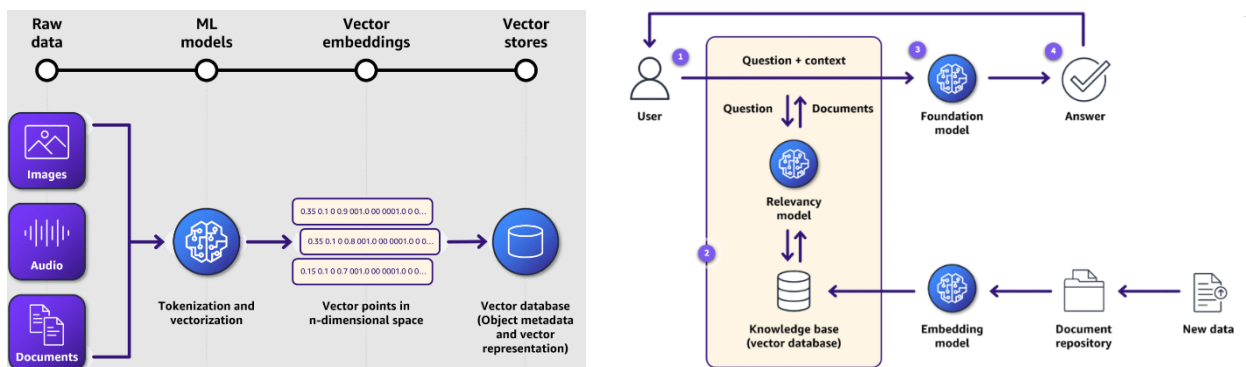


Рисунок 1. Схема процессов привлечения векторных баз данных для обогащения ответов языковой модели при пользовательском запросе в LLM

В рамках решения описанной задачи RAG-обогащение происходит в несколько этапов. На начальном этапе накапливается релевантная информация в текстовом и бинарном формате (форматы .txt, .doc(x), .xls(x), .pdf и др.), имеющем произвольную организацию и структуру, но содержащем определенные количественные описания свойств наноструктур и их качественную интерпретацию. Примерами таких источников текста могут служить научные публикации и монографии, отчеты о лабораторных исследованиях и измерениях, данные по моделированию определенных структур, обзорные публикации, рефераты и выводы на их основе, теоретические исследования фундаментальных свойств материалов и т.д. Также с использованием RAG можно работать с графическими материалами, сканировать и распознавать изображения, т.е. языковая модель может обучаться с использованием

графиков зависимостей, изображений структур, визуализации экспериментальных данных и др. Одним из важных преимуществ использования такой методики является отсутствие строгих требований к оглавлению и структурированию содержания материала, а также, фактически, ограничений по размерам обрабатываемых файлов. По мере сбора и накопления обучающего контента подключается специализированная векторная база данных (например LanceDB, AWS OpenSearch), которая трансформирует этот контент в бинарный вид и интегрируется с языковой моделью (рис. 2).

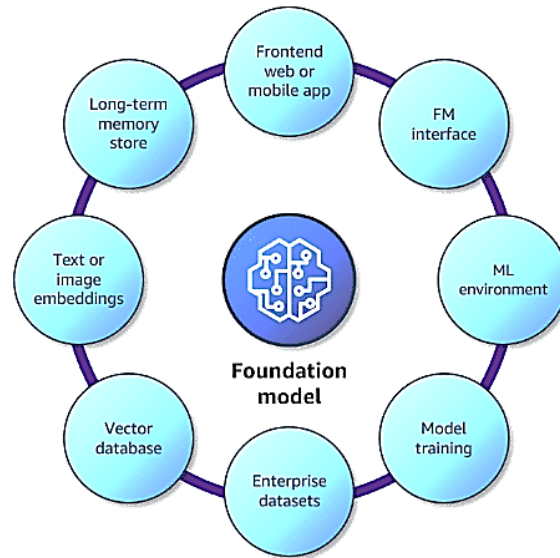


Рисунок 2. Архитектурная диаграмма в виде программного интерфейса с пользовательским вводом для описанного решения

Затем при обращении пользовательского запроса в модель происходит сверка с RAG-контекстом и с учетом специализированного контекста из векторной базы данных осуществляется генерация ответа пользователю, при этом релевантный поиск по десяткам и сотням терабайт векторных данных языковая модель осуществляет за несколько секунд, а пользователь получает ответ в виде наиболее вероятных словосочетаний и предложений. При этом в отличие от традиционных нейронных сетей, для реализации данного подхода не требуется дополнительных тренировок и переобучений языковой модели, что сокращает вычислительные и временные затраты на использование искусственного интеллекта.

Описываемый подход предлагается к реализации в виде кроссплатформенного программного решения, которое находится в стадии разработки и накопления векторных баз данных. Перспективность развития данной идеи подтверждает ряд предварительных экспериментов в виде диалогов (prompting) с искусственным интеллектом. В частности, используемый для взаимодействия RAG чат-бот в состоянии определить характеристики зонной структуры (ширина запрещенной зоны, энергия Ферми) в наноструктуре на примере широкозонного сегнетоэлектрика титаната бария ( $\text{BaTiO}_3$ ). Используя “обогащенный” контекст и созданную заранее векторную базу данных, чат-бот определил эти значения и сгенерировал корректный ответ на запрос, при этом тестируемая языковая модель не обладала запрашиваемыми параметрами в явном виде, но смогла провести статистическое сопоставление и сгенерировать верный ответ. При этом прогностические запросы по инжинирингу запрещенной зоны (изменение ее ширины путем модификации кристаллической решетки или внедрения допантов и дефектов) чат-бот не смог корректно обработать: вместо этого языковая модель предлагала другие химические соединения с искомыми параметрами запрещенной зоны. Это показывает важность создания баз данных достаточной полноты и их своевременной актуализации, из чего следует важность наличия открытых результатов исследований для глобализации научной сети и полноценного внедрения современных технологий в наукоемкие сферы по всему миру.

#### IV. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для развития современного материаловедения характерны, в общем случае, две противоположных тенденции. С одной стороны, соревновательный характер ведения исследований между научными группами разных стран, что предполагает закрытый формат результатов наряду с публикацией в изданиях, имеющих ограниченный круг доступа, что в сочетании со своевременным патентованием и оформлением ноу-хау помогает сохранить эксклюзивность результатов исследований. С другой стороны, неизбежная глобализация всех процессов научных исследований привела к созданию

мощнейших мировых исследовательских коллабораций и научных центров (например, Объединенный институт ядерных исследований в г. Дубне, РФ и др.), в которых совместное получение новых знаний и использование результатов является основой существования проектов и устойчивого развития всей исследовательской инфраструктуры. Использование современных информационных технологий может стать дополнительным средством обеспечения эффективного взаимодействия между учеными и исследователями всех стран, в том числе, для обмена актуальными результатами, сопоставления и верификации новых данных, облегчения поисковой исследовательской работы и повышения ее эффективности. Применение нейронных сетей (Generative AI, LLM) в качестве больших языковых моделей для исследования и анализа свойств наноструктур является перспективным, особенно, для повышения уровня автоматизации ряда исследовательских задач при значительном сокращении временных и трудовых затрат на обработку. Предложенный в данной работе подход предусматривает постоянное развитие и обучение LLM модели в рамках специализированного научного контекста (в рассматриваемом случае - в области наноматериалов), что будет способствовать по мере накопления заданного контекста увеличению точности прогнозного анализа и способности искусственного интеллект не только корректно производить поиск по имеющимся данным, но и предлагать новые наноструктуры с требуемыми и предсказанными свойствами.

#### БЛАГОДАРНОСТЬ

Исследования частично поддержаны в рамках НИР 4 по заданию № 2.25 ГПНИ «Материаловедение, новые материалы и технологии».

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Ozaki, T. Variationally optimized atomic orbitals for large-scale electronic structures / T. Ozaki // Phys. Rev. B. 2003. Vol. 67. P. 155108.
- [2] Ozaki, T. Numerical atomic basis orbitals from H to Kr / T. Ozaki, H. Kino // Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys. 2004. Vol. 69. P. 195113.
- [3] Ozaki, T. Efficient projector expansion for the ab initio LCAO method / T. Ozaki, H. Kino // Phys. Rev. B. 2005. Vol. 72. P. 045121.
- [4] Шиманский, Н.А. Автоматизация обработки результатов исследования структуры и свойств наноматериалов / Н.А. Шиманский, А.В. Баглов, Л.С. Хорошко // BIG DATA и анализ высокого уровня = BIG DATA and Advanced Analytics : сборник научных статей IX Международной научно-практической конференции, Минск, 17–18 мая 2023 г. : в 2 ч. Ч. 1 / Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники ; редкол.: В. А. Богуш [и др.]. – Минск, 2023. – С. 296-300.
- [5] Шиманский, Н. А. Автоматизация обработки результатов исследования структуры материалов / Н.А. Шиманский, А.В. Баглов, Л.С. Хорошко // Information Tehnologies and Systems 2023 (ITS 2023) : материалы международной научной конференции, Минск, Беларусь, 22 ноября / ред. Л. Ю. Шилин [и др.]. – Минск : БГУИР, 2023. – С. 207.
- [6] Шиманский, Н.А. Автоматизация обработки результатов исследования структуры наноматериалов с использованием методов BIG DATA & MACHINE LEARNING / Н.А. Шиманский, А.В. Баглов // Математические методы и компьютерное моделирование в ФКС. – Гродно: ГрГУ, 2024. – С. 159.

#### EXPRESS ANALYSIS OF THE STRUCTURAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF NANOMATERIALS USING BIG DATA, LARGE LANGUAGE MODELS & GENERATIVE AI

N. Shimansky<sup>1,2</sup>, A. Baglov<sup>2,3</sup>, L. Khoroshko<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>AndersenBel company (HTP), Minsk, Republic of Belarus, [nikita.shymanski@gmail.com](mailto:nikita.shymanski@gmail.com)

<sup>2</sup>Belarusian State University, Minsk, Republic of Belarus

<sup>3</sup>Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus

Abstract: This paper explores the possibility of using generative Machine Learning and Big Data methods for predictive analysis of the electronic properties of ultrathin and nanostructures based on crystalline semiconductor materials, without limiting the generality of this approach to other crystalline materials.

Keywords: machine learning, neural networks, large language models, big data, nanomaterials, predictive analysis.



УДК 538.91

## МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ И ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ НАНОРАЗМЕРНЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ С АДСОРБИРОВАННЫМИ МОЛЕКУЛАМИ

Баглов А.В.<sup>1,2</sup>, Хорошко Л.С.<sup>1,2</sup>, Рузимурадов О.Н.<sup>3</sup>, Парманов А.Б.<sup>4</sup>, Нурманов С.Э.<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск, Республика Беларусь, [baglov@bsuir.by](mailto:baglov@bsuir.by)

<sup>2</sup>Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь

<sup>3</sup>Туринский политехнический университет в городе Ташкенте, Ташкент, Узбекистан

<sup>4</sup>Национальный университет Узбекистана им. Мирзо Улугбека, Ташкент, Узбекистан

Аннотация: Проведен анализ взаимодействия сорбированной молекулы бензойной кислоты с поверхностью модельного катализатора – брукита. Установлено, что предпочтительной является ориентация карбоксильной группой к поверхности брукита. Показано, что адсорбция молекулы бензойной кислоты носит преимущественно физический характер. Анализ дисперсии энергетических зон показывает, что в запрещенной зоне брукита локализуются электронные состояния молекулы бензойной кислоты.

Ключевые слова: брукит, бензойная кислота, квантово-механическое моделирование, катализ.

### I. ВВЕДЕНИЕ

Процессы винилирования карбоновых кислот для получения соответствующих эфиров востребованы в химической промышленности и представляют собой комплексный поэтапный процесс, включающий использование неорганических (фото)катализаторов [1–3]. Широкое распространение данной группы реакций химического синтеза делает востребованным поиск и исследование новых каталитических материалов, способствующих повышению эффективности реализации процесса и снижающих расход исходных реагентов наряду с повышением качества целевого продукта. Одним из методов, снижающих временные и экономические затраты на исследовательский процесс, является анализ реагентов и условий протекания реакций средствами квантово-механического моделирования в рамках теории функционала плотности (ТФП), для успешной реализации которого необходимым условием является выбор модельных соединений для анализа соответствующих характеристик и особенностей протекания исследуемых реакций.

В рамках данного исследования проведено моделирование структурных и электронных свойств наноразмерных катализаторов с адсорбированными молекулами, представляющих собой поверхность диоксида титана с кристаллической решеткой брукита. Брукит выбран ввиду перспективности его свойств и сравнительно малой исследованностью, поскольку до недавнего времени получение стабильных форм брукита вызывало ряд затруднений [4]. Анализируя строение поверхности брукита различной ориентации, мы оценили как перспективную поверхность с ориентацией (010) из-за выходящих на поверхность атомов кислорода, участие которых в (фото)химических реакциях является необходимым для замыкания каталитического цикла. Среди карбоновых кислот, используемых в процессе винилирования, большое практическое значение имеет бензойная кислота, которая также представляет собой удобную модельную систему для исследования процессов взаимодействия между карбоновыми кислотами и поверхностью каталитических материалов.

### II. ИСХОДНЫЕ ДАННЫЕ И ОПИСАНИЕ МОДЕЛИРОВАНИЯ

В отличие от исследования чистой поверхности и процессов реконструкции и релаксации для исследования процессов взаимодействия бензойной кислоты с поверхностью необходимо учитывать дополнительные требования, а именно увеличенную толщину слоя диоксида титана, увеличенную площадь поверхности на которой атомы молекулы взаимодействуют с атомами материала и вакуумный слой достаточной толщины для обнуления дальнедействующего кулоновского взаимодействия (рис. 1, вакуумный слой показан частично). В нашем случае мы использовали вакуумный промежуток толщиной 25 Å, который позволяет проводить корректное численное моделирование при добавлении молекулы бензойной кислоты. Поверхность получали путем построения сверхъячейки 2×2, что в пересчете дает область размером 11,0×10,4 Å, т.е. толщина диоксида титана составляла примерно 18,4 Å. В целом система включала в себя 64 атома титана и 128 атомов кислорода, принадлежащих брукиту. При введении в систему молекулы бензойной кислоты C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>COOH дополнительно необходимо было учесть в расчете суммарно 15 атомов водорода, углерода и кислорода.

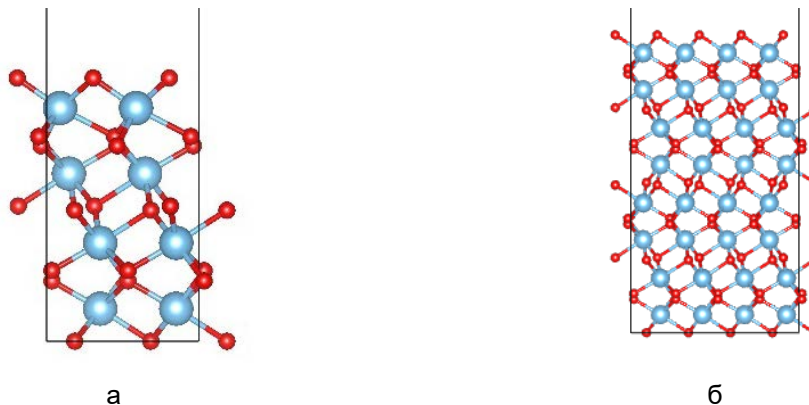


Рисунок 1. Исследуемые структуры брукита: а – монослой с ориентацией (010); б – модельная структура. Большой атом – титан, меньший – кислород

Численное квантово-механическое моделирование проводили в рамках теории функционала плотности и теории псевдопотенциала, реализованных в пакете OpenMX [5, 6]. Критерий сходимости расчета самосогласованного поля для структурной релаксации составлял  $10^{-6}$  эВ/ион. Интегрирование в первой зоне Бриллюэна проводили по  $\Gamma$ -центрированной регулярной сетке  $k$ -точек размером  $2 \times 2 \times 1$ . Сетка для численного интегрирования выбиралась такой, чтобы соответствовать среднему значению энергии отсечки около 2500 эВ. Достижением сходимости в процессе структурной релаксации считали достижение всех компонент сил, действующих на ионы, величины меньшей 10 мэВ/Å. Рассчитывали и анализировали только дисперсию зон.

Молекула бензойной кислоты была построена на основе экспериментальных данных из работы [3], затем проведена структурная релаксация по методике, изложенной выше, для корректного последовательного и самосогласованного описания исследуемой системы.

### III. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

По данным исследования одноэлектронного потенциала и электронной карты разностной плотности, наибольшие неоднородности и различия сосредоточены непосредственно у карбоксильной группы ( $-\text{COOH}$ ). Таким образом предпочтительной ориентацией для реализации адсорбционного процесса является ориентация карбоксильной группой к поверхности брукита. Структурная модель, реализующая данные выводы представлена на рис. 2, а (вакуумный слой показан не полностью). Для наглядности модель развернута на  $90^\circ$  в плоскости  $xz$ , чем обусловлен общий вид структуры, отличный от рис. 1.

В исследуемой системе наблюдается значительное изменение одноэлектронного потенциала, причем усиливается его локализация на отдельных атомах, а также на атоме кислорода «хвоста» бензойной кислоты, наиболее близко расположенном к атомам кислорода поверхности диоксида титана. Электронная карта разностной плотности показывает схожую тенденцию к локализации плотностей на атомах, однако сильного взаимодействия не наблюдается, что говорит об отсутствии переноса заряда от молекулы к подложке или наоборот. Учитывая, что расстояние между ближайшими атомами молекулы и подложки составляет около 3 Å, то разумно говорить о физической адсорбции бензойной кислоты на (010) поверхности брукита.

Дисперсия энергетических зон показана на рис. 3. Вследствие большого числа атомов, используемых в расчете (8 элементарных ячеек брукита), наблюдается большое число зон с одинаковым законом дисперсии, но сдвинутых друг относительно друга на малую величину энергии. Количество валентных зон много меньше, чем число зон проводимости, что обусловлено, вероятно, наложением энергетических уровней молекулы бензойной кислоты на энергетические уровни поверхности диоксида титана. Также наблюдается три зоны с линейным законом дисперсии в запрещенной зоне брукита. Отсутствие дисперсии говорит о принадлежности данных уровней молекуле бензойной кислоты.

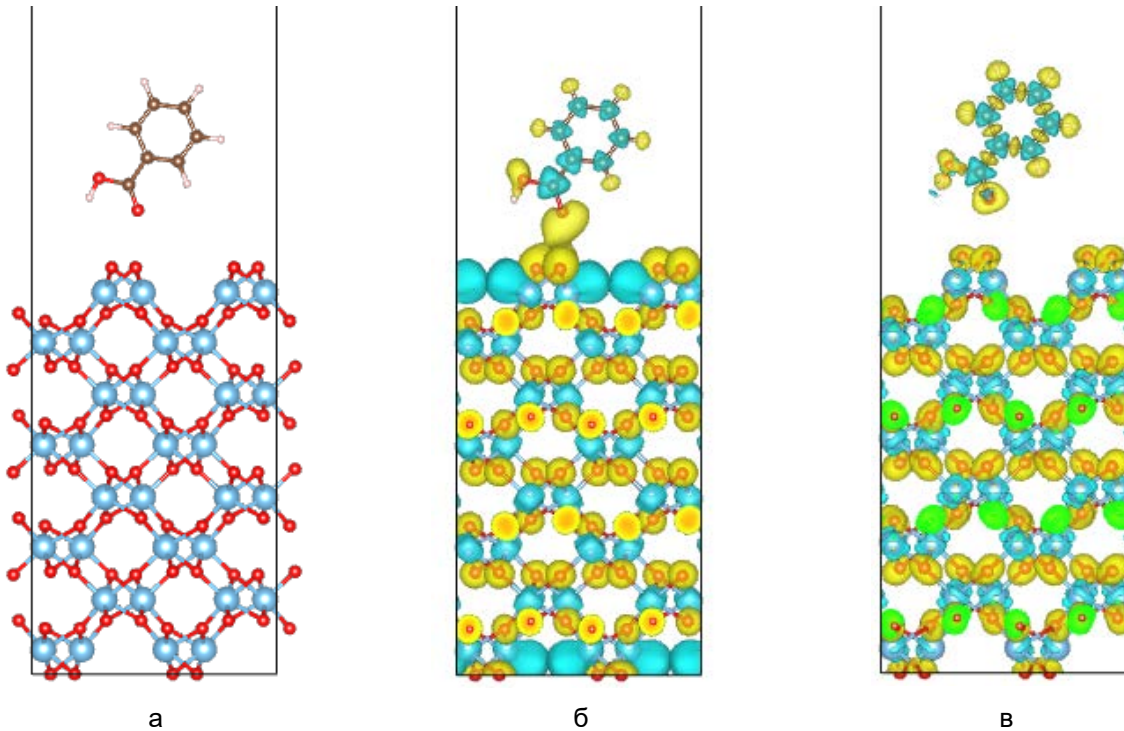


Рисунок 2. Поверхность брукита (010) с сорбированной молекулой бензойной кислоты: а – структурная модель; б – одноэлектронный потенциал; в – электронная карта разностной плотности

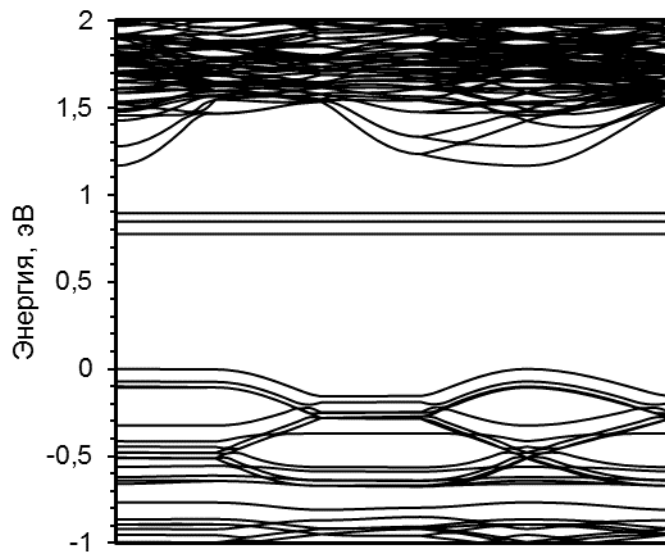


Рисунок 3. Зонная структура поверхности брукита (010) с сорбированной молекулой бензойной кислоты

#### IV. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исходя из анализа электронного строения молекулы бензойной кислоты (моделирующей карбоновые кислоты), а именно анализа одноэлектронного потенциала, электронных карт разностной плотности, визуализации высшей занятой молекулярной и низшей вакантной молекулярной орбиталей, установлено, что предпочтительной ориентацией молекулы является ориентация карбоксильной группой к поверхности брукита. Показано, что адсорбция молекулы бензойной кислоты носит преимущественно физический характер, что следует из анализа одноэлектронного потенциала и электронных карт разностной плотности системы поверхность брукита/молекула бензойной кислоты. Анализ дисперсии энергетических зон показывает, что в запрещенной зоне брукита локализируются

электронные состояния молекулы бензойной кислоты. На основе анализа проведенных исследований в качестве дальнейших шагов представляет интерес определение взаимного расположения энергетических уровней свободной и сорбированной молекулы бензойной кислоты относительно энергетических уровней поверхности брукита, поскольку необходимо понимать, заполнены эти состояния или вакантны, что важно для детального анализа процессов фотовозбуждения. Представляется разумным определить возможность и степень редуцирования количества атомов диоксида титана с целью минимизации времени проведения численного моделирования. Учитывая характер взаимодействия молекулы бензойной кислоты, как типичного представителя карбоновых кислот, также следует проводить анализ заселенностей орбиталей, который даст количественную оценку перераспределения электронной плотности в сорбированной молекуле, а также на поверхности брукита. Учитывая использование сверхъядейки и сложного характера электронного строения системы, следует рассмотреть возможность проведения процедуры развертки зон, которая даст количественный вклад атомов, относительно которых она будет проводиться, в каждую зону в зависимости от волнового вектора, что позволит более точно оценить взаимодействие между электронами молекулы и поверхности брукита.

#### БЛАГОДАРНОСТЬ

Исследования поддержаны БРФИИ (проект T23УЗБ-111). Авторы выражают благодарность профессору Борисенко В. Е. за полезное обсуждение результатов.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Paczkowski, P. Investigation of Degradation of Composites Based on Unsaturated Polyester Resin and Vinyl Ester Resin / P. Paczkowski, A. Puszka, B. Gawdzik // *Materials*. 2022. Vol. 15. P. 1286.
- [2] Remolding and Deconstruction of Industrial Thermosets via Carboxylic Acid-Catalyzed Bifunctional Silyl Ether Exchange / K. E. L. Husted [et al.] // *J. Am. Chem. Soc.* 2023. Vol. 145, No 3, P. 1916–1923.
- [3] Synthesis of vinyl esters of some aromatic carboxylic acids from vinyl acetate / A.B. Parmanov [et al.] // *Azerbaijan Chemical Journal*. 2023. Vol. 2. P. 53–59.
- [4] Synthesis and photocatalytic properties of 3-d metal ions (Mn, Co, Ni, Cu, Fe) doped titania nanostructured films / N. Smirnova [et al.]. In: *micro and nano technologies, biocompatible hybrid oxide nanoparticles for human health* (ed. by I.V. Melnyk [et al.]. Amsterdam: Elsevier, 2019. P. 67–82.
- [5] Ozaki, T. Variationally optimized atomic orbitals for large-scale electronic structures / T. Ozaki // *Phys. Rev. B*. 2003. Vol. 67. P. 155108.
- [6] Ozaki, T. Numerical atomic basis orbitals from H to Kr / T. Ozaki, H. Kino // *Phys. Rev. B*. 2004. Vol. 69. P. 195113.

#### MODELING OF THE STRUCTURAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF NANO-SIZED CATALYSTS WITH ADSORBED MOLECULES

A. Baglov<sup>1,2</sup>, L. Khoroshko<sup>1,2</sup>, O. Ruzimuradov<sup>3</sup>, A. Parmanov<sup>4</sup>, S. Nurmanov<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus,  
[baglov@bsuir.by](mailto:baglov@bsuir.by)

<sup>2</sup>Belarusian State University, Minsk, Republic of Belarus

<sup>3</sup>Turin Polytechnic University in Tashkent, Tashkent, Uzbekistan

<sup>4</sup>National University of Uzbekistan, Tashkent, Uzbekistan

**Abstract:** The interaction of the sorbed benzoic acid molecule with the model catalyst (brookite) surface was analyzed. Based on the analysis of the electronic structure of the benzoic acid molecule, it was found that the orientation of the carboxyl group to the brookite surface is the preferred. The adsorption of the benzoic acid molecule is predominantly physical. According the analysis of the dispersion of energy bands, the states of the benzoic acid molecule are localized in the band gap of brookite. Ideas for further extension of the research to obtain detailed information on the physical and chemical features of the interaction of the brookite surface with the benzoic acid molecule are proposed.

**Keywords:** brookite, benzoic acid, quantum mechanical modeling, catalysis.

УДК 681.32

## ПОСТРОЕНИЕ И ВИЗУАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ РЕШЕНИЙ В СИСТЕМЕ ЛОГИЧЕСКОЙ ОПТИМИЗАЦИИ ФУНКЦИОНАЛЬНО-СТРУКТУРНЫХ ОПИСАНИЙ ДИСКРЕТНЫХ УСТРОЙСТВ

Логинова И.П.

Объединенный институт проблем информатики НАН Беларуси,  
Минск, Республика Беларусь, [irilog@email.ru](mailto:irilog@email.ru)

Аннотация: Предложен подход к повышению эффективности решения задач оптимизации (снижение трудоемкости вычислений, уменьшение временных затрат) посредством организации параллельных вычислений в системе логической оптимизации функционально-структурных описаний дискретных устройств FLC-2. Возможности распараллеливания при выполнении различных программ оптимизации создаются посредством некоторых проектных операций. Оценкой эффективности параллельных решений является сокращение времени выполнения проектных операций с участием программ логической оптимизации.

Ключевые слова: автоматизация проектирования, параллельные вычисления, система булевых функций, OpenMP.

### I. ВВЕДЕНИЕ

Синтез логических схем, реализующих функциональные комбинационные блоки цифровых заказных СБИС, остается одной из важных задач автоматизированного проектирования, так как возрастает размерность задач проектирования и, соответственно, растёт время выполнения этапов синтеза. Практически все задачи из области логического проектирования носят комбинаторный характер и имеют экспоненциальную сложность. В силу этого становится проблематично решать задачи большой размерности за приемлемое время. Кроме того, к увеличению размерностей задач синтеза также ведет изменение субмикронных норм производства кристаллов и способов реализации логических элементов на транзисторном уровне.

В настоящее время наиболее перспективным направлением в развитии вычислительных систем является переход на многоядерную архитектуру. Однако, чтобы максимально полностью задействовать все имеющиеся ресурсы процессора требуется разработка принципиально новых алгоритмов вычислений. Для обеспечения оптимальной загрузки процессоров, в состав которых входит более одного ядра, необходимо при выполнении приложений использовать параллельные вычисления. К сожалению, существующие системы автоматизированного проектирования (САПР) не используют в полной мере многоядерные возможности современных процессоров, поскольку применение параллельных вычислений при решении задач проектирования требует полной переработки алгоритмов и соответствующих программных средств.

Представляется интересным и перспективным создание САПР, ориентированных на использование в технологий параллельных вычислений для многоядерных систем. В данном докладе представлен подход к реализации и интеграции параллельных вычислений в систему логической оптимизации функционально-структурных описаний дискретных устройств FLC-2 [1], целью которого является сокращение времени оптимизации при проведении ряда проектных операций.

### II. ПОДХОД К РЕАЛИЗАЦИИ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ В СИСТЕМЕ FLC-2

Одним из наиболее распространенных средств обеспечения параллельных вычислений для систем с общей памятью является технология OpenMP [2]. Данная технология представляет из себя набор директив, функций и переменных окружения, позволяющих последовательную программу превратить в параллельную. Для обеспечения параллельных вычислений средствами OpenMP реализуется многопоточность, при котором программа распределяется между главным (master) потоком и набором подчиненных (slave) потоков, создаваемых им [3]. OpenMP предполагает SPMD-модель параллельного программирования, в рамках которой один и тот же блок кода обрабатывается несколькими процессами. В начале программы должна находиться последовательная область, то есть изначально запускается лишь один процесс, который порождает некоторое количество дочерних процессов при входе в параллельную область программы. Число процессов, выполняющих конкретную параллельную часть программы, остается неизменным до момента завершения расчетов. После того, как дочерние процессы отработают параллельную часть, остается работать родительский процесс, причем в данный момент происходит неявная синхронизация данных программы. Первым, особенно трудоемким, этапом синтеза, является проведение технологически независимой оптимизации, поэтому для получения

эффективных решений, в отдельных случаях, предлагается нахождение такого решения для проекта, составленного из большого числа элементов. Разбиение описания проекта на сеть элементов преследует цели: понижение размерности объекта оптимизации, получение оптимального решения для каждого элемента сети и, в итоге, получение оптимального решения всего проекта. В ситуациях, когда описание проекта может быть представлено в виде сети, применение параллельных вычислений обеспечит еще и сокращение общего времени решения задачи оптимизации. В качестве критерия пригодности сети, получение которой осуществляется путем применения некоторых проектных операций системы FLC-2, является возможность ее представления в виде совокупности не зависящих друг от друга объектов (блоков).

Отличительной особенностью рассматриваемого подхода, который позволяет интегрировать параллельные вычисления в FLC-2 – включение в состав ядра системы FLC-2 программ запускающих параллельные процессы для всех типов используемых в системе программ оптимизации: Minim, Espresso, ABC [4]. Эти программы реализуют мощные, эффективные алгоритмы (принципиально последовательные) совместной и отдельной минимизации систем булевых функций в классе дизъюнктивных нормальных форм.

В системе FLC-2 реализован вариант организации распараллеливания по принципу многозадачного параллелизма [5], когда вне зависимости от вида запускаемых программ (например, различных программ оптимизации) и исходных объектов реализовано параллельное выполнение однотипных задач (ОЗ) с разными входными данными, представляющими собой фиксированные наборы определяющих параметров (ОП) по принципу один вариант ОЗ(ОП) – одно ядро процессора. Каждая параллельно выполняемая ОЗ представлена процессом, в котором производится запуск программы оптимизации, посредством команды «start». ОП этой команды – разные для разных программ, запускаемых этой командой и представлены аргументами с описаниями входных и выходных объектов, с которыми работает запускаемая в ОЗ программа.

Таким образом, при реализации на многоядерной вычислительной системе общая схема маршрута выполнения параллельных вычислений при проведении оптимизации блоков сети сводится к заданию разбиения описания проекта по соответствующим параметрам, определяемыми используемой проектной операцией разбиения, формированию однотипных задач для фиксированного числа блоков сети и раздаче ОП с параметрами блоков, назначенных для каждой ОЗ. По завершении выполнения всех ОЗ проводится сбор данных и формирование массива блоков с результатами оптимизации для последующей обработки. В силу того, что выполнение ОЗ осуществляется в ядрах процессора без обменов информацией между ядрами, распараллеливание средствами OpenMP сводится к организации многозадачного параллелизма (*multitasking*), при котором кооперативный (*Non-preemptive*) планировщик ЦП управляет распределением ОЗ по ядрам процессора. При использовании такого планирования, как только задача получила назначение на ядро, оно не может быть отобрано, даже если короткие задачи вынуждены ждать завершения более длительных задач. ОЗ, распределенные по ядрам, будут выполняться до тех пор, пока не будут завершены. Затем планировщик проверяет состояние всех задач и назначает из пула ОЗ следующую задачу, находящуюся в состоянии готовности. Общая схема маршрута проведения параллельной оптимизации с элементами 2-Connect одноуровневой сети представлена на рисунке 1.

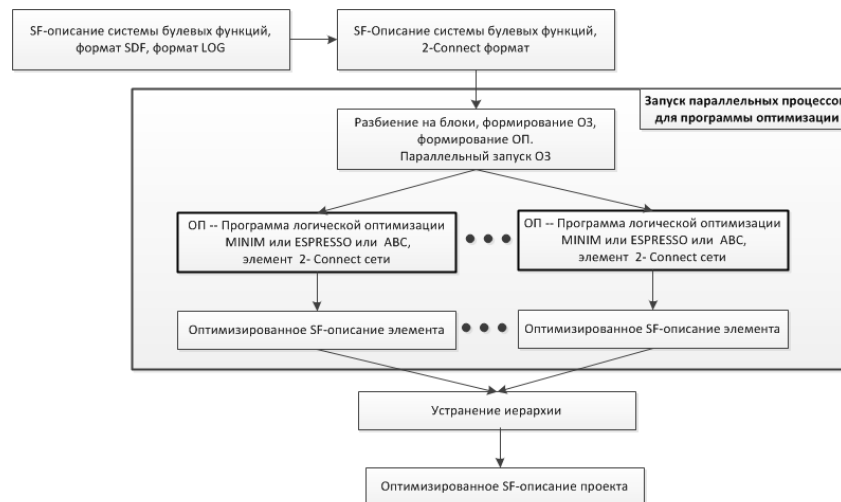


Рисунок 1. Общая схема параллельного выполнения оптимизации для элементов 2-Connect сети

### III. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ДАННЫХ ДЛЯ ЗАПУСКА ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ПРОЦЕДУР

В качестве языка описания логических схем в FLC2 используется язык SF [7], который ориентирован на иерархическое описание логической схемы. Схема на языке SF определяется последовательностью функционально-структурных описаний подсхем (блоков), из которых она состоит. Форматные преобразования позволяют проводить преобразование многоуровневых представлений в матричную форму системы ДНФ (SDF-формат). Исходное описание должно быть представлено матричными формами системы булевых функций в виде ДНФ (SDF-формат). Далее проводится проектная операция по преобразованию системы ДНФ в двухуровневую сеть (2-Connect формат), если это возможно. Каждая ДНФ в 2-Connect описании зависит от ограниченного числа входных/выходных переменных, либо содержит ограниченное число элементарных конъюнкций [6]. На рисунке 2 в качестве примера отображена последовательность выбора в меню операции «Минимизации двухуровневой сети (ABC)», которая запускает параллельное выполнение минимизации программой ABC для 8-ми элементов 2-Connect сети.

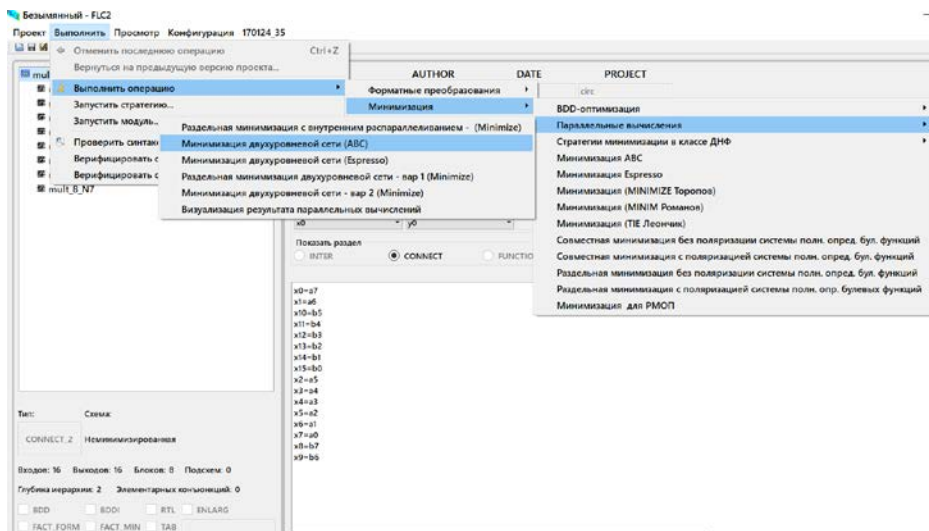


Рисунок 2. Общая схема параллельного выполнения оптимизации для элементов 2-Connect сети

### IV. РАСШИРЕНИЕ ВНЕШНЕГО ИНТЕРФЕЙСА СИСТЕМЫ FLC-2

Внешний вид графического интерфейса системы FLC-2 [6], работа с проектными процедурами, организация иерархического меню не претерпел никаких изменений при работе с проектными операциями и представлениями данных. Добавлена панель в дереве меню, которая позволяет запускать пять операций выполнения параллельных вычислений с разными программами минимизации, для разных исходных описаний (SDF-формат и 2-Connect формат) и разных режимах проведения совместной и раздельной минимизации. Кроме того, в эту панель включена возможность визуализации результатов параллельных вычислений для текущего состояния проекта. На рисунке 3 представлена временная диаграмма распределения вычислений по ядрам процессора.

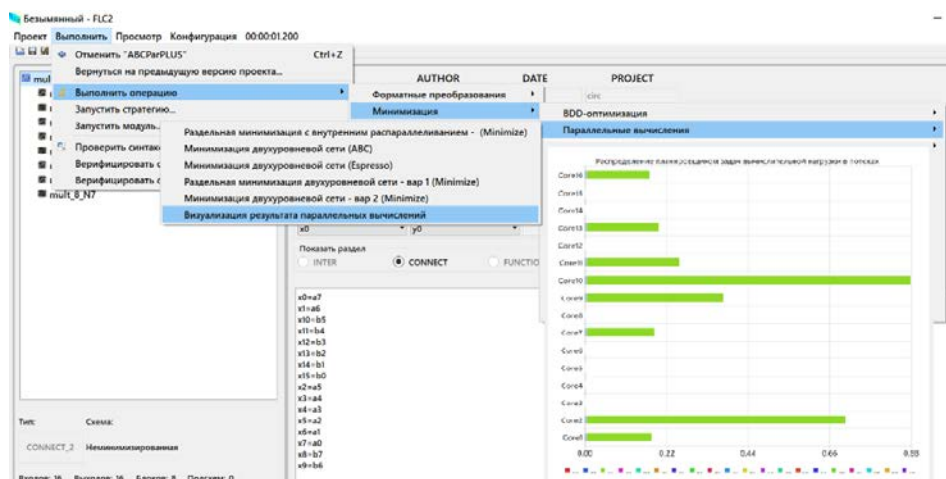


Рисунок 3. Визуализация распределения параллельных процессов по ядрам процессора

В состав проектных операций выполнения параллельных вычислений, представленных на последней панели иерархического меню (рисунок 2), включена программа, для которой исходное описание представлено матричными формами системы булевых функций в виде ДНФ (SDF-формат). В этой программе проведено распараллеливание алгоритма отдельной минимизации, поэтому результаты представлены оптимизированной системой булевых функций в формате SDF и временем выполнения этой параллельной программы. Визуализация для этой программы не проводится.

### III. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Функционал системы логической оптимизации функционально-структурных описаний дискретных устройств FLC-2, наличие проектных процедур для проведения разнообразных форматных преобразований с описаниями объектов проектирования позволил реализовать достаточно простой подход к интеграции параллельных вычислений в систему FLC-2 для выполнения логической оптимизации. Критерием эффективности такого подхода является существенное сокращение общего времени решения задачи оптимизации для объектов проектирования большой размерности [5].

### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Бибило, П.Н. Система логической оптимизации функционально-структурных описаний цифровых устройств на основе продукционно-фреймовой модели представления знаний /П. Н. Бибило, В. И. Романов // Проблемы разработки перспективных микро- и наноэлектронных систем - (МЭС-2020) : IX Юбилейная Всероссийская научно-техническая конференция : Сборник трудов ; под общей ред. А. Л. Стемпковского. – Москва : ИППМ РАН, 2021 Москва : ИППМ РАН, 2020.-С. 9–16.
- [2] J. Ciesko, S. Mateo, X. Teruel, X. Martorell, E. Ayguadé, J. Labarta, A. Duran, B. R. de Supinski, S. Olivier, K. Li, and A. E. Eichenberger, Towards Task-Parallel Reductions in OpenMP. Cham: Springer International Publishing, 2015, pp. 189–201.
- [3] Логинова, И.П. Использование технологий параллельных вычислений для систем с общей памятью на примере задачи минимизации булевых функций / И.П. Логинова // Информационные технологии в промышленности, логистике и социальной сфере (ITI\*2019) : тезисы докладов X Международной научно-технической конференции (23 – 24 мая 2019 года, Минск). – Минск : ОИПИ НАН Беларуси, 2019. – С. 130 – 133.
- [4] Бибило, П. Н. Экспериментальное сравнение эффективности программ минимизации систем булевых функций в классе дизъюнктивных нормальных форм / П. Н. Бибило, И. П. Логинова // Информатика. – 2022. – Т. 19, № 2.– С. 26-55.
- [5] Логинова, И.П. Анализ быстродействия при реализации параллельных вычислений для решения задач оптимизации в системе логического проектирования / И. П. Логинова // IX Международная научно-практическая конференция «BIG DATA and Advanced Analytics» (BIG DATA 2023): Сборник научных статей в 2 ч. Ч. 1, (Республика Беларусь, Минск, 17-18 мая 2023 г.). – Минск: БГУИР, 2023. – С. 365–378.
- [6] Романов, В.И. Программная поддержка базы знаний в системе логического проектирования FLC 2/ В.И. Романов / Информационные технологии и системы 2019 (ИТС 2019) – Information Technologies and Systems 2018 (ITS 2018): материалы междунар. науч. конф. (Республика Беларусь, Минск, 30 октября 2019 года). – Минск: БГУИР, 2019. – С. 116-117.

### DEVELOPMENT AND VISUAL ANALYSIS OF PARALLEL SOLUTIONS IN LOGIC OPTIIMIZATION SYSTEM OF FUNCTIONAL STRUCTURED DESCRIPTIONS FOR DIGITAL CIRCUITS

I.P. Loginova

United Institute of Informatics Problems of NAS of Belarus, Minsk, Republic of Belarus, [irilog@email.ru](mailto:irilog@email.ru)

Abstract: An approach to increasing the efficiency of solving optimization problems (reducing the complexity of calculations, reducing time costs) by organizing parallel calculations in a logical optimization system of structured functional descriptions for digital circuits FLC-2 is proposed. The possibilities for parallelization when executing various optimization programs are created by means of some design operations. The parallel solutions efficiency is assessed by reducing the execution time of design operations involving logical optimization programs.

Keywords: computer-aided design, parallel computing, the system of Boolean functions, OpenMP.



УДК 544.653.23; 535-92; 53.082.531

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТИЧЕСКОГО БИОСЕНСОРА НА ОСНОВЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАННОГО АНОДНОГО ОКСИДА НИОБИЯ

Гога А.В.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
Минск, Республика Беларусь, [a.goga@bsuir.by](mailto:a.goga@bsuir.by)

Аннотация: В работе проведено оптическое моделирование фотонного кристалла на основе наноструктурированного анодного оксида ниобия в качестве биосенсора биотина-стрептоидина и глюкозы в крови, дана оценка его эффективности, подобраны оптимальные морфологические параметры.

Ключевые слова: экспресс-анализ, FDTD-моделирование, отражение, 2D фотонный кристалл, массив нанопроводов, био-чип.

### I. ВВЕДЕНИЕ

Использование наноструктурированных материалов для детектирования биомолекул позволяет добиться повышения эффективности анализа при снижении его стоимости. Одним из перспективных направлений «label-free» — являются биосенсоры на основе 2D фотонных кристаллов (ФК), созданных из массива наностолбиков. Принцип работы таких ФК заключается в смещении положения пика отражения при заполнении средой, содержащей биомолекулы, пространства между наностолбиками, что приводит к изменению показателя преломления в межстолбиковом пространстве [1, 2]. Минусом таких ФК, сформированных, как правило, на основе кремния и его диоксида, является использование технологии фотолитографии, что приводит к удорожанию технологии, а также при уменьшении шага решетки ФК повышает требования к оборудованию или вовсе делает создание таких наноструктур невозможным. Решением данной проблемы может быть использование самоорганизованных систем, таких как анодные наноструктурированные оксиды вентильных металлов, например, ниобия. Уже исследованы оптические свойства таких систем, обладающих исключительной термической стабильностью и химической инертностью. Для оптимизации морфологических и оптических свойств биосенсоров на их основе удобно использовать FDTD моделирование, что позволит сократить стадию экспериментального подбора оптимальных параметров ФК. Известно, что ФК на основе наноструктурированного анодного оксида ниобия обладает достаточной сходимостью результатов оптического симулирования и свойств реальных структур [3].

Таким образом, целью настоящей работы является оптическое моделирование ФК на основе наноструктурированного анодного оксида ниобия в качестве биосенсора биотина-стрептоидина и глюкозы в крови человека, дана оценка его эффективности, подобраны оптимальные морфологические параметры.

### II. МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Все характеристики были рассчитаны путем решения уравнений Максвелла с использованием метода конечной разности во временной области (FDTD) на базе программного комплекса Ansys Lumerical.

При создании модели ФК использовали следующие допущения:

1. Морфологические параметры массива наностолбиков ниобия были выбраны исходя из реальных получаемых структур при анодировании двухслойных систем Al/Nb в 0.4 М водных растворах щавелевой (первый тип) и малоновой (второй тип) кислот при плотности тока 6 мА/см<sup>2</sup>.
2. В качестве подложки используется кремниевая пластина, так как это наиболее доступная подложка для напыления исходных систем Al/Nb.
3. Происходит полное заполнение биоактивной средой массива наностолбиков.
4. Чувствительность биосенсора определялась смещением главного пика отражения относительно его положения при заполнении пустот между наностолбиками ФК воздухом.
5. Индекс преломления биоактивных материалов принимали равным таковому для растворенных в крови человека биотина-стрептоидина и глюкозы [1].

