

Многомасштабное моделирование физических явлений и систем (часть II)

Лекции 8

**Моделирование тепловых свойств
слоистых структур с применением
интеграционного подхода**

Моделирование тепловых свойств слоистых структур в настоящее время является востребованным направлением научных исследований, что связано с постоянно растущей скоростью работы микроэлектронных элементов, в основе которых зачастую лежат слоистые структуры, выделяющих все большее количество энергии в виде тепла, которую требуется отводить, чтобы избежать перегрева и потери функциональных свойств устройств[1]. Рассмотрим решение задачи о теплопереносе в слоистых структурах на основе многомасштабной модели построена многомасштабная композиция, в которой были задействованы методы машинного обучения. Данный интеграционный подход позволяет существенно ускорить вычислительно затратные расчеты по получению функциональных зависимостей между внешними параметрами среды, а также внутренними параметрами слоистых структур и значением эффективного коэффициента теплопроводности.

Модель теплопереноса в слоистых структурах

Применением интеграционный подход к задаче моделирования зависимости эффективного коэффициента теплопроводности слоистых структур, а именно сверхрешеток от варьируемых параметров материала и внешней среды. Для этого, используем прямое многомасштабное физико-математическое моделирование, производилась генерация выборки на основе модели модального подавления [2] с дальнейшим обучением нейронных сетей на ней. На выходе алгоритма получим компактные нейросетевые модели, которые можно сравнивать между собой по точности работы на тестовом наборе данных для определения лучшей сети.

Основными переносчиками тепла в полупроводниках и диэлектриках являются квазичастицы-фононы, описывающие колебания кристаллической ячейки. Стоит отметить, что применение классических подходов для решения задач теплопроводности на основе закона Фурье для рассматриваемых слоистых структур дает неудовлетворительные результаты, т.к. при подобном подходе игнорируются квантово-механические эффекты в материалах, что дает сильное рассогласование с экспериментальными

Модель теплопереноса в слоистых структурах

материалах, что дает сильное рассогласование с экспериментальными данными[1].

Для построения моделей теплопереноса в слоистых структурах свою эффективность показали методы на основе решения кинетического уравнения Больцмана для фононов. При наличии теплового градиента, распределение фононов может быть описано с помощью кинетического уравнения Больцмана:

$$\frac{df}{dt} = \frac{df}{dt}(\text{diffusion}) + \frac{df}{dt}(\text{scattering}) = 0$$

$$\frac{df}{dt}(\text{diffusion}) = \nabla T v \frac{df}{dT}$$

Модель теплопереноса в слоистых структурах

Кинетическое уравнение Больцмана является сложным интегро-дифференциальным уравнением. Для достаточно небольшого температурного градиента распределение фононов может быть выражено в приближении времени релаксации:

$$\frac{f - f_0}{\tau^0} = -\nabla T v \frac{df_0}{dT}$$

$$f_0(\omega, T) = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}$$

При этом одна из проблем при построении вычислительных алгоритмов связана с учетом рассеяния фононов. Однако, во многих случаях, при решении данного уравнения достаточно учитывать лишь приближения времени релаксации, что существенно упрощает задачу[3].

Модель теплопереноса в слоистых структурах

В такой

постановке необходимо решить вопрос, связанный с расчетом данных по параметрам релаксации. Ранее они вычислялись полуэмпирически с учетом согласования модельных расчетов с результатами экспериментов. Несмотря на определённые успехи, данный подход весьма трудоемок. В связи с этим, его в основном применяли для моделирования структур однокомпонентных материалов (как правило, кремний и германий)[4,5]. Значительный прорыв в данном вопросе произошел при комбинировании методов с использованием кинетического уравнения с первопринципными расчётами[2,3,6]. При этом требуемые характеристики фононов могут быть получены не из аппроксимации экспериментальных данных, а из первопринципных квантово-механических расчетов, что значительно повышает точность вычислений, открывает возможности эффективного предсказания свойств моделируемых материалов при этом минимизируя различные допущения.

