

# Teilprojekt

## C7

Zweistufige Parallelisierung eines Bandstrukturprogramms  
und massiv parallele Anwendung auf  
Amorphisierungsphänomene an inneren Grenzflächen



## 2.1 Teilprojekt C7

Zweistufige Parallelisierung eines Bandstrukturprogramms und massiv parallele Anwendung auf Amorphisierungsphänomene an inneren Grenzflächen

### 2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. Michael Schreiber  
22.04.1954

Professur Theoretische Physik III  
(Theorie ungeordneter Systeme)  
Fakultät für Physik  
Technische Universität Chemnitz  
09107 Chemnitz  
Tel.: (0371) 531-3142  
Fax: (0371) 531-3143  
schreiber@physik.tu-chemnitz.de

Dr. Sibylle Gemming  
25.08.1968

Institut für Physikalische Chemie  
und Elektrochemie  
Fakultät für Naturwissenschaften  
Technische Universität Dresden  
01062 Dresden  
(0351) 463-39449  
(0351) 463-35953  
sibylle.gemming@chemie.tu-dresden.de

Prof. Schreiber war von Februar 2002 bis Januar 2003 beurlaubt, um eine Professur an der International University Bremen wahrzunehmen.

Dr. Sibylle Gemming (geb. Köstlmeier) war von August 2001 bis März 2002 sowie von Oktober 2002 bis September 2003 in Mutterschutz bzw. Elternzeit. Seit Januar 2004 ist sie an der Technischen Universität Dresden beschäftigt. Sie hat ihre Habilitation im Mai 2004 an der Technischen Universität Chemnitz eingereicht.

### 2.1.2 Projektbearbeiter

Dr. Igor Chaplygin (04/02–07/03)  
Dr. Rebecca Janisch (09/03–12/03)

## 2.2 Ausgangsfragestellung / Einleitung

Gegenstand des Teilprojekts ist die Untersuchung von Strukturbildungs- und Amorphisierungsvorgängen an Metall-Halbleiter-Grenzflächen mit Hilfe von Dichtefunktional-Bandstruktur-Rechnungen auf einer gestuft parallelen Plattform aus mehreren *shared-memory*-Compute-Servern, die untereinander mit einem schnellen, internen Netzwerk verbunden sind. Mit drei HP 9000 N4000 Enterprise-Servern mit je 8 Prozessoren verfügt die Arbeitsgruppe über eine geeignete Testplattform, und die gegenwärtigen Entwicklungen der Computertechnik hin zu Mehrprozessor-Rechnern bestätigen daher den gewählten Ansatz. Das Teilprojekt verbindet informatisch-methodische Aspekte mit physikalischen und materialwissenschaftlichen Fragestellungen: insbesondere soll geklärt werden, wie sich die inhärente Struktur des physikalischen Problems optimal auf eine adaptive Parallelisierung für homogene Cluster aus Mehrprozessor-Rechnern abbilden lassen kann, so dass sich große Modellsysteme (mit bis zu 500 Atomen) genau und effizient behandeln lassen, was einer Steigerung aktuell behandelbarer Systemgrößen um etwa einen Faktor von 10 entspricht.

Dazu mussten die folgenden Fragen beantwortet werden: Wie kann allein durch Restrukturierung des physikalischen Problems eine ausgewogenere Lastverteilung zwischen den Clusterknoten erreicht werden? An welchen Stellen können die bereits im Sonderforschungsbereich entwickelten parallelen Routinen direkt eingesetzt werden, und wo bedürfen sie einer Anpassung? Die grundlegende Parallelisierungsstrategie war es, die Stützstellen der numerischen Brillouinonen-Integration auf verschiedene Clusterknoten zu verteilen, das mit größerem Kommunikationsaufwand verbundene Eigenwertproblem an jeder Stützstelle aber lokal auf einer *shared-memory*-Mehrprozessormaschine mit parallelen Solvern zu lösen und so eine zweistufige Parallelisierung zu erzielen. Diese Strategie sollte im Projektverlauf geprüft werden, indem auch andere, potentielle Parallelisierungsmöglichkeiten evaluiert werden sollten.

