

Использование программных пакетов LAMMPS и GROMACS для высокопроизводительного моделирования напыления наноструктурированных тонких плёнок*

А.Н. Шаров¹, М.Ю. Козьмин¹, А.А. Горох², С.А. Шарапова², А.В. Сулимов²,
Д.В. Лукьяненко¹

МГУ имени М.В. Ломоносова: физический факультет¹,
Научно-исследовательский вычислительный центр МГУ имени М.В. Ломоносова²

В работе представлен подход к молекулярному моделированию современных высокоэнергетических процессов напыления оптических нанопокровов диоксида кремния на подложку и его реализация с использованием суперкомпьютера «Ломоносов» и программных пакетов для решения задач молекулярной динамики LAMMPS и GROMACS. В результате работы были получены напыленные слои толщиной до нескольких десятков нанометров, содержащих более миллиона атомов. Были рассчитаны различные структурные характеристики полученного слоя и проведено сравнение с экспериментальными данными. Было проведено сравнение результатов напыления, полученных с помощью указанных программных пакетов, и сравнение эффективности работы самих программных пакетов.

1. Введение

Напыление тонкоплёночных покрытий имеет множество практически важных приложений в науке и технике: от широко используемых потребительских продуктов таких, как мобильные телефоны, камеры, очки, до всех типов лазеров, телекоммуникационных фильтров и т.д. [1-3]. Этой тематике посвящено множество теоретических и экспериментальных работ. В данной работе рассматривается следующая проблема [1]: структурные неоднородности напылённых тонких плёнок масштаба нанометров могут значительно повлиять на практические свойства данных плёнок. Эти неоднородности зависят от различных условий, реализующихся в экспериментальных установках, и их моделирование на атомистическом уровне представляет существенный интерес и может помочь на практике гарантированно получать покрытия с заданными характеристиками. В работе представлен подход к молекулярному моделированию современных высокоэнергетических процессов напыления оптических нанопокровов диоксида кремния на подложку и его реализация с использованием суперкомпьютера «Ломоносов» и программных пакетов для решения задач молекулярной динамики LAMMPS и GROMACS. В результате работы были получены напылённые слои толщиной до нескольких десятков нанометров, содержащих более миллиона атомов. Были рассчитаны различные структурные характеристики полученного слоя, такие как плотность, радиальная функция распределения, количество точечных дефектов и другие. Были рассмотрены две модели напыления, использующие одно и то же оригинальное силовое поле, проведено сравнение результатов напыления для этих двух моделей, а также проведено сравнение эффективности работы самих программных пакетов в многопроцессорных режимах как при использовании вычислительных узлов CPU, так и графических узлов. Получено хорошее совпадение характеристик напыленных слоев, полученных при моделировании, с экспериментальными характеристиками кварцевого стекла и нанопокровов диоксида кремния.

Структура работы следующая. В разделе 2 описывается процедура напыления с помощью программного пакета LAMMPS, которая является идентичной процедуре напыления с помощью пакета GROMACS, описанной в работе [1]. Демонстрируется совпадение смоделированных структурных характеристик полученного слоя с экспериментальными характеристиками. В разделе 3 сравнивается эффективность параллельных алгоритмов, заложенных в рассматриваемых программных пакетах молекулярной динамики.

* Работа выполнена при поддержке РФФИ, код проекта 14-11-00409.

2. Процедура напыления

Приведем описание процедуры напыления, используемой при симуляции напыления в LAMMPS. В данном численном эксперименте была использована версия LAMMPS v. 18 Sep. 2014, программа была скомпилирована на суперкомпьютере «Ломоносов» с дополнительными библиотеками USER-CUDA и USER-MISC. В качестве компилятора был использован mpicxx (OpenMPI).

В качестве области молекулярно-динамического моделирования был выбран параллелепипед размерами 28x23x30 нм с периодическими граничными условиями по всем направлениям. Размеры этой области не менялись во время моделирования. Используется ансамбль NVT, T = 300 К.

Стенка с потенциалом Ленарда-Джонса устанавливается в координате $z=0$, команда `fix wall/lj93 zlo EDGE 1.0 1.0 2.5 (\sigma = 1.0, \epsilon = 1.0, cutoff = 2.5)`. Сверху от этой стенки помещается предварительно приготовленная подложка стеклообразного SiO₂, состоящая из 90000 атомов.

Для вставки новых атомов используется команда `fix_depose`. Атомы кремния и кислорода вставляются на высоте 4 нм от поверхности пленки с энергиями 10 eV и 0.05 eV, соответственно. Положения для вставки атомов кремния и кислорода выбираются случайно, с равномерным распределением, и независимо друг от друга. Вставка атомов кремния происходит каждые 40 фс, кислорода – 20 фс.