Модель теплопереноса в слоистых структурах

Данные, которые получают: координаты базисных атомов кристаллической ячейки, межатомные силовые константы для моделирования 2-х фононных взаимодействий, межатомные силовые константы для моделирования 3-х фононных взаимодействий, диэлектрический тензор и эффективные заряды Борна для неаналитического поправочного члена.

Более точное моделирование можно получить с использованием методов молекулярной динамики, однако это сопряжено с высокой вычислительной сложностью и нетривиальной задачей подбора оптимального потенциала[7,8] и значений его параметров под конкретный материал.

Модель теплопереноса в слоистых структурах

Рассмотрим вычисление эффективного коэффициента теплопроводности бинарной гетероструктуры на примере сверхрешетки GaAs/AlAs. Для этого применим подход, описанный в работе [2]. Расчет ведется в приближении виртуального кристалла[9,10].

$$\frac{1}{\tau_{\lambda}^0} = \frac{1}{\tau_{\lambda}^{3ph+}} + \frac{1}{\tau_{\lambda}^{3ph-}} + \frac{1}{\tau_{\lambda}^a} + \frac{1}{\tau_{\lambda}^b}$$

Здесь $\lambda \sim p, q$, τ_{λ}^{3ph+} описывает процессы адсорбции, один фонон из двух падающих [9,10], τ_{λ}^{3ph-} описывает процессы эмиссии, в ходе которых один падающий фонон разделяется на два [9,10], τ_{λ}^a -сплавной член, зависит от послойного распределения компонентов[11], τ_{λ}^b -барьерный член [11].

Модель теплопереноса в слоистых структурах

Рассматривается послойное распределение материала. Для моделирования распределения материалов при росте сверхрешетки использовалась модель Мураки [12]:

$$\tilde{X}(i) = \begin{cases} 1, & i < 1 \\ 1 - \phi(1 - R^i), & 1 \leq i < n_{ML} \\ 1 - \phi(1 - R^{n_{ML}})R^{i-n_{ML}}, & i \geq n_{ML} \end{cases}$$

Здесь R - варьируемый параметр модели, n_{ML} -число монослоев первого материала в периоде сверхрешетки.

Схема расчета параметров релаксации представлена на рис. 1.

