

## **Тема работы.**

Разработка параллельных алгоритмов для Монте-Карло моделирования гетероэпитаксии.

## **Состав коллектива.**

- Рудин Сергей Алексеевич (м.н.с ИФП СО РАН, rudin@isp.nsc.ru);
- Зиновьев Владимир Анатольевич (с.н.с. ИФП СО РАН, к.ф.-м.н.);
- Новиков Павел Леонидович (с.н.с. ИФП СО РАН, НГУ, к.ф.-м.н.);
- Смагина Жанна Викторовна (с.н.с. ИФП СО РАН, к.ф.-м.н.);
- Двуреченский Анатолий Васильевич (зав. лаб., д.ф.-м.н. ИФП СО РАН, НГУ, профессор).

## **Информация о гранте.**

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФП СО РАН (ГЗ FWGW-2022-0011).

## **Аннотация.**

Рассмотрены методы и алгоритмы моделирования гетероэпитаксиального роста Ge на Si (100) методом Монте-Карло. Проведен анализ вычислительной сложности составляющих алгоритмы блоков моделирования и предложено распараллеливание трудоемких циклов с использованием директив открытого стандарта OpenMP.

## **Научное содержание работы.**

### **Постановка задачи.**

На первом этапе будет проведен анализ вычислительной сложности алгоритмов и временных затрат на вычисление отдельных блоков, входящих в основной цикл расчета модели гетероэпитаксиального роста. Наиболее трудоемкие циклы будут распараллелены с использованием директив открытого стандарта OpenMP.

### **Современное состояние проблемы.**

Квантовые точки (КТ) GeSi привлекают значительное внимание из-за возможности их практического применения в электронных и электронно-оптических приборах нового поколения, создаваемых на базе существующей кремниевой технологии [1-3]. Наиболее распространенный способ синтеза подобных структур – эпитаксия, представляющая собой рост одного кристаллического материала на другом с сохранением кристаллической ориентации. Несоответствие кристаллических решеток осаждаемого материала и материала подложки приводит к росту напряженных слоев и накоплению деформации в них. При достижении критической толщины пленки формируются трехмерные наноструктуры. Такой рост называется ростом по механизму Странского-Крастанова [4-5]. Однако при осаждении Ge на гладкую подложку Si места зарождения наноструктур Ge располагаются хаотично и не поддаются точному контролю, что сильно ограничивает область возможных применений. Упорядоченные ансамбли КТ обладают более однородным химическим составом и энергетическим спектром, а точный контроль расположения КТ в пространстве открывает возможность адресного обращения к каждой КТ.

С помощью разработанного ранее программного комплекса для моделирования гетероэпитаксии [6] были выявлены механизмы роста Ge на подложках Si (100) с созданными в условиях ионного облучения траншеями [7], массивами ямок, образующих фотонный кристалл [8], а также зависимость положения КТ от формы дна ямок [9].

Одной из проблем использованной программной реализации модели является трудоемкость вычислений. Например, моделирование осаждения Ge на гладкую подложку Si (100) размерами 27x27x5.4 нм (200 тыс. атомов) при температуре 720 К со скоростью осаждения 0.0136 нм/с может занимать более двух недель. Исследования требуют моделирования

структур, в десятки раз превышающих размеры структур, представленных в примере. Также необходимо изменение и других входных параметров: температуры, количества осаждаемых слоёв, рельефа поверхности, что повышает сложность процесса вычисления. Поэтому актуальной задачей является поиск путей оптимизации вычислений, а также разработка параллельных алгоритмов для многоядерных вычислительных систем.

### Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы.

