

Многомасштабное моделирование физических явлений и систем (часть II)

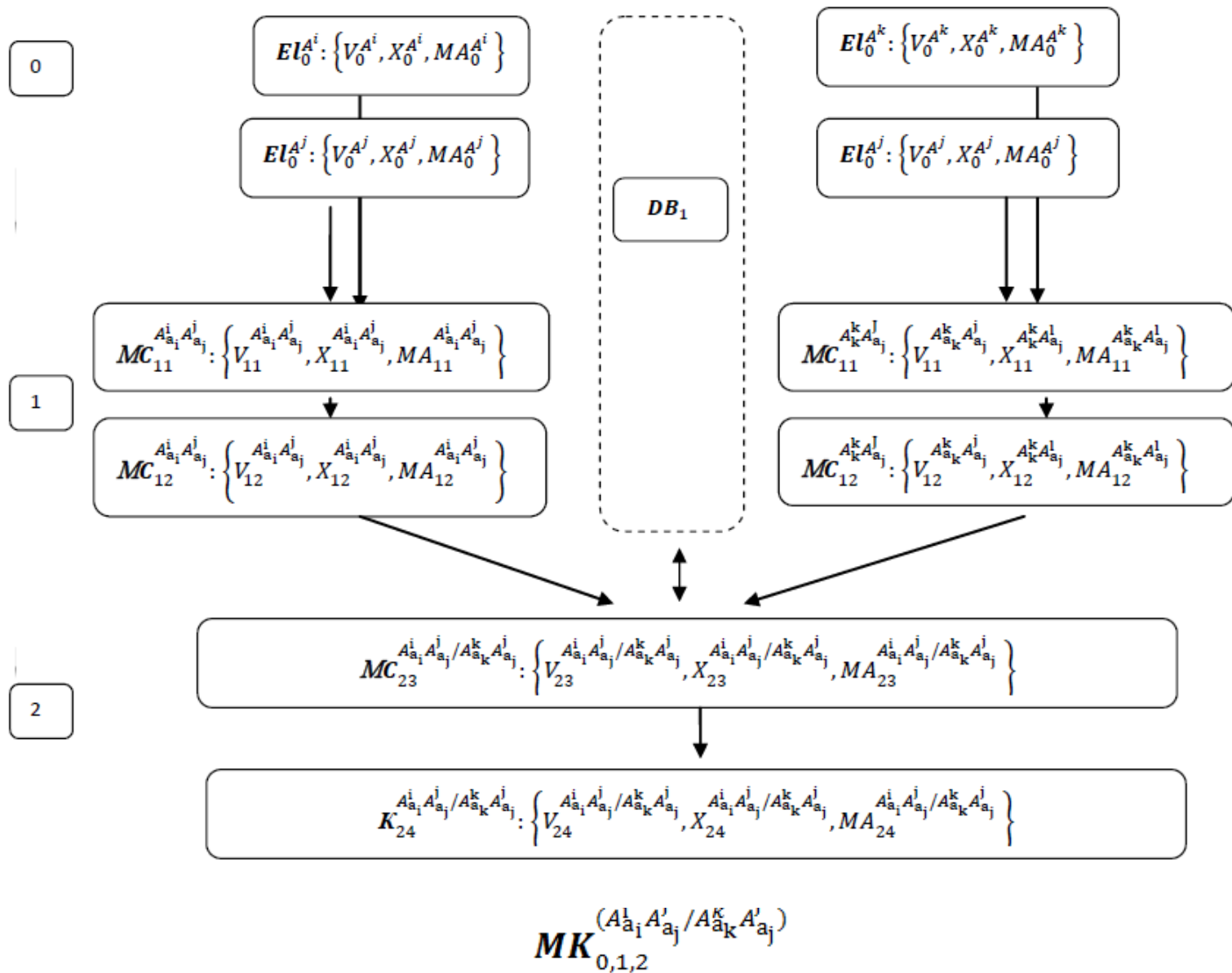
Лекции 9

Применение многомасштабного моделирования и методов машинного обучения в физике твердого тела.

