

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ И МАТЕРИАЛОВ

SIMULATION OF PROCESSES AND MATERIALS

Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2018. Т. 21, № 4. С. 224—231.

УДК 621:519.7(075.8)

Многомасштабное моделирование кластеров точечных дефектов в полупроводниковых структурах

© 2018 г. К. К. Абгарян^{1,2,§}, И. В. Мутигуллин¹, С. И. Уваров¹, О. В. Уварова^{1,2}

¹ *Вычислительный центр им. А. А. Дородницына Федерального исследовательского центра «Информатика и управление» РАН,
ул. Вавилова, д. 40, Москва, 119333, Россия*

² *Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет),
Волоколамское шоссе, д. 4, Москва, 125993, Россия*

Аннотация. Кластеры точечных и протяженных дефектов, возникающие в полупроводниках в результате радиационного воздействия, позволяют структурам приобретать различные свойства, которые могут быть использованы при изготовлении приборов нового поколения для нанoeлектроники. Численное моделирование полупроводниковых материалов, применяемое для изучения таких процессов, — это ресурсоемкая и многогранная задача. Для ее решения создан комплекс многомасштабного моделирования и задана многомасштабная композиция, содержащая экземпляры базовых моделей-композиций. Разработан алгоритм, позволяющий ускорять расчеты для систем больших размерностей и учета большого количества взаимодействующих атомов. В качестве модели рассмотрена структура кремния с комплексом точечных дефектов. Молекулярно-динамическое моделирование проведено с применением многопараметрического потенциала Терсоффа. Для расчетов представлен эффективный подход к осуществлению параллельных вычислений, и применены программные средства распараллеливания вычислений, размещенные на гибридном высокопроизводительном вычислительном комплексе ФИЦ «Информатика и управление» РАН. Для реализации распараллеленного алгоритма использован стандарт OpenMP. Такой подход позволил значительно снизить вычислительную сложность проводимых расчетов.

Показано, что разработанное высокопроизводительное программное обеспечение может значительно ускорить молекулярно-динамические расчеты, в частности, такие как расчет энергии связи дивакансий за счет алгоритма распараллеливания.

Ключевые слова: многомасштабное моделирование, точечные дефекты, высокопроизводительное ПО

Введение

Проведение теоретических исследований процессов формирования кластеров точечных дефектов в полупроводниковых структурах является важной задачей на пути совершенствования технологий по получению новых материалов.

Одним из распространенных подходов к проведению теоретических исследований процессов, происходящих в сложных дефектных структурах, является метод молекулярно-динамических расчетов, который обеспечивает компромисс между скоростью вычислений и точностью результатов. Однако задача молекулярно-динамического моделирования комплексных дефектных структур остается ресурсоемкой из-за необходимости рассмотрения систем большой размерности и учета взаимодействия огромного числа атомов друг с другом. Таким образом, возникает необходимость разработки алгоритмов, позволяющих ускорять подобные расчеты, не жертвуя размерами моделируемых атомных структур.

Абгарян Каринэ Карленовна^{1,2,§} — канд. физ.-мат. наук, зав. отделом (1), зав. кафедрой (2), e-mail: kristal83@mail.ru; **Мутигуллин Илья Васильевич**¹ — канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник, e-mail: mutigullin@gmail.com; **Уваров Сергей Игоревич**¹ — младший научный сотрудник, e-mail: seruv25@gmail.com; **Уварова Ольга Владимировна**^{1,2} — младший научный сотрудник (1), инженер (2), e-mail: olga25v@gmail.com

§ Автор для переписки

Задача разработки нового вычислительного алгоритма для молекулярно-динамических расчетов решалась в рамках исследования кластеров точечных дефектов в монокристаллическом кремнии. Дефектами кристалла называют всякое нарушение трансляционной симметрии кристалла — идеальной периодичности кристаллической решетки. Существует несколько видов дефектов: точечные, линейные, плоские, объемные. Точечные дефекты — это локальное нарушение кристаллической структуры, размеры которого во всех трех измерениях сравнимы с одним или несколькими межатомными расстояниями. Это дефекты, связанные с примесями, со смещением или заменой небольшой группы атомов. Такие дефекты обычно возникают при нагреве в процессе роста кристалла, при радиационном облучении, а также в результате добавления примесей. Одним из видов точечных дефектов является вакансия — свободный, незанятый атомом узел кристаллической решетки.

Одна из причин образования различных дефектов в структуре полупроводника, в том числе точечных, протяженных, их кластеров и комплексов, — радиационное воздействие. Как известно из ряда экспериментальных работ [1, 2], в результате облучения такие структуры приобретают различные свойства, которые могут быть использованы при изготовлении приборов нового поколения для нанoeлектроники.

Возникновение радиационных дефектов — это неизбежный побочный эффект такого метода модификации материалов, как ионная имплантация. Радиационные дефекты возникают вследствие воздействия на материал нейтронов или гамма-квантов. Такое воздействие характерно для материалов, находящихся в ядерном реакторе. В космосе же характерно воздействие на материалы электронов и протонов, а также тяжелых ионов с низкой энергией.

