

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ГРАФИЧЕСКИХ УСКОРИТЕЛЕЙ ПРИ РАСЧЕТЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ НАНОКРИСТАЛЛОВ В РАМКАХ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

А.В. Швецов, Д.В. Осокин

Нижегородский госуниверситет им. Н.И. Лобачевского

Рассматривается задача расчета оптических свойств многоэлектронных систем на основе динамической версии метода функционала плотности. Предлагается параллельный алгоритм расчета для систем с графическими ускорителями, который может быть использован для определения спектров как изолированных, так и взаимодействующих кремниевых нанокристаллов (квантовых точек). Приведены результаты вычислительных экспериментов.

Введение

Расчет оптических свойств многоэлектронных атомных и молекулярных систем представляет огромный интерес для спектроскопии, лазерной физики и оптоэлектронных приложений. В современной оптоэлектронике актуальной проблемой является исследование воздействия лазерного поля на отдельные кремниевые нанокристаллы (квантовые точки) и ансамбли взаимодействующих нанокристаллов, в которых состояния оккупируют большое число электронов. Интерес также представляют сложные гибридные структуры, в которых проявляется резонансная связь дискретных состояний экситонов в полупроводниковых квантовых точках с плазмонами в металлических наночастицах, приводящая к усилению фотолюминесценции полупроводниковых квантовых точек.

Для описания возбуждений в наноструктурах необходимо решить уравнение Шредингера для многоэлектронной волновой функции в многомерном пространстве и времени. В случае систем, состоящих из десятков и более частиц, подход, основанный на прямом решении уравнения Шредингера для многочастичной волновой функции, является крайне затратным. Упрощение возможно, если ограничиться кругом явлений, где проявляются свойства наблюдаемых, определяемых только электронной плотностью. В основе теории Кона-Шэма (теории функционала плотности) лежит тот факт, что наблюдаемые многоэлектронные системы могут быть выражены через электронную плотность и для этого не требуется находить многоэлектронную волновую функцию. Теория Кона-Шэма расширена Рунге и Гроссом на случай нестационарных систем и позволяет рассчитывать динамический отклик многоэлектронных систем.

Расчеты даже в рамках теории функционала плотности в случае большого числа частиц требуют большого объема вычислений. Одним из выходов является разработка параллельной реализации данного метода на графических процессорах.

1. Моделирование спектров электронных возбуждений в нанокристаллах

Ограничим рассмотрение взаимодействием сильного лазерного поля с электронной подсистемой в кремниевой квантовой точке; расчет отклика проведем в рамках нестационарной теории функционала плотности.

Отправной точкой теории функционала плотности является уравнение Шредингера для многоэлектронной функции $\psi(t)$ в присутствии нестационарного поля. Гамильтониан системы $H=T+V_{ext}+W_{ee}$ представляет собой сумму кинетической энергии электронов, потенциала взаимодействия электронов с ядрами решетки и внешними полями, а также энергии электрон-электронного взаимодействия. Одноэлектронный гамильтониан в квантовой точке берется в приближении эффективной массы. С учетом сказанного, гамильтониан многоэлектронной системы записывается в виде

$$\hat{H}(t) = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \sum_{i=1}^{N_p} \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^{N_p} v(\vec{r}_i, t) + \hat{W}_{ee},$$

где m_e^* – эффективная масса электронов, которая для конкретных материалов известна из экспериментальных работ.