Чтобы избежать накопления заряженного облака атомов кислорода над пленкой, на высоте 5 нм от пленки устанавливается еще одна стенка (командой `fix oneway`). Тогда те атомы кислорода, которые отразились при первом столкновении с пленкой, снова попадают на неё через время порядка 10 пс. Во время напыления высота пленки постепенно растет, поэтому стенка равномерно сдвигается вверх со скоростью 2.3 нм/нс, что на 50% превышает скорость роста пленки: 1.5 нм/с. Данная величина была рассчитана для режима, когда частота вставки новых атомов равна 75 пс⁻¹, а плотность $\rho=2.15$ г/см³.

Таблица 1. Сравнение структурных характеристик подложки и напылённой плёнки

Характеристика		Подложка	Пленка
Плотность		2,158 г/см ³	2,447 г/см ³
Среднее расстояние	Si-O	0,16578 нм	0,16583679 нм
	O-O	0,2698 нм	0,2702 нм
Дефекты Si	Доля 3-координированных Si:	0,00434268	0,00786969
	Доля 4-координированных Si:	0,99447296	0,98792094
	Доля 5-координированных Si:	0,00118437	0,00420937
Дефекты O	Доля 1-координированных O:	0,02515455	0,06433064
	Доля 2-координированных O:	0,96162865	0,90458221
	Доля 3-координированных O:	0,0132168	0,0294699
Средний угол	O-Si-O	109,335	109,263
	Si-O-Si	144,835	142,005

Аналогичные результаты были получены и в результате процедуры напыления диоксида кремния с такими же параметрами с помощью пакета GROMACS. Соответствующая процедура подробно описана в работе [1] и не приводится здесь.

3. Сравнение эффективности программных пакетов Lammps и Gromax

Эффективность программных пакетов исследовалась при использовании 90000 атомов на временах 14 пс. При расчете с помощью пакета Lammps использовались как вычислительные узлы CPU, так и графические узлы GPU. При этом на один узел приходится либо 8 CPU, либо 2 GPU.

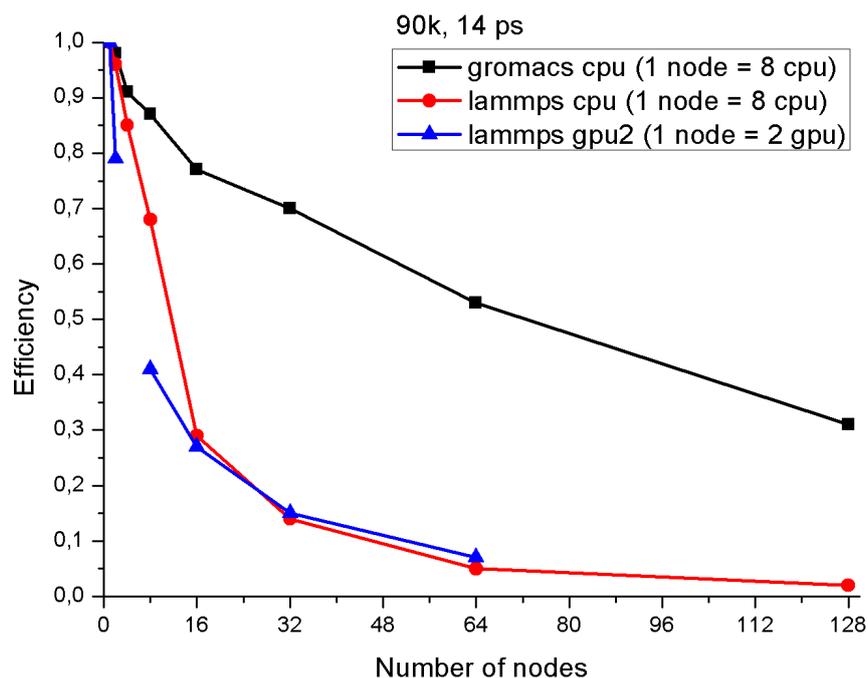


Рис. 1. Эффективность распараллеливания программных пакетов Gromacs и Lammps.