Теоретические и экспериментальные исследования показали, что дефекты в кремнии могут образовывать сложные протяженные структуры. Для численного моделирования подобных структур и изучения их стабильности требуется учитывать в расчетах большое количество взаимодействующих атомов. Это, в свою очередь, приводит к повышению вычислительной сложности задачи и увеличению времени, необходимого для ее решения. Применение новых подходов к распараллеливанию молекулярно-динамических расчетов на высокопроизводительных компьютерных кластерах позволяет сегодня решать такие задачи.

Ниже предложен новый эффективный подход к осуществлению параллельных вычислений при решении задачи молекулярно-динамического описания структуры кремния с взаимодействующими вакансионными дефектами.

Моделирование кластеров точечных дефектов в кремнии

Для расчетов дефектов, формирующихся в полупроводниковых структурах, в частности в кремнии, в результате радиационного воздействия, применен многомасштабный подход [3, 4]. Он основан на следующих причинах:

- выделение основных масштабных уровней, включая атомно-кристаллический и молекулярно-динамический;
- разработка и применение для решения поставленных задач математических моделей и алгоритмов, специфичных для каждого из уровней;
- объединении моделей и алгоритмов в общем вычислительном процессе.

Методы, применяемые для численного моделирования полупроводниковых материалов трудоемки и многогранны. Поэтому был создан программный комплекс для многомасштабного моделирования их структурных особенностей, позволяющий в вычислительном эксперименте изучать процессы формирования кластеров точечных и протяженных дефектов. В работе представлены результаты расчетов, полученных с применением программных средств распараллеливания вычислений, размещенных на гибридном высокопроизводительном вычислительном комплексе ФИЦ «Информатика и управление» РАН.

Было выделено два масштабных уровня (не считая нулевого): атомно-кристаллический и молекулярно-динамический. В рамках теоретико-множественных представлений его можно задать с помощью многомасштабной композиции

$$MK_{0,1,2}^{(0,14;1,1;1,2;2,1;2,2)} = MK_{0,1,2}^{(Si)},$$

в которой задействованы следующие обозначения базовых моделей-композиций:

$$El_{01}^{Si}: \{V_{01}^{Si}, X_{01}^{Si}, MA_{01}^{Si}\}$$

$$MC_{11}^{Si}: \{V_{11}^{Si}, X_{11}^{Si}, MA_{11}^{Si}\} \quad MC_1^1$$

(«КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКАЯ ФОРМУЛА»)

$$MC_{12}^{Si}: \{V_{12}^{Si}, X_{12}^{Si}, MA_{12}^{Si}\} \quad MC_1^2$$

(«КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКАЯ ЯЧЕЙКА»)

$$MC_{21}^{Si}: \{V_{21}^{Si}, X_{21}^{Si}, MA_{21}^{Si}\} \quad MC_2^1$$

(«АТОМНЫЙ КЛАСТЕР — СТАТИКА»)

$$MC_{22}^{Si}: \{V_{22}^{Si}, X_{22}^{Si}, MA_{22}^{Si}\} \quad MC_2^2$$

(«АТОМНЫЙ КЛАСТЕР — ДИНАМИКА»),

где E — полная энергия системы, эВ; V_{ij} — потенциальная энергия взаимодействия двух частиц i и

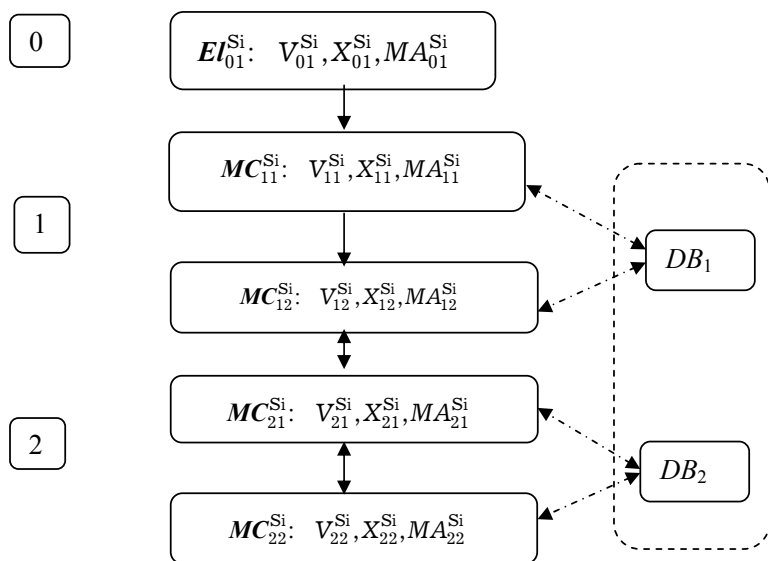


Рис. 1. Многомасштабная композиция для расчета дефектов в кремнии
Fig. 1. Multiscale composition for the calculation of defects in silicon

j , эВ; A_{ij} — параметр отталкивания между двумя атомами, эВ.

На рис. 1 представлена структура многомасштабной композиции для расчета упорядоченных кластерных конфигураций вакансий и межузельных атомов в Si. Указаны экземпляры базовых композиций и последовательность их использования в вычислительном процессе.

