

Lời Nói Đầu

Tài liệu này được thực hiện sau một thời gian làm việc về Mô Phỏng Vật Liệu của nhóm nghiên cứu thuộc Bộ môn Vật Lý Tin Học, Viện Vật Lý Kỹ Thuật và Trung tâm Tính Toán Hiệu Năng Cao trường Đại Học Bách Khoa Hà Nội.

Trong tài liệu này, chúng tôi xin trình bày, mô tả các khái niệm về mô hình hóa, mô phỏng trong khoa học vật liệu và việc song song hóa một số chương trình mô phỏng. Nội dung của tài liệu được chia thành 4 chương:

Chương 1: Giới thiệu tổng quan về mô phỏng, mô hình hóa trong vật lý và trong khoa học vật liệu.

Chương 2: Trình bày tổng quan về tính toán song song, khảo sát một số kiến trúc máy tính song song cũng như thư viện tính toán song song thông dụng.

Chương 3 trình bày về quá trình xây dựng hệ thống tính toán song song phục vụ cho các ứng dụng mô phỏng.

Chương 4 trình bày cụ thể về hai ứng dụng mô phỏng đã được triển khai: Phương pháp động lực học phân tử khảo sát vật liệu vi mô đa nguyên và Phương pháp giả thiết bán thực nghiệm mô phỏng giếng lượng tử.

5957- 5

25/7/06

Mục Lục

Lời Nói Đầu.....	1
Mục Lục	2
Danh mục hình	3
Danh Mục Bảng	4
CHƯƠNG 1. Tổng Quan	5
1.1 Tổng quan về mô phỏng và mô hình hóa trong Vật Lý	5
1.2 Mô phỏng trong khoa học vật liệu	9
CHƯƠNG 2. Tổng Quan Về Tính Toán Song Song	12
2.1 Phân loại máy tính song song theo mô hình bộ nhớ	13
2.2 Phân loại máy tính theo mô hình Flynn.....	14
2.3 Lập trình truyền thông điệp – Message Passing	16
2.3.1 Giới thiệu	16
2.3.2 Một số khái niệm	20
CHƯƠNG 3. Xây Dựng Hệ Thống Tính Toán Song Song	23
CHƯƠNG 4. Mô Phỏng Vật Liệu Vi Mô	31
4.1 Xây dựng chương trình mô phỏng song song cho hệ xi đa nguyên.....	31
4.1.1 Phương pháp động lực học phân tử	31
4.1.2 Thuật toán	35
4.1.3 Ứng dụng chương trình MD song song mô phỏng mẫu Al_2O_3 lỏng.	38
4.1.4 Kết Luận	48
4.2 Mô phỏng chấm lượng tử, dây lượng tử và giếng lượng tử.....	48
4.2.1 Mở đầu	48
4.2.2 Phương pháp tính toán.....	49
4.2.3 Các kết quả tính toán và nhận xét	50
4.2.4 Kết Luận	53
Tài liệu tham khảo	54

Danh mục hình

Hình 1-1 Mô phỏng trong các hệ vật lý	6
Hình 1-2 Sơ đồ thí nghiệm mô hình mức nguyên tử	9
Hình 2-1 Các bước phát triển ứng dụng song song	12
Hình 2-2 Máy tính song song bộ nhớ chia sẻ	13
Hình 2-3 Máy tính song song bộ nhớ phân tán.....	14
Hình 2-4 Phân loại máy tính theo mô hình Flynn.....	14
Hình 2-5 Mô hình SISD.....	15
Hình 2-6 Mô hình SIMD	15
Hình 2-7 Mô hình MIMD	16
Hình 2-8 Broadcast.....	22
Hình 2-9 Reduce.....	22
Hình 2-10 Gather và Scatter.....	22
Hình 3-1 Sơ đồ khối chương trình tính chuỗi.....	24
Hình 3-2 Sự phụ thuộc của thời gian tính toán vào số phần tử tính toán	24
Hình 3-3 Sự phụ thuộc của thời gian tính toán song song vào số nút tính toán.....	25
Hình 3-4 Sự phụ thuộc của thời gian truyền thông vào số nút tính toán.....	27
Hình 3-5 Sự phụ thuộc thời gian tính toán vào sự phân bổ công việc.....	29
Hình 4-1 Sơ đồ khối chương trình MD đơn	38
Hình 4-2 Sơ đồ khối chương trình MD song song	39
Hình 4-3 Hàm phân bố xuyên tâm Al-Al	40
Hình 4-4 Hàm phân bố xuyên tâm Al-O	41
Hình 4-5 Hàm phân bố xuyên tâm O-O	41
Hình 4-6 Hàm phân bố xuyên tâm tổng cộng mô phỏng và thực nghiệm nhiều xạ tia X	42
Hình 4-7 Cấu trúc địa phương của mẫu Al_2O_3 lỏng.....	43
Hình 4-8 Topology của các cụm AlO_3 , AlO_4 , AlO_5	44
Hình 4-9 Topology của các cụm Al_2O , Al_3O , Al_4O	45
Hình 4-10 Liên kết Al – O – Al	46
Hình 4-11 Phân bố cav	47
Hình 4-12 Cấu trúc dải năng lượng của InN dọc theo đường đối xứng của vùng Brillouin thứ nhất.	52
Hình 4-13 Sự phụ thuộc giữa hàm $P(x)=P_{\text{InN-GaN}}(x)$ và thành phần In	52
Hình 4-14 Độ rộng năng lượng vùng cấm đối với thành phần In của $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$; A(12) B(11).....	53

Danh Mục Bảng

Bảng 3-1 Sự phụ thuộc của thời gian tính toán vào số phần tử tính toán	23
Bảng 3-2 Sự phụ thuộc của thời gian tính toán song song vào số nút tính toán.....	25
Bảng 3-3 Sự phụ thuộc của thời gian truyền thông vào số nút tính toán.....	26
Bảng 3-4 Thời gian tính toán khi chia đều công việc	28
Bảng 3-5 Thời gian tính toán trên hai máy khi chia công việc không đều.....	28
Bảng 4-1 Hiệu năng tính toán của hệ thống 8 máy tính.....	39
Bảng 4-2 Vectơ mạng đảo, thừa số cấu trúc, và thừa số hình thể của mạng Wurtzite (đơn vị Ryd.).....	51
Bảng 4-3 Khối lượng điện tử và lỗ trống hiệu dụng của hợp chất $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	53

CHƯƠNG 1. Tổng Quan

1.1 Tổng quan về mô phỏng và mô hình hóa trong Vật Lý

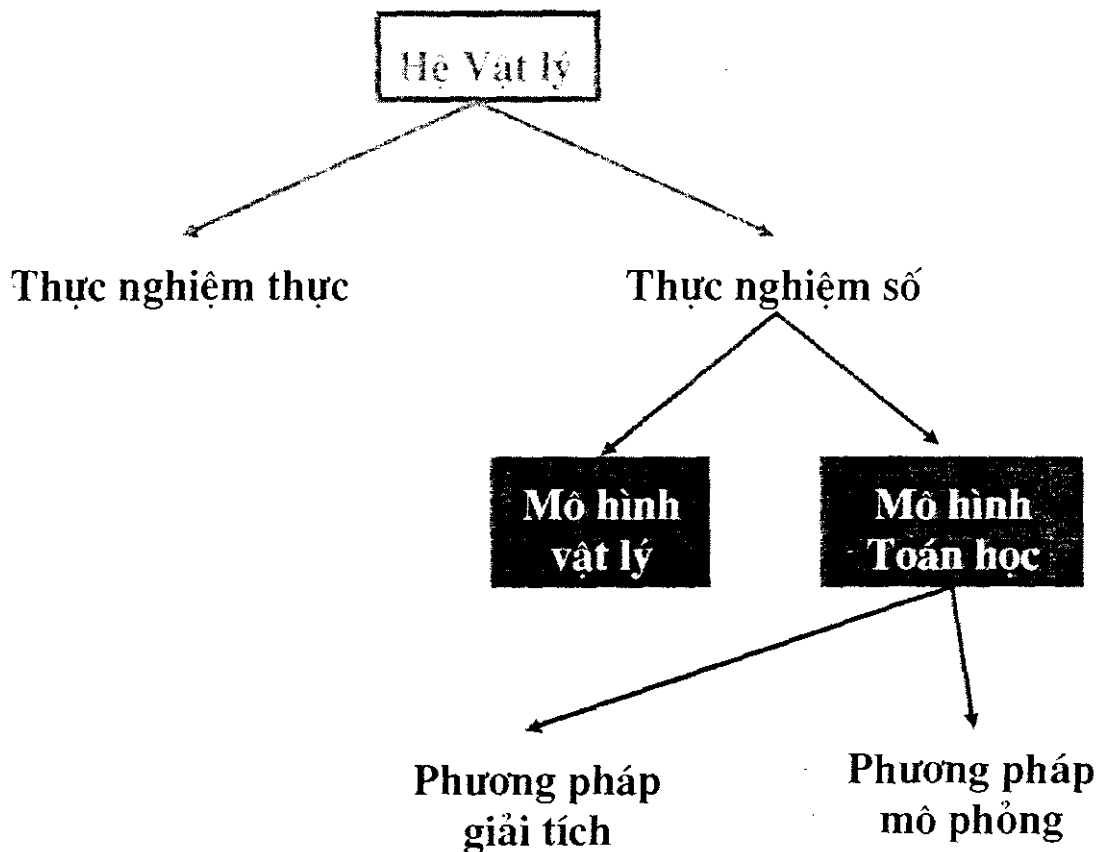
Mô phỏng và mô hình hoá: Tất cả các kỹ thuật sử dụng máy tính để nghiên cứu, khảo sát các đối tượng, quá trình vật lý xảy ra được gọi là mô phỏng hay mô hình hoá.

Hệ vật lý: Các đối tượng và các quá trình mà chúng ta quan tâm được gọi là các hệ vật lý. Khi mô phỏng chúng ta phải xây dựng một tập hợp các giả thiết để mô tả hoạt động của hệ thống.

Các giả thiết này bao gồm các mối quan hệ logic các công thức toán học. Chúng cho phép xây dựng nên các mô hình trợ giúp cho việc khảo sát hệ thống và các quá trình vật lý xảy ra trên nó. Nếu mô hình đơn giản chúng ta có thể sử dụng các công cụ toán học để tìm lời giải chính xác- phương pháp giải tích. Nếu mô hình phức tạp chúng ta giải quyết vấn đề với sự trợ giúp của thí nghiệm số hay phương pháp mô phỏng.

Các vấn đề của mô phỏng

- Mô hình khảo sát các hệ vật lý kích thước vĩ mô thường rất phức tạp và việc thiết kế xây dựng các phần mềm mô phỏng các hệ vật lý loại này rất khó khăn tốn kém.
- Các thí nghiệm mô phỏng đòi hỏi tài nguyên tính toán lớn.
- Độ tin cậy của các thí nghiệm mô phỏng, mục tiêu đặt ra như là một công cụ dự báo tiết kiệm công sức vật tư, vạch định kế hoạch phát triển của các dự án trở nên không khả thi trong nhiều hệ vật lý khi các thông tin do mô phỏng cung cấp trở nên sai lệch.



Hình 1-1 Mô phỏng trong các hệ vật lý

Mô hình vật lý: Các mối quan hệ vật lý, các giả thiết vật lý

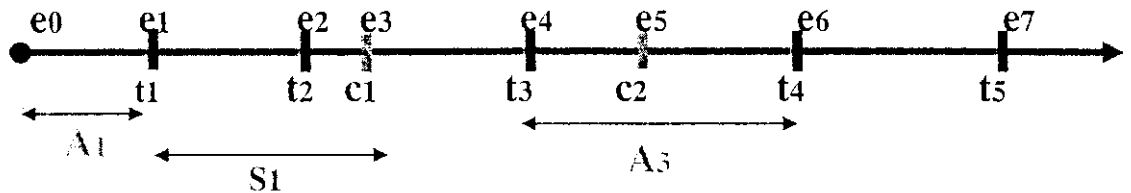
Mô hình toán học: các mối quan hệ định lượng, biểu thức giải tích..

Các dạng mô phỏng

- Mô phỏng động: Thời gian đóng vai trò quan đối với Thực nghiệm mô phỏng
- Mô Phỏng tĩnh: Không có biến thời gian
- Mô phỏng xác định: Các sự kiện xảy ra trong thực nghiệm mô phỏng theo một quy luật xác định chính xác, không có yếu tố ngẫu nhiên
- Mô Phỏng ngẫu nhiên: Có yếu tố ngẫu nhiên
- Mô phỏng liên tục: Các sự kiện xảy ra trong thời gian liên tục
- Mô Phỏng gián đoạn: Số lượng các thời gian xác định

Mô phỏng sự kiện gián đoạn

Thực nghiệm mô phỏng hoạt động nhà băng đơn giản



t_i : Thời gian khách hàng thứ i có mặt

$A_i = t_i - t_{i-1}$ Khoảng thời gian giữa khách hàng thứ i và thứ $i-1$ có mặt

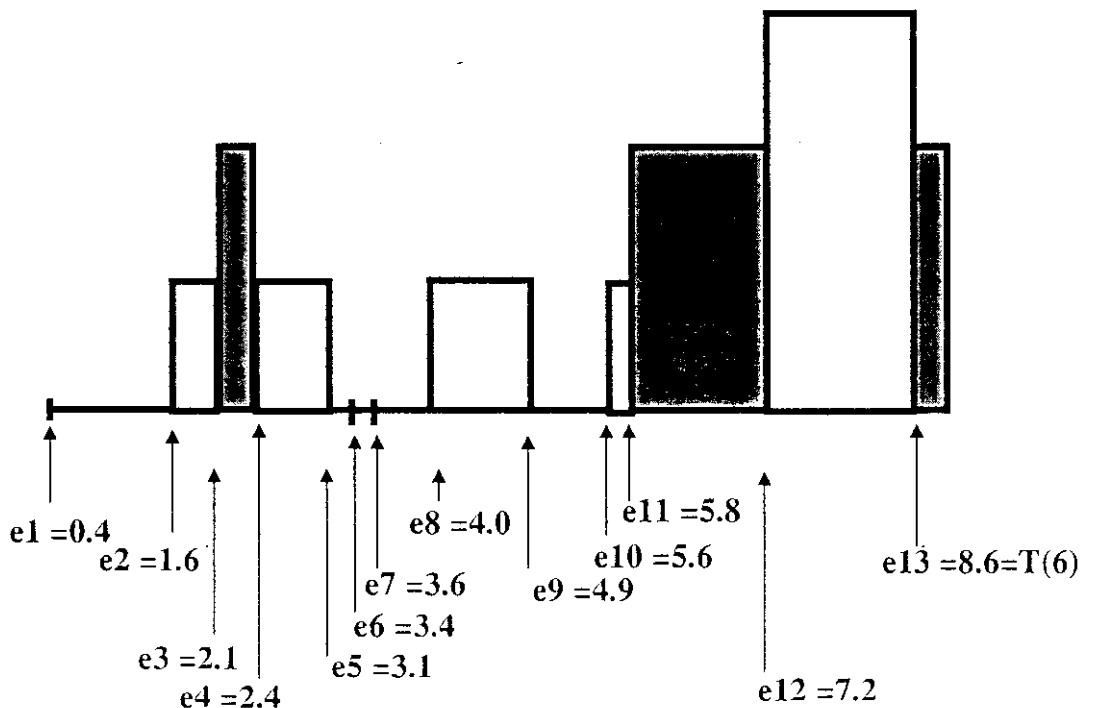
S_i : Thời gian nhân viên ngân hàng phục vụ khách hàng thứ i

D_i : không thời gian xếp hàng của khách hàng thứ i

$c_i = t_i + D_i + S_i$ Thời gian khách hàng thứ i đã thực hiện xong công việc giao dịch và rời khỏi ngân hàng.

e_i : Thời gian xảy ra sự kiện thứ i .