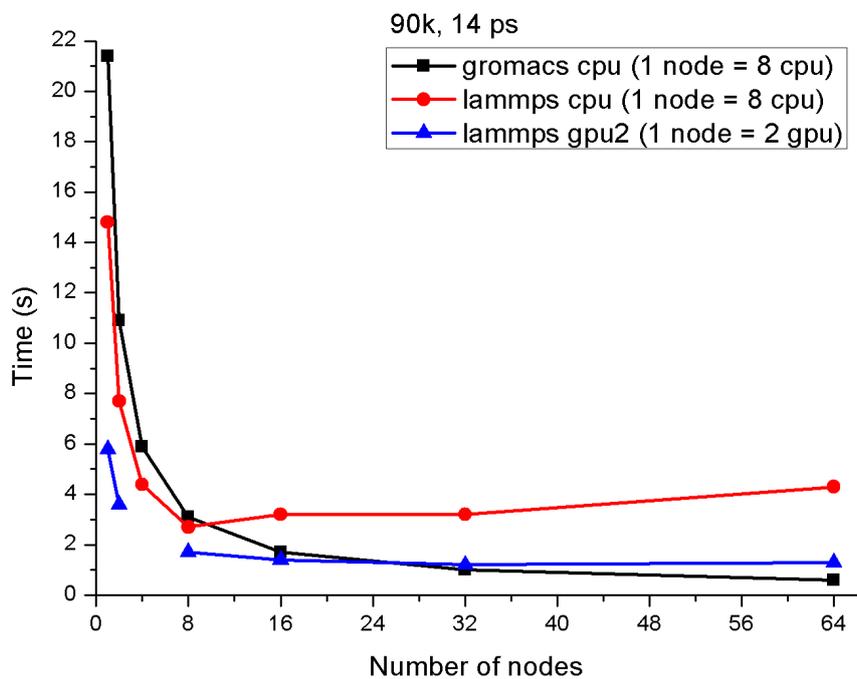


Рис. 2. Время вычислений с помощью пакетов Gromacs и Lammps на различном числе узлов.

Эффективность распараллеливания пакета Gromacs существенно выше эффективности распараллеливания пакета Lammps. Распараллеливание пакета Gromacs эффективно до 16 узлов включительно, в то время как распараллеливание Lammps эффективно лишь до 4-8 узлов. По

абсолютному времени вычислений Lammps превосходит Gromax на небольшом числе узлов (до 8) и уступает ему при использовании большего числа узлов.

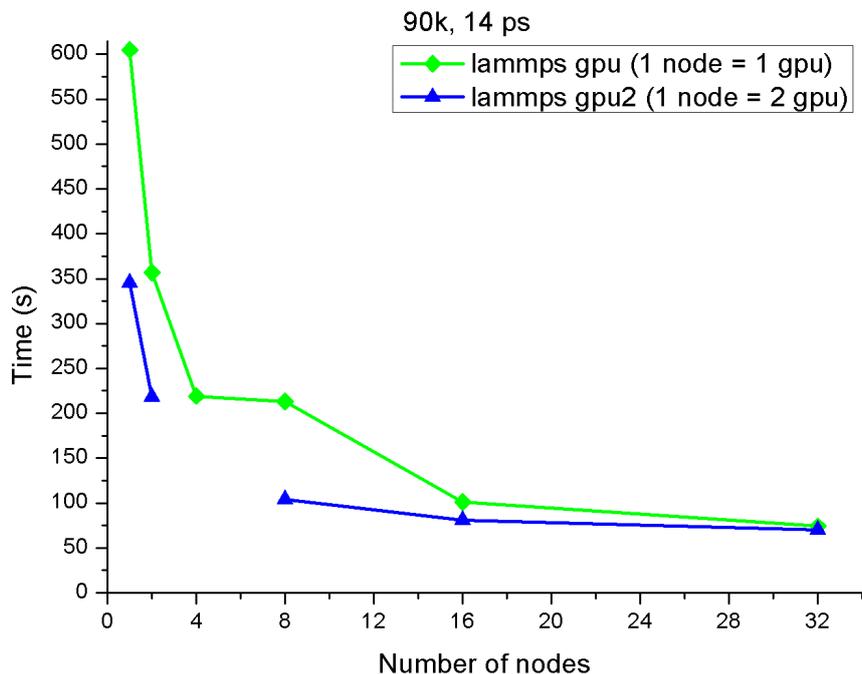


Рис. 3. Время вычислений с помощью пакета Lammps и использования одной графической видеокарты на узел и двух графических видеокарт на узел

При использовании графических видеокарт эффективнее использование 2 GPU на один узел.

Сравнение эффективности также проведено с использованием 950000 атомов на временах 6 пс.