Далее выбрана атомная система единиц: $e=\hbar=m_0=1$, где m_0 – масса свободного электрона. В приведенном выше выражении фигурирует внешний потенциал $v(\vec{r}, t)$, который согласно теореме Рунге–Гросса однозначно связан с электронной плотностью $n(\vec{r}, t)$ для многоэлектронной системы, эволюционирующей из начального состояния $\psi(t=0)$. Следовательно, если известна лишь электронная плотность системы, эволюционирующей из заданного начального состояния $\psi(t=0)$, то она однозначно определяет внешний потенциал, который ее создает. Внешний потенциал полностью определяет гамильтониан системы, тогда нестационарное уравнение Шредингера может быть решено, и получены наблюдаемые характеристики системы. Для этого выбирается система невзаимодействующих электронов, называемая KS системой, определенная таким образом, что точно воспроизводит электронную плотность истинной взаимодействующей системы. Тогда свойства истинной системы могут быть выражены через электронную плотность невзаимодействующей системы. Поскольку однозначное соответствие между зависящей от времени электронной плотностью и внешним потенциалом установлено для любого \hat{W}_{ee} , то оно справедливо и для $\hat{W}_{ee} \equiv 0$, то есть и для KS системы. Следовательно, внешний потенциал $v_{KS}(\vec{r}, t) \equiv v_{KS}[n; \Phi_0](\vec{r}, t)$ невзаимодействующей системы, воспроизводящий электронную плотность $n(\vec{r}, t)$, эволюционирующую из состояния Φ_0 , однозначно определен. KS состояние Φ_0 невзаимодействующих электронов выбирается в виде детерминанта одночастичных орбиталей $\phi(\vec{r}, 0)$. При этом KS состояние должно соответствовать заданной начальной электронной плотности, воспроизводить ее саму и ее первую производную по времени. Электронная плотность взаимодействующей системы может быть определена как

$$n(\vec{r}, t) = \sum_{j=1}^{N_p} |\phi_j(\vec{r}, t)|^2,$$

где $\phi_j(\vec{r}, t)$ являются решениями уравнения Шредингера с потенциалом $v_{KS}(\vec{r}, t)$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi_j(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\nabla^2}{2m_e^*} + v_{KS}[n; \Phi_0](\vec{r}, t) \right] \phi_j(\vec{r}, t)$$

$$v_{KS}[n; \Phi_0](\vec{r}, t) = v[n; \psi_0](\vec{r}, t) + \int d^3\vec{r}' \frac{e^2 n(\vec{r}', t)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + v_{XC}[n; \psi_0, \Phi_0](\vec{r}, t).$$

Здесь $v(\vec{r}, t)$ – потенциал внешнего поля, второе слагаемое представляет собой потенциал Хартри $v_H(\vec{r}, t)$, третье слагаемое – обменно-корреляционный потенциал. Функ-

циональная зависимость $\nu(\vec{r}, t)$ определяется тем фактом, что внешний потенциал $\nu(\vec{r}, t)$ является заданной функцией (складывается из потенциала, связанного с барьером на границе нанокристалла со средой, в которой он находится, и потенциальной энергии во внешнем электромагнитном поле волны). Для аппроксимации $\nu_{xc}(\vec{r}, t)$ используется адиабатическое приближение локальной плотности, которое хорошо зарекомендовало себя при расчетах спектров многоэлектронных систем. В этом случае ν_{xc} зависит лишь от значения электронной плотности в данной точке в данный момент времени. Таким образом, задача сводится к решению N_p нестационарных уравнений Шредингера с потенциалом $\nu_{KS}(\vec{r}, t)$ для орбиталей $\varphi_j(\vec{r}, t)$.

2. Численный метод решения

Для демонстрации общей методики исследуем динамику электронных состояний в сферической потенциальной яме с бесконечными стенками. Данная модельная система должна отражать свойства сферической квантовой точки с достаточно большим потенциальным барьером (в реальных системах барьер составляет несколько электрон-вольт).

На первом шаге происходит расчет электронной плотности, после чего решением уравнения Пуассона определяется потенциал Хартри для данной $n(\vec{r}, t)$

$$\Delta \nu_H(\vec{r}, t) = -4\pi(n(\vec{r}, t) - n_+(\vec{r})).$$

Здесь $n_+(\vec{r})$ – плотность положительных зарядов, которая выбирается в виде равномерно размазанного по всему объему нанокристалла положительно заряженного желе.