$Q(t)$ - Số khách hàng chờ đợi tại thời điểm t ; $T(n)$ - Khoảng thời gian phục vụ n khách hàng.



Các thông số hệ vật lý

Thời gian chờ đợi trung bình:

$$d(n) = \frac{\sum_{i=1}^n D_i}{n}$$

Hiệu suất phục vụ:

$$u(n) = \frac{\int_0^{T(n)} B(t) dt}{T(n)}$$

- $B(t)=1$ nếu nhân viên bận
- $B(t)=0$ nếu nhân viên rỗi

Số khách hàng chờ đợi trong một đơn vị thời gian :

$$q(n) = \frac{\int_0^{T(n)} Q(t) dt}{T(n)}$$

Xác định thời gian xuất hiện khách hàng, khoảng thời gian phục vụ:

Thời gian xuất hiện khách hàng t_0 , khoảng thời gian phục vụ cho mỗi khách hàng t_1 là các đại lượng ngẫu nhiên.

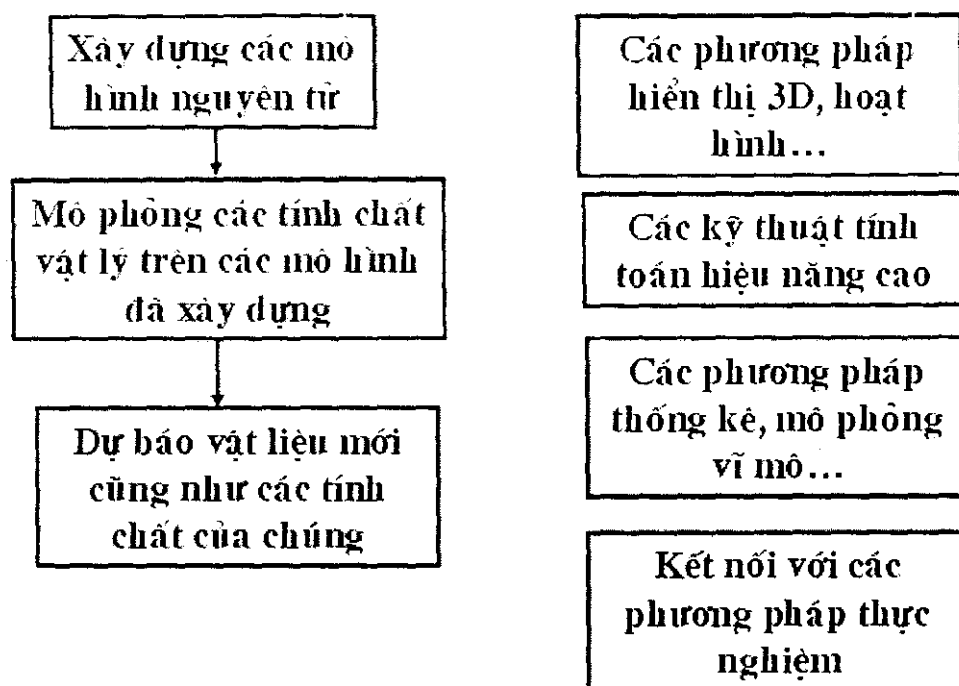
tv_0 , tv_1 - thời gian trung bình xuất hiện một khách hàng và thời gian trung bình phục vụ một khách hàng. Các đại lượng t_0 và t_1 có thể giả thiết là các đại lượng ngẫu nhiên x với hàm phân bố mật độ là (xv - giá trị trung bình của x) :

$$f(x) = \frac{1}{xv} e^{-\frac{x}{xv}}$$

Đại lượng t_0 và t_1 có thể xác định theo công thức :

$$t_0 = -tv_0 \cdot \ln b \text{ và } t_1 = -tv_1 \cdot \ln b$$

b - số ngẫu nhiên trên khoảng $[0,1]$.



Hình 1-2 Sơ đồ thí nghiệm mô hình mức nguyên tử

1.2 Mô phỏng trong khoa học vật liệu

Mô phỏng máy tính ra đời và phát triển cùng với sự xuất hiện ngày càng hoàn hảo của máy tính và ngày càng được khẳng định như một môn khoa học. Mô phỏng máy tính, mô hình hóa bằng máy tính ngày càng được áp dụng rộng rãi và thu được rất nhiều thành tựu trong các lĩnh vực nghiên cứu.

Có thể chia các phương pháp mô phỏng trong vật liệu thành: mô hình hóa các môi trường liên tục, mô hình hóa quy mô nguyên tử và mô hình hóa kết hợp cả hai phương pháp trên. Trong mô hình hóa các môi trường liên tục, vật liệu được coi như một mô hình liên tục và thường quá trình mô phỏng là giải phương trình đạo hàm riêng bằng phương pháp phần tử hữu hạn hoặc sai phân hữu hạn. Trong khi đó, ở mô phỏng quy mô nguyên tử, vật liệu được xem như tập hợp của các nguyên tử riêng biệt có quy luật vận động riêng. Kỹ thuật mô phỏng quy mô nguyên tử đòi hỏi phải có máy tính càng mạnh càng tốt, và tùy theo từng trường hợp cụ thể mà có rất nhiều phương pháp, kỹ thuật được nghiên cứu, phát triển.

Các nhà hóa lý lượng tử chia các phương pháp mô phỏng quy mô nguyên tử thành hai lĩnh vực chính: Cơ học lượng tử và phương pháp cấu trúc điện tử.

Cấu trúc điện tử (còn gọi là phương pháp *ab initio*) dựa trên nền tảng là cơ học lượng tử, xuất phát từ việc giải phương trình Schrödinger với chỉ phép gần đúng đoạn nhiệt và gần đúng một điện tử, cho phép tính toán chính xác tính chất của vật liệu. Tuy nhiên, cũng vì vậy mà khối lượng tính toán của nó rất đồ sộ, thậm chí chỉ với hệ một vài nguyên tử, phân tử đã thường được giải trên các siêu máy tính, hơn nữa, hiện nay cũng chỉ giới hạn ở nghiên cứu các tính chất tĩnh.

Bên cạnh lý thuyết *ab initio* truyền thống ở trên, với sự ra đời của lý thuyết hàm mật độ, các kỹ thuật tính toán cấu trúc điện tử ngày càng được nghiên cứu, hoàn thiện, nhất là với sự xuất hiện của hướng tiếp cận hợp nhất động lực học phân tử và hàm mật độ đã phần nào có thể cho phép nghiên cứu hệ thống lớn hơn, cỡ vài chục nguyên tử và thường được sử dụng làm tiêu chuẩn so sánh với các phương pháp khác, đặc biệt là trong nhiều trường hợp không có dữ liệu thực nghiệm tương ứng.

Mặt khác, mặc dù thường kém chính xác hơn phương pháp *ab initio*, cơ học phân tử (phương pháp trường lực) lại có thể áp dụng cho hệ lớn hơn và cho phép nghiên cứu cả tính chất tĩnh và động. Trung tâm của phương pháp này là mô tả tương tác của các hạt trong hệ bởi một thế năng hiệu dụng là hàm của toa độ các hạt nhân nguyên tử:

$$U(r_1, r_2, \dots, r_N) = \Sigma U^{(1)}(r_i) + \Sigma U^{(2)}(r_i, r_j) + \Sigma U^{(3)}(r_i, r_j, r_k) + \Sigma U^{(N)}(r_i, r_j, \dots, r_N)$$

Trong đó:

$U(1)$: thế 1 thành phần (tương ứng với thế năng trong trường ngoài)

$U(2)$: thế tương tác cặp

$U(3)$: thế 3 thành phần

Việc tìm biểu thức chính xác cho thế U là công việc hết sức khó khăn, có thể nói là khó có thể đạt được. Vì vậy, hiện nay người ta vẫn phải sử dụng các mô hình tương tác gần đúng như: Giả thế, Thế bán thực nghiệm và Thế thực nghiệm. Cũng cần phải nhấn mạnh là các thế bán thực nghiệm và thực nghiệm

thường được xây dựng từ kết quả so sánh và làm khớp với cơ sở dữ liệu thực nghiệm, có thể một phần tính toán bằng *ab initio*, thậm chí bằng tay và quan trọng nhất là tùy thuộc vào đặc điểm của từng hệ vật liệu mà có mô hình thể tương tác hợp lý được phát triển ứng dụng.

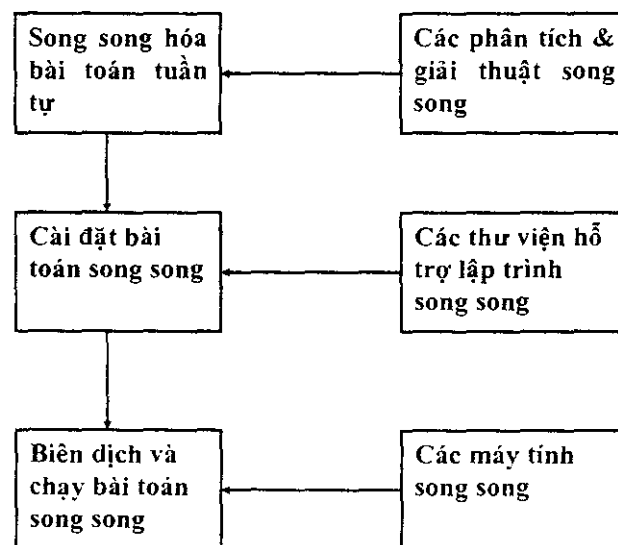
Hiện nay, một số phương pháp mô phỏng quy mô nguyên tử được sử dụng rộng rãi để xây dựng mô hình và nghiên cứu tính chất của vật liệu là: Động lực học phân tử, Monte-Carlo và Cực tiểu hoá (còn gọi là hồi phục hoá). Riêng với vật liệu vô định hình còn có phương pháp Random Network. Một điểm đáng chú ý là khi xây dựng mô hình vật liệu vô định hình có thể coi phương pháp hồi phục hoá (thống kê hồi phục) như một giới hạn của động lực học phân tử khi $T \rightarrow 0K$.

CHƯƠNG 2. Tổng Quan Về Tính Toán Song Song

Sự phát triển vượt bậc của công nghệ thông tin đã đem lại hàng loạt những ứng dụng to lớn. Một trong những lĩnh vực quan trọng đó là ứng dụng tính toán song song trong công tác nghiên cứu khoa học và đặc biệt là lĩnh vực Vật lý.

Thông thường các phần mềm được viết dưới dạng tính toán tuần tự (*serial computing*) để có thể thực hiện bởi một máy tính với một bộ xử lý. Công việc được lập trình dưới dạng một chuỗi có cấu trúc và thực hiện lần lượt bởi vi xử lý. Tại một thời điểm chỉ có một cấu trúc được xử lý.

Tính toán song song ra đời từ nhu cầu giải quyết những vấn đề đòi hỏi cao về : tốc độ xử lý, dung lượng bộ nhớ của máy tính ... mà thực tế là một máy tính đơn lẻ với một bộ vi xử lý thường không đảm nhiệm được.



Hình 2-1 Các bước phát triển ứng dụng song song

Tính toán song song sử dụng đồng thời nhiều tài nguyên để giải quyết một bài toán. Tài nguyên tính toán ở đây có thể là một máy tính với nhiều bộ vi xử lý. Nhiều máy tính một bộ vi xử lý được kết nối với nhau, hoặc kết hợp cả hai hệ thống. Đặc điểm của bài toán song song là có thể chia thành nhiều phần nhỏ có thể chạy đồng thời trong từng thời điểm nào đó. Thời gian tính toán song song ít

hơn thời gian tính toán tuần tự. Càng nhiều vi xử lý tham gia tính toán thì thời gian càng giảm đi. Tính toán song song phù hợp với nhiều hiện tượng xảy ra trong tự nhiên, trong đó có nhiều sự kiện xảy ra đồng thời. Vì thế nó được sử dụng để mô phỏng các hệ phức tạp, ví dụ như: thiên văn, thời tiết, phản ứng hạt nhân, các hệ vật lý...

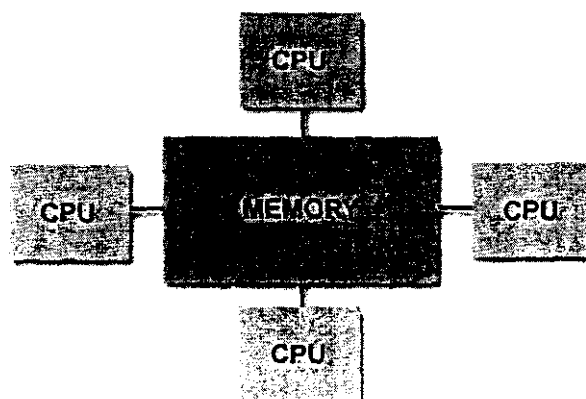
Tính toán song song đem lại kết quả ưu việt về cả khối lượng tính toán cũng như thời gian tính toán, chi phí tính toán.

2.1 Phân loại máy tính song song theo mô hình bộ nhớ

Có 2 cấu trúc vật lý bộ nhớ phổ biến của máy tính song song : bộ nhớ chia sẻ (*Shared memory*) và bộ nhớ phân tán (*distributed memory*)

Bộ nhớ chia sẻ có đặc trưng là bộ nhớ của cả hệ thống được dùng chung với một địa chỉ truy cập. Tất cả các vi xử lý có thể chạy độc lập nhưng cùng chia sẻ tài nguyên bộ nhớ. Bất kỳ sự thay đổi một giá trị nào trên bộ nhớ do một vi xử lý đều được các vi xử lý khác nhận biết.

Ưu điểm của bộ nhớ chia sẻ là : Việc dùng một địa chỉ toàn cục để xác định bộ nhớ làm việc lập trình song song trở nên đơn giản hơn đối với người sử dụng. Dữ liệu chia sẻ giữa những phần công việc khác nhau được trao đổi nhanh hơn do sự thống nhất của bộ nhớ.

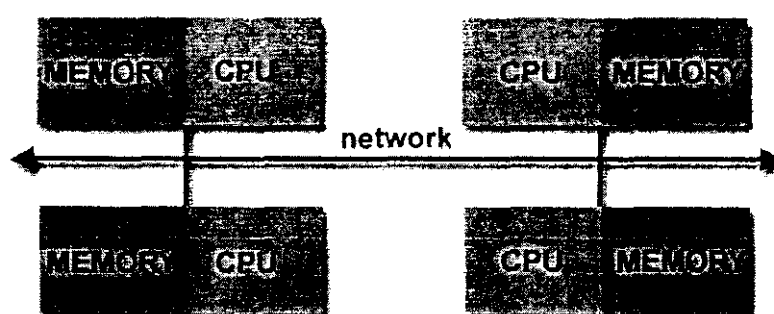


Hình 2-2 Máy tính song song bộ nhớ chia sẻ

Bộ nhớ phân tán có đặc trưng là có địa chỉ nhớ riêng biệt cho từng vi xử lý. Mỗi vi xử lý đều có riêng bộ nhớ của mình và chúng làm việc độc lập. Thay đổi bộ nhớ của một vi xử lý không ảnh hưởng đến bộ nhớ các vi xử lý khác. Liên kết giữa các vi xử lý là mạng ethernet.

Ưu điểm của bộ nhớ phân tán là dễ dàng thêm máy trạm vào hệ thống, chi phí thấp, kiến trúc đơn giản.

Nhược điểm của bộ nhớ phân tán là lập trình phức tạp hơn, tốc độ truy cập bộ nhớ không đồng bộ.



Hình 2-3 Máy tính song song bộ nhớ phân tán

Cấu trúc bộ nhớ chia sẻ thường được sử dụng trong các máy có nhiều vi xử lý đối xứng (SMP). Cấu trúc bộ nhớ phân tán thường dùng trong mạng nhiều máy đơn vi xử lý.