В основе разработанной модели гетероэпитаксии лежит алмазоподобная кристаллическая решётка. Взаимодействие между атомами описывается потенциалом Китинга [10]. Процесс моделирования роста производится методом Монте-Карло (МК) и состоит из последовательности элементарных событий, выбираемых случайным образом в соответствии с их вероятностями. Возможны события двух типов: осаждение и диффузионный прыжок атома по поверхности. Для учёта изменения деформации в пространстве с течением времени добавлен третий тип событий – тепловые колебания атомов вокруг их равновесных положений согласно распределению Больцмана. Периодический перерасчёт координат одного процента атомов (термический отжиг), выбираемых случайным образом, позволил избежать необходимости вычисления минимума внутренней энергии кристалла после каждого элементарного события, поскольку при достаточно большом их числе энергия системы автоматически будет стремиться к минимуму своей свободной энергии. Более детально модель описана в [6, 8].

Пакет моделирования гетероэпитаксиального роста реализован на языке программирования C/C++. На рис. 1 представлена блок-схема его последовательной реализации с характерным временем выполнения отдельных блоков. В каждом из блоков «Обновление значений энергии деформации», «Подсчет суммарной вероятности и выбор случайного события», «Осаждение нового атома», «Прыжок атома» и «Термический отжиг» предложено распараллеливание трудоемких циклов с использованием директив открытого стандарта OpenMP [11] на системах с общей памятью. Рассмотрим некоторые из них.

В блоке «Обновление значений энергии деформации» были выделены два цикла, подходящих для распараллеливания. В первом цикле (1) по соседям атома происходит редуцирование параметров  $V_x$ ,  $V_y$  и  $V_z$ . Для его параллельного вычисления в цикле была применена директива «`pragma omp parallel for`». Условие «`private(dir)`» используется для ограничения целостности переменной итерирования. «`reduction(+: V_x, V_y, V_z)`» добавлено для корректного подсчета редуцированных параметров в теле параллельного блока.

В цикле (2) производится инициализация и определение значения элементов массива. Его распараллеливание аналогично циклу (1), кроме добавления параметра редукиции переменной.

```
void calc_Edef(int x, int y, int z) {
    /*инициализация переменных*/
    /*проверка корректности входных параметров*/
    /*определение соседей атома*/
    /* Цикл (1) */
    #pragma omp parallel for private(dir) reduction(+: V_x, V_y, V_z)
    for (dir=0; dir<dir_number; dir++) {
        /*определение дополнительных параметров*/
        V_x+=V_x*x*ax2+V_x*y*ay2+V_x*z*az2;
        V_y+=V_y*x*ax2+V_y*y*ay2+V_y*z*az2;
        V_z+=V_z*x*ax2+V_z*y*ay2+V_z*z*az2;
    }
    /* Цикл (2) */
    #pragma omp parallel for private(dir)
    for (dir=0; dir<dir_number; dir++) {
        /*инициализация и определение значения элементов массива*/
    }
```

```

}
/*вычисление значения энергии деформации*/
/*обновление значения энергии деформации*/
}

```

Блок «Подсчет суммарной вероятности и выбор случайного события» содержит один векторизуемый вложенный цикл. В нем проводится суммирование параметра `real_sum` по всем атомам решетки. Для параллельного исполнения цикла применяется «`pragma omp parallel for`», а для ограничения одновременного доступа к переменным итерирования был добавлен параметр «`private(x, y, z)`». Корректный подсчет переменной `real_sum` обеспечивается использованием условия «`reduction(+: real_sum)`».

```

double calc_P_jump_sum(void) {
/*инициализация переменных*/
#pragma omp parallel for private(x, y, z)reduction(+: real_sum)
for (z=2; z<Lz-2; z++) {
    for (y=((int)z%2; y<Ly; y+=2) {
for (x=((int)z%2)+2*(((int)z/2+(int)y/2)%2); x<Lx; x+=4) {
        real_sum += jump_probability(x, y, z);
    }
}
}
return real_sum;
}

