

# Параллельная реализация стохастической клеточно-автоматной модели рекомбинации электронов и дырок в полупроводнике \*

А.Е. Киреева<sup>1</sup>, К.К. Сабельфельд<sup>1</sup>

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН<sup>1</sup>

Разработаны параллельные программы, реализующие стохастические клеточно-автоматные (КА) модели рекомбинации электронов и дырок в неоднородном полупроводнике в двумерном и трехмерном случаях. С помощью разработанной КА модели рекомбинации исследовано пространственно-временное распределение частиц, обнаружено и исследовано формирование макрокластеров электронов и дырок. Параллельная реализация программы позволила вычислить за приемлемое время интегральные характеристики процесса: плотности частиц и интенсивность фотолюминесценции, для большого числа различных начальных условий, а также изучить кинетику процесса рекомбинации при наличии центров рекомбинации и диффузии частиц в двумерном и трехмерном случаях.

*Ключевые слова:* рекомбинация электронов и дырок, полупроводник, фотолюминесценция, стохастический клеточный автомат, параллельная реализация.

## 1. Введение

Широкозонный полупроводник нитрид галлия ( $GaN$ ) и его твердые растворы являются одним из самых востребованных и перспективных материалов в области разработок полевых транзисторов и современной оптоэлектроники [1]. Физические свойства  $GaN$  и его соединений обеспечивают создание на их основе приборов с улучшенными значениями мощности, напряжения и тока. Для увеличения надежности и эффективности полупроводниковых приборов на основе  $GaN$ , а также для расширения области их применения, необходимо исследовать процессы, протекающие в полупроводниках, и изучать характеристики этих процессов в зависимости от параметров  $GaN$ .

В данной работе с помощью компьютерного моделирования изучается процесс рекомбинации электронов и дырок в неоднородном полупроводнике  $GaN$  для следующего случая: с помощью фемтосекундного лазера в полупроводнике создается избыток электронов и дырок, которые аннигилируют с друг другом путем туннелирования, процесс ускоряется диффузией и одновременно замедляется нерадиационной рекомбинацией электронов и дырок в дефектах (рекомбинационных центрах) [2]. В [3–6] разработана стохастическая модель взаимодействия электронов и дырок, основанная на стохастических интегродифференциальных уравнениях типа Смолуховского с учетом пространственной неоднородности, диффузии, наличия центров рекомбинации и возможности флуктуаций начальных концентраций. На основе [3,6] разработана клеточно-автоматная (КА) модель рекомбинации электронов и дырок в неоднородном полупроводнике для двумерного и трехмерного случаев.

Компьютерное моделирование процессов в полупроводнике требует использования значительных вычислительных мощностей, так как необходимо моделировать поведение большого количества частиц в объеме большого размера в течение длительного времени. Кроме того, интегральные характеристики процесса рекомбинации: плотности частиц и интенсивности фотолюминесценции, вычисляются с помощью осреднения по большому ансамблю начальных данных. Для сокращения времени КА-моделирования и вычисления интегральных характеристик процесса разработаны параллельные программы, реализующие КА-модель

\*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 14-11-00083.

рекомбинации в двумерном и трехмерном пространстве. С помощью разработанных программ изучается кинетика процесса аннигиляции электронов и дырок при наличии центров рекомбинации и диффузии частиц в двумерном и трехмерном случаях.

Статья включает в себя четыре раздела. В разделе 2 описана математическая постановка задачи, приведена система уравнений Смолуховского и формулы, описывающие асимптотическое поведение характеристик процесса рекомбинации при больших временах. Раздел 3 посвящен описанию КА-модели рекомбинации, в нем объясняются основные термины теории КА. В разделе 4 приводятся результаты распараллеливания КА-модели рекомбинации для трехмерного и двумерного случаев. В разделе 5 представлены результаты КА-моделирования рекомбинации, приведены эволюции КА и значения характеристик для различных параметров моделирования.

## 2. Математическая модель рекомбинации электронов и дырок в полупроводнике

Для описания процесса рекомбинации электронов и дырок в полупроводнике в [3, 6] предложена стохастическая модель, основанная на системе уравнений Смолуховского (1):

