

0.1. Рудин С.А., Павский К.В., Ревун А.Л. Решение задачи оптимизации алгоритмов моделирования гетэроэпитаксиального роста Ge на Si(100)

Исследования гетероструктур с квантовыми точками является одной из приоритетных задач в области материаловедения. Молекулярно-лучевая эпитаксия - метод получения пространственное упорядоченных массивов полупроводниковых квантовых точек. Одним из направлений исследования процессов гетэроэпитаксии является компьютерное моделирование. В данной работе представлена оптимизация алгоритмов моделирования гетэроэпитаксиального роста Ge на Si методом Монте-Карло [1].

При моделировании гетэроэпитаксиального роста на структуре размера 38x38 нм с высотой 8 нм, однопоточная программа выполняется более трех месяцев [2]. Для интерпретации экспериментальных данных, возникает потребность моделирования структур размером в десятки раз превышающую описанную выше структуру.

Процесс моделирования роста представляет собой последовательность элементарных событий, выбираемых случайным образом в соответствии с их вероятностями. Итерация Монте-Карло включает одно из элементарных события: осаждение, диффузионный прыжок. Суммарно итерации Монте-Карло занимают ~50% от исполняемого времени программы, вне зависимости от размера подложки. Для получения результата в более короткие сроки следует использовать технологии параллельного программирования OpenMP или MPI. Для того чтобы эффективность параллельной программы росла при увеличении количества вычислителей, следует максимально оптимизировать все ее медленные фрагменты, которые не могут быть распараллелены в силу ограничений, накладываемых моделью.

Была проведена оптимизация алгоритмов моделирования гетэроэпитаксиального роста Ge на Si методом Монте-Карло. Изменения внесенные в итерации Монте-Карло позволили сократить время его выполнения на 32%.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФП СО РАН (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. [Электронный ресурс]. URL: <http://nusc.nsu.ru/wiki/doku.php> (дата обращения 14.09.2023).