Als konkrete Anwendung des parallelen Rechnens wurde die Dichtefunktional-Bandstruktur-Untersuchung innerer Grenzflächen zwischen Silizium und Titan bzw. Vanadium geplant. Bei der Herstellung dieser Grenzflächen durch Molekularstrahlepitaxie bilden sich amorphe Bereiche, die sich zu kristallinen Polymorphen umformen. Aus diesen Beobachtungen ergaben sich folgende materialwissenschaftliche Fragestellungen, die mit Hilfe von Dichtefunktional-Rechnungen zu geeigneten Modellsystemen zu klären waren: welche strukturell stabilen, binären Silizidphasen existieren, und wie ist der Zusammenhang zwischen den gebildeten Silizid-Polymorphen und der Temperatur? Gibt es charakteristische, immer wiederkehrende lokale Strukturelemente, welche auch in amorphen Bereichen immer wieder beobachtet werden? Welche Wechselwirkungen dominieren an der Titan-Silizium-Grenzfläche vor der temperatur-induzierten Silizidbildung? Welche Wechselwirkung ist der Hauptgrund für die Bildung amorpher und/oder kristalliner Silizid-Polymorphe an der Grenzfläche? Wie beeinflusst die reaktive Phase die Grenzflächenstabilität? Und welche Auswirkungen hat sie auf die elektronischen Eigenschaften der gesamten Grenzfläche?

## 2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

Die Teilaufgaben 2.3.1 bis 2.3.3 sind verbunden mit den materialwissenschaftlichen Fragestellungen, den Dichtefunktional-Bandstruktur-Rechnungen zur Strukturbildung und Wechselwirkung an reaktiven Metall-Halbleiter-Grenzflächen. Teilaufgabe 2.3.4 ist ein Beispiel dafür, wie physikalische und informationstechnische Aspekte zur effizienten Parallelisierung kombiniert werden können. Die Teilaufgaben 2.3.5 und 2.3.6 widmen sich hingegen mehr der konkreten Programmentwicklung.

### 2.3.1 Teilaufgabe “Binäre kristalline und amorphe Modifikationen”

Der Mitarbeiter der Ergänzungsaustattung sollte sich mit Hilfe kleinerer Systeme in die physikalischen Grundlagen einarbeiten und einen Überblick über die Programmstruktur erhalten. Dazu dienten die Element-Volumenkristalle und die kristallinen Modifikationen TiSi (B27 oder AG) und V<sub>3</sub>Si (A15) mit jeweils acht Atomen in der Einheitszelle, um adäquate Pseudopotentiale und Konvergenzparameter für realistische Validierungstests bereit zu stellen. Als Validierung und als Benchmark waren auch komplexere Kristallstrukturen wie TiSi<sub>2</sub> (C54 und C49, 12 Atome), VSi<sub>2</sub> (C40, 9 Atome) und Ti<sub>5</sub>Si<sub>3</sub> oder V<sub>5</sub>Si<sub>3</sub> (D8<sub>8</sub>, 16 Atome) sowie amorphe Modifikationen zu berechnen. Dazu wer-

den - analog zum Vorgehen bei der Untersuchung von quasiperiodischen Strukturen - charakteristische Strukturelemente der amorphen Modifikation in größeren Superzellen periodisch wiederholt. Durch sukzessive Vergrößerung dieser periodischen Approximanten und durch Mittelung über verschiedene Konfigurationen sollen die Eigenschaften der ungeordneten, amorphen Struktur genähert beschrieben werden. Dabei müssen Eigenwertprobleme mit größeren Matrizen an wenigen  $k$ -Punkten gelöst werden, so dass diese Fragestellung es erlaubt, die Performance von Maschinen mit verteiltem Speicher und von *shared-memory*-Architekturen zu vergleichen.

### 2.3.2 Teilaufgabe “Ausgangsstruktur der Ti(0001)|Si(111)-Grenzfläche”

Ausgangs- und Referenzpunkte sind die Grenzflächen zwischen den Elementkristallen Si(111)/Ti(0001) und Si(111)/V(0001), sowie die Grenzflächen von Ti(0001) und V(0001) zu einer Modellstruktur für amorphes Silizium. Für diese Rechnungen werden Schichtmodelle in großen Superzellen periodisch wiederholt, und somit die Grenzflächen als unendlich ausgedehnte planare Defekte beschrieben. Da die meisten experimentell beobachteten Systeme dieses Typs die Festphasen-Amorphisierung durchlaufen, gibt es bislang wenige Daten zur Stabilität, zur lokalen geometrischen Struktur, oder zu den elektronischen Wechselwirkungen an dieser Grenzfläche. Daher müssen diese Daten aus molekularstatischen Modellrechnungen des Systems vor der Amorphisierung gewonnen werden. Neben den bereits erwähnten Aspekten geben diese Rechnungen auch Aufschluss über die Triebkraft der Strukturumwandlung. Mögliche Faktoren sind der Elektronegativitätsunterschied von Ti und Si, der eine Negativierung der Silizium-Ionen und damit eine Silizid-Bildung bevorzugt. Dem gegenüber steht die Fehlpassung der Gitterkonstanten von Silizium und Titan (oder Vanadium), welche ungünstige elastische Wechselwirkungen an der Grenzfläche induziert.

