

**0.1. Рудин С.А., Павский К.В. Монте-Карло модель для трехмерного моделирования гетероэпитаксии**

Одной из приоритетных задач в области материаловедения является создание пространственно-упорядоченных массивов полупроводниковых квантовых точек (КТ). Для интерпретации экспериментальных данных по росту таких гетероэпитаксиальных структур, а в некоторых случаях и для предсказания результатов при изменении условий эксперимента, используют различные компьютерные модели. Разработана физическая модель Монте-Карло для моделирования гетероэпитаксиального роста [1]. В основе модели лежит трехмерная алмазоподобная кристаллическая решетка. Процесс моделирования роста 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 учета изменения деформации в пространстве с течением времени добавлен третий тип событий - Тепловые колебания атомов вокруг их равновесных положений. Моделирование процессов гетероэпитаксиального роста является вычислительно сложной задачей. Возникновение неоднородностей в распределении деформации или в морфологии поверхности является проблемой при разработке параллельных алгоритмов для систем с распределенной памятью. Около 98Тестовые расчеты [2] показали, что разработанные параллельные алгоритмы позволяют сократить машинное время для моделирования роста Ge на Si на 20-60% в зависимости от условий эксперимента.

*Работа выполнена в рамках ГЗ 0242-2021-0011.*

**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.
- [2] Информационно-вычислительный центр Новосибирского государственного университета . [сайт]. URL: <http://nusc.nsu.ru/wiki/doku.php> (дата обращения 14.09.2022).