После этого определяется обменно-корреляционный потенциал по аппроксимирующей формуле

$$\nu_{xc}(\vec{r}, t) = -\frac{1,222}{r_s(n)} - 0,066 \ln\left(1 + \frac{11,4}{r_s(n)}\right), \quad r_s(n) = 3\sqrt{\frac{3}{4\pi n(\vec{r}, t)}}.$$

Далее решаются нестационарные уравнения Шредингера для N_p орбиталей (для KS системы) на одном шаге по времени. В результате находятся орбитали KS системы на новом шаге по времени, по которым рассчитывается электронная плотность на новом шаге по времени и происходит переход к расчету $n(\vec{r}, t)$ на следующем шаге по времени.

В настоящей работе для решения самосогласованных уравнений Кона-Шэма выбраны итерационный метод сопряженных градиентов и метод Рунге-Кутты, поскольку допускают блочное разбиение пространства, и, следовательно, будут хорошо сочетаться в параллельной реализации метода Кона-Шэма для расчета многоэлектронных задач.

3. Результаты вычислительных экспериментов

Предложенный алгоритм расчета оптических свойств полупроводниковых нанокристаллов в рамках теории функционала плотности на основе блочного разбиения пространства был реализован для гетерогенных систем с распределенной памятью (вычислительных кластеров с графическими процессорами на узлах).

Вычислительные эксперименты проводились на следующей платформе:

- язык программирования: C;
- используемые технологии: OpenMP, CUDA, MPI;
- операционная система: Microsoft Windows Server 2008 HPC Edition SP2 x64;
- среда разработки: Microsoft Visual Studio 2010;
- компилятор: Intel C++ Compiler XE 12.1;

- 16 узлов: 2 CPU Intel Xeon L5630 2.13 ГГц, 4 ядра; 24 ГБ оперативной памяти; NVidia Tesla M2050.

Результаты проведенных экспериментов (рис. 1) демонстрируют эффективность применения графических процессоров для решения задачи. Видно, что GPU-реализация быстрее однопоточной CPU-версии более, чем в 30 раз при размерах трехмерной пространственной сетки от 60 узлов в каждом направлении. Рисунок 2 показывает зависимость ускорения параллельной GPU-реализации метода Кона-Шэма для систем с распределенной памятью в зависимости от числа используемых графических процессоров.

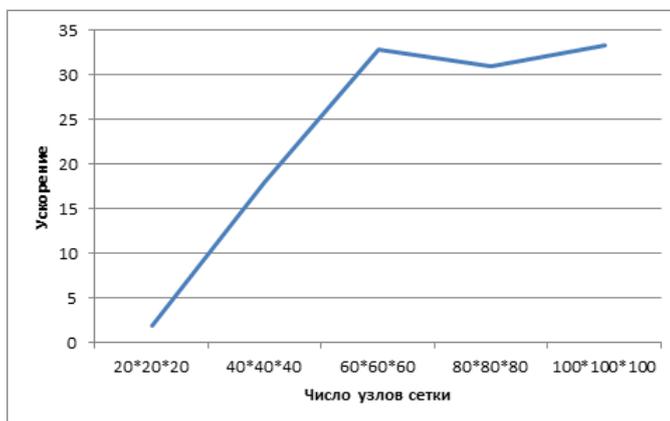


Рис. 1. Ускорение GPU-реализации метода Рунге-Кутты относительно многопоточной CPU-реализации

