

14. *Abasova A.M.* Zashchita informatsionnogo sodержaniya tsifrovyykh izobrazheniy putem primeneniya dopolnitel'nykh kriteriyev vybora ob"yektov dlya vnedreniya tsifrovyykh vodyanykh znakov [Protection of information content of digital images by applying additional criteria for the selection of objects for the introduction of digital watermarks], *Vestnik sovremennykh issledovaniy* [Bulletin of modern research], 2018, No. 10-1, pp. 249-252.
15. *Mills R.L.* Novel method and system for pattern recognition and processing using data encoded as Fourier series in Fourier space, *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, March 2006, Vol. 19, Issue 2, pp. 219-234.
16. *Khorn B. K. P.* Zreniye robotov [Vision robots]: transl. from Engl. Moscow: Mir, 1989 487 p.
17. *Kutter M., Jordan F., Bossen F.* Digital signature of color images using amplitude modulation, *Journal of Electronics Imaging*, 1998, Vol. 7, pp. 326-332.
18. *Kutter M., Jordan F., Bossen F.* Digital signature of color images using amplitude modulation, *Proc. of the SPIE Storage and Retrieval for Image and Video Databases*, 1997, pp. 518-526.
19. *Gribunin V.G., Okov I.N., Turintsev V.I.* Tsifrovaya steganografiya [Digital steganography]. Moscow: SOLON-Press, 2017, 262 p.
20. *Akushskiy I.Ya., Yuditskiy D.I.* Mashinnaya arifmetika v ostatochnykh klassakh [Machine arithmetic in residual classes]. Moscow: Sovetskoye radio, 1968, 440 p.

Статью рекомендовал к опубликованию д.т.н., профессор Я.Е. Ромм.

Абасова Анастасия Михайловна – Южный федеральный университет; e-mail: moonriel@yandex.ru; 347928, г. Таганрог, ул. Чехова, 22; тел.: +79615006290; кафедра безопасности информационных технологий; аспирантка.

Бабенко Людмила Климентьевна – e-mail: lkbabenko@sfedu.ru; тел.: +78634361518; кафедра безопасности информационных технологий; профессор.

Abasova Anastasiya Mikhailovna – Southern Federal University; e-mail: moonriel@yandex.ru; 22, Chehov street, Taganrog, 347928, Russia; phone: +79615006290; the department of security of information technologies; postgraduate student.

Babenko Liudmila Klimentevna – e-mail: lkbabenko@sfedu.ru; phone: +78634361518; the department of security of information technologies; professor.

УДК 621.315.592, 004.272.3

DOI 10.23683/2311-3103-2018-8-145-153

П.Л. Новиков, К.В. Павский, А.В. Двуреченский

**ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНОЙ АТОМНОЙ ДИФФУЗИИ
НА СТРУКТУРИРОВАННЫХ ПОДЛОЖКАХ КРЕМНИЯ МЕТОДОМ
МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ – МОДЕЛИРОВАНИЕ
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ВЫСОКОЭФФЕКТИВНЫХ АЛГОРИТМОВ***

В мире наблюдается интерес к созданию пространственно-упорядоченных массивов квантовых точек (КТ). Эти структуры являются перспективными для создания термически стабильных лазеров на КТ, МОП-структур на подвижных носителях, матриц фото-чувствительных сенсоров и др. Для создания таких структур многообещающей является концепция гетероэпитаксии на структурированной подложке. Структурированными мы называем подложки, на поверхности которых с помощью методов литографии создается регулярный рисунок с канавками или ямками. В ходе гетероэпитаксии на структурированной подложке можно добиться того, чтобы нанеоостровки зарождались в ямках/канавках и, таким образом, формировали пространственно упорядоченный массив КТ. С точки зрения фундаментальных вопросов малоизученным является механизм атомной диффузии по

*Работа выполнена при финансовой поддержке Президиума РАН (ГЗ 0306-2018-0012), РФФИ и Правительства Новосибирской области в рамках научного проекта № 18-41-540005_p_a.