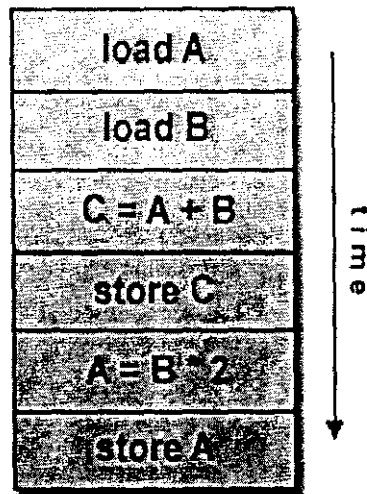
Các máy tính lớn nhất nhanh nhất hiện nay dùng cả 2 cấu trúc trên. Nó là mạng của nhiều máy tính, mỗi máy tính có nhiều vi xử lý.

2.2 Phân loại máy tính theo mô hình Flynn

SISD	SIMD
Single Instruction, Single Data	Single Instruction, Multiple Data
MISD	MIMD
Multiple Instruction, Single Data	Multiple Instruction, Multiple Data

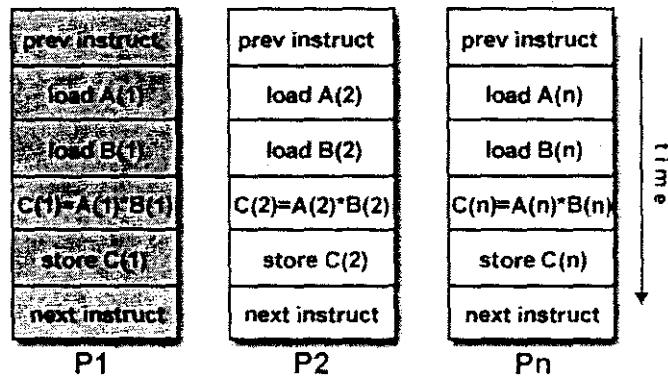
Hình 2-4 Phân loại máy tính theo mô hình Flynn

+ **SISD** (đơn lệnh đơn dữ liệu): là mô hình máy tính tuần tự.



Hình 2-5 Mô hình SISD

+ **SIMD** (đơn lệnh đa dữ liệu) : Thích hợp với mô hình bài toán song song dựa trên việc song song hoá dữ liệu



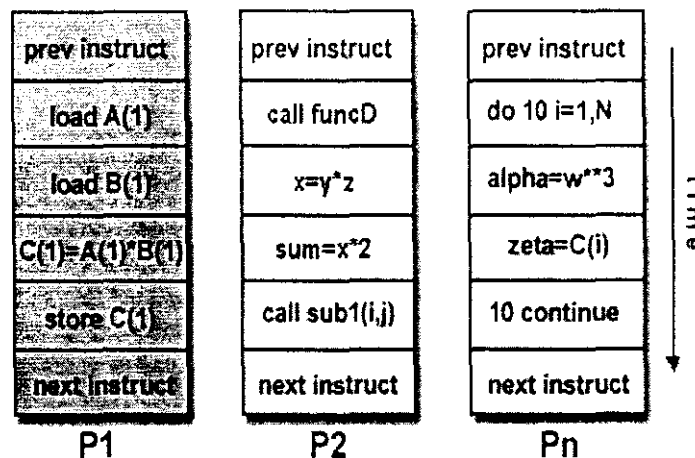
Hình 2-6 Mô hình SIMD

+ **MISD** (đa lệnh đơn dữ liệu):

Các vi xử lý sẽ thao tác trên cùng một bộ dữ liệu sẽ dễ xảy ra xung đột , không nhất quán nếu một VXL thay đổi dữ liệu. cho dù vấn đề này có được giải quyết

thì các VXL vẫn phải chờ kết quả của nhau đồng thời phải cập nhật dữ liệu một cách thường xuyên, làm giảm lợi thế vốn có của hệ thống song song.

+ **MIMD** (đa lệnh đa dữ liệu):



Hình 2-7 Mô hình MIMD

Mỗi VXL thao tác trên bộ dữ liệu riêng của mình mà không cần đồng bộ với nhau. Mô hình này phát huy tối đa được tính ưu việt của hệ thống song song, tuy nhiên để xây dựng được bài toán theo mô hình này đòi hỏi sự nghiên cứu hết sức phức tạp để tìm ra được phương thức phân rã bài toán một cách tối ưu.

2.3 Lập trình truyền thông điệp – Message Passing

2.3.1 Giới thiệu

Message Passing là một mô hình lập trình được sử dụng rộng rãi trong máy tính song song đặc biệt là máy tính song song khả chuyển (*Scalable Parallel Computers – SPCs*) với bộ nhớ phân tán, và Mạng các máy trạm (*Network of Workstations – NOWs*). Rất nhiều quá trình xử lý quan trọng đã được tạo ra trong việc xây dựng các ứng dụng với mô hình này trong nhiều năm qua. Mỗi nhà phát triển đều đưa ra một biến thể riêng của họ. Mô hình lập trình truyền thông điệp ngày càng chứng tỏ khả năng có thể triển khai một cách dễ dàng và hiệu quả. Từ đó đưa ra những định nghĩa về cấu trúc cũng như cú pháp của mô hình truyền thông điệp – MPI. Điều này đã được diễn đàn MPI-Forum

(*Message Passing Interface – Forum*) thực hiện với sự tham gia của nhiều cá nhân từ nhiều tổ chức, các nhà phát triển hệ thống song song, các tập đoàn, các phòng thí nghiệm, các trường đại học, các quốc gia.

Những nhà thiết kế phát triển MPI được khuyến cáo sử dụng các tính năng của các hệ thống MPI như các chuẩn sẵn có. Và MPI đã được triển khai thành công tại các trung tâm nghiên cứu: IBM T.J Watson, Intel's NX/2, Express, nCUBE's Vertex, PARMACS...

Chuẩn MPI định nghĩa ra các giao diện tương tác người dùng (*user interface*) và các chức năng phục vụ cho khả năng truyền thông điệp một cách rộng rãi. Kể từ khi phiên bản hoàn chỉnh đầu tiên ra đời, MPI đã được đón nhận và ứng dụng rộng rãi. Các phát triển của nó được thực hiện trên nhiều loại máy: từ SPCs đến NOWs. Lượng SPCs được cung cấp và hỗ trợ bởi MPI ngày càng tăng. Bởi vậy MPI đã và đang được sự tín nhiệm cũng như khẳng định tính hữu hiệu của nó trong tính toán song song.

Một trong những mục tiêu chính của MPI là mức độ linh hoạt giữa các máy khác nhau. Điều này có nghĩa là, cùng với một mã nguồn MPI có thể chạy trên nhiều loại máy khác nhau với thư viện MPI. Trong quá trình này, sự tinh chỉnh mã nguồn để tối ưu hóa mã trên từng máy cũng được diễn ra. Cũng như quá trình truyền thông thường được thiết kế chạy trên các máy song song có bộ nhớ phân tán, quá trình này hoàn toàn có thể chạy tốt trên máy song song với bộ nhớ chia sẻ. Nó có thể chạy trên máy trạm, cũng như một tập hợp các quá trình chạy trên máy trạm đơn lẻ.

MPI cũng hỗ trợ khả năng chạy trong suốt trên các máy hỗn tạp (tập hợp các bộ xử lý có kiến trúc khác biệt). Có nghĩa là MPI hoàn toàn có thể triển khai như một máy ảo duy nhất, che đi sự khác biệt kiến trúc của hệ thống. MPI sẽ thực hiện một cách tự động các quá trình chuyển đổi dữ liệu, trao đổi giao thức...

MPI với các chuẩn, định nghĩa, hàm của một hệ thống truyền thông điệp, là một mô hình có giá trị. Nó cho phép người lập trình thoát khỏi các rắc rối thường thấy. Có thể ví dụ, MPI đã thực hiện toàn bộ các quá trình phức tạp ở lớp dưới trình ứng dụng như: truyền thông điệp. Người dùng không phải quan tâm xem dữ liệu truyền chính xác như thế nào trong quá trình xây dựng chương trình ứng dụng.

MPI là một phần mềm khả chuyển (tương thích với các loại máy tính có cấu hình khác nhau).

Một trong những ưu điểm của mô hình MPI là khả năng đóng gói cao và ít phân tán. Chương trình triển khai theo mô hình này có thể chạy trên máy tính đa xử lý với bộ nhớ phân tán (*distributed memory multicomputer*), máy tính đa xử lý với bộ nhớ chia sẻ (*shared memory multicomputer*), mạng các máy trạm (*networks of workstations*), hoặc là tổ hợp các mô hình. Mô hình này không hề bị lỗi thời bởi sự phát triển của công nghệ như các: cấu trúc máy, tốc độ kết nối... Nó hoàn toàn có thể được triển khai trên một lượng lớn các hệ thống khác biệt, có song song hay không, với sự liên kết bởi các hệ thống mạng.

Mô hình này có thể sử dụng với các kiến trúc đa lệnh – đa dữ liệu (MIMD), hoặc đa chương trình – đa dữ liệu (MPMD). Ở các kiến trúc này. Mỗi tiến trình theo một luồng thực thi riêng biệt với cùng một mã lệnh, hoặc thậm chí là khác mã lệnh. Nó cũng hoàn toàn phù hợp khi viết trên những môi trường khác nhau, như một chương trình – đa dữ liệu (SPMD). Nơi mà tất cả tiến trình đều chạy trên cùng một luồng thực thi.

MPI cung cấp rất nhiều tính năng nhằm tăng cường hiệu năng trên các máy tính song song khả chuyển với phần cứng hỗ trợ giao tiếp trong xử lý được chuyên biệt hóa. Bởi vì MPI được xây dựng với mong muốn được triển khai một cách ổn định, hiệu năng cao trên những hệ thống như thế. Tại cùng một thời điểm, MPI được triển khai trên những giao thức truyền thông giữa các bộ xử lý theo chuẩn của UNIX, cung cấp một cách mềm dẻo cho nhóm các máy trạm và mạng đồng nhất các máy trạm.

Các phiên bản của MPI

Chuẩn nguyên gốc của MPI được tạo ra bởi diễn đàn MPI (*Message Passing Interface – Forum*), phiên bản 1.0 được công bố vào tháng 6 năm 1994. Diễn đàn MPI đã nâng cấp phiên bản 1.0 lên 1.1 với nhiệm vụ làm cho chuẩn MPI trở nên rõ ràng và ít lỗi. Cho đến hiện nay phiên bản 2.0 đã được công bố.

- **MPICH** Của phòng thí nghiệm quốc gia Argonne trường đại học bang Mississippi.

- **MPICH-PM/CLUMP** Thư viện MPICH-PM/CLUMP MPI do Myrinet hỗ trợ chạy nhóm với linux, NetBSD, và SunOS. Cũng hỗ trợ cho nhóm các Pentium SMP.
- **MPICH-T3E** là MPICH-1.10 xuất cho Cray T3E bởi phòng thí nghiệm HPV tại MSU.
- **LAM** Phiên bản triển khai LAM MPI được hỗ trợ và quan tâm bởi trường đại học Notre Dame, đại học Indiana .
- **CHIMP** Phiên bản được phát triển bởi trung tâm tính toán song song Edinburgh.
- **UNIFY** Phát triển tại trường Đại học bang Mississippi. Chạy trên đỉnh của PVM và cung cấp cho lập trình viên API - kép . Một trương chỉnh có thể có cả mã của PVM và MPI.
- **BDM/MPI** sử dụng những giao thức tin cậy thông qua Myrinet cho giao tiếp MPI.
- **MPICH/NT** là một phiên bản triển khai đầy đủ của MPI cho Windows NT workstation. Nó dựa trên MPICH , phiên bản này hỗ trợ cả giao tiếp chia sẻ bộ nhớ trong máy trạm và giao tiếp TCP/IP giữa các tiến trình chạy trên nhiều máy trạm một cách đồng thời.
- **W32MPI** là phiên bản đầy đủ của MPI cho các nhóm MS-Win32. Nó dựa trên MPICH và được đưa ra bởi Instituto de Engenharia de Coimbra (Bồ đào nha) và Universidade de Coimbra-Departamento de Engenharia Informatica (Bồ Đào Nha).
- **WinMPI** là phiên bản đầu tiên giành cho MS-Windows 3.1 . Nó chạy trên một máy tính đơn lẻ, không cần thiết phải có mạng. Được đưa ra bởi đại học Nebraska tại Omaha.
- **MPI-FM** là một công hiệu năng cao của MPICH cho nhóm các máy trạm SPARC giao tiếp trong bởi Myrinet. Dựa trên Fast Messages, được đưa ra bởi đại học Illinois tại Urbana-Champaign.

2.3.2 Một số khái niệm trong lập trình truyền thông điệp

1. Tiến trình

Một chương trình MPI bao gồm các tiến trình độc lập, thực hiện các mã của chúng (Bảng C hay Fortran) trong một kiểu MIMD. Những mã được thực hiện bởi mỗi tiến trình không nhất thiết phải đồng nhất. Các tiến trình giao tiếp thông qua việc gọi các phương thức cơ bản của MPI. Thông thường, mỗi tiến trình sẽ được thực thi trên không gian nhớ của riêng nó, dù rằng việc sử dụng bộ nhớ chia sẻ là hoàn toàn có thể.

2. Kiểu gọi của MPI

Local: Trong trường hợp thủ tục chỉ phụ thuộc vào các tiến trình được thực thi cục bộ. Những tính năng này không cần thiết các ràng buộc trong giao tiếp với các tiến trình khác.

Non-local : Trong trường hợp thủ tục có thể cần thực thi với một số thủ tục khác của MPI trên một số tiến trình khác. Có rất nhiều quá trình giao tiếp trong MPI là non-local.

Blocking : Trong trường hợp kết quả của thủ tục chỉ ra những người dùng được phép sử dụng tài nguyên của nó hay không.

Non-blocking : Trong trường hợp một thủ tục có thể kết thúc trước khi điều khiển kích hoạt hoàn thành, và trước khi người dùng được phép tái sử dụng tài nguyên.

Collective: Trong trường hợp toàn bộ các tiến trình trong nhóm tiến trình đều cần phải gọi đến một thủ tục.

3. Các đối tượng ẩn (Opaque Object)

MPI quản lý bộ nhớ hệ thống dùng cho bộ đệm thông điệp, lưu trữ các thể hiện bên trong của nhiều loại đối tượng trong MPI như: nhóm, truyền thông, kiểu dữ liệu,... Bộ nhớ này không cho phép người dùng truy cập trực tiếp và các đối tượng lưu trữ được gọi là ẩn (opaque): kích thước và kiểu của chúng bị che dấu đối với người dùng. Đối tượng ẩn được truy cập thông qua handles (quản lý), được lưu trữ trong không gian handles của người sử dụng.

4. Đặt tên các hằng (Named constant)

Đôi khi các thủ tục MPI gán những giá trị đặc biệt cho những tham số với ý nghĩa nào đó. Ví dụ như tag, là một hằng kiểu interger mang giá trị của điều khiển giao thức điểm – điểm (point to point communication operators), và có thể nhận giá trị kiểu wild - card. MPI_ANY_TAG. Đặc biệt những tham số kiểu này có thể mang một khoảng các giá trị. Những giá trị đặc biệt như MPI_ANY_TAG sẽ nằm ở ngoài khoảng cho phép.

5. Lựa chọn tham số (Choice Arguments)

Các hàm của MPI sử dụng các tham số với kiểu dữ liệu nhất định nào đó (hoặc là kiểu kết hợp). Mỗi lần gọi nhất định, có thể truyền những tham số mang giá trị khác nhau với những kiểu dữ liệu khác nhau. Cơ chế cung cấp tham số này khác nhau đối với mỗi loại ngôn ngữ. Với C, chúng ta có thể sử dụng (*void).