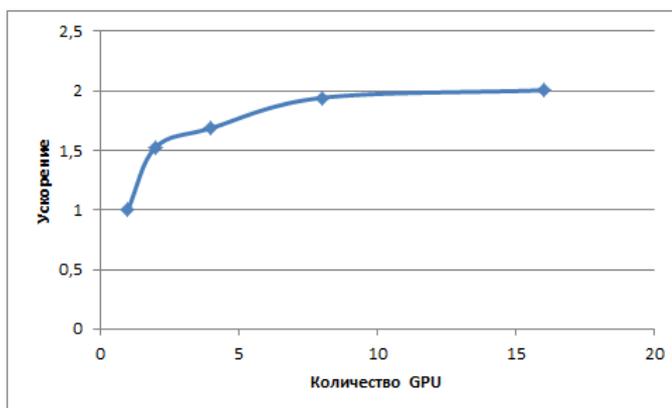


Рис. 2. Масштабируемость параллельной GPU-реализации метода Кона-Шэма

На рис. 3 приведены результаты следующего набора экспериментов: рассматривается параллельная GPU-версия для систем с распределенной памятью, и производится ее запуск на кластере с графическими ускорителями на каждом из узлов. Осуществляются параллельные запуски алгоритма на разном числе узлов кластера, причем количество процессов (узлов) соответствует размеру пространственной сетки, используемой для расчетов. Эффективность распараллеливания при использовании 68 GPU здесь составляет примерно 31.4%.

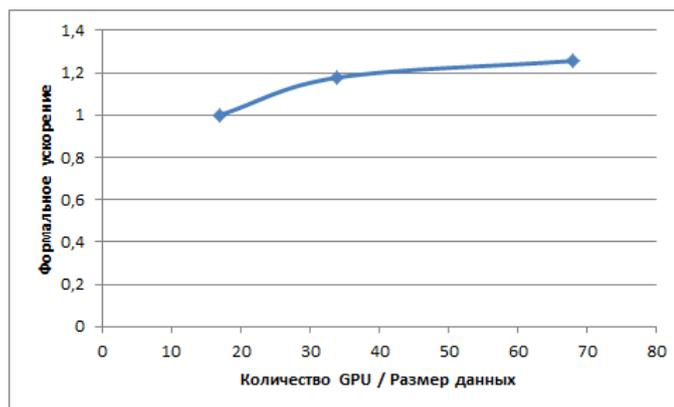


Рис. 3. Масштабируемость параллельной GPU реализации метода Кона-Шэма при пропорционально увеличивающемся объеме данных

Заключение

Предлагаемый алгоритм решения динамических уравнений Кона-Шэма на основе блочного разбиения пространства может давать существенное ускорение при реализации на гетерогенных системах с распределенной памятью. Использование дополнительных графических процессоров в данной задаче наиболее полезно при расчетах с пропорционально увеличивающимся объемом данных. Эффективность распараллеливания продемонстрирована на вычислительных системах при использовании 68 GPU и составляет приблизительно 31.4%.

Реализация была использована при разработке методики расчета оптических свойств многоэлектронных систем – полупроводниковых квантовых точек. Также, алгоритм может быть использован для определения спектров как изолированных, так и взаимодействующих кремниевых нанокристаллов (квантовых точек) различной формы.

Литература

1. Shimizu K.T., Woo W.K., Fisher B.R., Eisler H.J., and Bawendi M.G. // *Phys. Rev. Lett.* 2002. V. 89. P. 117401.
2. Runge E., Gross E.K.U. // *Phys. Rev. Lett.* 1984. V. 52. P. 997-1000.
3. Ferconi M., Vignale G. // *Phys. Rev. B.* 1994. V. 50. P. 14722.
4. Лундквист С., Марч Н. Теория неоднородного электронного газа. М.: Мир, 1987.
5. Broin C.O., Nicolopoulos L.A.A. An OpenCL implementation for the solution of TDSE on GPU and CPU architectures // *Computer Physics Communications* 183, 2012. P. 2071-2080.
6. Маркус Е.Д. Исследование параллельной реализации метода расщепления для уравнения теплопроводности на кластерных вычислительных системах // *Вестник Томского государственного университета* 1(14), 2011. С. 73–78.
7. Игнатъев А.А., Затевахин М.А. Параллельный метод для решения уравнения Пуассона // *Параллельные вычислительные технологии: Доклад Международной научной конференции, Нижний Новгород, Россия, 30 марта – 3 апреля 2009.* С. 491–495.