рельефной кристаллической поверхности. Целью работы является выявление механизма атомной диффузии на структурированных подложках Si (подложках, содержащих систему регулярно расположенных канавок). Для достижения указанной цели была сформирована виртуальная поверхность Si(001)-1×2, содержащая систему параллельных канавок. Ширина канавок и расстояние между ними были выбраны равными, что соответствует геометрии экспериментальных структурированных подложек, получаемых методом наномпринт-литографии. Разработан алгоритм расчета энергетической поверхности структурированной подложки на основе метода молекулярной динамики. Построена карта потенциального рельефа структурированной подложки Si(001) в области канавки. Найдены положения минимумов и седловых точек энергетической поверхности, рассчитана энергия активации поверхностной диффузии для атомов Ge и определены характерные маршруты миграции адатомов Ge по стенкам канавок. Проведен анализ микроскопического механизма атомной диффузии на структурированной подложке. Обсуждены возможные причины, препятствующие проникновению адатомов в глубь канавок и образованию в них трехмерных nanoостровков Ge. Моделирование методом МД связано с машинной обработкой большого объема данных и требует значительных затрат машинного времени. Для ускорения вычислений разработан параллельный алгоритм поиска соседей в системе с большим числом атомов. Получена зависимость времени вычислений от числа ядер в узле.

Гетероэпитаксия; структурированные подложки; метод молекулярной динамики; параллельные алгоритмы.

P.L. Novikov, K.V. Pavskiy, A.V. Dvurechenskiy

STUDY OF SURFACE ATOMIC DIFFUSION ON PRE-PATTERNED SI SUBSTRATES BY MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION: MODELING WITH THE USE OF HIGHLY EFFICIENT ALGORITHMS

There is a growing interest of researchers to the creation of space-arranged arrays of quantum dots (QDs). These structures are promising as an element basis for thermally stable solid state lasers, field effect transistors with enhanced electron mobility, photosensitive matrices etc. Such structures can be obtained by heteroepitaxial growth on a pre-patterned template. Under the proper conditions of heteroepitaxy nanoislands may nucleate in the pits or grooves, forming the space-arranged array of QDs. In the area of basic research the microscopic mechanism of atom diffusion on a non-planar crystal surface is not studied enough. The target of this paper is the elucidation of atomic diffusion mechanism on pre-patterned Si substrates. In order to achieve the purpose virtual Si(001)-1×2 structure with a system of parallel grooves has been formed. The groove width and inter-distance were chosen the same, which corresponds to geometry of experimental pre-patterned substrates, prepared by nanoimprint lithography. An algorithm of calculation of the pre-patterned substrate energy surface has been developed on the basis of molecular dynamics method. The energy surface was mapped out for Si (001) substrate in the region of groove. The positions of minima and saddle points at the energy surface have been found, surface diffusion activation energy was calculated for Ge atoms, and the typical Ge atoms migration paths on the groove walls have been determined. The analysis of microscopic mechanism of atomic diffusion on a pre-patterned substrate has been carried out. Possible reasons, preventing atom migration inside grooves and nucleation of 3D nanoislands there, are discussed. MD simulations are related to big volume data processing and require significant machine time spent. In order to accelerate the calculations a parallel algorithm for neighbors seeking in a large system of atoms has been developed. The time of calculations has been obtained as depending upon the number of nuclei within a single node. The effect of acceleration is shown to be linear against the number of cores at least from 1 to 8.

Heteroepitaxy; pre-patterned substrates; molecular dynamics simulation; parallel algorithms.

1. Введение. Одной из приоритетных задач в области материаловедения является создание пространственно упорядоченных массивов полупроводниковых квантовых точек (КТ). На основе этих полупроводниковых гетероструктур создаются разного рода низкоразмерные системы (квантовые ямы, нити и точки), в ко-

торых проявляются эффекты, связанные с пространственным ограничением движения носителей заряда. Эти низкоразмерные системы могут получить применение в электронных приборах и устройствах, таких, как светодиоды, лазеры на КТ, и логические элементы для квантовых вычислений [1–3]. Пространственно упорядоченные массивы КТ могут быть получены путем гетероэпитаксиального роста на структурированных подложках – подложках, содержащих регулярно расположенные ямки или канавки. Для создания структурированных подложек используются различные методы с применением голографии [4], сфокусированных электронных [5] и ионных [6] пучков, литографии наносферами [7], анодного травления [8], наноимпринт-литографии [9]. В некоторых модификациях наноимпринт-литографии на определенной стадии приготовления структурированной подложки применяется ионное облучение [10–12], в процессе которого в приповерхностную область пластины вводятся дефекты в виде междоузлий и оборванных связей. Для того, чтобы КТ формировались в заданных позициях, необходимо строго контролировать морфологию структурированной подложки на до ростовой стадии, а также осуществлять рост пленки в подходящих условиях. В частности, заданные положения nanoостровков могут быть достигнуты только в ограниченном интервале температур, длительностей и скоростей осаждения [13–23].