Пояснения по 1 лабораторной работе

Применение алгоритмов машинного обучения для решения задачи параметрической идентификации потенциалов межатомного взаимодействия

Многомасштабная композиция для расчета эффективного коэффициента теплопроводности наногетероструктуры



Многомасштабная модель для расчета эффективного коэффициента теплопроводности наногетероструктуры GaAs/AlAs

1.ОБЩАЯ ЗАДАЧА

- 1. Сгенерировать множество материалов с различными периодами Ga и As от 1 до 20 монослоев**
- 2. Помимо периодов проварьировать параметр модели Мураки в интервале 0-0.9**
- 3. Для каждого из сгенерированных материалов посчитать эффективный коэффициент теплопроводности в диапазоне температур 100К-400К и для ширины сверхрешетки 1нм - 100мкм**
- 4. Сгенерировать набор нейросетей для различного числа слоев, числа нейронов и функций активации**
- 5. Обучить все сети и сравнить их по точности. Для этого набор данных, полученных на 1-3 шагах разбивался на 3 части: 60% для обучения, 20% для проверки, что не идет переобучение, 20% для итоговой верификации модели**

Многомасштабная модель для расчета эффективного коэффициента теплопроводности наногетероструктуры GaAs/AlAs

I. Вводим данные по химическим элементам каждого из 2-х слоев наногетероструктуры

II. Проводим построение кристаллохимической структуры для каждого слоя. Определяем координаты базисных атомов

III. Проведем квантово-механические расчеты по GaAs и AlAs. На выходе по каждому слою получаем значения внутренней энергии системы, значения диэлектрических тензоров, эффективные заряды Борна (матрицу), силовые константы 2-го и 3-го порядка (рассчитываем производные от энергии).

IV. Далее возможны 2 варианта

1. Строим приближение виртуального кристалла, чтобы осреднить свойства 2-х слойной структуры (она рассматривается как сплав)

2. Строим сверхрешетку (рассматриваем 2-х слойную структуру как сплав), однако дополнительно учитываем послойное распределение материалов. Кроме того, в уравнение Больцмана добавляем барьерный член для учета приближения времени релаксации (решается уравнение Больцмана в приближении метода релаксации). Расчеты проводим в **AlmaBTE**. На выходе получаем эффективный коэффициент теплопроводности 2-х слойной структуры, он зависит от периода (количества разных слоев, т.е. от распределения вещества в структуре) объединенной структуры, от внешней температуры, от ширины образца.

Многомасштабная модель для расчета эффективного коэффициента теплопроводности наногетероструктуры GaAs/AlAs

V. Формирование выборки:

1. Фиксируем сверхрешетку.

2. Варьируем внешнюю температуру (например, от 100K-500K всего 7 значений), смотрим изменение коэффициента теплопроводности 2-х слойной структуры. Меняем размеры периода, распределение веществ в наногетероструктуре, общую ширину сверхрешетки. Расчеты проводятся во вложенных циклах. Например, в примере всего получилось 102816 различных наборов (точек в многомерном пространстве). Таким образом, строим область допустимых значений регрессионной функции, которая описывает функциональную зависимость. Распределение веществ строим в упрощенном виде (варьировался 1 параметр (модель Мураки))

VI. Используя TensorFlow определяем регрессионную функцию.

1. На полученных в п.V. наборах строим разные сетки.

2. Набор данных делим на 3 части (60 – для обучения, 20 для тестирования, 20-для контроля переобучения (на ней ошибка не должна увеличиваться))

3. Выбираем количество слоев, количество скрытых слоев и количество нейронов в скрытых слоях и активационную функцию (гиперболический тангенс и тд, сумма от суммы этих функций)). Обучение - настройка весовых коэффициентов нейронов в скрытом слое. Открытый слой то, что мы подаем на вход и то, что получаем на выходе.

