

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ ПОИСКА СТРУКТУР И РЕАКЦИЙ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССА РОСТА МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ АЛМАЗНОЙ ПЛЁНКИ

Г.Ю. Аверчук¹, Е.С. Куркина², Э.М. Кольцова¹

¹РХТУ им. Менделеева, каф. ИКТ

²Московский госуниверситет им. М.В. Ломоносова

На основании анализа образуемых в процессе роста кристалла алмаза поверхностных структур, а также возможных их изменений посредством реакций построен предметно-ориентированный язык. С его помощью описывается кинетическая схема роста кристаллической плёнки с десятками элементарных стадий. Анализ кинетической схемы позволяет получить рецепты для эффективных параллельных алгоритмов поиска поверхностных структур и элементарных реакций, их изменяющих. Каркас приложения с методом Монте-Карло ориентирован на системы с общей памятью. На основе каркаса и полученных рецептов генерируется высокопроизводительный параллельный код, компиляция которого позволяет осуществлять моделирование изменения поверхности кристаллической плёнки, содержащей сотни тысяч атомов.

Введение

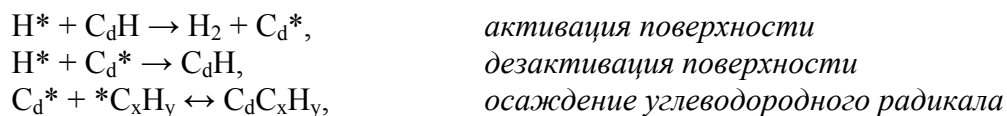
Алмазные кристаллические плёнки имеют большой потенциал возможного применения в бурильной, медицинской и нанoeлектронной промышленности, а также могут служить в качестве химически устойчивых покрытий для различных материалов [1]. Одним из способов получения алмазных кристаллических плёнок является процесс осаждения углеводородных радикалов из высокотемпературной плазмы (CVD), содержащей большое количество водорода. Методами спектрального анализа, атомно-силовой микроскопии, молекулярной динамики и квантовой химии различными исследователями были определены атомарные структуры, образуемые на поверхности растущего кристалла алмаза [2]. Помимо структур, исследователями были рассчитаны значения параметров различных элементарных реакций между такими структурами [3].

Кинетическая схема базового случая осаждения плёнки из метил-радикалов содержит десятки элементарных стадий, в которых участвует более тридцати всевозможных поверхностных структур. А наиболее применяемые на практике способы осаждения из смеси метана, ацетилена и небольшого количества азота содержат ещё большее количество структур и элементарных стадий. Задача кодирования алгоритмов поиска структур и реакций является рутинной и требует автоматизации на основе базовых эффективных алгоритмов. Понимание процесса образования и роста кристалла на атомарном уровне может позволить определить оптимальные условия проведения процесса роста плёнки.

1. Модель процесса осаждения алмазной плёнки

Микроскопическая стохастическая модель процесса осаждения алмазной плёнки из газовой фазы строится на формальной теории описания взаимодействий поверхностных структур и молекул газовой фазы, которые состоят из атомов и отношений между ними. В качестве символов алфавита формальной теории выделяются следующие типы атомов: водород (H), аморфный углерод (C) и кристаллический углерод (C_d), ис-

пользуя которые обобщённую кинетическую схему процесса взаимодействия кристалла с газовой фазой можно записать следующими тремя уравнениями:



где активные атомы обозначены знаком *, а x и y являются произвольными числами, удовлетворяющими валентности атомов.

В свою очередь, кристаллический углерод может принадлежать различным атомарным структурам, образуемым на поверхности кристалла. Кристаллическая решётка накладывает определённые ограничения на расположение атомов друг относительно друга, а также на типы связей, образуемых между атомами. Для описания одной связи или отношения положения между атомами используется плоскость кристалла, обозначаемая индексами Миллера, а также направление в этой плоскости.

С помощью атомов и различных типов связей описываются газовые молекулы и поверхностные структуры, которые вместе являются словами формальной теории. Для базового случая осаждения алмазной плёнки из метил-радикала выделяются виды структур, представленные на рис. 1.