Хотя пространственная самоорганизация КТ в процессе роста на структурированной подложке кажется закономерной, лежащие в ее основе физические механизмы остаются не вполне ясными. Например, в настоящее время недостаточно изучены механизм атомной диффузии в канавках, механизм зарождения трехмерных островков Ge и деформации на структурированных подложках, обусловленные радиационными дефектами. В эксперименте чрезвычайно трудно или в настоящее время невозможно непосредственно наблюдать элементарные процессы, ответственные за механизм образования nanoостровков на микроскопическом уровне. Поэтому особое значение для интерпретации экспериментальных данных по росту гетероэпитаксиальных структур и для предсказания результатов при изменении условий эксперимента приобретает метод моделирования [24, 25], в частности, моделирование методом молекулярной динамики (МД). Он, в частности, дает возможность без использования подгоночных параметров исследовать элементарные процессы, обеспечивающие рост Ge на подложках Si со сложным рельефом.

В данной работе на основе метода МД развита процедура расчета энергетической поверхности (потенциального рельефа) структурированной подложки Si. Получены количественные характеристики, позволяющие проанализировать микроскопический механизм атомной поверхностной диффузии на структурированной подложке. Разработан алгоритм параллельных вычислений, обеспечивающий значительное ускорение расчетов.

2. Метод молекулярной динамики. Метод молекулярной динамики заключается в решении уравнения движения многих тел [26]. В случае кристаллических систем объектом исследования являются атомы кристалла, взаимодействие между которыми задается эмпирическим потенциалом – функцией координат атомов. Обычно эмпирический потенциал устроен таким образом, что сила, действующая на данный атом, определяется только ближайшим его окружением. В данной работе использовался эмпирический потенциал Терсоффа [27]. Параметры этого потенциала были подобраны Терсоффом так, чтобы он наилучшим образом описывал свойства ковалентных кристаллов (Si, Ge), которые хорошо измеряются в эксперименте (таких как спектр акустических фононов, упругие свойства кристалла, плавление и кристаллизация кристаллов). Особенность потенциала Терсоффа, отличающая его от аналогичных эмпирических потенциалов, состоит в том, что си-

ла, действующая на данный атом, резко уменьшается, когда число соседей превышает 4. Благодаря этому потенциал Терсоффа имитирует химическую валентность атома. Указанная особенность приобретает актуальность для атомов на стенках канавок, где часто встречаются нетипичные атомные конфигурации.

Решение уравнения движения по методу МД осуществляется численными методами. Типичное число атомов в системе попадает в интервал от 10^4 до 10^6 . При этом шаг по времени составляет порядка 10^{-16} с. Длительность имитируемых процессов обычно варьируется от 10^{-12} с до 10^{-9} с.

Наряду с имитацией элементарных процессов на поверхности кристалла (столкновения иона с поверхностью, разрыв химической связи, переход атома из одного атомного слоя в другой и т.д.) метод МД может использоваться для определения численных характеристик кристалла, таких как энергия активации диффузии, энергия захвата адатома в ловушки, химический потенциал в углублениях или на выступах поверхности. В данной работе была разработана процедура расчета энергетической поверхности (потенциального рельефа) подложки Si.

