МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

# НОВЫЕ ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ИССЛЕДОВАНИИ СЛОЖНЫХ СТРУКТУР

**МАТЕРИАЛЫ**
**ПЯТНАДЦАТОЙ МЕЖДУНАРОДНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ**

**16–20 сентября 2024 г.**

Томск
Издательство Томского государственного университета
2024

УДК 004(082)
ББК 73я431
Н76



Н76 **Новые информационные технологии в исследовании сложных структур :** материалы Пятнадцатой Международной конференции, 16–20 сентября 2024 г. – Томск : Издательство Томского государственного университета, 2024 – 94 с.

ISBN 978-5-907722-98-9

Пятнадцатая конференция международная конференция «Новые информационные технологии в исследовании сложных структур» была проведена в посёлке Катунь Алтайского края с 16 по 20 сентября 2024 г.

Материалы сборника ориентированы на использование специалистами в области информационных технологий в различных сферах человеческой деятельности, включая вычислительные и телекоммуникационные системы, образование, архитектуру и градостроительство, охрану природы, здравоохранение, разработку систем искусственного интеллекта, исследование дискретных и стохастических структур управления и связи.

УДК 004(082)
ББК 73я431


ISBN 978-5-907722-98-9

патологий у населения, что приводит к высокой нагрузке на медицинские учреждения и персонал. Современные разработки в области электрокардиографии направлены, в том числе, на персонализацию устройств и автоматизацию измерений и диагностики. Персонализированные электрокардиографы позволяют вынести часть диагностических исследований из амбулаторных условий в личное пользование пациента. Однако здесь появляется необходимость в системе удаленного мониторинга врачом за состоянием пациента и в системе автоматизированного анализа электрокардиограммы (ЭКГ) для предварительного диагноза для помощи медицинскому персоналу в принятии решении и для более быстрой расшифровки результатов ЭКГ-исследований [1].

В данной работе описывается процесс и результаты разработки свёрточной нейронной сети для автоматической расшифровки результатов исследований ЭКГ для систем персонализированной медицины.

Применение нейросетевых алгоритмов для обработки результатов регистрации ЭКГ также обусловлено сложностью, сравнительно большой длительностью и меньшей вариабельностью классических линейных явных алгоритмов обработки сигналов, так как исследуемый сигнал может принимать разные временные и амплитудные характеристики в зависимости от наличия или отсутствия патологий, от качества кожно-электродного контакта, от физиологических особенностей конкретного человека [2, 3]. На основе выделенных факторов было предложено использовать неявные алгоритмы обработки электрокардиограммы, а именно алгоритмы с использованием свёрточной нейронной сети.

Предполагается, что наиболее подходящим вариантом для решения задачи классификации является нейронная сеть прямого распространения с модульной структурой, где каждый модуль искусственной нейронной сети (ИНС) отвечает за классификацию определенной патологии сердечного ритма или диагностирует её отсутствие. Обобщенная структура ИНС представлена на рис. 1.

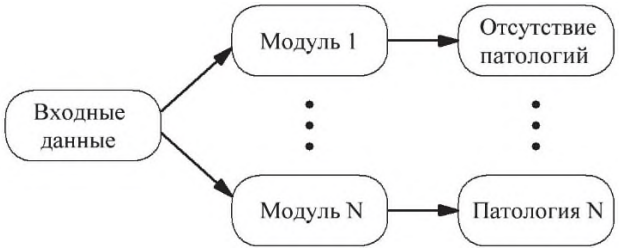


Рис. 1. Обобщенная структура ИНС для классификации патологий сердечно-сосудистой системы

**Литература**


1. Tsao C.W. et al. Heart disease and stroke statistics-2022 update: a report from the American Heart Association // Circulation. 2022. Vol. 145, № 8. P. 153–639.
2. Онищенко П.С., Клышников К.Ю., Овчаренко Е.А. Искусственные нейронные сети в кардиологии: анализ численных и текстовых данных // Математическая биология и биоинформатика. 2020. Т. 15, № 1. С. 40–56.
3. Özal Yıldırım, Paweł Pławiak, Ru-San Tan, U. Rajendra. Acharya, Arrhythmia detection using deep convolutional neural network with long duration ECG signals // Computers in Biology and Medicine. 2018. Vol. 102. P. 411–420.


# ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДЛЯ РАСЧЕТА ЗОННОЙ ДИАГРАММЫ ГЕТЕРОСТРУКТУР С КВАНТОВЫМИ ЯМАМИ $HgTe/Hg_{1-x}Cd_xTe$, ВЫРАЩЕННЫХ НА АТОМНОЙ ПЛОСКОСТИ (013)


*Д.Е. Каширский✉, А.В. Войцеховский, Д.И. Горн*

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия
✉ kde@mail.tsu.ru


# SOFTWARE FOR CALCULATING THE BAND DIAGRAM OF HETEROSTRUCTURES WITH $HgTe/Hg_{1-x}Cd_xTe$ QUANTUM WELLS GROWN ON THE ATOMIC PLANE (013)