На первом уровне, использовали данные по химическому составу и атомно-кристаллической структуре Si (структура алмаза), полученные с помощью базовой композиции MC_1^1 («КРИСТАЛЛО-ХИМИЧЕСКАЯ ФОРМУЛА»). Далее их использовали в качестве входных данных в базовой композиции MC_1^2 («КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКАЯ ЯЧЕЙКА») при проведении первопринципных расчетов в рамках теории функционала электронной плотности с применением программного комплекса VASP [5]. При первопринципном моделировании структуры идеального кремния рассматривали периодическую ячейку, состоящую из 64 атомов, размерностью

$(2 \times 2 \times 2)$. Уточняли атомно-кристаллическую и электронную структуру кремния с дефектами, вычисляли когезионную энергию системы E_{coh} . Для расчетов задействовали вычислительные ресурсы Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН и МГУ им. М. В. Ломоносова.

На втором масштабном уровне изучали вопросы изменения во времени структуры кремния с дефектами и дефектными кластерами. Применяли композицию вычислительных моделей, состоящую из базовых композиций MC_2^1 («АТОМНЫЙ КЛАСТЕР — СТАТИКА») и MC_2^2 («АТОМНЫЙ КЛАСТЕР — ДИНАМИКА»). Причем, при формировании входных данных в MC_2^1 как эталонные использовали результаты первопринципных расчетов [5], полученные с помощью базовой композиции MC_1^1 . В качестве глобального параметра, передающегося с первого масштаба на второй, выступала когезионная энергия системы.

Описание модели

Для численного моделирования монокристалла кремния использовали элементарную ячейку кремния, состоящую из 8 атомов (рис. 2, а). Далее с помощью параллельных переносов элементарную ячейку размножали до структур кремния, содержащих 616, 1160 и 4504 атомов. Моделировали структуру с комплексом точечных дефектов (двух вакансий), расположенных в соседних узлах решетки (рис. 3), с выбранной периодичностью повторяемости дефекта — через ячейку.

Решение поставленной задачи

Молекулярно-динамическое моделирование проводили с применением многопараметрического потенциала Терсоффа [6], хорошо зарекомендовавшего себя при решении задач моделирования соединений с ковалентными связями. Расчет когезионной энергии системы атомов осуществляли следующим образом:

$$E = \sum_i E_i = \frac{1}{2} \sum_i V_{ij}, \quad (1)$$

$$V_{ij} = f_c(r_{ij})[f_R(r_{ij}) + b_{ij}f_A(r_{ij})], \quad (2)$$

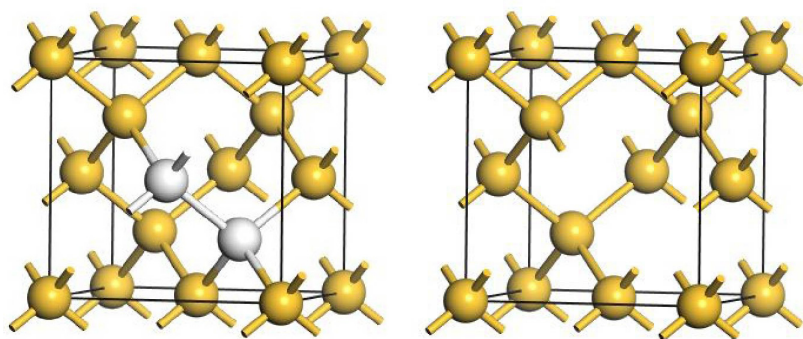


Рис. 2. Кристаллическая решетка Si:
а — без дефектов; б — с дивакансией

Fig. 2. Silicon crystal lattice: (a) without defects, (b) with divacancy

$$f_c(r_{ij}) = \begin{cases} 1, & r_{ij} < R - R_{cut} \\ \frac{1}{2} \left[1 + \cos \left[\frac{\pi(r_{ij} - R)}{2R_{cut}} \right] \right], & R - R_{cut} < r_{ij} < R + R_{cut} \\ 0, & r_{ij} > R + R_{cut} \end{cases} \quad (3)$$

$$f_R(r_{ij}) = A_{ij} \exp[-\kappa_{ij}(r_{ij} - R_e)], \quad (4)$$

$$f_A(r_{ij}) = B_{ij} \exp[-\mu_{ij}(r_{ij} - R_e)], \quad (5)$$

$$b_{ij} = \chi_{ij} \left(1 + \gamma_i^{ni} \zeta_{ij}^{ni} \right)^{\frac{ni}{2}}. \quad (6)$$

где E — полная энергия системы, эВ; V_{ij} — потенциальная энергия взаимодействия двух частиц i и j , эВ; $f_c(r_{ij})$ — функция отсечения (*cutoff*-функция); r_{ij} — расстояние между двумя частицами i и j , Å; R_{cut} — расстояние отсечения, Å; f_R — потенциал отталкивания между двумя атомами, эВ; b_{ij} — параметр притяжения между двумя атомами, эВ; f_A — потенциал притяжения между двумя атомами, эВ; κ_{ij} , R_e , μ_{ij} — параметры потенциала Теософфа, эВ; A_{ij} , χ_{ij} , γ_{ij} — безразмерный параметр потенциала Теософфа.