### 2.3.3 Teilaufgabe “Silizid-Bildung an der Ti(0001)|Si(111)-Grenzfläche”

Die Bildung der Niedertemperatur-Polytypen  $M_3Si$  und  $M_5Si_3$  ( $M = Ti, V$ ) kann mit Hilfe der Dichtefunktional-Molekulardynamik-Methode studiert werden. Dabei folgen die Kerne den klassischen Newton'schen Bewegungsgleichungen auf der Born-Oppenheimer-Oberfläche, die durch die quantenmechanische Wechselwirkung des Elektronensystems bestimmt ist. So kann mit Hilfe geeigneter Strukturmodelle untersucht werden, wie sich die relevanten Wechselwirkungsparameter, die Elektronegativität und die elastische Verspannung mit zunehmender Temperatur verändern, und abgewogen werden, welcher Faktor bei welcher Temperatur dominiert.

Da  $TiSi_2$  und  $VSi_2$  als Endstufe des Auslagerns im höheren Temperaturbereich (etwa 800 - 900 K) gebildet werden, sollten auch von diesen Polymorphen Grenzflächen zu Silizium bzw. zum jeweiligen Metall untersucht werden. Eine Erweiterung auf Grenzflächen mit den Niedertemperatur-Polytypen  $Ti_3Si$ ,  $V_3Si$ ,  $Ti_5Si_3$  und  $V_5Si_3$  wurde zunächst aufgrund des eng gesteckten Zeitrahmens des Teilprojekts nicht geplant, da die im Projektverlauf gesammelten Daten ausreichend sind, um aus dem Hochtemperaturverhalten auch auf den Temperaturbereich von 300 - 800 K Rückschlüsse zu erlauben.

### 2.3.4 Teilaufgabe “Verbessertes Load-Balancing der Parallelisierung über die Integrationsstützstellen”

Unter Verwendung periodischer Randbedingungen tritt bei der Berechnung der Gesamtenergie und der davon abgeleiteten Größen mit Hilfe des Kohn-Sham-Formalismus eine Integration über die erste Brillouin-Zone auf, welche durch Diskretisierung auf einem geeignet gewählten Gitter aus Integrationsstützstellen ausgewertet wird. Entscheidend ist dabei, dass hinreichend viele dieser Stützstellen, der  $k$ -Punkte, verwendet werden, und dass sie den reziproken Raum möglichst isotrop abdecken, um die Wechselwirkungen in allen drei Raumrichtungen genau und gleichmäßig zu beschreiben. Die konkrete Position dieser Stützstellen ist daher nicht direkt physikalisch motiviert, sondern bietet einen Ansatzpunkt für die Programoptimierung. In Standardverfahren für serielle Programme wurde versucht, eine optimale Integration mit möglichst wenigen dieser Stützstellen zu erreichen, da an jedem  $k$ -Punkt das zeitintensive Kohn-Sham-Eigenwertproblem gelöst werden muss. Die Wahl spezieller  $k$ -Punkte und dazu gehörender Gewichtungsfaktoren führt aber dazu, dass aus Symmetriegründen nicht an jeder Stützstelle gleich viele Basisfunktionen berücksichtigt werden müssen, so dass die Größe des Matrix-Eigenwertproblems im Extremfall an jeder Stützstelle anders ist. Bei der bislang seriell ausgeführten Berechnung stellt dies kein Problem dar, für die Verteilung der Brillouinzone-Integration auf verschiedene parallele Prozessoren ist es jedoch von Nachteil. Der Effizienzgewinn, der durch die gleichzeitige Behandlung mehrerer oder aller Stützstellen erzielt werden kann, wird in diesem Fall durch den  $k$ -Punkt mit dem größten zu lösenden Eigenwertproblem (oder der niedrigsten Symmetrie im reziproken Raum) dominiert. Für extrem heterogene parallele Architekturen kann dies ein Lösungsansatz für eine optimale Lastverteilungsstrategie sein. Für Cluster aus gleichen *shared-memory*-Maschinen muss jedoch die Rechenlast möglichst gleichmäßig auf die Clusterknoten verteilt werden. Mögliche Ansätze dafür sind Lastverteilungsalgorithmen über Taskeschlangen, wie sie im SFB entwickelt werden, oder die Wahl eines möglichst homogenen Stützstellennetzes, das noch die physikalischen Anforderungen hinsichtlich Dichte und isotroper Verteilung erfüllt.