Giao tiếp điểm – điểm (Point to point communication)

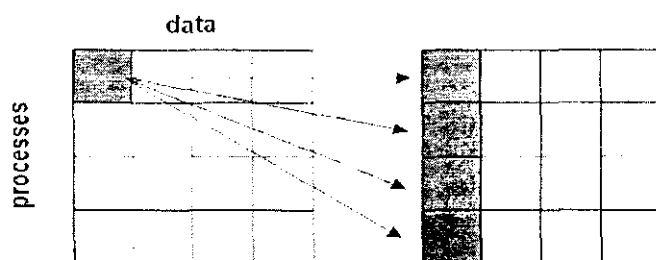
Cơ chế giao tiếp cơ bản của MPI là sự truyền dữ liệu giữa các cặp tiến trình. Ta gọi cơ chế này là “giao tiếp điểm – điểm”. Hầu hết các kiến trúc của MPI đều được xây dựng trên các điều khiển điểm – điểm.

MPI cung cấp các hàm truyền và nhận dữ liệu cho phép sự giao tiếp giữa các kiểu dữ liệu (datatypes) và thẻ thông điệp (tagmessages) được liên kết. Thông điệp cũng cần phải định kiểu để nhằm phục vụ cho môi trường mạng hỗn hợp cũng như cho việc thực hiện chuyển đổi dữ liệu khi truyền thông tin từ kiến trúc này sang kiến trúc khác. Tag cũng cho phép lựa chọn vào thời điểm cuối quá trình nhận: có thể nhận một thẻ đơn lẻ, có thể sử dụng wild-card, cho phép nhận bất kỳ message của bất kỳ thẻ nào.

Giao tiếp cộng đồng (Collective communication)

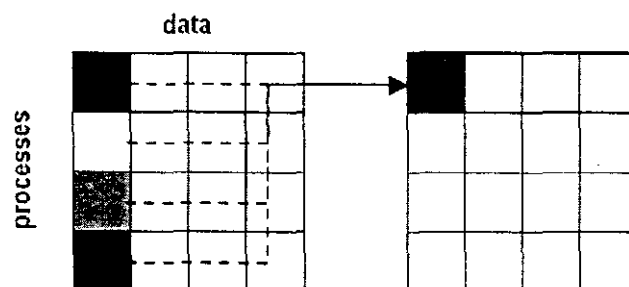
Giao tiếp cộng đồng truyền dữ liệu giữa tất cả các VXL trong hệ thống tính toán.

Broadcast : Gửi cùng một khối dữ liệu đến tất cả các máy trong hệ thống.



Hình 2-8 Broadcast

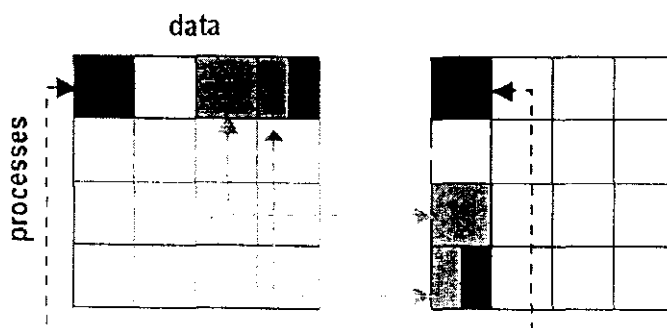
Reduce : Tổng hợp dữ liệu từ các máy trạm lại thành một dữ liệu đơn trên máy chủ



Hình 2-9 Reduce

Gather : Máy chủ thu thập dữ liệu từ các máy trạm và sắp xếp dữ liệu đó theo thứ tự số hiệu của nút tính toán.

Scatter : Phân rã mảng dữ liệu trên một máy đơn thành các mảng con và phân tán các mảng con đó lên tất cả các máy trong hệ thống, kể cả máy chủ.



Hình 2-10 Gather và Scatter

CHƯƠNG 3. Xây Dựng Hệ Thống Tính Toán Song Song

Hệ thống tính toán song song được xây dựng theo mô hình Beowulf. Đây là một mô hình máy tính song song theo kiểu ghép cụm (cluster), cho phép xây dựng các hệ thống tính toán từ những máy tính có kiến trúc thông dụng (PC) và các thiết bị mạng phổ biến. Các thông số kỹ thuật của hệ thống như sau:

- Nút tính toán: 8 nút, vi xử lý Pentium IV, 2.4GHz, 256 MB RAM
- Mạng kết nối: Ethernet 10/100 Mbps

Môi trường tính toán song song cũng như thư viện lập trình sử dụng gói phần mềm LAM/MPI.

Trước tiên chúng tôi khảo sát hiệu năng tính toán song song cho bài toán xác định tổng sau đây:

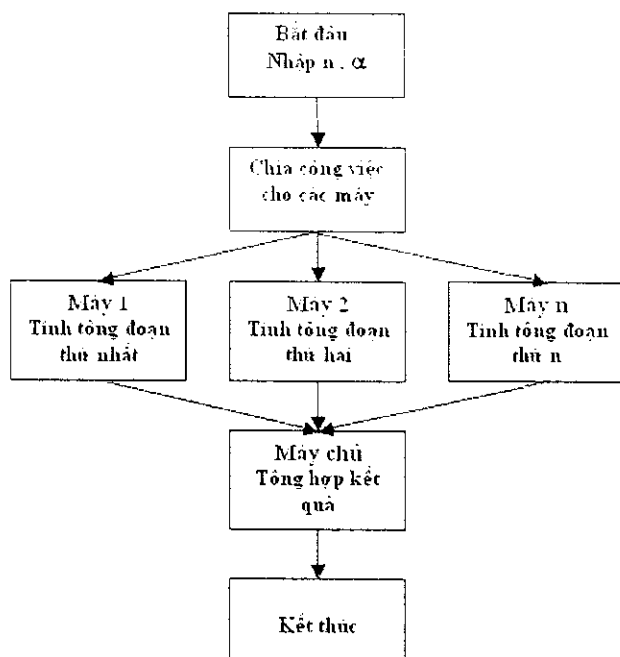
$$\sum_{i=1}^n \frac{1}{i^{\alpha}} \quad (3.1)$$

Với n là một số tự nhiên và α là một số thực cho trước. Sơ đồ khối chương trình tính tổng trên được minh họa trên Hình 3.1.

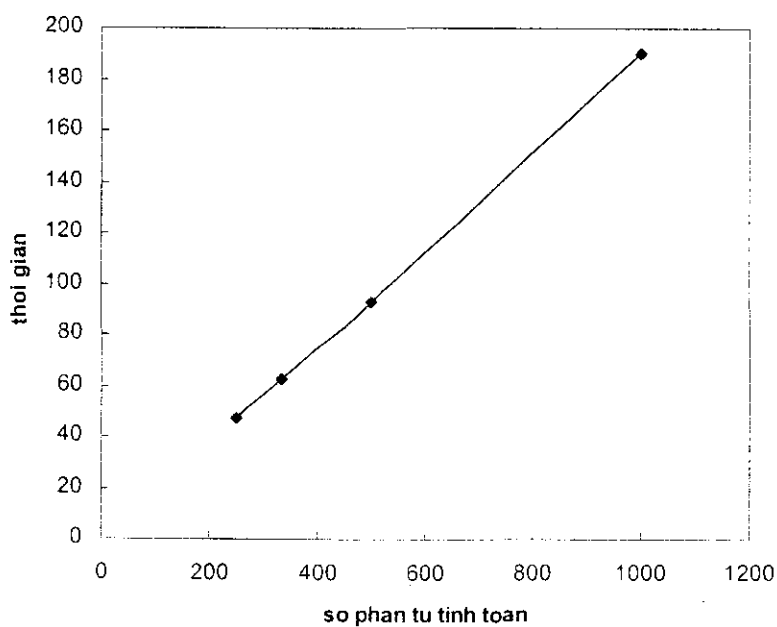
Kết quả khảo sát tính ổn định trên một máy đơn cho trường hợp $\alpha=2$ được trình bày trên bảng 3.1.

Thời gian (s)	46.94268	62.43850	93.35000	186.25720
n (triệu)	250	334	500	1000

Bảng 3-1 Sự phụ thuộc của thời gian tính toán vào số phần tử tính toán



Hình 3-1 Sơ đồ khối chương trình tính chuỗi



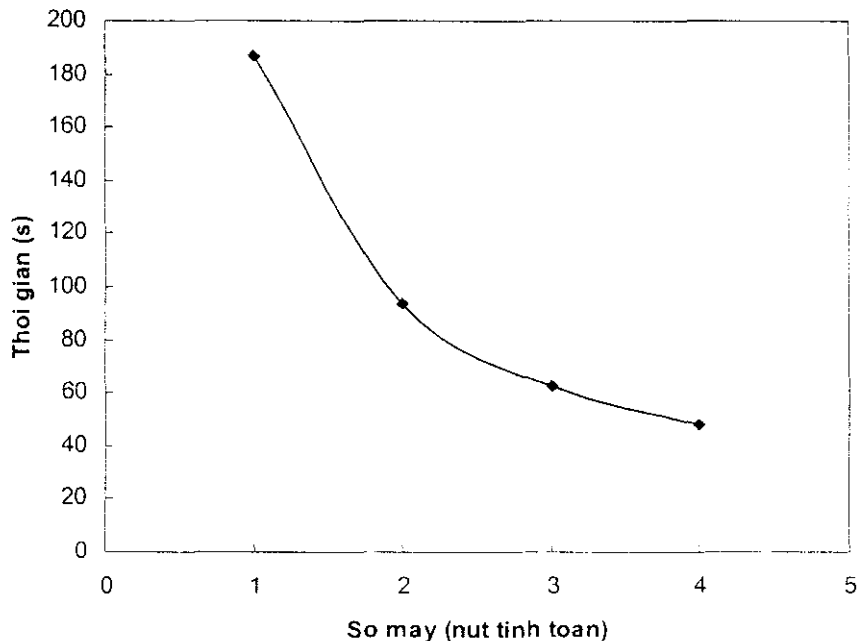
Hình 3-2 Sự phụ thuộc của thời gian tính toán vào số phần tử tính toán

Dựa vào bảng số liệu thu được, ta có thể đánh giá được khả năng tính toán của máy đơn là tương đối ổn định, sự phụ thuộc của thời gian tính toán vào số lượng phần tử gần như tuyến tính và quan trọng là thời gian tính toán sẽ trở nên rất lớn, không khả thi nếu như yêu cầu bài toán đặt ra với khối lượng tính toán quá lớn.

So sánh thời gian tính toán song song (với khối lượng tính toán là $n = 10^9$, $\sigma=2$) kết quả sau được trình bày trong bảng 3.2 (thời gian tính toán được tính theo thời gian của nút tính toán hoàn thành công việc sau cùng trong hệ thống):

Thời gian (s)	186.67740	93.42838	62.73477	47.90315
Số nút TT	1	2	3	4

Bảng 3-2 Sự phụ thuộc của thời gian tính toán song song vào số nút tính toán



Hình 3-3 Sự phụ thuộc của thời gian tính toán song song vào số nút tính toán

Với thời gian tính toán của hệ thống được tính theo thời gian tính toán của máy chủ (nút 0) do máy chủ phải thực hiện công việc gom kết quả tính toán của các máy trạm, rồi tính tổng, mặc dù nó có thể tính toán phần công việc của mình xong trước các máy khác.

Thời gian tính toán giảm nhanh chóng theo hàm mũ khi thực hiện cùng một khối lượng công việc so với trường hợp tính toán trên một máy đơn: Từ 186.67740 (s) trên một máy đã giảm xuống chỉ còn khoảng một nửa : 93.42838 (s) khi hệ thống có hai nút tính toán.

Qua đồ thị chúng ta có thể đánh giá được khả năng nâng cao số nút tính toán không phải là vô hạn (Do kết cấu mạng, đường truyền, thời gian nghẽn truyền thông ...). tuy nhiên trong giới hạn có thể, khi khối lượng tính toán lớn thì việc thêm một nút tính toán vào hệ thống thực sự có ý nghĩa rõ rệt.

Khi khối lượng tính toán lớn, vấn đề thời gian truyền thông trong hệ thống trở nên quan trọng. Trong quá trình xây dựng phần mềm, Cần thiết phải tối ưu hoá truyền thông. Hạn chế tối đa số lần truyền thông và tận dụng khả năng của các nút tính toán khi truyền thông, tính toán.

Kết hợp linh hoạt các kiểu truyền thông : điểm - điểm; đồng bộ - không đồng bộ, truyền thông cộng đồng.

Đánh giá các kết quả khảo sát trên một máy đơn và trên hệ thống song song, ta có thể rút ra được thời gian truyền thông trong hệ thống (Bảng 3.3):

N (triệu)	Số nút TT	T1(s)	T2(s)	T3(s)
250	4	46.94268	47.90315	0.96046
334	3	62.43850	62.73477	0.29626
500	2	93.35000	93.42838	0.07837
1000	1	186.25720	-	-

Bảng 3-3 Sự phụ thuộc của thời gian truyền thông vào số nút tính toán

N: số phần tử trong chuỗi tính toán

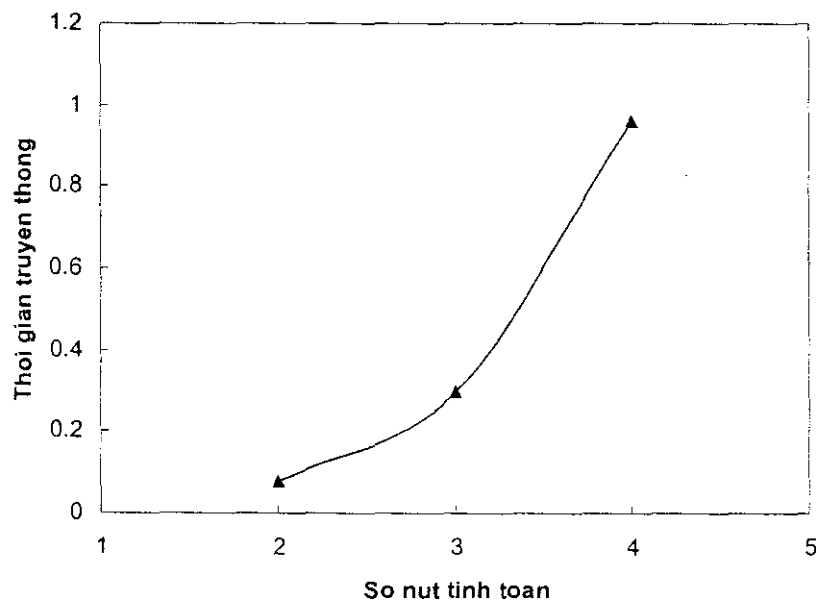
Số nút TT : số nút tính toán với $n=10^9$, $\alpha=2$

T1 : Thời gian tính toán trên một máy đơn

T2 : Thời gian tính toán trên cả hệ thống

T3 : Thời gian truyền thông trong hệ thống

Qua đồ thị (Hình 3.4) nhận thấy một vấn đề hiển nhiên đó là thời gian truyền thông trong hệ thống tăng nhanh khi ta tăng số lượng các nút tính toán. Đây cũng là một lý do khiến ta không thể tăng mãi số nút tính toán vì đến một lúc nào đó thời gian truyền thông trong hệ thống sẽ quá lớn, có thể bằng hoặc lớn hơn cả thời gian tính toán thực, như vậy là không khả thi.



Hình 3-4 Sự phụ thuộc của thời gian truyền thông vào số nút tính toán

Nội dung khảo sát tiếp theo là sự phân bổ công việc. Vẫn trong phần khảo sát trên ($n=10^9$, $\alpha=2$), các máy đều nhận được khối lượng công việc như nhau. Thời gian tính toán và thời gian tính toán trung bình của các nút được trình bày trong bảng 3.4.