Параметры потенциала подбирали в результате решения задачи оптимизации [7]:

$$\begin{aligned} F(\xi) = & \omega_1 [E_{coh}(\xi) - E_{coh}^{fpc}]^2 + \omega_2 [a(\xi) - a^{fpc}]^2 + \\ & + \omega_3 [B(\xi) - B^{fpc}]^2 + \omega_4 [C'(\xi) - C'^{fpc}]^2 + \\ & + \omega_5 [C_{44}(\xi) - C_{44}^{fpc}]^2 + \omega_6 [\zeta(\xi) - \zeta^{fpc}]^2 \rightarrow \min, \end{aligned} \quad (7)$$

где $\xi = (\xi_1 \dots \xi_m)$ — параметры потенциала Терсоффа; F — сила, действующая на молекулу, Н; $\omega = (\omega_1, \dots, \omega_6)$ — весовые коэффициенты; a — постоянная решетка, Å; B — объемный модуль упругости, МБар; C' — модуль сдвига, МБар; C_{44} — постоянная упругости, МБар; ξ — постоянная Клеймана, (безразмерный); E_{coh}^{fpc} , a^{fpc} , B^{fpc} , C'^{fpc} , C_{44}^{fpc} , ζ^{fpc} — эталонные значения, полученные с помощью первопринципных расчетов и из публикации [8]. Подобранные значения параметров потенциала Терсоффа для структуры кремния приведены ниже.

D_e	2,3631
S	1,4864
β	1,4637
R_e	2,3436
c	113074,1153
d	14,2474
n	0,9388
h	-0,4239
γ	$1,2466 \cdot 10^{-6}$
γ	0,2993

Молекулярно-динамическое моделирование представляло собой решение задачи Коши для уравнения движения, описанного ниже. В качестве начальных условий такой задачи задавали координаты и скорости каждой из частиц.

$$\begin{cases} m_n \frac{du_n}{dt} = F_n(x_1, \dots, x_N); \\ m_n \frac{dq_n}{dt} = F_n(y_1, \dots, y_N); \\ m_n \frac{dw_n}{dt} = F_n(z_1, \dots, z_N); \\ \frac{dx_n}{dt} = u_n; \\ \frac{dy_n}{dt} = q_n; \\ \frac{dz_n}{dt} = w_n, \end{cases} \quad (8)$$

где $n \in [1, N]$; m_n — масса n -ого атома, $n \in [1, N]$; F_n — сила, действующая на частицу с номером n ; x_n , y_n , z_n — координаты n -го атома, Å; u_n , q_n , w_n — скорость n -го атома, м/с; t — время, с.

Для интегрирования поставленной задачи Коши был выбран метод скоростей Верле [9]:

$$\begin{aligned} r_n^{k+1} &= r_n^k + \tau_k v_n^k - \frac{\tau_k^2}{2} \frac{\partial U_n^k}{\partial r_n^k}, \\ v_n^{k+1} &= v_n^k + \frac{\tau_k}{2} \left(\frac{\partial U_n^{k+1}}{\partial r_n^{k+1}} + \frac{\partial U_n^k}{\partial r_n^k} \right). \end{aligned} \quad (9)$$

где r — координаты атомов, Å; v — скорости атомов, м/с; U — потенциал взаимодействия между двумя атомами, Дж.

Данный метод является компромиссом между точностью и скоростью реализации. Метод является стабильным и точным, а также самостартующим за счет того, что для получения следующего местоположения частицы учитывается ее скорость.

Для моделирования дефектов были разработаны два алгоритма: последовательный, который запускался на персональном компьютере (ЦП Intel Core i7 4-ядерный 4 ГГц, ОП 16 Гб), и распараллеленный для запуска на суперкомпьютере IBM (два 8-ядерных ЦП IBM Power 8, ОП 512 Гб). Особенности реализации связаны с применением потенциала Терсоффа, который плохо поддается распараллеливанию из-за своей сложной структуры, и при этом является ресурсоемким с точки зрения вычислений.

Для реализации распараллеленного алгоритма использовали стандарт OpenMP. Для этого определяли максимально доступное количество потоков для запускаемого экземпляра программы, после чего входные данные разделялись на количество блоков, равное количеству доступных потоков. Каждый