3. Процедура расчета энергетической поверхности. Для расчета энергии адатома в данной точке (x, y) поверхности к исследуемой системе добавляется зондовый атом, обладающий только степенью свободы движения вдоль оси z , ориентированной по нормали к поверхности подложки. Зондовый атом помещается в начальное положение (x, y, z_0) над поверхностью на расстоянии приблизительно 3 \AA от нее. На этом расстоянии взаимодействие зондового атома с атомами системы пренебрежимо мало. Затем зондовому атому придается малая скорость (много меньшая термической) в направлении поверхности. Оказавшись на расстоянии менее 2 \AA от поверхности зондовый атом начинает испытывать притяжение со стороны ближайших атомов поверхности, которые также меняют свое положение. В течение приблизительно $5 \cdot 10^{-13}$ с зондовый атом приходит в равновесие с исследуемой системой, занимая определенное конечное положение (x, y, z_1) . Энергия зондового атома в конечном положении принимается за потенциальную энергию адатома в точке (x, y) . Далее атомы системы возвращаются в исходное положение. Зондовый атом сдвигается на минимальный шаг в латеральном направлении ($\sim 0.1 \text{ \AA}$), а по высоте помещается в точку z_0 , ему придается минимальная скорость, и процедура повторяется. Энергетическая поверхность строится путем сканирования по области (x, y) в заданных пределах.

Отметим, что известны альтернативные алгоритмы построения энергетической поверхности. В частности, за поверхностную энергию принималась разность полной энергии системы при конечном и начальном положениях зондового атома [28]. Наше исследование показало, что указанный алгоритм не работает при числе атомов, превышающем 10^3 , вследствие возрастания погрешности вычислений. С другой стороны, положения минимумов и седловых точек на энергетической поверхности, определяемые по-нашему и альтернативным алгоритмам соответственно, совпадают.

4. Моделируемая структура. Моделируемая структура показана на рис. 1. Она представляет собой фрагмент Ge/Si размером $8 \times 8 \times 3 \text{ нм}^3$, содержащий две параллельные канавки треугольного профиля. На границы фрагмента наложены периодические граничные условия в латеральных направлениях. С учетом граничных условий моделируемая структура представляет собой квазибесконечную систему с эквидистантно расположенными параллельными канавками.

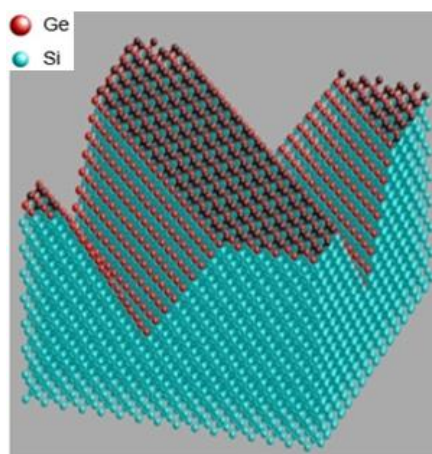


Рис. 1. Фрагмент моделируемой структурированной подложки с канавками (общий вид)

Размеры моделируемых канавок и расстояние между ними приблизительно на порядок меньше, чем в экспериментальных подложках, изготавливаемых методом наноимпринт-литографии. Однако данное отличие во многих случаях оказывается малосущественным. Например, упругие свойства гетеросистем обладают масштабной инвариантностью. Аналогично, характерные маршруты миграции атомов по стенкам канавок в модельных структурах имеют одну и ту же конфигурацию, независимо от ширины стенки.

5. Результаты расчета энергетической поверхности. Энергетическая поверхность моделируемой структуры была рассчитана в пределах области, помеченной прямоугольником в левой части рис. 2. Рассчитанная энергетическая поверхность представлена в правой части рис. 2 в виде цветовой шкалы. На участке между канавками видны прямые дорожки голубого цвета. Эти дорожки проходят параллельно димерным рядам и расположены между ними на максимальном удалении от свободных связей димерных атомов. Атомы,двигающиеся по этим траекториям, не встречают на своем пути глубоких энергетических барьеров, поэтому указанные траектории представляют собой каналы быстрой диффузии и вдоль них проходит основной поток атомов, мигрирующих на гладкой поверхности. На границе с канавками возникает блокада диффузионных каналов: для продолжения движения в прежнем направлении в глубь канавки атомы вынуждены преодолевать энергетический барьер приблизительно 1 эВ. При температурах роста (~ 500 °C) лишь один атом из $\sim 4 \cdot 10^6$ обладает достаточной для этого энергией. Большинство атомов проникает в глубь канавки по маршрутам, вдоль которых они испытывают наименьшее сопротивление движению. Один из таких маршрутов показан пунктирной линией на карте потенциального рельефа. Детальный анализ показал, что вдоль "проходимых" маршрутов энергия в наиболее глубоких минимумах составляет -1.25 эВ, а энергия в седловых точках между минимумами равна -1.75 эВ. Разность этих энергий дает величину минимального барьера 0.5 эВ (энергии активации поверхностной диффузии), которую приходится преодолевать атому для достижения дна канавки. На самом дне канавки располагается цепочка глубоких минимумов (-2.63 эВ), в которых осуществляется вероятный захват диффундирующих атомов.