*D.E. Kashirskii, A.V Voitsekhovskii, D.I. Gorn*

National Research Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation


Одним из перспективных направлений создания фоточувствительных приборов для среднего и дальнего инфракрасного диапазонов, работающих при температурах, близких к комнатным, является применение униполярных барьерных структур на основе материала HgCdTe с барьерным слоем, содержащим квантовые ямы [1]. Для расчёта рабочих характеристик полупроводникового прибора необходимо понимать закономерности

токопереноса в гетероструктуре, которые, в свою очередь, определяется их энергетическими свойствами, то есть зонной диаграммой. Моделирование полупроводниковых приборов часто осуществляется при помощи средств приборно-технологического моделирования (TCAD). Однако реалии настоящего времени делают недоступным для российских учёных легальное использование большинства коммерчески распространяемых TCAD. В связи с этим встаёт необходимость развития программных средств с аналогичными функциями в нашей стране для целей проектирования, в частности, приборов полупроводниковой фотоэлектроники.

Для описания зонной структуры объемного материала хорошо зарекомендовала себя 8x8 **kp**-модель Кейна [2]. Применив к этой модели подход дискретизации гамильтониана в направлении роста, можно произвести расчет зонной диаграммы гетероструктур с квантовыми ямами. В литературе, например [3, 4], приводятся математические модели для расчета зонной диаграммы гетероструктур с квантовыми ямами на основе $HgTe/Hg_{1-x}CdxTe$, выращенных в направлении (001). Целью данной работы стала разработка программного обеспечения для расчета зонной структуры гетероструктур с квантовыми ямами на основе $HgTe/Hg_{1-x}CdxTe$, выращенных на атомной плоскости (013).

Математическая модель была построена на базе гамильтониана из [5], определенного для направления роста (013). Дискретизация гамильтониана проводится по аналогии как в [4]. Определение значений энергий уровней сводится к решению задачи о нахождении собственных значений гамильтониана. Следует отметить, что такая модель позволяет моделировать зонную диаграмму как объемных материалов, так и гетеропереходов, одиночных и множественных квантовых ям, в том числе и сверхрешеток.

Программное обеспечение, основанное на построенной математической модели, реализовано на языке python. Для выполнения операций с матрицами использовалась библиотека NumPy, а для нахождения собственных значений гамильтониана – библиотека SciPy. На вход программы подается конфигурация исследуемой структуры, температура и иные параметры, требуемые для проведения расчетов. Используя входные данные, происходит построение гамильтониана с последующим поиском его собственных значений. Результаты вычислений представляются в табличном и графическом виде.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-62-10021, https://rscf.ru/project/23-62-10021/.*

**Литература**

1. Voitsekhovskii A.V., Nesmelov S.N., Dzyadukh S.M., Gorn D.I., Dvoretskii S.A., Mikhailov N.N., Sidorov G.Yu., Yakushev M.V. Ch. 6. II-VI Semiconductor-Based Unipolar Barrier Structures for Infrared Photodetector Arrays // Handbook of II-VI Semiconductor-Based Sensors and Radiation Detectors. Cham : Springer, 2023. P. 135–154.
2. Kane E.O. Band structure of indium antimonide // J. Phys. Chem. Solids. 1957. Vol. 1. P. 249–261.
3. Akhavan N.D., Umana-Membreno G.A., Gu R., Asadnia M., Antoszewski J., Faraone L. Supperlattice barrier HgCdTe nBn infrared photodetectors: validation of the effective mass approximation // IEEE Transactions on Electron Devices. 2016. Vol. 63, № 12. P. 4811–4818.
4. Marchewka M. Finite-difference method applied for eight-band **kp** model for $Hg_{1-x}CdxTe/HgTe$ quantum well // International Journal of Modern Physics B. 2017. Vol. 31. 1750197. 23 p.
5. Zholudev M., Teppe F., Orlita M., Consejo C., Torres J., Dyakonova N., Czapkiewicz M., Wrobel J., Grabecki G., Mikhailov N., Dvoretskii S., Ikonnikov A., Spirin K., Aleshkin V., Gavrilenko V., Knap W. Magnetospectroscopy of two-dimensional HgTe-based topological insulators around the critical thickness // Physical Review B. 2012. Vol. 86. 205420. 9 p.

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ДИМЕРИЗАЦИИ АТОМНЫХ СВЯЗЕЙ НА ПОВЕРХНОСТЯХ SI

*П.Л. Новиков[1, 2], Чжан Юйцзынь[2], Чжан Сяосюй[2], П.Н. Цынк[2]✉, К.В. Павский[1, 2]*

[1] Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова, Новосибирск, Россия
[2] Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия
✉ tsynk.p@gmail.com

# MODELING OF DIMERIZATION PROCESSES OF ATOMIC BONDS ON SI SURFACES

*P.L. Novikov[1, 2], Zhang Yujin[2], Zhang Xiaoxu[2], P.N. Tsynk[2], K.V. Pavsky[1, 2]*

[1] Rzhanov Institute of Semiconductor Physics of the Siberian Branch of the RAS, Novosibirsk, Russian Federation
[2] Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russian Federation

Одними из структур, востребованных в электронных и оптических приборах нового поколения, являются пространственно-упорядоченные массивы квантовых точек. Для их формирования применяется гетероэпитаксия