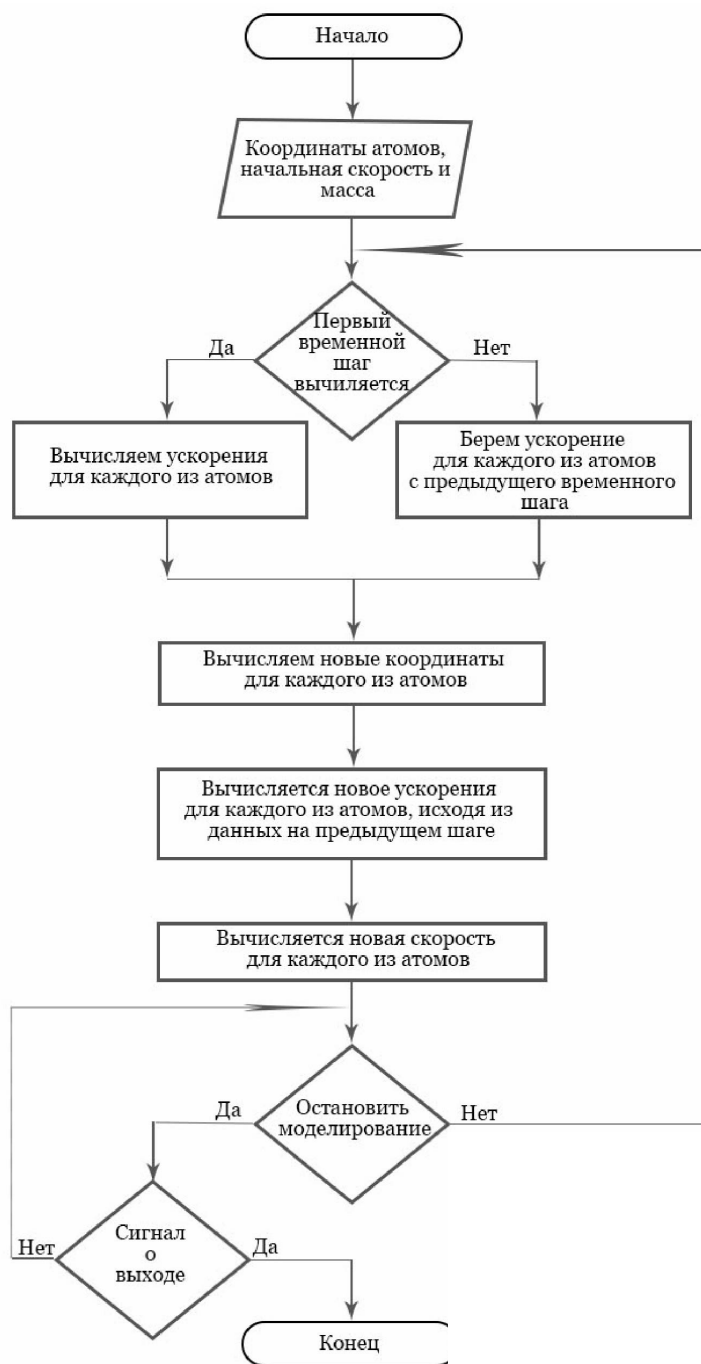


Рис. 3. Блок-схема алгоритма молекулярной динамики
Fig. 3. The block diagram of the molecular dynamics algorithm

блок входных данных запускался в своем потоке. Во время молекулярно-динамического моделирования в конце каждого временного шага блоки обменивались данными, чтобы синхронизировать параметры атомов, которые являются общими для разных блоков (рис. 4). Такой подход позволил снизить вычислительную сложность за счет уменьшения количества атомов, обрабатываемых в каждом потоке. В свою очередь это

позволило значительно ускорить процесс моделирования, благодаря чему стало возможным учитывать большее количество атомов в расчетах.

Для наглядного сопоставления скорости работы распараллеленного и последовательного алгоритмов процесс моделирования был ограничен 10 временными шагами. Результаты расчетов представлены в табл. 1. Согласно полученным результатам, применение разработанного алгоритма на персональном компьютере позволяет значительно ускорить расчеты, причем на суперкомпьютере продемонстрированный результат ускорения более значительный, чем на четырехъядерном процессоре.

Результаты, полученные с помощью разработанного программного комплекса, также сравнивали с результатами, полученными с помощью пакета LAMMPS. Для получения результатов в рамках пакета LAMMPS была написана отдельная программа. В ней элементарную ячейку кремния моделировали из 16 атомов с помощью потенциала Терсоффа при разной температуре. Полученные данные сравнивались с аналогичным экспериментом, поставленным в разработанном программном комплексе. Сравнивалась энергия связи (E_{pair}) и температура системы ($Temp$) (табл. 2).

Из проведенного сопоставления видно, что энергия связи близка к значениям энергии, полученным с помощью программного продукта LAMMPS, а температура сопоста-