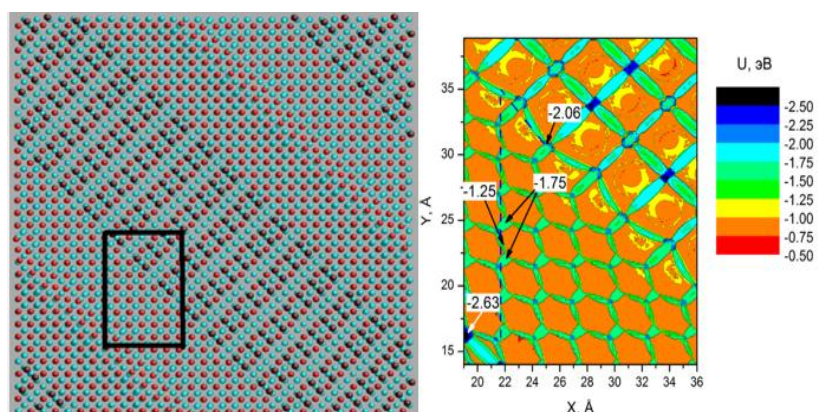


Рис. 2. Слева – моделируемая структура (вид сверху). Справа – энергетическая поверхность, рассчитанная для области внутри прямоугольной рамки на левом рисунке

6. Параллельный алгоритм. Моделирование МД связано с машинной обработкой большого объема данных и требует значительных затрат машинного времени. При моделировании поверхностной атомной диффузии методом МД наиболее затратным по времени является процедура поиска ближайших соседей для каждого атома гетероструктуры Ge/Si, которая занимает 70-95% от общего времени счета в зависимости от выбранного способа поиска (По спискам ячеек/Верле [20]). Разработка и использование параллельных алгоритмов поиска соседей позволяет существенно сократить время моделирования.

Разработанный в данной работе параллельный алгоритм заключается в следующем:

1. Создаются массивы для координат атомов. Корневая машина выполняет широковещательную рассылку (используя операцию трансляционного обмена BCAST) данной информации по остальным элементарным машинам (ЭМ, ядрам) вычислительной системы. Определение соседей выполняется перебором атомов в двух циклах. Первый цикл включает исходные атомы (по принципу «от которого»), второй цикл по остальным атомам («до которого»), не рассмотренных в качестве соседей.

2. Цикл расчета потенциальных соседей разбивается по схеме «циклического распределения итераций». В соответствии с данной схемой каждая элементарная машина выбирает свой, еще не взятый в расчет, этап (номер атома) для расчета соседей.

3. После завершения своего этапа цикла, корневая ЭМ производит сбор информации, представленной в виде массива соседей для соответствующего атома, от остальных элементарных машин системы. Далее ЭМ переходит к следующему атому согласно шагу 2.

Параллельный алгоритм был реализован на языке программирования Си с использованием библиотеки MPI (для реализации параллельных программ с распределенной памятью). Результаты эффективности исполнения параллельной программы для 256768 атомов на сегменте «oak» мультикластерной ВС Центра параллельных вычислительных технологий (ЦПВТ) Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Сибирский государственный университет телекоммуникаций и информатики» [29] представлены на рис. 3 в виде ускорения $K_i = T_0/T_i$, где T_i – время исполнения программы на i элементарных машинах (ядрах). Из проведенного эксперимента видно, что ускорение реализации параллельного алгоритма на 8 ядрах близко линейному.