T0 : Thời gian tính toán của máy chủ

Ti : Thời gian tính toán của máy trạm có số hiệu i ($i=1,2,3$)

T : Thời gian tính toán trung bình của các máy

Số nút TT	T0(s)	T1(s)	T2(s)	T3(s)	T(s)
4	47.90314	47.72079	47.48304	47.35920	47.61654
3	62.73767	62.72628	62.47350	-	62.64581
2	93.42837	93.38953	-	-	93.40895
1	168.67741	-	-	-	-

Bảng 3-4 Thời gian tính toán khi chia đều công việc

Từ bảng kết quả trên cho thấy thời gian tính toán của các máy là tương đối đồng đều, dao động trong một lần cận nhỏ so với thời gian trung bình. Kết quả này là do việc khảo sát tiến hành trên hệ thống máy tính đồng đều về mặt cấu hình, nên khả năng giải quyết cùng một khối lượng công việc ở mỗi máy là tương đương nhau.

Tiến hành chia công việc không đồng đều cho hệ thống tính toán gồm 2 nút, kết quả trình bày trong bảng 3.5.

N (triệu)	T(s)	T1(s)
100	168.59718	18.89265
200	149.98764	37.83715
300	131.49206	57.35668
400	112.54258	74.64443
500	93.42837	93.38953
600	114.25630	113.52130
700	135.23540	134.32510
800	151.45762	150.25410
900	171.03378	170.24560

Bảng 3-5 Thời gian tính toán trên hai máy khi chia công việc không đều

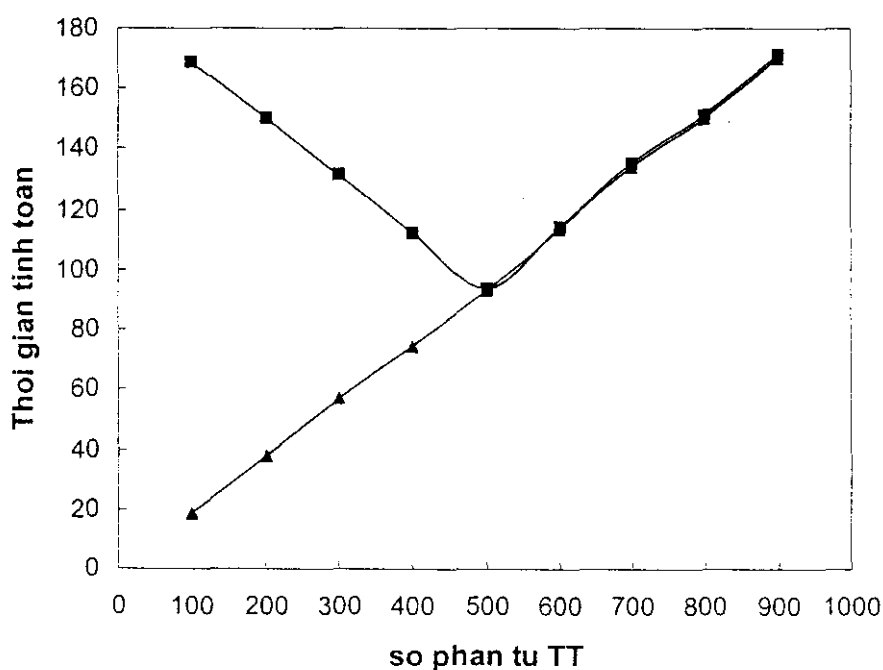
N : số phần tử TT (tính toán) phân cho máy trạm

Số phần tử TT phân cho máy chủ = $10^9 - N$

T : Thời gian TT của máy chủ - cũng là thời gian TT của hệ thống

T_1 : Thời gian tính toán của máy trạm

Để thấy thời gian tính toán của máy chủ luôn lớn hơn so với máy trạm. Vậy một câu hỏi đặt ra là có nên chia công việc cho máy chủ ít đi không. Thực chất phần lớn hơn về thời gian của máy chủ là do nó phải đợi các máy trạm tính toán xong rồi thu thập kết quả lại để tổng hợp. Như vậy không nên chia công việc ít hơn cho máy chủ vì sẽ lãng phí một khoảng thời gian chờ đợi của máy chủ trong khi nó đã tính xong phần công việc được chia của mình.



Hình 3-5 Sự phụ thuộc thời gian tính toán vào sự phân bổ công việc

Đường biểu diễn thời gian tính toán của hệ thống (đường có chấm hình vuông) cho thấy giải pháp tối ưu cho hệ thống máy tính hiện có (cấu hình ngang nhau) là khối lượng công việc chia đồng đều (mỗi máy đều nhận số phần tử tính toán bằng nhau : $N = 500$ triệu).

Từ đây ta có thể rút ra một kết luận quan trọng trong việc nâng cao hiệu năng của hệ thống: Với các hệ thống máy tính có cấu hình tương đương nhau, nên chia công việc cho các máy một cách đồng đều. Tuy nhiên với một hệ thống tận dụng hết các máy tính sẵn có không đồng đều về mặt cấu hình thì nhất thiết phải khảo sát chi tiết để đánh giá khả năng tính toán của từng máy, từ đó sẽ có sự phân bổ công việc cho các nút tính toán theo tỷ lệ hợp lý để đạt được hiệu năng cao nhất của hệ thống.

CHƯƠNG 4. Mô Phỏng Vật Liệu Vi Mô

4.1 Xây dựng chương trình mô phỏng song song cho hệ xi đa nguyên

4.1.1 Phương pháp động lực học phân tử

Mô phỏng bằng phương pháp động lực học phân tử (Molecular Dynamic – MD) là kỹ thuật dùng để xác định các tính chất vật lý của hệ cổ điển nhiều hạt, khi mà sự dịch chuyển các hạt tuân theo các định luật cơ học cổ điển Newton. Đây là một phương pháp gần đúng hữu hiệu cho một dải rộng các loại vật liệu. Trong một số trường hợp khi cần xét đến chuyển động tịnh tiến, chuyển động quay của các nguyên tử, phân tử nhẹ như He, H₂, D₂ ... hoặc là dao động với tần số ν với $h\nu > K_B T$ thì yếu tố lượng tử được áp dụng.

Mô hình MD cho phép nhận được nhiều thông tin về vật liệu, dự báo các tính chất vật lý của nó. Ngoài ra so với các phương pháp thực nghiệm truyền thống, phương pháp mô phỏng có ưu điểm là rẻ tiền và đòi hỏi thời gian thực hiện ngắn.

Mô phỏng bằng phương pháp MD về một số mặt rất giống với các thí nghiệm thực. Khi chúng ta làm thí nghiệm thực cần phải trải qua những bước sau : chuẩn bị mẫu vật liệu cần nghiên cứu, kết nối mẫu với các thiết bị đo và đo các tính chất cần quan tâm trong khoảng thời gian có thể. Trong mô phỏng bằng phương pháp MD, ta cũng tiến hành các bước tương tự : Trước tiên là chuẩn bị mẫu: Chọn hệ mô hình chứa N hạt và giải các phương trình chuyển động Newton cho tất cả các nguyên tử có trong hệ cho đến khi các tính chất của hệ không thay đổi theo thời gian (hệ đạt đến trạng thái cân bằng). Sau khi đạt trạng thái cân bằng, ta tiến hành “đo” các đại lượng. Trên thực tế, một số lỗi thường gặp khi tiến hành thí nghiệm tính toán rất giống với các lỗi thường gặp khi làm thí nghiệm thực (như : mẫu chuẩn bị không tốt, thời gian đo quá ngắn, hệ thống trải qua những thay đổi không thấy được trong quá trình thí nghiệm...)

Thực tế hiện nay phần lớn các mẫu để mô phỏng cấu trúc và các tính chất nhiệt động chứa vài trăm đến vài ngàn hạt, số hạt của hệ mô phỏng rất nhỏ so

với thực tế, do vậy để mô phỏng các hệ thực có số hạt lớn việc chọn điều kiện biên là rất cần thiết qua đó có thể hạn chế đến mức nhỏ nhất nh hưởng của s? hạt trong mô hình lên các tính chất của hệ mà ta mô phỏng. Điều này có thể đạt được nếu dùng điều kiện biên tuần hoàn. Tuy nhiên, tùy từng hệ mô phỏng cụ thể mà người ta chọn điều kiện biên cho phù hợp như sau:

- **Biên cứng:** Xung quanh không gian tính toán có một lớp nguyên tử đứng yên
- **Biên tự do:** Có không chân không tuyệt đối bao quanh không gian tính toán.
- **Biên mềm:** Có hai lớp nguyên tử biên xung quanh không gian tính toán. Các nguyên tử lớp ngoài đứng yên, lớp bên trong dịch chuyển theo biên độ cho trước.
- **Biên tuần hoàn:** không gian tính toán được lặp lại tuần hoàn trong không gian.

Để xác định đại lượng cần khảo sát trong phương pháp MD, đầu tiên ta cần diễn tả đại lượng đó như là một hàm của vị trí và moment của các hạt trong hệ. Ví dụ, một cách thuận lợi để xác định nhiệt độ trong hệ nhiều hạt là diễn tả qua động năng trung bình cho một bậc tự do :

$$\frac{1}{2}mv_i^2 = \frac{1}{2}k_B T \quad (1.1)$$

Và trong mô phỏng ta dùng phương pháp trên như một cách xác định nhiệt độ. Trên thực tế, chúng ta xác định động năng toàn phần của hệ và chia cho số bậc tự do N_f (bằng $3N-3$ cho hệ có N hạt với moment cố định). Vì động năng toàn phần của hệ được tính theo hệ thức sau:

$$T(t) = \sum_{i=1}^N \frac{m_i v_i^2(t)}{k_B N_f} \quad (1.2)$$

Thăng giáng nhiệt độ sẽ vào khoảng $(N_f)^{-1/2}$. ví $N_f = 10^2 - 10^3$, nên sự thăng giáng này là khoảng 5 – 10%. Để có nhiệt độ chính xác hơn thì phải lấy giá trị trung bình qua rất nhiều sự thăng giáng.

Thế tương tác

Một trong các vấn đề quan trọng trong phương pháp MD là lựa chọn thế tương tác nguyên tử. Thế tương tác này được xác định bởi tương tác giữa các đám mây điện tử xung quanh nguyên tử, giữa các ion và giữa ion với các đám mây điện tử. Hiển nhiên là để có thể phân tích và đánh giá một cách chính xác các thành phần kể trên là một việc không dễ dàng, tuy nhiên chúng ta có thể biểu diễn chúng dưới dạng:

$$E = \sum_{i < j} V_{ij}(r_{ij}) + \sum_i F_i(\rho_i) \quad (1-3)$$

Với mật độ điện tử ρ được xác định bởi

$$\rho(i) = \sum_j f_j(r_{ij}) \quad (1-4)$$

Trong đó F là hàm nhúng nguyên tử, mô tả phần năng lượng của nguyên tử i khi được nhúng trong môi trường có mật độ điện tử. Một trong những dạng gần đúng của (1-3) là thế tác Kiting, chỉ xét ảnh hưởng của góc giữa hai lân cận và có biểu thức là:

$$\varphi = \frac{3}{16} \frac{\alpha}{d^2} \sum_{i,j} (r_{ij}^2 - d^2) + \frac{3}{8} \frac{\beta}{d^2} \sum_{i,j,k} (r_{ij} r_{jk} + \frac{d^2}{3}) \quad (1-5)$$

Ở đây, α , d , β là những hằng số xác định từ thực nghiệm.

Bên cạnh thế tương tác (1-3) nhiều tác giả còn sử dụng thế tương tác cặp. Ví dụ thế Lennard-Jones có dạng:

$$\varphi(r) = \frac{A}{r^n} - \frac{B}{r^m} \quad (1-6)$$

Trong đó A , B là các tham số được xác định từ thực nghiệm. Thông thường $n=12$ và $m=6$. Một thế cặp bán thực nghiệm được sử dụng rộng rãi là thế More:

$$\varphi(r) = A \cdot \exp(-ar) - B \cdot \exp(-br) \quad (1-7)$$

Các thế tương tác cặp thường bị cắt ở một khoảng cách ngắn r_0 nào đó. Ưu điểm của thế tác cặp là đơn giản và đòi hỏi thời gian tính toán ngắn, vì vậy

cho đến nay nó vẫn được sử dụng để xây dựng các mô hình hàng triệu nguyên tử.

Đối với các hệ ôxit, nhiều tác giả sử dụng thế tác Born-Meyer và thế Pauling. Thế Born-Meyer có dạng:

$$U_{ij}(r) = Z_i Z_j \frac{e^2}{r} + B_{ij} \exp\left(-\frac{r}{R_{ij}}\right) - \frac{C_{ij}}{r^6} - \frac{D_{ij}}{r^8} \quad (1-8)$$

Trong đó r là khoảng cách giữa ion i và ion j ; Z_i, Z_j là điện tích của ion thứ i và j ứng. B_{ij} và R_{ij} là các thông số lực đẩy của lớp vỏ ion; C_{ij} và D_{ij} là các thông số tương tác lưỡng cực - lưỡng cực và lưỡng cực - tứ cực tương ứng.

Một dạng đặc biệt của thế Born-Meyer là thế Born-Meyer-Higgins trong đó các thông số B_{ij} và R_{ij} được biểu diễn thông qua các bán kính ion r_i và r_j như sau:

$$B_{ij} = b \left(1 + \frac{Z_i}{n_i} + \frac{Z_j}{n_j}\right) \cdot \exp\left(\frac{r_i + r_j}{R_{ij}}\right) \quad (1-9)$$

Với n_i, n_j là số electron ở vòng ngoài cùng được lấp đầy của ion thứ i và thứ j ứng; b là thông số xác định từ thực nghiệm.

Thế Pauling được viết dạng:

$$U_{ij}(r) = \frac{Z_i Z_j e^2}{r} + \frac{B_{ij}}{r^n} - \frac{C_{ij}}{r^6} - \frac{D_{ij}}{r^8} \quad (1-10)$$

Với n có giá trị từ 8 đến 10. Các giá trị của thế Born-Meyer-Higgins và Pauling cho các mô hình ôxit được xác định lần đầu tiên bởi Fumi và Tosi, các thông số của thế được xác định nhờ các số liệu thực nghiệm về mật độ, độ nén và năng lượng liên kết của các hợp chất tinh thể. Mô hình với thế Born-Meyer-Higgins cho kết quả phù hợp tốt hơn với thực nghiệm so với thế Pauling.

Khác với liên kết ion, tương tác giữa các hạt trong mô hình liên kết cộng hoá trị thường được mô tả bằng thế tác ba thành phần:

$$U = U_0 + U_1 + U_2 \quad (1-11)$$

U_0 là năng lượng của tinh thể lí tưởng; U_1, U_2 là hai thành phần thể phụ thuộc vào sức căng và góc liên kết.

Mặc dù số lượng các thể tác gần đúng được đề xuất rất lớn nhưng về c bn các thể tác nguyên tử chưa đáp ứng yêu cầu của các mô hình nguyên tử. Gần đây một hướng nghiên cứu mới liên quan đến thể tác là phương pháp nguyên lí ban đầu (ab initial). Phương pháp này dựa trên cơ sở phân tích hàm sóng Schrodinger giải theo từng bước dịch chuyển của mô hình, từ đó xác định được lực tác dụng giữa các ion. Kết quả tính toán phù hợp tốt với thực nghiệm nhưng khối lượng tính toán rất lớn và phức tạp. Vì vậy các mô hình nguyên tử sử dụng phương pháp này chỉ giới hạn trong phạm vi vài chục đến vài trăm nguyên tử trong khi các mô hình tương tác cặp có thể đạt kích thước lên đến vài trăm triệu nguyên tử.