Модель теплопереноса в слоистых структурах

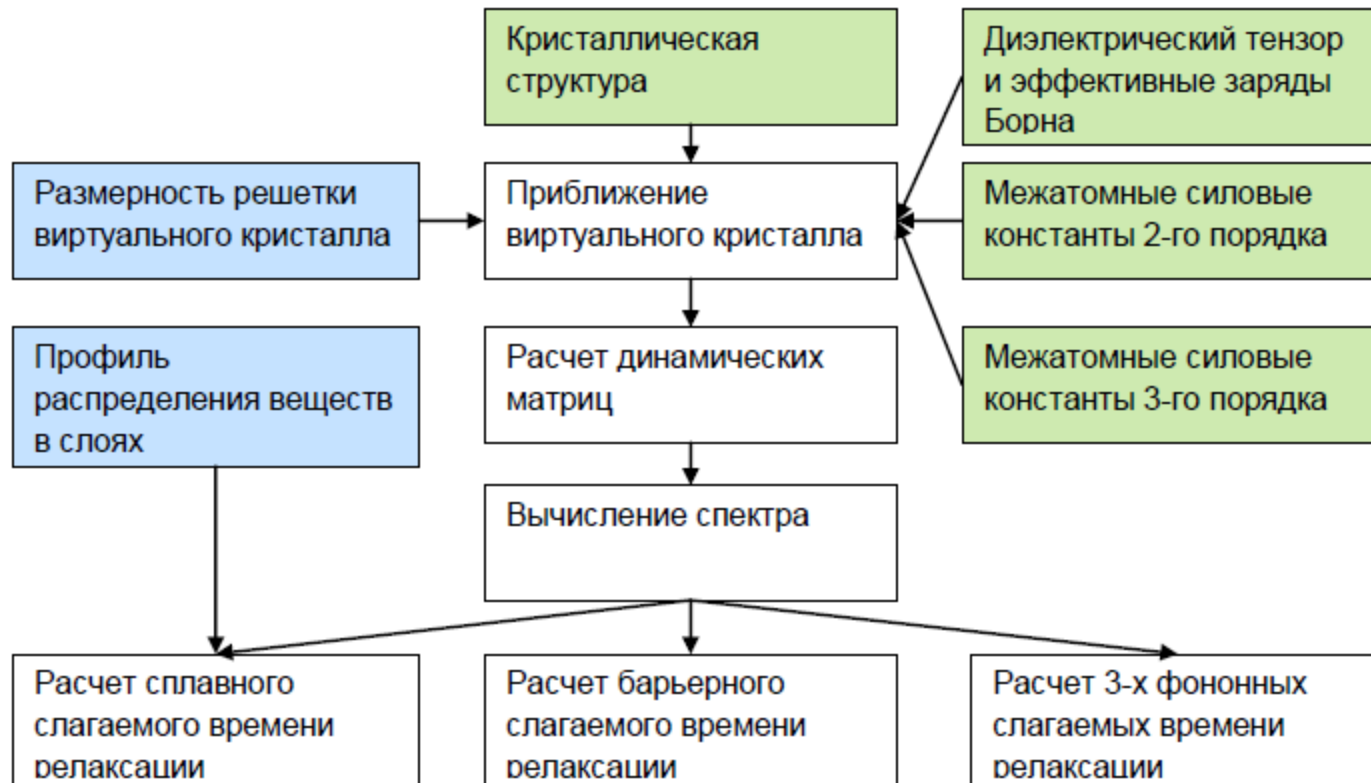


Рисунок 1. Схема расчета параметров релаксации сверхрешетки

Модель теплопереноса в слоистых структурах

Для расчета эффективного коэффициента теплопроводности использовалась модель модального подавления[11]:

$$k(L) = \sum_{\lambda} S_{\lambda} C_{\lambda} ||v_k|| A_{\lambda} \cos^2(\theta_{\lambda})$$

$$\text{Здесь } S_{\lambda} = \frac{1}{1+K_{\lambda}} \text{ , } A_{\lambda} = ||V_{\lambda}|| \tau_{\lambda}^0$$

$$K_{\lambda} = \frac{A_{\lambda}[\cos(\theta_{\lambda})]}{L} \text{ , } C_{\lambda} = \frac{k_B}{N\Omega} \left(\frac{\hbar\omega_{\lambda}}{k_B T} \right) f_0(f_0 + 1)$$

$f_0 = f_0(\omega_{\lambda}, T)$, θ - угол между V и направлением теплопереноса.

В отсутствии температурного градиента и иных термодинамических сил система находится в тепловом равновесии и распределение фононов подчинено закону Бозе-Эйнштейна.

Модель теплопереноса в слоистых структурах

Формирование обучающей выборки

Обучающая выборка сформирована из результатов расчетов эффективного коэффициента теплопроводности в пакете Alma BTE с варьированием параметров.

R- параметр модели Мураки, отвечающий за послойное распределение материалов в периоде сверхрешетки варьировался от 0 до 0.9;

x-число монослоев первого материала (GaAs) , варьировался от 1 до 20;

y- число монослоев второго материала (AlAs) , варьировался от 1 до 20;

T- температура окружающей среды, варьировалась от 100K до 500K;

L- толщина сверхрешетки от 1 нм до 100 мкм.

Модель теплопереноса в слоистых структурах

Многомасштабная композиция

В данной работе при построении многомасштабной композиции для моделирования теплопроводности в слоистых структурах используются подходы, разработанные ранее и представленные в [9,10].

Покажем, как с помощью данной технологии, при решении задачи о применении интеграционных подходов для моделирования теплопроводности в слоистых структурах из конкретных базовых моделей-композиций (БК) составляются многомасштабные композиции (МК)–вычислительные аналоги многомасштабных моделей, передающие информационную сущность многомасштабных вычислительных процессов[9,10]. При описании многомасштабной композиции и базовых