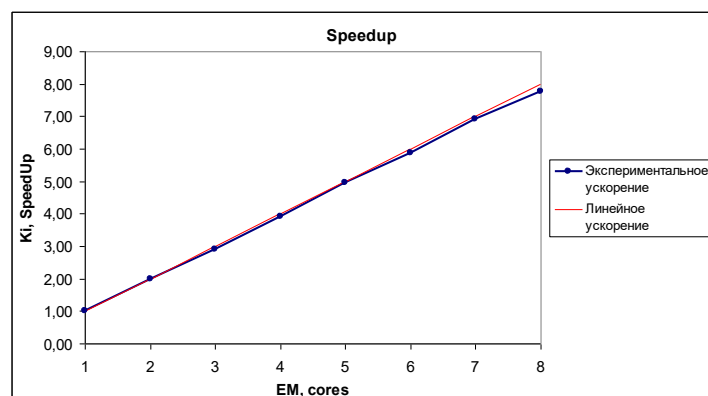


Рис. 3. Зависимость эффективности исполнения параллельной программы от числа ядер в узле

Заключение. На основе метода молекулярной динамики разработан алгоритмически-программный инструментарий, который позволил построить карту потенциального рельефа структурированной подложки Si с канавками и определить энергию активации поверхностной диффузии по стенкам канавок.

Разработан параллельный алгоритм поиска соседей в атомном массиве, который используется в программной реализации физической модели атомной системы с потенциалом взаимодействия Терсоффа. Показана эффективность параллельного исполнения программы на вычислительных системах.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Schmidt O.G. and Eberl K. Self-assembled Ge/Si dots for faster field-effect transistors, *IEEE Trans. El. Dev.*, 48, 2001, 1175.
2. Tsybeskov L. and Lockwood D.J. Silicon-Germanium Nanostructures for Light Emitters and On-Chip Optical Interconnects, *Proc. IEEE*, 97, 2009, 1284.
3. Loss D., DiVincenzo D.P. Quantum computation with quantum dots, *Phys. Rev. A.*, 57. 1998, 120.
4. Stangl V.H.J. and Bauer G. Structural properties of self-organized semiconductor nanostructures, *Rev. Mod. Phys.*, 76, 2004, 725.
5. Verma V.B., Stevens M.J., Silverman K.L., et al. Photon anti bunching from a single lithographically defined In GaAs/GaAs quantum dot, *Optics express*, 19, 2011, 4182.
6. Zhong Z., Schwinger W., Schaffler F., Bauer G., Vastola G., Montalenti F., and Miglio L. Delayed Plastic Relaxation on Patterned Si Substrates: Coherent SiGe Pyramids with Dominant {111} Facets, *Phys. Rev. Lett.*, 98, 2007, 176102.
7. Vieu C., Carcenac F., Pepin A., Chen Y., Mejias M., Lebib A., Manin-Ferlazzo L., Couraud, L. and Launois H. Electron beam lithography: resolution limits and applications, *Appl. Surf. Sci.*, 164, 2000, 111.
8. Ebbesen T.W., Lezec H.J., Ghaemi H.F., Thio T. and Wolff P.A. Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays, *Nature*, 391, 1998, 667.
9. Qian X., Li J., Wasserman D. et al. Uniform In GaAs quantum dot arrays fabricated using nanosphere lithography, *Appl. Phys. Lett.*, 93, 2008, 231907.
10. Liang J., Luo H., Beresford R. et al. A growth pathway for highly ordered quantum dot arrays, *Appl. Phys. Lett.*, 85, 2004, 5974.
11. Seleznev V.A., Prinz V.Ya. Hybrid methods of 3-D light projection printing and nanoimprint lithography for fabrication of micro- and nanostructured bone scaffolds, *Nanotechnology*, 28, 2017, 064004.
12. Smagina Zh., Novikov P., Zinovyev V., Stepina N., Dvurechenskii A., Armbrister Vl., Seleznev V., and Kuchinskaya P. Nucleation and epitaxial growth of Ge nanoislands on Si surface repatterned by ion irradiation, *Phys. Stat. Sol. (a)*, 210, 2013, 1522.