### 2.3.5 Teilaufgabe “Parallelisierung über die Bänder”

Wie bereits in Teilaufgabe 2.3.4 beschrieben, ist an jeder der Integrationsstützstellen ein Matrix-Eigenwertproblem mit Hilfe eines Selbstkonsistenzverfahrens zu lösen, das die Gesamtenergie, die Kräfte auf die Kerne im Potential der Elektronen, aber auch das elektronische Spektrum in Kohn-Sham-Näherung liefert. Neben dem Index  $k$  für die Integrationsstützstelle tritt deshalb auch der Laufindex  $n$  auf, der die Energieeigenzustände bzw. Bänder durchzählt und die Größe des zu lösenden Eigenwertproblems bestimmt. Es bietet sich deshalb an, auch über diesen Index zu parallelisieren, wobei aufgrund des zu erwartenden hohen Kommunikationsaufwandes während des Selbstkonsistenzzyklus eine parallele Bearbeitung nur auf einer *shared-memory*-Maschine aussichtsreich erscheint.

### 2.3.6 Teilaufgabe “Alternative Parallelisierungsansätze”

Neben den beiden Parallelisierungsansätzen gibt es alternative Ansatzpunkte, insbesondere für die Parallelisierung für die *shared-memory*-Architektur. Da verschiedene Teile des physikalischen Problems im Orts- oder im Impulsraum gelöst werden, müssen die

Ergebnisse durch Fourier-Transformation miteinander verbunden werden. Deshalb ist zu prüfen, ob die lokale Parallelisierung der Fouriertransformation mit Hilfe der im SFB entwickelten parallelen Algorithmen eine bessere Effizienzsteigerung bewirkt als die Parallelisierung über den Bandindex. Eine Kombination der beiden alternativen Verfahren erscheint wegen des zusätzlichen Kommunikationsaufwandes nicht sinnvoll.

## 2.4 Ergebnisse

In der laufenden Förderperiode erfolgte die optimierende Parallelisierung des Pseudopotential-Bandstruktur-Programms, das für die Berechnung der strukturellen und elektronischen Eigenschaften der Metall-Halbleiter-Grenzflächen eingesetzt wird. So kann auch die Gitterfehlpassung, die durch die unterschiedlichen Gitterkonstanten von Titan bzw. Vanadium und Silizium an der  $M(0001)|Si(111)$ -Grenzfläche auftritt, adäquat mit großen Superzellen mit vertretbarem numerischem Aufwand modelliert werden. Dazu wurde die in den numerischen Algorithmen des Programms vorliegende mehrstufige Parallelität über die Stützstellen bei der  $k$ -Raum-Integration, über die Bänder und bei der Fouriertransformation zwischen Orts- und Impulsraum genutzt.

### 2.4.1 Teilaufgabe “Binäre kristalline und amorphe Modifikationen”

Zunächst wurden die strukturellen und elektronischen Eigenschaften der verschiedenen Silizid-Modifikationen in Analogie zu früher publizierten Daten reproduziert [g03a, g03b, gcs03a, gcs03b]. Diese Ergebnisse sind die Referenzdaten für die Berechnung der Grenzflächenstabilität sowie weiterer thermodynamischer Größen bei der grenzflächeninduzierten Silizidbildung. Sie dienen aber auch für die Parametrisierung eines einfachen tight-binding-Modells, mit dem ein schneller, qualitativer Zugang zu Approximanten für die amorphen Modifikationen und zum Hochtemperaturverhalten der Volumenkristalle erschlossen wurde [gcs04b, gcs03b, g03a, g03b, g03c]. Damit konnten mehrere Piko-sekunden lange Trajektorien für den strukturellen Phasenübergang von der elektrisch schlechter leitenden C49-Modifikation des  $TiSi_2$  zur gewünschten, gut leitenden C52-Modifikation bei erhöhten Temperaturen simuliert werden [GCS04, gcs04a, gcs04b]. Dieser Phasenübergang ist unter Parinello-Rahman-Randbedingungen mit einer geringfügigen Veränderung der Gitterparameter verbunden. Die relevanten Abschnitte der Trajektorien werden zur Zeit mit Hilfe des Dichtefunktional-Bandstrukturprogramms nachgerechnet, so dass eine Mittelwertbildung auf voller Dichtefunktional-Basis erhalten wird. Diese Arbeiten sind thematisch eingebettet in Untersuchungen zur Strukturbildung und Thermodynamik in binären Mischverbindungen. So konnte z.B. auch gezeigt werden, dass sich das Mischungsverhalten binärer Verbindungen auf der Nanometerskala grundlegend von den Verhältnissen im ausgedehnten Volumenkristall unterscheidet [GS03b, GSS04, gss04a, gss04b, gss04c, g03a]. In einem Hauptgruppen-Silizid der gleichen Stöchiometrie wie die hier relevanten Verbindungen, dem  $CaSi_2$ , wurde ferner nachgewiesen, dass sich das Zintl-Konzept der Strukturbildung auch auf Nanostrukturen übertragen lässt [GS03a, gs03a, gs03b, gs03c].