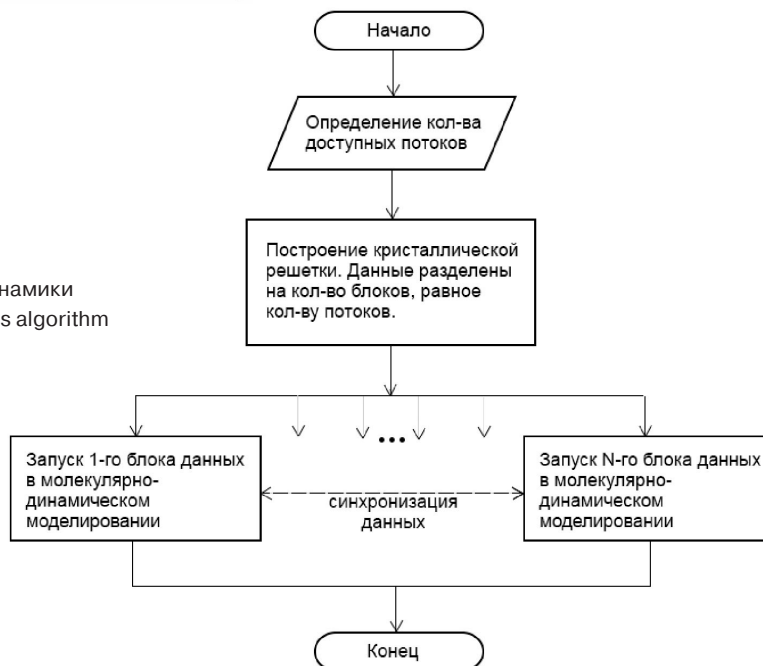


Рис. 4. Блок-схема распараллеленного алгоритма
Fig. 4. The block diagram of the parallelized algorithm

Таблица 1

Сравнение времени работы алгоритма на РС и IBM для разного количества атомов
 [Comparison of the running time of the algorithm on PC and IBM for a different number of atoms]

Количество атомов	Персональный компьютер		Суперкомпьютер IBM	
	1 поток, с	4 потока, с	1 поток, с	128 потоков, с
864	991,664	358,496	1990,230	65,585
1152	1995,660	707,852	3830,310	125,255
2048	7010,740	2873,040	14231,100	464,480

Таблица 2

Результаты расчетов для ячейки из 16 атомов кремния с дивакансией
 [Calculation results for a cell of 16 silicon atoms with divacancy]

Количество временных шагов	E_pair МД, эВ	E_pair LAMMPS, эВ	Temp МД, К	Temp LAMMPS, К
<i>Температура в начале моделирования — 0 К</i>				
0	-74,0808	-74,0866	0	0
100	-74,0808	-74,0866	$5,8324 \cdot 10^{-34}$	$9,8751 \cdot 10^{-25}$
1000	-74,0808	-74,0866	$6,0933 \cdot 10^{-32}$	$9,1005 \cdot 10^{-25}$
10000	-74,0808	-74,0866	$7,0054 \cdot 10^{-34}$	$3,1961 \cdot 10^{-25}$
<i>Температура в начале моделирования — 100 К</i>				
0	-74,0808	-74,0866	100	100
100	-73,5437	-73,9947	87,5567	52,6309
1000	-74,0808	-74,0120	87,5872	61,5911
10000	-74,0808	-73,9978	87,5872	54,2501
<i>Температура в начале моделирование — 500 К</i>				
0	-74,0808	-74,0866	500	500
100	-70,9716	-73,6818	437,8505	291,3985
1000	-74,0808	-73,6169	437,9358	258,1365
10000	-74,0808	-73,6535	437,9360	276,9892
<i>Температура в начале моделирования — 1000 К</i>				
0	-74,0808	-74,0866	1000	1000
100	-67,8394	-73,1538	875,6751	519,4458
1000	-74,0808	-73,1616	875,8718	523,6768
10000	-74,0808	-73,0931	875,8721	488,4341

вима с результатами, полученными в LAMMPS.

Реализованный алгоритм позволил провести расчет характеристик монокристаллического кремния, в частности было рассчитано значение энергии связи для монокристаллического кремния ($E_{\text{coh}}(\xi) = -4,6314$ эВ). Полученное значение оказалось близким к значению, полученному ранее с помощью первопринципных расчетов ($E_{\text{coh}}^{\text{fpc}} = -4,6305$ эВ) [10—18]. Таким образом, разработанное программное обеспечение с использованием подобранных параметров потенциала Терсофа позволяет достаточно точно описывать геометрические и энергетические свойства монокристаллического кремния. Этот подход в дальнейшем может быть применен для изучения более сложных структур вакансионных кластеров в монокристалле кремния.

Заключение

Разработано программное обеспечение, позволяющее осуществлять молекулярно-динамические моделирование, эффективно распараллеливая вычислительные потоки. В рамках задачи по исследованию стабильности дефектных кластеров в монокристаллическом кремнии разработанное программное обеспечение было использовано для расчета энергии связи дивакансии в структуре монокристаллического кремния. Предложенный новый алгоритм позволяет значительно ускорить молекулярно-динамические расчеты, благодаря чему стало возможно учитывать большее количество взаимодействующих атомов при моделировании. В свою очередь это позволит изучить свойства бо-

лее сложных дефектных структур в кремнии. Такой подход может быть применен в дальнейшем для моделирования взаимодействующих атомных систем, описываемых разными потенциалами.

