

СЕКЦИЯ 3. ТЕХНОЛОГИИ ПРОЕКТИРОВАНИЯ ПРОГРАММНЫХ СИСТЕМ

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ РЕПЛИК ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДИФФУЗИИ В КРИСТАЛЛЕ КРЕМНИЯ

В.И. Белько, О.М. Кондратьева
Беларусь, г. Минск

В течение последних двух десятилетий наблюдается впечатляющий рост использования атомистического моделирования как вспомогательного инструмента исследований в науках о материалах. Одним из наиболее распространенных методов моделирования является метод молекулярной динамики (МД), в котором взаимодействие между атомами описывается эмпирическим потенциалом, а динамика ансамбля частиц – системой классических дифференциальных уравнений движения. Успех в применении данного метода моделирования определяется построением удачных потенциалов для определенных систем и ростом вычислительных возможностей компьютеров.

Ограничения в достижимом времени моделирования являются существенной проблемой при использовании метода МД. В [1] теоретически обоснованы модификации метода МД – методы ускоренной динамики, которые в последние пять лет позволяют отчасти решить проблему достижимого времени моделирования. Методы ускоренной динамики применимы к классу систем, которые характеризуются последовательностью редких событий, и основаны на предположениях теории переходных состояний [2]. Динамическая эволюция таких систем заключается в колебательных блужданиях в пределах данного бассейна (потенциальной ямы), которые прерываются спонтанными переходами из бассейна в бассейн; переходы являются редкими в том смысле, что среднее время между прыжками много больше, чем период колебаний.

Метод параллельных реплик является наиболее простым и точным из методов ускоренной динамики и требует единственного предположения: переходы распределены экспоненциально по времени. Функция распределения вероятности перехода из бассейна в бассейн имеет вид

$$p(t) = k \exp(-kt),$$

где k – кинетическая константа перехода. Данное соотношение естественным образом связано с эргодическим и хаотичным поведением системы в пределах одного бассейна.

Основная идея метода параллельных реплик заключается в следующем. В начальном состоянии система из N атомов находится в некотором бассейне. Затем строятся копии (реплики) системы и помещаются на каждый из M параллельных процессоров. После выполнения специальной процедуры десинхронизации на каждом из процессоров отслеживается независимая МД-траектория при данной постоянной температуре. Как только на каком-либо из процессоров происходит переход системы в любой другой бассейн, вычисления на всех про-

цессорах приостанавливаются. Время нахождения системы в данном бассейне теперь может быть найдено как сумма всех времен, прошедших на M процессорах. Затем заново строятся реплики системы, находящейся на процессоре, где произошел переход в другой бассейн, и начинается новый цикл моделирования.

В данной работе рассматривается задача реализации алгоритма молекулярной динамики с использованием метода параллельных реплик. В результате разработан комплекс программ, реализующий названный метод с использованием интерфейса MPI. Затем было проведено тестирование параллельной версии алгоритма, поскольку процедура десинхронизации не является очевидной и зависит от метода, с помощью которого поддерживается заданная температура системы. И, наконец, были выполнены вычислительные эксперименты для решения конкретной прикладной задачи: нахождение коэффициента диффузии собственного междоузельного дефекта в кремнии в зависимости от гидростатического давления.

Моделирование миграции дефекта при диффузии в кремнии. Исследование миграции собственного междоузельного дефекта начинается с ячейки при 0 К, содержащей одну междоузельную конфигурацию с наиболее низкой энергией формирования. Затем атомы внешнего слоя ячейки помещаются в термостат. Температура плавно повышается до заданной величины. После нагревания системы отслеживается миграция дефектов в течение разных периодов времени. Более низкой температуре соответствует более длительное время моделирования.

Коэффициент диффузии для самого междоузлия вычисляется следующим образом. При моделировании миграции положение дефекта в модельном кристалле отслеживается с помощью метода ячеек Вигнера-Зейтца [3]. В результате находится траектория центра масс дефекта. Чтобы получить коэффициент диффузии данного дефекта, траектория разбивается на несколько сегментов, и для каждого сегмента вычисляется квадрат смещения центра масс дефекта. Затем применяется формула Эйнштейна, связывающая суммарный квадрат смещения дефекта и коэффициент диффузии.

Оценка коэффициента диффузии, полученная в результате моделирования миграции одиночного междоузлия, находится в разумном соответствии с расчетами авторов [4, 5], которые использовали последовательный метод МД и метод сильной связи.

Полученная параллельная версия алгоритма МД применялась также для моделирования миграции $\langle 110 \rangle$ -гантели при различных температурах и различных значениях гидростатического давления. Полученные результаты соответствуют результатам термодинамических расчетов, выполненных в [6].

Литература

1. Voter A.F., Phys. Rev. B – 1995. Adv. Chem. Phys. – V. 57. P. –13985.
2. Anderson J.B. – 1995. Adv. Chem. Phys. – V. 91. – P. 381 – 431.
3. Osetsky Yu.N., Defect Diffusion Forum. – 2001. – V. 188-190. – P. 71 – 78.
4. Posselt M., Gao F., Zwicker D. Atomistic study of the migration of di- and tri-interstitials in silicon // Phys. Rev. B – 2005. – V. 71 – P. 245202 – 245217.