Модель теплопереноса в слоистых структурах

Многомасштабная композиция

моделей-композиций, например $MC_{1,1}^{A_{ai}^1} : \{V_0^{A_{ai}^1}, X_0^{A_{ai}^1}, MA_0^{A_{ai}^1}\}$, представляющих собой однопараметрическое семейство множеств разного структурного типа, объединенных в общем вычислительном процессе, где $V_0^{A_{ai}^1}$ - множество входных данных, $X_0^{A_{ai}^1}$ - множество выходных данных, $MA_0^{A_{ai}^1}$ - множество, состоящее из моделей и алгоритмов, используем упрощенную форму записи:

$$MC_{1,1}^{A_{ai}^i} : \{V_0^{A_{ai}^i}, X_0^{A_{ai}^i}, MA_0^{A_{ai}^i}\} = MC_{1,1}^{A_{ai}^i}.$$

Рассмотрим расчет теплопроводности бинарной гетероструктуры GaAs/AlAs для различных периодов сверхрешетки. При построении многомасштабной композиции $MK_{0,1,2}^{(A_{ai}^i A_{aj}^j / A_{ak}^k A_{aj}^j)} = MK_{0,1,2}^{(GaAs/AlAs)}$ выделим 3 масштабных уровня (0,1,2) и используем следующие обозначения:

Модель теплопереноса в слоистых структурах

Многомасштабная композиция

Базовая модель-композиция MC_0^{ai} (i – номер элемента в таблице Менделеева (ТМ)), поставим ей в соответствие:

- экземпляр El_0^{31} , для описания характеристик химического элемента Ga ($i=31$);
- экземпляр El_0^{33} , для описания характеристик химического элемента As ($i=33$);
- экземпляр El_0^{13} , для описания характеристик химического элемента Al($i=13$);

MC_{11}^{GaAs} - экземпляр соответствующей БК для расчета кристаллохимической структуры GaAs;

MC_{11}^{AlAs} - экземпляр БК для расчета кристаллохимической структуры AlAs;

MC_{12}^{GaAs} - экземпляр БК для квантово-механического расчета GaAs;

MC_{12}^{AlAs} - экземпляр БК для квантово-механического расчета AlAs;

$MC_{23}^{GaAs/AlAs}$ – экземпляр БК для решения уравнения Больцмана;

$K_{24}^{GaAs/AlAs}$ - экземпляр Композиции (формируется за счет объединения БК с одного масштабного уровня, в данном случае 2-го) для определения регрессионной функции.

Модель теплопереноса в слоистых структурах

Многомасштабная композиция

Общее представление о распределении базовых моделей-композиций по масштабным уровням, задействованным в вычислительном процессе, показано в табл. 1.

Таблица 1

№ масш. Уровн я	Обозначение и название базовой модели- композиции	Название масштабного уровня
0	$MC_0^{A_{a_i}^i} = MC_0$ «АТОМ A_0^i »	Уровень химических элементов
1	$MC_{1,1}^{A_{a_i}^i A_{a_j}^j} = MC_1^1$ «КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКАЯ ФОРМУЛА» $MC_{1,2}^{A_{a_i}^i A_{a_j}^j} = MC_1^2$ «КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКАЯ ЯЧЕЙКА»	Квантово- механический уровень
2	$MC_{2,3}^{GaAs/AlAs} = MC_{2,3}^{A_{a_i}^i A_{a_j}^j / A_{a_k}^k A_{a_j}^j} = MC_2^3$ «УРАВНЕНИЕ БОЛЬЦМАНА» $MC_{2,4}^{GaAs/AlAs} = MC_{2,4}^{A_{a_i}^i A_{a_j}^j / A_{a_k}^k A_{a_j}^j} = MC_2^4$ «АППРОКСИМАЦИОННАЯ МОДЕЛЬ»	Наноуровень

Модель теплопереноса в слоистых структурах

Многомасштабная композиция

Покажем, как организован вычислительный процесс.

На нулевом масштабном уровне с помощью базовой модели-композиции MC_0^1 «АТОМ A_0^i » задаются основные данные по химическим элементам, входящим в состав соединений, участвующим в вычислительном процессе (атомный номер химического элемента, масса атома, заряд ядра, радиус атома, электронная конфигурация, структура решетки и др.). В данном случае формируются экземпляры базовой модели-композиции MC_0 «АТОМ Ga_0^{31} », MC_0 «АТОМ As_0^{33} », MC_0 «АТОМ Al_0^{13} ».