Область симуляции составляла 1,5×1,5 мкм<sup>2</sup> в плоскости x – y и 0,7 мкм в направлении z – координаты. В качестве граничных условий области симуляции по x – y – z координатам выбраны идеально сочетающиеся слои (perfectly matched layers – PML). Минимальное количество слоев PML – 13. В качестве источника выступал дипольный источник излучения с углом падения 10° в диапазоне длин

волн 200–550 нм, который выбран исходя из доступного диапазона для спектрофотометра МС–121. Шаг вычисления составил 0,25 нм, время симуляции 1000 фс. Экран детектирования падающего излучения (пропускания) расположен по  $x$  – координате. Значения комплексного показателя преломления для оксида ниобия были взяты из открытых баз данных [4]. При построении модели ФК на основе массива наностолбиков оксида ниобия были использованы морфологические параметры реального наноструктурированного анодного оксида ниобия, который возможно сформировать анодированием двухслойной системы Al/Nb на кремнии. Методика формирования подобных наноструктур включает следующие основные этапы: анодирование верхнего слоя алюминия с формированием пористой матрицы оксида алюминия, которая задает морфологию массива наностолбиков оксида ниобия, реанодирование – на данном этапе происходит задание высоты наностолбиков, травление с целью удаления анодного оксида алюминия. В результате получается следующая структура наноструктурированного анодного оксида ниобия (снизу вверх): кремниевая подложка, оставшийся металлический подслой ниобия, сплошной оксидный слой и массив наностолбиков оксида ниобия. Итоговая структура для моделирования представлена на рис. 1.

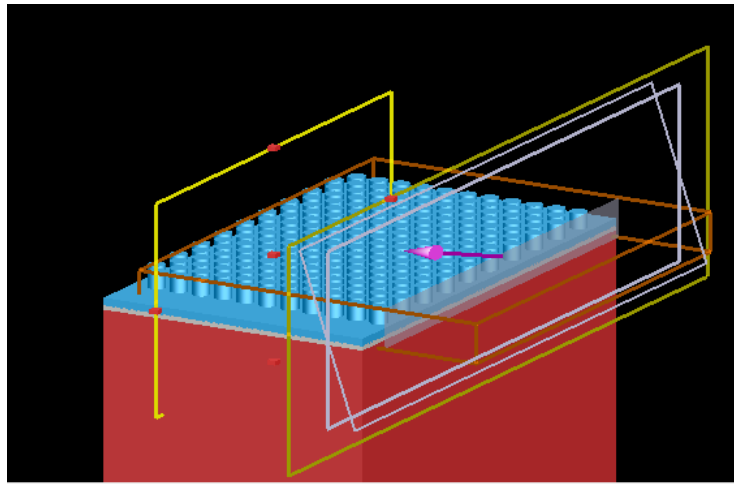
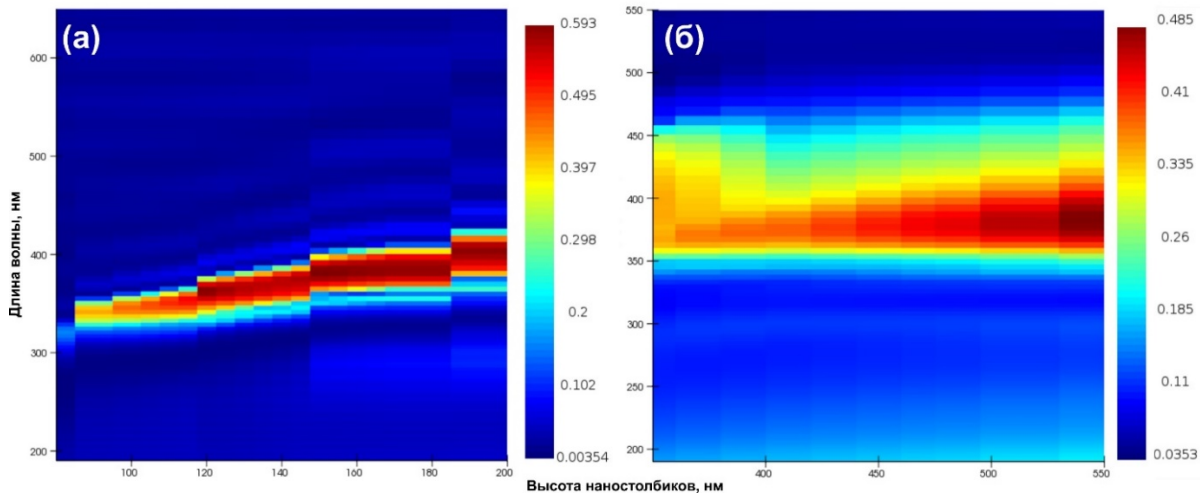


Рисунок 1. Полное изображение массива наностолбиков оксида ниобия, построенное для моделирования в среде программного комплекса Ansys Lumerical

### III. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Для упрощения расчётов толщину сплошных слоев приняли постоянной и равной 30 нм для металлического слоя, а для сплошного слоя оксида ниобия равной 100 нм. Данное допущение было сделано исходя из того, что на кремниевой подложке проще получать структуры с остаточным металлическим слоем. Прежде, чем переходить к оптическому моделированию в средах с разным показателем преломления, был проведен подбор оптимальных морфологических параметров. Развертка параметров происходила по высоте наностолбиков оксида ниобия, т. к. это наиболее управляемый параметр. Диаметр и межстолбиковое расстояние для массива наностолбиков оксида ниобия принимали постоянными, упаковка ФК гексагональная. Первый тип наностолбиков соответствует структурам, получаемым в щавелевой кислоте, при этом в данном случае выбор морфологических параметров был сделан так, чтобы непосредственное расстояние между столбиками составило порядка 20 нм. Так как длина цепочки биотина-стрептовицина составляет 10 нм, то происходит полное заполнение межстолбикового пространства. Для первого типа наностолбиков межстолбиковое расстояние (между центрами соседних столбиков) и диаметр составили 77 нм и 27 нм, соответственно. Для второго типа ФК межстолбиковое расстояние и диаметр составили 180 нм и 80 нм, соответственно. Второй тип соответствует наностолбикам анодного оксида ниобия, получаемым в малоновой кислоте. На рис. 2 показано распределение интенсивности отражения в зависимости от высоты наностолбиков для выбранного диапазона длин волн. Для первого типа развертка показана без сплошных слоев, чистый ФК, без дополнительных слоев и подложки кремния. Видно, что при этом улучшается добротность спектра отражения, которая выше, чем для второго типа наностолбиков. Однако видно, при моделировании с дополнительными слоями, пик сильно «смазывается» и смещается в ультрафиолетовую область, что также будет показано ниже на рис. 3. Для второго типа наилучший спектр наблюдается для высоты столбиков в диапазоне длин волн 500–550 нм. Наблюдается следующая тенденция: чем выше наностолбики, тем лучше спектр отражения, однако для первого типа столбиков невозможно значительное увеличение высоты, так как при высоком аспектном соотношении повышается склонность к падению наностолбиков.



а – развертка по высоте для первого типа наностолбиков;  
б – развертка по высоте для второго типа наностолбиков

Рисунок 2. Распределение интенсивности отражения в зависимости от высоты наностолбиков в диапазоне длин волн от 200 до 550 нм

На рис. 3 показан спектр отражения для двух типов ФК в средах с разным показателем преломления. Видно, что главный пик отражения для первого типа ФК, не позволяет его использовать для «label-free» биосенсора. Для второго типа ФК с высотой 550 нм, при выбранной морфологии пик отражения составил 0,46 отн. ед. на длине волны 386 нм. Для данного типа ФК было проведено оптическое моделирование для биотина-стрептовида и глюкозы в крови с разными концентрациями и соответствующими индексами преломления среды. Для биотина-стрептовида значения показателя преломления составили 1,45 и 1,46, а для глюкозы 1,337 и 1,339. При изменении показателя преломления до 1,46 смещение пика составило более 50 нм, при 1,339 до 40 нм. При незначительном изменении показателя преломления, детектирование смещения пика возможно только при использовании спектрофотометра. Однако смещение пика отражения на 50 нм и переход максимума в видимый диапазон допускает визуальное наблюдение изменения цвета на поверхности при заполнении межстолбикового пространства. Конечно, применение массива наноструктурированного анодного оксида ниобия в качестве оптического биосенсора биотина-стрептовида и глюкозы практически нецелесообразно. Однако полученный результат позволяет допустить применение данной структуры для детектирования олигонуклеотидов и вирусов путем иммобилизации биоспецифичных групп на поверхности и придания ей тем самым исключительных селективных свойств.

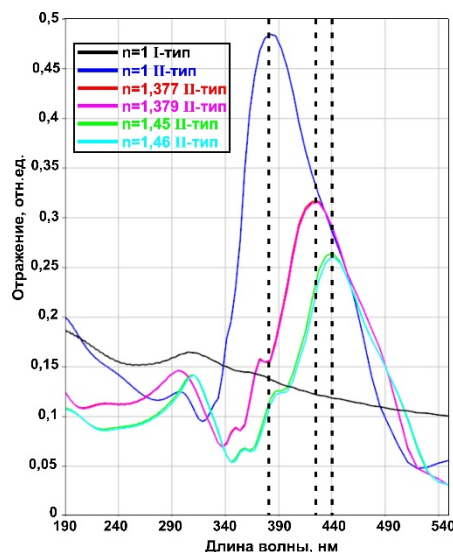


Рисунок 3. Спектральные характеристики биосенсора первого и второго типа при заполнении средами с показателями преломления 1,337 и 1,339 для глюкозы, 1,45 и 1,46 для биотина-стрептовида

#### IV. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе путем оптического моделирования фотонного кристалла на основе наноструктурированного анодного оксида ниобия была обоснована возможность его использования в качестве биосенсора биотина-стрептоведина и глюкозы. Получены следующие основные результаты:

- выбранная морфология для фотонного кристалла на основе наноструктурированного анодного оксида ниобия, условно сформированного в щавелевой кислоте с расстоянием между столбиками 25 нм, не позволяет получить биосенсор с достаточной чувствительностью;
- фотонный кристалл на основе наноструктурированного анодного оксида ниобия, условно сформированный в малоновой кислоте, с высотой наностолбиков 550 нм может быть использован в качестве биосенсора;
- главный пик отражения биосенсора составил 0,46 отн. ед. на длине волны 386 нм, смещение пика отражения при заполнении средой с индексами преломления 1,339 и 1,46 составили 40 и 50 нм, соответственно.

#### БЛАГОДАРНОСТЬ

Исследование осуществлено при финансовой поддержке Государственной программы научных исследований «Конвергенция-2025» по теме 1.10.7 «Разработка процессов управляемого воспроизводимого формирования высокоупорядоченных иммобилизирующих наноструктур методами анодного окисления для химической модификации».

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Yashaswini, P. R. Performance analysis of photonic crystal based biosensor for the detection of bio-molecules in urine and blood / P. R. Yashaswini; H. N. Gayathri; P. C. Srikanth // Mater. Today Proc. 2023, Vol. 80, Part 3. P. 2247–2254.
- [2] Label-free detection of DNA hybridization using nanopillar arrays based optical biosensor / J. Chen [et.al.] // Sensors and Actuators B: Chemical. 2013. V. 194. P. 10–18.
- [3] Pligovka, A. Properties of Porous Alumina Assisted Niobia Nanostructured Films—Designing 2-D Photonic Crystals Based on Hexagonally Arranged Nanocolumn / A. Pligovka, A. Poznyak, M. Norek // Micromachines. 2021. Vol. 12, No 6. Art. No 589.
- [4] Refractive index [Electronic Resource] // Mode of access: <https://refractiveindex.info> // Date of access: 01.10.2024.

#### MODELING OF OPTICAL BIOSENSOR BASED ON NANOSTRUCTURED ANODIC NIOBIUM OXIDE

A. Hoha

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus,  
[a.goga@bsuir.by](mailto:a.goga@bsuir.by)

Abstract: Optical stimulation of photonic crystal based on nanostructured anodic niobium oxide as a biosensor of biotin-streptavidin and blood glucose was performed. Efficiency of biosensor was evaluated, and optimal morphological parameters were obtained.

Keywords: label-free, FDTD modeling, 2D-photonic crystal, reflection, arrays of nanocolumns, bio-chip.

УДК 519.6

## ЗАРЯДОВАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ ТРАНЗИСТОРНОЙ СТРУКТУРЫ С ДВУМЕРНЫМ КАНАЛОМ, ВЫЗВАННАЯ ИНТЕРФЕЙСНЫМИ СОСТОЯНИЯМИ

Мельникова В.В.<sup>1</sup>, Курапцова А.А.<sup>2</sup>

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
Минск, Республика Беларусь, <sup>1</sup>vitaemaximus@gmail.com, <sup>2</sup>anku21qwerty@gmail.com

Аннотация: Получены закономерности зарядовой неустойчивости транзисторной структуры с двумерным каналом, вызванной интерфейсными состояниями, в которой в качестве материала двумерного канала рассматривается дихалькогенид переходного металла (ДПМ). Рассмотрено влияние на электрофизические параметры транзисторной структуры с двумерным полупроводниковым каналом ширины запрещенной зоны материала канала, толщины подзатворного диэлектрика, емкости интерфейсных состояний. Показано, что в условиях неустойчивости, вызываемой ростом емкости интерфейсных состояний, зависимости химического потенциала, концентрации электронов от потенциала полевого электрода имеют скачкообразный вид. Такой эффект обусловливается рассогласованием электронейтральности и статистики Ферми-Дирака.

Ключевые слова: транзисторная структура, двумерный канал, электрохимический потенциал, квантовая емкость, зарядовая неустойчивость, интерфейс, бистабильность.

### I. ВВЕДЕНИЕ

Актуальным направлением создания нового поколения элементной базы устройств обработки и передачи информации кроме решения технологических проблем является разработка энергоэффективных приборов микро- и нанoeлектроники, что требует непрерывного совершенствования моделей и алгоритмов для их проектирования и функционирования. Соответствующие перспективы связываются с применением двумерных материалов в качестве проводящих каналов [1]. Транзисторы с двумерными каналами лишены некоторых недостатков традиционных МДП транзисторов, но они также имеют свои особенности, связанные с механизмами токопереноса и зарядовыми свойствами. Перспективными материалами для двумерных каналов транзисторных структур нового поколения считаются дихалькогениды переходных металлов (ДПМ), такие как  $\text{MoS}_2$ ,  $\text{WS}_2$ ,  $\text{MoSe}_2$  и аналогичные им. Наряду с активным решением технологических проблемы получения двумерных ДПМ необходимым является разработка моделей функционирования транзисторных структур, в которых они выполняют роль проводящих каналов. Режимы функционирования полевого транзистора с двумерным каналом в значительной мере определяются такими электрофизическими параметрами как химический потенциал  $\chi$ , заряд канала, квантовая емкость канала, емкости канала и затвора, емкость интерфейсных состояний  $C_{it}$ . Эти параметры влияют друг на друга и в конечном счете определяют электрические выходные характеристики транзистора [2]. Актуальным является исследование взаимовлияния электрофизических параметров транзисторных структур с двумерными каналами с учетом возможности возникновения зарядовых неустойчивостей. В данной работе представлены результаты моделирования возникновения зарядовой неустойчивости в транзисторной структуре с двумерным каналом из  $\text{MoS}_2$  с учетом взаимовлияния между химическим потенциалом, концентрацией носителей заряда, зарядом канала, квантовой емкостью, емкостями канала и затвора, потенциалом полевого электрода, емкостью подзатворного диэлектрика, емкостью состояний на интерфейсах.

### II. МОДЕЛЬ

Моделируемая транзисторная структура содержит канал из двумерного кристалла из ДПМ, полевой электрод, отделенный от канала подзатворным диэлектриком с емкостью  $C_{ox}$ . Концентрация электронов в двумерном канале на единицу площади определяется величиной его химического потенциала согласно статистики Ферми-Дирака

$$n_e(\chi) = \int_{E_c}^{\infty} D(E) f(E - \chi) dE \quad (1)$$

где плотность состояний ДПМ [3]:

$$D(E) = \frac{4\pi m_e}{h^2} \sum_n H(E - E_n) \quad (2)$$

Здесь  $H$  – функция Хэвисайда,  $m_e$  – эффективная масса электронов,  $E_n$  энергия  $n^{\text{th}}$  – подзоны (основной вклад в концентрацию носителей заряда вносит основное состояние с  $n = 0$ ),  $E_c$  – энергия минимума зоны проводимости,  $h$  постоянная Планка,  $f$  – функция Ферми-Дирака. Для концентрации дырок  $n_h$  записывается аналогичное выражение.

С другой стороны, исходя из условия электронейтральности, основное уравнение электростатики для двумерного канала определяется взаимосвязью между концентрацией носителей заряда и химическим потенциалом посредством потенциала полевого электрода с учетом емкостей подзатворного диэлектрика и интерфейсных состояний [2]

$$\chi \left( 1 + \frac{C_{it}}{C_{ox}} \right) + \frac{q^2 n_s(\chi)}{C_{ox}} = qU_G \quad (3)$$

где  $U_G$  – потенциал полевого электрода,  $n_s = n_e - n_h$ ,  $q$  – элементарный заряд.

### III. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Для проведения расчетов были использованы следующие величины параметров транзисторной структуры с двумерным каналом: температура  $T = 300$  К, ширина запрещенной зоны материала двумерного канала,  $E_g = 0,22-0,312$  эВ, удельная емкость подзатворного диэлектрика  $9,43 \times 10^{-4}$  Ф/м<sup>2</sup>, удельная емкость интерфейса  $C_{it} = (3-4) \times 10^{-3}$  Ф/м<sup>2</sup>, потенциал полевого электрода  $U_G = 0 - 5$  В, эффективная масса электронов  $(0,45-0,56)m_0$ . Здесь  $m_0$  – масса свободного электрона.

Полученные результаты показали, что с увеличением потенциала полевого электрода и варьировании ширины запрещенной зоны химический потенциал при наличии неустойчивости изменяется скачкообразно, рис.1 (кривые 1–6 получены при различной ширине запрещенной зоны  $E_g/kT$ : 8,45 (кривая 1); 9,0 (2); 10,0 (3); 12,0 (4). Переход к неустойчивости и возникновению скачков на  $\chi(U_G)$  происходит при росте емкости  $C_{it}$  с  $3 \times 10^{-3}$  Ф/м<sup>2</sup> до  $3,7 \times 10^{-3}$  Ф/м<sup>2</sup>.

При этом, с ростом ширины запрещенной зоны и постоянных величинах емкости подзатворного диэлектрика и интерфейса  $C_{it}$  пороговое значение потенциала  $U_{Gt}$ , при котором происходит резкое изменение  $\chi(U_G)$  уменьшается с 4,95 до 1,95 В. Однако изменение  $U_{Gt}$  наблюдается только при росте  $E_g/kT$  с 8,45 до 12, а при  $E_g/kT \geq 12$ , значение  $U_{Gt}$  практически не меняется и составляет 1,9–2,0 В ( $k$  – постоянная Больцмана).

Зависимости концентрации  $n_e$  от  $U_G$  аналогичны зависимостям  $\chi(U_G)$ , т.е. также имеют скачкообразный характер, отражающий наличие зарядовой неустойчивости, рис.2. Величины пороговых потенциалов  $U_{Gt}$  аналогично зависят от ширины запрещенной зоны, но при этом более резко выражены полки при  $U_G < U_{Gt}$ : наблюдается снижение концентрации при росте  $E_g/kT$  до 12. При  $U_G > U_{Gt}$  значения выхода  $n_e(U_G)$  в область монотонности снижаются с  $2 \cdot 10^{12}$  до  $4,5 \cdot 10^{11}$  см<sup>-2</sup> с ростом  $E_g/kT$  до 12.

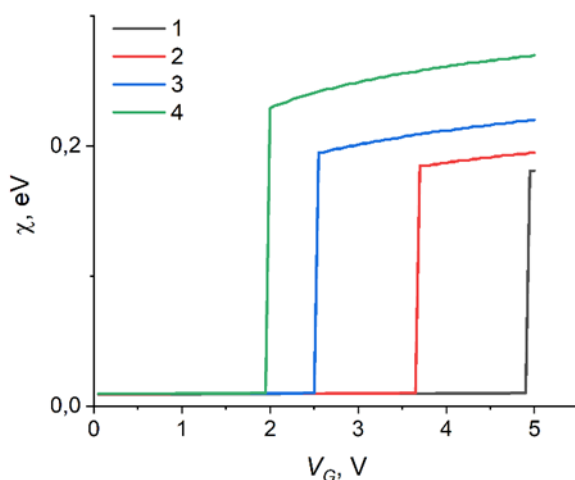


Рисунок 1. Зависимость химического потенциала от потенциала полевого электрода

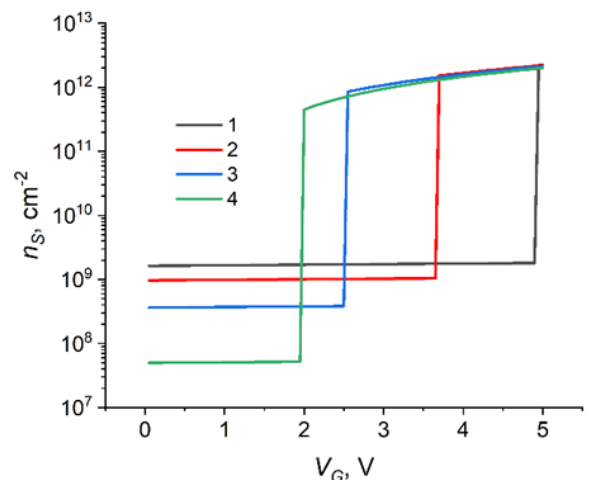


Рисунок 2. Зависимость концентрации электронов от потенциала полевого электрода

Из полученных результатов следует, что скачкообразное изменение химического потенциала и концентрации электронов происходит при определенной критической величине потенциала полевого электрода  $U_{Gt}$ . При  $U_G < U_{Gt}$  и  $U_G > U_{Gt}$  зависимости  $\chi(U_G)$  и  $n_e(U_G)$  носят монотонный характер без наличия особенностей. Таким образом, рост потенциала полевого электрода при  $U_G > U_{Gt}$  способствует преодолению неустойчивости и наблюдается монотонный рост параметров  $\chi(U_G)$  и  $n_s(U_G)$ , но уже при существенно иных значениях.

Преодоление неустойчивости означает переход в другую область соотношений параметров, обеспечивающих самосогласование при  $U_G > U_{Gt}$ . Возникновение неустойчивости может быть связано с тем, что существенное увеличение соотношения емкостей  $C_{it}/C_{ox}$  приводит к появлению сингулярности в решении системы (1)-(3) в некоторой критической точке, определяемой величиной потенциала полевого электрода  $U_{Gt}$ . Физически это связано с тем обстоятельством, что рост емкости интерфейса ведет к рассогласованию условия электронейтральности и статистики Ферми-Дирака при определенном значении потенциала  $U_G$  по причине, ограниченной плотности состояний  $D(E)$ , из-за чего и возникает зарядовый дисбаланс.

#### IV. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, проведенное моделирование взаимовлияния электрофизических параметров транзисторной структуры с двумерным каналом в условиях неустойчивости показало, что зависимости химического потенциала и концентрации электронов от потенциала полевого электрода в условиях неустойчивости носят скачкообразный характер, порог которого зависит от ширины запрещенной зоны, емкости интерфейсных состояний и емкости подзатворного диэлектрика.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Liu, Y. Promises and prospects of two-dimensional transistor / Y. Liu, X. Duan, H.J. Shin / Nature 591. – 2021. – P. 43–53.
- [2] Makovskaya, T.I. Charge properties of the MOS transistor structure with the channel made from a two-dimensional crystal/ T.I. Makovskaya et al. // Russian Microelectronics. – 2020. – Vol.49, No.7. – P.507–515.
- [3] Jiménez, D. Drift-diffusion model for single layer transition metal dichalcogenide field-effect transistors / D. Jiménez // Applied Physics Letters. – 2012. – Vol.101, Iss. 24. – P. 243501.

#### CHARGE INSTABILITY OF A TRANSISTOR STRUCTURE WITH A TWO-DIMENSIONAL CHANNEL CAUSED BY INTERFACE STATES

V.V. Melnikova<sup>1</sup>, H.A. Kuraptsova<sup>2</sup>

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus,  
[1vitaemaximus@gmail.com](mailto:1vitaemaximus@gmail.com), [2anku21qwerty@gmail.com](mailto:2anku21qwerty@gmail.com)

Abstract: Regularities of charge instability of transistor structure with two-dimensional channel caused by interface states, in which transition metal dichalcogenide (TMD) is considered as a material of two-dimensional channel, are obtained. It is shown that under the conditions of instability caused by the growth of the interface states capacitance, the dependences of the chemical potential, electron concentration from the field electrode potential have a jump-like form. The obtained results are explained by the fact that under the conditions of instability the growth of the interface state capacitance leads to the mismatch of the electroneutrality condition and Fermi-Dirac statistics.

Keywords: transistor structure, two-dimensional channel, electrochemical potential, quantum capacitance, charge instability, interface, bistability.

УДК 621.3.049.774.2

## ПЕРЕПРОЕКТИРОВАНИЕ КМОП СБИС СРЕДСТВАМИ ИНСТРУМЕНТА СИНТЕЗА Yosys

Черемисинов Д.И., Черемисинова Л.Д.

Объединенный институт проблем информатики НАН Беларуси,  
Минск, Республика Беларусь, [cld@newman.bas-net.by](mailto:cld@newman.bas-net.by)

Аннотация: Рассматривается задача перепроектирования схемы транзисторного уровня, заданной в формате SPICE, в другом технологическом базисе. Предлагается подход, в основе которого лежит экстракция структуры на уровне логических элементов и экспорт полученного иерархического SPICE описания в программную среду инструмента синтеза Yosys (Yosys Open SYnthesis Suite) для выполнения оптимизации и синтеза в заданном базисе. Разработан метод и программное средство представления логической сети в формате SPICE и преобразования его во внутреннее представление пакета Yosys.

Ключевые слова: экстракция транзисторных подсхем, КМОП-схемы, формат SPICE, Verilog, VHDL.

### I. ВВЕДЕНИЕ

Проектирование электронных устройств в любой САПР осуществляется в несколько этапов преобразований от высокого к низкому уровню абстракции. Для ПЛИС низкоуровневое описание состоит из двоичного файла, который должен быть прошит в матрицу вентилях, в то время как для интегральной схемы низкоуровневое описание состоит из лейаута, который описывает маски, которые должны использоваться машиной литографии на фабрике интегральных схем. Каждый этап проектирования требует специализированных инструментов. Программное обеспечение для автоматизации проектирования электронных устройств (в частности для проектирования интегральных схем) предлагают три мировых поставщика: Synopsys, Cadence Design Systems и Siemens EDA (ранее Mentor Graphics, приобретенная в 2017 году компанией Siemens). Эти поставщики предлагают программные пакеты, которые позволяют охватить весь спектр проектирования ИС: от синтеза по описанию аппаратуры на языке HDL (Hardware Description Language) до физического синтеза и тестирования.

Разработка инструментов проектирования тесно связана с разработкой технологии изготовления микросхем. Свойства технологии конкретного завода полупроводников, такие как модели транзисторов, физические характеристики и правила проектирования, обычно фиксируются в описаниях, которые являются собственностью изготовителя программного обеспечения. Этот набор информационных материалов составляет комплект PDK (Process Design Kit) для проектирования процесса изготовления микросхем, который разрабатывается обычно совместными усилиями завода полупроводников и поставщика средств автоматизации проектирования. Поэтому заводы полупроводников обычно выпускают PDK, которые совместимы только с одним конкретным пакетом САПР. Информация, содержащаяся внутри PDK, обычно считается конфиденциальной.

Одной из проблем, с которой сталкивается отечественная индустрия проектирования микросхем, является отсутствие своих инструментов автоматизации проектирования микросхем. Используемые технологии производства интегральных схем настолько сложны, что только многолетний опыт работы с существующими поставщиками средств автоматизации проектирования позволит разработать аналогичные продукты.

Бесплатные и с открытым исходным кодом программные пакеты САПР микроэлектроники FOSS (Free and Open-Source Software) в настоящее время находятся в стадии быстрой разработки благодаря проекту DARPA и Google OpenROAD. Проект OpenROAD [1] предлагает полный набор инструментов от высокоуровневого синтеза до генерации лейаута. Набор инструментов включает программные средства Yosys для логического синтеза и OpenLane для физического синтеза, который ориентирован на выпуск заказных СБИС с технологией 130nm (SkyWater 130nm Open Source PDK). В последнее время пакеты FOSS для проектирования интегральных схем совершенствуются, благодаря усилиям энтузиастов из академических кругов и коммерческих организаций, которые пытаются упростить доступ и использование набора инструментов для цифрового и аналогового проектирования микросхем.

Yosys представляет собой пакет программ с открытым исходным кодом, который позволяет обрабатывать, оптимизировать и синтезировать проекты на Verilog-2005, а также преобразовывать Verilog описания в форматы BLIF (Berkeley Logic Interchange Format), EDIF (Electronic Design Interchange Format), RTL Verilog, BTOR, SMT-LIB и др., доступные для использования в других САПР.



В настоящей работе рассматривается задача из области перепроектирования КМОП СБИС. Основным этапом обратного проектирования служит декомпиляция плоского нетлиста транзисторной схемы, заданной в формате SPICE (Simulation Program with Integrated Circuit Emphasis), которая состоит в извлечении описания на уровне логических элементов [2]. Полученная логическая сеть, представленная в виде иерархического SPICE описания, может служить исходной спецификацией для выполнения оптимизации и синтеза СБИС, если представить его на используемых в САПР языках проектирования, таких как VHDL, Verilog. В работе предложен метод и его программная реализация для экспорта иерархического SPICE описания логической сети в среду пакета синтеза Yosys, в рамках которого возможны не только операции проектирования, но и преобразования описаний.

## II. ДЕКОМПИЛЯЦИЯ И ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ЛОГИЧЕСКОЙ СЕТИ

В статье [2] описывается программа декомпиляции КМОП схемы из транзисторов, который предназначен для замены представления схемы на низком (транзисторном) уровне более высокоуровневым ее представлением (на уровне логических элементов). Исходным объектом для программы является плоский нетлист КМОП схемы в формате SPICE, имя головной схемы и имена цепей питания. Результатом является иерархическое SPICE-описание, в которое включены модели всех идентифицированных КМОП элементов. В программе распознаются логические КМОП вентили статического стиля, как самого распространенного, а также элементы на основе проходной логики – передаточные вентили и схемы на их основе – мультиплексоры.

В процессе декомпиляции можно выделить следующие основные этапы: 1) выделение подсхем, представляющих передаточные вентили и схем на их основе; 2) распознавание подсхем, представляющих КМОП вентили, установление реализуемых ими функций; 3) формирование библиотеки элементов, функционально и топологически идентичных; 4) построение логической сети; 5) выделение подсхем с обратными связями, представляющих элементы памяти; 6) трансляция иерархического описания логической сети в формате SPICE в описания на языках SF, VHDL и Verilog. Последнее описание получается средствами после преобразования SPICE описания логической сети во внутреннее представление Yosys.

Программа [2] строит логическую сеть в формате SPICE, имени сети предшествует символ «С» (например, С0). Так как формат SPICE не содержит средств указания типа выводов сети, то для отображения этой информации, в декомпилированном описании на SPICE логическая сеть выделена как отдельная модель, в которой параметры, имена которых начинаются с “P”, задают входы схемы, а параметры с именами, начинающимися с “O”, – выходы схемы.

Сеть логических элементов как вычислительная структура представляет собой помеченный ориентированный граф  $G(V, E)$ , позволяющий логически представлять двухуровневые структурные описания схем. Каждая вершина из множества  $V$  помечена входной или выходной переменной или типом соответствующего элемента (его модель приводится в иерархическом SPICE описании). В этом описании для логических элементов указаны также и реализуемые ими функции. Внутреннее представление графа  $G$  задается массивом списков смежности его вершин.

## III. СТРУКТУРА И ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ДАННЫХ В YOSYS

С функциональной точки зрения программа Yosys состоит из ядра и обрабатывающих модулей преобразования (passes в Yosys). Модули преобразования запускаются командами встроенного интерпретатора командной строки. Ядро Yosys представляет собой совокупность структур данных и методов, которые используются для представления сети логических вентилях и манипуляций с ней. Модули преобразования взаимодействуют через интерфейс, представляющий собой промежуточный объект RTLIL (Register-Transfer-Level-Intermediate-Language). Представление в формате RTLIL по сути является представлением списка соединений схемы со следующей особенностью: используется внутренняя для Yosys библиотека вентилях, которые имеют фиксированные функции. Номенклатура вентилях библиотеки соответствует логическим операторам языков Verilog или VHDL. Однако имеется также и вентиль LUT (Lookup Table), который позволяет задать булеву функцию произвольной сложности. В зависимости от своей настройки вентиль LUT может реализовать любую необходимую функцию от входных сигналов. Кроме логических вентилях библиотека содержит также мультиплексор.

Структура данных RTLIL представляет собой класс языка C++. Корневым объектом структуры данных RTLIL является класс RTLIL::Design, который представляет обрабатываемую логическую сеть. В памяти Yosys всегда есть один задаваемый классом RTLIL::Design «текущий проект», который трансформируется обрабатываемыми модулями, запускаемыми командами языка интерпретатора командной строки. Целью последовательности трансформаций (passes) является преобразование вводимой логической сети в состояние, в котором ее функциональность реализуется вентилями из

заданной библиотеки и проводами для связей вентилях друг с другом. Класс RTLIL::Design является верхним слоем иерархии объектов, представляющих ядро. Модуль содержит объекты разных категорий, таких как RTLIL::Cell, RTLIL::Wire, RTLIL::Process и RTLIL::Memory. Объекты первых двух категорий представляют данные списка соединений, задающего структуру схемы.

#### IV. ИМПОРТ В YOSYS ЛОГИЧЕСКОЙ СЕТИ В ФОРМАТЕ SPICE

Для импорта в ядро Yosys логической сети в формате SPICE был разработан специальный обрабатывающий модуль RTLIL::Module на языке C++ с именем `my_cmd`. Этот модуль принимает SPICE описание логической схемы и переводит его во внутреннее представление формата RTLIL в среде Yosys. Для этого сначала проводится анализ текстового описания SPICE и построение представления задаваемой им логической сети в виде помеченного ориентированного графа  $G(V, E)$ .

Затем граф представляется модулем  $\$G(V, E)$ , который содержит объекты двух категорий: RTLIL::Cell ячеек и RTLIL::Wire связей. При генерации объектов первой категории для каждой ячейки схемы указывается идентификатор, реализуемая функция и идентификаторы входных и выходных портов. Сложная функция от  $n$  аргументов задается в векторном виде:  $2^n$ -разрядным вектором ее значений. Простые функции типа AND, NAND выбираются из внутренней библиотеки Yosys. Объекты категории RTLIL::Wire строятся с использованием методов Yosys типа Connect, которые позволяют указать связи портов ячеек.

Разработанный модуль `my_cmd` был интегрирован в среду Yosys в качестве одного из преобразований (*passes*). При обращении к нему при работе программного интерпретатора Yosys в командной строке указываются два параметра: `my_cmd <Par1> <Par2>`, где Par1 задает путь доступа к файлу со SPICE описанием, а Par2 – имя модели логической сети в этом описании.

#### IV. ПРИМЕР ВЫПОЛНЕНИЯ РАЗРАБОТАННОГО ОБРАБАТЫВАЮЩЕГО МОДУЛЯ В СРЕДЕ YOSYS

Работа обрабатывающего модуля `my_cmd` в среде Yosys демонстрируется на примере ввода и преобразования иерархического SPICE описания логической сети (листинг 1), которое было получено в результате декомпиляции плоского SPICE описания транзисторной схемы одноразрядного сумматора [3].

Листинг 1. Иерархическое SPICE описание одноразрядного сумматора

```
* SPICE deck for cell adder_gen
.GLOBAL vdd gnd
.SUBCKT G0 A B C D E F G Y
* ((A AND B AND C) OR (G AND (D OR E OR F)))
M1 Y A 2 gnd n
M2 2 B 3 gnd n
M3 3 C gnd gnd n
M4 5 D gnd gnd n
M5 5 E gnd gnd n
M6 5 F gnd gnd n
M7 Y G 5 gnd n
M8 vdd A 7 vdd p
M9 vdd B 7 vdd p
M10 vdd C 7 vdd p
M11 7 A 8 vdd p
M12 8 E 9 vdd p
M13 9 F Y vdd p
M14 7 G Y vdd p
.ENDS
.SUBCKT G1 A B C D E Y
* ((A AND B) OR (C AND (D OR E)))
M1 Y A 2 gnd n
M2 2 B gnd gnd n
M3 Y C 4 gnd n
M4 4 D gnd gnd n
M5 4 E gnd gnd n
M6 vdd A 6 vdd p
M7 vdd B 6 vdd p
M8 6 E 7 vdd p
M9 7 A Y vdd p
M10 6 C Y vdd p
.ENDS
.SUBCKT G2 A Y
* A
M1 Y A gnd gnd n
M2 vdd A Y vdd p
.ENDS
.SUBCKT C0 P0 P1 P2 O3 O4
XG0M0I1 P0 P1 P2 P0 P1 P2 1 2 G0
XG1M1I1 P0 P1 P2 P0 P1 1 G1
XG2M2I1 1 O3 G2
XG2M2I2 2 O4 G2
.ENDS
.SUBCKT adder_gen a b cin cout sum
XC0 a b cin cout sum C0
.ENDS
```

В Yosys это описание преобразуется с помощью переходов (*passes*) типа Write в описания на языках Verilog, BLIF и EDIF. На листинге 2 приведено состояние консольного окна программного интерпретатора Yosys при выполнении соответствующих переходов, а на листинге 3 – полученное описание сумматора на языке Verilog.

Листинг 2. Консольное окно интерпретатора Yosys

```
yosys> my_cmd d:\abdata23\adder_gen_ier.sp C0
Arguments to my_cmd:
my_cmd
d:\abdata23\adder_gen_ier.sp
C0
Read input file d:\abdata23\adder_gen_ier.sp
Reading is OK
Modules in current design:
C0 (7 wires, 4 cells)

yosys> write_verilog d:\abdata23\adder.v
1. Executing Verilog backend.
Dumping module `C0'.

yosys> write_blif d:\abdata23\adder.blif
2. Executing BLIF backend.

yosys> write_edif d:\abdata23\adder.edif
3. Executing EDIF backend.
```

Листинг 3. Описание логической сети сумматора на Verilog

```
/* Generated by Yosys 0.9 (git sha1 1979e0b1, Visual Studio) */
module C0(Ca, Cb, Ccin, Ccout, Csum);
wire \1 ;
wire \2 ;
input Ca;
input Cb;
input Ccin;
output Ccout;
output Csum;
assign \2 = 128'h00005557555755575557555755575557 >> (* src = "Y=((A * B * C) + (G * (D + E + F)))" *) { \1 ,
Ccin, Cb, Ca, Ccin, Cb, Ca };
assign \1 = 32'd2039583 >> (* src = "Y=((A * B) + (C * (D + E)))" *) { Cb, Ca, Ccin, Cb, Ca };
assign Ccout = ~\1 ;
assign Csum = ~\2 ;
endmodule.
```

## V. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предлагается вариант программного инструмента Yosys, расширенного модулем импорта логической сети в формате SPICE. Расширенный пакет Yosys позволяет выполнять моделирование и перепроектирование импортированной схемы до уровня лейаута. Предлагаемый инструмент пригоден не только для исследовательского и академического использования, где требуются модификации инструментов и описаний, но и при проектировании промышленными САПР.

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] Ajayi, Tutu. Toward an Open-Source Digital Flow: First Learnings from the OpenROAD Project / Tutu Ajayi, at all // Proc. of the 56th Annual Design Automation Conf. 2019 (DAC '19). Association for Computing Machinery, USA. Article 76. P. 1–4.
- [2] Черемисинов, Д. И. Извлечение сети логических элементов из КМОП схемы транзисторного уровня / Д. И. Черемисинов, Л. Д. Черемисинова // Микроэлектроника. 2019. Vol. 48. № 3. С. 224–234.
- [3] Черемисинов, Д.И. Обратное проектирование СБИС для обеспечения безопасности аппаратуры / Д. И. Черемисинов, Л. Д. Черемисинова // Проблемы разработки перспективных микро- и наноэлектронных систем. Сб. трудов. М.: ИППМ РАН, 2022. Вып. III. С. 10–17.

## REDESIGNING CMOS VLSI USING Yosys SYNTHESIS TOOL

D. Cheremisinov, L. Cheremisinova

United Institute of Informatics Problems of NAS of Belarus,  
Minsk, Republic of Belarus, [cld@newman.bas-net.by](mailto:cld@newman.bas-net.by)

Abstract: The problem of redesigning a transistor-level circuit specified in the SPICE format in a different technological basis is considered. An approach is proposed based on the extraction of the structure at the level of logical elements and export of the obtained hierarchical SPICE description to the software environment of the Yosys synthesis tool (Yosys Open SYnthesis Suite) to perform optimization and synthesis in a given basis. A method and software tool for representing a logical network in the SPICE format and converting it into an internal representation of the Yosys package are developed.

Keywords: transistor subcircuit extraction, CMOS circuits, SPICE format, Verilog, VHDL.

УДК 621.71

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ ТЕХНОЛОГИЙ СМЕШАННОЙ РЕАЛЬНОСТИ  
В СБОРОЧНЫХ ПРОЦЕССАХ НА ПРИМЕРЕ ОЧКОВ HoloLens 2

Лим А.А., Кутин А.А.

МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Российская Федерация, [lim@mirea.ru](mailto:lim@mirea.ru)

**Аннотация:** В данной работе рассматриваются перспективы применения технологий смешанной реальности в сборочных процессах на примере очков HoloLens 2. Исследуется использование смешанной реальности для повышения эффективности и точности сборки экструдера FDM 3D-принтера. Основное внимание уделено разработке программы смешанной реальности, которая предоставляет интерактивные инструкции и визуализации, помогающие операторам в процессе сборки. Также анализируются технические и организационные аспекты внедрения технологий смешанной реальности в производственные процессы. Результаты работы показывают значительный потенциал для улучшения качества и скорости сборки с помощью этих технологий.

**Ключевые слова:** Смешанная реальность, сборочные процессы, HoloLens 2, экструдер FDM, визуализация, эффективность.

#### ВВЕДЕНИЕ

Сборка машиностроительных изделий является критически важным процессом, от которого зависит функциональность и надежность конечных продуктов. Современные технологии смешанной реальности (MR) предлагают уникальные возможности для улучшения этих процессов. В данной работе исследуется применение технологий MR для повышения эффективности и точности сборки экструдера FDM 3D-принтера. Сборка сложных изделий, таких как экструдер FDM 3D-принтера, требует высокой точности и внимательности от оператора. Традиционные методы обучения, такие как бумажные инструкции и видеоматериалы, могут быть недостаточными для обеспечения точного выполнения всех шагов сборки. MR предоставляет интерактивные и наглядные методы обучения, которые помогают операторам лучше понять процесс сборки и снизить вероятность ошибок [1].

Очки HoloLens 2 представляют собой одно из самых передовых устройств для смешанной реальности на сегодняшний день. Они позволяют операторам видеть виртуальные инструкции и компоненты прямо на реальном оборудовании, что значительно улучшает восприятие и понимание процесса сборки. Возможность взаимодействия с виртуальными объектами через жесты и голосовые команды делает процесс более интуитивным и удобным для оператора.

В данной работе мы исследуем потенциал использования технологий MR для улучшения сборочных процессов в машиностроении на примере сборки экструдера FDM 3D-принтера. Мы разработали программу смешанной реальности, которая предоставляет интерактивные инструкции и визуализации, помогающие операторам в процессе сборки. Результаты нашего исследования показывают значительный потенциал для улучшения качества и скорости сборки с помощью этих технологий.

#### РЕЗУЛЬТАТЫ

Для повышения эффективности и точности сборки машиностроительных изделий был разработан инструмент смешанной реальности (MR). Этот инструмент предоставляет уникальную возможность для сборщиков работать в виртуальной среде, где они могут взаимодействовать с различными деталями и комбинировать их в реальном времени. Это существенно улучшает процесс обучения и подготовку сборщиков к реальной сборке. Проведенные эксперименты показали значительное улучшение эффективности сборки на начальных этапах. Анализ данных показал, что использование инструмента MR привело к увеличению эффективности сборки в 1,6 раза по сравнению с традиционными методами (рис. 1). Это достигается за счет более эффективного взаимодействия с деталями и возможности получения наглядной обратной связи о правильности сборки [2, 3].

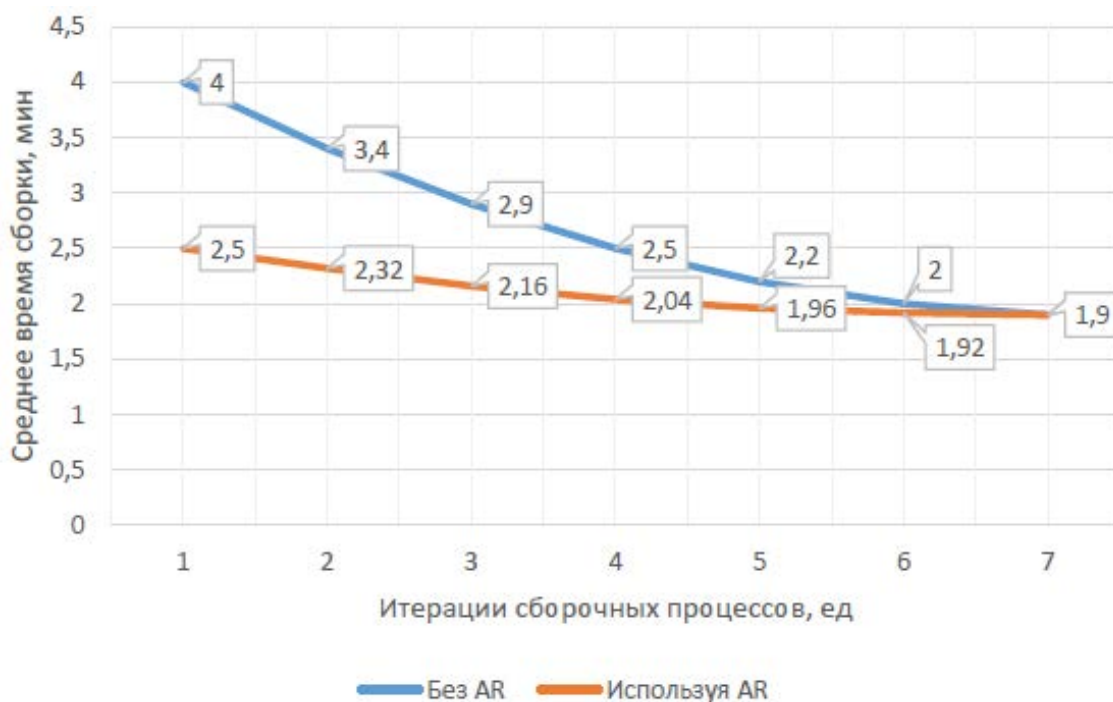


Рисунок 1. График времени сборки при различных подходах

Кроме того, проведенный опрос показал положительные отзывы от сборщиков о применении инструмента MR. Из 22 опрошенных сборщиков 18 человек отметили удобство использования инструмента (рис. 2). Это подтверждает эффективность инструмента и его применимость в реальных производственных условиях [4].