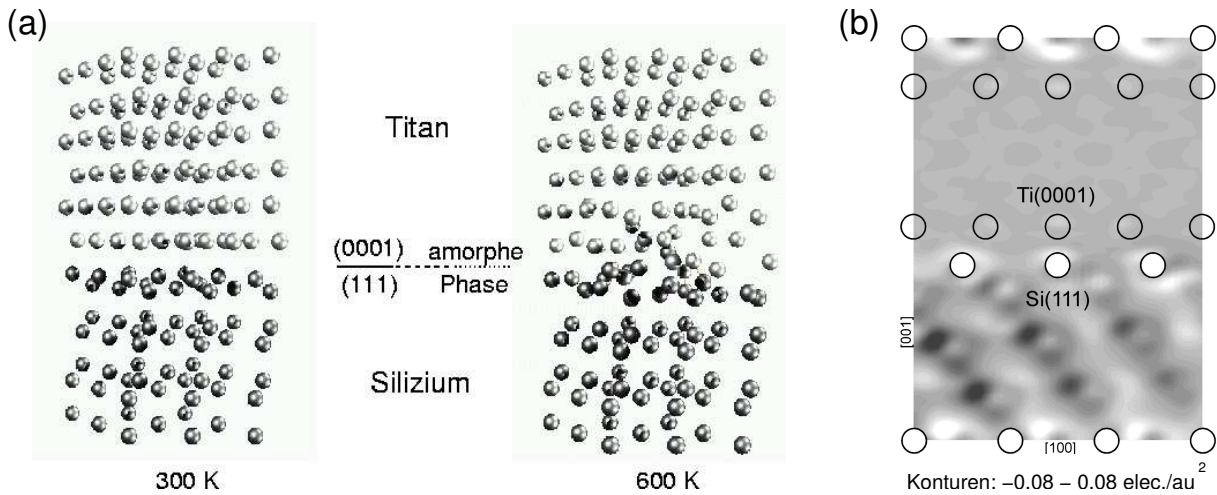


Abbildung 2.1: Das Grenzflächensystem  $\text{Ti}(0001)|\text{Si}(111)$ : (a) Schematischer Aufbau des Modellsystems und erste Schritte der temperatur-induzierten Silizidbildung. (b) Bindungsladungsdichte vor der Grenzflächenreaktion in einer Schnittebene parallel zur  $[100]$ -Richtung des Si, in der sich die meisten bindenden Titan-Silizium-Kontakte ergeben. Abgebildet ist die Differenz der Elektronendichte des Gesamtsystems, die 17 Konturlinien reichen von  $-0.08$  bis  $+0.08$   $e^-/\text{bohr}^2$ . Dunkle Bereiche entsprechen einer Elektronenverarmung, helle einer Elektronenanreicherung.

## 2.4.2 Teilaufgabe “Ausgangsstruktur der $\text{Ti}(0001)|\text{Si}(111)$ -Grenzfläche”

Darauf aufbauend wurden Dichtefunktional-Bandstruktur-Rechnungen zu Superzellen durchgeführt, welche die Grenzfläche  $\text{Ti}(0001)|\text{Si}(111)$  vor, während und nach der Silizidbildung repräsentieren. Aufgrund der Gitterfehlpassung zwischen Titan ( $a_0 = 2.95$  Å) und Silizium ( $a_0 = 3.85$  Å) beinhalten gleiche Bereiche der  $\text{Ti}(0001)$ - und  $\text{Si}(111)$ -Oberflächen eine unterschiedliche Anzahl an Atomen mit einem Verhältnis von Ti : Si von etwa 16 : 9. Deshalb wurden Superzellen gewählt, welche parallel zur Grenzfläche  $4 a_0(\text{Ti}) \approx 3 a_0(\text{Si})$  groß sind und senkrecht dazu sechs Lagen Titan und acht Lagen Silizium (in vier Doppellagen) enthalten (siehe Abbildung 2.1). Vor der Silizidbildung beträgt die Energie der reinen Grenzfläche nur  $0.28$   $\text{J}/\text{m}^2$  [GS04, gcs04a, g04, gcs03a, gcs03b, g03a]. Dies deutet darauf hin, dass die Wechselwirkung vor der Grenzflächenreaktion nur schwach attraktiv ist und von den wenigen direkten Ti-Si-Bindungen vermittelt wird. Für ein kleineres Superzell-Modell, bei dem starke expansive Kräfte auf Silizium und kontraktive Kräfte auf Titan wirken, ist das System sogar nichtbindend [gcs03b]. Diese Befunde stehen im Einklang mit früheren Dichtefunktional-Untersuchungen zur Titan-Spinell-Grenzfläche, an der ohne strukturelle Relaxation die korrosive Oxidation der Titanschicht schon für niedrige Sauerstoffgehalte ein Versagen der Grenzfläche prognostiziert wird, welches - neben elektronischen Faktoren - wie an der Titan-Silizium-Grenzfläche auf ungünstige elastische Wechselwirkungen zurückzuführen ist. [EK01, KE01, gsc03, cgs02, ge01].