К первому масштабному уровню отнесены базовые модели-композиции MC_1^1 «КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКАЯ ФОРМУЛА» и MC_1^2 «КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКАЯ ЯЧЕЙКА». С их помощью данные, полученные с нулевого масштабного уровня из MC_0 «АТОМ Ga_0^{31} », MC_0 «АТОМ As_0^{33} », MC_0 «АТОМ Al_0^{13} », передаются на квантово-механический уровень первоначально в MC_1^1 «КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКАЯ ФОРМУЛА», где, используя знания о химическом

Модель теплопереноса в слоистых структурах

Многомасштабная композиция

составе и кристаллографической структуре, определяется кристаллохимическая структура соединения (метрические параметры кристаллической решетки, координаты базисных атомов и др.). Данная БК программно реализована в двух расчетных модулях (модель «Плотная упаковка» и программный комплекс Materials Studio (<https://www.3dsbiovia.com/products/collaborative-science/biovia-materials-studio>)).

Далее полученные в ходе вычислительного процесса данные передаются в базовую модель-композицию MC_1^2 «КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКАЯ ЯЧЕЙКА». Данная БК программно реализована в двух расчетных модулях (программный комплекс VASP (<https://www.vasp.at>) и пакет программ с открытым кодом Quantum Espresso (<https://www.quantum-espresso.org>)). Здесь на базе квантово-механической теории по каждому слою бинарной гетероструктуры уточняются параметры кристаллической решетки, рассчитывается электронная плотность [1], полная энергия для заданной конфигурации базисных атомов, значения диэлектрических тензоров, эффективные заряды Борна, силовые константы 2-го и 3-го порядка, рассчитываются как производные соответствующих порядков от энергии.

Модель теплопереноса в слоистых структурах

Многомасштабная композиция

На втором масштабном уровне, используя данные, полученные на предыдущем уровне, применяется модель «виртуального кристалла» в которой 2-х слойная структура рассматривается как сплав, однако при этом дополнительно учитывается послойное распределение материалов (модель Мураки)[12]. Для расчета теплопроводности используем уравнение Больцмана с добавлением барьерного члена для учета приближения времени релаксации. Базовая модель-композиция MC_2^3 «УРАВНЕНИЕ БОЛЬЦМАНА» программно реализована в расчетном модуле в основе которого лежит комплекс AlmaBTE([www// https://almabte.bitbucket.io](https://almabte.bitbucket.io)).

В результате расчетов получаем значения эффективного коэффициента теплопроводности для 2-х слойной структуры в зависимости от периода (количества слоев GaAs и AlAs, то есть распределения вещества) бинарной

Модель теплопереноса в слоистых структурах

Многомасштабная композиция

структуры, от ширины образца от температуры внешней среды. Формируем набор расчетных данных, варьируя внешнюю температуру (например от 100K-500K), меняем размеры периода, распределение веществ в наногетероструктуре GaAs/AlAs, общую ширину сверхрешетки. Расчеты проводятся во вложенных циклах, таким образом собирается выборка.

Полученные наборы данных передаются в экземпляр Композиции $K_{24}^{GaAs/AlAs}$, которая формируется за счет объединения БК с одного масштабного уровня, в данном случае 2-го и служит для определения регрессионной функции, описывающей функциональную зависимость изменения эффективного коэффициента теплопроводности бинарной структуры от варьируемых параметров. Определяется область допустимых значений, которые может принимать искомая функция. Используются программные модули, в основе которых лежат пакеты TensorFlow (<https://aws.amazon.com/ru/tensorflow/>) и Pytorch (<https://pytorch.org>). На рис. 2 представлена архитектурная схема расчетных модулей многомасштабной

композиции $MK_{0,1,2}^{(A_{a_i}^i A_{a_j}^i / A_{a_k}^k A_{a_j}^i)}$ и основные потоки данных.