Многомасштабная модель для расчета эффективного коэффициента теплопроводности наногетероструктуры GaAs/AlAs

4. Генерируем набор нейросетей для различного числа слоев, числа нейронов и функций активации (используем TensorFlow).

5. Обучаем все сети и сравнил их по точности, для этого набор данных, полученных на 1-3 шагах разбивался на 3 части: 60% для обучения, 20% для проверки, что не идет переобучение, 20% для итоговой верификации модели.

В качестве примера были построены нейросетевые модели для расчета эффективного коэффициента теплопроводности для бинарных гетероструктур: сверхрешеток GaAs/AlAs с различными периодами слоев. Данные для обучения были сгенерированы в программном пакете AlmaBTE 1.3.2[1], параметры материалов получены из открытой базы данных проекта. Выборка формировалась для различных комбинаций содержания GaAs и AlAs, толщин пленок, периодов сверхрешетки.

Simulation	Compound	Number of elements	Compressed files
AgKTe_F4-3m	AgKTe	3	AgKTe_F4-3m.tar.xz
AgNaTe_F4-3m	AgNaTe	3	AgNaTe_F4-3m.tar.xz
AgSbBa_F4-3m	AgSbBa	3	AgSbBa_F4-3m.tar.xz
AlAs	AlAs	2	AlAs.tar.xz
AlN_cubic	AlN	2	AlN_cubic.tar.xz
AlN_wurtzite	AlN	2	AlN_wurtzite.tar.xz
BePNa_F4-3m	BePNa	3	BePNa_F4-3m.tar.xz
BiKBa_F4-3m	BiKBa	3	BiKBa_F4-3m.tar.xz
BiNaBa_F4-3m	BiNaBa	3	BiNaBa_F4-3m.tar.xz
BiSrK_F4-3m	BiSrK	3	BiSrK_F4-3m.tar.xz
BiSrLi_F4-3m	BiSrLi	3	BiSrLi_F4-3m.tar.xz
BN	BN	2	BN.tar.xz

Рассчитать эффективный коэффициент теплопереноса для слоистых структур

Фамилия (группа)	Хим. состав 1 слой	Хим. состав 2 слой	
1. 2 3	AlN_cubic	GaN_cubic	
4. 5 6	AlN_wurtzite	GaN_wurtzite	
7 8 9	GaAs	AlAs	
10 11 12.	InAs	GaAs	
13 14 15.	InAs	AlAs	
16 17 18	InP	GaP	
19 20	AlN_cubic	BN	

Пример расчетных данных

R, x,y,T,L, kappa, kappa_bulk

0.1,10,20,100,1e-09,0.333148,0.0144052
0.1,10,20,100,1.25893e-09,0.409962,0.0177266
0.1,10,20,100,1.58489e-09,0.502859,0.0217434
0.1,10,20,100,1.99526e-09,0.614522,0.0265717
0.1,10,20,100,2.51189e-09,0.747809,0.032335
0.1,10,20,100,3.16228e-09,0.905666,0.0391606
0.1,10,20,100,3.98107e-09,1.09101,0.0471747
0.1,10,20,100,5.01187e-09,1.30657,0.0564956
0.1,10,20,100,6.30957e-09,1.55475,0.067227
0.1,10,20,100,7.94328e-09,1.83745,0.0794505
0.1,10,20,100,1e-08,2.15588,0.0932192
0.1,10,20,100,1.25893e-08,2.51047,0.108552
0.1,10,20,100,1.58489e-08,2.90078,0.125429
0.1,10,20,100,1.99526e-08,3.32543,0.14379
0.1,10,20,100,2.51189e-08,3.78211,0.163537
0.1,10,20,100,3.16228e-08,4.26768,0.184533
0.1,10,20,100,3.98107e-08,4.77827,0.206611
0.1,10,20,100,5.01187e-08,5.30949,0.22958
0.1,10,20,100,6.30957e-08,5.85658,0.253236
0.1,10,20,100,7.94328e-08,6.41473,0.27737
0.1,10,20,100,1e-07,6.97931,0.301782
0.1,10,20,100,1.25893e-07,7.54611,0.326291
0.1,10,20,100,1.58489e-07,8.11159,0.350742
0.1,10,20,100,1.99526e-07,8.67302,0.375018
0.1,10,20,100,2.51189e-07,9.22859,0.399041