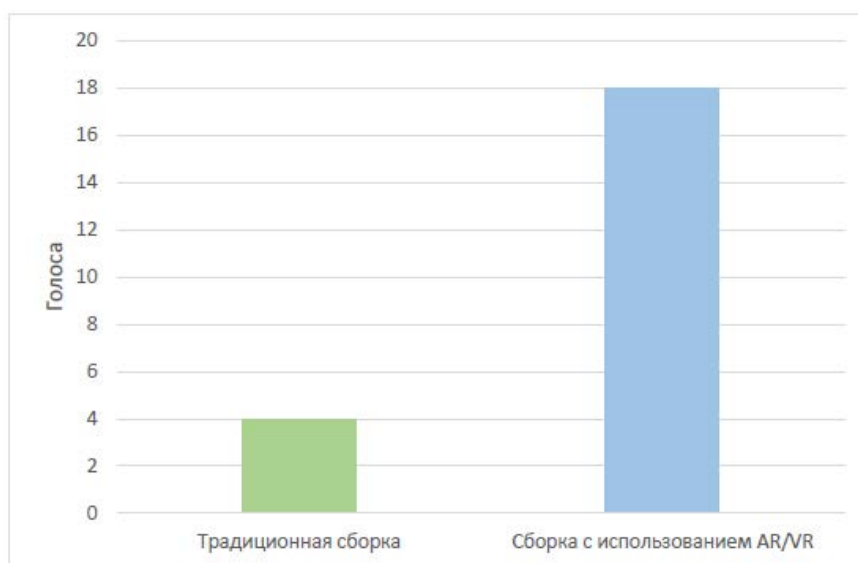


Рисунок 2. Гистограмма опроса участников эксперимента

Результаты исследований и экспериментов показывают значительный потенциал применения инструментов смешанной реальности (MR) в сборке машиностроительных изделий. Они позволяют сократить время и усилия, необходимые для обучения сборщиков и подготовки к сборке, а также повысить эффективность сборки на начальных этапах. Отзывы сборщиков подтверждают удобство использования инструмента и его положительное влияние на их работу.

Таким образом, инструменты MR представляют собой перспективное решение для повышения эффективности сборки машиностроительных изделий. Разработка демонстрирует значительные улучшения в сборке на начальных этапах и получила положительные отзывы от сборщиков. Дальнейшее развитие и применение инструментов MR в машиностроительном производстве обещает дополнительные преимущества и улучшение процесса сборки в целом.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Лим, А. А. Инновационные подходы в технологии сборки / А. А. Лим, И. В. Кудрявцев, А. А. Кутин // Оптические технологии, материалы и системы (Оптотех - 2023) : Сборник докладов Международной научно-технической конференции, Москва, 11–15 декабря 2023 года. – Москва: МИРЭА - Российский технологический университет, 2023. – С. 330-334.
- [2] Лим, А. А. Повышение эффективности сборки машиностроительных изделий с применением инструментов MR / А. А. Лим, А. А. Кутин // Перспективные материалы и технологии (ПМТ-2024) : Сборник докладов Международной научно-технической конференции ИПТИП РТУ МИРЭА, Москва, 12–16 апреля 2024 года. – Москва: МИРЭА - Российский технологический университет, 2024. – С. 216-219.
- [3] Лим, А. А. Разработка инструмента смешанной реальности для реализации процесса сопряжения поверхностей деталей при сборке / А. А. Лим, И. В. Кудрявцев, А. А. Кутин // Сборка в машиностроении, приборостроении. – 2024. – № 7. – С. 294-298.
- [4] Лим, А. А. Разработка инструмента дополненной реальности для визуальной поддержки сборочных процессов в машиностроении / А. А. Лим, А. А. Кутин, В. В. Пирогов // Сборка в машиностроении, приборостроении. – 2023. – № 10. – С. 435-440.

PERSPECTIVES OF MIXED REALITY TECHNOLOGIES IN ASSEMBLY PROCESSES: A CASE STUDY  
USING HoloLens 2

A.A. Lim, A.A. Kutin

MIREA – Russian Technological University, Moscow, Russian Federation, [lim@mirea.ru](mailto:lim@mirea.ru)

Abstract: This work explores the potential of mixed reality technologies in assembly processes, using HoloLens 2 as an example. The focus is on the development of a mixed reality program that provides interactive instructions and visualizations to help operators assemble an FDM 3D printer extruder. The technical and organizational aspects of implementing mixed reality technologies in production processes are analyzed. The results show significant potential for improving the quality and speed of assembly using these technologies.

Keywords: Mixed reality, assembly processes, HoloLens 2, FDM extruder, visualization, efficiency.

УДК 621.3.049.78

## РАЗРАБОТКА БИБЛИОТЕКИ СИСТЕМНЫХ МОДЕЛЕЙ МЭМС РЕЗОНАТОРОВ

Соловьев А.А.<sup>1</sup>, Певцов Е.Ф.<sup>1</sup>, Колчужин В.А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Российская Федерация,  
[solovev\\_aa@mirea.ru](mailto:solovev_aa@mirea.ru)

<sup>2</sup>QORVO Munich GmbH, Мюнхен, Федеративная Республика Германия

Аннотация: представлена библиотека системных моделей логических МЭМС вентилях, включающая трех-, пяти- и девятиконтактные микрорезонаторы с электростатическим возбуждением. Проанализированы динамические характеристики и логические операции на разработанных моделях.

Ключевые слова: МЭМС, резонаторы, логические элементы, вентили, системное моделирование.

### I. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время МЭМС резонаторы находят применение в качестве логических элементов, обеспечивая низкое энергопотребление, сокращая количество функциональных компонентов по сравнению с КМОП-технологиями, а также позволяя перепрограммирование в процессе работы и повышая надежность благодаря бесконтактному режиму функционирования [1].

В работе представлена библиотека системных моделей, состоящая из трех-, пяти- и девятиконтактных МЭМС резонаторов с электростатическим возбуждением для выполнения на их основе логических операций. Созданное тестовое окружение позволяет проверить функционирование модели и провести симуляции статического, частотного и динамического (во временной области) откликов структуры.

### II. ТРЕХКОНТАКТНЫЙ МЭМС РЕЗОНАТОР

Трехконтактный резонатор представляет собой систему "пружина-масса-демпфер", состоящую из недеформируемой сейсмической массы, подвешенной на четырех подвесах (см. рис. 1). Собственная частота выбрана 439,49 кГц, масса равна 0,019 мкг, зазор между сейсмической массой и боковыми электродами равен 4 мкм. Коэффициент демпфирования равный  $2,57 \cdot 10^{-6}$  мкН·с/мкм для  $Q=20$

Для создания системных моделей был выбран язык описания аппаратных средств VHDL-AMS. Аналоговое поведение компонентов реализовано через величины, терминалы и уравнения.

Работа логического элемента основана на изменении резонансной частоты подвижного электрода с использованием эффекта электростатического смягчения жесткости резонатора. Для определения оптимальных величин напряжения смещения, подаваемого на подвижный электрод, определено напряжение схлопывания, которое составляет 276,1 В. Зависимости тока на чувствительном электроде от частоты напряжения смещения на подвижном электроде приведены на рис. 1. При увеличении напряжения на подвижном электроде электростатическая сила возрастает, что вызывает смещение резонансного пика влево и увеличение амплитуды осцилляций.

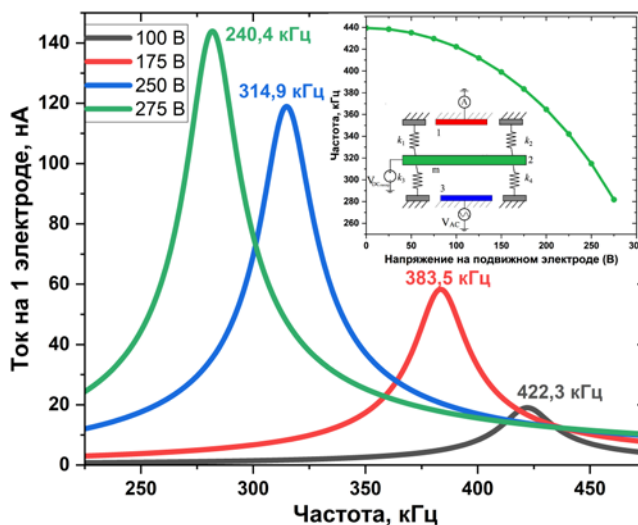


Рисунок 1. Зависимость АЧХ от напряжения на подвижном электроде,  $V_1 = 1$  В (АС)

Реализация логических операций построена на принципе резонанса [2], когда резонансная частота подвижного электрода и частота подаваемого синусоидального сигнала совпадают, высокий выходной ток емкостным способом детектируется на чувствительном электроде. Для реализации логической операции «НЕ» на входной электрод, подается импульсный сигнал (рис. 2).

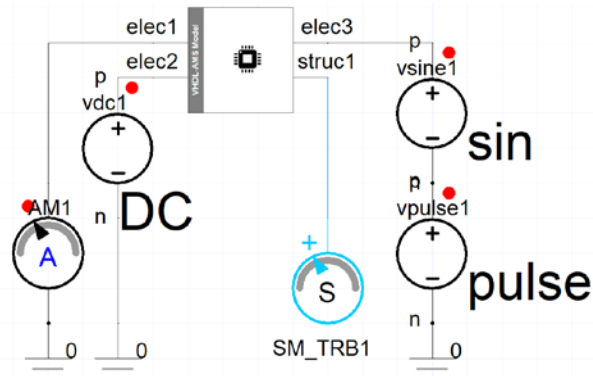


Рисунок 2. Подключение резонатора и источников для выполнения логической операции «НЕ»

Для реализации логических операций на подвижный электрод 2 подано смещение 250 В, на управляющий электрод 3, подается импульсный сигнал, где напряжение цифровой «1» принято 225 В, а напряжение цифровой «0» равно 0 В. Напряжение цифровой «1» выбрано меньше напряжения смещения подвижного электрода, так как для снятия на чувствительном электроде 1 сигнала по току, необходима разность потенциалов между 1-2 и 2-3 электродами. Частота синусоидального сигнала на электроде 3 равна 314,89 кГц, при которой резонатор работает как логический вентиль «НЕ» (рис. 3).

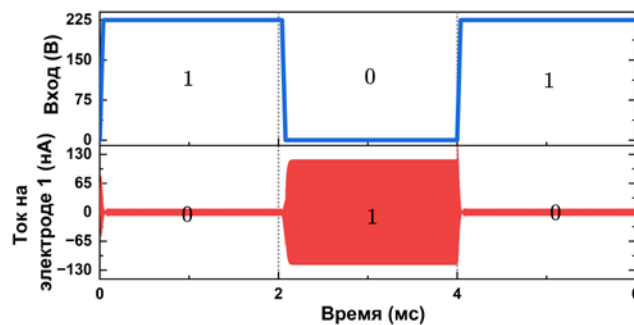


Рисунок 3. Осциллограмма, демонстрирующая реализацию логической операции «НЕ»

### III. ПЯТИКОНТАКТНЫЙ МЭМС РЕЗОНАТОР

Для реализации полного функционального набора логических вентилях на основе одного резонатора, была использована конструкция с 4 боковыми электродами по два с каждой стороны подвижного элемента резонатора (рис. 4) [3]. Собственная частота выбрана 195 кГц, а сейсмическая масса равна 0,042 мкг, коэффициент демпфирования  $d$  равен  $0,34 \cdot 10^{-6}$  мкН·с/мкм для  $Q=150$ .

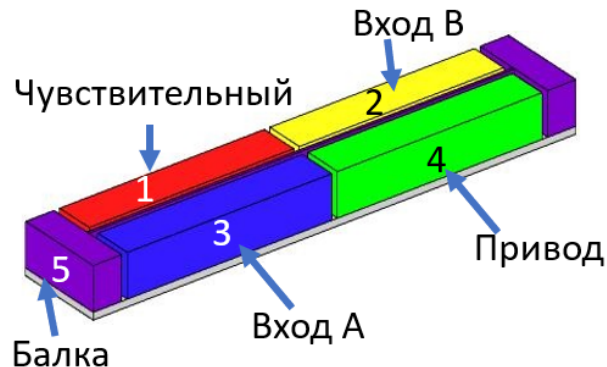


Рисунок 4. Пятиконтактный МЭМС резонатор для выполнения логических операций

Для пятиконтактного резонатора три различные частоты можно получить, подавая на цифровые входы 2 и 3 комбинации «0-0», «0-1/1-0» и «1-1» соответственно (рис. 5), где напряжение цифровой «1» равно 30 В, а напряжение цифрового «0» равно 0 В, на подвижный электрод 5 подано смещение 30 В.



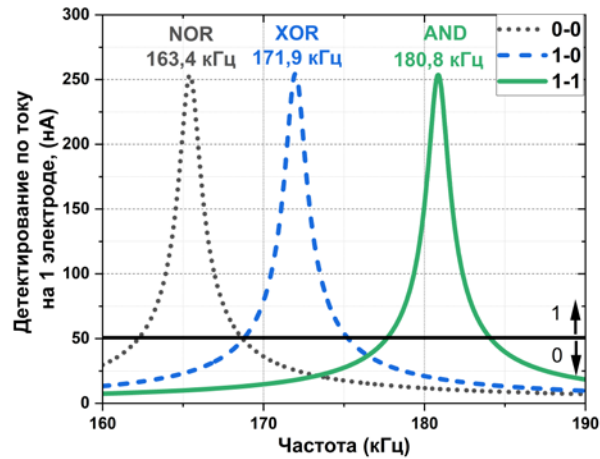


Рисунок 5. АЧХ резонатора при различных входных комбинациях цифровых входах 2 и 3,  $V_4=1$  В (АС)

Если частота синусоидального сигнала на приводном электроде 4 равна 163,4 кГц, только входная комбинация «0-0» приводит к совпадению между вынужденной резонансной частотой подвижного электрода и частотой сигнала возбуждения. В остальных случаях выходной сигнал будет слабым. Следовательно, резонатор в данном случае работает как логический вентиль «ИЛИ-НЕ» (рис. 6).

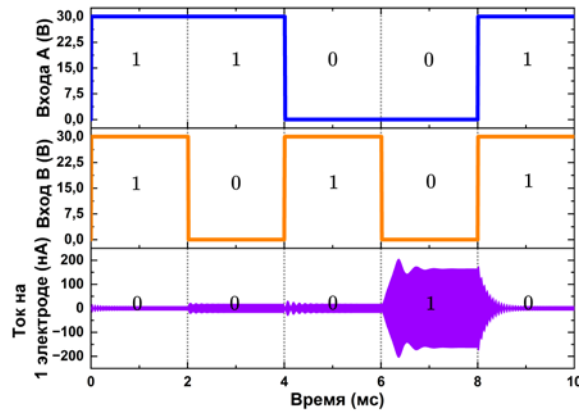


Рисунок 6. Осциллограмма, демонстрирующая реализацию логической операции ИЛИ-НЕ

#### IV. ДЕВЯТИКОНТАКТНЫЙ МЭМС РЕЗОНАТОР

Для реализации мультывходового логического вентиля, необходимо большее количество боковых электродов. На рис. 7 представлена АЧХ при различных комбинациях на цифровых входах 9-контактного МЭМС резонатора с собственной частотой 110 кГц, массой 22 мкг. Напряжение смещения на подвижном электроде и напряжение цифровой единицы «1», подаваемое на входы вентиля, выбраны близкими к напряжению схлопывания для большего разделения резонансных пиков и равняются 95 В, амплитуда синусоидального сигнала 1 В (АС), коэффициент демпфирования  $d$  равен  $3,80 \cdot 10^{-4}$  мкН·с/мкм для  $Q=40$ .

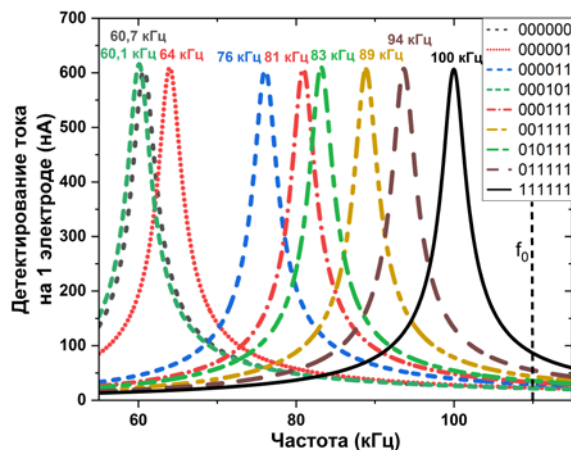


Рисунок 7. АЧХ 9-контактного резонатора при различных входных комбинациях цифровых входах

Данный резонатор позволяет реализовать, например, 6-входовый логический вентиль «И», осциллограмма которого представлена на рис. 8.

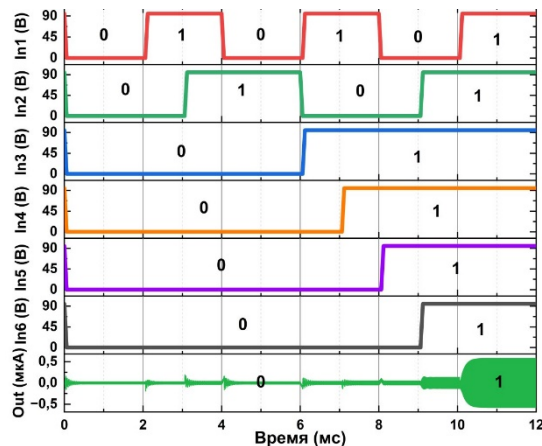


Рисунок 8. Осциллограмма, демонстрирующая работу логического вентиля 6И

## V. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлена библиотека системных моделей трех-, пяти- и девятиконтактных микрорезонаторов с электростатическим возбуждением и варианты логических элементов на их основе. Полученная библиотека элементов и тесты могут применяться для сквозного автоматизированного проектирования цифровых схем на МЭМС-элементах, например, аналого-цифровых и цифро-аналоговых преобразователей, триггеров и арифметико-логических устройств.

## БЛАГОДАРНОСТЬ

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание для университетов № ФГФЗ-2023-0005.) и с применением оборудования Центра коллективного пользования РТУ МИРЭА (соглашение от 01.09.2021 № 075–15-2021-689).

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] Li R., Fariborzi H. Ultra-Low Power Data Converters with BEOL NEM Relays, in 2018 IEEE 61st International Midwest Symposium on Circuits and Systems (WSCAS), 2018, pp. 627-630.
- [2] Hafiz M. et al. Microelectromechanical reprogrammable logic device, Nat. Commun. 7, 2016, pp. 1–9.
- [3] Kolchuzhin V. LMGT\_MEMS\_component\_library, URL: [https://github.com/Kolchuzhin/LMGT\\_MEMS\\_component\\_library/tree/master/resonator/transducer\\_e5](https://github.com/Kolchuzhin/LMGT_MEMS_component_library/tree/master/resonator/transducer_e5) (дата обращения: 10.11.2024).

## DEVELOPMENT OF THE LIBRARY OF SYSTEM MODELS FOR MEMS RESONATORS

A. Solovev<sup>1</sup>, E. Pevtsov<sup>1</sup>, V. Kolchuzhin<sup>2</sup>

<sup>1</sup>MIREA – Russian Technological University, Moscow, Russian Federation, [solovev\\_aa@mirea.ru](mailto:solovev_aa@mirea.ru)

<sup>2</sup>Qorvo Munich GmbH, Munich, Federal Republic of Germany

Abstract: The library of system models of logic MEMS gates including three-, five-, and nine-terminal electrostatically excited microresonators is presented. The dynamic characteristics and logic operations on the developed models are analyzed.

Keywords: MEMS, microelectromechanical resonators, logic elements, gates, system modeling.

УДК 538.9

МОДЕЛИРОВАНИЕ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ФУНКЦИЙ ОСЕЙ СЛУЧАЙНОЙ АНИЗОТРОПИИ  
ДВУМЕРНОЙ СИСТЕМЫ ФЕРРОМАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ

Назаренко Е.С., Данилюк А.Л.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
Минск, Республика Беларусь, [katyanaz2001@gmail.com](mailto:katyanaz2001@gmail.com)

Аннотация: В данной работе представлены результаты моделирования корреляционных функций осей случайной анизотропии для двумерной системы ферромагнитных наночастиц. Расчеты проведены с помощью интегрального преобразования Мейера, описывающего закон приближения к намагниченности насыщения ансамбля ферромагнитных наночастиц. Рассмотрен пример в виде аналитической функции-образа, на основании которой получены корреляционные функции различных типов, как монотонные и немонотонные, так и характеризующиеся наличием скачков.

Ключевые слова: случайная анизотропия, массив наночастиц, корреляционная функция, преобразование Мейера.

Массивы ферромагнитных наночастиц на поверхности твердых тел (металлов, диэлектриков), а также двумерных кристаллов, в частности, графена, вызывают большой интерес у исследователей. Синтез и исследование таких магнитных композитов является весьма актуальной задачей для разработки приборов спинтроники. Такие композиты могут успешно синтезироваться посредством осаждения на поверхность твердого тела наночастиц различных ферромагнитных металлов (Co, Ni и др.) [1]. Из экспериментальных данных по измерению намагниченности  $M(H)$  двумерных массивов ферромагнитных наночастиц определяется функция-образ  $F(p) = kp^{3/2}\delta M(p)/M_S$ . Здесь  $k$  – нормировочный коэффициент, параметр  $p = (H/H_{ex})^{1/2}$ ,  $M_S$  – намагниченность насыщения,  $H_{ex}$  – поле обменной энергии. Фитирование показало, что экспериментальные данные укладываются на аналитические зависимости, описываемые спадающими монотонными функциями [2].

Для анализа результатов магнитных измерений таких магнитных композитов и их интерпретации обычно используется модель случайной анизотропии (RAM). Однако она ограничена из-за лежащими в ее основе приближениями, такими как выбор корреляционной функции. В модели RAM корреляции осей случайной анизотропии описываются только экспоненциальной функцией, к тому же устанавливаются жесткие соотношения между внешним магнитным полем и полем обмена. Указанных недостатков лишен подход, развитый в работе [3]. Он описывает закон приближения к намагниченности насыщения (LAS) в интегральной форме и позволяет находить корреляционные функции для осей случайной анизотропии непосредственно из функций-образов, определяющих этот закон. Также данный подход свободен от ограничений модели RAM. LAS для двумерных магнитных систем соответствует интегральному преобразованию Мейера (K-transform). С его помощью возможно определить корреляционные функции осей случайной магнитной анизотропии  $C(z)$ , а также поля обмена  $H_{ex}$  и случайной анизотропии  $H_a$ . LAS для двумерной магнитной системы, полученный в [4], может быть записан в виде преобразования Мейера [5]

$$F(p) = \frac{32p^{3/2}}{4\pi} \left(\frac{H_{ex}}{H_a}\right)^2 \frac{\delta M(p)}{M_S} = \int_0^\infty \frac{z^3}{z^2} C(z) \sqrt{pz} K_1(pz) dz, \quad (1)$$

где  $\delta M(p) = M_S - M(H)$ ,  $K_1$  – модифицированная функция Бесселя второго рода первого порядка,  $M(H)$ ,  $M$  – намагниченность в области LAS,  $H$  – напряженность внешнего магнитного поля.

Из интегрального уравнения (1) следует, что корреляционная функция однозначно определяется функцией образом  $F(p)$  и должна меняться при ее изменении. Как показали предварительные исследования, получаемые из экспериментальных данных функции-образы характеризуются немонотонными зависимостями от параметра  $p$  с наличием максимума. Область LAS обычно лежит на падающей части кривой  $F(p)$  с ростом параметра  $p$ . Рассмотрим корреляционные функции для функции-образа  $F(p)$ , которые могут характеризовать LAS. Проведенные предварительные оценки показали, что экспериментальные данные хорошо укладываются на аналитические зависимости, описываемые функцией [5]

$$F(p) = k(2\pi)^{-1/2} a^{1-\mu} p^\mu K_1(ap/2) K_{\mu-1/2}(ap/2) \quad (2)$$

где  $a, \mu$  – параметры, зависящие от величины поля обмена  $H_{ex}$ .  $K_{\mu-1}$  – модифицированная функция Бесселя второго рода  $\mu-1$  порядка. В этом случае, согласно интегральному преобразованию Мейера для (2), корреляционная функция  $C(z) = 0$  при  $0 < z < a$ , и

$$C(z) = z^{-\mu-\frac{3}{2}}(z^2 - a^2)^{-\frac{\mu}{2}} P_{\frac{1}{2}}^{\mu}(z/a), \quad (3)$$

при  $z > a$ , где  $P_{\frac{1}{2}}^{\mu}(z/a)$  – шаровая функция (присоединенная функция Лежандра),  $z$  – координата, нормированная на радиус наночастицы. Шаровая функция при условии [6]

$$\left| \frac{z/a - 1}{z/a + 1} \right| < 1,$$

определяется как

$$P_{\nu-\frac{1}{2}}^{\mu}\left(\frac{z}{a}\right) = \frac{1}{\Gamma(1-\mu)} \left(\frac{z-1}{z+1}\right)^{-\mu/2} \left(\frac{z+1}{2}\right)^{-1} {}_2F_1\left(-1; -1-\mu; 1-\mu; \frac{z/a-1}{z/a+1}\right), \quad (4)$$

где  $\Gamma(1-\mu)$  – гамма-функция,  ${}_2F_1(z/a, \mu)$  – гипергеометрическая функция.

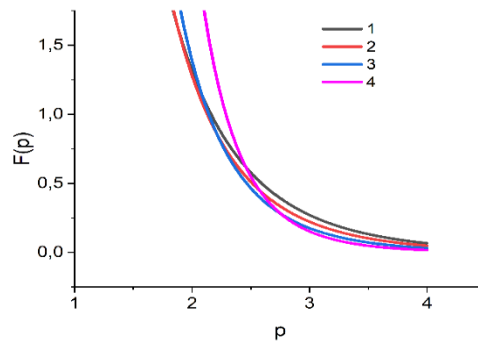


Рисунок 1. Функции  $F(p)$  (а) при  $a=1,0$ ,  $\mu=-0,2$  (1),  $\mu=-0,5$  (2),  $\mu=-1,0$  (3),  $\mu=-2,0$  (4)

На рисунке 1 приведены результаты расчетов функции-образа  $F(p)$  при  $a=1$  и различных величинах  $\mu$ , которая слабо чувствительна к параметру  $\mu$ , изменяемому в широких пределах. Соответствующие ей корреляционные функции, определенные из обратного преобразования Мейера приведены на рис. 2. Для данной функции-образа корреляционные функции различаются в зависимости от параметра  $\mu$ . Они могут быть различных типов, как монотонные и немонотонные, так и характеризующиеся наличием скачков при незначительных изменениях параметра  $\mu$ . Так при некоторых величинах  $\mu$ , увеличивающихся от  $-0,833$  до  $-0,625$  корреляционная функция  $C(z)$  меняется с растущей монотонной (кривая 1 на рис.2) и выходящей на насыщение (кривая 2 на рис.2), до немонотонной, характеризующейся максимумом при  $z=2-3$  (кривые 3,4,5, рис.2) и далее спадающей с ростом  $z$ . При этом при некоторых критических величинах параметра  $\mu$ , входящих в диапазон значений  $\mu$ , приведенных на рис.2, возникают скачки корреляционной функции  $C(z)$ , рис. 3. Таким образом, проведенные расчеты показали, что корреляционные функции осей магнитной анизотропии двумерной систем ферромагнитных наночастиц для похожих законов приближения к намагниченности насыщения могут качественно различаться, показывая монотонный, немонотонный и скачкообразный характер.

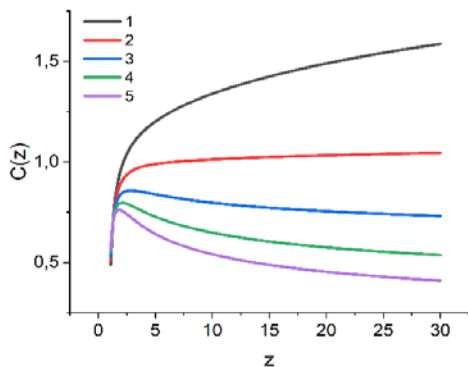


Рисунок 2. Корреляционные функции  $C(z)$  (б) при  $a=1,0$ ,  $\mu=-0,833$  (1),  $\mu=-0,77$  (2),  $\mu=-0,714$  (3),  $\mu=-0,67$  (4),  $\mu=-0,625$  (5)

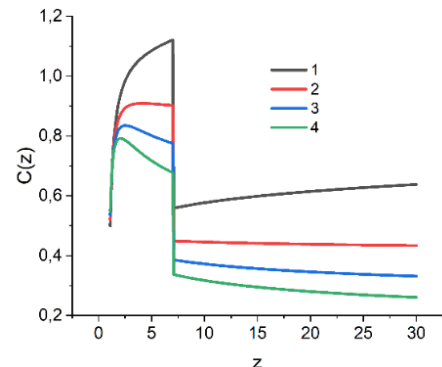


Рисунок 3. Функция  $C(z)$  при  $a=1$ ,  $\mu=-0,8$  (1),  $\mu=-0,74$  (2),  $\mu=-0,7$  (3),  $\mu=-0,662$  (4)

Для магнитной системы, характеризующейся наличием возрастающей по амплитуде с расстоянием корреляционной функции, имеет место усиление корреляций осей анизотропии под влиянием магнитодипольного взаимодействия, обменного смещения при наличии антиферромагнитной оболочки, или сильной анизотропии оболочки. Для немонотонной корреляционной функцией с одним максимумом можно предполагать существенное превышение поля случайной анизотропии над полем обмена в области, где корреляционная функция растет с расстоянием. Ее спад характеризует затухание корреляций с расстоянием для массивов ферромагнитных наночастиц со слабым дальним действием. Скачки корреляционной функции связаны с ограниченными областями сильной корреляции осей анизотропии, обусловленной самоорганизацией наночастиц в определенные кластеры, которые относительно слабо взаимодействуют друг с другом.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] С.П. Губин, Ю.А. Кокшаров, Г.Б. Хомутов, Г.Ю. Юрков. Магнитные наночастицы: методы получения, строение и свойства. Успехи химии 2005. – Том 74. – № 6. – С. 539–574.
- [2] A.L. Danilyuk, E.S. Nazarenka, S.A. Vorobyova, J.A. Fedotova and S.L. Prischepa. Low-temperature magnetic ordering in Co core/CoO shell nanoparticles on the copper surface // Current Applied Physics. – 2023. - Vol. 56. - P.79-84.
- [3] Chudnovsky, Eugene M. The magnetism of amorphous metals and alloys / Fernandez-Baca, J. A. and Ching, W.-Y. (World Scientific, Singapore). – 1995. – Ch. 3. – p.143-175.
- [4] Danilyuk, A. L., Komissarov, I. V., Kukharev, A. V., Le Normand, F., Hernandez, J. M., Tejada, J. and Prischepa, S. L. Impact of CNT medium on the interaction between ferromagnetic nanoparticles // Europhys. Lett. – 2017. – 117: 27007(1-7).
- [5] A. Erdélyi (Ed.), Tables of Integral Transforms, vol. 2, McGraw-Hill Book Co., New York, 1954. – 451 p.
- [6] И.С. Градштейн, И.М. Рыжик. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. Изд. 4-е. М. Физматгиз, 1963. – 1100 стр.

#### MODELING CORRELATION FUNCTIONS OF RANDOM ANISOTROPY AXES OF A TWO-DIMENSIONAL SYSTEM OF FERROMAGNETIC NANOPARTICLES

K.S. Nazarenka, A.L. Danilyuk

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus,  
[katyanaz2001@gmail.com](mailto:katyanaz2001@gmail.com)

Abstract: This paper presents the results of modeling the correlation functions of random anisotropy axes for a two-dimensional system of ferromagnetic nanoparticles. The calculations were performed using the Meyer integral transform, which describes the law of approaching the saturation magnetization of an ensemble of ferromagnetic nanoparticles. An example is considered in the form of an analytical image function, on the basis of which correlation functions of various types are obtained, both monotonic and non-monotonic, and characterized by the presence of jumps.

Keywords: random anisotropy, nanoparticle array, correlation function, Meyer transform.

UDC 621.37

## CONCEPTS OF MODELING, PROCESSING AND DATA WAREHOUSING

N.A. Atroshchenko

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus,  
[natasha@atroshchenko.ru](mailto:natasha@atroshchenko.ru)

**Abstract:** In the era of digitalization of various areas of society development, data has acquired the status of a vital resource. The constantly increasing volume of data in the world since 2000, both structured and unstructured, coming from different sources and having different formats, has caused the emergence of new tasks, required innovative non-standard solutions for fast processing, secure storage of data and well-organized transparent access to them. Today, various concepts exist in parallel and are successfully applied, often complement each other, and are successfully applied to solve emerging problems. A pressing issue is also the search for directions that allow satisfying the need for modeling and storing information.

**Keywords:** data structures, Big Data, data warehouses, DaaS, DWH, ORM systems.

### I. INTRODUCTION

Our time is characterized by the growth of data in geometric progression. Today, information is collected in huge volumes from various sources: the Internet, contact centers, mobile devices, web cameras, IoT sensors, social media, etc. The data format may not have a clear definition: text documents, images, video, audio, data from social networks, server logs, financial transactions.

### II. MAIN TEXT

Without a clear structure and orderliness, it is impossible to apply generally accepted concepts of automation and analysis to data.

In addition, the mere presence of data, even well-structured, will not be enough for their technological, effective maintenance. They must be transformed into an information structure ready for management, storage and modification, which is impossible without displaying them in a certain form or model. In this regard, it is important to decide on the choice of concepts for storage, modeling and processing.

A data warehouse (DWH) as an information system is nothing more than an infrastructure with the necessary tools for prompt access to them and processing. We are talking about the essence of data warehouses as structured, integrated, subject-oriented data sets with a time reference for their rapid processing and information support. The need to work with data consolidation, integration of multiple data sources from different systems (from files, external data sources, RDBMS, Data Lakes, etc.), the search for convenient, fast and secure ways to work with data is growing. This is the reason why issues related to the design of data warehouse architecture are so relevant and in demand today.

In this regard, an important aspect is the principle of organizing an object storage as a software system designed to manage large volumes of data used for forecasting, reporting, analytics, and making business decisions.

The next evolutionary stage in the development of the data storage concept can be called Enterprise Data Warehouse (EDW), or corporate data warehouse, providing a wider range for typification of values and sources of source information. Data presentation is characterized by a consistent, structured, standardized view, the absence of discrepancies for users.

Due to the explosive growth of the volumes of processed information, the terms "Big Data" and "Hadoop" appeared for areas of distributed processing of big data. With the advent of modern technologies, such as massive parallel processing (MPP) architecture for commercial DBMS and the development of cloud technologies, the concepts of Data Fabric and Data Lake have come forward. New technological directions based on process automation and the prospects of cloud storage have led to the active use of cloud services Data as a Service (DaaS) and architectural directions Data Mesh and Data Lakehouse.

The choice of the prevailing concept of the DWH management system, which includes relational, non-relational (NOSQL), object-oriented, XML-oriented, hybrid object-relational, distributed - is an important aspect of building the architectural foundations of IT projects. Of course, it is important not to make a mistake in choosing the presentation of the data structure.

Until a certain time, the relational approach to data modeling was considered more traditional; it is traditionally more often represented in the corporate world and uses the widely used standard SQL language. Relational modeling initially involves the development of ER diagrams that define the structure of entities and relationships, as well as visualization of the relationships between them [1].

The definition of relationships between tables and tabular data is carried out by setting foreign and primary keys. The presence of a primary key guarantees unique identification of table records. A foreign key is needed to establish relationships between tables and is a column of a child table that refers to the primary key of the parent table. The required form of databases is achieved through 6 forms of normalization. This way, data is structured, retains integrity, access to it is simplified, and the redundancy of stored information is reduced.

Using object-oriented concepts in building data models (encapsulation, inheritance, polymorphism) significantly simplifies development and design. Object-relational DBMS combine the capabilities of object-oriented and relational databases. This provides a number of advantages. For example, one of the options for solving the problems of structuring data coming from various sources organized using different metamodels (Metadata Impedance Mismatching, is the creation of an object-relational mapping. In practice, the possibility of including an intermediate layer in information systems that has a ready-made API with a full set of working interfaces for accessing data has proven itself to be quite good in this regard.

Of course, ORM (Object-Relational Mapping) systems, which are based on the mechanism of linking a database management system with an object-oriented programming language, have all the priorities of object-oriented access to data. Such systems have long been successfully used for efficient processing, access and storage of data. Many mechanisms have been developed that eliminate the problems of data typing and their transformation for storage in a DBMS.

In this regard, it is possible to emphasize the advantages of object-oriented DBMS, characterized by the provision of natural object-oriented interfaces for projects in high-level implementation languages.

A sufficient number of ORM systems have been developed to date, successfully performing tasks of efficient and productive work with data storage. A kind of virtual DBMS is created. In this case, the developer must provide (generate) mapping of DBMS tables to solution classes, and entities (Entity Framework) will perform the necessary transformations.

Among the indisputable advantages of ORM systems are: reduced development time, transparency of maintenance, no need to write most SQL queries, a standardized and understandable maintenance process, resistance to internal and external errors. A classic software project in a high-level language, as a rule, also includes layers of storage, processing, analysis and visualization of data.

Distributed databases [3] can be called the next step in the evolution of data storage and processing. The impetus for their emergence was the branching and widespread use of computer networks. This is the most promising direction of development of data processing and storage. However, it requires solving many problems.

Along with issues of support, configuration, organization of request processing, fault tolerance and scaling of applications, there are issues of reliability, performance, transaction synchronization, problems of communication and computing resources, management of data storage as a single entity, etc.

### III. CONCLUSION

The search for solutions that meet modern requirements for data processing and storage is currently being conducted in all directions. Ways to improve the performance of data access, harmonization of data structures coming from various sources, organization of storage security, elimination of conflicts, collisions, variability of typing, etc. are successfully solved using various approaches, innovative and complex developments. Their implementation in modern information systems opens up prospects for solving problems of data storage and processing at the global level.

### REFERENCES

- [1] Information Modeling and Relational Databases / Terry Halpin: Morgan Kaufmann, 2024. 1084 Pages.
- [2] The Data Warehouse Toolkit: The Definitive Guide to Dimensional Modeling / Ralph Kimball, Margy Ross: Wiley, 2013, 3rd Edition. 608 Pages.
- [3] Cloud Data Warehousing Volume I: Architecting Data Warehouse, Lakehouse, Mesh, and Fabric/ Barry Devlin: Kindle Edition, 2023. 189 Pages.

КОНЦЕПЦИИ МОДЕЛИРОВАНИЯ, ОБРАБОТКИ И ХРАНИЛИЩ ДАННЫХ

Атрощенко Н.А.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
Минск, Республика Беларусь, [natasha@atroschenko.ru](mailto:natasha@atroschenko.ru)

Аннотация: В эпоху цифровизации различных направлений развития общества данные приобрели статус жизненно важного ресурса. Постоянно возрастающий в мире с 2000 г. объём данных, как структурированных, так и неструктурированных, поступающих из разных источников и имеющих разный формат, вызвал появление новых задач, потребовал инновационных нестандартных решений для быстрой обработки, безопасного хранения данных и хорошо организованного прозрачного доступа к ним. Сегодня параллельно существуют и успешно применяются различные концепции, часто взаимодополняют друг друга, успешно применяются для решения возникающих задач. Злободневным вопросом также является поиск направлений, позволяющих удовлетворить потребность в моделировании и хранении информации.

Ключевые слова: структуры данных, Big Data, хранилища данных, DaaS DWH, ORM-системы.



УДК 539.23

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕМЕНТОВ ИНТЕГРАЛЬНОГО ОПТОЭЛЕКТРОННОГО ОСЦИЛЛЯТОРА  
С ПЛАВНОЙ ПЕРЕСТРОЙКОЙ ЧАСТОТЫ НА ОСНОВЕ УПРАВЛЕНИЯ ФАЗОЙ  
В ЕГО ПЕТЛЕ ОБРАТНОЙ СВЯЗИ

Воронков Г.С., Степанов И.В., Иванов В.В., Кутлюяров Р.В., Грахова Е.П.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Российская Федерация, [voronkov.gs@ugatu.su](mailto:voronkov.gs@ugatu.su)

Аннотация: Работа посвящена вопросам моделирования элементов интегральной фотоники, необходимых для плавного управления выходной частотой оптоэлектронного осциллятора путем контроля интегрированной оптической линии задержки в контуре его обратной связи. Показано, что для плавного для управления частотой оптоэлектронного осциллятора можно использовать линии задержки на основе интерферометра Маха-Цендера или на основе микрокольцевого резонатора, а процесс перестройки может быть реализован за счет термооптического или электрооптического эффекта. Показано, что крутизна графика зависимости вносимой задержки от приложенного напряжения, для микрокольцевого резонатора слишком велика, чтобы обеспечить плавную перестройку частоты, а наименьший шаг перестройки можно получить при использовании линии задержки на основе микрокольцевого резонатора, управляемого за счет электрооптического эффекта.

Ключевые слова: численное моделирование; оптоэлектронный осциллятор; фотонная интегральная схема; радиофотоника.

## I. ВВЕДЕНИЕ

Оптические методы генерации сверхвысокочастотных (СВЧ) колебаний являются перспективной альтернативой традиционным схемам, основанным на использовании полупроводниковых активных приборов. При этом стоит отметить, что в большей части современных СВЧ-генераторов используются транзисторы, изготовленные с использованием арсенида галлия *GaAs*, обладающие относительно малым диапазоном перестройки частоты [1,2]. Методы радиофотоники же позволяют достичь существенного диапазона перестройки частот, при этом одной из самых простых и экономичных схем оптических генераторов СВЧ-колебаний является оптоэлектронный осциллятор (ОЭО) [3,4]. Классический ОЭО состоит из источника лазерного излучения, электрооптического модулятора, режекторного фильтра, фотодетектора, усилителя электрического сигнала и элемента, запасующего энергию [5]. Большинство разработанных ранее ОЭО реализованы на основе дискретных оптических компонентов, обладающих относительно большими массой и габаритами [3]. Их снижение возможно при использовании технологий интегральной фотоники [6] за счет реализации оптической части ОЭО на фотонной интегральной схеме (ФИС) с дальнейшей интеграцией оптической и электрической частей на одной печатной плате [7,8]. Примеры реализации ОЭО на ФИС можно найти, например, в работах [9–12]. Однако, в фундаментальных работах по ОЭО [3,13] рассматривается обычно управление частотой за счет изменения резонансной длины волны режекторного фильтра. Шаг перестройки частоты ОЭО при этом оказывается значительно больше, чем у электрических аналогов [14,15]. При условии фиксированной оптической длины петли обратной связи ОЭО он определяется областью свободной дисперсии ОЭО и составляет порядка нескольких десятков кГц при использовании электрического режекторного фильтра, диапазон перестройки которого ограничивает и диапазон генерируемых ОЭО частот. В то же время, для электрических генераторов шаг перестройки частоты может достигать 0,001 Гц с применением схем фазовой автоподстройки частоты [16,17].

Снизить шаг перестройки частоты ОЭО можно при использовании альтернативного метода управления ею, основанного на изменении фазового набега в петле обратной связи ОЭО за счет включения в нее дополнительно электрического фазовращателя или перестраиваемой оптической линии задержки (ЛЗ) [14,16]. Использование решений такого позволит обеспечить непрерывную перестройку частоты СВЧ-сигнала на выходе ОЭО. Наша работа посвящена моделированию компонентов ФИС, необходимых для непрерывного управления выходной частотой интегрального ОЭО, в соответствии со структурной схемой, приведенной на рис. 1.

## II. Моделирование элементов системы

В интегральной фотонике выделяют два метода управления фазовым набегом оптического излучения: фазовый сдвиг (*PS – phase shift*) и действительная временная задержка (*TTD – true time delay*) [18]. Первый метод реализуется за счёт изменения эффективного показателя преломления интегрального оптического волновода (например, на основе термооптического или электрооптического эффекта). Второй метод часто реализуется за счёт дискретного изменения пути прохождения света,

соответственно, вносимая временная задержка изменяется дискретно. Однако в интегральной фотонике представлены решения с непрерывным изменением вносимой временной задержки [19–21].



Рисунок 1. Структурная схема интегрального ОЭО, дополненного ЛЗ

Существенным недостатком метода фазового сдвига является зависимость фазового набега от длины волны и более высокие потери по сравнению с методом действительной временной задержки [22]. Этот недостаток обусловил выбор метода TTD в нашем исследовании.

Непрерывная перестройка временной задержки была продемонстрирована для ИМЦ [19,23], МКР [24] и волноводной брэгговской решётки [21]. Наиболее выгодными вариантами с точки зрения технологичности производства являются ИМЦ и МКР [25], которые и будут рассмотрены в нашем исследовании.

#### а. Моделируемые структуры и эффекты

Моделирование производилось для платформы «кремний-на-изоляторе» (КНИ). Геометрия волноводов и численные модели нагревательного элемента и полупроводникового диода в волноводе, разработанные в программном пакете Ansys Lumerical DEVICE, приведены на рис. 2.

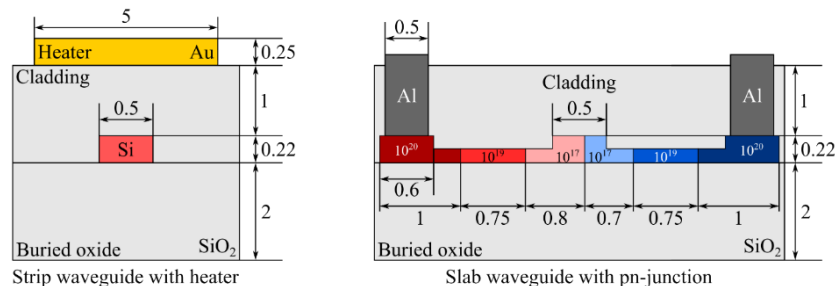


Рисунок 2. Геометрические параметры волновода с нагревательным элементом и полупроводникового диода. Все размеры приведены в мкм. У волновода с pn-переходом оттенки красного показывают области с примесями p-типа, синего – примесями n-типа

#### б. Результаты моделирования

На рис. 3 и 4 приведены полученные зависимости временных задержек для ЛЗ на основе ИМЦ и МКР соответственно. Видно, что значительная крутизна характеристики МКР при использовании термооптического эффекта не позволит обеспечить малого шага перестройки частоты ОЭО. Однако, такая схема может найти применение в сенсорных системах.