Библиографический список

1. Tang M., Colombo L., Zhu J., de la Rubia T. D. Intrinsic point defects in crystalline silicon: Tight-binding molecular dynamics studies of self-diffusion, interstitial-vacancy recombination, and formation volumes // *Phys. Rev. B*. 1997. V. 55, Iss. 21. P. 14279—14289. DOI: 10.1103/PhysRevB.55.14279
2. Fedina L. I., Sheglov D. V., Gutakovskii A. K., Kosolobov S. S., Latyshev A. V. Precision measurements of nanostructure parameters // *Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing*. 2010. V. 46, Iss. 4. P. 301—311. DOI: 10.3103/S8756699010040011
3. Абгарян К. К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения: монография. М.: Изд-во Макс Пресс, 2017. 284 с.
4. Абгарян К. К. Информационная технология построения многомасштабных моделей в задачах вычислительного материаловедения // *Системы высокой доступности*. 2018. Т. 14, № 2. С. 9—15.
5. VASP. URL: <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/>
6. Tersoff J. Empirical interatomic potential for silicon with improved elastic properties // *Phys. Rev. B: Condens Matter*. 1988. V. 38, Iss. 14. P. 9902—9905. DOI: 10.1103/physrevb.38.9902
7. Абгарян К. К., Посыпкин М. А. Применение оптимизационных методов для решения задач параметрической идентификации потенциалов межатомного взаимодействия // *Ж. выч. мат. и матем. физ.* 2014. Т. 54, № 12. С. 1994—2001. DOI: 10.7868/S0044466914120023
8. Powell D. Elasticity, lattice dynamics and parameterisation techniques for the Tersoff potential applied to elemental and type

III—V semiconductors: dis. Sheffield (UK): University of Sheffield, 2006.

9. Зализняк В. Е. Основы вычислительной физики. Часть 2. Введение в метод частиц. М.; Ижевск: Регулярная и теоретическая динамика, Ижевский институт компьютерных исследований, 2006. 156 с. (С. 26—45).

10. Abgaryan K. K., Volodina O. V., Uvarov S. I. Mathematical modeling of point defect cluster formation in silicon based on molecular dynamic approach // *Modern Electronic Materials*. 2015. V. 1, Iss. 3. P. 82—87. DOI: 10.1016/j.moem.2016.03.001

11. Линник Ю. В. Метод наименьших квадратов и основы математико-статистической теории обработки наблюдений. М.: Физматлит, 1958. 336 с.

12. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела. Т. 1. М.: Мир, 1979. 486 с.

13. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. Теория упругости. М.: Наука, 1987. 248 с.

14. Словарь нанотехнологических и связанных с нанотехнологиями терминов / под ред. С. В. Калужного. М.: Физматлит, 2010. 528 с.

15. Hooke R., Jeeves T. A. «Direct search» solution of numerical and statistical problems // *J. Ass. Comput. Mach.* 1961. V. 8, Iss. 2. P. 12—229. DOI: 10.1145/321062.321069

16. Химическая энциклопедия / под ред. Н. С. Зефинова. М.: Большая Российская Энциклопедия, 1995. Т. 4. 639 с. (С. 55)

17. Абгарян К. К. Применение оптимизационных методов для моделирования многослойных полупроводниковых наносистем // *Труды Института системного анализа Российской академии наук. Динамика неоднородных систем*. 2010. Т. 53, № 3. С. 6—9.

18. Острик А. В. Метод конечно-размерных частиц в ячейке применяемый для численного моделирования высокоскоростного взаимодействия гетерогенных тел // *Химическая физика*. 2008. Т. 27, № 8. С. 89—96.

Статья поступила в редакцию 11 декабря 2018 г.

Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = *Materials of Electronics Engineering*. 2018, vol. 21, no. 4, pp. 224—231. DOI: 10.17073/1609-3577-2018-4-000-000

Multiscale modeling of clusters of point defects in semiconductor structures

K. K. Abgaryan^{1,2,*}, I. V. Mutigullin¹, S. I. Uvarov¹, O. V. Uvarova^{1,2}

¹ *Dorodnitsyn Computing Centre, Federal Research Center «Computer Science and Control» of Russian Academy of Sciences, 40 Vavilov Str., Moscow 119333, Russia*

² *Moscow Aviation Institute (National Research University), 4 Volokolamskoe Shosse, Moscow 125993, Russia*

Abstract. Clusters of point and extended defects, arising in semiconductors as a result of radiation exposure, allow structures to acquire various properties that can be used in the manufacture of new generation devices for nanoelectronics. Numerical simulation of semiconductor materials used to research such processes is a resource-intensive and multifaceted task. To solve it, the multiscale modeling complex was created and the multiscale composition containing instances of basic composition models was set. An algorithm was developed that allows speeding up calculations for systems of large dimensions and accounting for a large number of interacting atoms. The structure of silicon with a complex of point defects was considered as a model. Molecular dynamics simulation was performed using the multiparameter potential of Tersoff. For the calculations, an effective approach to the implementation of parallel computing was presented, and software for parallelizing the computations was used, placed on the hybrid high-performance computing complex of the FRC «Computer Science and Control» of Russian Academy of Science. To implement the parallelized algorithm, the OpenMP standard was used. This approach has significantly reduced the computational complexity of the calculations. It was shown that the developed high-performance software can significantly accelerate molecular dynamics calculations, such as the calculation of divacancy communication energy, due to the parallelization algorithm.