R-параметр модели Мураки,

x-число монослоев 1-го вида материала (GaAs) в
периоде свехрешетки,

y-число монослоев 2-го вида материала(AlAs) в периоде
сверхрешетки,

T-температура окружающей среды,

L-толщина структуры,

kappa-эффективный коэфф. Больцмана(определяемая
величина),

kappa_bulk (определяемая величина)

Задачи молекулярно-динамического моделирования эволюционных процессов

В данном разделе приведены результаты идентификации параметров потенциалов межатомного взаимодействия одно- и двухкомпонентных материалов. Представлены результаты, полученные при изучении процессов формирования кластеров точечных дефектов в кремнии. Кроме того, приведены данные по изучению начальных этапов процесса нитридизации Si, полученные с помощью молекулярно-динамического подхода. Показано что, применение в ходе МД-моделирования потенциалов, учитывающих тип химической связи с идентифицированными параметрами, позволяет получить результаты, согласующиеся с данными квантовомеханических расчетов, а также визуализировать процессы, протекающие в твердом теле.

МД-моделирование процессов формирования кластеров точечных дефектов

Механизм изменения и роста кластеров точечных дефектов в расширенные {113} дефекты является одним из важных и недостаточно изученных вопросов, возникающих в процессе ионной имплантации тяжёлых элементов в кристаллический кремний. На сегодняшний день получены экспериментальные данные о возможных типах кластеров точечных дефектов в кремнии [63-65]. Кроме того, проведено множество теоретических исследований их стабильности, трансформации во времени, в том числе при изменении температуры. При этом применяют различные подходы. Так, в работах [66,67] теоретическое исследование точечных дефектов в кремнии, в том числе расчеты энергии формирования, проводили с применением первопринципных расчетов на базе теории функционала плотности [27, 28]. В работе [68] процесс миграции точечных дефектов в кремнии рассмотрен с применением методов молекулярной динамики в приближении сильной связи (*tight-binding molecular dynamics (TBMD) simulation method*). В работах [69,70] были представлены результаты экспериментального исследования,

проведенного методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) высокого разрешения, сложных самоорганизованных дефектных структур. Согласно полученным данным, они сформировались в кристаллическом кремнии в процессе ионной имплантации атомов Er (с энергией 2 МэВ при температуре 600 °С). На основании данных ПЭМ и расчётов полученных с использованием программного пакета NurelChem, было показано [69,70], что данные дефектные структуры представляют собой объединение двух расщеплённых межузельных атомов и дивакансии, выстроенных в цепочку в плоскости {113}. Первое прямое наблюдение подобной упорядоченной структуры дефектных комплексов описано в работах [69,70]. Теоретическое исследование причин образования сложных дефектных структур-кластеров точечных дефектов в кремнии- и их трансформации во времени является сложной и актуальной задачей. В статье [23] предложен один из возможных подходов к ее решению и представлены результаты математического моделирования кластеров точечных дефектов в кремнии. Молекулярно-динамическое моделирование кластеров точечных дефектов в кремнии выполнялось с применением многопараметрического потенциала Терсоффа. Было проведено моделирование идеальной структуры кремния, а также структур кремния с различными точечными дефектами.