13. Smagina Zh.V., Stepina N.P., Zinovyev V.A., Novikov P.L., Kuchinskaya P.A., and Dvurechenskii A.V. Chains of quantum dot molecules grown on Si surface pre-patterned by ion-assisted nanoimprint lithography, *Appl. Phys. Lett.*, 105, 2014, 153106.
14. Dvurechenskii A., Smagina Z., Novikov P., Zinovyev V., Kuchinskaya P., Rudin S., and Nenashev A. Spatially arranged chains of Ge quantum dots grown on Si substrate prepatterned by ion-beam-assisted nanoimprint lithography, *Phys. Stat. Sol. (c)*, 13, 2016, 882.
15. Eaglesham D.J. and Cerullo M. Dislocation-free Stranski-Krastanow growth of Ge on Si(100), *Phys. Rev. Lett.*, 64, 1990, 1943.
16. Mo Y.-W., Savage D.E., Swartzentruber B.S., and Lagally M.G. Kinetic pathway in Stranski-Krastanow growth of Ge on Si(001), *Phys. Rev. Lett.*, 65, 1990, 1020.
17. Rastelli A., Kanel H.V., Spencer B.J., and Tersoff J. Prepyramid-to-pyramid transition of SiGe islands on Si(001), *Phys. Rev. B*, 68, 2003, 115301.
18. Medeiros-Ribeiro G., Bratkovski A.M., Kamins T.I., Ohlberg D.A.A., and Williams R.S. Shape transition of germanium nanocrystals on a silicon (001) surface from pyramids to domes, *Science*, 279, 1998, 353.
19. Ross F.M., Tromp R.M., and Reuter M.C. Transition States Between Pyramids and Domes During Ge/Si Island Growth, *Science*, 286, 1999, 1931.
20. Stoffel M., Rastelli A., Tersoff J., Merdzhanova T., and Schmidt O.G. Local equilibrium and global relaxation of strained SiGe/Si(001) layers, *Phys. Rev. B*, 74, 2006, 155326.
21. Zhong Z. and Bauer G. Site-controlled and size-homogeneous Ge islands on prepatterned Si(001) substrates, *Appl. Phys. Lett.*, 84, 2204, 1922.
22. Hackl F., Grydlik M., Brehm M., Groiss H., and Bauer G. Microphotoluminescence and perfect ordering of SiGe islands on pit-patterned Si(001) substrates, *Nanotechnology*, 22, 2011, 165302.
23. Pezzoli F., Stoffel M., Merdzhanova T., Rastelli A., and Schmidt O.G. Alloying and Strain Relaxation in SiGe Islands Grown on Pit-Patterned Si(001) Substrates Probed by Nanotomography, *Nanoscale Res. Lett.*, 4, 2009, 1073.
24. Vastola G., Montalenti F., and Miglio L. Understanding the elastic relaxation mechanisms of strain in Ge islands on pit-patterned Si(001) substrates, *J. Phys: Condens. Matter.*, 20, 2008, 454217.
25. Grydlik M., Langer G., Fromherz T., Schaffler F., and Brehm M. Recipes for the fabrication of strictly ordered Ge islands on pit-patterned Si(001) substrates, *Nanotechnology*, 24, 2013, 105601.
26. Novikov P.L., Nenashev A.V., Rudin S.A., Polyakov A.S., and Dvurechenskii A.V. Simulating the nucleation and growth of Ge quantum dots on Si using high-efficiency algorithms, *Nanotechnologies in Russia*, 10, 2015, 192.
27. Rudin S.A., Zinovyev V.A., Nenashev A.V., Polyakov A.Yu., Smagina Zh.V., and Dvurechenskii A.V. Three-dimensional model of heteroepitaxial growth of germanium on silicon, *Optoelectronics Instr. and Data Proc.*, 49, 2013, 461.
28. Frenkel D. and Smit B. Understanding molecular simulation. Academic Press, 1996.
29. Tersoff J. New empirical approach for the structure and energy of covalent systems, *Phys. Rev. B*, 37, 1988, 6991.
30. IstvánSzabó, HajnalkaTelekes, and GáborCzakó. Accurate ab initio potential energy surface, thermochemistry, and dynamics of the $F^- + CH_3FSN_2$ and proton-abstraction reactions, *J. Chem. Phys.*, 142, 2015, 244301.
31. Vychislitel'nye resursy Tsentra parallel'nykh vychislitel'nykh tekhnologiy SibGUTI [Computational resources of the center of parallel computing technologies of Sibguti]. Available at: <https://cpct.sibsutis.ru/index.php/Main/Resources> (accessed 14 November 2018).