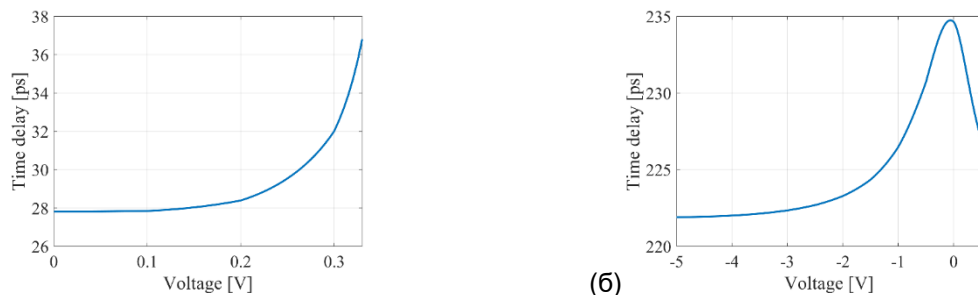


Рисунок 3. Зависимости вносимых временных задержек от приложенного к управляющему контакту напряжения для термооптического (а) и электрооптического ИМЦ (б)

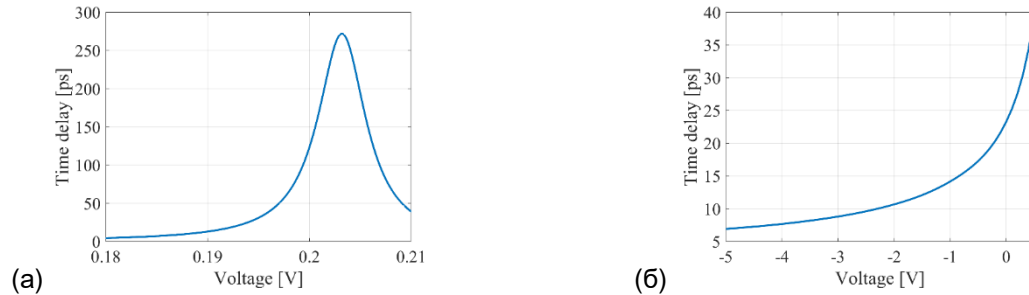


Рисунок 4. Зависимости вносимых временных задержек от приложенного к управляющему контакту напряжения для термооптического (а) и электрооптического МКР (б). Расчёт выполнен для длины волны 1550,4 нм

### III. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе приведены результаты моделирования ЛЗ, предназначенных для плавного изменения частоты выходных колебаний ОЭО, на основе ИМЦ и МКР. Показано, что ЛЗ на ИМЦ обеспечивают шаги перестройки задержки 49,4 пс/В (термооптический ИМЦ), 8,25 пс/В (электрооптический ИМЦ), а МКР – 28611,43 и 3,49 пс/В (термооптический и электрооптический, соответственно). Таким образом, минимального шага перестройки частоты ОЭО можно добиться при использовании ЛЗ на МКР, управляемом электрооптическим эффектом.

### БЛАГОДАРНОСТЬ

Исследование выполнено в рамках работ по государственному заданию Минобрнауки России для УУНиТ (соглашение № 075-03-2024-123/1 от 15.02.2024 г.) в молодёжной научно-исследовательской лаборатории Евразийского НОЦ «Сенсорные системы на основе устройств интегральной фотоники».

### ЛИТЕРАТУРА

- [1] 24-24.5GHz Tx Multifunction. United Monolithic Semiconductors, 2012.
- [2] 18.10 GHz to 26.60 GHz Quadband VCO. Analog Devices, 2020.
- [3] Maleki L. The optoelectronic oscillator // *Nature Photon.* 2011. Vol. 5, № 12. P. 728–730.
- [4] Li M. et al. Tutorial on optoelectronic oscillators // *APL Photonics.* 2021. Vol. 6, № 6. P. 061101.
- [5] Ivanov V. et al. PIC-based opto-electronic oscillator for communication and sensing applications // *J. Opt. Technol.* 2023. Vol. 90, № 12. P. 719.
- [6] Pelucchi E. et al. The potential and global outlook of integrated photonics for quantum technologies // *Nat Rev Phys.* 2021. Vol. 4, № 3. P. 194–208.
- [7] Tang J. et al. An integrated optoelectronic oscillator // 2017 International Topical Meeting on Microwave Photonics (MWP). Beijing: IEEE, 2017. P. 1–4.
- [8] Zhang W., Yao J. Silicon Photonic Integrated Optoelectronic Oscillator for Frequency-Tunable Microwave Generation // *J. Lightwave Technol.* 2018. Vol. 36, № 19. P. 4655–4663.
- [9] Han J.-Y. et al. Wideband frequency-tunable optoelectronic oscillator with a directly modulated AlGaInAs/InP integrated twin-square microlaser // *Opt. Express.* 2018. Vol. 26, № 24. P. 31784.
- [10] Do P.T. et al. Wideband tunable microwave signal generation in a silicon-micro-ring-based optoelectronic oscillator // *Sci Rep.* 2020. Vol. 10, № 1. P. 6982.
- [11] Wani M., Azeemuddin S. Optoelectronic Oscillator (OEO) designs: Wide-range tunable Silicon Microring resonator design and Low-noise High frequency Optical Mix Oscillator design // *OSA Advanced Photonics Congress 2021.* Washington, DC: Optica Publishing Group, 2021. P. JTU1A.8.
- [12] Weng W. et al. Microresonator Dissipative Kerr Solitons Synchronized to an Optoelectronic Oscillator // *Phys. Rev. Applied.* 2022. Vol. 17, № 2. P. 024030.
- [13] Yao X.S., Maleki L. Optoelectronic microwave oscillator // *J. Opt. Soc. Am. B.* 1996. Vol. 13, № 8. P. 1725.
- [14] Yang B. et al. A Wideband Frequency-Tunable Optoelectronic Oscillator Based on a Narrowband Phase-Shifted FBG and Wavelength Tuning of Laser // *IEEE Photon. Technol. Lett.* 2012. Vol. 24, № 1. P. 73–75.

- [15] Peng H. et al. Wideband tunable optoelectronic oscillator based on the deamplification of stimulated Brillouin scattering // *Opt. Express*. 2017. Vol. 25, № 9. P. 10287.
- [16] Hao T. et al. Perspectives on optoelectronic oscillators // *APL Photonics*. 2023. Vol. 8, № 2. P. 020901.
- [17] Guo A., Qin S., Xu M. A charge pump phase-locked loop with low phase noise based on ring oscillator // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2024. Vol. 2810, № 1. P. 012003.
- [18] McKay L. et al. Integrated microwave photonic true-time delay with interferometric delay enhancement based on Brillouin scattering and microring resonators // *Opt. Express*. 2020. Vol. 28, № 24. P. 36020.
- [19] Melati D. et al. Wideband Integrated Optical Delay Line Based on a Continuously Tunable Mach–Zehnder Interferometer // *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*. 2018. Vol. 24, № 1. P. 1–8.
- [20] Megret P. et al. Ring resonator-based Tunable Optical Delay Line in LPCVD Waveguide Technology. 2005. P. 79–82.
- [21] Zhang W., Yao J. A fully reconfigurable waveguide Bragg grating for programmable photonic signal processing // *Nature Communications*. 2018. Vol. 9, № 1. P. 1396.
- [22] Meijerink A. et al. Novel ring resonator-based integrated photonic beamformer for broadband phased array receive antennas - Part I: Design and performance analysis // *Journal of Lightwave Technology*. 2010. Vol. 28, № 1. P. 3–18.
- [23] Wang X. et al. Continuously tunable ultra-thin silicon waveguide optical delay line // *Optica*. Optical Society of America, 2017. Vol. 4, № 5. P. 507–515.
- [24] Schwelb O. Transmission, Group Delay, and Dispersion in Single-Ring Optical Resonators and Add/Drop Filters—A Tutorial Overview // *J. Lightwave Technol.* 2004. Vol. 22, № 5. P. 1380–1394.
- [25] Su Y., Zhang Y. *Passive silicon photonics devices*. 1st ed. Melville: AIP Publishing, 2022.

SIMULATION OF ELEMENTS OF AN INTEGRATED OPTOELECTRONIC OSCILLATOR WITH SMOOTH FREQUENCY TUNING BASED ON PHASE CONTROL IN ITS FEEDBACK LOOP

G.S. Voronkov, I.V. Stepanov, V.V. Ivanov, R.V. Kutluyarov, E.P. Grakhova

Ufa University of Science and Technology, Ufa, Russian Federation, [voronkov.gs@ugatu.su](mailto:voronkov.gs@ugatu.su)

**Abstract:** The study addresses the challenges in modeling integrated photonics-based elements necessary for the precise control of an optoelectronic oscillator's output frequency. This control is achieved by adjusting the integrated optical delay line within the oscillator feedback loop. The research demonstrates that for smooth frequency control, delay lines based on either a Mach-Zehnder interferometer or a microring resonator can be utilized. The tuning process can be implemented through thermo-optical or electro-optical effects. However, it is noted that the steepness of the delay versus applied voltage curve for a microring resonator is too high to ensure smooth frequency tuning. The smallest tuning step is achieved using a delay line based on a microring resonator controlled by the electro-optical effect.

**Keywords:** numerical simulation; optoelectronic oscillator; photonic integrated circuit; radiophotonics.

УДК 004.2+744.4

## МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОВ ПОВЫШЕНИЯ ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ ПРОЦЕССОРА С АРХИТЕКТУРОЙ RISC-V

Сторожев И.Е., Певцов Е.Ф.

Центр проектирования интегральных схем, устройств наноэлектроники и микросистем,  
МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Российская Федерация,  
[storozhev9003@gmail.com](mailto:storozhev9003@gmail.com)

Аннотация: В статье представлена микроархитектура процессора с архитектурой RISC-V, поддерживающая ограниченное количество инструкций из набора команд RV32IM. Проведены разработка и функциональная верификация прототипа на языке описания аппаратуры SystemVerilog, а также статический временной анализ для оценки тактовой частоты в САПР Xilinx Vivado. Применены методы повышения производительности процессора: конвейеризация тракта данных, пересылка результатов (bypass), статический предсказатель условных переходов, синхронный умножитель, сумматор с ускоренным переносом.

Ключевые слова: процессор, RISC-V, микроархитектура, конвейеризация, синхронный умножитель, сумматор с ускоренным переносом.

### I. ВВЕДЕНИЕ

Процессоры играют ключевую роль в работоспособности компьютеров. Так как с каждым годом требования по эффективности процессоров растут, разработчики применяют различные методы и техники по повышению производительности своих решений. Архитектура RISC-V – современный открытый стандарт на архитектуру процессора [1,2,3], который широко распространяется не только во всем мире, но и, в частности, в России. Многие крупнейшие компании по производству отечественной цифровой электроники используют данную архитектуру для своих разработок.

### II. РАЗРАБОТКА RTL КОДА ПРОЦЕССОРА С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДОВ ПОВЫШЕНИЯ ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ

#### 2.1 Конвейерная микроархитектура

Для апробации методов по повышению производительности сначала реализован одноктактный процессор, содержащий в себе следующие базовые блоки для выполнения инструкций RV32IM: 32 архитектурных регистра, арифметико-логическое устройство, устройство умножения и деления разделенные память инструкций и данных, счетчик команд. Далее в этот проект была встроена конвейерная микроархитектура, которая является мощным средством повышения производительности, так как добавляет в микроархитектуру временной параллелизм [4]. Реализованная в данном проекте методика конвейеризации подразумевает добавления в тракт данных не архитектурных временных регистров (рис. 1).

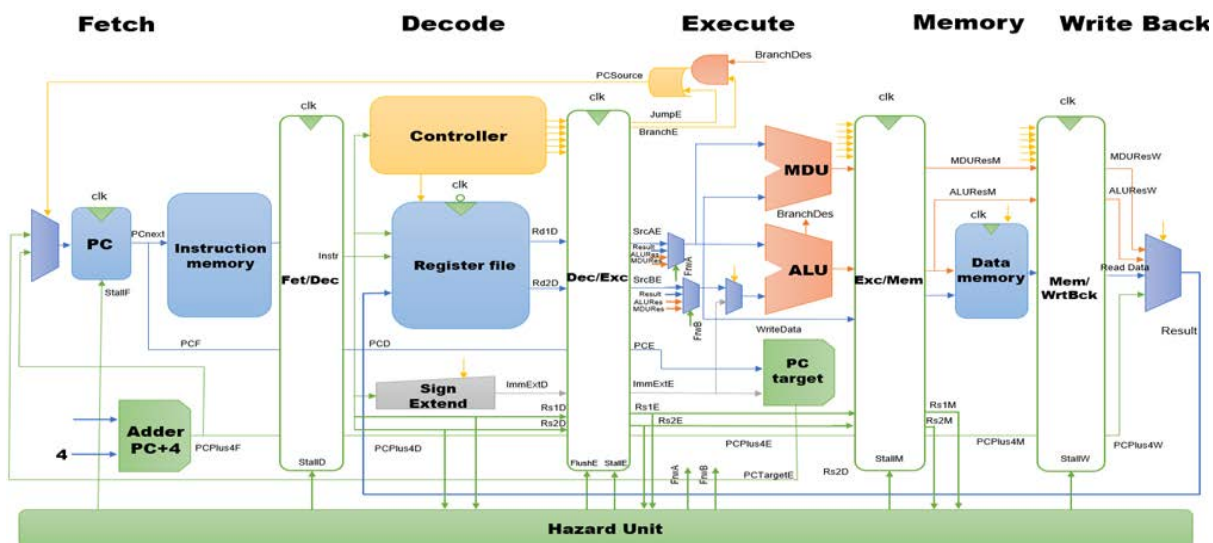


Рисунок 1. Структурная схема конвейерной микроархитектуры процессора

В результате примененной конвейеризации тракт данных разделен на 5 стадий: Выборка (Fetch), Декодирование (Decode), Выполнение (Execute), Обращение к памяти (Memory), Запись в регистры (Write Back) [5]. Известно, что в конвейерной микроархитектуре возникают три вида конфликтов: по управлению, по данным и операционные. Для предотвращения конфликтов по управлению и данным в микроархитектуру встроены блоки предотвращения ошибок (Hazard Unit) [6], который содержит следующий функционал: статический предсказатель условных переходов [7], пересылка результатов, остановка и очистка конвейера.

### 2.3 Повышение производительности операционных устройств

Самой распространенной операцией, выполняемой процессором, является операция сложения. Сумма двух однобитных операндов происходит через простую схему сумматора с полным переносом, но если числа имеют больше разрядов, например 32, как в архитектуре RV32IM, то схема будет содержать 32 полных сумматора, в которых входные и выходные переносы соединены между разрядами, что сильно замедляет вычисление результирующего переноса, так как нужно ждать пока рассчитаются переносы для остальных разрядов. Для повышения производительности в данном проекте в процессор встроены сумматоры с ускоренным переносом (carry-lookahead, CLA) [8], так что 32-битный сумматор разделен на восемь 4-разрядных сумматоров, с сигналами генерации (G) и распространения (P), которые требуются для определения переноса n-го разряда сумматора по следующей формуле:

$$C_n = A_n B_n + (A_n + B_n) C_{n-1} = G_n + P_n C_{n-1}, \quad (1)$$

где  $A_n$  и  $B_n$  являются n-тыми разрядами операндов.

На рисунке 2 представлена RTL схема 32-битного сумматора с ускоренным переносом. В красной области показана синтезированная логика сигналов генерации и распространения, а в фиолетовой области 4 полных сумматора. В каждом из 8 блоков выходной перенос рассчитывается по формуле (1) и переходит в следующий блок.

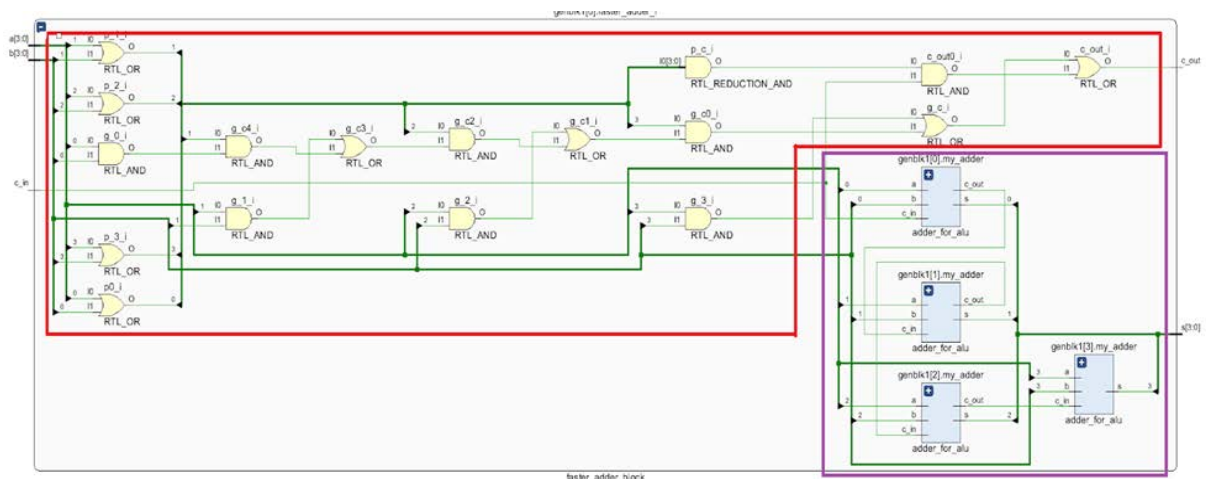


Рисунок 2. RTL блок сумматора с ускоренным переносом

Главный фактор снижения производительности – операция умножения в среди операционных устройств, так как она является самой медленной и относительно часто встречающейся в отличие от деления. В одноктактной реализации умножения производилось с помощью комбинаторной логики, что сильно увеличивало критический путь, такие решения не применяются в современных процессорных системах.

В данном проекте реализован синхронный умножитель, который содержит в себе вспомогательные регистры, применение которых позволило выполнять операцию умножения за 32 такта, что соответственно существенно увеличивает тактовую частоту процессора [9].

Алгоритм умножения представляет из себя конечный автомат (КА) с двумя состояниями S0 и S1. В состоянии S0 КА ожидает сигнал `gip`, который инициирует умножение, а именно присвоит значения операндов в регистры, обнулит счетчик, регистр готовности и результирующий регистр. Далее КА переходит в состояние S1, в котором выполняется основной алгоритм. Сначала происходит проверка младшего разряда второго регистра операнда, если он равен единице, то результирующий регистр присвоит значение суммы первого регистра операнда и своего значения, иначе он не изменится, после этого значения регистров операндов сдвигаются на один разряд влево и вправо соответственно, также одновременно с этим счетчик увеличивает свое значение. Далее, если счетчик достиг 32 операция заканчивается и регистр `rdone` сигнализирует о том, что данные готовы.

RTL-представление блока синхронного умножителя приведено на рис.3.

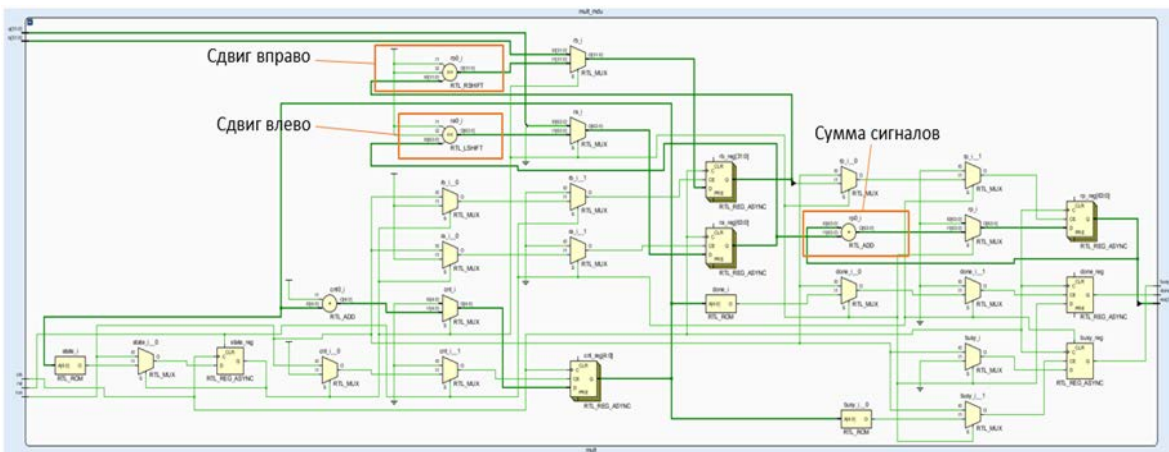


Рисунок 3. RTL блок синхронного умножителя

#### 2.4 Функциональная верификация

Для спроектированного прототипа проведена функциональная верификация, показывающая корректность работоспособность микроархитектуры и примененных методов. В частности для демонстрации работы в память процессора была загружена программа, выполняющая вычисление факториала 7 (рис. 4).

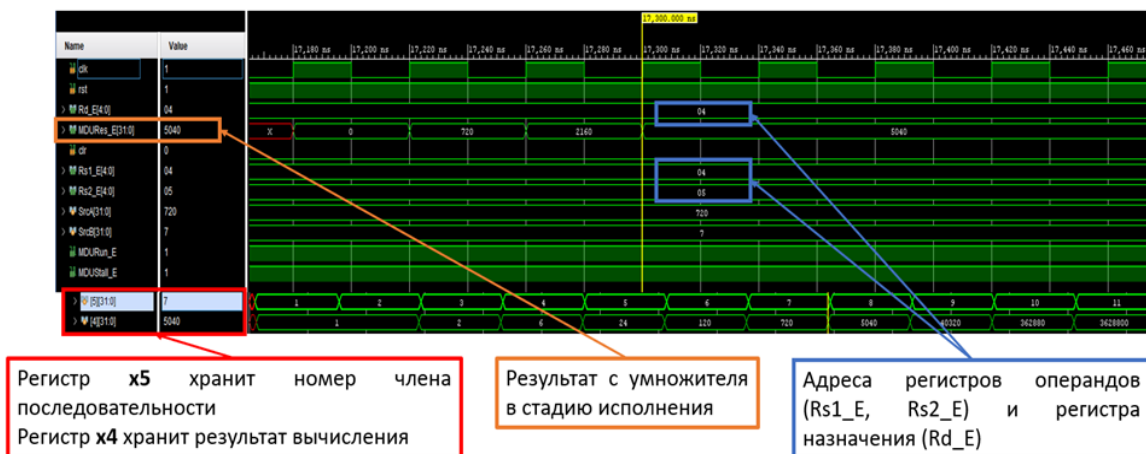


Рисунок 4. Тестовый сценарий вычисления факториала числа 7

Из временной диаграммы видно, что результаты записываются в нужные регистры x5 и x4 каждый такт, что свидетельствует о правильности работы пересылки результата. В процессе выполнения не появляются задержки из-за работы предсказателя. По результатам факториал 7 равен 5040, что является верным значением.

#### 2.5 Статический временной анализ

Для анализа и оценки производительности проводился статический временной анализ (STA) в САПР Xilinx Vivado относительно тактовой частоты 100 МГц для ПЛИС Arty A7 (табл. 1).

По результатам анализа для реализаций с применение методов повышения производительности критический путь составил -0.332 нс. Для одноктактной микроархитектуры критический путь составил -8.74 нс.

Таблица 1. Результаты статического временного анализа

Параметры процессора	Критический путь, нс	Тактовая частота, МГц
Без конвейеризации	-8.74	53
После конвейеризации	-0.332	96

### III. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработан прототип процессора с архитектурой RISC-V на языке описания аппаратуры SystemVerilog, поддерживающий ограниченное количество инструкций из наборов команд RV32IM. Апробированы следующие методы повышения производительности: конвейеризация, включающая в себе блок предотвращения конфликтов, сумматор с ускоренным переносом, синхронные умножитель и делитель. Данные методы и техники делают микроархитектуру высокопроизводительной, что было подтверждено с помощью статического временного анализа, проведенного в САПР Xilinx Vivado. В сравнении с однократно реализацией, улучшенный процессор имеет тактовую частоту выше на 81%.

### БЛАГОДАРНОСТЬ

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание для университетов № ФГФ3-2023-0005.) и с применением оборудования Центра коллективного пользования РТУ МИРЭА (соглашение от 01.09.2021 № 075–15-2021-689, уникальный идентификационный номер 2296.61321X0010).

### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Aneesh Ravvendran, Vinayak Baramu Patil, David Selvakumar A RISC-V Instruction Set Processor-Microarchitecture Design and Analysis // International Conference on VLSI Systems, Architectures, Technology and Applications. 2016.
- [2] David Patterson, Andrew Waterman The RISC-V Reader: An Open Architecture Atlas. University of California, Berkeley: 2017.
- [3] Gonzalez A., Korpan B., Zhao J. Replicating and Mitigating Spectre Attacks on a Open Source RISC-V Microarchitecture // CARRV. 2019. №19.
- [4] David A. Patterson, John L. Hennessy Computer Organization and Design. Cambridge: Elsevier, 2018.
- [5] Bora S., Paily R. A High-Performance Core Micro-Architecture Based on RISC-V ISA for Low Power Applications // IEEE Transactions on Circuits and Systems. 2021. №6.
- [6] Gokulan T, Akshay Muraleedharan, Kuruvilla Varghese Design of a 32-bit, dual pipeline superscalar RISC-V processor on FPGA // Euromicro Conference on Digital System Design. 2020.
- [7] C. Arul Rathi, G. Rajakumar Design and Development of an Efficient Branch Predictor for an In-order RISC-V Processor // Journal Of Nano- And Electronic Physics. 2020. №5.
- [8] Харрис Д.М., Харрис С.Л. Цифровая схемотехника и архитектура компьютера: RISC-V. Elsevier, 2021.
- [9] Don Kurian D. Single Cycle RISC-V Micro Architecture Processor and its FPGA Prototype // Seventh International Symposium on Embedded Computing and System Design. 2017.

### METHODS TO IMPROVE THE PERFORMANCE OF RISC-V ARCHITECTURE PROCESSOR

I. Storozhev, E. Pevtsov

Centre for Design of Integrated Circuits, Nanoelectronics and Microsystems Devices,  
MIREA – Russian Technological University, Moscow, Russian Federation, [storozhev9003@gmail.com](mailto:storozhev9003@gmail.com)

**Abstract:** The paper presents a microarchitecture of a processor with RISC-V architecture supporting a limited number of instructions from the RV32IM instruction set. Development and functional verification of the prototype in the hardware description language SystemVerilog, as well as static timing analysis for clock frequency estimation in Xilinx Vivado CAD. Methods to improve processor performance were applied: data path pipelining, result forwarding (bypass), static conditional transition predictor, synchronous multiplier, adder with accelerated carry.

**Keywords:** processor, RISC-V, microarchitecture, pipelining, synchronous multiplier, accelerated carry adder.



УДК 004

## РАЗРАБОТКА ПОДХОДА К СБОРУ И АННОТИРОВАНИЮ ИЗОБРАЖЕНИЙ КЕРАМИЧЕСКОГО КИРПИЧА ДЛЯ ЗАДАЧ КОМПЬЮТЕРНОГО ЗРЕНИЯ

Птуха В.И.<sup>1</sup>, Птуха К.И.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск, Республика Беларусь, [viktar.ptukha@gmail.com](mailto:viktar.ptukha@gmail.com)

<sup>2</sup>Белорусский национальный технический университет, Минск, Республика Беларусь

Аннотация: в статье представлен подход к сбору и аннотированию изображений керамического кирпича для задач компьютерного зрения. Разработан мобильный стенд для стандартизированной фотосъёмки образцов, что позволяет создать качественный датасет для анализа дефектов. Выполнена разметка более 5000 изображений, что обеспечивает возможность классификации различных дефектов и способствует повышению точности алгоритмов автоматизированного контроля качества. Предложенный подход и собранный датасет открывают перспективы для дальнейшего увеличения количества снимков и применения разработок на промышленных предприятиях.

Ключевые слова: контроль качества, компьютерное зрение, датасет, разметка данных, машинное обучение, искусственный интеллект, нейронные сети.

### I. ВВЕДЕНИЕ

На территории Республики Беларусь в 2024 году функционирует около 10 предприятий, занимающихся производством керамического кирпича. Согласно данным 2019 года, годовой объём производства составляет 2150,9 млн условных кирпичей [1]. В 2024 году объём мирового рынка кирпича в денежном эквиваленте составил 1,737 млрд долларов США, с прогнозируемым ростом до 2,086 млрд долларов к 2030 году. На Северную Америку приходится 39% мирового рынка, тогда как европейский рынок занимает около 30% [2]. Применение систем компьютерного зрения для контроля качества позволит осуществлять непрерывный мониторинг, выявлять дефекты и оптимизировать настройки оборудования для улучшения качества продукции. Использование компьютерного зрения при контроле качества направлено на сокращение издержек на производство продукции, исключение человеческого фактора при оценке качества, организацию круглосуточного и бесперебойного контроля в различных условиях эксплуатации, в том числе экстремальных или непригодных для работы человека условиях. А также уменьшение количества брака, увеличение числа анализируемых параметров и скорости анализа выпускаемой продукции по сравнению с обработкой информации человеком [3].

Цель текущего исследования: разработать методологию сбора и аннотирования изображений керамического кирпича для создания специализированного датасета, предназначенного для обучения нейронной сети с целью автоматического выявления дефектов, таких как трещины, сколы, неровности кромок, геометрические отклонения и недожог.

### II. ОПИСАНИЕ МЕТОДОЛОГИИ СБОРА ДАННЫХ

Для формирования датасета необходимо сделать фотографии керамического кирпича (размером 250x120x65 мм), затем обработать изображения, приведя их к заданной ориентации и позиции, изменив размеры и разрешение, а при необходимости – преобразовав в черно-белый формат. После этого проводится разметка изображений: анализируется наличие и тип дефекта(ов), и результаты заносятся в таблицу с привязкой к конкретному снимку. Для этого был разработан и собран тестовый стенд для фотосъёмки, с учётом оптимальных размеров по высоте, ширине и глубине. Важное требование при проектировании – мобильность стенда, позволяющая легко перемещать его и использовать не только в помещении. Это наложило ограничения на выбор материалов и габариты конструкции. Особое внимание уделено соблюдению требований охраны труда и экологических норм, что обеспечивает безопасность использования стенда для оператора и минимизирует вредное воздействие на окружающую среду. При выборе материалов учитывались экологическая безопасность и возможность их утилизации. Конструкция предусматривает защиту от возможных травм, таких как защемления или удары, и не содержит токсичных веществ, что делает её безопасной при длительном использовании в любых условиях, включая работу на открытом воздухе.

Габаритные размеры стенда: длина (внутренняя/наружная): 400/420 мм., ширина (внутренняя/наружная): 280/380 мм., высота (внутренняя/наружная): 250/320 мм., Материал изготовления – ориентированно-стружечная плита OSB-3 10мм. Масса конструкции: 5,25 кг

Стенд представляет собой короб с крышкой (рис. 1). Для удобства крышка не закреплена жёстко и легко снимается за имеющиеся на ней ручки. В крышке сделано прямоугольное отверстие размером 40×40 мм, а также предусмотрены крепления для установки смартфона для фотосъёмки. Для надлежащего освещения на внутренней поверхности крышки закреплены две светодиодные ленты длиной 10 см каждая, содержащие по 12 светодиодов мощностью 0,08 Вт. Такое освещение обеспечивает равномерный свет, необходимый для качественной съёмки. Суммарная мощность двух лент составляет 1,92 Вт, световой поток 90 лм. Ленты подключаются к источнику постоянного напряжения для светодиодных лент, требующих напряжение равное 24В. Источник постоянного напряжения подключается к сети переменного тока с напряжением 220В. Электрическая схема подсветки представлена на рисунке (рис. 2). Все соединения осуществляются при помощи клеммных соединений Wago. Светодиодные ленты, источник постоянного напряжения, устройство короба соответствуют требованиям ТР ТС 004/2011 и ТР ТС 020/2011.



Рисунок 1. Стенд для фотосъёмки: а) вид без крышки, б) низ крышки с подсветкой, в) вид сверху

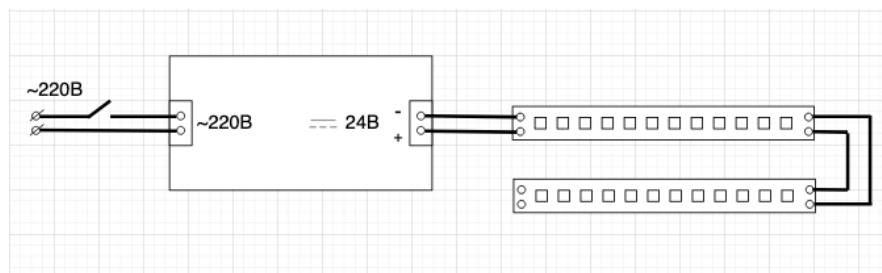


Рисунок 2. Электрическая схема организации подсветки

### III. ПРОЦЕСС СЪЕМКИ И ИМИТАЦИЯ КОНВЕЙЕРНОГО РЕЖИМА

Для формирования датасета было принято фотографировать только верхнюю и нижнюю постель кирпича. Таким образом один кирпич позволяет получить два изображения. Положение кирпича ограничено размерами стенда, который не позволяет разместить образец под углом 90 градусов относительно основного положения. Допускается и даже приветствуется смещение образца от центра по любой из осей XY или разворот относительно оси Z так как будущая нейронная сеть сможет распознавать дефекты на образцах независимо от их положения на конвейере. Наличие исключительно искусственного источника света, одинаковое фокусное расстояние до всех образцов обеспечивает однородность изображений.

### IV. РАЗМЕТКА ПОЛУЧЕННЫХ ДАННЫХ

Полученные изображения визуально размечаются на основании требований СТБ 1160-99 «Кирпич и камни керамические. Технические условия». Контролируемые дефекты: трещины, сколы, неровность кромки, геометрические отклонения и недожог. Согласно СТБ 1160-99, недожог и пережог изделий устанавливают путем сравнения цвета и водопоглощения образцов с образцом-эталоном нормально обожжённого изделия. Это дефект в данной работе определяем визуально. Неровность кромки так же должна соответствовать образцу-эталоны и не контролируется действующими обязательными нормативными. Многие предприятия обращают внимание на этот дефект, поэтому он включён в датасет. Результаты заносятся в таблицу EXCEL. Фрагмент таблицы представлен в таблице (табл. 1).

Таблица 1. Примеры изображений с классификацией дефектов

name	no_defect	crack	chipping	geometric_deviation	curved_edge	under-burned
20240310_154149.jpg	0	1	1	0	0	0
20240330_171219.jpg	0	0	0	0	1	0
20240330_181421.jpg	0	0	1	0	1	0
20240330_180707.jpg	1	0	0	0	0	0

Как видно из таблицы, образец может содержать несколько дефектов. Если имеется дефект, то в колонку вносится 1, 0 если дефект отсутствует. Образец, не имеющий дефектов, содержит 1 в столбце "no\_defect". Примеры изображений приведены на рисунке (рис.3).



Рисунок 3. Дефекты кирпича: а) образец без дефектов, б) трещина, в) сколы, г) геометрические отклонения д) неровность кромки е) недожог

## V. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате проделанной работы разработан подход к сбору и аннотированию изображений керамического кирпича для задач компьютерного зрения. Созданный тестовый стенд обеспечил стандартизированные условия съёмки, что повысило точность последующей обработки изображений. Собранный датасет из более чем 5000 снимков позволяет классифицировать дефекты с высокой степенью детализации и является ценным инструментом для разработки алгоритмов автоматического контроля качества. Для повышения надежности модели необходимо увеличить количество снимков, что будет проще выполнить с использованием имеющегося мобильного стенда, позволяющего легко переносить оборудование и осуществлять съёмку в различных условиях. Дальнейшее расширение датасета и усовершенствование методов аннотации данных помогут создать более точные алгоритмы классификации дефектов и автоматизации контроля на производстве.

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] Электронный ресурс: <https://nadezda.by/stati/obem-proizvodstva-kirpicha-i-blokov-v-mire/>
- [2] Электронный ресурс: <https://www.precedenceresearch.com/bricks-market/>

[3] Птуха, В. И. Проблемы и оптимальные пути решений задачи контроля качества продукции при помощи компьютерного зрения = Problems and optimal ways to solve the problem of product quality control using computer vision / В.И. Птуха // Компьютерные системы и сети : сборник статей 60-й научной конференции аспирантов, магистрантов и студентов, Минск, 22–26 апреля 2024 г. / Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники. – Минск, 2024. – С. 504-507.

[4] СТБ-1160-99 Кирпич и камни керамические. Технические условия.

[5] Технический регламент Таможенного союза ТР ТС 004/2011 "О безопасности низковольтного оборудования".

[6] Технический регламент Таможенного союза ТР ТС 020/2011 "Электромагнитная совместимость технических средств".

#### DEVELOPMENT OF AN APPROACH FOR COLLECTING AND ANNOTATING CERAMIC BRICK IMAGES FOR COMPUTER VISION TASKS

V. Ptukha<sup>1</sup>, K. Ptukha<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus,  
[viktar.ptukha@gmail.com](mailto:viktar.ptukha@gmail.com)

<sup>2</sup>Belarusian National Technical University, Minsk, Republic of Belarus

Abstract: the article presents an approach for collecting and annotating images of ceramic bricks for computer vision tasks. A mobile setup was developed for standardized sample photography, enabling the creation of a high-quality dataset for defect analysis. Over 5,000 images were annotated, providing the ability to classify various defects and enhance the accuracy of automated quality control algorithms. This approach and dataset offer potential for further increasing the number of images and applying these developments in industrial settings.

Keywords: quality control, computer vision, dataset, data partitioning, machine learning, AI, neural networks.

UDC 621.771 : 669.716

## BUILDING A MiniApp TO MODEL MICROSTRIP ANTENNA ARRAYS USING THE INTEGRAL EQUATIONS METHOD

V. Kizimenko, N. Naumovich

Center 1.6, Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics,  
Minsk, Republic of Belarus, [kizimenko\\_v@bsuir.by](mailto:kizimenko_v@bsuir.by)

**Abstract:** This article discusses the development of a MiniApp that models microstrip antenna arrays using the Integral Equations method. The MiniApp allows users to input key parameters such as the size and arrangement of radiators, substrate properties, and operating frequency to compute the array's characteristics. MiniApp offers an interactive platform for antenna design, providing insights into radiation patterns, impedance, gain, and directivity. This tool aids engineers, researchers, and students in exploring and optimizing microstrip antenna arrays in real time.

**Keywords:** Microstrip antennas, antenna arrays, Integral Equations, Python, MiniApp, radiation pattern, antenna modeling.

### I. INTRODUCTION

Microstrip antennas are widely used in various applications, such as communication systems, satellite technology, and radar systems, due to their compact size, ease of integration with printed circuit boards, and low profile. These antennas consist of a conducting patch mounted on a dielectric substrate with a ground plane beneath. The patch can take different shapes, such as rectangular, circular, or even complex geometries, depending on the design requirements. Microstrip antenna arrays, which consist of multiple individual radiators arranged in a pattern, are commonly used to improve the performance of antenna systems, providing higher gain, directivity, and beam steering capabilities.

Modeling the performance of these antenna arrays is a crucial step in antenna design. One common approach for solving electromagnetic problems in antenna theory is the Integral Equations (IE) method, which allows for the analysis of radiation and scattering by antennas, especially when considering the interaction between multiple radiators and the surrounding medium [1]. The IE method is particularly useful for microstrip antennas because it provides a way to account for the effects of substrate materials, the spacing between radiators, and other factors that affect the performance of antenna arrays [2-3].

In this article, we will focus on building a Telegram MiniApp using Python that models the characteristics of microstrip antenna arrays using the integral equations method. The MiniApp will serve as an interactive tool where users can input various parameters related to the antenna array and receive detailed information about its performance. Through this MiniApp, users can calculate radiation patterns, impedance, directivity, and other important characteristics of the antenna array based on specific input parameters.

### II. UNDERSTANDING MICROSTRIP ANTENNAS AND ARRAYS

A microstrip antenna is composed of a conducting patch, a dielectric substrate, and a ground plane. The patch, typically made of a thin metal layer, is etched into the top surface of the dielectric substrate. The ground plane lies beneath the substrate. The configuration is designed to radiate electromagnetic waves when an RF signal is applied to the patch. The performance of the antenna depends on several key factors, including the size and shape of the patch, the dielectric properties of the substrate, and the frequency of operation.

One of the major advantages of microstrip antennas is their low profile, making them suitable for integration into compact devices, such as mobile phones, drones, and satellites. Microstrip arrays, which consist of multiple individual microstrip antennas arranged in a grid pattern, can offer improved performance compared to single-element antennas. The arrangement of the elements, the spacing between them, and the size of the individual elements all influence the array's radiation pattern, gain, and directivity.

The Integral Equations (IE) method is a numerical technique used to solve Maxwell's equations for antenna problems. This method expresses the electromagnetic fields as integrals over the surface of the antenna, which can be solved numerically. For microstrip antenna arrays, the IE method helps in modeling the interaction between the different radiators, accounting for the coupling between elements, and analyzing the overall performance of the array.

### III. MINIAPP PURPOSE AND FUNCTIONALITY

The goal of the MiniApp is to provide an intuitive interface for users to model microstrip antenna arrays by simply inputting a set of parameters. These parameters will include:

**Size of Individual Microstrip Radiators:** Users will be able to specify the dimensions (length and width) of the rectangular or other types of patch elements.

**Number of Radiators in X and Y Directions:** The MiniApp will allow users to define how many elements there are in the array along the X and Y axes, which influences the total size and configuration of the array;

**Spacing Between Radiators:** The user can set the spacing between adjacent elements in the array. The spacing affects the coupling between elements and, therefore, the overall radiation pattern and impedance characteristics of the array;

**Substrate Parameters:** The dielectric properties of the substrate material, including its relative permittivity (dielectric constant) and permeability, will be provided as input. The substrate thickness is another important parameter that affects the antenna's impedance and bandwidth;

**Frequency of Operation:** The operating frequency will be an input parameter, which directly influences the resonant frequency of the antenna and the overall design calculations.

The MiniApp will use these parameters as inputs and model the electromagnetic interactions between the elements of the array using the Integral Equations method. By solving the associated equations, the MiniApp will generate predictions for key antenna characteristics such as the radiation pattern, impedance matching, gain, directivity, and beamwidth.

In addition to these basic parameters, the MiniApp will also allow for optimization of the array's design based on the user's requirements. For example, users might want to maximize the antenna's directivity while minimizing its size, or they might seek a specific impedance value for matching to a transmission line. The MiniApp will use the Integral Equations method to model these trade-offs and provide insights into how adjustments to the array configuration can affect its performance.

Once the user inputs the required parameters into the MiniApp interface, the Python-based backend will process these inputs and use the Integral Equations method to compute the antenna's characteristics. The method typically involves the discretization of the surface of the antenna and the surrounding medium into small elements. These elements are then used in integral equations to represent the electromagnetic fields. A numerical solver will process these equations, often using methods like the Method of Moments (MoM), to compute the antenna's impedance matrix, radiation pattern, and other parameters.

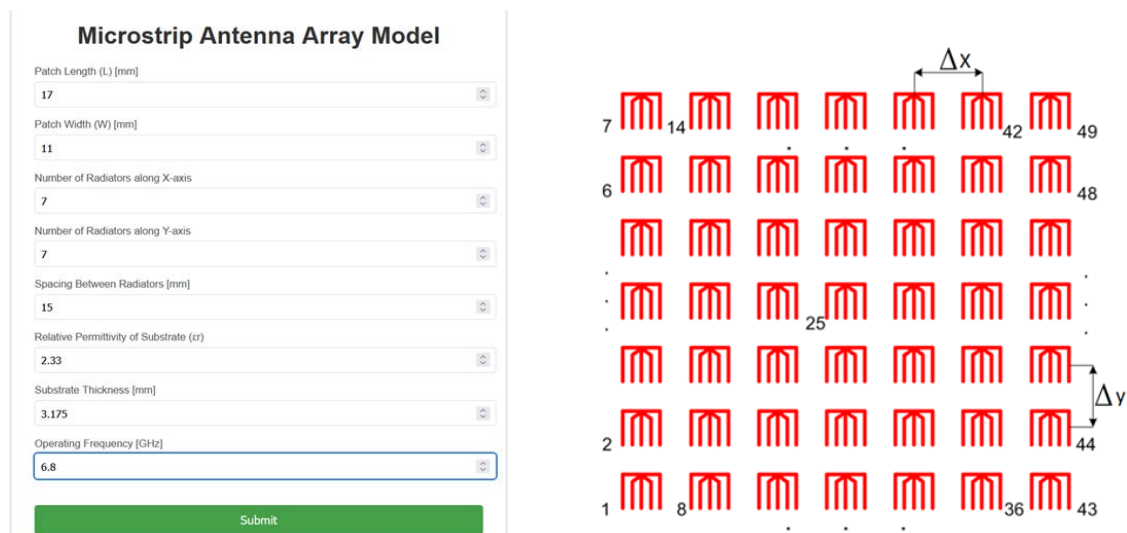


Figure 1. User interface of MiniApp and geometry of the microstrip antenna array

The results will be displayed in a user-friendly format, providing the user with valuable information about the antenna's behavior. For example, the radiation pattern can be visualized in polar or 3D plots, while other parameters like gain and directivity can be presented in tabular form or graphical plots. This allows the user to quickly understand the impact of different design choices on the antenna's performance.

#### IV. ADVANTAGES OF USING A MINIAPP FOR ANTENNA MODELING

A key benefit of building this MiniApp within Telegram is the accessibility and ease of use. Users don't need to download or install any specialized software; they can simply interact with the bot within Telegram itself. The input process is designed to be intuitive, with clear prompts guiding the user through the required parameters.

Additionally, the MiniApp will allow for rapid prototyping of different antenna designs. Users can experiment with various configurations and quickly visualize the effects of different parameters on the antenna's performance. This makes it a valuable tool for antenna engineers, researchers, and students learning about microstrip antennas.

By leveraging Python's scientific libraries and Telegram's Bot API, the MiniApp can also be easily integrated with external databases and tools, such as material property libraries or online frequency calculators. This integration can provide additional value to users who wish to include real-world material data or compare the performance of their designs against theoretical or experimental benchmarks.

#### V. CONCLUSIONS

Building a Telegram MiniApp to model microstrip antenna arrays using the Integral Equations method represents an exciting intersection of engineering, mathematics, and modern communication tools. By using the MiniApp, users can explore the characteristics of microstrip antenna arrays, experiment with different design parameters, and gain valuable insights into the performance of their antenna systems. This tool will be especially useful for engineers and researchers working in the field of antenna design, as well as for students learning about the theory and application of microstrip antennas.

Using this application, users will gain an understanding of the key factors that influence the performance of microstrip antenna arrays, such as element spacing, substrate properties, and array configuration. Moreover, the ability to interact with this powerful modeling tool directly through Telegram provides an intuitive and convenient way to explore the design space of microstrip antennas.

As you experiment with this MiniApp, you'll gain hands-on experience in both antenna theory and the practical aspects of implementing computational methods. The integral equations method offers a powerful way to model and analyze electromagnetic systems, and by applying it to microstrip antenna arrays, the MiniApp serves as an accessible, real-time platform for antenna design and simulation.

#### REFERENCES

- [1] Kizimenko V. and Ulanouski A., Thin printed dipole arrays simulation using integral equation method / Proceedings of International Conference on Modern Problem of Radio Engineering, Telecommunications and Computer Science, Lviv, Ukraine, 2012, pp. 181-181.
- [2] Kizimenko V., Ulanouski A., Mathematical model of the microstrip radiator based on thin-wire approximation of metal patch / 2015 International Conference on Antenna Theory and Techniques (ICATT), Kharkiv, Ukraine, 2015, pp. 1-3.
- [3] Kizimenko, V. Numerical modeling of multibeam microstrip antenna arrays for telecommunication systems using the integral equation method / V. V. Kizimenka, S. A. Karaneuski, N. M. Naumovich // Технологии передачи и обработки информации : материалы Международного научно-технического семинара, Минск, апрель 2024 г. / БГУИР; редкол.: В. Ю. Цветков [и др.]. – Минск, 2024. – С. 11–13.