```

Блок «Прыжок атома» содержит единственный цикл, подходящий для параллельного исполнения. В нем происходит проверка координат, найденных для прыжка. Для распараллеливания цикла была применена директива «`pragma omp parallel for`», «`private(n)`» – для ограничения целостности переменной итерирования. Для корректного одновременного выхода из цикла всех потоков (при обнаружении «плохого» прыжка) использовался параметр «`shared(bad_jump)`».

```

int jump(int x,int y, int z, int dir, int* x2_, int* y2_, int* z2_) {
/*инициализация переменных*/
/*определение координаты для совершения прыжка*/
/*поиск соседей атома*/
#pragma omp parallel for private(n)shared(bad_jump)
for (n=0; n<n_spisok; n++) {
    if (bad_jump == 1) continue;
    x2=spisok[n][0]; y2=spisok[n][1]; z2=spisok[n][2];
    set_config(x2, y2, z2);
if (atoms(x2, y2, z2).type > 0 && !good_config[atoms(x2, y2, z2).config]) {
        bad_jump = 1;
    }
}
return real_sum;
}

```

### Полученные результаты.

Для оценки эффективности распараллеливания по блокам было выполнено моделирование структуры размером  $13 \times 13 \times 4$  нм с осаждением 0.136 нм. На рис. 2-3 представлены графики зависимости коэффициента ускорения  $K_n$  от количества рабочих потоков, исполняющихся на соответствующем числе вычислительных ядер системы:

$$K_n = \frac{T_1}{T_n}$$

где  $T_n$  – время исполнения блока на  $n$  ядрах.

По графику видно, что наиболее эффективным оказалось распараллеливание блоков «Термический отжиг» и «Осаждение нового атома» и с ростом количества используемых потоков коэффициент ускорения увеличивается (рис. 2).

Эффективность распараллеливания всей программы оценивалась для трех стадий осаждения Ge: 0.136 нм, 0.407 нм и 0.815 нм, соответственно (рис. 3). Размеры подложки  $13 \times 13 \times 4$  нм. Время моделирования вычислялось по среднему времени за 10 запусков программы. В первом случае было выполнено осаждение 0.136 нм. При использовании 12 потоков ускорение вычислений составило около 3 раз. Во втором случае осаждено 0.407 нм. Максимальное полученное ускорение – 1.28 раза было достигнуто при использовании 4 и 12 потоков. В третьем случае осаждено 0.815 нм. Максимальное полученное ускорение – 1.136 раз получено на 8 и 12 потоках.

При увеличении количества осажденного материала увеличивается количество прыжков. Это отражается на увеличении доли последовательных вычислений и, следовательно, приводит к падению коэффициента ускорения.

Таким образом, распараллеливание с использованием только директив открытого стандарта OpenMP хоть и приводит к ускорению, но оно оказывается недостаточным и слабо зависит от количества используемых вычислительных ресурсов. Для более эффективного распараллеливания требуется принципиальное изменение алгоритмов моделирования.

#### **Перечень публикаций, содержащих результаты работы.**

Павский К.В., Ревун А.Л., Рудин С.А., Перышкова Е.Н., Курносков М.Г. «Параллельные методы моделирования гетероэпитаксиального роста на многопроцессорных системах с общей памятью». – Автометрия, т. 60, №4, сс. 116-125 (2024).

DOI: 10.15372/AUT20240413

Рудин С.А., Павский К.В., Ревун А.Л., Двуреченский А.В. «Моделирование гетероэпитаксиального роста Ge на структурированной подложке Si (100) методом Монте-Карло и распараллеливание вычислений». – Вестник СибГУТИ, т. 18. № 1. сс. 16-28 (2024).