Статью рекомендовал к опубликованию д.т.н., профессор М.С. Хайретдинов.

Новиков Павел Леонидович – Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН; e-mail: novikov@isp.nsc.ru; 630090, г. Новосибирск, пр. Лаврентьева, 13; тел.: 8383332624; старший научный сотрудник лаборатории неравновесных полупроводниковых систем; к.ф.-м.н.; доцент кафедры общей физики ФФ НГУ.

Павский Кирилл Валерьевич – e-mail: pkv@isp.nsc.ru; тел.: 83833332171; зав. лабораторией вычислительных систем; д.т.н.; доцент; профессор кафедры ВС ФГОБУ ВПО СибГУТИ.

Двуреченский Анатолий Васильевич – e-mail: dvurech@isp.nsc.ru; тел.: 83833332466; зав. лабораторией неравновесных полупроводниковых систем; член-корреспондент РАН; д.ф.-м.н.; профессор кафедры общей физики ФФ НГУ.

Novikov Pavel Leonidovich – Rzhanov Institute of Semiconductor Physics Siberian Branch of Russian Academy of Sciences; e-mail: novikov@isp.nsc.ru; 630090, Novosibirsk, Lavrentyev Ave., 13; phone: +73833332624; senior researcher of the laboratory of nonequilibrium semiconductor systems; cand. of phis.-math. sc.; associate professor of general physics, NSU.

Pavskiy Kirill Valer'evich – e-mail: pkv@isp.nsc.ru; phone: +73833332171; head of the laboratory of computer systems; dr. of eng. sc.; associate professor; professor of the department.

Dvurechenskiy Anatoliy Vasil'evich – e-mail: dvurech@isp.nsc.ru; phone: +73833332466; head of the laboratory of nonequilibrium semiconductor systems; corresponding member of RAS; dr. of phis.-math. sc.; professor of the department of general physics, NSU.

УДК 519.683

DOI 10.23683/2311-3103-2018-8-153-163

К.Ф. Коледина, М.К. Вовденко, И.М. Губайдуллин, С.Н. Коледин

АНАЛИЗ ЭФФЕКТИВНОСТИ РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЯ РАСЧЕТА КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ СЛОЖНОЙ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ*

Целью исследования является расчет кинетических параметров реакции окисления изопропилбензола по нескольким схемам химических превращений с применением алгоритмов распараллеливания вычислительной задачи и анализом эффективности. Рассмотрены основные этапы распараллеливания решения обратной кинетической задачи: первая группа объединяет все механизмы, предложенные для химической реакции; для каждого механизма рассматриваются все эксперименты реакции; по каждому эксперименту происходит разделение параметрической плоскости для поиска кинетических параметров. Решение обратной кинетической задачи относится к задачам оптимизации, для которых существуют модели распараллеливания вычислительного процесса: островная модель, клеточная модель, глобальная модель «Хозяин – Работник». Объектом исследования является реакция окисления изопропилбензола кислородом воздуха. Реакция является одной из стадий в технологическом процессе получения фенола и ацетона кумольным способом. На сегодняшний день этот метод является самым распространённым в мире промышленным способом синтеза данных веществ. Реакция относится к радикально-цепному процессу. Рассмотрены основные элементарные реакции для стадий инициирования цепи, развития цепи, затухания цепи. Для решения прямой и обратной кинетической задач с целью определения кинетических параметров для элементарных стадий применялись такие математические методы, как Рунге-Кутта 4-ого порядка, метод переменного порядка в программной среде MATLAB. Для трех реакционных схем реакции окисления изопропилбензола разработаны кинетические модели. Проведено сравнение. При разработке кинетических моделей применены модели распараллеливания. Проведен анализ эффективности распараллеливания. Эффективность распараллеливания решения обратной задачи рассматриваемой реакции генетическим алгоритмом с островной моделью распараллеливания вычислительного процесса на персональном 4-х ядерном компьютере Intel Core I5 составляет 65%.

Распараллеливания обратной кинетической задачи; реакция окисления изопропилбензола; модели распараллеливания; эффективность; кинетическая модель; островная модель.

* Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ 18-07-00341, № 18-37-00015 (п. 2), Стипендии Президента РФ СП-669.2018.5.