

0.1. Ревун А.Л., Рудин С.А., Павский К.В. Оптимизация алгоритмов расчёта деформации при атомистическом моделировании гетероэпитаксиального роста Ge на Si(100) методом Монте-Карло

Одной из приоритетных задач в области материаловедения является создание гетероструктур с квантовыми точками (КТ). Для решения этой задачи требуется получать упорядоченные массивы КТ. Одним из способов получения массивов КТ является метод молекулярно-лучевой эпитаксии. Для исследования процессов зарождения массивов КТ на уровне не доступном экспериментатору используется имитационное моделирование методом Монте-Карло построенное на физической модели описанной в материале [1].

Для получения новых экспериментальных данных возникает потребность в проведении множества экспериментов имитационного моделирования с различными параметрами. Однако при моделировании осаждения 1 монослоя Ge на гладкую подложку Si размером 27x27x0.8 нм при температуре 500° C занимает 60 часов. Увеличение размеров моделируемой структуры, температуры, и прочих параметров не линейно увеличивает время моделирования, что обуславливает потребность в нахождении оптимальных путей вычислений.

Основной этап моделирования роста состоит из шага Монте-Карло и “термического отжига”. Шаг Монте-Карло представляет собой случайный выбор одного из элементарных событий: осаждения или диффузионного прыжка. Выбор случайного события обусловлен его вероятностью. После каждого элементарного события выполняется “термический отжиг” во время его выполнения пересчитываются координаты 1% случайно выбранных атомов согласно распределению Больцмана. Такой подход позволяет учитывать изменение энергии деформации в пространстве с течением времени.

Анализ циклов расчёта деформации в шаге Монте-Карло показал, что использование средств барьерной синхронизации приводит к снижению эффективности распараллеливания. Также было показано, что не все фрагменты кода могут быть распараллелены в силу ограничений, накладываемых моделью. Определив такие фрагменты, мы сосредоточились на их рефакторинге и оптимизации. При оценке временных затрат шаг Монте-Карло занимает примерно 40% времени по отношению к 60% “термического отжига” от основного времени этапа моделирования. В результате оптимизация алгоритмов позволила сократить время выполнения шага Монте-Карло на 25%.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема № FWGW-2022-0011).

Список литературы

- [1] Новиков П.Л., Ненашев А.В., Рудин С.А., Поляков А.С., Двуреченский А.В. Зарождение и рост квантовых точек Ge на Si - моделирование с использованием высокоэффективных алгоритмов // Российские нанотехнологии. 2015. Т. 10. № 3–4. С. 26–34.