DOI: 10.55648/1998-6920-2024-18-1-16-28

## Иллюстрации, визуализация результатов.

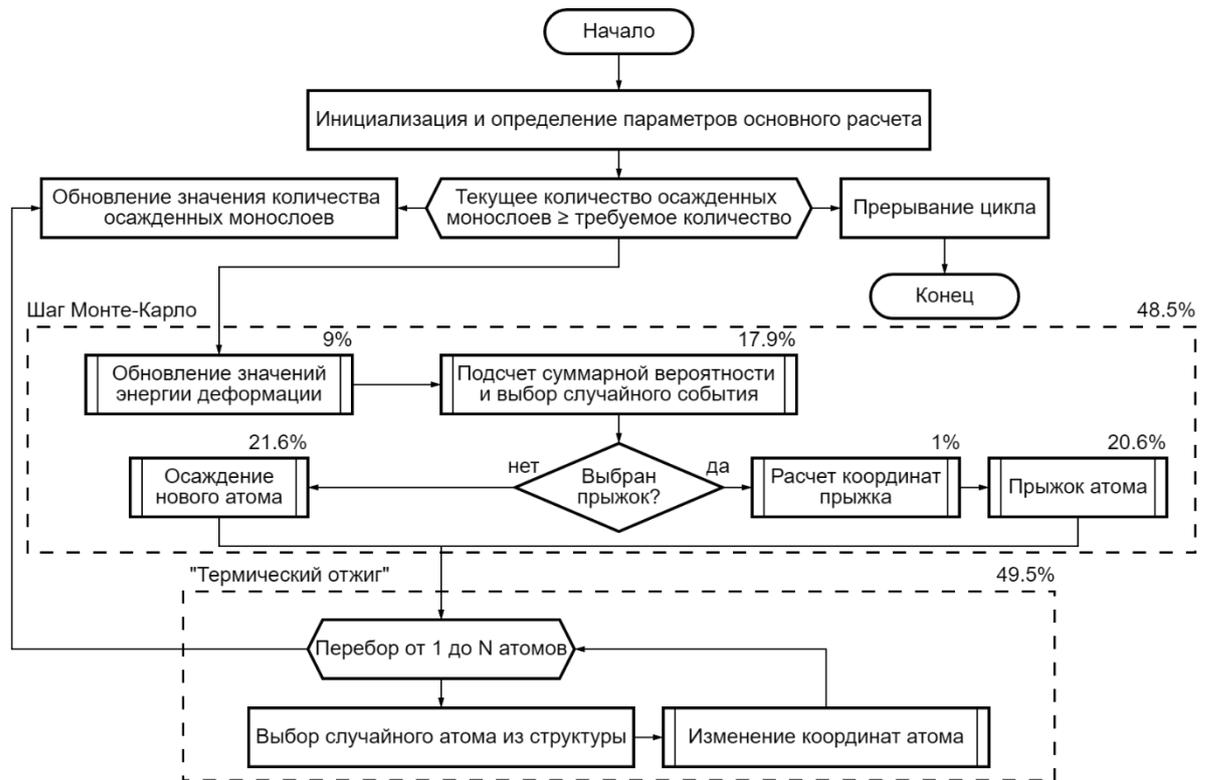


Рис. 1. Блок-схема однопоточной программной реализации моделирования гетероэпитаксиального роста методом МК. Выделены два основных блока – «Шаг Монте-Карло» и «Термический отжиг». Указано время выполнения блоков в % от общего времени выполнения программы.

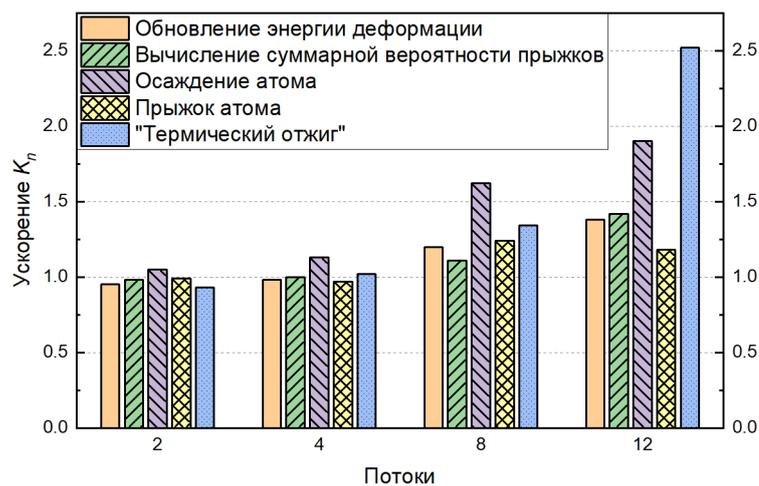


Рис. 2. График ускорения отдельных блоков.