#### РАЗРАБОТКА MiniApp ПРИЛОЖЕНИЯ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ МИКРОПОЛОСКОВЫХ АНТЕННЫХ РЕШЕТОК МЕТОДОМ ИНТЕГРАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

Кизименко В.В., Наумович Н.М.

Центр 1.6, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
Минск, Республика Беларусь, [kizimenko\\_v@bsuir.by](mailto:kizimenko_v@bsuir.by)

Аннотация: В статье обсуждается разработка MiniApp приложения, предназначенного для моделирования характеристик микрополосковых антенных решеток с использованием метода интегральных уравнений. MiniApp позволяет пользователям вводить такие ключевые параметры, как размер и расположение излучателей, свойства диэлектрической подложки и рабочую частоту для расчета характеристик. Разработанное приложение MiniApp представляет собой интерактивную

платформу для проектирования антенных решеток, которая позволяет рассчитать диаграмму направленности, импеданс, коэффициент усиления и направленного действия. Инструмент помогает инженерам, исследователям и студентам в анализе и оптимизации параметров микрополосковых антенных решеток в режиме реального времени.

Ключевые слова: Микрополосковые решетки, антенные решетки, метод интегральных уравнений, Python, MiniApp, диаграмма направленности, численное моделирование антенн.



УДК 681.3

## РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ШТАМПОВКИ ОПРАВОК ПРОШИВНЫХ СТАНОВ С ЦЕЛЬЮ ПОВЫШЕНИЯ СТОЙКОСТИ ИНСТРУМЕНТА

Преображенская Е.В., Мышечкин А.А., Скрипник С.В.

МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Российская Федерация,  
[Skripnik53@yandex.ru](mailto:Skripnik53@yandex.ru)

Аннотация: Предложен новый технологический процесс изготовления поковок с глубокими полостями методом горячей штамповки, позволяющий снизить нагрев и удельные усилия на инструменте, а также повысить его стойкость. Разработанная технология включает операции осадки исходной заготовки, горячей штамповки наружного профиля полученной поковки, выдавливания внутренней полости оправки и открытой штамповки заднего конического участка оправки.

Ключевые слова: Моделирование, программа QForm, горячее объемное формоизменение, штамп.

### I. ВВЕДЕНИЕ

Сложность промышленного использования технологии горячей штамповки поковок с глубокими полостями небольшого сечения связана с тяжелыми условиями работы и низкой стойкостью инструмента для выдавливания таких полостей. Исследования технологических процессов горячей штамповки поковок с глубокими полостями показывают, что пуансон для выдавливания полости испытывает большие удельные усилия ( $>1000$  МПа) при значительном тепловом воздействии. Температура по сечению пуансона в наиболее нагруженной нижней части находится в пределах от 400 (в центре) до 800 °С (на поверхности). Применение теплостойких инструментальных сталей (4Х2В5МФ, 5Х3В3МФ, 2Х6В8М2К8 и др.) не позволяет решить эту проблему. Цель настоящей работы — разработка нового технологического процесса горячей штамповки поковок типа оправок прошивных станов из тепло- и жаростойких сталей, обеспечивающего повышение стойкости штампового инструмента.

### II. МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА

Анализ известных технологических процессов горячей штамповки оправок прошивных станов показывает, что наибольшие удельные усилия, разогрев и низкую стойкость имеет пуансон для выдавливания внутренней полости оправки.

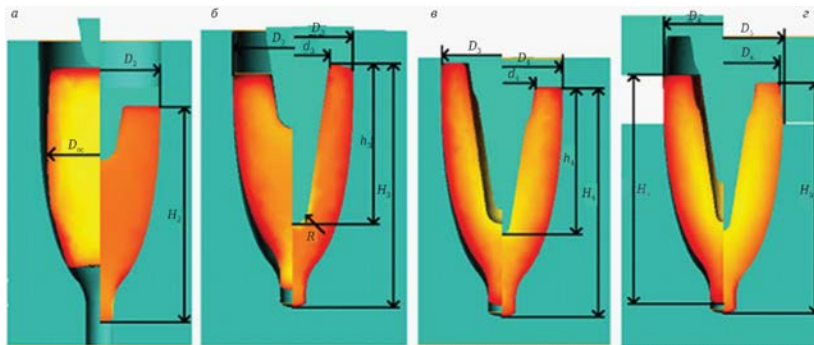


Рисунок 1. Технологические переходы горячей штамповки поковки типа оправки прошивного стана:  
а – штамповка наружного профиля; б – предварительное выдавливание полости; в – штамповка внутренней полости оправки; г – штамповка обратного конуса

На основе конструктивно-технологического анализа особенностей оправки и существующих технологических процессов для повышения стойкости инструмента предложен технологический процесс горячей штамповки оправки прошивного стана, включающий операции осадки исходной заготовки, горячей штамповки наружного профиля получаемой поковки, выдавливание внутренней полости оправки, открытой штамповки заднего конического участка оправки. При этом для улучшения условий работы и повышения стойкости инструмента для выдавливания внутренней полости оправки предложено после горячей штамповки наружного профиля производить предварительное выдавливание и окончательно формировать внутреннюю полость и задний конический участок оправки.

При моделировании в программе QForm определяли износ инструмента от нормальных и касательных напряжений с учетом скорости движения металла заготовки относительно инструмента, предела текучести материала, времени контакта заготовки с инструментом.

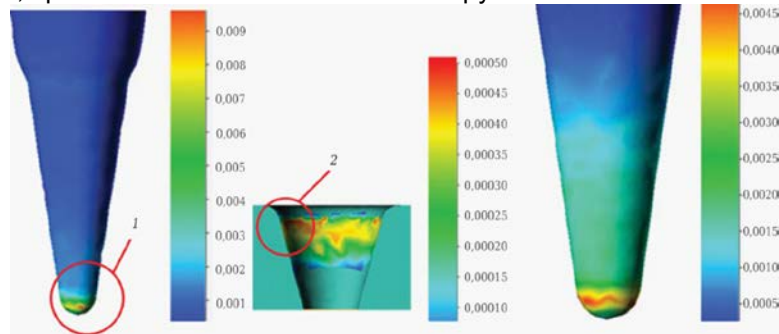


Рисунок 2. Влияние размеров пуансона на третьем переходе на его износ

### III. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследования износа инструмента на третьем переходе показывают, что при выдавливании полости пуансоном, раз меры которого соответствуют полости готовой поковки, наибольший износ наблюдается на носике пуансона 1 и в зоне перехода конуса в конус 2. При этом значение коэффициента, характеризующего интенсивность износа носика пуансона за цикл штамповки, составляет 0,008–0,009, на переходной части 0,0004–0,0005. При использовании для выдавливания полости пуансона с увеличенным поперечным сечением ( $R = 17,5$  мм вместо  $r = 9,5$  мм) максимальный износ наблюдается также на нижней части пуансона. Значение коэффициента, характеризующего интенсивность износа носика пуансона за цикл штамповки в этом случае, составляет 0,004–0,0045, т. е. интенсивность износа инструмента при увеличении его размеров уменьшилась в 2 раза. Полученный результат свидетельствует о целесообразности использования предложенной технологии для повышения стойкости инструмента при горячей штамповке поковок с глубокими полостями.

### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Моделирование процесса горячей штамповки оправки прошивного стана / А. А. Мышечкин, В. С. Юсупов, Е. В. Преображенская, С. В. Скрипник // Сталь. – 2022. – № 10. – С. 30-34.
- [2] Определение оптимальных параметров процесса горячей объемной штамповки оправки прошивного стана моделированием в программе QForm / А. А. Мышечкин, В. С. Юсупов, С. В. Скрипник // Прокатное производство. Приложение к журналу "Технология металлов". – 2023. – № 21. – С. 9-16.
- [3] Разработка и исследование цифровым моделированием в программе QFORM технологического процесса горячей штамповки двухслойных деталей / А. А. Мышечкин, С. В. Скрипник // Заготовительные производства в машиностроении. – 2024. – Т. 22, № 8. – С. 353-359.
- [4] Исследование цифровым моделированием процесса горячей объемной штамповки поковок с глубокими полостями и обратным конусом / А. А. Мышечкин, В. В. Зуев, Е. В. Преображенская, С. В. Скрипник // Вестник МГТУ "Станкин". – 2024. – № 1(68). – С. 108-118.
- [5] Технологическое моделирование процесса горячей штамповки двуслойных поковок с глубокими полостями и обратным конусом / А. А. Мышечкин, И. Н. Кравченко, В. В. Зуев [и др.] // Металлург. – 2024. – № 2. – С. 65-70.

### DEVELOPMENT OF TECHNOLOGY FOR STAMPING MANDRELS OF SEWING MILLS IN ORDER TO INCREASE TOOL DURABILITY

E.V. Preobrazhenskaya, A.A. Myshechkin, S.V. Skripnik

MIREA – Russian Technological University, Moscow, Russian Federation, [Skripnik53@yandex.ru](mailto:Skripnik53@yandex.ru)

Abstract: A new technological process for manufacturing forgings with deep cavities by hot stamping is proposed, which reduces heating and specific forces on the tool, as well as increases its durability. The developed technology includes the operations of precipitation of the initial workpiece, hot stamping of the outer profile of the resulting forging, extrusion of the inner cavity of the mandrel and open stamping of the rear conical section of the mandrel.

Keywords: Modeling, QForm program, hot volumetric shaping, stamp.

УДК 621.3

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СРЕДСТВ МОДЕЛИРОВАНИЯ ХАРАКТЕРИСТИК СОЛНЕЧНЫХ ПАНЕЛЕЙ ПРИ ПРОЕКТИРОВАНИИ ИХ ОТКАЗОУСТОЙЧИВОСТИ

Дик К.С.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
Минск, Республика Беларусь, [kanstantind@gmail.com](mailto:kanstantind@gmail.com)

Аннотация: В статье рассматривается результат исследования эффективности использования программных средств для выявления аномалий в работе солнечных панелей, что позволяет повысить эксплуатационные характеристики оборудования. Исследуемые программные средства используют два разных подхода при обнаружении аномалий и неисправностей: с использованием цифрового двойника и искусственной нейронной сети – автокодировщика. В статье приводится описание структурной схемы эксперимента, где данные телеметрии собираются с помощью специального оборудования, а затем анализируются с использованием двух программных средств. Результаты эксперимента показывают, что программное средство на основе автокодировщика эффективнее с точки зрения времени и вычислительных ресурсов на 33,3 – 42,5 % по сравнению с программным средством на основе цифрового двойника, обеспечивая одинаковую точность обнаружения аномалий.

Ключевые слова: моделирование параметров солнечной панели, цифровой двойник, автокодировщик.

### I. ВВЕДЕНИЕ

Развитие приоритетных направлений научно-технической в значительной степени зависит от своевременного создания и практического применения современных программных средств, которые обеспечивают повышение эксплуатационных характеристик электронного оборудования путём поиска аномалий в их работе, в том числе полупроводниковых ячеек солнечных панелей. Можно отметить актуальность разработки программных средств, на основе новых методик обнаружения аномалий в работе солнечных электростанций на уровне солнечных панелей и полупроводниковых ячеек путём анализа телеметрических данных элементов этих электростанций [1–5].

При этом важное значение имеет оценка эффективности использования разработанных и применяемых программных средств, основанных на разных методиках поиска аномалий в работе солнечных панелей.

Целью работы явилась сравнительная оценка эффективности использования двух подходов для поиска аномалий и неисправностей в работе солнечных панелей при проектировании их отказоустойчивости. Оба подхода опираются на результат телеметрии, но один использует физико-математическое моделирование создавая цифровой двойник [1–3], а другой искусственную нейронную сеть [4, 5].

### II. ИССЛЕДОВАНИЕ И РЕЗУЛЬТАТЫ

Для построения цифрового двойника солнечной панели были использованы результаты телеметрии солнечной электростанции с установленной мощностью 45,2 кВт, оборудованную 272 солнечными панелями M190 (STORM Energy GmbH, Germany). Структурная схема включения солнечных панелей и системы сбора телеметрической информации отражена на рисунке 1.

Напряжение  $V$  и температура  $T$  в каждой солнечной панели измеряется каждые 15 минут с фиксацией даты и времени  $t$  посредством специального датчика Sensor (SunSniffer GmbH & Co, Germany). Данные с группы семнадцати последовательно включенных панелей собираются в устройстве считывания датчиков – String Reader (SunSniffer GmbH & Co, Germany), который дополнительно измеряет силу тока  $I$  в цепи этих панелей. Датчик уровня энергетической экспозиции Irradiance Sensor Si-13TC (Ingenieurbüro Mencke & Tegtmeyer, Germany) обеспечивает измерение её значения  $G$  (уровня освещённости) и передачу измеренного значения в шлюз – Gateway (SunSniffer GmbH & Co), который в свою очередь записывает все результаты телеметрии в базу данных на сервер. В эксперименте были использованы 20160 векторов  $(t, I, V, T, G)$  собранные в течение 7 месяцев работы солнечной электростанции. Объём информации об векторах  $(t, I, V, T, G)$  составил 269 Mb для всего времени наблюдений. Детально принцип работы использованного в исследовании цифрового двойника отражен в [1].

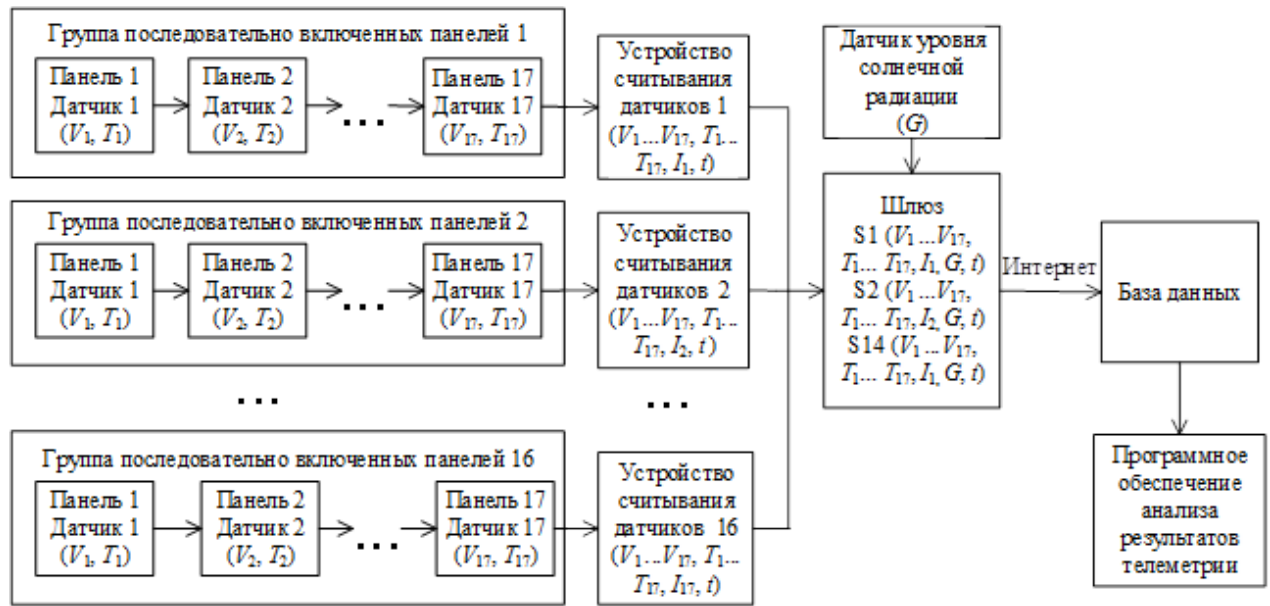


Рисунок 1. Структурная схема солнечной электростанции и системы сбора телеметрической информации

Результатом работы цифрового двойника (API) являются следующие параметры, определенные в смоделированных стандартных условиях испытаний (Standard Test Conditions, STC) для каждой солнечной панели электростанции: выходная мощность в MPP, напряжение и сила тока в MPP, последовательное и параллельное электрическое сопротивление, ток короткого замыкания и напряжение холостого хода.

Для анализа данных использовались нормализованные значения мощностей в MPP  $P_N$  для всех солнечных панелей. Рассчитанные значения сравнивались с медианными значениями и по результатам сравнения относились к дефектным или в пределах нормы. При этом анализ осуществлялся в пределах одного месяца (статический анализ) или в сравнении от месяца к месяцу (динамический анализ). Алгоритм программного обеспечения отражён на рисунке 2.

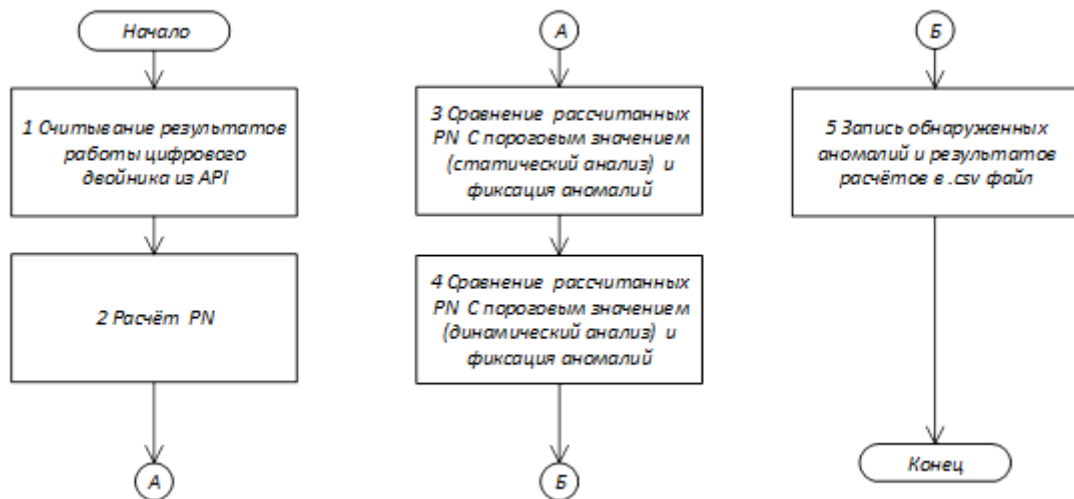


Рисунок 2. Алгоритм работы программного обеспечения для поиска аномалий в работе солнечных панелей, разработанного на основе цифрового двойника

Второе программное обеспечение имеет в основе разработанную искусственную нейронную сеть, представляющую собой автокодировщик и состоит из пяти слоёв нейронов. Для определения критериев детектирования солнечных панелей в аномальном режиме работы были использованы средне-дневные отклонения измеренных значений силы тока  $\Delta I$  и напряжения  $\Delta U$  от восстановленных автокодировщиком, а также количество строк  $l$  в векторе, средние отклонения в которых по напряжению или по силе тока превысили установленное значение. Алгоритм работы программного обеспечения на основе нейронной сети отражён на рисунке 3.

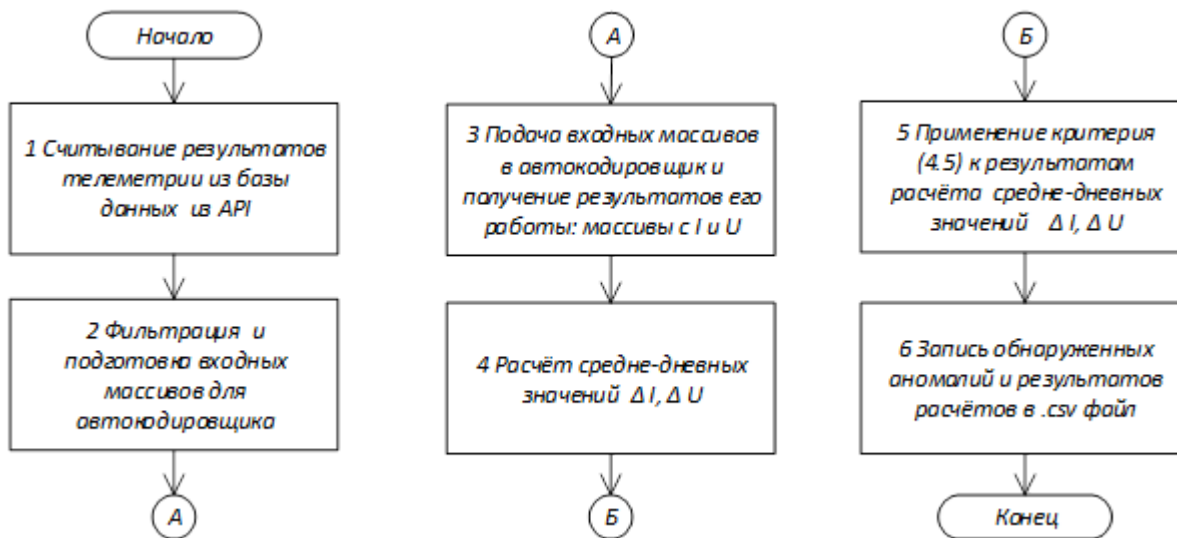


Рисунок 3. Алгоритм работы программного обеспечения для поиска аномалий в работе солнечных панелей, разработанного на основе предложенной методики

Вместе оба программных средства обеспечивают все расчёты, необходимые для применения трёх разработанных методик поиска аномалий в работе солнечных панелей электростанции: статический анализ, динамический анализ и анализ на основе результатов работы автокодировщика.

Далее была проведена оценка затрат времени на выполнение всех математических и алгоритмических вычислений для поиска аномалий в работе 186 солнечных панелей экспериментальной электростанции с использованием данных телеметрии, собранных в течение 6 месяцев. Все операции осуществлялись с использованием персонального компьютера с характеристиками: процессор Intel Core i9 (3,2 ГГц), объём оперативной памяти 8 GB. Все расчёты были повторены 7 раз. Затраты времени составили:

- для расчётов параметров цифрового двойника и выполнения операций 1 – 6 алгоритма поиска аномалий (рисунок 1) необходимо 7 – 8 ч.;
- для обучения искусственной нейронной сети типа автокодировщик и выполнения операций 7 – 10 алгоритма поиска аномалий (рисунок 2) необходимо 4 – 4,6 ч.

При этом, основные затраты аппаратной мощности и времени при использовании алгоритмов основанных на отклонении нормализованных значений мощностей в точке максимальной мощности приходятся на операции, связанные с работой цифрового двойника (80 – 83 %), а при использовании алгоритмов основанных на автокодировщике – обучение искусственной нейронной сети (86 – 89 %).

Таким образом, методика и алгоритм поиска аномалий в работе солнечных панелей основанная на применении автокодировщика эффективнее в использовании в 1,5 – 1,75 раза или на 33,3 – 42,5 %.

### III. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Оценка ресурсов, требуемых для выполнения математических и алгоритмических операций реализующих поиск аномалий в работе солнечных панелей электростанции, показала, что основные затраты аппаратной мощности и времени приходятся на операции, связанные с работой цифрового двойника и обучением искусственной нейронной сети типа автокодировщик (83 – 86 %). Обе эти операции выполняются один раз для выбранного для анализа срока.

Установлено, что методика и алгоритм поиска аномалий в работе солнечных панелей основанная на применении автокодировщика эффективнее в использовании в 1,5 – 1,75 раза или на 33,3 – 42,5 %, чем методики, основанные на отклонении нормализованных значений мощностей в точке максимальной мощности. При этом показывают одинаковую точность в поиске аномалий.

### БЛАГОДАРНОСТЬ

Автор выражает благодарность директору ООО «Сенсотроника» Асимову Р.М. за предоставленные данные телеметрии электростанции и доступ к API цифрового двойника.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Валевиц, С.В. Информационное обеспечение мониторинга технического состояния солнечных электростанций / С.В. Валевиц, В.С. Осипович, И. Крузе, Р.М. Асимов // Информационные технологии. – 2020. – Т. 26, № 10. – С. 594–601.
- [2] Методика и программное средство поиска аномалий в данных телеметрии солнечной электростанции / К. С. Дик [и др.] // Информатика. – 2023. – Т. 20, № 2. – С. 96–110.
- [3] Methods and software tool for automating static and dynamic search for anomalies in telemetry data of a solar power plant / K.S. Dzik [et al.] // International Journal of Advanced Research. – 2023. – Vol. 11, No. 08. – pp. 143–155.
- [4] Methodology and Software for Searching for Anomalies in Telemetry Data of a Solar Power Plant Based on an Artificial Neural Network – Autoencoder // / K.S. Dzik [et al.] // International Journal of Advanced Research. – 2024. – Vol. 12, No. 06. – pp. 1009–1018.
- [5] Метод и программное средство поиска аномалий в данных телеметрии солнечной электростанции на основе искусственной нейронной сети – автокодировщик / К.С. Дик, Н.И. Мухуров, И. Крузе, Р.М. Асимов, В.С. Осипович // Проблемы физики, математики и техники. – 2024. – № 3 (60). – С. 100.

USING MODELING TOOLS FOR SOLAR PANEL CHARACTERISTICS IN DESIGNING THEIR FAULT TOLERANCE

K. Dzik

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus,  
[kanstantind@gmail.com](mailto:kanstantind@gmail.com)

**Abstract:** This article presents the results of a study on the effectiveness of software tools for detecting anomalies in the operation of solar panels, aimed at improving equipment performance. The software tools examined employ two different approaches to anomaly and fault detection: one using a digital twin and the other an artificial neural network, specifically an autoencoder. The article describes the experimental setup, where telemetry data is collected using specialized equipment and subsequently analyzed with the two software tools. The experiment results indicate that the autoencoder-based tool is 33.3–42.5% more efficient in terms of time and computational resources compared to the digital twin-based tool, while providing the same level of accuracy in anomaly detection.

**Keywords:** solar panel parameter modeling, digital twin, autoencoder.

УДК 621.389

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ ГРАДИЕНТОВ В КРИСТАЛЛАХ АКУСТООПТИЧЕСКИХ ФИЛЬТРОВ

Журавлёв В.И., Наумович Н.М., Ревин В.Т.

Центр 1.6, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
Минск, Республика Беларусь, [vadzh@bsuir.by](mailto:vadzh@bsuir.by)

Аннотация: Рассматривается компьютерное моделирование нагрева кристалла при его работе в составе акустооптического фильтра. Показано возникновение градиента температур при различных значениях подводимой мощности и отсутствия теплоотводящих компонентов, что может ухудшить характеристики фильтра.

Ключевые слова: акустооптический фильтр, кристалл, преобразователь, нагрев, градиент температуры.

### I. ВВЕДЕНИЕ

Акустооптические фильтры (АОТФ) получили широкое распространение в различных областях визуализации. Основанные на анизотропной дифракции широкополосного света ультразвуком в кристаллических средах, такие приборы обеспечивают хорошее сочетание оптических и конструктивных характеристик [1-2]. Для реализации высокого разрешения и широкого диапазона углов отклонения в АОТФ требуются большой размер кристалла и широкая частотная полоса пропускания. Соответственно, таким конструкциям нужно больше радиочастотной мощности, что может привести к повышению температуры разогрева и вызвать значительный температурный градиент в кристалле.

Нагрев акустооптических устройств во время работы сильно влияет на их рабочие параметры: дифракционную эффективность, временную стабильность, направление и распределение дифрагированных пучков. Этот эффект особенно заметен для приборов, использующих акустооптические кристаллы, где акустическая волна распространяется в объеме кристалла, когда уровни приложенной электрической и акустической мощности относительно высоки [3-4].

В АОТФ, использующих сдвиговые акустические волны с высоким коэффициентом поглощения, большое количество акустической энергии поглощается даже при однократном прохождении через кристалл. Кроме того, часто нужно учитывать потери и в самом преобразователе.

Изменение температуры может влиять на временную стабильность луча. Поэтому эффекты самонагрева необходимо учитывать при проектировании любых акустооптических устройств. Одним из путей решения таких задач является разработка тепловых моделей АОТФ и выполнение соответствующего моделирования распространения тепловых полей.

### II. ПОСТРОЕНИЕ ТЕПЛОВОЙ МОДЕЛИ

Кристалл фильтра обладает низкой теплопроводностью, поэтому тепловые градиенты могут возникнуть в нем даже при эффективном отводе тепла от стенок кристалла. Особенно важна поверхность самого преобразователя, поскольку потери в нем могут быть дополнительным источником выделения избыточной мощности. Распределение тепла в объеме кристалла определяется как акустическим поглощением в кристалле, так и мощностью, выделяемой непосредственно в преобразователе.

Противоположная преобразователю лицевая сторона обычно не параллельна ему и не перпендикулярна нижней и верхней сторонам кристалла и наклонена под заданным углом, чтобы избежать отражения акустической волны в плоскость взаимодействия. Корпус кристалла АОТФ имеет большое значение с тепловой точки зрения, поскольку тепло, выделяемое в устройстве, передается в окружающую среду через корпус. Обычно для эффективного отвода тепла кристалл садится на контактные поверхности и элементы конструкции с высокой теплопроводностью. Однако в текущей конфигурации рассматривается только модель кристалла с соответствующими граничными условиями.

Для проведения теплового анализа используется заданная конфигурация плоских источников мощности для учета акустического поглощения и нагрева преобразователя. Акустическое поглощение вносит значительный вклад в тепловые характеристики АОТФ в основном из-за относительно высокого коэффициента поглощения сдвиговой волны в кристалле парателлурита ( $\text{TeO}_2$ ). Нагрев преобразователя вызван потерями на рассеивание тепла в областях преобразователя, которые включают омические потери электродов, диэлектрические потери пьезоэлектрического кристалла и акустическое затухание [5]. При этом поглощенная мощность может быть получена из разности

мощностей между соседними точками. Акустическая мощность  $P$  в точке  $x$  на пути распространения определяется по следующему выражению [6]:

$$P = P_0 10^{\frac{-\alpha f^2 x}{10}},$$

где  $P_0$  – подводимая акустическая мощность,  $\alpha$  – коэффициент акустического поглощения,  $f$  – рабочая частота.

### III. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Рассматривается наихудший случай, когда вся поглощенная акустическая энергия преобразуется в тепло. Для моделирования тепловых характеристик АОТФ на основе парателлуриата использовался метод конечных элементов для рассматриваемой конфигурации кристалла. Учитывалась теплопередача за счет теплопроводности и конвекции. Проведено предварительное тепловое моделирование имеющихся кристаллов для различной рассеиваемой мощности. Для этого кристалл  $\text{TeO}_2$  представляется как анизотропное тело с несколькими тепловыми источниками. Рассматривается численное решение методом конечных элементов.

Результаты моделирования кристаллов показывают нагрев и неравномерное распределение температуры в объёме кристалла. Уже при рассеиваемой мощности 1-1,5 Вт может наблюдаться наличие градиента температуры в 8-15 градусов (рис. 1).

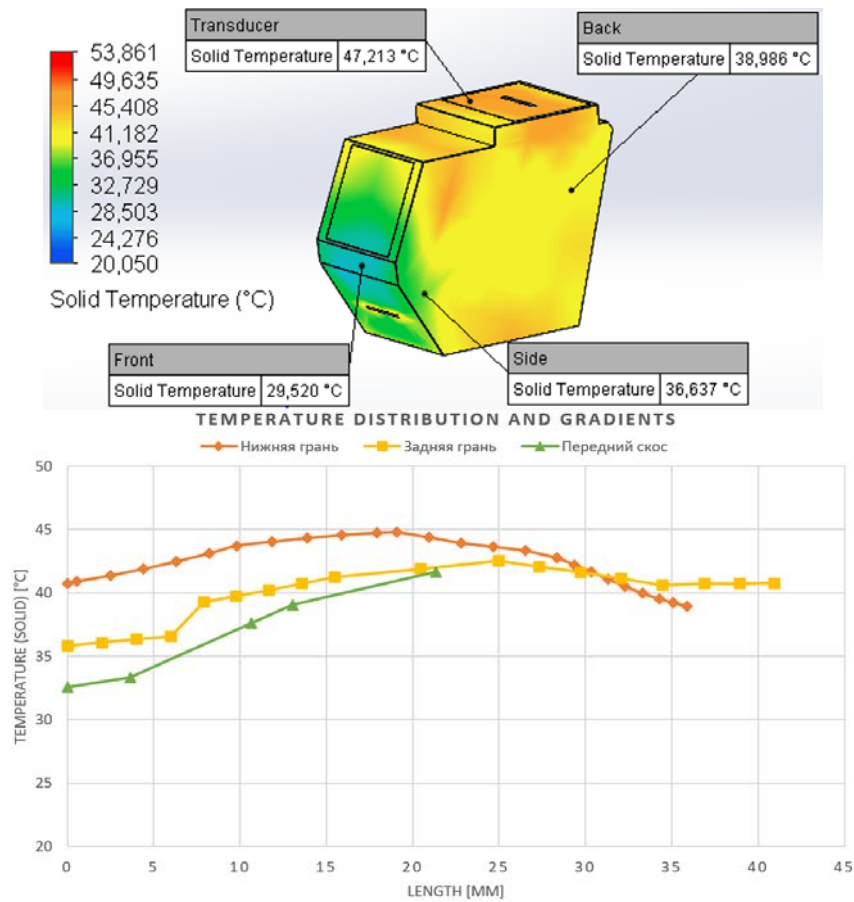


Рисунок 1. Распределение тепла в кристалле и соответствующие градиенты температуры

При увеличении акустической мощности возрастает и температура нагрева, и градиент усиливается, что связано как низкой теплопроводностью. Как известно, для обеспечения работы АОТФ с кристаллом из парателлуриата является оптимальным диапазон температур + 30...40 °C [7]. Однако градиент температуры по всему кристаллу и локальное повышение температуры при уровне акустической мощности от 1,5 Вт может привести к нарушению в работе прибора.

Таким образом, акустическое поглощение является доминирующим источником нагрева вследствие выделения избыточной мощности. Оценивая тепловые характеристики кристалла с помощью тепловой модели, можно минимизировать тепловые эффекты при проектировании АОТФ и оптимизировать параметры конструкции.



ЛИТЕРАТУРА

- [1] O. V. Shakin, V. G. Nefedov and P. A. Churkin Application of Acoustooptics in Electronic Devices / IEEE Wave Electronics and its Application in Information and Telecommunication Systems (WECONF), St. Petersburg, Russia, 2018. – P.1-4,
- [2] Sudipta Ghosh, *et.al.* Acousto-Optic Switches/ Optical Switching: Device Technology and Applications in Networks – IEEE, Wiley, 2022. – P.73-91.
- [3] Манцевич С.Н., Юхневич Т.В., Волошинов В.Б. Исследование влияния температуры на функционирование акустооптических фильтров // Оптика и спектроскопия. 2017. – Т. 122. № 4. – С.694–700.
- [4] S. N. Mantsevich, *et.al.* Quasi-Collinear AOTF Spectral Transmission Under Temperature Gradients Aroused by Ultrasound Power Absorption // IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics and Frequency Control. 2022. – vol.69, no.12. – P.3411-3421.
- [5] Maak, Pal, *et.al.* Thermal behavior of acousto-optic devices: Effects of ultrasound absorption and transducer losses // Ultrasonics. 2011. – vol.51. – P.441–451.
- [6] A.P. Goutzoulis, D.R. Pape, S.V. Kulakov Design and Fabrication of AcoustoOptic Devices. – Marcel Dekker Inc., New York, 1994. – 497 pp.
- [7] Mantsevich, Sergey N., T. V. Yukhnevich and Vitaly B. Voloshinov. Examination of the temperature influence on the acousto-optic filters performance // Optics and Spectroscopy 122 (2017). – P.675 - 681.

MODELING OF THERMAL GRADIENTS IN ACOUSTO-OPTIC FILTER CRYSTALS

V. Zhuravliov, N. Naumovich, V. Revin

Center 1.6, Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus,  
[vadzh@bsuir.by](mailto:vadzh@bsuir.by)

Abstract: Computer modeling of acousto-optic filter crystal heating is considered. It shows the appearance of temperature gradient at different values of input power and absence of heat dissipating components. This may be the cause of filter characteristic degradation.

Keywords: acousto-optic filter, crystal, transducer, heating, temperature gradient.

УДК 620.3

## ЗОННАЯ СТРУКТУРА И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА КОБАЛЬТ-СОДЕРЖАЩИХ СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА

Шапошников В.Л., Кривошеева А.В., Борисенко В.Е.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
Минск, Республика Беларусь, [shaposhnikov@bsuir.by](mailto:shaposhnikov@bsuir.by)

Аннотация: В рамках компьютерного моделирования проведена атомно-структурная оптимизация и рассчитаны зонные спектры и плотности электронных состояний четырехкомпонентных кобальт-содержащих сплавов Гейслера в зависимости от входящих в них химических элементов и их позиций. Выявлены факторы, влияющие на их электронные и магнитные свойства, основным из которых является стехиометрический состав. В результате установлено, что рассмотренные соединения являются ферромагнетиками. Выявлены структурные особенности, при которых значения спиновой поляризации достигают 100%, т.е. соединения становятся полуметаллами. Установлено, что значения температуры Кюри лежат в температурном диапазоне от 480 до 1400 К и в основном оказываются пропорциональны полному магнитному моменту системы.

Ключевые слова: сплав Гейслера, зонный спектр, плотность электронных состояний, магнитный момент, температура Кюри.

### I. ВВЕДЕНИЕ

Последние десятилетия интерметаллические соединения Гейслера являются объектами пристального изучения благодаря их исключительным качествам, типа полуметаллического магнетизма, эффекта памяти магнитной формы, гигантского магнитокалорического эффекта, термоэлектрического эффекта и сверхпроводимости [1, 2]. Эти свойства успешно применяются, например, полуметаллическая ферромагнитных материалах используется в спинтронных приборах, таких как спиновые инжекторы, магнитные туннельные переходы и память с произвольным доступом, основанная на переносе спинового момента. Полуметаллические ферромагнетики (ПМФ) представляют собой привлекательный класс материалов благодаря новым электронным и магнитным свойствам, в частности, они обладают 100% спиновой поляризацией. Из-за потенциальных применений в спинтронике [2] ПМФ интенсивно исследуются как экспериментально, так и теоретически, особенно после предсказания путем компьютерного моделирования полуметаллического ферромагнетизма в сплаве Гейслера NiMnSb [3].

Из-за высоких значений магнитного момента и температуры Кюри в качестве ПМФ отлично подходят сплавы Гейслера на основе кобальта ( $\text{Co}_2\text{YZ}$ ) [4], одним из наиболее перспективных является  $\text{Co}_2\text{CrAl}$  благодаря теоретически предсказанным полуметаллическим свойствам и высокому значению спиновой поляризации в упорядоченных структурах. Недавние исследования сообщают о повышении температуры Кюри со сдвигом уровня Ферми в полуметаллической запрещенной зоне  $\text{Co}_2\text{CrAl}$ , путем частичной замены атомов хрома на атомы металлов с более высокой валентностью [5].

Большой магниторезнитный эффект также наблюдался в упорядоченных сплавах  $\text{Co}_2\text{Cr}_{0.6}\text{Fe}_{0.4}\text{Al}$  [6]. Кроме того, показано относительно высокое значение туннельного магнитосопротивления (26,5% при 5 К и 16% при комнатной температуре) магнитного туннельного перехода на основе упорядоченной структуры B2 [7]. В работе [8] был синтезирован сплав Гейслера  $\text{Co}_2\text{Cr}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Al}$ , демонстрировавший высокие значения спиновой поляризации и температуры Кюри. Для соединения  $\text{Co}_2\text{Cr}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Al}$  были проведены различные экспериментальные и теоретические исследования.

Большинство изучаемых магнитных сплавов Гейслера представляют собой тройные интерметаллические соединения вида  $\text{X}_2\text{Y}'\text{Z}$ , где X и Y' являются переходными металлами, а Z – элемент основной группы [1]. Очевидно, что новые магнитные свойства в этих соединениях возникают из-за наличия незаполненной d оболочка у одного из переходных металлов. Было обнаружено, что за появление новых явлений, наблюдаемых в этих материалах, отвечает сложная связь заселенностей магнитных элементов в подрешетках с различными симметриями. Если каждая подрешетка в сплаве Гейслера занята другим элементом, что приводит к соединению  $\text{XX}'\text{Y}'\text{Z}$ , где магнитный элемент X' отличен от X, то в такой структуре будет больше подклассов (в зависимости от заселенностей подрешеток трех магнитных элементов), чем возможно в соединениях  $\text{X}_2\text{Y}'\text{Z}$ . Следовательно, четырехкомпонентные соединения Гейслера будут обладать более гибкими возможностями выбора компонентов и их расположения в узлах решетки, что может обеспечить получение новых материалов с заданными свойствами. Поэтому в последнее время началось исследование четырехкомпонентных соединений Гейслера. Довольно много соединений в этом семействе оказались перспективными для

спинтронных применений, демонстрирующих полуметаллические свойства и высокую температуру Кюри. При этом большинство из них остается недостаточно изучено как теоретически, так и экспериментально.

Таким образом, компьютерное моделирование свойств кобальт-содержащих четырехкомпонентных сплавов Гейслера  $\text{Co}_2\text{XY}_{1-t}\text{Z}_t$ , а также способов их модификации является актуальной задачей.

## II. МЕТОДИКА РАСЧЕТА

Согласно имеющимся экспериментальным данным, четырехкомпонентные сплавы Гейслера  $\text{Co}_2\text{XY}_{1-t}\text{Z}_t$  формируются в упорядоченной кубической решетке типа  $L2_1$  (пространственная группа  $Fm\bar{3}m$ ) с четырьмя взаимопроникающими гранецентрированными кубическими подрешетками [1]. Элементарная ячейка состоит из 16 атомов, по 4 в каждой подрешетке, из которых две позиции занимают атомы кобальта и по одной позиции – атомы X и Y или Z. В качестве атомов Y и Z были выбраны атомы переходных металлов (Cr, Mn, Fe), в качестве атомов X – атомы III (Al, Ga) и IV групп (Si, Ge, Sn) периодической системы элементов.

Все вычисления из первых принципов в рамках теории функционала плотности выполнены с помощью программы VASP [9]. Для оптимизации кристаллической структуры использовался метод проецированных присоединенных плоских волн (PAW) в приближении PBE [10]. Первоначально проводилась атомно-структурная оптимизация кристаллических решеток трехкомпонентных сплавов Гейслера  $\text{Co}_2\text{XY}$ , после чего осуществлялось частичное замещение одних атомов переходных металлов другими атомами. Значение энергии отсечки базиса электронных плоских волн составляло 460 эВ. Для структурной оптимизации использовалась Г-центрированная сетка из  $9 \times 9 \times 9$  k-точек.

## III. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

В результате проведенного моделирования электронных свойств установлены энергетически стабильные конфигурации ряда соединений вида  $\text{Co}_2\text{XY}$  и  $\text{Co}_2\text{XY}_{1-t}\text{Z}_t$ , для которых определены параметры решетки, атомные позиции, а также полные магнитные моменты. Показано, что все исследованные структуры сохраняют кубическую симметрию решетки. Анализ численных данных показал, что в трехкомпонентных соединениях  $\text{Co}_2\text{XY}$  постоянные решетки изменяются от 0,5621 нм для  $\text{Co}_2\text{FeSi}$  до 0,5988 нм для  $\text{Co}_2\text{FeSn}$ . В рамках одной группы (Al–Ga, Si–Ge–Sn) с ростом номера элемента наблюдается рост значений постоянной решетки, равно как и объема ячейки. Аналогичная тенденция наблюдается для четырехкомпонентных сплавов Гейслера  $\text{Co}_2\text{XY}_{1-t}\text{Z}_t$ .

В сплавах Гейслера  $\text{Co}_2\text{XY}$  наблюдается увеличение значений полного магнитного момента при переходе от элементов III группы (Al, Ga) к элементам IV (Si, Ge, Sn) в позиции Y. При этом в рамках одной группы в позиции Y локальный магнитный момент на одном элементе X практически не меняется. Также наблюдается рост значений магнитного момента в ряду переходных металлов Cr–Mn–Fe в позиции X. Это может быть связано с числом валентных электронов в каждом соединении. Аналогичная тенденция наблюдалась для четырехкомпонентных сплавов Гейслера  $\text{Co}_2\text{XY}_{1-t}\text{Z}_t$ .

Качественно зонные спектры для трехкомпонентных и четырехкомпонентных сплавов Гейслера подобны, также можно наблюдать аналогичное поведение кривых у рассмотренных соединений в ряду атомов из одной группы. Это можно объяснить тем, что исследованные сплавы Гейслера имеют одинаковую кристаллическую решетку и отличаются лишь входящими элементами, некоторые из которых имеют схожую электронную конфигурацию. Сравнение полученных зонных спектров и структурных параметров с имеющимися результатами теоретических расчетов других авторов показало хорошее согласие, что говорит о корректности проведенного моделирования и правильности выбора обменного корреляционного функционала. Из представленных спектров можно сделать вывод, что в то время как одни соединения являются полуметаллами, т.е. проявляют полупроводниковые свойства в одном спиновом канале и металлические в другом (как  $\text{Co}_2\text{CrFeSn}$ ,  $\text{Co}_2\text{CrMnGe}$  и  $\text{Co}_2\text{MnCrSi}$ ), другие (как  $\text{Co}_2\text{CrFeAl}$ ) являются металлическими в обоих спиновых каналах. Соединений, демонстрирующих полупроводниковое поведение в обоих спиновых каналах, среди исследованных материалов обнаружено не было. Выявленные полуметаллические соединения (такие как  $\text{Co}_2\text{CrMnAl}$ ,  $\text{Co}_2\text{MnCrGe}$ ,  $\text{Co}_2\text{MnCrSi}$ ,  $\text{Co}_2\text{CrMnSn}$ ,  $\text{Co}_2\text{MnCrGa}$ ), в которых атомы железа не находятся в позиции Y, представляют наибольший интерес, т.к. они будут обладать 100% спиновой поляризацией, что имеет практическое значение для спинтроники. В качестве примера на рис. 1 и 2 представлены энергетические диаграммы полуметаллических трех- и четырехкомпонентных сплавов Гейслера соответственно.