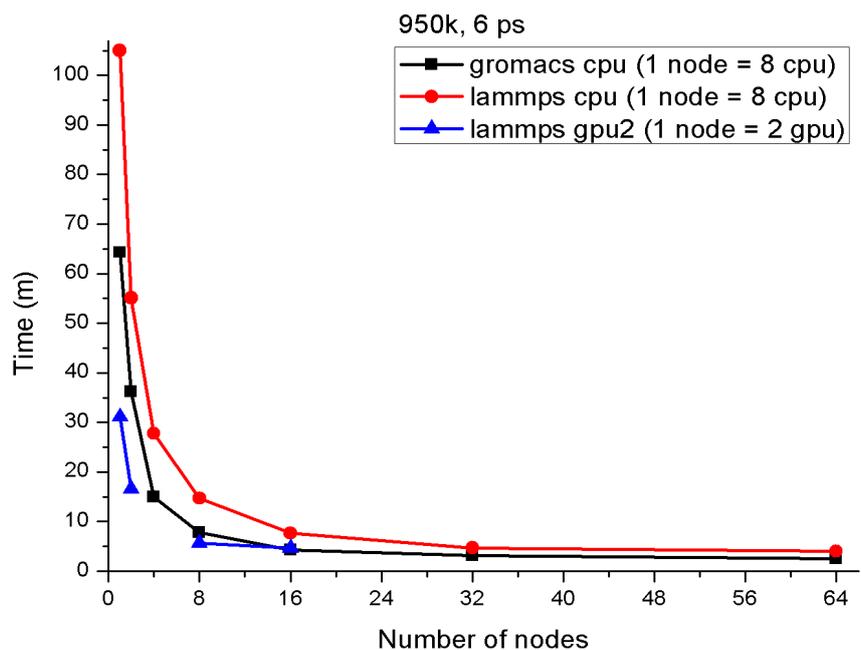


Рис. 4. Время вычислений с помощью пакетов Gromax и Lammps на различном числе узлов.

Аналогично предыдущему результату по абсолютному времени использование пакета LAMMPS и графических узлов GPU превосходит пакет GROMACS при использовании от 1 до 8 узлов. При использовании более 8 узлов программный пакет GROMACS эффективнее программного пакета LAMMPS.

4. Заключение

В результате работы были получены напылённые слои толщиной до нескольких десятков нанометров, содержащих более миллиона атомов. Были рассчитаны различные структурные характеристики полученного слоя, такие как плотность, радиальная функция распределения, количество точечных дефектов и другие. Были рассмотрены две модели напыления, использующие одно и то же оригинальное силовое поле, проведено сравнение результатов напыления для этих двух моделей, а также проведено сравнение эффективности работы самих программных пакетов в многопроцессорных режимах как при использовании вычислительных узлов CPU, так и графических узлов. Получено хорошее совпадение характеристик напыленных слоев, полученных при моделировании, с экспериментальными характеристиками кварцевого стекла и нанопокрывтий диоксида кремния.

Литература

1. Grigoriev F.V., Sulimov A.V., Kochikov I.V., Kondakova O.A., Sulimov V.B., Tikhonravov A.V. High-performance atomistic modeling of optical thin films deposited by energetic processes // International Journal of High Performance Computing Applications. 2015. Vol. 29, No. 2. P. 184 - 192.
2. Григорьев Ф.В., Кочиков И.В., Кондакова О.А., Сулимов В.Б., Тихонравов А.В. Алгоритм суперкомпьютерного моделирования напыления оптических нанопокрывтий // Вычислительные методы и программирование: Новые вычислительные технологии (Электронный научный журнал). 2013. Т. 14. С. 323–327.
3. Григорьев Ф.В., Сулимов В.Б., Кондакова О.А., Кочиков И.В., Тихонравов А.В. Пространственные и временные эффекты при осаждении частиц на тонкие пленки диоксида кремния, получаемые с использованием высокоэнергетических процессов напыления // Вестник Московского университета. Серия 3. Физика, астрономия. 2013. № 3. С. 80-83.

Using of Lammmps and Gromacs software packages for high-performance deposition simulation of nano-structured thin films

A.N. Sharov, A.A. Gorokh, M.Y. Kozmin, A.V. Sulimov, D.V. Lukyanenko and S.A. Sharapova

The paper presents an approach to molecular modeling of modern high-energy deposition processes of optical coatings of silicon dioxide and its implementation using the supercomputer "Lomonosov" and the software packages for molecular dynamics Lammmps and Gromacs. In result layer were obtained with a thickness to a few tens of nano meters containing over one million atoms. The various structural characteristics of the resulting layer were calculated, such as density, radial distribution function, the number of point defects and other. Two models of deposition were considered using the same original force field. A comparison of the results for these two models as well as a comparison of the effectiveness of mentioned software packages in multiprocessor mode (both CPU and GPU) were performed. A good agreement of deposited layers characteristics obtained by the simulations to the experimental characteristics of quartz glass and nano silica was demonstrated.