Модель теплопереноса в слоистых структурах

Многомасштабная композиция

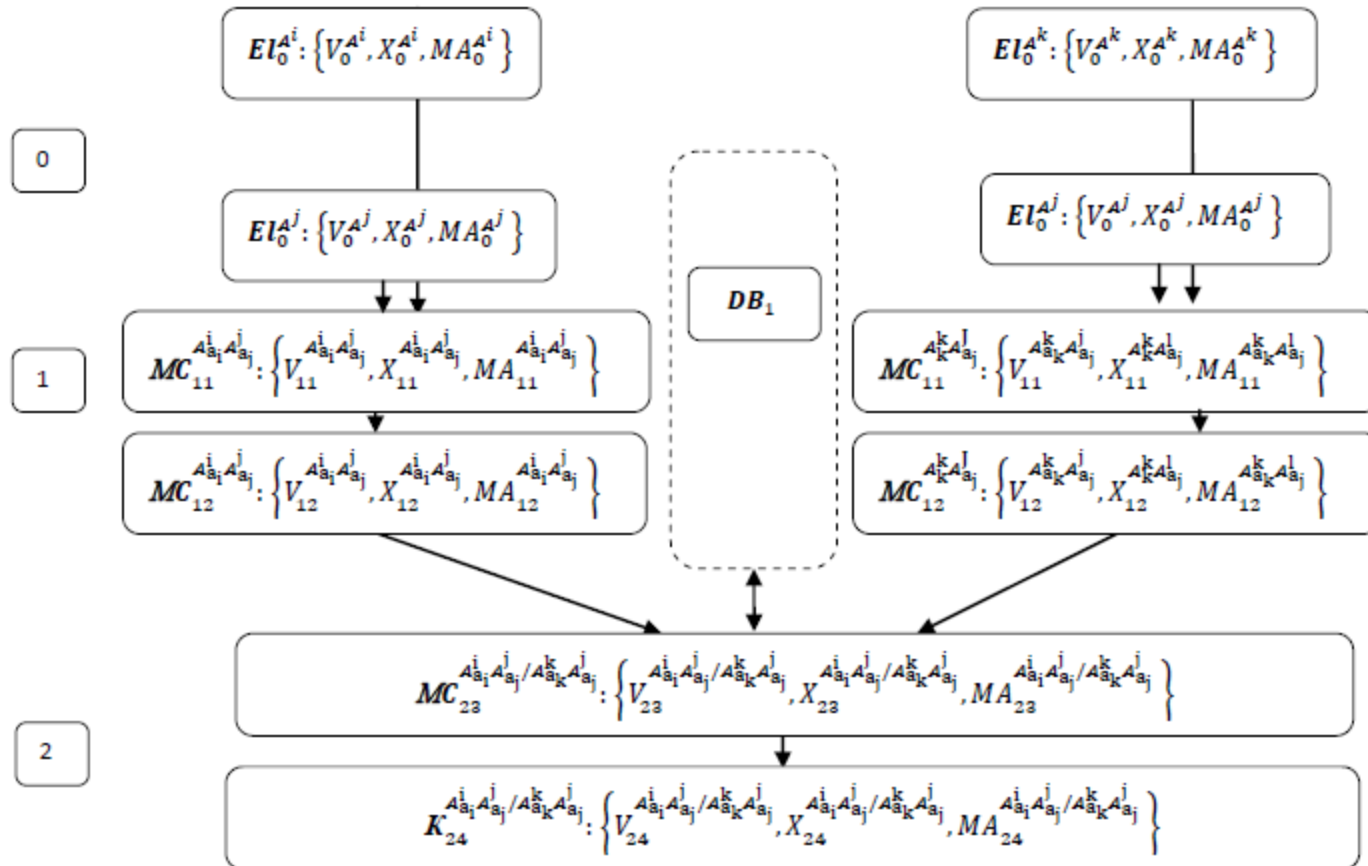


Рисунок 2. Схематическое представление многомасштабной композиции

$MK_{0,1,2}^{(A_{a_1}^i A_{a_j}^j / A_{a_k}^k A_{a_j}^j)}$ для моделирования теплопереноса в слоистой структуре GaAs/AlAs.