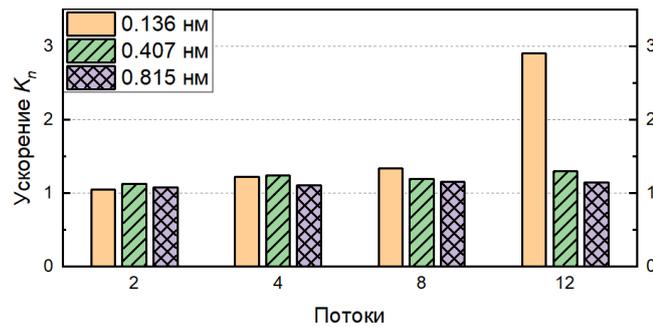


Рис. 3. График зависимости коэффициента ускорения от количества использованных потоков на разных стадиях осаждения Ge: 0.136, 0.407 и 0.815 нм.

### Литература

- [1] Shmidt O.G. and Eberl K. «Self-assembled Ge/Si dots for faster field-effect transistors». – IEEE Trans. El. Dev, vol. 48, iss. 6, p. 1175 (2001).
- [2] Stangl J., Holy V., and Bauer G. «Structural properties of self-organized semiconductor nanostructures». – Rev. Mod. Phys., vol. 76, p. 725 (2004).
- [3] Tsybeskov L. and Lockwood D.J. «Silicon-Germanium Nanostructures for Light Emitters and On-Chip Optical Interconnects». – Proc. IEEE, vol. 76, iss. 7, p. 1284 (2009).
- [4] Eaglesham D.J. and Cerullo M. «Dislocation-free Stranski-Krastanow growth of Ge on Si(100)». – Phys. Rev. Lett., vol. 64, p. 1943 (1990).
- [5] Mo Y.-W., Savage D.E., Swartzentruber B.S., and Lagally M.G. «Kinetic pathway in Stranski-Krastanow growth of Ge on Si(001)». – Phys. Rev. Lett., vol. 65, p. 1020 (1990).
- [6] П.Л. Новиков, А.В. Ненашев, С.А. Рудин, А.С. Поляков, А.В. Двуреченский. «Зарождение и рост квантовых точек Ge на Si – моделирование с использованием высокоэффективных алгоритмов». – Журнал «Российские нанотехнологии», т. 10, №3-4, с. 26-34 (2015).
- [7] Smagina Zh.V., Zinovyev V.A., Rudin S.A., Novikov P.L., Rodyakina E.E., and Dvurechenskii A.V. «Nucleation sites of Ge nanoislands grown on pit-patterned Si substrate prepared by electron-beam lithography». – J. Appl. Phys., vol. 123, p. 165302 (2018).
- [8] Rudin S.A., Zinovyev V.A., Smagina Zh.V., Novikov P.L., Nenashev A.V., Pavsky K.V. «Groups of Ge nanoislands grown outside pits on pit-patterned Si substrates». – J. of Crystal Growth, vol. 593, p. 126763 (2022).
- [9] Smagina Zh.V., Zinovyev V.A., Rudin S.A., Novikov P.L., Rodyakina E.E., and Dvurechenskii A.V. «Nucleation sites of Ge nanoislands grown on pit-patterned Si substrate prepared by electron-beam lithography». – J. Appl. Phys., vol. 123, p. 165302 (2018).
- [10] Keating P.N. «Effect of invariance requirements on the elastic strain energy of crystals with application to the diamond structure» – Phys. Rev., 145, Iss. 2., p. 637–645 (1966).
- [11] Application programming interface (API) that supports multi-platform shared-memory multiprocessing programming in C, C++, and Fortran, available at <https://www.openmp.org/> (accessed 26.02.2025).