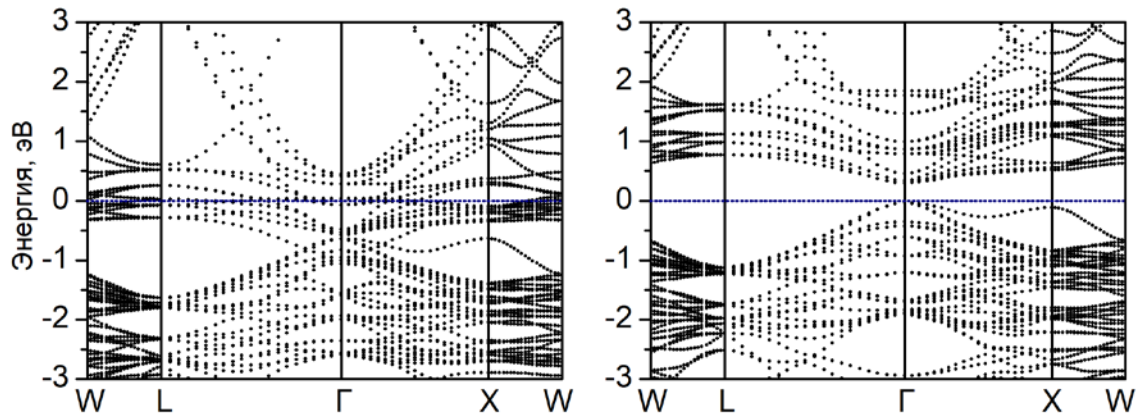


Рисунок 1. Зонная структура  $\text{Co}_2\text{Cr}_{0,75}\text{Al}_{1,25}$  в спин-вверх (слева) и спин-вниз (справа) каналах

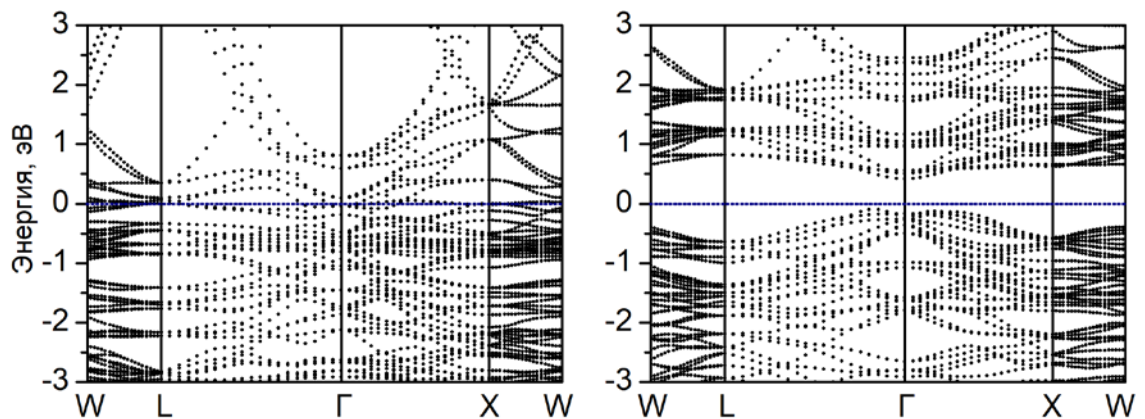


Рисунок 2. Зонная структура  $\text{Co}_2\text{MnCr}_{0,25}\text{Ga}_{0,75}$  в спин-вверх (слева) и спин-вниз (справа) каналах

С целью установления стабильного магнитного состояния оценена разность полной энергии системы в ферромагнитном (ФМ) и антиферромагнитном (АФМ) состояниях. На основании рассчитанных спектров плотностей электронных состояний (ПЭС) определена спиновая поляризация, которая оценивается как отношение разности и суммы ПЭС для электронов со спином вверх и вниз на уровне Ферми. Для оценки температуры Кюри использовалось приближение среднего поля (mean field approximation). В этом случае температура Кюри вычислялась, исходя из числа ближайших магнитных атомов в ячейке, обменного интеграла, и спина магнитного атома, пропорционального полному магнитному моменту. Для оценки обменного интеграла использовалась энергия обменного взаимодействия между магнитными атомами в ячейке, которая оценивалась как разность энергий системы, рассчитанных с ФМ и АФМ упорядочением.

Расчеты показали энергию обменного взаимодействия в диапазоне от  $-0,3$  до  $-1,1$  эВ, при этом отрицательный знак свидетельствует о том, что энергетически выгодным является ФМ состояние для всех рассмотренных соединений. Значения спиновой поляризации изменяются в широком диапазоне, достигая во многих случаях 100%, т.е. соединения становятся полуметаллами, являясь проводниками для электронов с одной спиновой ориентацией, и полупроводниками для электронов с противоположной спиновой ориентацией. Для практического применения они представляют наибольший интерес. Установлено, что это большинство исследованных четырехкомпонентных сплавов Гейслера  $\text{Co}_2\text{XY}_{1-i}\text{Z}_i$ , у которых атомы железа не находятся в позиции Y. А соединения с  $\text{Y}=\text{Fe}$  и  $\text{Z}=\text{Cr}$  обладают наиболее низкими значениями спиновой поляризации.

### III. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработана компьютерная модель кристаллической структуры четырехкомпонентных сплавов Гейслера  $\text{Co}_2\text{XY}_{1-i}\text{Z}_i$ , проведена их оптимизация и рассчитаны электронные и магнитные свойства в зависимости от стехиометрического состава. Для каждой из рассмотренных систем установлены энергетически стабильные конфигурации, определены электронные состояния вблизи уровня Ферми, полные и локальные магнитные моменты, а также выявлены факторы, влияющие на электронные и магнитные свойства. Установлены соединения, обладающие 100% спиновой поляризацией.

Определены значения температуры Кюри, которые лежат в широком температурном диапазоне. Полученные сведения могут быть использованы при выборе сплавов Гейслера для создания новых спинтронных элементов обработки информации.

#### БЛАГОДАРНОСТЬ

Работа выполнена в рамках проекта № Т23МЭ-016 Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (БРФФИ).

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Heusler Alloys. Properties, Growth, Applications / C. Felser, A. Hirohata (Ed.): Springer Series in Materials Science. – Vol. 222, 2016.
- [2] Kundu, A. New quaternary half-metallic ferromagnets with large Curie temperatures / A. Kundu, et al. // Sci. Rep. – 2017. – Vol. 7, № 1803. – P. 1–15.
- [3] de Groot, R. A. New class of materials: half-metallic ferromagnets / R. A. de Groot et al. // Phys. Rev. Lett. – 1983. – Vol. 50, № 25. – P. 2024–2027.
- [4] Srivastava, Y. Structure and magnetic properties of  $\text{Co}_2(\text{Cr}_{1-x}\text{Fe}_x)\text{Al}$ , ( $0 \leq x \leq 1$ ) Heusler alloys prepared by mechanical alloying / Y. Srivastava et al. // J. Magnetism and Magnetic Materials. – 2017. – Vol. 433. – P. 141–147.
- [5] Gonçalves, J.N. Volume dependence of magnetic properties in  $\text{Co}_2\text{Cr}_{1-x}\text{Y}_x\text{Ga}$  (Y=Ti-Ni) Heusler alloys: A first-principles study / J.N. Gonçalves et al. // J. Magnetism and Magnetic Materials. – 2017. – Vol. 428. – P. 362–367.
- [6] Block, T. Large negative magnetoresistance effects in  $\text{Co}_2\text{Cr}_{0.6}\text{Fe}_{0.4}\text{Al}$  / T. Block et al. J. Solid State Chem. – 2003. – Vol. 176, № 2. – P. 646–651.
- [7] Buchmeier, M. Magnetic properties of polycrystalline  $\text{Co}_2\text{Cr}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Al}$  alloys / M. Buchmeier et al. // J. Magnetism and Magnetic Materials. – 2007. – Vol. 313. – P. 157–163.
- [8] De Teresa, J.M. Correlation between the synthesis conditions and the compositional and magnetic properties of  $\text{Co}_2(\text{Cr}_{1-x}\text{Fe}_x)\text{Al}$  Heusler alloys / J.M. De Teresa et al. // J. Alloys Comp. – 2008. – Vol. 450, № 1–2. – P. 31–38.
- [9] Kresse, G. Efficient interactive schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set / G. Kresse, J. Furthmüller // Phys. Rev. B. – 1996. – Vol. 54, № 16. – P. 11169–11186.
- [10] Perdew, J. P. Generalized gradient approximation made simple / J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof // Phys. Rev. Lett. – 1996. – Vol. 77, № 18. – P. 3865–3868.

#### BAND STRUCTURE AND SPIN PROPERTIES OF COBALT-CONTAINING HEUSLER ALLOYS

V.L. Shaposhnikov, A.V. Krivosheeva, V.E. Borisenko

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus,  
[shaposhnikov@bsuir.by](mailto:shaposhnikov@bsuir.by)

**Abstract:** The atomic structural optimization was carried out and the band spectra and the electronic density of states of the four-component cobalt-containing Heusler alloys were theoretically calculated, depending on the chemical elements and their positions. The stoichiometric composition was found to be the main factor affecting their electronic and magnetic properties. As a result, all the compounds considered were identified as ferromagnets. Structural features in which the spin polarization values reach 100%, i.e. the compounds become half-metal were revealed. It was established that the Curie temperature values lie in a temperature range from 480 to 1400 K and are mainly proportional to the total magnetic moment of the system.

**Keywords:** Heusler alloy, band spectrum, electronic density of states, magnetic moment, Curie temperature.

УДК 621.382

## ОСНОВНЫЕ МЕТОДИКИ ОБНАРУЖЕНИЯ АППАРАТНЫХ ТРОЯНОВ НА ЭТАПЕ ПРОЕКТИРОВАНИЯ

Воронов А.Ю., Стемпицкий В.Р.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
Минск, Республика Беларусь, [voronov.drawtoon@gmail.com](mailto:voronov.drawtoon@gmail.com)

Аннотация: увеличение разнообразия и спектров применения интегральных микросхем (далее – ИС) приводит к росту числа участников их производства и проектирования. Стороннее программное обеспечение для проектирования ИС, использование IP-блоков (Intellectual Property) других компаний значительно увеличивает риск внедрения в устройства вредоносных схем, называемых аппаратными троянами, уже на этапе проектирования. Аппаратные трояны могут вызвать изменение функциональной работы устройства, утечку информации или вывод из строя [1]. В этом тезисе рассмотрены современные и малостоящие методы обнаружения аппаратной закладки без разрушения микросхемы.

Ключевые слова: цифровая электроника, аппаратная безопасность, аппаратные трояны, ПЛИС, IP-ядра, анализ по стороннему каналу, функционально-логическое тестирование.

### ВВЕДЕНИЕ

Сегодня, наравне с программным обеспечением, аппаратная часть устройств также подвержена внедрению вредоносных схем, называемых аппаратными троянами, которые могут быть использованы для нарушения безопасности пользователя устройства. Связано это с большим распределением этапов разработки электронных устройств не только между компаниями, но и между странами и даже континентами. В таких условиях невозможно соблюсти те же требования по безопасности к аппаратной части, какими они были еще 30 – 40 лет назад, когда разработка и производство микросхемы велось в рамках одной фирмы и никогда за пределами страны-производителя. Сейчас же даже отдельные цифровые блоки принято отдавать на стороннее проектирование или вовсе использовать по лицензии IP-блоки (Intellectual Property) для уменьшения издержек, связанных с разработкой электронных устройств.

Для обнаружения аппаратных закладок применяются 2 большие группы методов: с последующим разрушением микросхемы и без. Метод с разрушением чипа основывается на изучении топологии готовой микросхемы после снятия каждого слоя металлизации с помощью оптической или электронно-лучевой микроскопии. Данный метод обладает высокой точностью, однако долог, дорогостоящ и требует специализированную лабораторию с обученным персоналом, не говоря уже о затратах на производство тестовой партии микросхем. Неинвазивные способы обнаружения более предпочтительны в связи с низкой стоимостью и возможностью обнаружения аппаратного трояна еще на этапе разработки. К данному направлению относится группа методов анализа по стороннему каналу (Side-channel analysis), с помощью которых изучаются изменения в микросхеме по потребляемой мощности, выделяемой температуре, временным задержкам и так далее.

Целью данного исследования является нахождение методики, которая при комбинации группы анализов по стороннему каналу и логического тестирования, помогала бы с достаточной и необходимой точностью определить наличие трояна в проекте на ПЛИС на этапе разработки цифровой микросхемы малого объема (до 3 тысяч элементов). Для этого в этой статье будут рассмотрены современные методы, относящиеся к анализу по стороннему каналу и логическому тестированию, и будет дана им оценка по соотношению денежных и временных издержек к получаемому результату.

### ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

Логическое тестирование заключается в создании нескольких тестовых шаблонов данных, которые должны представлять собой как стандартный поток данных, так и редкие их комбинации с целью нахождения условий активации аппаратной закладки. Если же ответы между образцом и эталоном различны, то логическое тестирование обнаружило аппаратный троян. Главная проблема такого подхода заключается в том, что для ИС большого объема (VLSI, Very Large Scale Integration) невозможно перебрать все возможные комбинации битов вместе со всеми возможными комбинациями этих тестовых посылок потому, что симуляция работы с исчерпывающим набором тестовых шаблонов данных для обнаружения всех возможных аппаратных закладок трудно выполнимо на текущих вычислительных мощностях. Связано это с тем, что при получении каждой новой посылки, изменяются состояния отдельных конечных автоматов или процессорных подсистем, регистров, защелок и т.д.,

комбинация данных на выходе которых и может вызвать отказ устройства. Для тестирования ИС с большой степенью интеграции (от 100 тысяч элементов на кристалле) можно выделить два основных подхода: разбиение схемы на малые функциональные узлы и логическое тестирование с анализом данных по стороннему каналу.

В работе [2] представлен способ, где тестируемая схема разбивалась на подсхемы. В каждой такой схеме выбирались конкретные узлы, в которых будет происходить сравнение получаемых данных с таким же узлом соседней подсхемы. Отличие ответа хоть одной такой ячейки может свидетельствовать о наличии трояна в массиве однотипных подмодулей. Данное тестирование может масштабироваться, избегая проблем, связанных с типом ИС и процессом разработки.

В работе [3] предлагается использовать масштабируемый метод генерации статистических тестов, который может генерировать высококачественный набор тестовых шаблонов для создания команд с высокой вероятностью активации встроенного произвольного трояна. Этот метод генерирует команды с учетом анализа сигналов по сторонним каналам. Такой анализ позволяет установить отклик в виде дополнительного переключения транзисторов в аппаратной закладке и определить не только наличие встроенного трояна, но и механизм его активации, включая и сам шаблон активации.

Анализ сигнала по стороннему каналу сравнивает ИС в роли “золотого образца” с тестируемой ИС по всем видам сторонних параметров, таких как напряжение, температура, задержка распространения сигнала (path delay) и т. д. По изменениям этих параметров в ходе тестирования исследуемой схемы можно предположить, что расхождение исследуемых параметров при анализе по стороннему каналу свидетельствует о наличии незаявленного дополнительного логического узла в ИС с неизвестным функционалом, который может привести к неисправности устройства, содержащего аппаратную закладку. Тем не менее, не только шум мешает обнаружению аппаратного трояна, но и малые величины изменения напряжений и тока потребления.

В работе [4] предложен метод обнаружения аппаратных закладок в ИС на основе матрицы разницы температур. Эта матрица представляет собой попиксельный анализ теплового изображения схемы за некоторое время. В эксперименте, приведенном в данной работе, добавлены также дополнительные модули для создания теплового шума для маскировки аппаратного трояна. Однако сравнение температурной матрицы исследуемого образца со встроенной аппаратной закладкой и “золотого образца” показало значительное повышение дифференциальной температуры.

В работе [5] представлен новый метод обнаружения встроенных аппаратных закладок на основе анализа задержки распространения сигнала. В этой работе предложение объединить исследуемую схему со структурой защелки, и эта структура защелки способна показать задержку, вызванную аппаратной закладкой. Этот метод позволяет решить проблему влияния изменения технологического процесса ИС и в то же время уменьшить влияние шума на эффективность анализа по стороннему каналу.

В связи с тем, что целью данной работы является нахождение методики, включающей в себя методы, требующие минимальных финансовых вложений, а также проверка этой методики на микросхеме малого объема, в качестве анализа по стороннему каналу предлагается использовать анализ изменения расчетной статической мощности и динамической мощности потребления устройства. Таким образом, используя в качестве анализа по стороннему каналу статическую потребляемую мощность и динамическую потребляемую мощность, теоретически можно определить наличие вредоносной аппаратной закладки с внутренним или внешним механизмами активации.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрены методы функционально-логического тестирования и анализа по стороннему каналу. На основе анализа временных и финансовых затрат решено для обнаружения аппаратной закладки в ИС малого объема использовать комбинацию стандартного функционально-логического тестирования всей схемы, анализа статической и динамической мощностей и используемых ресурсов ПЛИС и сравнение полученных результатов с “золотым образцом”. Данная методика будет использоваться для обнаружения аппаратных закладок с внутренним и внешним механизмом активации, а тестируемое устройство будет представлять собой обычный SPI master и SPI slave, реализованные на одном кристалле ПЛИС Spartan-7 компании Xilinx.

## ЛИТЕРАТУРА

[1] Белоус А. И., Солодуха В. А., Шведов С. В. Программные и аппаратные трояны – способы внедрения и методы противодействия. Первая техническая энциклопедия. Москва, Техносфера, 2019. 688 с.

- [2] Bazzazi, A.; Shalmani, M.T.M.; Hemmatyar, A.M.A. Hardware Trojan Detection Based on Logical Testing. J. Electron. Test. 2017, 33, 381–395.
- [3] Huang, Y.W.; Bhunia, S.; Mishra, P. Scalable Test Generation for Trojan Detection Using Side Channel Analysis. IEEE Trans. Inf. Forensics Secur. 2018, 13, 2746–2760.
- [4] Zhong, J.X.; Wang, J.Y. Thermal images based Hardware Trojan detection through differential temperature matrix. Opt. Int. J. Light Electron Opt. 2018, 158, 855–860.
- [5] Zarrinchian, G.; Zamani, M.S. Latch-Based Structure: A High Resolution and Self-Reference Technique for Hardware Trojan Detection. IEEE Trans. Comput. 2017, 66, 100–113.
- [6] Xilinx Power Estimator User Guide (UG440). Santa Clara, AMD, 2023, 129 p.
- [7] Vivado Design Suite User Guide (UG901). Santa Clara, AMD, 2020, 295 p.

#### MAIN METHODS FOR DETECTING HARDWARE TROJANS AT THE DESIGN STAGE

A. Voronov, V. Stempitsky

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus,  
[voronov.drawtoon@gmail.com](mailto:voronov.drawtoon@gmail.com)

Abstract: the increasing diversity and range of application of integrated circuits (ICs) leads to an increase in the number of participants in their production and design. Third-party software for ICs design, the use of IP-blocks (Intellectual Property) of other companies significantly increases the risk of introducing malicious circuits, called hardware trojans, into devices already at the design stage. Hardware trojans can cause a change in the functional operation of the device, leak information, or disable it [1]. This thesis examines modern and low-cost methods for detecting a hardware bug without destroying the chip.

Keywords: digital electronics, hardware security, hardware trojans, FPGA, IP-cores, Side channel analysis, functional testing.



УДК 621.382

## ОБНАРУЖЕНИЕ АППАРАТНОЙ ЗАКЛАДКИ В ПРОСТЫХ ЦИФРОВЫХ УСТРОЙСТВАХ НА ОСНОВЕ АНАЛИЗА ПО СТОРОННЕМУ КАНАЛУ

Воронов А.Ю., Стемпицкий В.Р.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
Минск, Республика Беларусь, [voronov.drawtoon@gmail.com](mailto:voronov.drawtoon@gmail.com)

Аннотация: сегодня для уменьшения цикла разработки интегральных схем (далее -ИС) компании прибегают к использованию стороннего программного обеспечения проектирования ИС, внедрению сторонних IP-блоков (Intellectual Property) других фирм и производству микросхем на мощностях коммерческих фабрик, что значительно увеличивает риск внедрения в изделия аппаратных троянов. Аппаратные трояны могут вызвать изменение функциональной работы устройства, утечку информации или вывод из строя [1]. В этой статье представлен процесс внедрения аппаратного трояна в цифровой приемо-передатчик, проведен анализ полученной структуры на функциональном и схемотехническом уровне при помощи программируемых ресурсов программируемой логической интегральной схемы (далее – ПЛИС).

Ключевые слова: цифровая электроника, аппаратная безопасность, аппаратные трояны, ПЛИС, IP-ядра, Serial Peripheral Interface, Side channel analysis, функционально-логическое тестирование.

### ВВЕДЕНИЕ

Как и программное обеспечение, аппаратное обеспечение имеет риски, связанные с безопасностью, и долгое время проблемам безопасности аппаратного обеспечения не уделялось должного внимания. Распределенная и многоступенчатая процедура современной цепочки изготовления и поставок микросхем для электронной аппаратуры с использованием многих государств создает высокую опасность включения в микросхемы так называемых аппаратных закладок (аппаратных троянов).

В этой работе рассмотрены неинвазивные способы обнаружения аппаратных закладок как более предпочтительны в связи с низкой стоимостью и возможность обнаружения трояна на этапе разработки, что обеспечивается анализом по стороннему каналу (Side-channel analysis) и логическим тестированием. К анализу по стороннему каналу относится изучение изменений в микросхеме по потребляемой мощности, температуре, временным задержкам и занимаемой площади схемы на кристалле.

Цель проводимого исследования – определение эффективности анализа по стороннему каналу для обнаружения внедренного трояна в ИС. Для этого на базе программного комплекса Xilinx Vivado 2020.1 и ПЛИС семейства Spartan-7 разработан блок SPI (Serial Peripheral Interface) master и SPI slave в который будет введен функциональный аппаратный троян с внутренним механизмом активации и проводится попытка его обнаружения.

### МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЯ

Для внедрения аппаратной закладки выбран цифровой блок, изображенный на рисунке 1. Он представляет собой два SPI приемо-передатчика, которые обмениваются друг с другом информацией, хранящийся в памяти с произвольным доступом (Random Access Memory, RAM). Такая простая структура позволяет более точно оценить незаметность встраиваемой аппаратной закладки и эффективность обнаружения внедренного трояна с помощью анализа по стороннему каналу, а именно потребляемой статической и динамической мощности.

При своей нормальной работе в пакете передаваемых данных младший полубайт больше старшего на единицу, а младшие и старшие полубайты соседних байтов равны. В свою очередь SPI slave сохраняет полученные данных в блочную RAM и по команде SPI master передает их обратно. Аппаратный троян вносит функциональное изменение в работу цифрового устройства, суть которого является подмена данных, идущих из памяти в передатчик. На временной диаграмме симуляции это представлено в виде рисунках 1 и 2. На них видно, что во время передачи данных при активации трояна (сигнал trj\_led) на линии send\_data\_MasterSPI младший полубайт копируется и заменяет своим значением старший полубайт, после чего, полученная SPI slave посылка по команде отправляется обратно с уже испорченными данными.



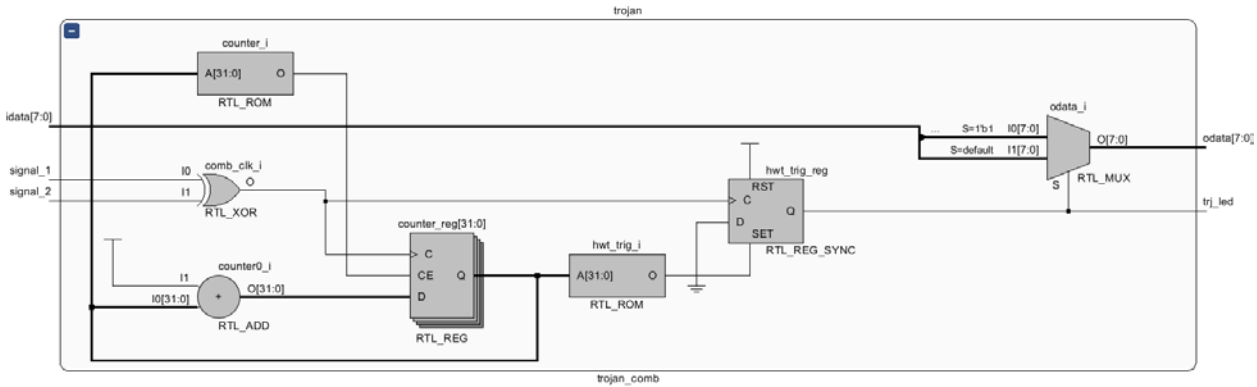


Рисунок 3. Схематическое изображение комбинационного трояна-счетчика

Для удобства сравнения полученных результатов, значения статических и динамических потребляемых мощностей, а также задействованных ресурсов ПЛИС продублированы в таблице 1. Из них видно, что во всех случаях внедрения аппаратной закладки росла потребляемая динамическая мощность устройства и самое большое значение у комбинационного трояна-счетчика. Неизменность статической мощности объясняется как малыми размерами трояна и самого цифрового устройства, так и самой архитектурой ПЛИС, где незадействованная программируемая логика сама по себе является основным потребителем мощности в простое устройства. Так же видно, что “золотой образец” занимает больше места, чем комбинация “золотой образец” и аппаратная закладка. Учитывая, что и исследуемое устройство, и его комбинация с аппаратной закладкой работают согласно ожиданиям, а стратегии оптимизации одинаковы для их обоих проектов, следует предположить, что компилятор программного обеспечения Xilinx Vivado 2020.1 просто переиспользует занятые элементы для сохранения ресурсов ПЛИС [4].

Таблица 1. Потребляемая мощность исследуемых устройств

Исследуемый проект	$P_{stat}$ , Вт	$P_{dyn}$ , Вт	$P_{общ}$ , Вт	LUT, шт.	FF, шт.
“Золотой образец”	0,068	5,180	5,248	567	356
“Золотой образец” + комбинационный троян	0,068	5,488	5,556	209	353

Дополнительно к анализу по стороннему каналу, для детектирования трояна использовалось обычное функционально-логическое тестирование в симуляции, где данные, полученные с тестируемого проекта, сравнивались с данными из “золотого образца”. Тестовая последовательность включала в себя посылки по 256 байт в 10 случайных комбинациях. С помощью такого подхода не удалось обнаружить активацию аппаратной закладки с помощью встроенных средств Xilinx Vivado 2020.1.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено исследование методики обнаружения, основанной на анализе по стороннему каналу, аппаратной закладки в цифровой блок внутренним механизмом активации. Показана эффективность данного метода при использовании инструментария программного обеспечения Xilinx Vivado 2020.1. Данная методика может быть использована для исследования эффективности обнаружения аппаратных троянов с другими механизмами активации и последующей ее доработки.

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] Белоус А. И., Солодуха В. А., Шведов С. В. Программные и аппаратные трояны – способы внедрения и методы противодействия. Первая техническая энциклопедия. Москва, Техносфера, 2019. 688 с
- [2] Prashanth Reddy G. Design and detection of hardware trojans. Hyderabad, Masaryk University, 2017. 64 p.
- [3] Xilinx Power Estimator User Guide (UG440). Santa Clara, AMD, 2023. 129 p.
- [4] Vivado Design Suite User Guide (UG901). Santa Clara, AMD, 2020. 295 p.

[5] 7 Series FPGAs Clocking Resources (UG472). Santa Clara, AMD, 2018. 114 p.

[6] 7 Series DSP48E1 Slice (UG479). Santa Clara, AMD, 2018. 58 p.

## HARDWARE TROJAN DETECTION BASED ON SIDE-CHANNEL ANALYSIS IN SIMPLE DIGITAL DEVICES

A. Voronov, V. Stempitsky

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus,  
[voronov.drawtoon@gmail.com](mailto:voronov.drawtoon@gmail.com)

Abstract: today, in order to reduce the development cycle of integrated circuits (ICs), companies resort to using third-party ICs design software, implementing third-party IP blocks (Intellectual Property) of other companies, and manufacturing microcircuits at the facilities of commercial factories, which significantly increases the risk of introducing hardware trojans into products. Hardware trojans can cause a change in the functional operation of the device, leak information, or disable it [1]. This article presents the process of inserting a hardware trojan into a digital transceiver, and analyzes the result structure at the functional and circuit levels using programmable resources of a programmable logic integrated circuit (FPGA).

Keywords: digital electronics, hardware security, hardware trojans, FPGA, IP-cores, Serial Peripheral Interface, Side channel analysis, functional testing.

УДК 538.9

## РАЗРАБОТКА УЧЕБНЫХ СТЕНДОВ НА PIC16F887 В EasyEDA

Салихов Р.Б., Абдрахманов В.Х., Остальцова А.Д.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Российская Федерация, [salikhovrb@yandex.ru](mailto:salikhovrb@yandex.ru)

Аннотация: Обзор популярных в России систем автоматизированного проектирования (САПР) с акцентом на требования к средствам трассировки печатных плат. Рассматриваются возможности облачной САПР EasyEDA и оправданность ее применения. Идея создания бюджетных лабораторных стендов на базе микроконтроллера PIC16F887 для изучения основ микропроцессорной техники. Стенды демонстрируют функции микроконтроллера, включая работу портов ввода-вывода, последовательного порта, аналого-цифрового преобразователя (АЦП), использование с двухстрочным жидкокристаллическим индикатором (ЖКИ), температурных датчиков, а также управление двигателями. Приведен опыт разработки учебного стенда на базе PIC в EasyEDA для изучения программирования микроконтроллеров. Также рассмотрены возможности сервиса [jlcpcb.com](http://jlcpcb.com) для заказа печатных плат у китайского производителя JLCPCB.

Ключевые слова: САПР, EasyEDA, проектирование печатных плат, учебные стенды, программирование микроконтроллеров PIC, микроконтроллеры фирмы Microchip.

### I. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время существует множество систем проектирования радиоэлектронной аппаратуры, информация о которых представлена в различных источниках. Лидерами на рынке САПР печатных плат являются компании Mentor Graphics (около 40% рынка), Cadence и Zuken, а также Altium, Pulsonix, Eagle и Topological Router (Eremex, Россия). Также распространены программы, такие как KiCAD и Dip Trace [1-2].

Ключевыми компонентами этих систем являются средства трассировки печатных плат, которые обеспечивают следующие функции: задание технологических параметров и ограничений на трассировку печатных плат (ПП); размещение компонентов; трассировку соединений на ПП; редактирование топологии трассировки ПП; контроль выполнения технологических нарушений на разведенной ПП; обмен данными с другим программным обеспечением, включая схемотехнические редакторы и системы моделирования.

Для решения этих задач в России чаще всего используются программы от Mentor Graphics (PADS, Expedition), Altium (Altium Designer, NanoBoard) и Cadence (SPECCTRA, Allegro PCB Router), а также Topological Router от Eremex. Выбор программного обеспечения для эффективного проектирования печатных плат является сложной задачей, зависящей от технических возможностей продукта, стоимости лицензий и обучения, а также аппаратных требований к компьютеру [3].

### II. ОБЛАЧНЫЕ САПР

В последнее время активно развиваются облачные САПР, работающие в виртуальной среде, доступные через приложения или браузеры [4]. Их основное преимущество — возможность использования на слабых компьютерах. Одной из популярных облачных систем является EasyEDA — бесплатный инструмент для проектирования электроники, который не требует установки. Он включает редакторы схем и печатных плат, SPICE-симулятор, генератор и просмотрщик файлов Gerber, а также облачное хранилище. EasyEDA работает по клиент-серверной модели в браузерах, поддерживающих HTML5, без необходимости установки плагинов. Пользователи могут работать с проектами на любом компьютере с интернетом. Система стабильна, проста в освоении и предлагает богатую библиотеку электронных компонентов и примеров схем. Также поддерживается импорт проектов из Altium, Eagle и KiCad, а пользователи имеют доступ к Open Source модулям [5]. EasyEDA предоставляет множество возможностей, включая 3D-обзор печатных плат и экспорт в BOM.

### III. ОПЫТ РАЗРАБОТКИ В EasyEDA И СБОРКА МАКЕТОВ

Современные устройства связи, автоматики и бытовой электроники требуют микроконтроллеров, что делает обучение микропроцессорной технике важным аспектом образования в электронике. Это также интересно инженерам и радиолюбителям, стремящимся повысить квалификацию [6-7]. Для практического обучения студентам необходимы лабораторные стенды на базе современных микроконтроллеров. Рекомендуется начинать с простых 8-разрядных контроллеров, таких как Microchip, благодаря их доступной системе команд и русскоязычной документации.

Разработаны два учебных стенда на базе PIC16F887. Стенд №1 демонстрирует работу с ЖКИ-дисплеем, кнопками, светодиодами, АЦП и другими элементами. Стенд №2 ориентирован на управление двигателями и включает клавиатуру, семисегментные индикаторы и интерфейсы.

Для стендов №1 и №2 была разработана электрическая схема в EasyEDA (рис. 1, 2), спроектирована печатная плата (рис. 3, 4) и сделан заказ на её изготовление через JLCPCB. В результате был собран макет (рис. 5, 6).

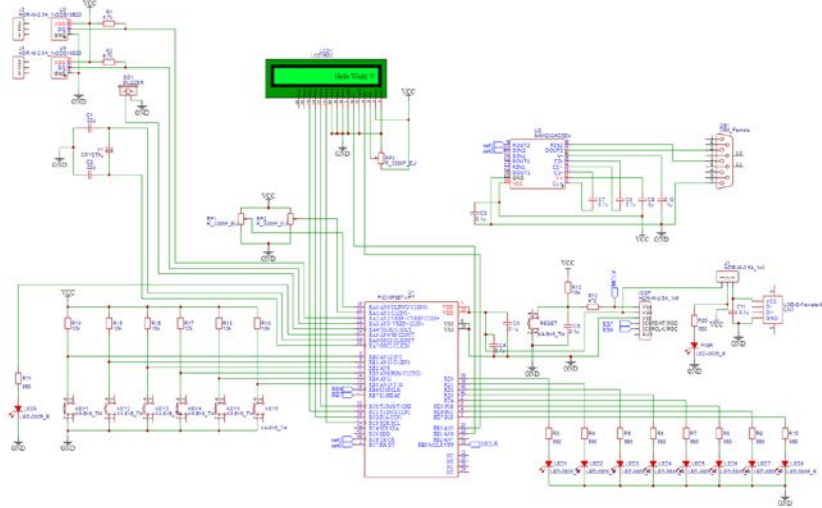


Рисунок 11. Схема электрическая принципиальная стенда №1

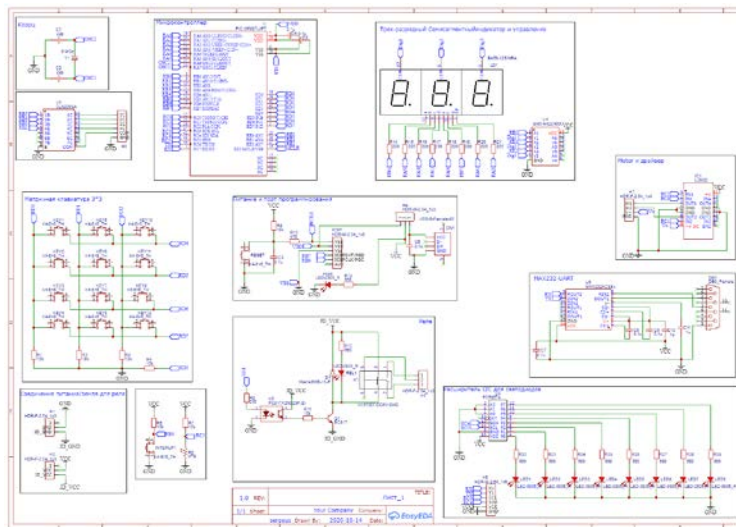


Рисунок 22. Схема электрическая принципиальная стенда №2

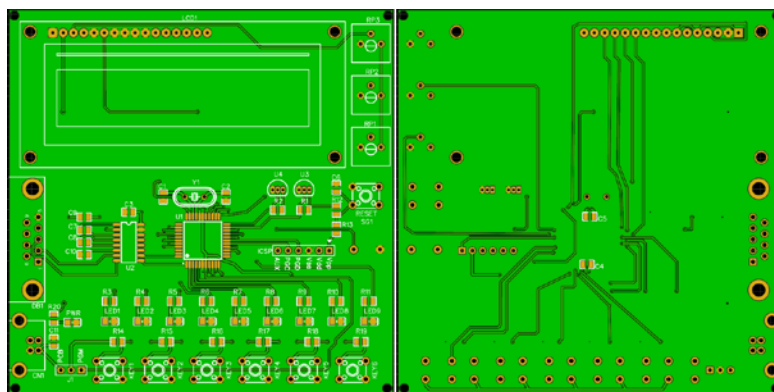


Рисунок 3. Спроектированная печатная плата учебного стенда №1

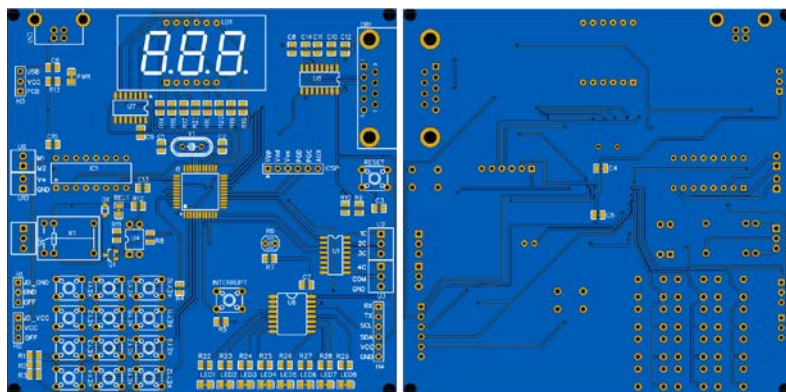


Рисунок 4. Спроектирована печатная плата учебного стенда №2

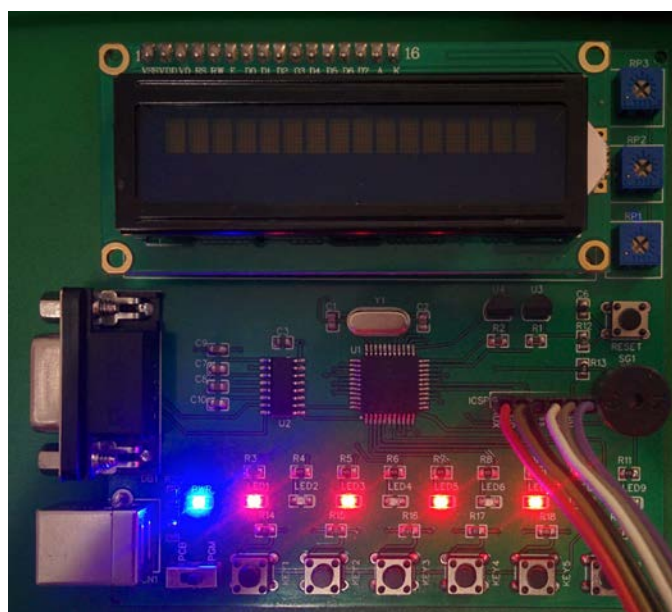


Рисунок 5. Собраный макет учебного стенда №1

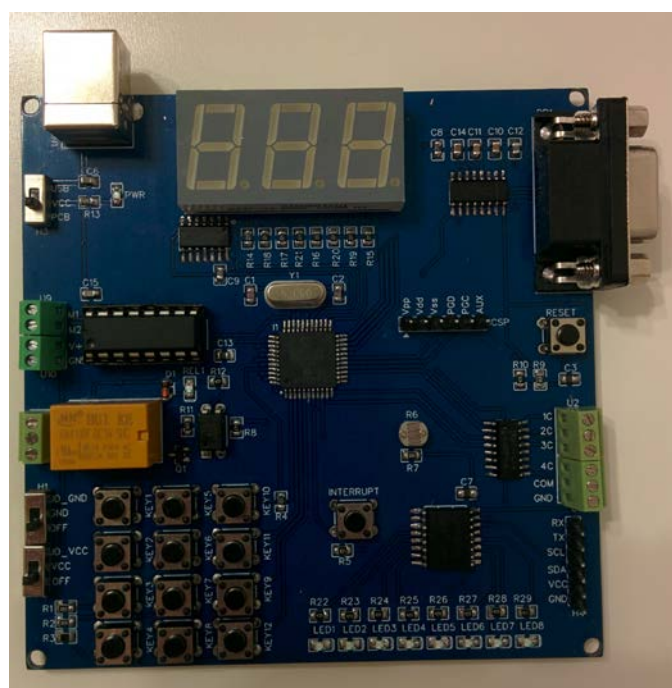


Рисунок 6. Собраный макет учебного стенда №2

#### IV. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представлен обзор популярных в России систем проектирования печатных плат и обозначена проблема выбора эффективного программного обеспечения. Эта задача решается с учетом технических характеристик продукта, финансовых затрат на лицензии и обучение, а также требований к аппаратному обеспечению компьютера. Одним из решений являются облачные САПР, которые функционируют в виртуальной среде и доступны через браузер или специальное приложение, что позволяет их использовать даже на слабых компьютерах. В результате анализа для создания учебного стенда выбрана облачная система EasyEDA. Также представлен опыт разработки бюджетного учебного стенда на базе микроконтроллера PIC, который подходит для изучения микропроцессорной техники как студентами, так и радиолюбителями.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Salikhov R. B., Abdrakhmanov V. K., Safargalin I. N. Internet of Things (IoT) Security Alarms on ESP32-CAM //Journal of Physics: Conference Series. - IOP Publishing, 2021. - Т. 2096. - No. 1. - С. 012109.
- [2] Salikhov R. B., Abdrakhmanov V. K., Yumalin T. T. Experience of Using Bluetooth Low Energy to Develop a Sensor Data Exchange System Based on the NRF52832 Microcontroller //2021 International Ural Conference on Electrical Power Engineering (UralCon). - IEEE, 2021. - С. 229-233.
- [3] Abdrakhmanov V. K., Salikhov R. B., Zinnatulina A. A. Research of the Implementation Possibility of the Precise GPS Positioning Technology //2021 International Ural Conference on Electrical Power Engineering (UralCon). - IEEE, 2021. - С. 234-238.
- [4] Abdrakhmanov V. K., Salikhov R. B., Popov S. A. Experience of Using EasyEDA to Develop Training Boards on the PIC16f887 Microcontroller //Journal of Physics: Conference Series. - IOP Publishing, 2021. - Т. 2096. - No. 1. - С. 012098.
- [5] Abdrakhmanov V. K., Salikhov R. B., Zinnatulina A. A. Research of the Implementation Possibility of the Precise GPS Positioning Technology //2021 International Ural Conference on Electrical Power Engineering (UralCon). - IEEE, 2021. - С. 234-238.
- [6] Юмалин, Т. Т., Салихов, Р. Б., Абдрахманов, В. Х., Салихов, Т. Р., Важдаев, К. В., & Мунтянова, Т. Д. (2023). БЕСПРОВОДНАЯ СИСТЕМА КОНТРОЛЯ КАЧЕСТВА ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ. Нефтегазовое дело, 21(3), 232-242.
- [7] Salikhov, T. R., Abdrakhmanov, V. K., & Yumalin, T. T. (2021, November). Application of Organic Sensors in Wireless Environmental Monitoring Systems. In 2021 International Conference on Electrotechnical Complexes and Systems (ICOECS) (pp. 500-503).

#### DEVELOPING EDUCATIONAL PROJECTS ON PIC16F887 WITH EasyEDA

R.B. Salikhov, V. Kh. Abdrakhmanov, A.D. Ostaltsova

Ufa University of Science and Technology, Ufa, Russian Federation, [salikhovrb@yandex.ru](mailto:salikhovrb@yandex.ru)

Abstract: an overview of popular computer-aided design (CAD) systems in Russia with an emphasis on the requirements for printed circuit board routing tools. The capabilities of the cloud-based EasyEDA CAD system and the justification for its use are considered. The idea of creating low-cost laboratory stands based on the PIC16F887 microcontroller for studying the basics of microprocessor technology. The stands demonstrate the functions of the microcontroller, including the operation of input-output ports, a serial port, an analog-to-digital converter (ADC), use with a two-line liquid crystal display (LCD), temperature sensors, and motor control. The experience of developing a PIC-based training stand in EasyEDA for studying microcontroller programming is given. The capabilities of the jlcpcb.com service for ordering printed circuit boards from the Chinese manufacturer JLCPCB are also considered.

Keywords: CAD, EasyEDA, PCB design, educational stands, PIC microcontroller programming, Microchip microcontrollers.



УДК 681.2:004.42

## ПОЛЕВЫЕ ТРАНЗИСТОРЫ НА ОСНОВЕ ИННОВАЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ С УГЛЕРОДНЫМИ НАПОЛНИТЕЛЯМИ

Салихов Р.Б., Остальцова А.Д., Фахрисламова Д.У.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Российская Федерация, [salikhovrb@yandex.ru](mailto:salikhovrb@yandex.ru)

Аннотация: Современные исследования в области композиционных материалов на базе природных полимеров открывают новые горизонты для создания биосовместимых электроники. Сукцинат хитозана, благодаря своим уникальным свойствам, становится все более распространенным в разработке сенсорных устройств, способных эффективно взаимодействовать с человеческим организмом. В частности, композитные сенсоры на основе хитозана продемонстрировали выдающиеся результаты в обнаружении специфических энантиомеров, что представляет значительный интерес для фармацевтической диагностики. Важным аспектом работы с тонкопленочными структурами является выбор наполнителей. Оксид графена и углеродные нанотрубки не только улучшают механические характеристики, но и способствуют повышению электропроводности композитов. Эффективная интеграция таких наполнителей в матрицу на основе сукцинамида хитозана открывает возможность создания более чувствительных и стабильных сенсоров. Метод атомно-силовой микроскопии сыграл ключевую роль в исследовании поверхности этих тонких пленок, позволяя детально проанализировать их микроструктуру и взаимодействия между компонентами. Полученные данные не только подтвердили перспективность использования модифицированных биополимеров, но и стали основой для разработки полевых транзисторов, что может привести к значительным прорывам в области медицинской электроники и диагностики.

Ключевые слова: тонкие пленки, сукцинамид хитозана, полевой транзистор, подвижность носителей заряда.

### I. ВВЕДЕНИЕ

С каждым годом научные исследования в области материаловедения и электроники становятся все более актуальными, что ведет к разработке новых технологий и улучшению существующих. Одной из перспективных областей является полимерная электроника, основанная на использовании новых полимерных соединений в виде тонких пленок наноразмерной толщины. Эти материалы обладают высокой энергоэффективностью и могут быть использованы в различных приложениях, включая гибкие электронные устройства и сенсоры [1-3].

Однако многие органические соединения, применяемые в полимерной электронике, не всегда обеспечивают необходимую электропроводность, что создает потребность в композитных и нанокompозитных структурах. В последние годы наблюдается активный рост интереса к гибридным материалам, которые объединяют преимущества полимеров и углеродных наноматериалов, таких как углеродные нанотрубки и оксид графена [4]. Эти композиты улучшают характеристики устройств, снижая при этом затраты на производство по сравнению с традиционными неорганическими материалами.

Натриевая соль сукцинамида хитозана (СХТЗ) представляет собой новый многообещающий материал, обладающий хорошей электропроводностью, биосовместимостью и нетоксичностью. Она находит применение в таких областях, как пищевая промышленность, косметика и биотехнология, и становится все более популярной в научных исследованиях [5-8]. СХТЗ используется для создания тонкопленочных нанокompозитных мембран и эффективных сенсорных платформ, что открывает новые горизонты для практического применения в электронике.

Цель данной статьи – исследование композитных и нанокompозитных тонкопленочных структур на основе СХТЗ с различными углеродсодержащими наполнителями, такими как оксид графена и углеродные нанотрубки. Также в работе будет рассматриваться создание тонкопленочных полевых транзисторов на основе этих структур и анализ их основных характеристик, что может способствовать дальнейшему развитию технологий в области полимерной электроники.

### II. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Образцы полевых транзисторов были созданы на стеклянной подложке с ITO-слоем, который служит затвором (рис.1). Перед нанесением диэлектрических пленок подложка была отожжена при температуре 350 °С. В качестве диэлектрика использовались пленки AlOx толщиной 300 нм, которые формировались методом центрифугирования раствора при 2000 об/мин в течение 30 секунд, а затем

отжигались в печи в течение 1 часа при 350 °С. На диэлектрическом слое были установлены два алюминиевых электрода (сток и исток) толщиной 500 нм. Полупроводниковый материал одного из четырех типов наносился центрифугированием в область между электродами, при этом расстояние между ними составляло 50 мкм, а длина — 2 мм. Были использованы различные углеродные наполнители с СХТЗ, такие как: оксид графена (GO), СВ, СР и одностенные углеродные нанотрубки (SWCNT).