Die Geometrieoptimierung der Grenzfläche führt zu einer Verbiegung der Titan-Ebene an der Grenzfläche um  $0.09$  Å. Durch diese Deformation gleichen sich die Ti-Si-Abstände



für die verschiedenen Adhäsionsplätze an der Grenzfläche einander an, so dass sie im Intervall 2.6 bis 2.7 Å liegen. Die Siliziumlage an der Grenzfläche zeigt hingegen keine signifikante Aufrauung, aber der Abstand zur darunterliegenden Siliziumlage ist um 0.21 Å vermindert. Dadurch bilden die beiden Siliziumlagen zusammen nicht mehr einen idealen Cyclohexyl-artigen Ausschnitt aus dem Diamantgitter, sondern eine leicht abgeflachte gewellte Sechseckstruktur, die auch in schichtartigen Siliziden wie  $\text{CaSi}_2$  vorliegt [GS03a]. Dadurch kommen die in den Lücken der ersten Siliziumlage stehenden Si-Atome der zweiten Lage in näheren Kontakt mit der Titanschicht und können sich an der Wechselwirkung mit dem Titan beteiligen [GS04, gcs04a, g04, gcs03a].

Die Differenz der Elektronendichte des Gesamtsystems und der der Überlagerung der Dichten der beiden einzelnen Teilschichten ist ebenfalls in Abbildung 2.1 gezeigt. Der Schnitt entlang der [100]-Richtung, in der sich die meisten Titan-Silizium-Kontakte bilden, zeigt, dass die Titanschicht von der Wechselwirkung mit dem Silizium nur im unmittelbaren Bereich der Grenzfläche betroffen ist, während in der mittleren Titanlage vollständige Abschirmung auftritt. Im halbleitenden Silizium ist die Abschirmung weniger stark, so dass die Elektronenanhäufung an den Si-Atomen der Grenzfläche (im Bild: helle Bereiche) eine etwas weiterreichende Ladungsumordnung in der darunterliegenden Schicht verursacht. Insgesamt bestätigt die Analyse der elektronischen Struktur aber eine Tendenz zur Silizidbildung durch die Elektronegativitätsunterschiede der beteiligten Komponenten [GS04, gcs04a, g04, gcs03a].

### 2.4.3 Teilaufgabe “Silizid-Bildung an der Ti(0001)|Si(111)-Grenzfläche”

Dichtefunktional-Molekulardynamik-Simulationen auf der Born-Oppenheimer-Hyperfläche zeigten ferner, dass sich an der Grenzfläche amorphe Strukturen bei Temperaturen ausbilden, bei denen die Volumenkristalle noch nicht schmelzen (siehe Abbildung 2.1). Die Grenzflächenreaktion führt zu einer Angleichung und Reduktion der Komponenten des elastischen Spannungstensors, durch den die Fehlanpassung ausgeglichen wird. Durch diesen Vorgang erhöht sich die Bindungsenergie signifikant auf 0.52 J/m<sup>2</sup>. Im Einklang mit experimentellen Befunden wurde beobachtet, dass Silizium die mobilere Spezies an der Grenzfläche ist. Vorläufige Ergebnisse für die Grenzflächen Ti—TiSi<sub>2</sub>—Si lassen darauf schließen, dass die für Kobalt berechnete Stabilisierung durch Silizidbildung auch bei Titan erfolgt [gcs04a, g04, gcs04b].

### 2.4.4 Teilaufgabe “Verbessertes Load-Balancing der Parallelisierung über die Integrationsstützstellen”

Durch den Programmablauf und die Datenstruktur bedingt, erfordert die Parallelisierung über die  $k$ -Punkte weniger Informationsaustausch zwischen parallelen Knoten als die Parallelisierung über die Bänder, die pro  $k$ -Punkt anfällt. Deshalb wurde die eingangs beschriebene Strategie verfolgt, nur die  $k$ -Punkt-Parallelisierung für Maschinen mit verteiltem Speicher vorzusehen, und für die zweite Stufe Mehrprozessor-Rechner mit gemeinsamem Speicher einzusetzen. Außerdem sollte zunächst davon ausgegangen werden, dass die verschiedenen Parallelknoten von gleichem Typ sind, so dass die Optimierung des Programms auf eine möglichst gleichmäßige Verteilung der Rechenlast hinausläuft.