Рис. 1. Основные поверхностные структуры, выделяемые на плоскости (100) кристалла алмаза: 1 – мост, 2 – димер, 3 – димер с метил-радикалом, 4 – мост с метил-радикалом, 5 – высокий мост, 6 – мост на следующем слое, 7 – два моста



Рис. 2. Некоторые элементарные стадии кинетической схемы осаждения алмазной плёнки из газовой фазы

Формулами формальной теории являются элементарные реакции, в которых поверхностные структуры взаимодействуют либо с радикалами газовой фазы, либо друг с другом, изменяя конфигурацию взаимодействующих атомов с образованием новых структур (рис. 2). В модели осаждения плёнки поток всевозможных реакций является стохастическим процессом и может быть представлен марковской цепочкой событий, а изменение вероятности состояния поверхности кристаллической плёнки в марковском приближении описывается основным кинетическим уравнением, где вероятность каждой реакции определяется её скоростью. Единственной аксиомой формальной теории является необходимость соблюдения материального баланса в реакциях.

Поскольку адекватная кинетическая схема процесса роста кристалла из газовой фазы имеет большую размерность, а её анализ представляется относительно сложной задачей, которую необходимо выполнить один раз перед расчётом, было решено отделить этап составления и анализа кинетической схемы от этапа её расчёта посредством стохастического метода Монте-Карло.

2. Предметно-ориентированный язык

На основании вышеописанной формальной теории процесса осаждения алмазной плёнки построен интерпретатор, оперирующий множествами необходимых сущностей, каждая из которых выражена некоторым синтаксисом, понятным интерпретатору. Множество синтаксических структур образует предметно-ориентированный язык, с помощью которого вся необходимая информация о кинетической схеме записывается в конфигурационном файле, который после интерпретации и анализа полученных данных на выходе даёт программный код, основанный на базовом каркасе приложения расчёта процесса.

Язык позволяет описывать атомы, молекулы газовой фазы и их концентрацию, структуры на поверхности плёнки, взаимные расположения между атомами которых выводятся автоматически, согласно правилам вывода формальной теории, в соответствии с заданной кристаллической решёткой. С помощью атомарных структур описываются элементарные реакции кинетической схемы, и для каждой указываются необходимые константы, такие как предэкспоненциальный множитель и энергия активации. На этапе интерпретации уравнения реакции по валентностям задействованных атомов и количеству связей между ними проверяется материальный баланс. После проверки баланса реакции с целью определения атомов, подвергшихся изменению, производится сопоставление атомов в реагирующих структурах и определяется, каким образом атомы изначальных структур переходят в атомы продуктов. Сопоставление атомов осуществляется с помощью модернизированного алгоритма Хансера, учитывающего принадлежность атомов кристаллической решётке, а также возможность изменения типов отношений между атомами.

После интерпретации введённые данные анализируются и строятся зависимости структур друг от друга на основе максимальной общей подструктуры (MCS) и алгоритма Хансера [4]. Язык предоставляет инструмент для описания сначала общей реакции взаимодействия некоторых структур, а затем, если необходимо, более конкретных, зависящих от взаимного расположения реагирующих структур или от локального окружения обеих структур. На основании этого производится относительное упорядочивание зависимых реакций.

Атомы реагирующих структур классифицируются по типам (рис. 3) с учётом используемых связей и относительных характеристик, таких как «не связанность» и «не фиксированность». Между полученными атомами строятся отношения включения одного типа атома в другой (рис. 4), по которым, на этапе расчёта, выполняется алгоритм поиска структур. Для базового случая осаждения из метил-радикала выделяется более 30 различных типов атомов.

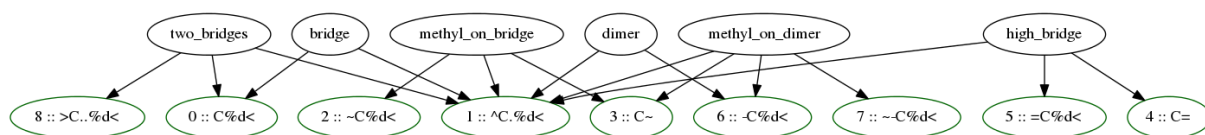


Рис. 3. Отношение атомов к структурам, из которых они состоят

После определения всех необходимых зависимостей данных производится генерация выходной информации, например изображений структур и реакций (рис. 1, 2), графов (рис. 3, 4) или программного кода, содержащего рецепты поиска и использующего методы каркаса расчётной программы [5].