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \rho_n(\mathbf{r}; t)}{\partial t} &= D_n(\mathbf{r})\Delta \rho_n(\mathbf{r}; t) - \rho_n(\mathbf{r}; t) \int B(|\mathbf{x}|)\rho_p(\mathbf{r}+\mathbf{x}; t)d\mathbf{x} \\
 &\quad - \beta^d(\mathbf{r})\rho_n(\mathbf{r}; t)\rho_p(\mathbf{r}; t) - \rho_n(\mathbf{r}; t) \int b_n(|\mathbf{x}|)\rho_{N_n}(\mathbf{r}+\mathbf{x}; t)d\mathbf{x}; \\
 \frac{\partial \rho_p(\mathbf{r}; t)}{\partial t} &= D_p(\mathbf{r})\Delta \rho_p(\mathbf{r}; t) - \rho_p(\mathbf{r}; t) \int B(|\mathbf{x}|)\rho_n(\mathbf{r}+\mathbf{x}; t)d\mathbf{x} \\
 &\quad - \beta^d(\mathbf{r})\rho_p(\mathbf{r}; t)\rho_n(\mathbf{r}; t) - \rho_p(\mathbf{r}; t) \int b_p(|\mathbf{x}|)\rho_{N_p}(\mathbf{r}+\mathbf{x}; t)d\mathbf{x}; \\
 \frac{\partial \rho_{N_n}(\mathbf{r}; t)}{\partial t} &= -\rho_n(\mathbf{r}; t) \int b_n(|\mathbf{x}|)\rho_{N_n}(\mathbf{r}+\mathbf{x}; t)d\mathbf{x} + \rho_p(\mathbf{r}; t) \int b_p(|\mathbf{x}|)\rho_{N_p}(\mathbf{r}+\mathbf{x}; t)d\mathbf{x}.
 \end{aligned} \tag{1}$$

Предполагается, что в начальный момент времени электроны, дырки и рекомбинационные центры случайно распределены в  $d$ -мерном пространстве  $X$  с плотностями  $\rho_n(\mathbf{r}; t)$ ,  $\rho_p(\mathbf{r}; t)$  и  $\rho_N(\mathbf{r})$ , соответственно. Символ  $r$  обозначает пространственную координату, а  $t$  - момент времени. Рекомбинационные центры могут быть свободны, тогда они способны захватить электрон, либо заняты электроном, тогда они способны захватить дырку. Суммарная плотность рекомбинационных центров  $\rho_N(\mathbf{r}) = \rho_{N_n}(\mathbf{r}; t) + \rho_{N_p}(\mathbf{r}; t)$  в процессе моделирования остается постоянной, меняются только плотности рекомбинационных центров, свободных для электронов  $\rho_{N_n}(\mathbf{r}; t)$ , и рекомбинационных центров, свободных для дырок  $\rho_{N_p}(\mathbf{r}; t)$ .

Радиационная рекомбинация электронов и дырок осуществляется путем туннелирования со скоростью  $B(|\mathbf{x}|) = B_0 \cdot \exp(-|\mathbf{x}|/a_{np})$ , где  $|\mathbf{x}|$  - расстояние между электроном и дыркой,  $a_{np}$  - характерное расстояние взаимодействия электронов и дырок. При радиационной рекомбинации происходит выделение энергии в виде фотона. Захват электронов в свободные рекомбинационные центры происходит со скоростью  $b_n(|\mathbf{x}|) = b_{n0} \cdot \exp(-|\mathbf{x}|/a_{nN_n})$ . Аналогично, скорость захвата дырок в рекомбинационные центры, содержащие электроны, равна  $b_p(|\mathbf{x}|) = b_{p0} \cdot \exp(-|\mathbf{x}|/a_{pN_p})$ . При взаимодействии электронов и дырок в рекомбинационных центрах происходит нерадиационная рекомбинация, сопровождающаяся выделением тепловой энергии.

Электроны и дырки могут диффундировать в области с коэффициентами диффузии  $D_n(\mathbf{r})$  и  $D_p(\mathbf{r})$ . При перемещении вследствие диффузии встретившиеся электроны и дырки рекомбинируют с друг другом с коэффициентом  $\beta^3(\mathbf{r}) = 4\pi \cdot D \cdot r_0$  в трехмерном пространстве и  $\beta^2(\mathbf{r}) = 4\pi \cdot D$  в двумерном пространстве, где  $D(\mathbf{r}) = D_n(\mathbf{r}) + D_p(\mathbf{r})$  - это относительный коэффициент диффузии,  $r_0$  - радиус частицы, далее  $r_0 = 1 \text{ nm}$ .

Интенсивность фотолюминесценции в [6] вычисляется по формуле:

$$\phi(t) = \left\langle \int \frac{1}{|X|} d\mathbf{r} \int B(|\mathbf{x}|) \rho_n(\mathbf{r}; t) \rho_p(\mathbf{r} + \mathbf{x}; t) d\mathbf{x} \right\rangle, \quad (2)$$

где угловые скобки обозначают математическое ожидание по начальным распределениям частиц,  $|X|$  - размер области.

В [6] с помощью корреляционного анализа выведены формулы для асимптотического поведения плотности электронов и интенсивности фотолюминесценции при  $t \rightarrow \infty$  для двух случаев:

1. для случая чистого туннелирования, то есть радиационной рекомбинации без рекомбинационных центров и диффузии частиц:

$$\rho'_{n\_dD}(t) \sim 1/(\ln(t))^{d/2}; \quad I'_{dD}(t) \sim 1/\{t \cdot (\ln(t))^{d/2+1}\}, \quad (3)$$

2. для случая чистой диффузии, то есть радиационной рекомбинации вследствие только диффузии частиц:

$$\rho'_{n\_dD}(t) \sim 1/t^{d/4}; \quad I'_{dD}(t) \sim 1/t^{d/4+1}, \quad (4)$$

где  $d$  - размерность пространства.