Моделирование кластеров точечных дефектов в кремнии

Для расчетов упорядоченных кластерных конфигураций вакансий и межузельных атомов в Si применялся многомасштабный подход [23]. Было выделено два масштабных уровня (не считая нулевого)-атомно-кристаллический и молекулярно-динамический. В рамках теоретико-множественных представлений его можно представить 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 экземпляры базовых моделей-композиций:

$$\begin{aligned} El_{01}^{Si} &: \{V_{01}^{Si}, X_{01}^{Si}, MA_{01}^{Si}\}; \\ MC_{11}^{Si} &: \{V_{11}^{Si}, X_{11}^{Si}, MA_{11}^{Si}\}; \\ MC_{12}^{Si} &: \{V_{12}^{Si}, X_{12}^{Si}, MA_{12}^{Si}\}; \\ MC_{21}^{Si} &: \{V_{21}^{Si}, X_{21}^{Si}, MA_{21}^{Si}\}; \\ MC_{22}^{Si} &: \{V_{22}^{Si}, X_{22}^{Si}, MA_{22}^{Si}\}. \end{aligned}$$

На рис. 3.7.1 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.

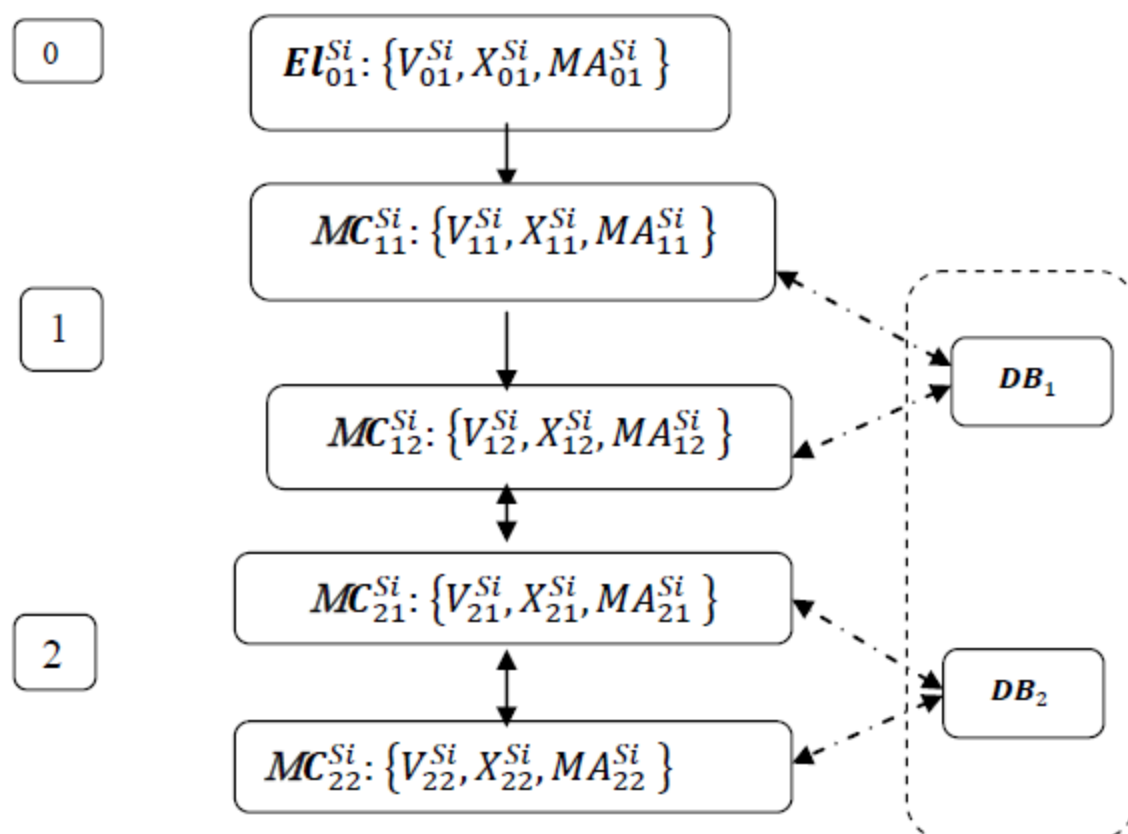


Рис.3.7.1Многомасштабная композиция для расчета дефектов в Si

На первом уровне, использовались данные по химическому составу и атомно-кристаллической структуре Si (структура алмаза), полученные с помощью базовой композиции MC_1^1 («КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКАЯ ФОРМУЛА»). Далее они использовались в качестве входных данных в базовой композиции MC_1^2 («КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКАЯ ЯЧЕЙКА») при проведении первопринципных расчетов в рамках теории функционала электронной плотности с использованием программного комплекса VASP[72]. При первопринципном моделировании структуры идеального кремния использовали периодическую ячейку, состоящую из 64 атомов, размерностью $(2 \times 2 \times 2)$. Уточнялись атомно-кристаллическая и электронная структура кремния с дефектами, вычислялась E_{coh} . Для расчетов были задействованы вычислительные ресурсы Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН и МГУ им. М. В. Ломоносова.

На втором масштабном уровне изучались вопросы изменения во времени структуры кремния с дефектами и с дефектными кластерами. Применялась композиция вычислительных моделей, состоящая 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 использовались результаты первопринципных расчетов, полученные с помощью базовой композиции MC_1^2 . Они использовались как эталонные. В качестве глобального параметра, передающегося с первого масштаба на второй, выступала когезионная энергия системы E_{coh} .