Модель теплопереноса в слоистых структурах

4 Результаты вычислений, выводы

Были построены нейросетевые модели для расчета эффективного коэффициента теплопроводности для бинарных гетероструктур: сверхрешеток GaAs/AlAs с различными периодами слоев. Данные для обучения были сгенерированы в программном пакете AlmaBTE 1.3.2, параметры материалов получены из открытой базы данных проекта. Выборка формировалась для различных комбинаций содержания GaAs и AlAs, толщин пленок, периодов сверхрешетки. Полученный массив данных был разделен на 3 части: 60% для обучения нейросетей, 20% для валидации (для избежания переобучения) и 20% как тестовая выборка, для оценки результирующей точности обученных моделей. Оптимизация нейросетей велась с использованием алгоритма RMSprop с шагом 0.0001 в среде Tensorflow 2.3.

Модель теплопереноса в слоистых структурах

В качестве модели для расчета использовались многослойные нейронные сети прямого распространения. В работе были рассмотрены сети

с различным числом скрытых слоев, также проведены сравнения для варьирующего числа нейронов и распространенных активационных функций. Полученные в результате обучения сети сравнивались по среднеквадратичной ошибке. Результаты сравнения представлены в табл. 2. В таблице: n_1 – число скрытых слоев, n_n – число нейронов на скрытых слоях, f – активационная функция (*relu* – линейный выпрямитель, *tanh* – гиперболический тангенс, *sig* – логистическая функция).

Модель теплопереноса в слоистых структурах

Таблица 2. Среднеквадратичное отклонение нейросетевой модели эффективного коэффициента теплопроводности на тестовой выборке

		n_s	6	8	10	12	14	16	18	20
n_l	f									
2	<i>relu</i>		2.673	1.335	1.473	0.808	0.681	0.679	0.691	0.551
	<i>tanh</i>		2.067	1.564	1.428	1.293	1.326	1.565	1.174	1.022
	<i>sig</i>		2.049	1.922	1.784	1.677	2.014	1.245	1.598	1.625
3	<i>relu</i>		1.32	1.087	1.385	1.131	0.938	0.544	0.711	0.716
	<i>tanh</i>		2.057	1.833	1.649	1.131	1.413	1.308	1.305	1.222
	<i>sig</i>		4.899	1.862	1.611	1.969	1.375	1.521	1.694	1.29
4	<i>relu</i>		1.411	0.809	1.004	0.896	1.191	0.646	0.693	0.952
	<i>tanh</i>		2.552	1.589	1.614	1.643	1.591	1.329	1.704	1.936
	<i>sig</i>		4.737	4.891	1.968	4.997	4.981	4.915	4.962	1.639
5	<i>relu</i>		2.296	1.207	1.444	1.63	0.764	0.949	1.28	1.401
	<i>tanh</i>		2.11	1.918	1.895	2.625	2.579	2.354	2.555	1.96
	<i>sig</i>		4.86	5.01	4.907	11.74	11.897	2.314	1.639	11.609

Модель теплопереноса в слоистых структурах

Как видно из таблицы, наиболее высокая точность на тестовой выборке была достигнута на трехслойной сети с ReLU (линейный выпрямитель) активационной функцией, с 16 нейронами на каждом скрытом слое: в таком случае среднеквадратичная ошибка 0.544 Вт/(м К) . Относительная среднеквадратичная ошибка при этом составляет порядка 3-5%, что позволяет говорить о достаточно хорошей точности выбранного подхода.

Заключение

Были построены нейросетевые модели для расчета эффективного коэффициента теплопроводности для слоистых структур: сверхрешеток GaAs/AlAs с различными периодами слоев. Данные для обучения были сгенерированы в программном пакете AlmaBTE 1.3.2, параметры материалов получены из открытой базы данных проекта. Выборка формировалась для различных комбинаций содержания GaAs и AlAs, толщин пленок, периодов сверхрешетки. Полученный массив данных был разделен на 3 части: 60% для обучения нейросетей, 20% для валидации (для избежания переобучения) и 20% как тестовая выборка, для оценки результирующей точности обученных моделей. Оптимизация нейросетей велась с использованием алгоритма RMSprop с шагом 0.0001 в среде Tensorflow 2.3.

В качестве модели для расчета использовались многослойные нейронные сети прямого распространения. В работе были рассмотрены сети с различным числом скрытых слоев, также проведены сравнения для варьирующего числа нейронов и распространенных активационных функций. Полученные в результате обучения сети сравнивались по среднеквадратичной ошибке.