4.1.2 Thuật toán

Phương pháp động lực học phân tử dựa trên phương trình chuyển động của Newton

$$F_i = m_i . a_i \quad (1.12)$$

trong đó:

m_i : Khối lượng hạt thứ i

a_i : Gia tốc hạt thứ i

F_i : Lực tác dụng lên hạt thứ i

F_i được xác định như sau:

$$F_i = - \sum_{j=1}^N \nabla_i V_{ij} \quad (1.13)$$

với V_{ij} là thể tương tác giữa hạt thứ i và j

Vị trí, vận tốc, gia tốc của hạt được khai triển theo chuỗi Taylor

$$r_i(t + \Delta t) = r_i(t) + v_i(t) . \Delta t + \frac{1}{2} a_i(t) \Delta t^2 + \quad (1.14)$$

$$v_i(t + \Delta t) = v_i(t) + a_i(t) . \Delta t + \frac{1}{2} b_i(t) \Delta t^2 + \quad (1.15)$$

$$a_i(t + \Delta t) = a_i(t) + b_i(t) \cdot \Delta t + \dots \quad (1.16)$$

Có thể sử dụng một trong số những thuật toán sau để giải phương trình chuyển động của Newton như thuật toán Verlet hay thuật toán Beenman... Việc lựa chọn thuật toán để giải phương trình chuyển động đòi hỏi phải thỏa mãn những điều kiện sau:

- + Giữ năng lượng và xung lượng bảo toàn
- + Tính toán có độ chính xác cao
- + Cho phép tính tích phân theo bước thời gian dài

Theo thuật toán Verlet tọa độ và vận tốc của hạt thức ở thời điểm $(t + \Delta t)$ và t được xác định thông qua tọa độ của hạt ở thời điểm $(t - \Delta t)$ và t qua biểu thức:

$$r_i(t + \Delta t) = 2r_i(t) - r_i(t - \Delta t) + (\Delta t)^2 \cdot \frac{F_i(t)}{m_i} \quad (1.17)$$

$$v_i(t) = \frac{r_i(t + \Delta t) - r_i(t - \Delta t)}{2\Delta t} \quad (1.18)$$

Theo thuật toán Beenman ta lại có:

$$r_i(t + \Delta t) = r_i(t) + v_i(t) \cdot \Delta t + \frac{2}{3} \cdot \frac{F_i(t)}{m_i} \cdot \Delta t^2 - \frac{1}{6} \cdot \frac{F_i(t - \Delta t)}{m_i} \cdot \Delta t^2 \quad (1.19)$$

$$v_i(t + \Delta t) = v_i(t) + \frac{F_i(t)}{m_i} \cdot \Delta t + \frac{1}{3} \cdot \frac{F_i(t)}{m_i} \cdot \Delta t + \frac{5}{6} \cdot \frac{F_i(t)}{m_i} \cdot \Delta t - \frac{1}{6} \cdot \frac{F_i(t - \Delta t)}{m_i} \cdot \Delta t \quad (1.20)$$

Ưu điểm của thuật toán này là biểu thức khai triển vận tốc và tọa độ chính xác hơn, năng lượng bảo toàn tốt hơn nhưng nhược điểm là biểu thức tính toán phức tạp, đòi hỏi thời gian tính toán lớn.

Khi hệ chúng ta quan tâm đạt trạng thái cân bằng, một vài đại lượng của hệ mô phỏng được giữ cố định, ví dụ như năng lượng, thể tích, áp suất.... Trong mô phỏng bằng phương pháp MD có một số tập hợp: NVE, NVT, NPH, NTP, μ TV và μ TP.

Trong đó: N: số hạt, E: năng lượng toàn phần, V: thể tích, T: nhiệt độ, P: áp suất, H: entanpy và μ : thế hoá học.

Từ đó ta có các mô hình MD ứng với các tập hợp trên, ví dụ như ứng với tập hợp vi chính tắc trong nhiệt động lực học ta có mô hình NVE trong đó các đại lượng N, V và E được giữ không đổi, hay tương ứng với tập hợp chính tắc NVT ta có mô hình NVT trong đó N, V và T được giữ không đổi.

Trên thực tế mô hình NVE được cô lập với bên ngoài nhờ một bức tường cách nhiệt để giữ N, V, E không đổi, mô hình NPH tiếp xúc với một bể điều áp bởi một pittông để điều chỉnh áp suất của hệ, giữ áp suất của hệ thống không đổi. Mô hình NVT tiếp xúc với bể điều nhiệt thông qua tường truyền nhiệt để điều chỉnh nhiệt độ của hệ từ đó giữ nhiệt độ của mô hình không đổi. Mô hình NPT tiếp xúc với bể điều nhiệt và điều áp để điều chỉnh áp suất và nhiệt độ, giữ áp suất và nhiệt độ của hệ không đổi. Tất cả các mô hình trên đều được cách nhiệt với bên ngoài bằng một tường cách nhiệt.

Về mặt thuật toán ví dụ với mô hình NVT nhiệt độ được điều chỉnh không đổi thông qua đại lượng s như sau:

Đầu tiên tọa độ và vận tốc của hạt thứ i ở thời điểm $(t + \Delta t)$ và $(t + \frac{1}{2} \Delta t)$ được xác định bởi công thức sau:

$$x_i(t + \Delta t) = x_i(t) + v_i^* \left(t + \frac{\Delta t}{2} \right) \cdot \Delta t \quad (1.21)$$

$$v_i \left(t + \frac{\Delta t}{2} \right) = v_i \left(t - \frac{\Delta t}{2} \right) + \frac{F_i(t)}{m_i} \cdot \Delta t \quad (1.22)$$

Đại lượng đặc v_i^* trong biểu thức được xác định như sau:

$$v_i^* \left(t + \frac{\Delta t}{2} \right) = v_i \left(t + \frac{\Delta t}{2} \right) \cdot s \quad (1.23)$$

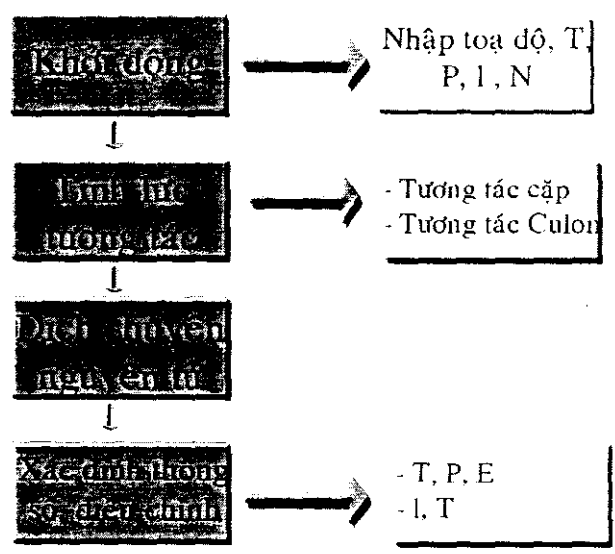
$$\text{với } \sum_i \frac{m_i v_i^2 \left(t + \frac{\Delta t}{2} \right)}{2} \cdot s^2 = \frac{3}{2} nkT \quad (1.24)$$

trong đó n là số hạt trong mô hình, k là hằng số Bonzman, T là nhiệt độ của mô hình.

Như vậy sau mỗi bước thời gian s được xác định với T không đổi. Sau đó vận tốc của hạt thứ i thay đổi từ v_i thành v_i^* sau đó v_i^* được sử dụng để xác định toạ độ mới, điều đó có nghĩa là ta đã điều chỉnh nhiệt độ T thông qua điều chỉnh vận tốc.

4.1.3 Ứng dụng chương trình MD song song mô phỏng mẫu Al_2O_3 lỏng

Tiến hành xây dựng chương trình MD song song mô phỏng mẫu Al_2O_3 lỏng gồm 3000 nguyên tử ở 2663K.



Hình 4-1 Sơ đồ khối chương trình MD đơn

Trong bài toán đơn phần tính toán phức tạp và có khối lượng lớn tính toán là khâu tính lực, do đó lựa chọn phân rã bài toán đơn theo hướng phân chia khâu tính lực cho các máy. Từ sơ đồ khối của chương trình MD, ta tiến hành song song hoá bài toán với sơ đồ khối song song.

Trong đó :

- KD : Khởi động giống như phần MD đơn.
- L : Tính lực trong giới hạn công việc được chia.



Hình 4-2 Sơ đồ khối chương trình MD song song

Khảo sát chương trình với 50 bước so với chương trình đơn, thu được kết quả trung bình sau 5 lần và hiệu năng của hệ thống 8 máy tính được trình bày trong bảng 4.1.

Máy đơn	Song song (8 máy)	Hiệu năng (lần)
565 (s)	150 (s)	$565/150 = 3,76$

Bảng 4-1 Hiệu năng tính toán của hệ thống 8 máy tính

Khảo sát phân chia khối lượng tính toán cho 7 nút trạm, ta thu được tỷ lệ phân chia tối ưu để thời gian tính thực trên các máy là gần tương đương nhau (giảm thiểu thời gian chờ đợi giữa các nút tính toán):

Tương ứng với các nút, ta có tỷ lệ khối lượng chia như sau :

$$241 - 242 - 253 - 317 - 310 - 489 - 1088. \quad (3.1)$$

Thời gian tính toán trên các nút dao động trong khoảng 80 (s).

Kết quả này không mâu thuẫn với kết luận trong phần khảo sát chuỗi : Với hệ thống máy tính có cấu hình tương đương nhau, phân chia công việc đồng đều là tối ưu. Trong tỷ lệ chia (3.1) thực chất đây không phải số phần tử tính toán của mỗi nút. Mà chỉ là số nguyên tử trong mẫu mà mỗi nút đảm nhiệm tính toán. Do số phép tính lực được xác định như sau:

```
for ( i=cận 1 ; i < cận 2; i++; )
```

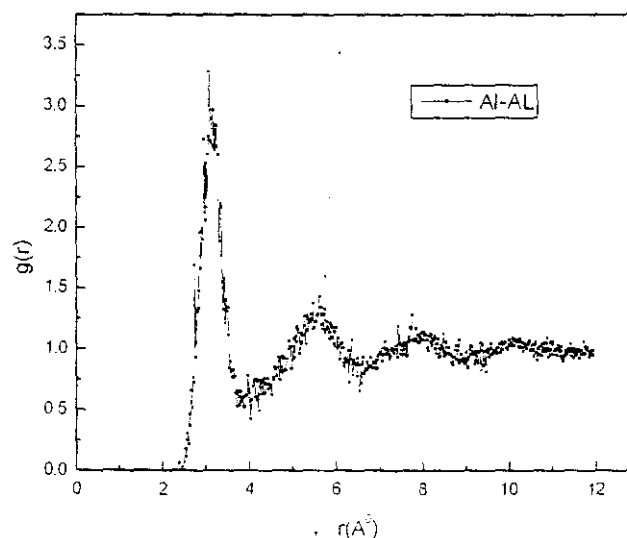
```
for( j=i+1; j< n ; j ++)
```

```
{ Tính lực}
```

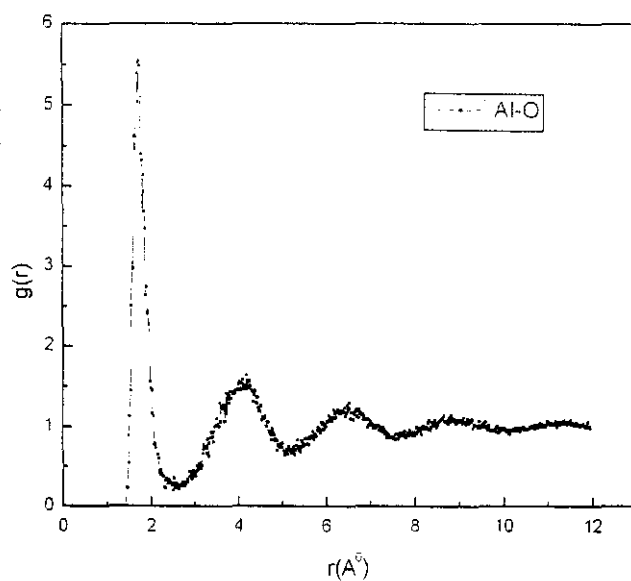
Kết quả đoạn chia (3.1) có được do sử dụng một chương trình tính toán ra số đoạn chia tối ưu với điều kiện là số phép tính thực của mỗi nút tính toán là tương đương nhau.

Tiến hành khảo sát mẫu ta thu được một số kết quả :

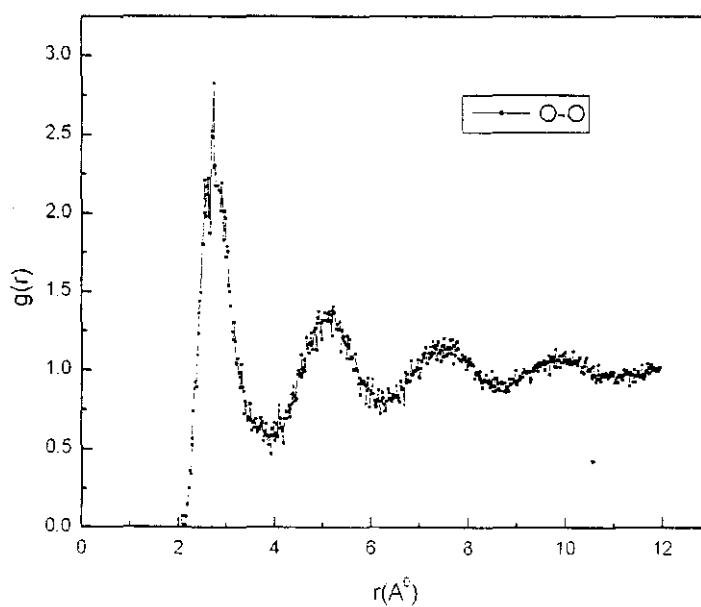
Hàm phân bố xuyên tâm (PBXT) :