Для кремния в качестве потенциала межатомного взаимодействия был выбран многочастичный потенциал Терсоффа [8-10], хорошо зарекомендовавший себя при решении задач моделирования соединений с ковалентными связями. В качестве эталонных значений были выбраны значения параметров из работы [20]:

$$r = (2.36, 2.34, 1.46, 1.48, 0.94, 1.25 \cdot 10^{-6}, 1.46, 113031, 14.25, -0.42)$$

Область допустимых значений параметров задавалась параллелепипедом из [20]:

$$X = [\underline{\xi}, \bar{\xi}] = \{\xi \in R^n : \underline{\xi}_i \leq x_i \leq \bar{\xi}_i\}$$

$$\underline{\xi} = (0.5, 0.5, 0.5, 5 \cdot 10^{-8}, 0.1, 5 \cdot 10^{-8}, 1 \cdot 10^{-2}, 10000, 0.1, -10),$$

$$\bar{\xi} = (5, 5, 10, 5, 5, 1, 10, 200000, 50, 10).$$

Начальные приближения выбирались из данной области случайным образом, с применением метода Монте-Карло.

В результате работы двух алгоритмов были получены 200 наборов параметров методом Хука-Дживса и 200 наборов параметров методом Granular Random Search (GRS). Для полученных 400 наборов параметров значения целевой функции не превосходило 0.00001. В табл. 3.7.1 представлены несколько наборов идентифицированных параметров потенциала Терсоффа для кремния, полученных с использованием программы [73], в которой реализован алгоритм GRS. В качестве эталонного принималось значение $E_{coh} = -4.6305$ эВ (см.[71]), полученное в ходе первопринципного моделирования на VASP[72].

Таблица 3.7.1

N_{e} n/n	Iterations	D_e	S	β	R_e	C	d	n	h	γ	λ
1	1000	2,3725	0,0342	1,5279	2,3380	7497,679	20,3588	1,07506	0,5849	1,41E-05	0,3947
2	2000	2,3725	1,4895	1,4607	2,3436	113068,4	14,2479	0,93885	0,2431	1,25E-06	0,1475
3	2000	2,3726	0,0333	1,5291	2,3381	5088,643	32,5942	0,88495	1,6882	9,38E-06	0,4037
4	1000	2,3726	1,4891	1,4608	2,3435	113033,3	14,247	0,93886	0,4235	1,25E-06	0,0957

Цветом выделены параметры, которые использовались при МД-моделировании. Описание параметров, приведенных в табл.3.7.1 представлено в Приложении к Главе 3.