Keywords: multiscale modeling, point defects, high-performance software

Information about authors:

Karine K. Abgaryan^{1,2,*}: Cand. Sci. (Phys.–Math.), Head of the Department (1,2) (kristal83@mail.ru); **Ilya V. Mutigullin**¹: Cand. Sci. (Phys.–Math.), Senior Researcher (mutigullin@gmail.com); **Sergey I. Uvarov**¹: Junior Researcher (seruv25@gmail.com); **Olga V. Uvarova**^{1,2}: Junior Research (1), Engineer (2) (olga25v@gmail.com)

* Corresponding author

References

1. Tang M., Colombo L., Zhu J., de la Rubia T.D. Intrinsic point defects in crystalline silicon: Tight-binding molecular dynamics studies of self-diffusion, interstitial-vacancy recombination, and formation volumes. *Phys. Rev. B.*, 1997, vol. 55, no. 21, pp. 14279—14289. DOI: 10.1103/PhysRevB.55.14279
2. Fedina L.I., Sheglov D.V., Gutakovskii A.K., Kosolobov S.S., Latyshev A.V. Precision measurements of nanostructure parameters. *Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing*, 2010, vol. 46, no. 4, pp. 301—311. DOI: 10.3103/S8756699010040011
3. Abgaryan K. K. *Mnogomasshtabnoe modelirovanie v zadachakh strukturnogo materialovedeniya* [Multiscale modeling in material science problems]. Moscow: Max Press, 2017, 284 p. (In Russ.)
4. Abgaryan K. K. Information technology is the construction of multi-scale models in problems of computational materials science. *Sistemy vysokoi dostupnosti = Highly Available Systems*, 2018, vol. 14, no. 2, pp. 9—15. (In Russ.)
5. VASP. URL: <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/>
6. Tersoff J. Empirical interatomic potential for silicon with improved elastic properties. *Phys. Rev. B: Condens Matter.*, 1988, vol. 38, no. 14, pp. 9902—9905. DOI: 10.1103/physrevb.38.9902
7. Abgaryan K. K., Posypkin M. A. Optimization methods as applied to parametric identification of interatomic potentials. *Comput. Math. and Math. Phys.*, 2014, vol. 54, no. 12, pp. 1929—1935. DOI: 10.1134/S0965542514120021
8. Powell D. Elasticity, lattice dynamics and parameterisation techniques for the Tersoff potential applied to elemental and type III—V semiconductors: dis. Sheffield (UK): University of Sheffield, 2006.
9. Zaliznyak V. E. *Osnovy vychislitel'noi fiziki. Chast' 2. Vvedenie v metod chastits* [Fundamentals of computational physics. Part 2. Introduction to the particle method]. Moscow; Izhevsk: Regul'yarnaya i teoreticheskaya dinamika, Izhevskii institut komp'yuternykh issledovaniy, 2006, 156 p. (In Russ.)
10. Abgaryan K. K., Volodina O. V., Uvarov S. I. Mathematical modeling of point defect cluster formation in silicon based on molecular dynamic approach. *Modern Electronic Materials*, 2015, vol. 1, no. 3, pp. 82—87. DOI: 10.1016/j.moem.2016.03.001
11. Linnik Yu. V. *Metod naimen'shikh kvadratov i osnovy matematiko-statisticheskoi teorii obrabotki nablyudenii* [Least squares method and the foundations of the mathematical-statistical theory of processing observations]. Moscow: Fizmatlit, 1958, 336 p. (In Russ.)
12. Ashcroft N. W., Mermin N. D. *Fizika tverdogo tela* [Solid State Physics]. Vol. 1. Moscow: Mir, 1979, 486 p. (In Russ.)
13. Landau L. D., Lifshits E. M. *Teoreticheskaya fizika. Teoriya uprugosti* [Theoretical physics. Theory of elasticity]. Moscow: Nauka, 1987, 248 p. (In Russ.)
14. *Slovar' nanotekhnologicheskikh i svyazannykh s nanotekhnologiyami terminov* [Dictionary of nanotechnological and nanotechnology-related terms]. Ed. S. V. Kalyuzhny. Moscow: Fizmatlit, 2010, 528 p. (In Russ.)
15. Hooke R., Jeeves T. A. «Direct search» solution of numerical and statistical problems. *J. Ass. Comput. Mach.*, 1961, vol. 8, no. 2, pp. 212—229. DOI: 10.1145/321062.321069
16. *Khimicheskaya entsiklopediya* [Chemical Encyclopedia]. Ed. N. S. Zefirov. Moscow: Bol'shaya Rossiiskaya Entsiklopediya, 1995, vol. 4, 639 p. (In Russ.)
17. Abgaryan K. K. Application of optimization methods for simulation of multilayer semiconductor nanostructures. *Trudy Instituta sistemnogo analiza Rossijskoj akademii nauk. Dinamika neodnorodnykh system*. 2010, vol. 53, no. 3, pp. 6—9. (In Russ.)
18. Ostrik A. V. The method of finite-dimensional particles in a cell used for numerical simulation of high-speed interaction of heterogeneous bodies. *Khimicheskaya fizika = Chemical Physics*, 2008, vol. 27, no. 8, pp. 89—96. (In Russ.)

Received December 11, 2018