Относительная среднеквадратичная ошибка при этом составила порядка 3-5%, что позволяет говорить о достаточно хорошей точности выбранного подхода.

Разработанные подходы могут быть использованы при решении обратных задач для предсказательного моделирования структурных характеристик слоистых материалов, с заданными значениями эффективного коэффициента теплопроводности.

Литература

1. *Хвезюк В.И., Скрябин А.С.* Теплопроводность наноструктур // Теплофизика высоких температур, 2017. Т. 55. № 3. С. 446–471. doi: 10.7868/S0040364417030127.
2. *Vermeersch B., Carrete J., Mingo, N.* Cross-plane heat conduction in thin films with ab-initio phonon dispersions and scattering rates // Applied Physics Letters, 2016. Vol. 108(19), 193104. doi:10.1063/1.4948968.
3. *Carrete J., Vermeersch B., Katre A., Roekeghem A., Wang T., Madsen G., Mingo N.* AlmaBTE: a solver of the space-time dependent Boltzmann transport equation for phonons in structured materials // Comp. Phys. Commun., 2017. Vol. 220C, PP. 351-362. doi: 10.1016/j.cpc.2017.06.023
4. *Loy J.M., Murthy J. Y., Singh D. A.* Fast Hybrid Fourier–Boltzmann Transport Equation Solver for Nongray Phonon Transport // Journal of Heat Transfer, 2012. Vol. 135(1), 011008. doi: 10.1115/1.4007654
5. *Chung J. D., McGaughey A. J. H., Kaviany M.* Role of Phonon Dispersion in Lattice Thermal Conductivity Modeling // Journal of Heat Transfer, 2004. Vol. 126(3). pp 376-380. doi:10.1115/1.1723469

6. *Broido D. A., Malorny M., Birner G., Mingo N., Stewart D. A.* Intrinsic lattice thermal conductivity of semiconductors from first principles // *Applied Physics Letters*, 2007. Vol. 91(23), 231922. doi: 10.1063/1.2822891

7. *Powell D.* Elasticity, Lattice Dynamics and Parameterisation Techniques for the Tersoff Potential Applied to Elemental and Type III-V Semiconductors: yew. – University of Sheffield, 2006.

8. *Abgaryan K.K., Mutigullin I.V., Uvarov S.I., Uvarova O.V.* Multiscale modeling of clusters of point defects in semiconductor structures// Prepared for the Workshop/Conference/Book: International Conference “Information Technologies and High-Performance Calculations” (ITHPC 2019), Khabarovsk, Russia, 16-19 Sep, 2019. (Scopus). <http://ceur-ws.org/Vol-2426/paper7.pdf>

9. *Li W., Lindsay L., Broido D.A., Stewart D.A., Mingo N.* Thermal conductivity of bulk and nanowire $\text{Mg}_2\text{Si} \times \text{Si}_{1-x}$ alloys from first principles // *Physical Review B.*, 2012. Vol. 86. 174307. doi: 10.1103/PhysRevB.86.174307.

10. *Li W., Carrete J., Katcho N.A., Mingo N.* A solver of the Boltzmann transport equation for phonons // *Computer Physics Communications*, 2014. Vol. 185, Iss. 6, pp. 1747-1758. doi: 10.1016/j.cpc.2014.02.015

11. *Carrete J., Vermeersh B., Thumfart L., Kakodkar R.R., Trevisi G., Frigeri. P., Seravalli L., Feser J. P., Rastelli A., Mingo N.* Predictive design and experimental realization of InAs/GaAs superlattices with tailored thermal conductivity // *The Journal of Physical Chemistry*, 2018. Vol. 122 (7), pp. 4054-4062. doi: 10.1021/acs.jpcc.7b11133

12. *Muraki K., Fukatsu S., Shiraki Y, Ito R.* Surface segregation of In atoms during molecular beam epitaxy and its influence on the energy levels in InGaAs/GaAs quantum wells // *Applied Physics Letters*. 1992. Vol. 61, 557. doi: 10.1063/1.107835.