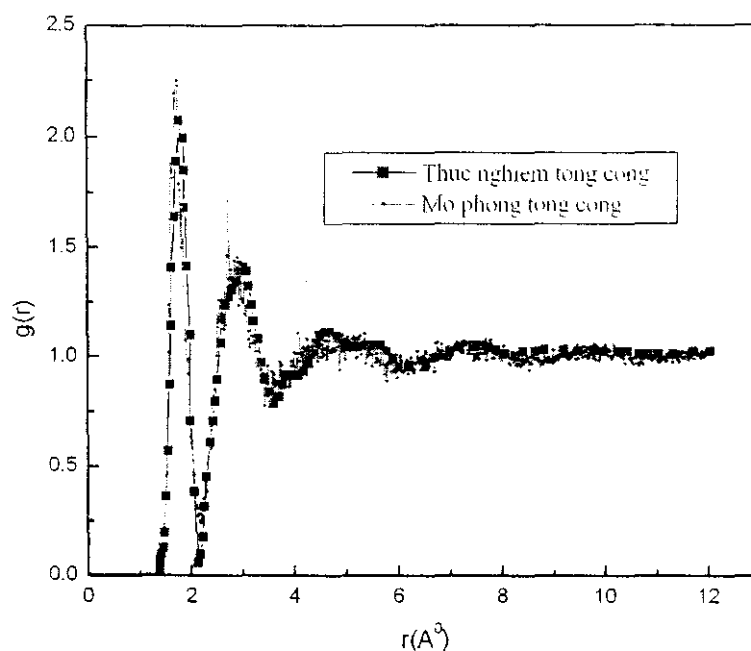
Hình 4-3 Hàm phân bố xuyên tâm Al-AL



Hình 4-4 Hàm phân bố xuyên tâm Al-O



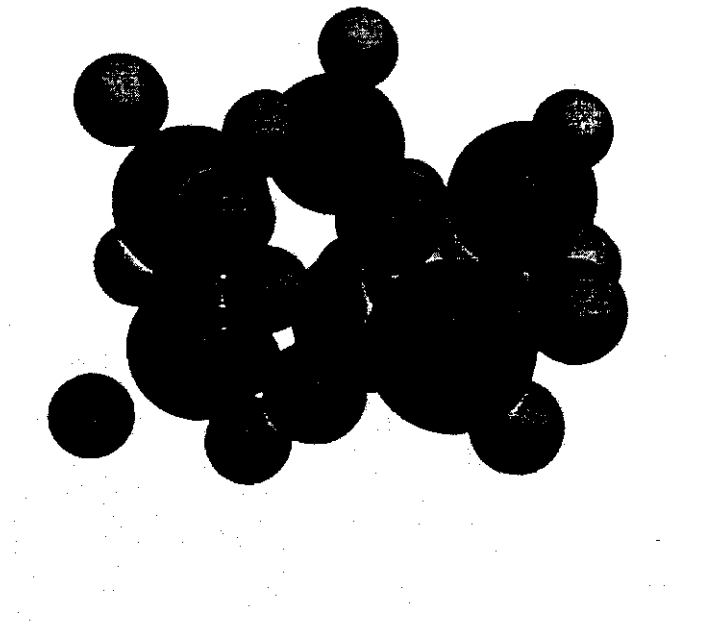
Hình 4-5 Hàm phân bố xuyên tâm O-O



Hình 4-6 Hàm phân bố xuyên tâm tổng cộng mô phỏng và thực nghiệm nhiễu xạ tia X

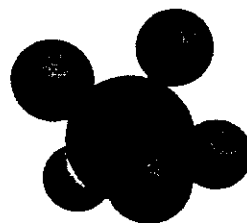
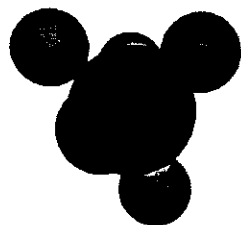
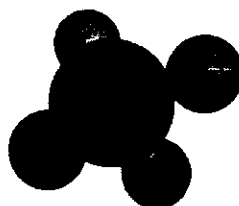
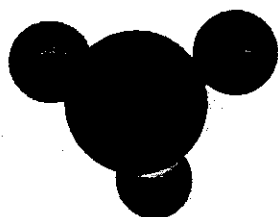
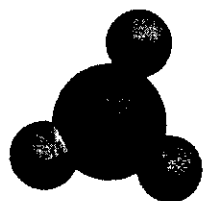
Qua so sánh đồ thị thực nghiệm nhiễu xạ tia X và mô phỏng, có thể đánh giá kết quả thực nghiệm phù hợp tương đối tốt với thực nghiệm.

Hình ảnh cấu trúc địa phương (trật tự gần) của mẫu Al_2O_3 lỏng được trình bày trong hình 4.7 (trong đó các quả cầu màu xanh mô tả nguyên tử Al, các quả cầu màu đỏ mô tả nguyên tử O) được dựng nên từ tọa độ các nguyên tử trong mẫu mô phỏng được, giữa tâm là một nguyên tử Al, tiếp theo là các lớp nguyên tử O rồi đến Al và lớp ngoài là O.

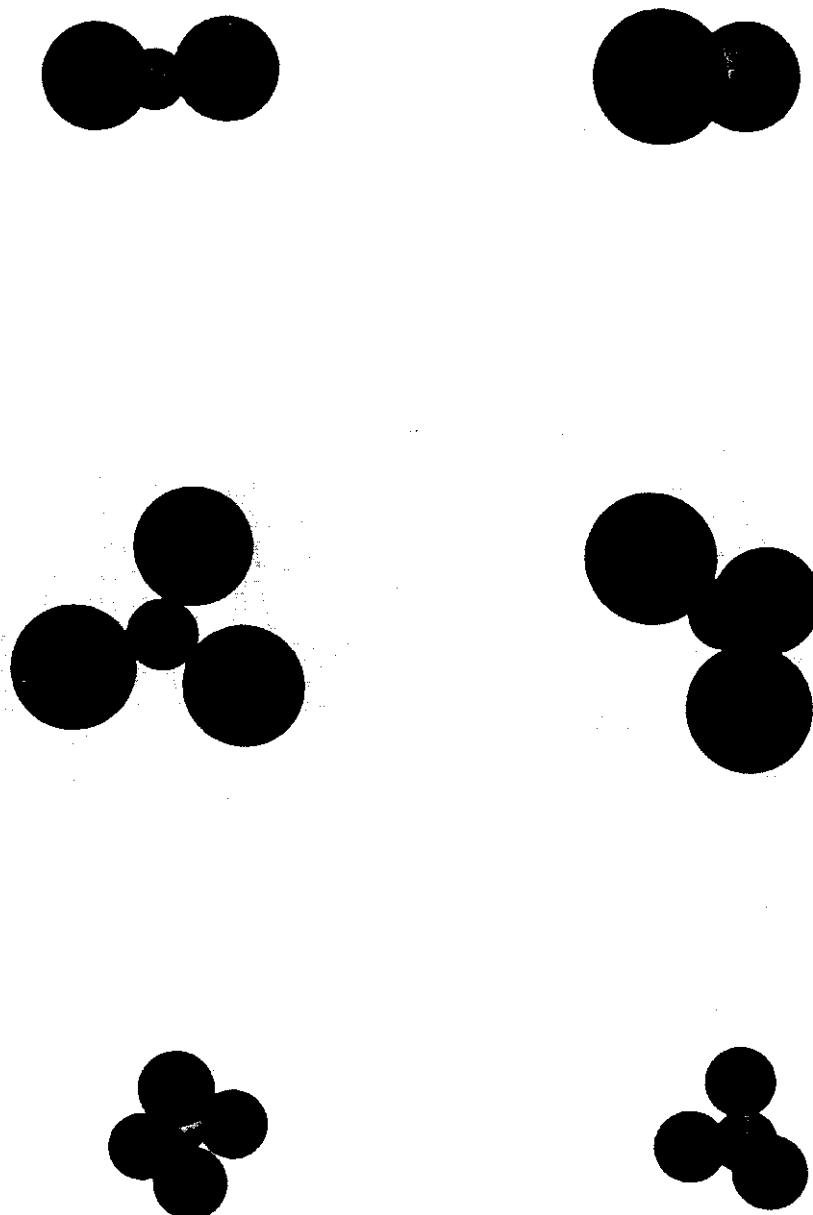


Hình 4-7 Cấu trúc địa phương của mẫu Al_2O_3 lỏng

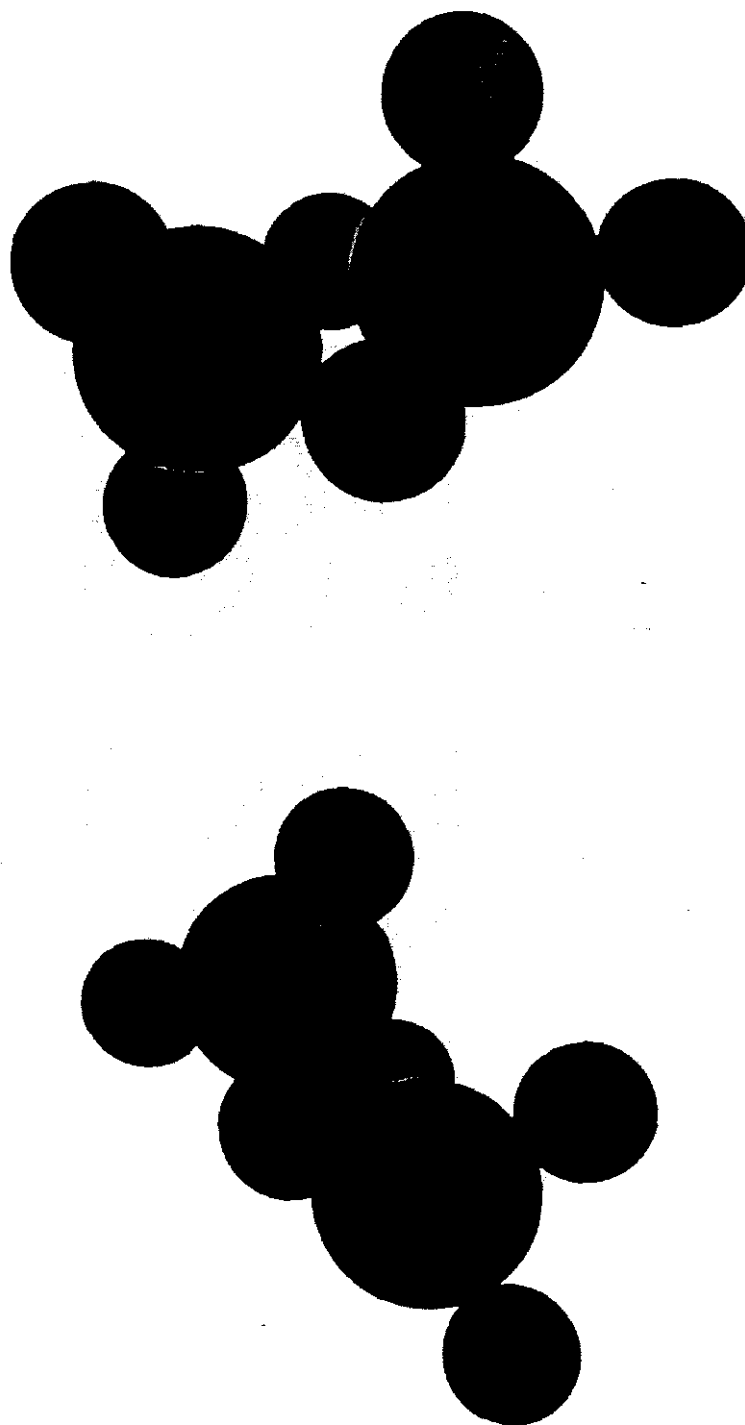
Bên cạnh đó, từ kết quả mô phỏng còn thu được topology của các cụm AlO_3 , AlO_4 , AlO_4 và các cụm Al_2O , Al_3O , Al_4O được trình bày trong hình Hình 4-8 và Hình 4-9. Liên kết $\text{Al} - \text{O} - \text{Al}$ được mô tả trong hình 3.15, giữa hai nguyên tử Al có hai nguyên tử O chung. Phân bố lỗ hổng (cav) trong mẫu nhìn theo các góc khác nhau được trình bày trong hình 3.16, trong đó các quả cầu màu vàng mô tả các lỗ hổng trong mẫu.



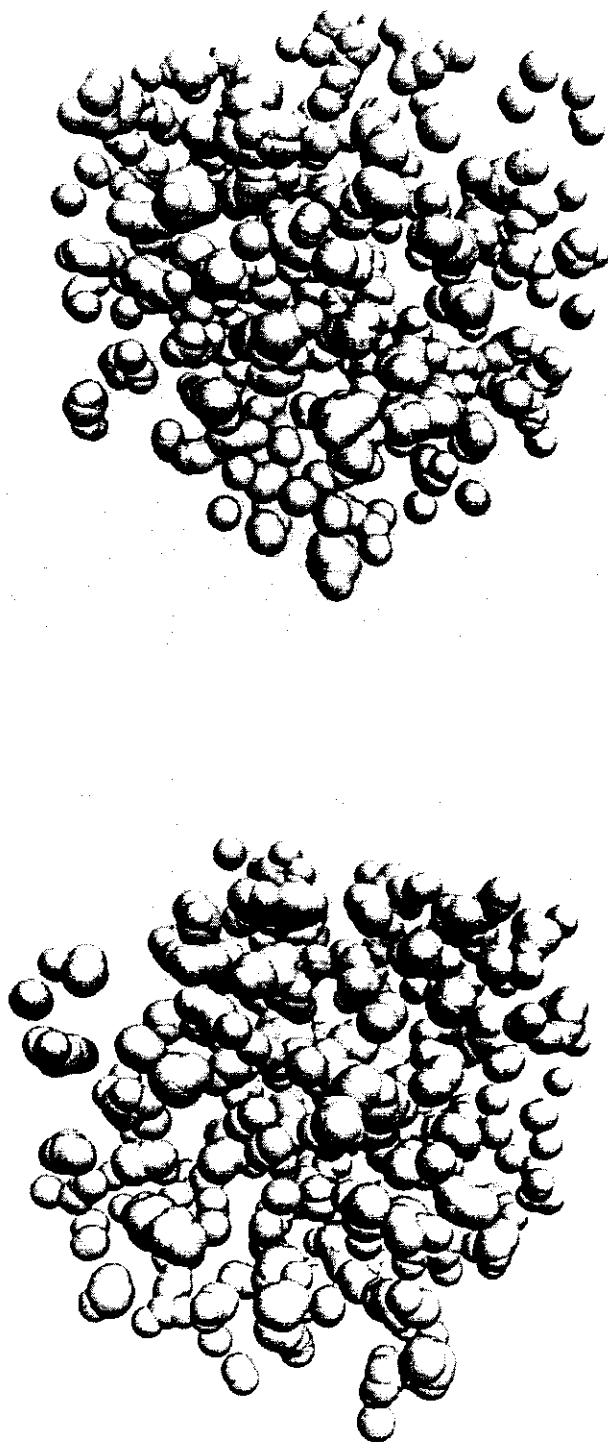
Hình 4-8 Topology của các cụm AlO_3 , AlO_4 , AlO_5



Hình 4-9 Topology của các cụm Al_2O , Al_3O , Al_4O



Hình 4-10 Liên kết Al – O -Al



Hình 4-11 Phân bố cav

4.1.4 Kết Luận

Nhóm nghiên cứu đã nghiên cứu và tìm hiểu kỹ thuật tính toán song song trên mạng LAN trong môi trường MPI, đồng thời xây dựng thành công chương trình động lực học phân tử song song (đây là chương trình động lực học phân tử song song đầu tiên ở Việt Nam) trong môi trường MPI. Kết quả thực hiện chương trình trên mạng LAN gồm 8 máy cho thấy thời gian tính toán giảm xuống 4 lần so với mô phỏng trên một máy đơn.

Mô hình Al_2O_3 lỏng gồm 3000 nguyên tử mô phỏng trên mạng LAN 8 máy cho kết quả hàm phân bố xuyên tâm phù hợp tốt với thực nghiệm nhiễu xạ tia X. Mô hình này đã cho phép khảo sát cấu trúc; Topology của các cụm AlO_3 , AlO_4 , AlO_5 , Al_2O , Al_3O , Al_4O , liên kết $\text{Al} - \text{O} - \text{Al}$, phân bố các lỗ hổng trong mô hình.

Chương trình MD cho phép mô phỏng hệ xỉ với số lượng nguyên tử tham gia bất kỳ (số nguyên). Với 3000 nguyên tử, chương trình MD cho phép mô phỏng tốt các hệ xỉ hai nguyên (Al-O, Co-B, Si-O...). Do hạn chế về hiệu năng tính toán của hệ thống hiện tại, chương trình chưa thể chạy các bài toán cỡ 50000 nguyên tử. Với cỡ 50000 nguyên tử, MD hoàn toàn cho phép mô phỏng các hệ xỉ 5 nguyên.

4.2 Mô phỏng chấm lượng tử, dây lượng tử và giếng lượng tử

4.2.1 Mở đầu

Hơn một thập kỷ qua, vật liệu $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ được quan tâm nghiên cứu tại nhiều phòng thí nghiệm bởi những ứng dụng rộng rãi của chúng trong việc chế tạo các linh kiện quang điện tử. Phần lớn các nghiên cứu tập trung vào các hợp kim giàu Ga bởi chúng được sử dụng làm các lớp hoạt động trong các phát xạ diodes và laser có bước sóng trong dải blue và green. Các công trình nghiên cứu đã chỉ ra độ rộng năng lượng vùng cấm của $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ thay đổi trong một phổ rất rộng. Năng lượng vùng cấm có thể thay đổi từ giá trị của GaN là 3,4eV tới giá trị của $\text{In}_{0,4}\text{Ga}_{0,6}\text{N}$ là 2,3eV². Một loạt các công trình công bố ban đầu

đều chỉ ra giá trị năng lượng vùng cấm của InN là 1,9eV. Với độ rộng năng lượng vùng cấm này, giá trị thông số cong thu được là tương đối lớn.