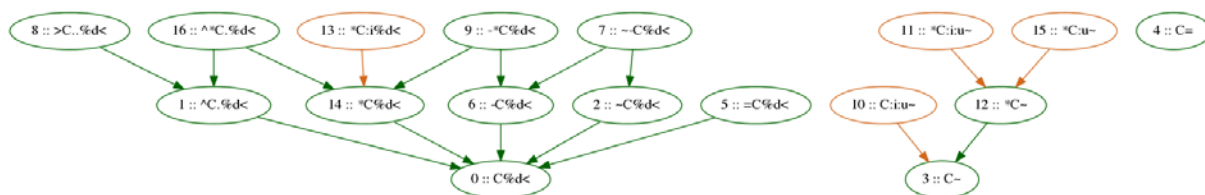


Рис. 4. Лес неявного преобразования типов атомов, необходимый для реализации эффективного алгоритма поиска структур, где *i* означает «не связанность», а *u* – «не фиксированность»

3. Параллельный алгоритм поиска структур и реакций

В начальный момент расчёта модели роста создаётся массив атомов, в котором хранятся и атомы, принадлежащие кристаллической решётке, и множество для аморфных атомов, связанных с поверхностью. Создаются два первых слоя атомов, в которых атомы иницируются определяемыми в конфигурационном файле типами, а затем обновляют своё относительное состояние в параллельном режиме. После инициализации для каждого атома параллельно запускается поиск структур, и, поскольку структуры могут включать друг друга, поиск начинается с наименьшей структуры. В случае успешного нахождения какой-либо структуры активируются задачи на поиск структур, включающих найденную. Поиск осуществляется благодаря рецептам, полученным после анализа интерпретируемых данных. Рецепт представляет собой последовательность типов атомов, с учётом распространения связей между атомами в структуре, их отношений друг к другу. Другими словами, рецепт является монадным выражением проверок типов атомов, с оператором *И* между ними, и, следовательно, может быть осуществлён параллельно. При проверке типов анализируемых атомов используется транзитивная матрица смежности, построенная для графа на рис. 4, позволяющая быстро определять, имеет ли рассматриваемый атом требуемый тип. Каждый атом запоминает все структуры, в описании которых он состоит, и какую он при этом играет роль, представляясь атомом необходимого типа на этапе поиска структуры.

После того как все возможные структуры найдены, запускается алгоритм поиска реакций, также основанный на рецептах, полученных после анализа языкового файла. С целью нахождения атомов определённых типов, принадлежащих структурам, необходимым для осуществления реакции, для каждой структуры в параллельном режиме производится анализ локального окружения. Найденные реакции запоминаются в векторах, соответствующих типу реакции, и используются в динамическом алгоритме Монте-Карло, благодаря которому среди всех найденных реакций выбирается наиболее вероятная, которая, осуществляясь, изменяет типы некоторых атомов реагирующих структур. Затем, если требуется, изменённые атомы обновляют своё относительное состояние, и в параллельном режиме проверяются все структуры, которым принадлежит атом, на соответствие тому типу, в роли которого он используется для данной структуры. Если соответствия нет, структура и использующие её реакции удаляются. Если соответствие найдено, состояние относительно этой структуры не обновляется. Таким образом, в каждый момент времени, атомы моделируемой поверхности имеют типы, соответствующие истокам на рис. 4. От подвергшихся изменению атомов снова иницируется поиск новообразованных структур, и алгоритм повторяется.

Заключение

Для моделирования процесса осаждения алмазной плёнки из газовой фазы был реализован комплекс программ, позволяющих лаконично описывать кинетическую схему процесса фазового перехода. На основании кинетической схемы генерируется программный код, основанный на каркасе расчётного приложения, предоставляющего

эффективные базовые алгоритмы для организации параллельных вычислений. По сравнению с последовательным кодом параллельный алгоритм даёт увеличение производительности в 2.7 раза, на 4-ядерном процессоре.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты №11-01-00887 и №11-08-00979-а.

Литература

1. Sussmann R.S. CVD Diamond for Electronic Devices and Sensors. WILEY, London, 2009. – 582 p.
2. Cheesman A. Investigations into the fundamentals of gas-phase and gas-surface chemistry prevalent in growth of CVD diamond films. Dis. of doc. of phil., 2006. – 292 p.
3. Frenklach M., Skokov S. Surface Migration in Diamond Growth // J. Phys. Chem. B. – 1997. – Vol. 101. P. 3025-3036.
4. Савельев А.С.. Алгоритм поиска максимальной общей подструктуры набора молекул / SciTouch LLC., 2010. – С. 42.
5. <https://github.com/newmen/versatile-diamond>.