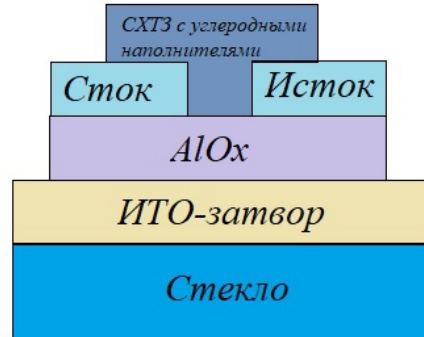


Рисунок 1. Структура экспериментального полевого транзистора

### III. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Исследования показали, что композитные сенсоры на основе СХТЗ и углеродных частиц обладают высокой эффективной площадью поверхности и скоростью переноса электронов, что делает их многообещающими для разработки полевых транзисторов в будущем. Также была проанализирована морфология поверхности пленок, изображения (атомно-силовой микроскопии) АСМ, полученные с помощью Nanoeducator II, представлены на рис. 2.

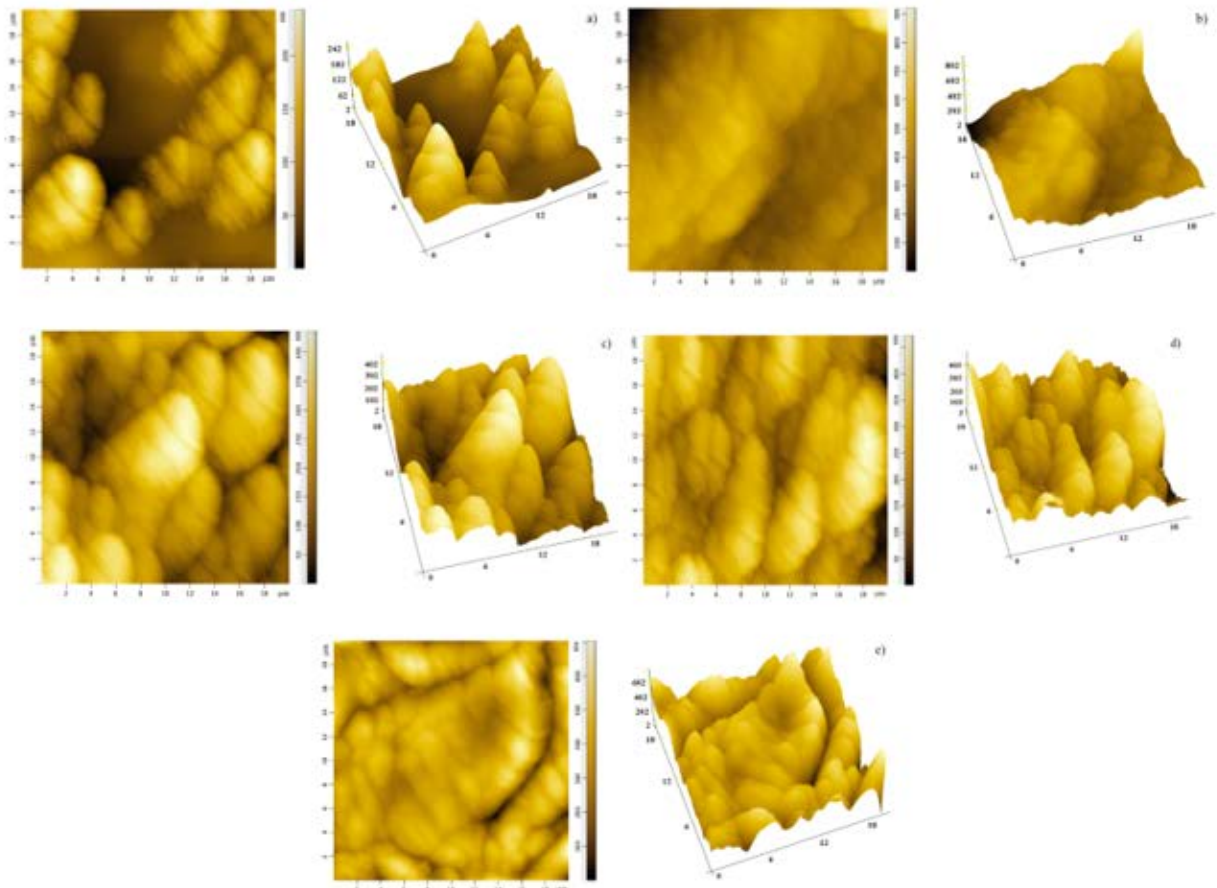


Рисунок 2. АСМ-изображение а) СХТЗ, б) СХТЗ-СР, в) СХТЗ-СВ, г) СХТЗ-GO, д) СХТЗ-SWCNT.  
Размеры скана: 20 на 20 мкм

Среднеквадратичная шероховатость поверхности пленок была рассчитана с помощью программы Gwyddion на площади 20 на 20 мкм и представлена в таблице 1 и на диаграмме (рис. 3). Полученные значения шероховатости соответствуют значениям эффективной площади поверхности.

Таблица 1. Значения шероховатости образцов

	20x20 мкм Среднеквадратическая шероховатость (RMS), нм
Образец СХТЗ	44
Образец СХТЗ-СР	63
Образец СХТЗ-СВ	75
Образец СХТЗ-GO	52
Образец СХТЗ-SWCNT	106

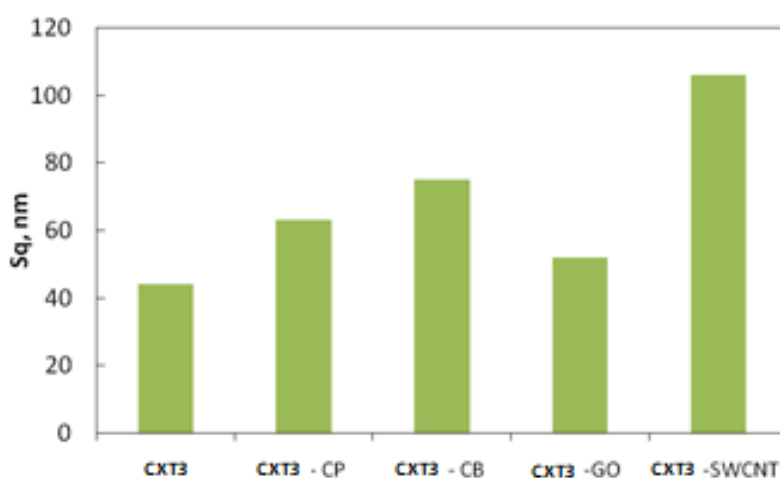


Рисунок 3. Значения шероховатости образцов

#### IV. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Созданные композитные и нанокompозитные сенсоры обладают высокой скоростью переноса электронов и значительной эффективной площадью поверхности, что открывает возможности для их применения в разработке высокоэффективных сенсорных платформ. На основе исследованных пленок были изготовлены полевые транзисторы, и проведены измерения их выходных и передаточных характеристик.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Nanocomposite thin-film structures based on a polyelectrolyte complex of chitosan and chitosan succinamide with swcnt // Letters on Materials. R.B. Salikhov, R.A. Zilberg, E.O. Bulysheva, A.D. Ostaltsova, T.R. Salikhov. 2023. Т. 13, № 2. С. 132-137.
- [2] Effect of the morphology of films of polyaniline derivatives poly-2-[(2e)-1-methyl-2-butene-1-yl]aniline and poly-2-(cyclohex-2-en-1-yl)aniline on sensory sensitivity to humidity and ammonia vapors // Letters on Materials. R.B. Salikhov, I.N. Mullagaliev, B.R. Badretdinov, A.D. Ostaltsova, T.T. Sadykov, A.G. Mustafin. 2022. Т. 12. № 4 (48). С. 309-315.
- [3] Polyaniline derivatives for chemical sensors of ammonia vapor // Chemistry Proceedings. R.B. Salikhov, A.A. Gaskarova, T.R. Salikhov, A.D. Ostaltsova, T.T. Yumalin. 2023. Т. 14. № 1. С. 15.
- [4] Investigation of the morphology of the surface of films // International ICFM-2023. A.D. Ostaltsova, T.R. Salikhov, R.B. Salikhov. 2023. С. 132.
- [5] Nanocomposite thin-film structures and sensors based on THEM // International Conference "Functional Materials" ICFM-2023. Book of abstracts. R.B. Salikhov, A.D. Ostaltsova, T.R. Salikhov 2023. С. 124.

- [6] The structural factors affecting the sensory properties of polyaniline derivatives // Sustain Energy Fuels. A. N. Andriianova, R. B. Salikhov, L.R. Latypova, I. N. Mullagaliev, T. R. Salikhov, A. G. Mustafin. 2022
- [7] Optically controlled field effect transistors based on photochromic spiropyran and fullerene C60 films // Mendeleev Commun, A.R. Tuktarov, R. B. Salikhov, A.A. Khuzin, I.N. Safargalin, I. N. Mullagaliev, O.V. Venidiktova, U. M. Dzhemilev. 2019, C. 160-162.
- [8] Nanocomposite thin film structures based on polyarylenephthalide with SWCNT and graphene oxide fillers // Mendeleev Commun, R.B. Salikhov, R. A. Zilberg, I. N. Mullagaliev, T.R. Salikhov, Y.B. Teres, 2022, № 32, C. 520-522.

#### FIELD-EFFECT TRANSISTORS BASED ON INNOVATIVE MATERIALS WITH CARBON FILLERS

R.B. Salikhov, A.D. Ostaltsova, D.U. Fakhrislamova

Ufa University of Science and Technology, Ufa, Russian Federation, [salikhovrb@yandex.ru](mailto:salikhovrb@yandex.ru)

Abstract: Modern research in the field of composite materials based on natural polymers opens up new horizons for the creation of biocompatible electronics. Chitosan succinate, due to its unique properties, is becoming increasingly common in the development of sensor devices capable of effectively interacting with the human body. In particular, chitosan-based composite sensors have demonstrated outstanding results in detecting specific enantiomers, which is of significant interest for pharmaceutical diagnostics. An important aspect of working with thin-film structures is the choice of fillers. Graphene oxide and carbon nanotubes not only improve mechanical properties, but also contribute to an increase in the electrical conductivity of composites. Effective integration of such fillers into a chitosan succinamide matrix opens up the possibility of creating more sensitive and stable sensors. Atomic force microscopy played a key role in studying the surface of these thin films, allowing a detailed analysis of their microstructure and interactions between components. The data obtained not only confirmed the potential of using modified biopolymers, but also became the basis for the development of field-effect transistors, which could lead to significant breakthroughs in the field of medical electronics and diagnostics.

Keywords: thin films, chitosan succinamide, field-effect transistor, charge carrier mobility.

УДК 681.518

## ИНТЕГРАЦИЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ И НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ВРЕМЕННЫХ РЯДОВ И СИСТЕМ С ОБРАТНОЙ СВЯЗЬЮ

Маметсалиев Р.Р.

Инженерно-технологический университет Туркменистана имени Огуз хана, Ашхабад, Туркменистан,  
[mamedresul1501@gmail.com](mailto:mamedresul1501@gmail.com)

Аннотация: В последние годы нейронные сети и методы машинного обучения становятся всё более востребованными для прогнозирования сложных динамических систем и временных рядов. Одной из ключевых проблем при анализе таких систем является необходимость моделирования обратной связи и учёта физической природы процесса, что может быть достигнуто с использованием дифференциальных уравнений. В данном докладе представлена концепция интеграции дифференциальных уравнений с нейронными сетями для улучшения прогнозирования временных рядов и динамических систем с обратной связью. Мы рассматриваем гибридные подходы, где нейронные сети помогают обучать сложные модели, а дифференциальные уравнения задают физически-обоснованную структуру модели. Описаны примеры приложений, а также проведён сравнительный анализ предложенной методологии с традиционными методами.

Ключевые слова: нейронные сети, дифференциальные уравнения, временные ряды, гибридные модели, прогнозирование, интеграция моделей, системы с обратной связью.

### 1. ВВЕДЕНИЕ

С развитием технологий и данных в реальном времени возрос интерес к моделированию и прогнозированию сложных систем, в которых присутствует обратная связь и нелинейные зависимости. Традиционные методы, использующие дифференциальные уравнения, обеспечивают точные физически-обоснованные модели, однако они имеют ограничения в условиях высокой размерности и сложности системы. С другой стороны, нейронные сети обладают высокой адаптивностью и способностью моделировать нелинейные зависимости, но зачастую лишены физического смысла и интерпретируемости.

Интеграция дифференциальных уравнений и нейронных сетей предоставляет мощные инструменты для создания гибридных моделей, способных сочетать физические знания с гибкостью нейросетевых методов. В данном исследовании предлагается методология, которая позволяет:

- Учитывать структуру системы через дифференциальные уравнения.
- Применять нейронные сети для прогнозирования тех частей системы, которые сложно поддаются традиционному моделированию.

Особое внимание в работе уделяется прогнозированию временных рядов и моделированию систем с обратной связью, таких как динамика популяций, экономические системы и физические процессы.

### 2. МЕТОДОЛОГИЯ

#### 2.1 Основы гибридного подхода

Основная идея гибридного подхода состоит в том, чтобы использовать дифференциальные уравнения для моделирования известных физических процессов, а нейронные сети – для обучения неизвестных или трудно моделируемых частей системы. Такая комбинация позволяет создать модель, которая:

1. Учитывает известные физические законы.
2. Повышает точность предсказания за счёт гибкости нейронных сетей.

Формула гибридной модели:

Пусть  $x(t)$  – состояние системы в момент времени  $t$ , тогда гибридная модель может быть представлена следующим образом:

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t, \theta) + g(x, t, \phi)$$

где  $f(x, t, \theta)$  – физически-обоснованная часть, заданная дифференциальными уравнениями и параметризованная параметрами  $\theta$ ;  $g(x, t, \phi)$  – нейросетевой компонент, обучаемый на основе данных и параметризованный параметрами  $\phi$ .

## 2.2. Структура гибридной модели

Для построения модели необходимы следующие компоненты:

- Дифференциальное уравнение: описывает известную часть динамической системы.
- Нейронная сеть: моделирует неизвестные или трудно поддающиеся описанию процессы.
- Обратная связь: связывает выходы нейронной сети и физической модели, что позволяет учитывать исторические данные и текущие условия системы.

Дифференциальное уравнение	Нейронная сеть
Известные параметры → Физическая модель	Моделирование неизвестных параметров → Прогнозирование

Рисунок 1. Схема гибридной модели

## 2.3. Пример использования гибридной модели

Рассмотрим пример системы с обратной связью, такой как экономическая модель, в которой изменения на рынке (ценовые колебания) зависят от множества факторов. Пусть состояние системы  $x(t)$  описывает цену актива в момент времени  $t$ , и её изменение можно выразить как:

$$\frac{dx}{dt} = \alpha x(t) - \beta x^2(t) + g(x, t, \phi)$$

где  $\alpha x(t) - \beta x^2(t)$  описывает основные динамические процессы рынка (например, рост и насыщение);  $g(x, t, \phi)$  – корректировочная функция, задаваемая нейронной сетью, которая учитывает нестабильные рыночные условия.

Таблица 1. Описание параметров модели

Параметр	Описание	Значение (пример)
$\alpha$	Коэффициент роста	0.03
$\beta$	Коэффициент насыщения	0.0001
$\phi$	Параметры нейросети	Определяются обучением

## 2.4. Подход к обучению нейронной сети

- Сбор данных: необходимо собрать данные временного ряда для обучения модели, включая факторы, которые влияют на динамику системы.
- Обучение: нейронная сеть обучается на части данных, при этом параметры  $\phi$  подстраиваются таким образом, чтобы минимизировать ошибку между предсказанием модели и фактическими данными.
- Интеграция: после обучения нейронная сеть интегрируется с дифференциальным уравнением, обеспечивая совместное прогнозирование.

## 2.5. Алгоритм прогнозирования

Алгоритм работы гибридной модели:

1. На каждом шаге времени  $t$ 
  - Вычисляется предсказание физической модели  $f(x, t, \theta)$
  - Вычисляется корректировочная составляющая с использованием нейронной сети  $g(x, t, \phi)$
2. Обновляется состояние системы  $x(t + 1)$  на основе полученного значения.
3. Решение дифференциального уравнения:
  - Вычисляются значения переменных, используя дифференциальное уравнение на основании текущих входных данных.
  - Полученные значения служат первичным прогнозом или начальным условием для последующих вычислений нейронной сети.
4. Обработка нейронной сетью:
  - Передаётся результаты дифференциального уравнения на вход нейронной сети.
  - Нейронная сеть обрабатывает входные данные, учитывая нелинейные зависимости, и выдает прогноз или корректирующие значения.

5. Интеграция и обратная связь:

- Нужно объединить результаты блока дифференциального уравнения и нейронной сети для получения комплексного прогноза.
- Используется механизм обратной связи: результаты нейронной сети можно использовать для обновления параметров дифференциального уравнения.
- Если модель обновляется в реальном времени, скорректированные параметры и предсказания передаются в систему как начальные условия для следующего шага.

6. Оценка ошибки и адаптация:

- Сравнивается прогноз с фактическими данными и рассчитывается ошибка.
- Если ошибка превышает допустимый порог, нужно обучить нейронную сеть на новых данных или скорректировать параметры дифференциального уравнения.
- В случае онлайн-обучения модель адаптируется на каждом новом временном шаге для улучшения точности.

7. Получение финального прогноза:

- На основе скорректированных данных гибридная модель выдает финальный прогноз.
- Сохраняется прогнозы для последующего анализа и использования в дальнейших временных шагах.

8. Повторение шагов для следующего временного шага:

- Повторяются шаги с решения дифференциального уравнения для следующего набора данных временного ряда, чтобы продолжить процесс прогнозирования.

Для временных рядов, таких как прогнозирование погодных условий или финансовых рынков, данный алгоритм может обеспечить более точное моделирование благодаря сочетанию математических моделей и данных.

Этот подход особенно полезен, когда существующих данных недостаточно для самостоятельного обучения нейронной сети, но при этом у модели есть физические ограничения, которые можно описать дифференциальными уравнениями.

#### ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ, РЕАЛИЗАЦИЯ И РЕЗУЛЬТАТ.

Приведём пример математического расчёта для гибридной модели, где используется сочетание логистического уравнения роста популяции и нейронной сети. Этот пример будет иллюстрировать численное интегрирование дифференциального уравнения с корректировочной функцией, которая моделируется простой нейронной сетью.

Для вычислений возьмём параметры и смоделируем простой случай, добавив конкретные численные значения для каждого шага.

Зададим логистическое уравнение роста популяции с внешним воздействием, которое описывается уравнением:

$$\frac{dx}{dt} = rx \left(1 - \frac{x}{K}\right) + g(x, t, \phi)$$

где:

- $r = 0,1$  – коэффициент роста,
- $K = 1000$  – ёмкость среды,
- $g(x, t, \phi)$  – функция, моделируемая нейронной сетью, зависящая от времени  $t$

Для простоты примера предположим, что  $g(x, t, \phi)$  – это синусоидальное внешнее влияние, которое аппроксимируется сетью:

$$g(x, t) = 0,05 \cdot \sin(0,5 \cdot t).$$

Численное решение:

Используем метод Эйлера для численного интегрирования, чтобы определить изменение популяции  $x(t)$  за заданный интервал времени.

1. Задание параметров модели и начальных условий

- Начальная численность популяции:  $x(0) = 50$ ;
- Временной шаг:  $\Delta t = 0,1$ ;
- Число шагов: 100 (на интервале от  $t = 0$  до  $t = 10$ ).

2. Расчёт изменения численности популяции на каждом временном шаге  
Каждое изменение  $x$  вычисляется по формуле:

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \Delta t \left( r \cdot x(t) \cdot \left( 1 - \frac{x(t)}{K} \right) + g(x, t) \right)$$

Реализация расчёта на Python:

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
# Параметры модели
r = 0.1 # Коэффициент роста
K = 1000 # Емкость среды
x0 = 50 # Начальная численность популяции
t_max = 10 # Максимальное время
dt = 0.1 # Шаг времени
steps = int(t_max / dt) # Количество шагов
# Функция внешнего влияния g(x, t)
def external_influence(t):
    return 0.05 * np.sin(0.5 * t)
# Массивы для хранения времени и численности популяции
t_values = np.linspace(0, t_max, steps)
x_values = np.zeros(steps)
x_values[0] = x0
# Численное интегрирование методом Эйлера
for i in range(1, steps):
    t = t_values[i-1]
    x = x_values[i-1]
    dxdt = r * x * (1 - x / K) + external_influence(t) # Вычисление dx/dt
    x_values[i] = x + dt * dxdt # Обновление x на следующем шаге
# Визуализация результатов
plt.plot(t_values, x_values, label='Популяция (гибридная модель)')
plt.xlabel('Время')
plt.ylabel('Численность популяции')
plt.title('Прогноз популяции с использованием гибридной модели')
plt.legend()
plt.grid()
plt.show()
```

Результаты расчета представлена на рисунке 2.

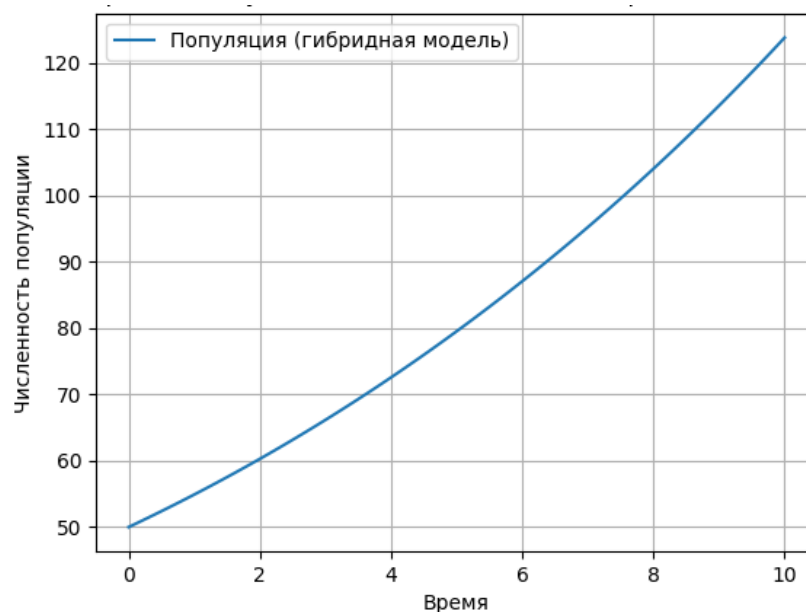


Рисунок 2. Прогноз популяции с использованием гибридной модели



### 3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данном примере продемонстрировано, как интеграция дифференциальных уравнений с нейронными сетями может улучшить прогнозирование временных рядов. Этот гибридный подход полезен для моделирования сложных процессов, которые недостаточно описываются стандартными методами, и может применяться к разнообразным задачам, включая экономику, биологию и физику.

### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Zhang, G. P. (2003). Time Series Forecasting Using a Hybrid ARIMA and Neural Network Model. *Neurocomputing*, 50, 159-175.
- [2] Liao, S. Y. (2017). A Hybrid Model for Time Series Forecasting: A Comparison of ARIMA, Neural Networks, and Support Vector Regression. *Expert Systems with Applications*, 88, 159-172.
- [3] Huang, Y. F., & Wang, Y. J. (2018). An Integrated Model of Neural Network and Differential Equation for Time Series Prediction. *IEEE Access*, 6, 23492-23501.
- [4] Алиев, Р. Н., & Гусейнов, А. А. (2020). Моделирование временных рядов с использованием нейронных сетей и дифференциальных уравнений. *Вестник Московского государственного университета. Серия 1, Математика. Механика*, 81(4), 355-367.
- [5] Костенко, В. А., & Полянская, И. И. (2021). Применение нейронных сетей для решения обратных задач с использованием дифференциальных уравнений. *Прикладная математика и информатика*, 15(2), 72-84.
- [6] Григорьев, А. И. (2022). Интеграция нейронных сетей и дифференциальных уравнений для предсказания динамики временных рядов. *Вестник РУДН. Серия «Информатика»*, 20(3), 225-234.
- [7] Кузнецов, В. И., & Смирнов, А. А. (2019). Применение нейронных сетей для прогнозирования временных рядов с использованием методов математического моделирования. *Научные записки МГТУ им. Н. Э. Баумана*, 81(5), 89-97.

## INTEGRATION OF DIFFERENTIAL EQUATIONS AND NEURAL NETWORKS FOR TIME SERIES FORECASTING AND FEEDBACK SYSTEMS

R. Mametsaliyev

Oguz Han Engineering and Technology University of Turkmenistan, Ashgabat, Turkmenistan,  
[mamedresul1501@gmail.com](mailto:mamedresul1501@gmail.com)

**Abstract:** In recent years, neural networks and machine learning methods have become increasingly popular for forecasting complex dynamic systems and time series. One of the key problems in the analysis of such systems is the need to model feedback and take into account the physical nature of the process, which can be achieved using differential equations. This report presents the concept of integrating differential equations with neural networks to improve forecasting of time series and dynamic systems with feedback. We consider hybrid approaches, where neural networks help to train complex models, and differential equations define a physically based structure of the model. Examples of applications are described, and a comparative analysis of the proposed methodology with traditional methods is carried out.

**Keywords:** neural networks, differential equations, time series, hybrid models, forecasting, model integration, feedback systems.

УДК 519.714.5

## РЕШЕНИЕ НЕКЛАССИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Назаров С.Г.<sup>1</sup>, Рахимов М.Р.<sup>2</sup>

Государственный энергетический институт Туркменистана, Мары, Туркменистан,  
<sup>1</sup>[energetikatdei@gmail.com](mailto:energetikatdei@gmail.com), <sup>2</sup>[rahymowmuhammet72@gmail.com](mailto:rahymowmuhammet72@gmail.com)

Аннотация: В данной работе рассматривается не классическая краевая задача, известная в литературе как задача Бицадзе-Самарского. Полученное решение может быть полезным при компьютерном проектировании в электронике и процессе компьютерной технологии в целом. Предложенная процедура построения решения по спектральному разложению может быть применена в компьютерной математике для создания пакета программ. Построена двукратная базисность Рисса собственных и присоединенных функций решенной краевой задачи, установлена двукратная разложимость априори заданных функций, что является важным результатом для устойчивости колебательных и диффузионных процессов.

Ключевые слова: моделирование, не классическая задача, базис Рисса, компьютерная математика.

### ВВЕДЕНИЕ

Компьютерное проектирование в электронике и процессе компьютерной технологии в целом, основывается на создание удобной математической модели, позволяющие применить алгоритмы численных методов и логических операций. В проектируемом объекте в создании триады «модель-алгоритм-программа» [1] важное место занимает математическое моделирование изучаемых технических процессов. В настоящее время, наравне с математическим моделированием, бурно развивается и искусство компьютерного моделирования, также компьютерная математика. В этом направлении науки значительно продвинута теория алгоритмов и составления компьютерных программ для вычисления значений функций, приближенного решения алгебраических и обыкновенных дифференциальных уравнений. Несмотря на это, по сравнению с программным обеспечением решений математических задач обыкновенных дифференциальных уравнений, компьютерная математика с программами вычисления решений оптимального моделирования сложных систем, состояния которых описываются линейными и нелинейными уравнениями в частных производных, развита значительно меньше. Эта в первой очереди связано с трудно разрешимыми проблемами несамосопряженных краевых задач математической физики. Оптимальное моделирование тепловых и колебательных процессов, описываемыми несамосопряженными краевыми условиями, методом спектрального разложения приводит к разрешимости проблемы базисности систем корневых функций. Исследованию систем корневых функций несамосопряженных задач посвящены многочисленные работы авторов. Отметим лишь некоторые из них [2,3], которые явились отправной точкой для дальнейшего развития фундаментальной теории несамосопряженных операторов [4]. В настоящей работе предлагается схема построения системы базисных функций несамосопряженной краевой задачи типа Бицадзе-Самарского, которая используется в решении соответствующей задачи оптимального управления и может быть применено в компьютерной математике для создания пакета программ вычисления значений функций по методу разделения переменных. При этом строится двукратная базисность Рисса, что является важным результатом для устойчивости колебательных процессов.

### ПОСТАНОВКА И РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ

Рассмотрим не классическую краевую задачу, известную в литературе как задача Бицадзе-Самарского [4]. Требуется найти решение следующей задачи:

$$u_{tt} - u_{xx} = 0, \quad t \in (0, T), \quad x \in (0, 1), \quad (1)$$

$$u(0, x) = f_0(x) \in \tilde{W}_2^1(0, 1), \quad u_t(0, x) = f_1(x) \in L_2(0, 1), \quad (2)$$

$$u(t, 0) = 0, \quad u_x(t, 0) = u_x(t, 1), \quad t \in (0, T). \quad (3)$$

Заметим, что условие (3) соответствует граничным условиям колебаний кольца или стержень правая сторона, которой свободно колеблется с углом закрепленного левого конца. Представив искомое решение этой задачи в виде  $u(t, x) = e^{i\lambda t} u(x)$ ,  $i$  – мнимая единица, приходим к несамосопряженной спектральной задаче:

$$L(i\lambda)u = u'' + \lambda^2 u = u'' + i^2(i\lambda)^2 u = 0, \quad u(0) = 0, \quad u'(0) = u'(1), \quad (4)$$

где  $i\lambda$  – собственное значение (с.з.) Разрешив задачу (4), найдем следующие с.з. и соответствующие им собственные элементы (с.э.):

$$i\lambda_0 = 0; \quad i\lambda_k = 2k\pi i, \quad k = 1, 2, \dots, \quad u_0(x) = x, \quad u_0^k(x) = \lambda_k^{-1} \sin \lambda_k x, \quad k = 1, 2, \dots$$

Система с.э.  $\{x, \lambda_k^{-1} \sin \lambda_k x\}$  не образует полной системы в  $L_2(0,1)$ . Дополним эту систему до полной в  $L_2(0,1)$  системы добавлением к ней соответствующих присоединенных элементов (п.э.) Так как кратность с.з.  $i\lambda_k, k = 1, 2, \dots$  краевой задачи (4) равна двум, то длина цепочки п.э. к с.э.  $u_0^k = \lambda_k^{-1} \sin \lambda_k x$  равна единице, а с.э.  $u_0 = x$ , соответствующая с.з.  $i\lambda_0 = 0$ , п.э. не имеет. П.э. первого порядка определяется из следующего уравнения:

$$\frac{d^2 u_1^k}{dx^2} + \lambda_k^2 u_1^k - 2i\lambda_k u_0^k = 0, \quad u_1^k(0) = 0, \quad \frac{du_1^k(0)}{dx} = \frac{du_1^k(1)}{dx} \quad (5)$$

Решение задачи (5) имеет вид:  $u_1^k(x) = \lambda_k^{-1} \left( \frac{1}{2\lambda_k} \sin \lambda_k x - x \cos \lambda_k x \right) i$ .

Составим вектор  $\{y_h^k\}, y_h^k = \{y_h^{(k,0)}, y_h^{(k,1)}\}; m_k = 2; h = 0, 1; k = 1, 2, \dots;$

$y_h^{(k,0)} = u_h^k, y_h^{(k,1)} = i\lambda_k u_h^k + u_{h-1}^k$  из с.п.э. оператора  $L(i\lambda)$  из (4).

Сопряженная краевая задача, соответствующая оператору  $L^*(-i\lambda)$ , имеет вид

$$\frac{d^2 \vartheta_0^k}{dx^2} + \lambda_k^2 \vartheta_0^k = 0, \quad \frac{d\vartheta_0^k(1)}{dx} = 0, \quad \vartheta_0^k(0) = \vartheta_0^k(1). \quad (6)$$

Для п.э. оператора  $L^*$  имеем уравнение

$$\frac{d^2 \vartheta_1^k}{dx^2} + \lambda_k^2 \vartheta_1^k + 2\lambda_k i \vartheta_0^k = 0, \quad \frac{d\vartheta_1^k(1)}{dx} = 0, \quad \vartheta_1^k(0) = \vartheta_1^k(1). \quad (7)$$

Разрешив краевые задачи (6) и (7), найдем, что  $\vartheta_0^k(x) \equiv 1, k = 1, 2, \dots$ .

$$\vartheta_0^k(x) = -2 \cos \lambda_k x, \quad \vartheta_1^k(x) = -2i \left[ (1-x) \sin \lambda_k x - \frac{1}{2\lambda_k} \cos \lambda_k x \right],$$

Тогда находим:  $k = 1, 2, \dots; h = 0, 1,$

$$\tilde{y}_h^k = \{\lambda_k u_h^k; i\lambda_k u_h^k + u_{h-1}^k\}, \quad \tilde{z}_h^k = \{i \vartheta_{1-h}^k - \lambda_k^{-1} \vartheta_{-h}^k; -\vartheta_{1-h}^k\},$$

Определим элементы

$$\tilde{y}_0^\circ = \{u_0, iu_0\} = \{x, ix\} \in L_2(0,1), \tilde{z}_0^\circ = \{1, i\} \in L_2(0,1) = L_2(0,1) \oplus L_2(0,1).$$

Тогда

$$(\tilde{z}_h^k, \tilde{y}_v^l)_{L_2(0,1)} = \delta_{hv}^{kl}, k, l = 0, 1, 2, \dots; h = 0, \dots, m_k - 1; v = 0, \dots, m_l - 1; m_0 = 1, m_k = 2, k = 1, 2, \dots$$

Система  $\{\tilde{y}_h^k\}, k = 0, 1, 2, \dots; h = 0, 1$  полна в  $L_2(0,1)$ .

Доказательство этого утверждения для действительной вектор-функции  $f = \{f_0, f_1\} \in L_2(0,1)$  вытекает из следующего соображения. Пусть

$$\int_0^1 f \tilde{y}_h^k dx = 0, \quad k = 0, 1, 2, \dots; \quad h = 0, 1.$$

Тогда легко получим  $\int_0^1 f_n(x) x dx = \int_0^1 f_n \sin \lambda_k x dx = \int_0^1 f_n x \cos \lambda_k x dx = 0, n = 0, 1$ , что требовалось доказать.

Вектор-функцию  $f = \{f_0, f_1\} \in L_2(0,1)$  можно разложить в ряд по полной системе  $\{\sin \lambda_k x, x \cos \lambda_k x\}, k = 0, 1, 2, \dots$ . Система  $\{\tilde{y}_h^k\}, k = 0, 1, 2, \dots; h = 0, \dots, m_k - 1$  образует базис Рисса в  $L_2(0,1)$ .

Из приведенного выше рассуждения вытекает, что система функций, составленная из производных цепочек М.В. Келдыша, т.е. система

$$y_0^{(0,0)} = x, \quad y_0^0 = \{y_0^{(0,0)}, 0\}, \quad y_h^k = \{y_h^{(k,0)}, y_h^{(k,1)}\}; \quad y_h^{(k,0)} = u_h^k, \quad y_h^{(k,1)} = i\lambda_k u_h^k + u_{h-1}^k, \quad h = 0, 1; \quad k = 1, 2, \dots,$$

не образует полной системы в  $L_2(0,1)$ .

Система  $z_h^k$  принимает вид  $z_h^k = \{\zeta_h^{(k,0)}, \zeta_h^{(k,1)}\}, \quad \zeta_h^{(k,0)} = i\lambda_k \vartheta_{1-h}^k - \vartheta_{-h}^k, \quad \zeta_h^{(k,1)} = -\vartheta_{1-h}^k.$

Находим:

$$\tilde{y}_h^k = \{\lambda_k u_h^k; i\lambda_k u_h^k + u_{h-1}^k\}, \quad \tilde{z}_h^k = \{i \vartheta_{1-h}^k - \lambda_k^{-1} \vartheta_{-h}^k; -\vartheta_{1-h}^k\}, \quad k = 1, 2, \dots; h = 0, 1.$$

Определим элементы  $\tilde{y}_0^\circ = \{u_0, iu_0\} = \{x, ix\} \in L_2(0,1), \tilde{z}_0^\circ = \{1, i\} \in L_2(0,1)$ .

Тогда  $(\tilde{z}_h^k, \tilde{y}_v^l)_{L_2(0,1)} = \delta_{hv}^{kl}, k, l = 0, 1, 2, \dots; h = 0, \dots, m_k - 1; v = 0, \dots, m_l - 1; m_0 = 1, m_k = 2, k = 1, 2, \dots$

Более того,  $(\mu, \lambda_k y_h^{(k,0)})_{L_2(0,1)} = (\mu, y_h^{(k,1)})_{L_2(0,1)} = 0, k = 1, 2 \dots; h = 0, 1.$

$$(\lambda_k^{-1} \zeta_h^{(k,0)} \mu x)_{L_2(0,1)} (\zeta_h^{(k,1)}, \mu x)_{L_2(0,1)} = 0, k = 1, 2 \dots; h = 0, 1,$$

$$(\zeta_h^{(k,n)}, y_v^{(k,m)})_{L_2(0,1)} = 0, k = 1, 2 \dots,$$

где  $\mu = 1$ , либо  $i$ ;  $h, v, n, m = 0, 1$ , при этом выполняется хотя бы одно из неравенств:  $n \neq m$  и  $h \neq v$ .

Система  $\{\sin \lambda_k x, x \cos \lambda_k x\}, k = 0, 1, 2 \dots$  полна (даже образует базис Рисса в  $L_2(0,1)$ ) в  $L_2(0,1)$ . Система  $\{\tilde{y}_h^k\}, k = 0, 1, 2 \dots; h = 0, \dots, m_k - 1$  образует базис Рисса в  $L_2(0,1)$ .

Произвольные заданные функции  $f_0(x) \in \tilde{W}_2^1(0,1)$  и  $f_1(x) \in L_2(0,1)$  можно представить в виде безусловно сходящихся в норме  $L_2(0,1)$  рядов по системе производных цепочек  $(y_0^0 = \{x, ix\}) \{y_h^k\}, k = 0, 1, 2 \dots, h = 0, \dots, m_k - 1$ , составленной из с.п.э. оператора  $L(i\lambda)$  из (4). Будем считать, что  $f_n(x), n = 0, 1$  действительные. Используя формулу двукратного разложения элементов  $f_0, f_1$ , приведенную в [2-4] получим:

$$f_0(x) = \operatorname{Re}[a_0 x + \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{h=0}^1 a_h^k u_h^k], \quad (8)$$

$$f_1(x) = \operatorname{Re}[a_0 ix + \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{h=0}^1 a_h^k (i\lambda_k u_h^k + u_{h-1}^k)], \quad (9)$$

$$a_0 = \int_0^1 [f_0(x) - if_1(x)] dx, a_h^k = (f_0, i\lambda_k \vartheta_{1-h}^k)_{L_2(0,1)} - (f_1, \vartheta_{1-h}^k)_{L_2(0,1)}.$$

$$\tilde{a}_h^k = (f_0, i\vartheta_{1-h}^k - \lambda_k^{-1} \vartheta_{-h}^k)_{L_2(0,1)} - (f_1, \vartheta_{1-h}^k)_{L_2(0,1)}.$$

Для решения начально-краевой задачи (1)-(3) можно использовать базис Рисса  $\{\tilde{y}_h^k\}$ , составленный из с.п.э. задачи (4.4), и сопряженную с ней систему  $\{\tilde{z}_h^k\}$ .

Составим следующий ряд [4]:

$$u(t, x) = a_0(1 + it)x + \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{h=0}^1 a_h^k e^{i\lambda_k t} [u_h^k(x) + t u_{h-1}^k(x)]. \quad (10)$$

Тогда решение уравнения (1) с краевыми условиями (3) определяется по той же формуле (10), в которой коэффициенты  $a_h^k$  заменены с  $\tilde{a}_h^k, k = 1, 2, \dots$ , т.е. При этом справедливо равенство

$$u(0, x) = \tilde{f}_0(x) = a_0 x + \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{h=0}^1 \tilde{a}_h^k u_h^k(x). \quad (11)$$

Тогда  $\forall t \in (0, T]$  справедливы оценки ( $F = \{F_0, F_1\}$  априори заданная вектор-функция):

$$\|u(t, x)\|_{L_2(0,1)}^2 \leq C_1 \sum_{k=0}^{\infty} \sum_h |a_h^k|^2 \leq C_2 \|F\|_{L_2(0,1)}^2 < \infty, F = \{F_0, F_1\}.$$

$$\|u_t(t, x)\|_{L_2(0,1)}^2 \leq C_1 \sum_{k=0}^{\infty} \sum_h |a_h^k|^2 \leq C_2 \|F\|_{L_2(0,1)}^2 < \infty, \quad (12)$$

$$\|u_x(t, x)\|_{L_2(0,1)}^2 \leq C_1 \sum_{k=0}^{\infty} \sum_h |a_h^k|^2 \leq C_2 \|F\|_{L_2(0,1)}^2 < \infty.$$

Нетрудно проверить, что функция  $u(t, x)$  из (10) формально удовлетворяет уравнению (1), а также начальным и краевым условиям (2) и (3). Отметим, что ряды (8), (9) сходятся безусловно. Так как  $\{y_h^k\}, k = 0, 1, 2, \dots; h = 0, \dots, m_1 - 1$  образует базис Рисса в  $L_2(0,1)$ , то

$$\sum_{k=1}^{\infty} \sum_h |a_h^k|^2 < \infty.$$

Следовательно, ряд (10)  $\forall t \in (0, T]$  безусловно сходится в норме  $L_2(0,1)$ . Получена оценка решений в пространстве решений. Функции  $u(t, x), u_t(t, x)$  и  $u_x(t, x)$ , определяемые согласно равенству (10), являются непрерывными функциями от  $t \in [0, T]$  в норме  $L_2(0,1)$ . Начальные условия выполняются в следующем смысле:

$$\lim_{t \rightarrow 0} \| \operatorname{Re} u(t, x) - f_0(x) \|_{W_2^1(0,1)} = 0; \lim_{t \rightarrow 0} \| \operatorname{Re} u_t(t, x) - f_1(x) \|_{L_2(0,1)} = 0.$$

Функция  $\operatorname{Re} u(t, x) = v(t, x)$  является обобщенным решением задачи (1) – (3), из класса  $\tilde{W}_2^1(Q) = \{f(t, x): f(t, x) \in W_2^1(Q), Q = (0, T) \times (0, 1), f(t, 0) = f_x(t, 0) - f_x(t, 1) = 0\}$  почти  $\forall t \in (0, T)$  и уравнению (1) удовлетворяет в смысле интегрального тождества:

$$\int_0^1 \vartheta_t(t, x) \omega(t, x) \Big|_{t_1}^{t_2} dx = \int_{t_1}^{t_2} \int_0^1 [\vartheta_t \omega_t - \vartheta_x \omega_x] dx dt,$$

$\forall \omega \in \tilde{W}_2^1(Q) = \{f(t, x): f \in W_2^1(Q), f'(t, 1) = f(t, 1) - f(t, 0) = 0\}$  и почти  $\forall t_1, t_2 \in [0, T]$ .

Из оценок (12) вытекает, что задача (1)-(3) поставлена корректно, т.е. существует единственное решение задачи (1)-(3) в пространстве  $\tilde{W}_2^1(Q)$ . Это решение в метрике пространства  $\tilde{W}_2^1(Q)$  устойчиво относительно начальной вектор-функции  $f = \{f_0, f_1\} \in \tilde{W}_2^1(0,1) \oplus L_2(0,1)$ .

Задача (1)-(3) поставлена корректно, т.е. существует единственное решение задачи (1)-(3) в пространстве  $\tilde{W}_2^1(Q)$ . Это решение в метрике пространства  $\tilde{W}_2^1(Q)$  устойчиво относительно начальной вектор-функции  $f = \{f_0, f_1\} \in \tilde{W}_2^1(0,1) \oplus L_2(0,1)$ .

Для приближенного значения функции  $u(t, x)$  можно брать функцию

$$u_N(t, x) = \sum_{k=1}^N \sum_h a_h^k e^{i\lambda_k t} [u_h^k(x) + t u_{h-1}^k(x)] + a_0(1 + i t)x,$$

полученную из ряда (10)  $N$  – усечением.

Отметим, что в равенствах (8), (9), (11) для функций  $f_0(x)$ ,  $\tilde{f}_0(x)$  коэффициенты при  $u_h^k(x)$  отличаются друг от друга на множители  $\lambda_k$ . Это означает, что для решения задачи (1) - (3) по базису Рисса  $\{\tilde{y}_h^k\}$  нужно разложить функцию  $f_0(x) \in L_2(0,1)$  (а не заданную  $\tilde{f}_0(x) \in \tilde{W}_2^1(0,1)$ ). Отметим, что функция  $f_0(x)$  по росту коэффициентов разложения напоминает производную  $\tilde{f}_0'(x)$ . Заметим, что для применения базиса  $\{\tilde{y}_h^k\}$  в краевой задаче (1) – (3) первое начальное условие нужно задать по формуле (11), что может быть использовано в аналитическом конструировании технологических процессов.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученные в работе результаты по двукратному базису Рисса и решению не классической краевой задачи может быть полезными в компьютерном проектировании электронной системы и создании пакета программ для численного решения задач колебательных и диффузионных процессов.

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] Игнатъев Ю.Г., Математическое и компьютерное моделирование фундаментальных объектов и явлений в системе компьютерной математике Maple, Казанский университет, 2014.
- [2] Келдыш М.В.: О собственных значениях и собственных функциях некоторых классов несамосопряженных уравнений // Докл. АН СССР, 1951, Т.77, № 1. – С. 11-14.
- [3] Ильин В.А. О безусловной базисности на замкнутом интервале систем собственных и присоединенных функций дифференциального оператора второго порядка // Докл. АН СССР, 1983, Т. 273, № 5. – С. 1048-1053.
- [4] Рахимов М.Р. Оптимальное моделирование процессов теплопередачи и колебаний. Методы динамического программирования и спектрального разложения, научная монография, LAP, LAMBERT Academic Publishing, ISBN:978-620-3-30910-2.

## SOLUTION OF A NON-CLASSICAL PROBLEM FOR COMPUTER MODELING

S.G. Nazarov<sup>1</sup>, M.R. Rakhimov<sup>2</sup>

State Energy Institute of Turkmenistan, Mary, Turkmenistan,  
<sup>1</sup>energetikatdei@gmail.com, <sup>2</sup>rahymowmuhammet72@gmail.com

Abstract: This paper discusses a non-classical boundary value problem, known in the literature as the Bichadze-Samarsky problem. The obtained solution can be useful in computer-aided design in electronics and in the process of computer technology in general. The proposed procedure for constructing a solution based on spectral decomposition can be applied in computational mathematics for creating software packages. A twofold basis of Riesz eigenfunctions and adjoint functions for the solved boundary value problem is constructed, and the double decomposability of a priori given functions is established, which is an important result for the stability of oscillatory and diffusion processes.

Keywords: modeling, non-classical problem, Riesz basis, computational mathematics.

УДК 621.382.323; 538.9

ВЕРИФИКАЦИЯ МЕТОДИКИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ КОМПАКТНОЙ МОДЕЛИ  
GaAs ГЕТЕРОПЕРЕХОДНЫХ БИПОЛЯРНЫХ ТРАНЗИСТОРОВ

Новиков П.Э.<sup>1</sup>, Кратович П.С.<sup>2</sup>, Корсак К.В.<sup>1</sup>, Ловшенко И.Ю.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск,  
Республика Беларусь, [p.novikov@bsuir.by](mailto:p.novikov@bsuir.by)

<sup>2</sup>ОАО «Минский НИИ радиоматериалов», Минск, Республика Беларусь

Аннотация: Разработана методика определения параметров (экстракции) модели Mextram level 504 для гетеропереходных биполярных транзисторов (ГБТ) на основе GaAs. Экстрагированные параметры обеспечили высокую точность моделирования вольт-амперных характеристик, что подтверждает эффективность методики. Моделирование выполнено без использования специальных тестовых структур.

Ключевые слова: приборное моделирование, компактные модели, разработка моделей, экстракция параметров, гетеропереходные биполярные транзисторы, GaAs.

## I. ВВЕДЕНИЕ

Выбор подходящей модели – неотъемлемый этап разработки полупроводниковых устройств. Из-за высокой стоимости производства тестовых структур и низкой эффективности отладки технологических процессов и конструктивных особенностей на их основе, для этого целесообразнее использовать компьютерное моделирование. Как следствие, модели должны удовлетворять ряду требований, что обусловило появление множества различных моделей полупроводниковых приборов и их модификаций для применения в конкретных особенных случаях, например, для определенного класса устройств [1]. Моделирование приборных структур ГБТ на основе GaAs возможно осуществлять с помощью модели MEXTRAM level 504, которая предназначена для другого класса приборов, однако позволяет учитывать основные эффекты, протекающие в структурах ГБТ. К тому же, особое внимание в MEXTRAM level 504 уделено работе с производными первого и высшего порядка, что приводит к повышению точности при определении выходной проводимости, частот среза и низкочастотных искажений третьего порядка, а также улучшению сходимости. Эти факторы крайне важны при моделировании устройств, работающих в СВЧ-диапазоне, поэтому для исследования выбрана именно эта модель. Она включает в себя 71 параметр, для определения которых необходимо выполнить серию расчетов. Для использования модели в схемотехнических расчетах (компактной модели) необходимо определить численные значения каждого из параметров для конкретной структуры. Для определения параметров используются вольт-амперные характеристики.

## II. МЕТОДИКА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ MEXTRAM LEVEL 504

Реализована стратегия (методика определения), в соответствии с которой посредством использования модуля Utmost4 программного комплекса Silvaco проведена экстракция параметров модели Mextram level 504 [2-4]. Поскольку прямой режим работы транзистора более важен, чем обратный, эти параметры модели извлекаются в последнюю очередь. Таким образом, при необходимости можно пожертвовать точностью подгонки данных для обратного включения, чтобы добиться наилучшей сходимости данных для прямого включения транзистора.

Для определения параметров модели требуются прямые и обратные вольт-амперные характеристики, а также зависимости емкости каждого перехода от приложенного напряжения. Входные данные получены посредством компьютерного моделирования эксплуатационных характеристик типовой приборной структуры ГБТ в модуле Victory Procces программного комплекса Silvaco.

Предложенная методика определения параметров компактной модели состоит из семи этапов. Целью каждого этапа является оптимизация только тех параметров модели, которые оказывают наибольшее влияние на характеристику.

Модель Mextram объединяет уравнения емкости, которые и необходимо определить на первом этапе (чтобы избежать необходимости перенастраивать параметры модели постоянного тока позже), и заряда. Таким образом, на первом этапе определяются параметры модели: CJE, PE, VDE, CJC, PC, VDC, CJS, PS, VDS и XP, которые описывают зависимость емкости всех трех транзисторных переходов от напряжения. Максимальное отклонение результатов моделирования с учетом определенных

параметров модели от данных приборного моделирования (далее – отклонение) не превышает 0,02 % (среднее значение 0,01 %).

Второй этап включает определение параметров (по обратной зависимости Гуммеля): ток насыщения коллектор-эмиттер IS, ток насыщения базы при обратном включении IBR, коэффициент усиления идеального обратного тока базы BRI, сопротивление немодулированного эпитаксиального слоя RCV, переменная составляющая сопротивления базы при нулевом смещении RBV, постоянные составляющие сопротивления коллектора и базы RCC и RBC. Максимальное отклонение получено для параметров RCV, RBV, RCC и RBC (3,24 %), минимальное – IBR, BRI (0,29 %).

На третьем этапе определяется обратное напряжение Эрли VER. Максимальное отклонение составляет 50 %.

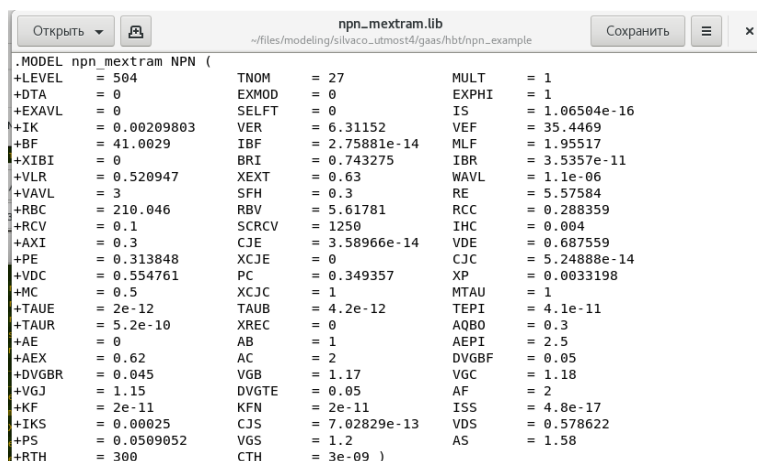
Четвертая секция используется для уточнения всех параметров, извлеченных в предыдущих двух секциях. Общая среднее отклонение не превышает 5,09 %.

Так как прямой режим работы наиболее важен, параметры модели Mextram 504, оказывающие на него наибольшее влияние, извлекаются в последнюю очередь. На пятом этапе определяются по прямой характеристике Гуммеля параметры IS, коэффициент идеального усиления прямого тока BF, ток насыщения неидеального прямого тока базы IBF, фактор неидеальности прямого тока базы MLF, сопротивление эмиттера RE и ток коллектор-эмиттер при высоком уровне инжекции IK.

На шестом этапе определяется прямое напряжение Эрли (максимальное отклонение 1,29 %).

Последний этап используется для уточнения всех параметров, характеризующих прямой режим работы транзистора и определенных на предыдущих этапах.

В результате реализации методики определения параметров компактной модели Mextram level 504 получен набор параметров (рисунок 1) ГБТ, который может быть использован в программах схемотехнического моделирования и топологического проектирования.