На рис.3.7.2 и рис. 3.7.3 представлены отклонения рассчитанных значений параметров потенциала Терсоффа от эталонных в процентах для метода Хука-Дживса и для метода Granular Random Search(GRS). Можно увидеть, что метод GRS дает лучшие результаты.

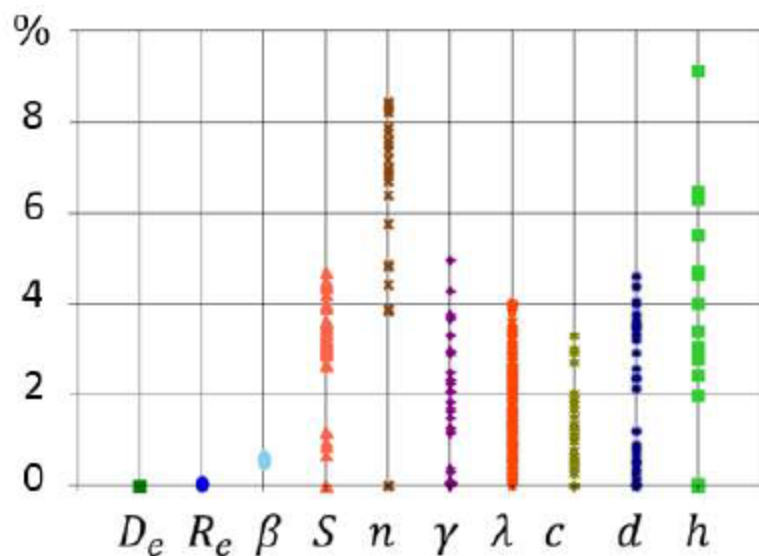


Рис. 3.7.2 Метод Хука Дживса
(рис. из статьи [71])

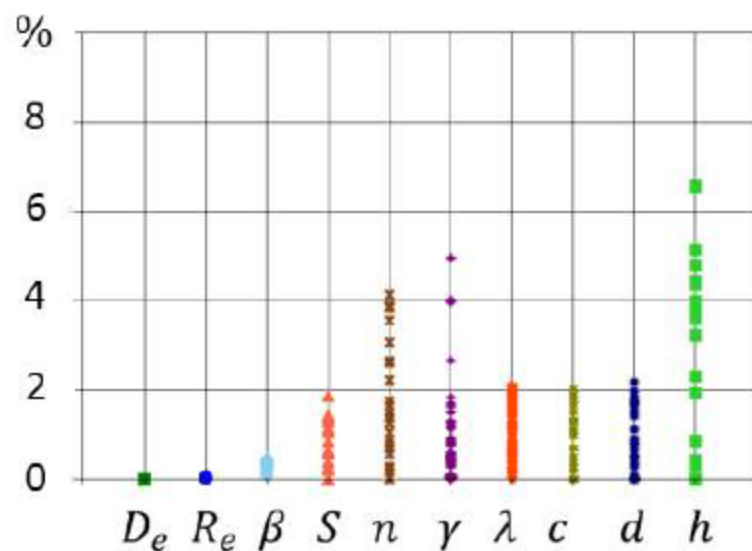


Рис. 3.7.3 Метод GRS
(рис. из статьи [71])

Аналогичные расчеты были проведены в ходе параметрической идентификации параметров потенциала Бреннера-Терсоффа для структуры кремния с применением программного кода [73]. В табл. 3.7.2 представлены два набора идентифицированных параметров потенциала Бреннера-Терсоффа для Si, рассчитанных при значении $E_{coh} = -4.6305$ эВ (см.[71]), полученном в ходе первопринципного моделирования на VASP[72].