Hiện nay, các thí nghiệm trên kỹ thuật tạo lớp epitaxi đã chỉ ra rằng tồn tại tinh thể InN có mật độ điện tử thấp và độ linh động điện tử rất cao. Các thí nghiệm này cho thấy lớp InN có cường độ quang hoá (Photoluminescence-PL) tại giá trị năng lượng xấp xỉ 0,8eV ở nhiệt độ phòng. Các đặc trưng chuyển tiếp cũng được quan sát tại giá trị năng lượng trên. Do đó, độ rộng năng lượng vùng cấm của InN được xác định trong khoảng 0,8eV. Ngoài ra, các thí nghiệm cũng được tiến hành với các hợp kim $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ giàu In.

Nhóm nghiên cứu đã sử dụng Phương Pháp Giả Thế (Semi-Empirical Pseudopotential Method – SEPM) để tính toán các cấu trúc điện của vật liệu $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. Ở đây, nhóm nghiên cứu sử dụng phương pháp giả thể thực nghiệm có hiệu chỉnh thừa số hình thể để tái tạo các đặc trưng dải năng lượng sao cho phù hợp với giá trị thực nghiệm và các tính toán bằng phương pháp nguyên lý ban đầu. Thông số cong cho vật liệu $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ hiện vẫn đang được tranh luận, và chúng tôi thảo luận vấn đề này trong phần tiếp theo.

4.2.2 Phương pháp tính toán

Cấu trúc Wurtzite của vật liệu hợp kim $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ thuộc nhóm C_{6v}^4 . Chúng ta xem xét hai thông số mạng của vật liệu này là a và c . Các hằng số mạng của hợp kim ba nguyên thuộc nhóm III-V thường biến đổi tuyến tính với thành phần theo luật Vegard:

$$a(x) = a_{\text{InN}} \cdot x + a_{\text{GaN}} \cdot (1 - x)$$

$$c(x) = c_{\text{InN}} \cdot x + c_{\text{GaN}} \cdot (1 - x)$$

Trong đó các hằng số mạng của InN và GaN lần lượt là $a_{\text{InN}}=3,54\text{\AA}$, $c_{\text{InN}}=5,70\text{\AA}$ và $a_{\text{GaN}}=3,189\text{\AA}$, $c_{\text{GaN}}=5,185\text{\AA}$. Hằng số nội cấu trúc u của trúc Wurtzite ($=0,3768$ đối với GaN và $=0,3790$ đối với InN) mô tả sự dịch chuyển mạng con của nhóm III và nhóm V theo hướng c . Đối với nhóm C_{6v}^4 , vị trí của các nguyên tử Ga(In) và N như sau: Ga(In), $(0, 0, 0)$, $(1/3, 2/3, 1/2)$; N, $(0, 0, u)$, $(1/3, 2/3, 1/2+u)$.

Các thừa số hình thể đối xứng V^S và bất đối xứng V^A của vật liệu $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ tại mỗi điểm được xác định bởi vectơ mạng đảo G có thể nhận được:

$$V_{\text{InGa}}^S(G) = V_{\text{InN}}^S(G) \cdot x + V_{\text{GaN}}^S(G) \cdot (1-x) + P_{\text{GaN-InN}}^S(x) \cdot x \cdot (1-x)$$

$$V_{\text{InGa}}^A(G) = V_{\text{InN}}^A(G) \cdot x + V_{\text{GaN}}^A(G) \cdot (1-x) + P_{\text{GaN-InN}}^A(x) \cdot x \cdot (1-x)$$

Ở đây, hàm $P_{\text{GaN-InN}}(x)$ ($=P_{\text{GaN-InN}}^S(x)=P_{\text{GaN-InN}}^A(x)$) nhận bằng cách tái tạo lại năng lượng vùng cấm. Phương pháp giả thể được sử dụng với sự hiệu chỉnh giả thể thừa số hình thể để nhận năng lượng vùng cấm, các đặc điểm dải năng lượng vùng hoá trị phù hợp với các giá trị thực nghiệm hiện tại và các tính toán bằng nguyên lý ban đầu. Chúng tôi đã tái tạo lại chính xác năng lượng vùng cấm tại điểm Γ để tính các giá trị tin cậy trên vùng dẫn cũng như ước lượng năng lượng vùng cấm tại các điểm đối xứng khác.

4.2.3 Các kết quả tính toán và nhận xét

Giả thể Hamilton với sự hiệu chỉnh các giả thể hình thể đối xứng và bất đối xứng được sử dụng để nhận được các đặc tính mong muốn tại các điểm đối xứng. Các giả thể hình thể đối xứng và bất đối xứng đã hiệu chỉnh trên Bảng 4-2 được dùng để xác định cấu trúc dải điện tử theo các lưới điểm dọc đường đối xứng của vùng Brillouin. Độ rộng vùng cấm của GaN được hiệu chỉnh xấp xỉ 3,5 eV, và của InN được hiệu chỉnh xấp xỉ 0,78 eV phù hợp với các giá trị thực nghiệm. Trên Hình 4-12 là cấu trúc dải năng lượng của InN. Đáy vùng năng lượng hoá trị của InN là -6,9 eV, giá trị này lớn hơn một chút so với một số tính toán trước đây (dao động từ -5,8÷-6,8 eV), nhưng nó xấp xỉ với giá trị -6,8eV được tính toán bằng phương pháp nguyên lý ban đầu – phương pháp cho giá trị chính xác về cấu trúc năng lượng vùng hoá trị.

Vật liệu $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ có dao động rất mạnh đối với vùng giàu GaN. Hàm số $P(x)=P_{\text{InN-GaN}}(x)$ có thể chỉ ra sự dao động của vật liệu này. Chúng tôi đã tìm ra hàm số $P(x)$ có dạng như trên Hình 4-13. Sự dao động mạnh xảy ra với thành phần giàu Ga ($x<0,5$), còn khi hợp kim giàu In ($x>0,5$) thì sự dao động tương đối ổn định.

$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ có vùng cấm chuyển tiếp thẳng trên mọi thành phần của hợp chất. Độ rộng năng lượng vùng cấm có thể mô tả theo thành phần có dạng:

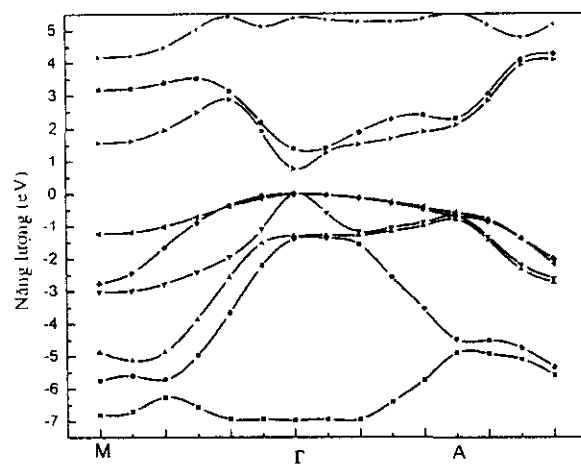
$$E_g(x)=3,45 \cdot x \cdot (1-x)+0,78 \cdot x-1,52 \cdot x \cdot (1-x)$$

Thông số cong b (bowing parameter) tìm được ở đây $b=1,52$ eV, giá trị này là nhỏ so với một số giá trị $b=\{4,8; 3,5; 3,2\}$ eV và gần với giá trị $b=1,43$ eV. Trên Hình 4-14 chỉ ra rằng độ rộng năng lượng vùng cấm của hợp chất ba nguyên này có một vùng phổ rộng bao trùm từ vùng hồng ngoại xấp xỉ $\lambda=1,6\mu\text{m}$ tới vùng cực tím $\lambda=0,36\mu\text{m}$.

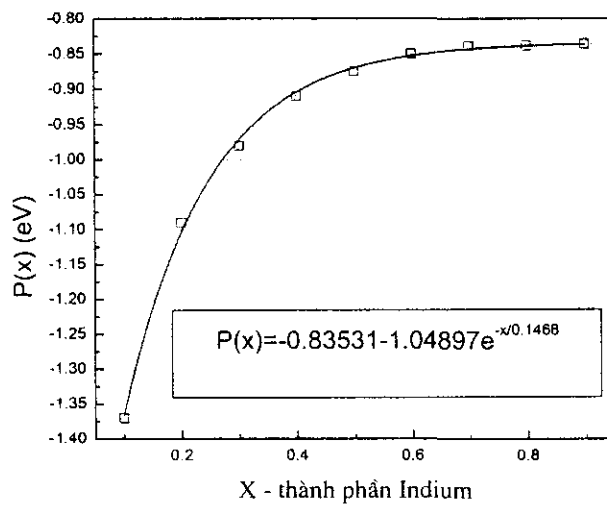
Trên Bảng 4-3 là khối lượng hiệu dụng của hợp chất $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ được tính toán bằng cách làm khít với đường cong parabol tại điểm đối xứng trung tâm. Các giá trị khối lượng này gần như là giảm tuyến tính theo thành phần của Ga. Khối lượng hiệu dụng tính toán cho GaN và InN ở đây phù hợp với các giá trị thực nghiệm và các tính toán khác.

$ G ^2$ ($2\pi/a$)	$ S^S(G) $	$ S^A(G) $	GaN		InN	
			$V^S(G)$	$V^A(G)$	$V^S(G)$	$V^A(G)$
0	1	0	0.000	0.000	0.000	0.000
3/8	0	0	0.000	0.000	0.000	0.000
1 1/3	0.50	0	-0.384	0.000	-0.368	0.000
1 1/2	0.71	0.71	-0.360	0.286	-0.211	0.173
1 17/24	0.33	0.80	-0.290	0.233	-0.180	0.144
2 5/6	0.35	0.35	-0.055	0.114	-0.033	0.098
3 3/8	0	0	0.000	0.000	0.000	0.000
4	1	0	0.061	0.000	0.036	0.000
4 3/8	0	0	0.000	0.000	0.000	0.000
4 17/24	0.80	0.33	0.086	0.053	0.046	0.027
5 1/3	0.50	0	0.058	0.000	0.037	0.000
5 1/2	0.71	0.71	0.068	0.037	0.037	0.024
5 17/24	0.33	0.80	0.069	0.034	0.030	0.017
6	0	1	0.000	0.007	0.000	0.010
6 5/6	0.35	0.35	0.022	0.005	-0.005	0.013
7 1/3	0	0.50	0.000	0.000	0.000	-0.050

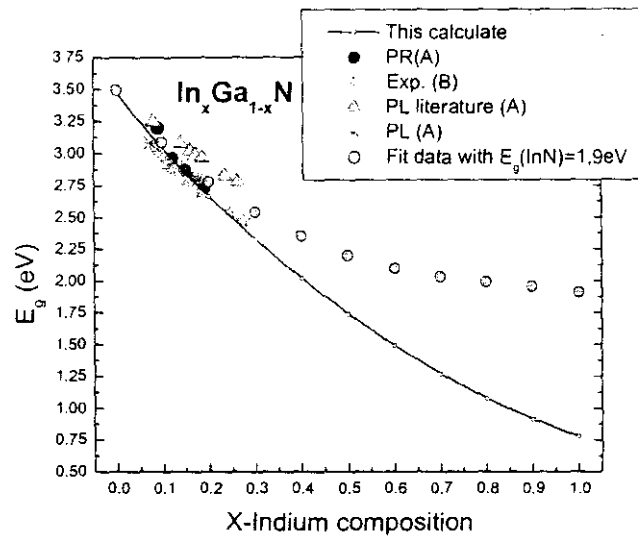
Bảng 4-2 Vectơ mạng đảo, thừa số cấu trúc, và thừa số hình thể của mạng Wurtzite (đơn vị Ryd.)



Hình 4-12 Cấu trúc dải năng lượng của InN dọc theo đường đối xứng của vùng Brillouin thứ nhất.



Hình 4-13 Sự phụ thuộc giữa hàm $P(x)=P_{\text{InN-GaN}}(x)$ và thành phần In



Hình 4-14 Độ rộng năng lượng vùng cấm đối với thành phần In của $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$; A(12) B(11).

	$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$										
X	0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1
$m_e(m_0)$	0,26	0,25	0,23	0,21	0,20	0,17	0,16	0,15	0,14	0,11	0,09
$m_{hh}(m_0)$	4,05	3,88	3,70	3,51	3,32	3,12	2,95	2,77	2,60	2,42	2,25
$m_{lh}(m_0)$	0,22	0,21	0,19	0,18	0,17	0,15	0,13	0,12	0,10	0,09	0,08

Bảng 4-3 Khối lượng điện tử và lỗ trống hiệu dụng của hợp chất $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$.

4.2.4 Kết Luận

Phương pháp giả thế với các thừa số hình thể được tái tạo lại tại các điểm đối xứng trong vùng Brillouin thứ nhất để nhận được các cấu trúc dải năng lượng của hợp chất ba nguyên $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. Hàm $P(x)$ được tính toán cho thấy sự dao động mạnh trong vùng giàu Ga của hợp chất này. Thông số cong của năng lượng vùng cấm nhỏ $b=1,52$ chỉ ra rằng sự phụ thuộc năng lượng vùng cấm vào các thành phần hợp chất gần với sự tuyến tính hơn, và năng lượng vùng cấm này nằm trong một phổ rất rộng từ 0,778eV đến 3,45eV. Các thông số đưa ra ở đây là hữu dụng cho các nghiên cứu về cấu trúc ít chiều của hợp chất $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ đồng thời Những kết quả thu được cũng cho phép khảo sát giếng lượng tử, dây lượng tử và chấm lượng tử đối với các hợp kim thuộc họ InGaN.

Tài liệu tham khảo

- [1] Linux tiếp cận và thực hành – Bộ môn VLTH & TT Công nghệ thông tin bộ y tế – 2003
- [2] Giáo trình mô phỏng vật lý – PGS.TSKH Phạm Khắc Hùng – Bộ môn VLTH - ĐHBK- HN, 2005.
- [3] Mô phỏng vật lý – Võ Văn Hoàng – NXB ĐHQG TP HCM, 2002.
- [4] Vo Van Hoang and Suhk Kun Oh – Physical review E 70, 061203(2004)
- [5] Vo Van Hoang - Physical review B 70 , 134204 (2004)
- [6] Gonzalo Guti rrez - Physical review E 69 , 031201 (2004)
- [7] VinhLV, HungPK, Study of electronic band structures, effective-mass parameters, and gap bowing of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ materials, Proceeding of Seventh German-Vietnamese Seminar on Physics and Engineering, Halong City, April 2004
- [8] VinhLV, AnhLH, HungPK, The Study of material parameters of a ternary compound $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. The second international workshop on Nanophysics and Nanotechnology (IWONN'04)
- [9] Quản trị hệ thống Linux - Nguyễn Thanh Thủy, Lê Quân, Ngô Hồng Sơn, Trương Diệu Linh – NXB KHKT 2000
- [10] <http://www-unix.mcs.anl.gov/mpi/tutorial/mpiintro/>
- [11] <http://www.llnl.gov/computing/tutorials/workshops/workshop/mpi/>
- [12] <http://www.tldp.org/LDP/intro-linux/html/>
- [13] <http://www.linux.org/>
- [14] <http://www.vnn.vn/cntt/thegioiso/2004/07/176148/>
- [15] <http://www.mpi-forum.org>
- [16] <http://webct.ncsa.uiuc.edu:8900/public/MPI/>