```
.MODEL npn_mextram NPN (
+LEVEL = 504          TNOM = 27          MULT = 1
+DTA = 0              EXMOD = 0          EXPHI = 1
+EXAVL = 0            SELFT = 0          IS = 1.06504e-16
+IK = 0.00209803     VER = 6.31152          VEF = 35.4469
+BF = 41.0029        IBF = 2.75881e-14      MLF = 1.95517
+XIBI = 0             BRI = 0.743275          IBR = 3.5357e-11
+VLR = 0.520947      XEXT = 0.63            WAVL = 1.1e-06
+VAVL = 3            SFH = 0.3            RE = 5.57584
+RBC = 210.046       RBV = 5.61781          RCC = 0.288359
+RCV = 0.1           SCRCV = 1250           IHC = 0.004
+AXI = 0.3           CJE = 3.58966e-14     VDE = 0.687559
+PE = 0.313848       XCJE = 0              CJC = 5.24888e-14
+VDC = 0.554761      PC = 0.349357         XP = 0.0033198
+MC = 0.5            XCJC = 1              MTAU = 1
+TAUE = 2e-12        TAUB = 4.2e-12        TEPI = 4.1e-11
+TAUR = 5.2e-10      XREC = 0              AQB0 = 0.3
+AE = 0              AB = 1                AEPI = 2.5
+AEX = 0.62          AC = 2                DVGBF = 0.05
+DVGBR = 0.045       VGB = 1.17           VGC = 1.18
+VGJ = 1.15          DVGTE = 0.05         AF = 2
+KF = 2e-11          KFN = 2e-11          ISS = 4.8e-17
+IKS = 0.00025       CJS = 7.02829e-13    VDS = 0.578622
+PS = 0.0509052     VGS = 1.2            AS = 1.58
+RTH = 300           CTH = 3e-09 )
```

Рисунок 1. Набор значений параметров модели Mextram level 504

Сравнение исходных характеристик и характеристик, полученных из компактной модели для схемотехнического моделирования, приведено на рисунке 2. За счет снижения точности в области обратных токов, удалось достичь относительной погрешности не более 10% относительно исходных данных без использования специальных тестовых структур для экстракции и верификации.

### III. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложена методика (стратегия) определения параметров (экстракции) для реализации в моделях GaAs ГБТ на основе Mextram level 504. Предложенная стратегия состоит из 7 шагов, на каждом из которых численными методами определяются наиболее важные параметры, влияющие на электрические характеристики. Результатом выполнения описанной стратегии экстракции стал набор параметров модели. Вольт-амперные характеристики, полученные с использованием экстрагированных значений параметров модели, соответствуют результатам натурального эксперимента, что свидетельствует об эффективности исследуемой методики экстракции. Максимальная относительная погрешность схемотехнического моделирования с использованием экстрагированного набора параметров в сравнении с экспериментальными данными составила не более 10% без использования специальных тестовых структур.

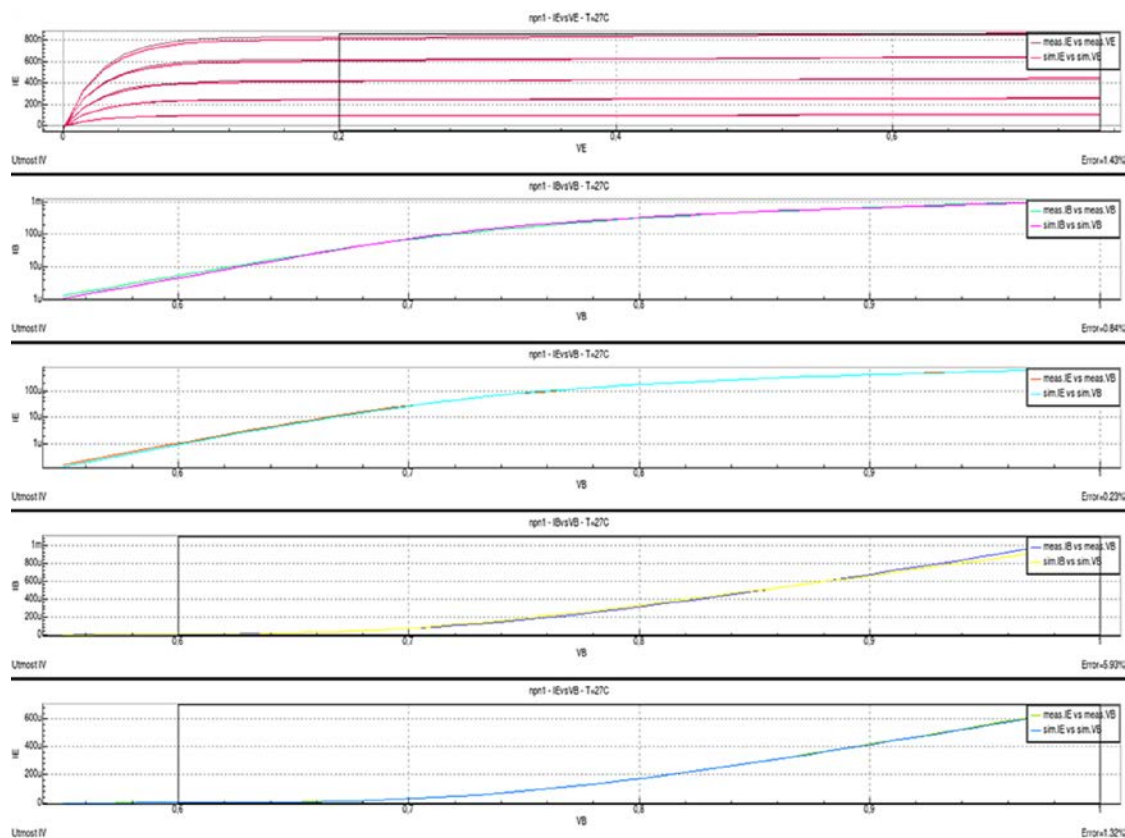


Рисунок 2. Сравнение результатов приборного и схемотехнического моделирования для приборной структуры ГБТ

## БЛАГОДАРНОСТЬ

Работа выполнена в рамках гранта БРФФИ Т23МЭ-042.

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] Денисенко, В. В. Компактные модели МОП-транзисторов для SPICE в микро- и наноэлектронике / В. В. Денисенко. – М. : ФИЗМАТЛИТ, 2010. – 408 с.
- [2] Parameter Extraction for the Bipolar Transistor Model Mextram Level 504 : Unclassified Report / J.C.J. Paasschens, W.J. Kloosterman, and R.J. Havens // Koninklijke Philips Electronics, 2001. – 111 p.
- [3] Mijalković, S. Compact modeling of SiGe HBTs: Mextram / S. Mijalković // Measurement and Modeling of Silicon Heterostructure Devices. – CRC Press, 2018. – P. 7-1.
- [4] Improved compact modeling of SiGe HBT linearity with MEXTRAM/ Zhang H. et al. // IEEE Transactions on Electron Devices. – 2021. – Vol. 68. – №. 6. – P. 2597-2603.

## VERIFICATION OF A METHODOLOGY FOR DETERMINING THE PARAMETERS OF A COMPACT MODEL FOR GaAs HETEROJUNCTION BIPOLAR TRANSISTORS

P.E. Novikov<sup>1</sup>, P.S. Kratovich<sup>2</sup>, K.V. Korsak<sup>1</sup>, I.Yu. Lovshenko<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus,  
[p.novikov@bsuir.by](mailto:p.novikov@bsuir.by)

<sup>2</sup>OJSC «Minsk Research Institute of Radio Materials», Minsk, Republic of Belarus

Abstract: A parameter extraction methodology for Mextram level 504 models of GaAs heterojunction bipolar transistors has been designed. The extracted parameters yielded high-accuracy simulation of current-voltage characteristics, which shows the methodology's effectiveness. Simulations were performed without the use of special test structures.

Keywords: device modelling, compact models, model implementation, parameter extraction, heterojunction bipolar transistor, GaAs.



УДК 538.9, 537.6

ДВУМЕРНЫЕ МАГНИТНЫЕ МАТЕРИАЛЫ  $MX_2$  И  $MX_Y$  (ГДЕ М – ПЕРЕХОДНЫЙ МЕТАЛЛ;  
X, Y – ХАЛЬКОГЕН, X  $\neq$  Y): ИССЛЕДОВАНИЕ В РАМКАХ DFT

Гвоздовский Д.Ч.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
Минск, Республика Беларусь, [gvozдовsky@bsuir.by](mailto:gvozдовsky@bsuir.by)

Аннотация: В данной работе представлена методика поиска новых двумерных материалов, включающая с себя критерии термодинамической и динамической устойчивостей, механической и термической стабильностей. Среди 360 2D-структур на основе халькогена 58 из 180 соединений с симметричным расположением халькогена ( $MX_2$ ) и 50 из 180 соединений с асимметричным расположением халькогена ( $MX_Y$ ) являются стабильными материалами. Анализ магнитных свойств 2D-структур показал, что 69 соединений – немагнитные 2D-материалы, 39 соединений – магнитные 2D-материалы (29 – ферромагнетики и 10 – антиферромагнетики). Для 2D ферромагнетиков рассчитаны энергии магнитной анизотропии, что позволит углубить понимание их магнитных характеристик. На основе полученных результатов создана база данных, содержащая рекомендуемые к дальнейшему исследованию материалы.

Ключевые слова: двумерный материал, дихалькогенид, основное магнитное состояние, энергия магнитной анизотропии.

## I. ВВЕДЕНИЕ

Для современных устройств магнитной памяти необходимы новые двумерные материалы, которые будут термодинамически стабильными и сохранять магнитный порядок при комнатной температуре. Поиск таких материалов, как правило, начинается с компьютерного моделирования. Результаты компьютерного моделирования позволят разработать рекомендации для экспериментов по синтезу новых материалов, а также дополнят базы данных со свойствами перспективных материалов, что позволят в дальнейшем использовать технологии машинного обучения.

За последние два десятилетия исследователи достигли значительного прогресса в изучении структуры и свойств низкоразмерных материалов, включая двумерные материалы [1]. Существует несколько распространенных методов прогнозирования и создания новых 2D-материалов, включая экспериментальные [2], *ab initio* [3] и машинное обучение [4]. Использование машинного обучения и больших данных в материаловедении привело к созданию баз данных, содержащих различные характеристики материалов [5,6]. Базы данных позволили провести масштабные исследования 2D-материалов, такие как поиск перспективных 2D-магнитных материалов. В [7] из 4264 рассмотренных 2D-материалов 85 ферромагнитных и 61 антиферромагнитный 2D-материал были отмечены как потенциально синтезируемые. Очевидно, что эти базы данных еще предстоит дополнить новыми обнаруженными структурами.

Особый интерес среди перспективных 2D-материалов вызывают галогениды и халькогениды переходных металлов для применения в электронике. В работе исследуются электронные и магнитные свойства стабильных 2D-структур с формулами  $MX_2$  и  $MX_Y$  (где М – переходный металл; X, Y – халькоген, X  $\neq$  Y).

## II. МЕТОДИКА РАСЧЕТА

Алгоритм поиска новых двумерных материалов представлен на рисунке 1. Для поиска новых двумерных материалов использовался программный пакет VASP в качестве высокопроизводительного интерфейса для предварительной обработки входных файлов и постобработки расчетных данных, полученных с помощью кода VASP. Для заданного структурного файла POSCAR при помощи программного пакета VASPKIT проводится проверка входных файлов (POSCAR, KPOINTS и INCAR). Затем выполняются структурная релаксация на уровне PBE-D3 с учетом спиновой поляризации для определения основного электронного и магнитного состояний каждого двумерного материала. Для основного состояния 2D-структуры рассчитываются: теплота образования для определения термодинамической устойчивости; дисперсионные фононные спектры для определения динамической устойчивости; константы жесткости для определения механической стабильности; серия численных экспериментов на основании молекулярной динамики для определения термической стабильности.

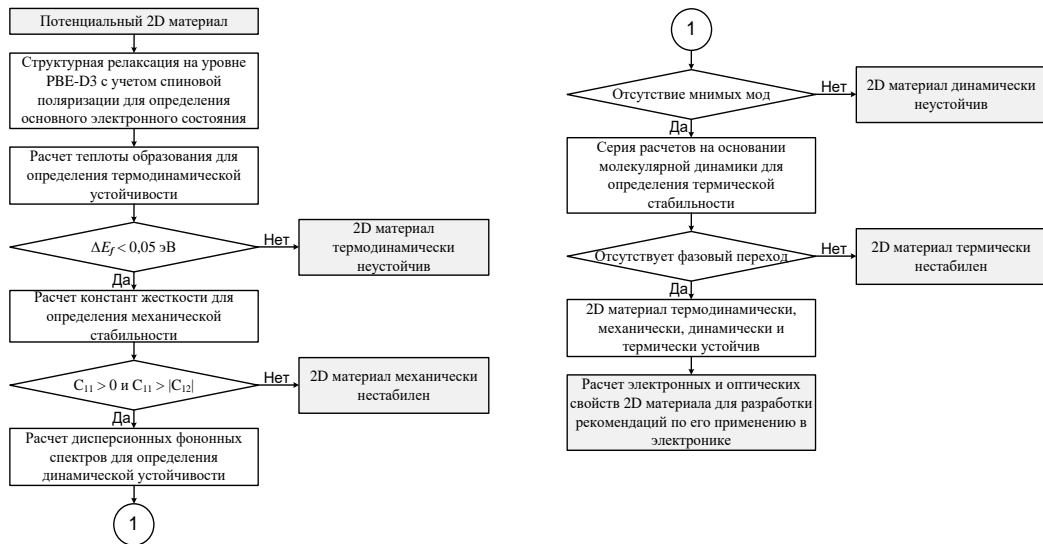


Рисунок 1. Алгоритм поиска новых двумерных материалов

Если потенциальный кандидат термодинамически, механически, термически и динамически является устойчивой 2D-структурой, то проводится серия дополнительных расчетов для детального изучения его магнитных и электронных свойств для разработки рекомендаций по его применению в электронике, спинтронике, сенсорике и оптоэлектронике.

### III. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

В ходе проведения научных исследований выполнена серия *ab initio* расчетов для установления стабильности и магнитных свойств полиморфных модификаций (1H- и 1T-фазы) 2D-материалов с формулами  $\text{MX}_2$  и  $\text{MXY}$  (где М – переходный металл; X, Y – халькоген,  $X \neq Y$ ), ранее неизвестных и потенциально синтезируемых монослоев. Название структуры «1T» характеризует принадлежность 2D-структуры к тригональной точечной группе D3d, а название структуры «1H» характеризует принадлежность 2D-структуры к гексагональной точечной группе D3h. Цифра «1» указывает количество слоев, образующих элементарную ячейку. В исследуемых структурах переходный металл (М) расположен в центре слоя, а халькоген (X и Y) – сверху и снизу монослоя переходного металла. Если один из двух атомов халькогена заменить на атом другого халькогена, получают так называемые Янус-структуры. Асимметричность относительно базисной плоскости двумерного слоя приводит к новым свойствам. Виды сверху и сбоку 1H- и 1T-фаз полиморфов  $\text{MXY}$  показаны на рисунке 2. Кристаллическая структура аналогична рисунку 2 для полиморфов  $\text{MX}_2$  с условием, что  $X = Y$ .

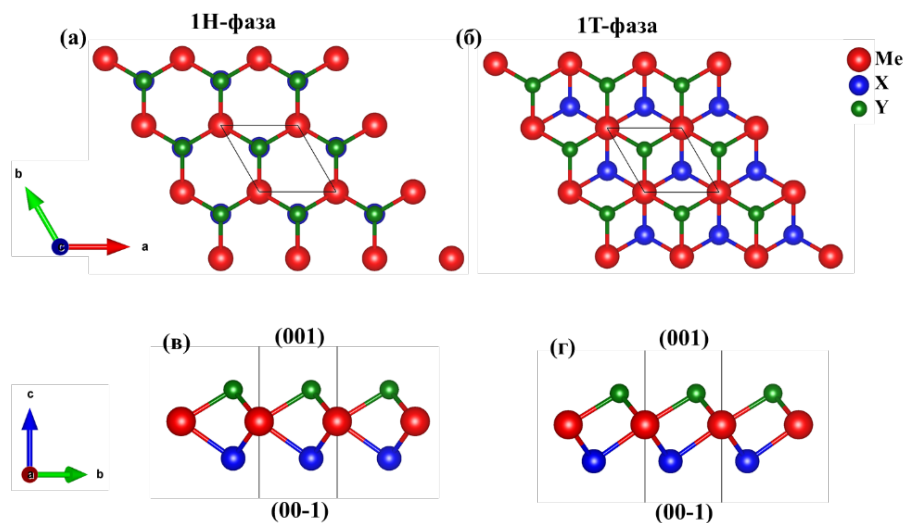


Рисунок 2. Виды сверху (а, б) и сбоку (в, г) 1H- и 1T-фаз структур  $\text{MXY}$

Критерий выбора термодинамически устойчивых монослойных дихалькогенидов переходных металлов (ДПМ) установлен с учетом погрешности методов расчета. Численное значение теплоты образования  $\Delta E_f$  должно быть меньше 0,22 эВ.

Установлено, что 59 из 180 2D-структур  $MX_2$  термодинамически нестабильными соединениями. Лишь 64 структур 1T- $MX_2$  и 57 структур 1H- $MX_2$  численное значение  $\Delta E_f$  меньше 0,22 эВ. Установлено, что 52 из 180 2D-структур  $MXY$  термодинамически нестабильными соединениями. Лишь 69 структур 1T- $MXY$  и 59 структур 1H- $MXY$  численное значение  $\Delta E_f$  меньше 0,22 эВ.

На следующем этапе оценена механическая стабильность для термодинамически устойчивых 2D-структур, которая описывает устойчивость материала к деформациям или искажениям при наличии напряжения. Для этого рассчитываются константы упругой жесткости  $C_{11}$  и  $C_{12}$ . Установлено, что согласно критериям Борна-Хуанга для гексагональных 2D-структур ( $C_{11} > 0$  и  $C_{11} > |C_{12}|$ ) 89 из 121 исследованных 2D-структур  $MX_2$  и 96 из 128 исследованных 2D-структур  $MXY$  являются механически стабильными соединениями.

Динамическую устойчивость 2D-структур оценивали путем расчета фононных спектров термодинамически и механически стабильных соединений. Установлено, что 33 из 50 1T- $MX_2$ , 31 из 39 1H- $MX_2$ , 27 из 50 1T- $MXY$  и 28 из 46 1H- $MXY$  являются динамически устойчивыми 2D-структурами, так как на фононных дисперсионных кривых этих структур отсутствуют мнимые моды. Такой вывод сделан на основе детального анализа полученных фононных спектров исследованных материалов.

При помощи *ab initio* молекулярно-динамического (AIMD) моделирования исследовалась термическая стабильность при конечных температурах 300 K и периоде времени 4 пс. Для моделирования AIMD использовался канонический ансамбль (NVT) со схемой термостата Ноза-Гувера. На основе результатов AIMD моделирования было установлено, что 4 Янус-структуры (1T-YS<sub>2</sub>, 1H-FeSSe, 1H-CoSSe и 1H-FeSeTe) и 1T-ZnSe<sub>2</sub> изменяют свои изначальные структуры и не имеют строгой упорядоченности (являются термически нестабильными). Соединения 1T-YS<sub>2</sub>, 1T-RuS<sub>2</sub>, 1H-ScS<sub>2</sub>, 1H-YS<sub>2</sub>, 1H-YS<sub>2</sub> изменяют свою изначальную структуру, однако, в отличие от 1T-ZnSe<sub>2</sub>, эти соединения переходят в энергетически более выгодное состояние образуя новую полиморфную модификацию 2D-материала с формулой  $MX_2$ . Соединение 1H-MnSeTe изменяет свою изначальную структуру (1H-фаза) и переходит в энергетически более выгодное состояние 1T-MnSeTe 2D-материала. Оставшиеся 58 из 64  $MX_2$  2D-структуры и 50 из 55  $MXY$  2D-структуры являются термически стабильными материалами при температуре 300 K, поскольку для них не наблюдаются колебания энергии и сохраняется изначальная структура при заданной температуре.

В таблице 1 представлены результаты расчета основного магнитного состояния для 2D-структуры на основе ДПМ, где NM – немагнитная система; FM – магнитная система, имеющая ферромагнитный порядок; AFM – магнитная система, имеющая антиферромагнитный порядок. Установлено, что 38 соединений с формулой  $MX_2$  являются немагнитными 2D-материалами, 20 соединений – магнитные 2D-материалы (14 – ферромагнетики и 6 – антиферромагнетики). Установлено, что 31 соединение с формулой  $MXY$  являются немагнитными 2D-материалами, 19 соединений – магнитные 2D-материалы (15 – ферромагнетики и 4 – антиферромагнетики).

Таблица 1. Основные магнитные состояния 2D-структур на основе ДПМ

	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Y	Zr	Nb	Mo	Pd	Lu	Hf	Ta	W	Pt
<b>1T-MS<sub>2</sub></b>	NM	FM	–	FM	AFM	–	NM	–	NM	NM	–	NM	NM	NM	NM	–	NM
<b>1T-MSSe</b>	NM	–	FM	–	–	–	NM	–	NM	NM	–	NM	–	NM	FM	–	NM
<b>1T-MSe<sub>2</sub></b>	NM	–	–	FM	–	NM	–	–	NM	NM	–	NM	–	NM	FM	–	NM
<b>1T-MSTe</b>	NM	–	–	–	–	–	FM	–	–	NM	–	NM	–	NM	FM	–	NM
<b>1T-MSeTe</b>	NM	–	FM	AFM	–	–	FM	–	NM	NM	–	NM	–	NM	FM	–	NM
<b>1T-MTe<sub>2</sub></b>	NM	–	–	–	FM	–	FM	–	NM	NM	–	NM	–	NM	FM	–	NM
<b>1H-MS<sub>2</sub></b>	NM	FM	NM	AFM	AFM	–	NM	–	–	–	NM	–	–	–	FM	NM	–
<b>1H-MSSe</b>	NM	FM	AFM	FM	–	–	FM	FM	–	–	NM	–	–	–	FM	NM	–
<b>1H-MSe<sub>2</sub></b>	NM	–	NM	FM	AFM	–	FM	–	NM	–	NM	–	–	NM	FM	NM	–
<b>1H-MSTe</b>	NM	–	AFM	–	–	–	–	–	NM	–	NM	–	–	NM	–	NM	–
<b>1H-MSeTe</b>	NM	–	AFM	–	–	–	FM	–	NM	FM	NM	–	–	NM	FM	NM	–
<b>1H-MTe<sub>2</sub></b>	NM	–	AFM	FM	AFM	–	–	–	NM	–	NM	–	–	NM	FM	NM	–

Рассчитана энергия магнитной анизотропии для 14 (с симметричным расположением халькогена) и 15 (с асимметричным расположением халькогена) стабильных двумерных ферромагнетиков на основе ДПМ. Полученные численные значения  $E_{MAE}$  могут быть использованы для более детального анализа магнитных свойств 2D-структур на основе ДПМ.

На основании полученных результатов создана база данных (<https://github.com/hvtee/Database-of-properties-of-2D-materials-with-MX2-and-MX1X2-structure/tree/main>) рекомендованных к дальнейшему исследованию материалов, содержащая подробные расчетные параметры и свойства бинарных  $MeX_2$  и тройных  $MeXY$  2D-соединений.

#### IV. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработана методика поиска стабильных двумерных материалов, включающая с себя критерии термодинамической и динамической устойчивостей, механической и термической стабильностей. Установлено, что 58 из 180  $MX_2$  2D-структур и 50 из 180  $MeXY$  2D-структур являются стабильными материалами при температуре 300 К. Анализ магнитных свойств 2D-структур показал, что 38 соединений  $MX_2$  являются немагнитными материалами, в то время как у 20 соединений наблюдаются ферромагнитные и антиферромагнитные свойства. Для 2D ферромагнетиков были рассчитаны энергии магнитной анизотропии, что позволит углубить понимание их магнитных характеристик. На основе полученных результатов создана база данных, содержащая рекомендуемые к дальнейшему исследованию материалы, что может служить важным ресурсом для ученых в области 2D-материалов.

#### БЛАГОДАРНОСТЬ

Исследования проводятся в рамках выполнения задания 3.02.3 государственной программы научных исследований «Конвергенция – 2025» и задания 2.07 государственной программы научных исследований «Материаловедение, новые материалы и технологии».

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Han Z. J. et al. Recent progress in plasma-assisted synthesis and modification of 2D materials // 2D Materials. – 2018. – Т. 5. – №. 3. – С. 032002.
- [2] Geng J. et al. Ab initio design of a new family of 2D materials: transition metal carbon nitrogen compounds (MCNs) // Journal of Materials Chemistry C. – 2021. – Т. 9. – №. 14. – С. 4748-4756.
- [3] Prezhdo O. V. Advancing physical chemistry with machine learning // The Journal of Physical Chemistry Letters. – 2020. – Т. 11. – №. 22. – С. 9656-9658.
- [4] Botella R., Fernández-Catalá J., Cao W. Experimental  $ni_3teo_6$  synthesis condition exploration accelerated by active learning // Materials Letters. – 2023. – Т. 352. – С. 135070.
- [5] Rasmussen F. A., Thygesen K. S. Computational 2D materials database: electronic structure of transition-metal dichalcogenides and oxides // The Journal of Physical Chemistry C. – 2015. – Т. 119. – №. 23. – С. 13169-13183.
- [6] Torelli D. et al. High-throughput computational screening for two-dimensional magnetic materials based on experimental databases of three-dimensional compounds // npj Computational Materials. – 2020. – Т. 6. – №. 1. – С. 158.
- [7] Gjerding M. N. et al. Recent progress of the computational 2D materials database (C2DB) // 2D Materials. – 2021. – Т. 8. – №. 4. – С. 044002.

TWO-DIMENSIONAL MAGNETIC MATERIALS  $MX_2$  AND  $MeXY$  (WHERE M – TRANSITION METAL;  
X, Y –CHALCOGENE, X  $\neq$  Y): DFT STUDY

D.C. Hvazdouski

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus,  
[gvozдовский@bsuir.by](mailto:gvozдовский@bsuir.by)

Abstract: This work presents a methodology for the search of new two-dimensional materials, which includes criteria for thermodynamic and dynamic stability, as well as mechanical and thermal stability. Among 360 2D structures based on chalcogens, only 58 out of 180 compounds with symmetric chalcogen arrangements ( $MX_2$ ) and 50 out of 180 compounds with asymmetric chalcogen arrangements ( $MeXY$ ) are stable materials. The analysis of the magnetic properties of the 2D structures revealed that 69 compounds are non-magnetic 2D materials, while 39 compounds are magnetic 2D materials (29 ferromagnets and 10 antiferromagnets). For the

2D ferromagnets, the magnetic anisotropy energies were calculated, which will enhance the understanding of their magnetic characteristics. Based on the obtained results, a database has been created containing materials recommended for further investigation.

Keywords: two-dimensional material, dichalcogenide, ground magnetic state, magnetic anisotropy energy.

УДК 621.384.3

## РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕПЛОЙ ПОСТОЯННОЙ ВРЕМЕНИ ДЛЯ НЕОХЛАЖДАЕМЫХ ТЕПЛОВЫХ ДЕТЕКТОРОВ БОЛОМЕТРИЧЕСКОГО ТИПА

Корсак К.В., Новиков П.Э., Ловшенко И.Ю.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,  
Минск, Республика Беларусь, [k.korsak@bsuir.by](mailto:k.korsak@bsuir.by)

Аннотация: в данной работе представлена методика моделирования тепловой постоянной времени для неохлаждаемых тепловых детекторов болометрического типа (микроболометров). Для исследования используется структура микроболометра, созданного с использованием технологии микроэлектромеханических систем. Приведены основные теоретические сведения о физических процессах и характеристиках, лежащих в основе устройства микроболометра. Рассмотрены основные электрофизические параметры, влияющие на постоянную времени. Представлено моделирование переходного термического процесса типовой структуры микроболометра. Описан физико-математический аппарат расчёта постоянной времени. Для определения численного значения постоянной времени использовался метод наименьших квадратов в комплексе с методом линейной регрессии с целью нахождения коэффициентов аппроксимационной кривой. Для эффективного применения названных методов производилось нормирование входных данных.

Ключевые слова: неохлаждаемый тепловой детектор болометрического типа, инфракрасный датчик, компьютерное моделирование, постоянная времени, микроболометр.

### I. ВВЕДЕНИЕ

Тепловые детекторы находят все более широкое применение в различных областях, включая системы безопасности и видеонаблюдения, пожаротушение и биомедицину. Особый интерес представляет разработка высокоэффективных неохлаждаемых тепловых детекторов болометрического типа (микроболометр). Эти устройства используют резистивный элемент с низкой теплоемкостью и высоким температурным коэффициентом сопротивления. Поглощаемое тепловое излучение вызывает значительное изменение сопротивления, что регистрируется как изменение напряжения при прохождении через детектор контролируемого тока. В отличие от полупроводниковых детекторов, в микроболометрах изменение сопротивления происходит исключительно за счет нагрева, без прямого фотонно-электронного взаимодействия. В работе используется структура микроболометра, созданного с использованием технологии микроэлектромеханических систем. Эта структура обладает рядом преимуществ: низким энергопотреблением, относительно невысокой стоимостью и возможностью работы при комнатной температуре [1–3].

Ключевой характеристикой микроболометра является постоянная времени ( $\tau$ ), определяющая скорость реакции на изменение теплового потока [4]. Постоянная времени характеризует скорость, с которой температура болометра реагирует на изменение мощности падающего излучения. Более низкая постоянная времени означает более быструю реакцию и более высокую частоту кадров.

### II. ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПОСТОЯННОЙ ВРЕМЕНИ

Основной физический процесс, определяющий постоянную времени, – это теплообмен между чувствительным элементом микроболометра и окружающей средой. Он включает в себя:

1. Теплоемкость ( $C$ ): Количество теплоты, необходимое для изменения температуры чувствительного элемента на 1 градус. Зависит от материала, размера и геометрии элемента.

2. Теплопроводность ( $G$ ): Скорость передачи тепла между чувствительным элементом и окружающей средой. Зависит от материала подложки, конструкции теплоотвода и условий окружающей среды.

Простейшая модель описывает постоянную времени как отношение теплоемкости к теплопроводности:  $\tau = C/G$ . Эта модель предполагает экспоненциальный спад температуры после прекращения воздействия излучения.

Используя методы компьютерного моделирования, наиболее простым решением нахождения постоянной времени является построение графика остывания микроболометра от времени, по сравнению с непосредственным расчётом С и G исходя из конструктивных и электрофизических параметров датчиков.

Для компьютерного моделирования используется программный комплекс компании Coventor. Использование средств автоматизированного проектирования обеспечит повышение точности результатов проектирования, а также существенное сокращение временных (в разы) и материальных (на порядок) затрат при разработке новых устройств.

Используя типовую структуру микроболометра (рисунок 1), проведено компьютерное моделирование переходного процесса, связанного с температурой и происходящего при сообщении тепловой мощности микроболометру [5, 6].

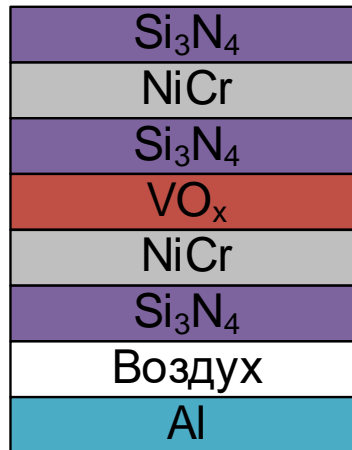


Рисунок 1. Типовая структура микроболометра

Этот процесс может быть описан следующим уравнением, описывающим увеличение температуры в зависимости от мощности падающего излучения:

$$C \frac{d(\Delta T)}{dt} + G \Delta T = Q, \quad (1)$$

где  $\Delta T = T(t) - T_0$ ,  $Q$  – мощность падающего излучения.

Решая уравнение с граничными условиями  $Q = 0$  при  $t \geq 0$  (процесс охлаждения микроболометра после нагревания до определенной температуры и установления состояния термодинамического равновесия), можно получить следующую модель переходного процесса:

$$\Delta T(t) = \frac{Q}{G} e^{-\frac{G}{C}t}. \quad (2)$$

Таким образом, имея приведенную зависимость, представляется возможным расчет  $t$  из полученного в Coventor переходного термического анализа путем исследования температурной характеристики детектора как функции времени при охлаждении после нагревания до максимальной рассчитанной температуры при постоянном падающем инфракрасном излучении. Для обеспечения универсальности метода, целесообразно нормировать полученные значения относительно максимального, что также повысит точность последующих расчетов, так как численные методы для определения коэффициентов экспоненциальной модели чувствительны к входным данным.

$$e^{-\frac{t}{\tau}} = \frac{T(t) - T_0}{T_{MAX} - T_0}, \quad (3)$$

где  $T(t)$  – температура датчика в момент времени при остывании;  $T_0$  – конечная температура при остывании (обычно 300 K);  $T_{MAX}$  – начальная температура при остывании.

Вид переходного термического анализа представлен на рисунке 2.

Зная, что качественно график представляет собой экспоненциальную зависимость, возможно найти экспоненциальную кривую вида:

$$y = a \times \exp(b \times x), \quad (4)$$

где  $y$  – зависимая переменная (значения, которые мы пытаемся предсказать);  $x$  – независимая переменная (значения, которые мы используем для предсказания);  $a$  – коэффициент, определяющий начальное значение;  $b$  – коэффициент, определяющий скорость роста (или убывания) экспоненты.

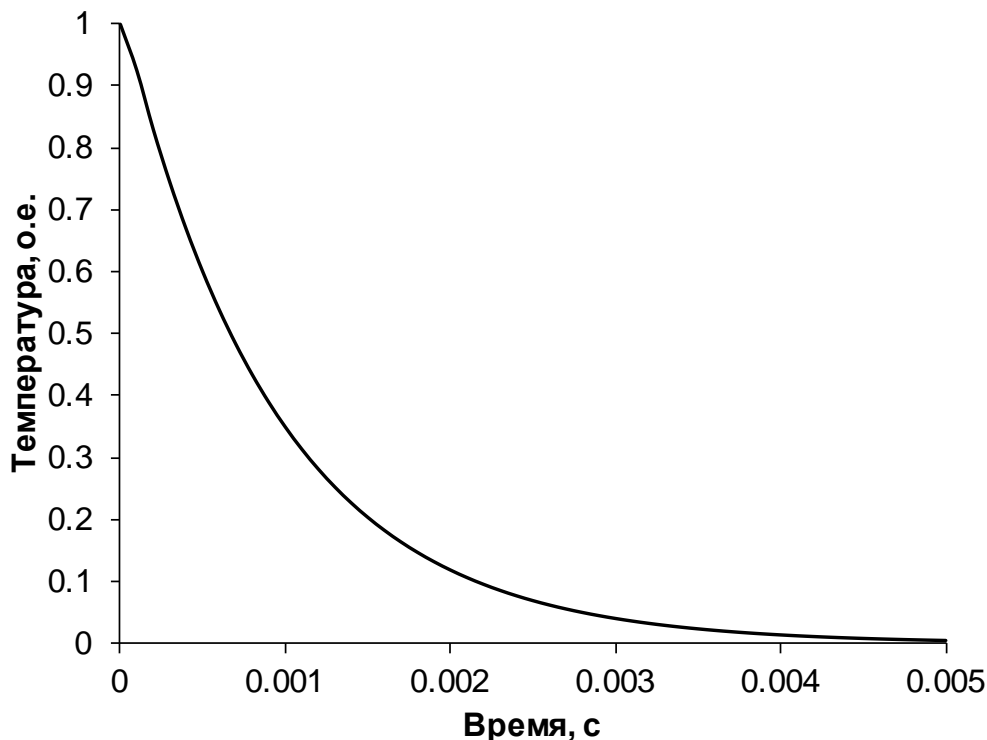


Рисунок 2. Зависимость температуры от времени при остывании микроболометра

Термическая постоянная времени определяется как

$$\tau = \frac{1}{|a|}. \quad (5)$$

Наиболее простым методом определения коэффициентов кривой из данных переходного термического анализа является использование метода линейной регрессии, преобразуя экспоненциальную модель в линейную с помощью логарифмирования:

$$\ln(y) = \ln(a) + b \times x. \quad (6)$$

Теперь это линейная зависимость между  $\ln(y)$  и  $x$ , где  $\ln(a)$  – свободный член,  $b$  – угловой коэффициент.

Используя метод наименьших квадратов для нахождения значений  $a$  и  $b$ , согласно которому минимизируется сумма квадратов отклонений между фактическими значениями  $y$  и значениями, предсказанными экспоненциальной моделью. Этот процесс включает в себя решение системы линейных уравнений, полученных из условия минимизации суммы квадратов отклонений [7].

Таким образом, для зависимости на рисунке 2, получена экспоненциальная зависимость

$$y = 1,0278e^{-1081,2067x}. \quad (7)$$

Таким образом, постоянная времени  $\tau = 0,925$  мс. Полученные коэффициенты  $a$  и  $b$  обеспечивают коэффициент корреляции  $R^2 = 0.99999365$  относительно исходных данных.

### III. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате работы описан метод моделирования тепловой постоянной времени для неохлаждаемых микроболометров, разработанных с использованием технологии микроэлектромеханических систем, а также изложены основные физические принципы работы микроболометра и рассмотрены ключевые электрофизические параметры, определяющие его постоянную времени. Моделирование проведено

для типовой структуры микроболометра, с подробным описанием используемого физико-математического аппарата. Численное значение постоянной времени получено методом наименьших квадратов, применённым к линейной регрессии после нормирования входных данных для повышения точности аппроксимации, и составила 0,925 мс, при этом коэффициент корреляции для коэффициентов  $a = 1,0278$  и  $b = -1081,2067$ , составил  $R^2 = 0.99999365$ .

#### БЛАГОДАРНОСТЬ

Исследования выполняются при финансовой поддержке и в рамках обеспечения решения задач государственной программы научных исследований «Фотоника, опто- и микроэлектроника» (задание 3.3.3).

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Wood R. A., Han C. J., Kruse P. W. (1992) Integrated Uncooled Infrared Detector Imaging Arrays. Solid-State Sensor and Actuator Workshop, 5th Technical Digest, IEEE. 132–135.
- [2] Takamuro D., Tomohiro M., Takaki S. (2011) Development of New SOI Diode Structure for Beyond 17-umPixel Pitch SOI Diode Uncooled IRFPAs. Proceedings of SPIE – the International Society for Optical Engineering. (8012), 80121E.
- [3] Li C., Han C. J., Skidmore G. D., Hess C. (2010) DRS Uncooled VOx Infrared Detector Development and Production Status. Proc SPIE. (7660), 76600V.
- [4] Svatoš V. et al. Precise determination of thermal parameters of a microbolometer //Infrared Physics & Technology. – 2018. – Т. 93. – С. 286-290.
- [5] Van Trieu T. et al. Application of Cad Systems to Accounting for Mechanical Stresses in the Development of Uncooled Thermal Detectors of the Bolometric Type //ЦИФРОВАЯ ТРАНСФОРМАЦИЯ. – 2023. – Т. 29. – №. 1. – С. 73.
- [6] Niklaus F., Vieider C., Jakobsen H. MEMS-based uncooled infrared bolometer arrays: a review //MEMS/MOEMS technologies and applications III. – 2008. – Т. 6836. – С. 125-139.
- [7] Gavin H. P. The Levenberg-Marquardt algorithm for nonlinear least squares curve-fitting problems //Department of Civil and Environmental Engineering Duke University August. – 2019. – Т. 3.

#### DEVELOPMENT OF A THERMAL TIME CONSTANT MODELING TECHNIQUE FOR UNCOOLED THERMAL DETECTORS OF BOLOMETRIC TYPE

K.V. Korsak, P.E. Novikov, I.Yu. Lovshenko

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus,  
[k.korsak@bsuir.by](mailto:k.korsak@bsuir.by)

**Abstract:** This work presents a methodology for modeling the time constant of uncooled bolometric thermal detectors (microbolometers). The research utilizes a microbolometer structure fabricated using microelectromechanical systems technology. The fundamental theoretical information on the physical processes and characteristics underlying the microbolometer device is provided. The main electrophysical parameters affecting the time constant are considered. Modeling of the transient thermal process of a typical microbolometer structure is presented. The physico-mathematical apparatus for calculating the time constant is described. The least squares method in conjunction with linear regression was used to determine the numerical value of the time constant, aiming to find the coefficients of the approximating curve. Input data normalization was performed for the efficient application of these methods.

**Keywords:** uncooled thermal detector of bolometric type, infrared sensor, computer simulation, time constant, microbolometer.



*Научное издание*

# **КОМПЬЮТЕРНОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ В ЭЛЕКТРОНИКЕ**

**(EDA Conference 2024)**

Сборник трудов Международной научно-практической конференции

(Республика Беларусь, г. Минск, 28 ноября 2024 года)

В авторской редакции  
Ответственный за выпуск *В. Р. Стемпицкий*  
Компьютерная верстка *Д. Ч. Гвоздовский*

Подписано в печать 26.11.2024. Формат 60×84 1/8. Бумага офсетная. Гарнитура «Arial».  
Отпечатано на ризографе. Усл. печ. л. 23,48. Уч.-изд. л. 23,0. Тираж 68 экз. Заказ 190.

Издатель и полиграфическое исполнение: учреждение образования  
«Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники».  
Свидетельство о государственной регистрации издателя, изготовителя,  
распространителя печатных изданий №1/238 от 24.03.2014,  
№2/113 от 07.04.2014, №3/615 от 07.04.2014.  
Ул. П. Бровки, 6, 220013, г. Минск