Таблица 3.7.2

№ n/n	D_e	R_e	β	S	n	γ	λ	c	d	h
1	2,3704	2,3432	1,2452	1.4934	0.9411	1.2013	1.0345	11393.25	14,2382	-0.4186
2	2,3730	2,33641	1,2421	1.4900	0.9426	1.2164	2.4225	113453.7	14.2787	-0,4221

Описание параметров, приведенных в табл.3.7.2 представлено в Приложении к Главе 3. Первоначально проводилось МД-моделирование идеального монокристалла кремния в структуре алмаза с помощью потенциала Терсоффа с оптимально подобранными параметрами, полученными в ходе процедур параметрической идентификации и релаксации системы. В результате удалось воспроизвести данную структуру, она сохраняла стабильность в течении 100000 временных шагов. Результаты МД-моделирования совпали с данными первопринципных расчетов, полученных программным комплексом VASP[72].

Кроме того, удалось воспроизвести разрушение структуры кремния при повышении температуры системы до температуры плавления. Далее проводилось МД-моделирование структуры кремния с дефектами (вакансией, примесным атомом замещения, внедрения, дивакансией и т.д.). Использовались периодические ячейки, содержащие 8 атомов, размерностью $(1 \times 1 \times 1)$, и 64 атома, размерностью $(2 \times 2 \times 2)$.

На рис.3.7.4-рис.3.7.5 показаны результаты МД-моделирования кремния с дефектами, визуализированные с помощью оригинального программного модуля

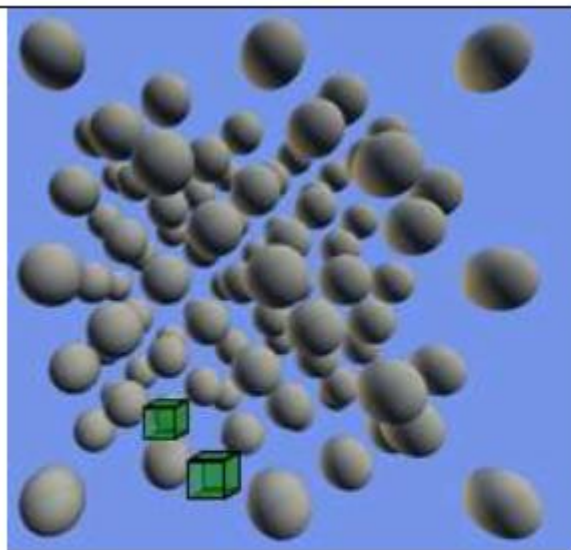


Рис. 3.7.4 Дивакансия([23])

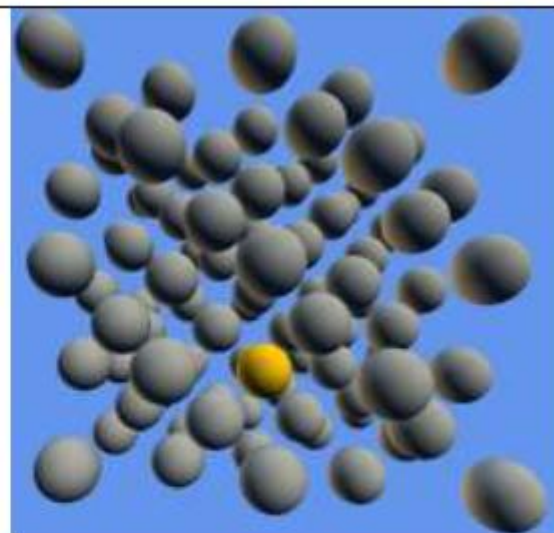


Рис. 3.7.5 Примесный атом замещения([23])

Поскольку полученные конфигурации в расчёте оказались стабильными и не разрушились с течением времени, на основании полученных данных был сделан вывод о том, что подобные дефектные структуры являются метастабильными, что в свою очередь подтверждается первопринципными расчетами.