Für die  $k$ -Punkt-Parallelisierung war dies auf einfache Weise möglich, indem gemäß den Arbeiten von Moreno und Soler die  $k$ -Punkt-Netze möglichst gut gleichverteilt gewählt wurden. Dabei wird eine Basistransformation der dreidimensional periodisch wiederholten Superzelle durchgeführt, so dass die dazu komplementäre Zelle im Impulsraum Basisvektoren hat, die möglichst genau ganzzahlige Vielfache einer Einheitslänge sind. Dies führt zu einem effizienten Sampling des Impulsraumes mit wenigen Stützstellen, da Wechselwirkungen in allen drei Raumrichtungen gleich gut beschrieben werden und nicht die Richtung mit dem schlechtesten Sampling die numerische Genauigkeit des Verfahrens vorgibt. Für die hier zu lösende Optimierungsaufgabe bietet das gleichverteilte Sampling aber auch noch den Vorteil, dass die Eigenwertgleichungen, die pro  $k$ -Punkt zu lösen sind, in etwa gleich große Matrizen beinhalten. Damit ist die Forderung nach einer möglichst gleichmäßigen Verteilung der Rechenlast für den Einsatz von homogenen Architekturen erfüllt. Die zusätzliche Implementation von Lastverteilungsalgorithmen ist deshalb für diese Stufe der Parallelisierung auf homogenen Rechnerclustern nicht erforderlich gewesen.

### 2.4.5 Teilaufgabe “Parallelisierung über die Bänder”

Die Parallelisierung über den Bandindex wurde vorerst zurückgestellt. Eine Analyse der Daten- und Kommunikationsstruktur zusammen mit den Projektpartnern aus der Informatik zeigte, dass die Parallelisierung der Fourier-Transformation der vielversprechendere Ansatz für die lokale Parallelisierung innerhalb eines *shared-memory*-Knotens ist.

### 2.4.6 Teilaufgabe “Alternative Parallelisierungsansätze”

Für die zweite Stufe der Parallelisierung der Fourier-Transformation werden derzeit verschiedene Algorithmen zusammen mit den Projektpartnern aus der Fakultät für Informatik erprobt.

## Literaturverzeichnis

- [EK01] C. Elsässer, S. Köstlmeier. Oxidative corrosion of adhesive interlayers. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 3:5140–5144, 2001.
- [GCS04] S. Gemming, I. Chaplygin, M. Schreiber. High-temperature behaviour of metal-semiconductor interfaces. eingereicht bei *Phys. Rev. B*.
- [GS03a] S. Gemming, G. Seifert. Nanotube Bundles from Calcium Disilicide - a DFT study. *Phys. Rev. B* 68:075416-1-7, 2003.
- [GS03b] S. Gemming, M. Schreiber. Alloying in mixed  $\text{Ag}_n\text{Au}_{1-n}$  Nanowires. *Z. Metallkd.* 75:213–218, 2003.
- [GS04] S. Gemming, M. Schreiber. Density-functional study of the  $\text{Ti}(0001)|\text{Si}(111)$  interface. eingereicht bei *J. Phys.: Condens. Matter*.
- [GSS04] S. Gemming, G. Seifert, M. Schreiber. Density-functional study of alloyed  $\text{AgAu}$  and  $\text{PdAu}$  nanowires. *Phys. Rev. B* 68:096424-1-7, 2004.

- [KE01] S. Köstlmeier, C. Elsässer. Influence of interfacial excess oxygen on the adhesion energetics at metal/oxide heterophase boundaries. *Trans. JWRI* 30:251–256, 2001.

### Beiträge zu wissenschaftlichen Veranstaltungen:

- [cgs02] I. Chaplygin, S. Gemming, M. Schreiber. Oxidation of thin Ti films. EuroConference “Interfaces”, Kloster Irsee, 08/02.
- [g02] S. Gemming. DFT for Interfaces. Seminar of the Materials Research Laboratory, U. C. Santa Barbara, Santa Barbara (CA), U.S.A., 09/02.
- [g03a] S. Gemming. Density-functional investigations for systems with reduced dimensionality. Seminar “Quantum Chemistry”, MPI-PKS Dresden, 10/03.
- [g03b] S. Gemming. Band structure calculations for novel materials. Seminar Physikalische Chemie und Elektrochemie, TU Dresden, 07/03.
- [g03c] S. Gemming. Theoretische Untersuchungen zu inneren Grenzflächen. Physikalisches Kolloquium, TU Chemnitz, 05/03.
- [g04] S. Gemming. DFT investigation of the Ti-Si heterophase boundary. Workshop “Modelling and Simulation in Molecular Systems, Mesoscopic Structures, and Material Science”, TU Chemnitz, 04/04.
- [gcs03a] S. Gemming, I. Chaplygin, M. Schreiber. Phase Formation at the Silicon-Titanium Interface. Workshop Physik-Kolloquium, Universität Chouaib Doukkali, El-Jadida, Marokko, 10/03.
- [gcs03b] S. Gemming, I. Chaplygin, M. Schreiber. Phase Transformations at the Silicon-Titanium Interface. EuroConference on Interfaces in Nanostructured Materials - Moving Interfaces, Kloster Irsee, 08/03.
- [gcs04a] S. Gemming, I. Chaplygin, M. Schreiber. Reactive Metal-Semiconductor Interfaces. 103. Bunsen-Tagung, Dresden, 05/04.
- [gcs04b] S. Gemming, I. Chaplygin, M. Schreiber. Structure and reactivity at the Titanium-Silicon interface. DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Regensburg, 03/04.
- [ge01] S. Gemming, C. Elsässer. Oxidative Corrosion of Ti-Interlayers. 100. Bunsentagung, Stuttgart, 05/01.
- [gs03a] S. Gemming, G. Seifert. DFT study of bundles from calcium disilicide. Conference on Functional Nanostructures, CFN Karlsruhe, 10/03.  
*dito*: 17th International Winterschool on the Electronic Structure of Novel Materials. Kirchberg/Tirol, Österreich, 03/03.
- [gs03b] S. Gemming, M. Schreiber. Alloying on the Nanoscale. DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Dresden, 03/03.
- [gs03c] S. Gemming, G. Seifert. Metallic MX<sub>2</sub> tubes. DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Dresden, 03/03.

- [gsc03] S. Gemming, M. Schreiber, I. Chaplygin. Initial oxidation stages in thin titanium films. DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Dresden, 03/03.
- [gss04a] S. Gemming, M. Schreiber, G. Seifert. DFT Investigation of Binary Nanostructures. 103. Bunsen-Tagung, Dresden, 05/04.
- [gss04b] S. Gemming, G. Seifert, M. Schreiber. DFT investigations of alloyed binary nanostructures. 18th International Winterschool on the Electronic Structure of Novel Materials. Kirchberg/Tirol, Österreich, 03/04.
- [gss04c] S. Gemming, G. Seifert, M. Schreiber. Density-functional study of alloyed nanowires. 13th International Winterschool on New Developments in Solid State Physics, Mauterndorf, Österreich, 03/04.

## 2.5 Offene Fragen / Ausblick

In der laufenden Förderperiode wurden die mikroskopischen Mechanismen aufgeklärt, welche zur Ausbildung amorpher und kristalliner Modifikationen an reaktiven Metall-Halbleiter-Grenzflächen führen. Diese Ergebnisse zu Struktur und Thermodynamik dienen als Ausgangspunkt für die weitergehende Untersuchung des elektronischen Transports über Metall-Halbleiter-Grenzflächen. Konkret sollen für das System Ti(0001)|Si(111) drei, teilweise komplementäre theoretische Ansätze verfolgt werden: die Dichtefunktional-Störungstheorie, mit der die Antwort des Systems auf ein externes elektrisches Feld oder auf die Verschiebung von Atompositionen berechnet werden kann, die Beschreibung der Zweiteilchen-Streuung am Grenzflächenpotential durch die Lösung der entsprechenden Bethe-Salpeter-Gleichung und ein Verfahren zur Wellenpaket-Dynamik auf den bereits berechneten Potentialhyperflächen, mit dem der Einfluss des phononischen Hintergrunds auf den Elektronentransport modelliert werden kann.

Mit diesen Untersuchungen sollen drei experimentelle Beobachtungen erklärt werden, welche für die Anwendung von frühen Übergangsmetallen als Haftvermittler an mikro- und nanoelektronischen Gold-Silizium-Kontakten von Bedeutung sind: Warum zeigt nur eine der beiden niederenergetischen kristallinen Modifikationen des  $\text{TiSi}_2$  einen geringen Kontaktwiderstand und wie verändert sich der Widerstand, wenn (pseudo-)amorphe Strukturen an der Grenzfläche vorliegen? Wie verstärken Dotieratome wie Niob den Transport über die Grenzfläche? Und wie verändert sich der Transport, wenn anstelle von Titan eine Vanadiumlage verwendet wird, bei der ebenfalls Silizidbildung erfolgt? Für Rechnungen mit der Dichtefunktional-Störungstheorie soll das Bandstrukturprogramm eingesetzt werden, dessen Parallelisierung in der laufenden Förderperiode für homogene Architekturen erfolgt ist, und dessen weitergehende Optimierung für komplexere Rechner-Architekturen in Zusammenarbeit mit den Teilprojekten aus der Informatik geplant ist. Für die anderen Ansätze sollen in der Arbeitsgruppe entwickelte, zum Teil parallele Routinen adaptiert und auf eine weitere Parallelisierbarkeit getestet werden.