Для решения системы уравнений Смолуховского (1) в [6] представлен алгоритм Монте-Карло. На основе этого метода в данной работе разработана клеточно-автоматная модель рекомбинации электронов и дырок.

### 3. Клеточно-автоматная модель рекомбинации электронов и дырок в полупроводнике

Клеточный автомат (КА) - это дискретная динамическая система, состоящая из множества клеток, плотно заполняющих  $d$ -мерное пространство [7-9]. Каждая клетка характеризуется парой значений  $(a, \mathbf{x})$ , где  $a$  - это состояние клетки,  $\mathbf{x}$  - координата клетки в пространстве  $X$ . Состояние клетки  $a \in A$ , где  $A$  - алфавит состояний, который определяется возможными состояниями моделируемой системы. Состояние клетки изменяется в соответствии с правилами переходов  $\Theta$  в зависимости от состояния самой клетки и от состояний взаимодействующих с ней клеток, которые выбираются с помощью шаблона моделирования  $T$ . Шаблон моделирования может быть фиксированным и определяться как множество соседних клеток, расположенных вокруг центральной клетки, либо это может быть множество случайных клеток, выбираемых в соответствии с заданным распределением из множества всех клеток пространства. Применение правил переходов  $\Theta(\mathbf{x})$  ко всем клеткам  $\mathbf{x} \in X$  называется итерацией. Правила переходов могут применяться к клеткам  $\mathbf{x} \in X$  в различном порядке. Этот порядок называется режимом функционирования ( $\mu$ ) КА. Для моделирования стохастических физико-химических процессов используется асинхронный режим работы КА ( $\mu = \alpha$ ), при котором правила переходов применяются к случайно выбранным клеткам клеточного массива, сразу же изменяя их состояния, таким образом, новые состояния клеток вычисляются от состояний, полученных на предыдущих и на текущей итерациях.

На основании определения КА [8] КА-модель рекомбинации электронов и дырок в полупроводнике задается в следующем виде:

$$\aleph = \langle A, X^d, \Theta, \alpha \rangle \quad (5)$$

В соответствии с математической моделью рекомбинации (1) и алгоритмом Монте-Карло [6] алфавит состояний выбирается в виде  $A = \{n, p, N_n, N_p, \emptyset\}$ , где символ  $n$  обозначает электрон,  $p$  - дырку,  $N_n$  - рекомбинационный центр свободный для электрона,  $N_p$

- рекомбинационный центр свободный для дырки,  $\emptyset$  обозначает свободное место. Множество координат  $X^d$  в двумерном случае ( $d = 2$ ) представимо в виде квадратной решетки  $X^2 = \{\mathbf{x} = (i, j), i = 1 \dots Size_i, j = 1 \dots Size_j\}$ , а в трехмерном ( $d = 3$ ) - в виде куба  $X^3 = \{\mathbf{x} = (i, j, k) i = 1 \dots Size_i, j = 1 \dots Size_j, k = 1 \dots Size_k\}$ . На множестве координат вводятся периодические граничные условия.

Правила переходов задаются в следующем виде:  $\Theta = R\{\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4, \theta_5\}$ , где символ  $R$  обозначает вероятностный выбор одного из правил  $\theta_l, l = 1, \dots, 5$ . Правила переходов  $\Theta$  моделируют процессы, происходящие в полупроводнике:  $\theta_1$  - радиационную рекомбинацию электрона и дырки,  $\theta_2$  - захват электрона в свободный рекомбинационный центр,  $\theta_3$  - захват дырки в рекомбинационный центр, содержащий электрон,  $\theta_4$  и  $\theta_5$  - диффузию электронов и дырок. Формально правила переходов записываются в виде (6):

$$\begin{aligned}
 \theta_1(\mathbf{x}) &: \{(n, \mathbf{x}), (p, \varphi(\mathbf{x}))\} \xrightarrow{p_1 \cdot \omega_1} \{(\emptyset, \mathbf{x}), (\emptyset, \varphi(\mathbf{x}))\}, \\
 \theta_2(\mathbf{x}) &: \{(n, \mathbf{x}), (N_n, \varphi(\mathbf{x}))\} \xrightarrow{p_2 \cdot \omega_2} \{(\emptyset, \mathbf{x}), (N_p, \varphi(\mathbf{x}))\}, \\
 \theta_3(\mathbf{x}) &: \{(p, \mathbf{x}), (N_p, \varphi(\mathbf{x}))\} \xrightarrow{p_3 \cdot \omega_3} \{(\emptyset, \mathbf{x}), (N_n, \varphi(\mathbf{x}))\}, \\
 \theta_4(\mathbf{x}) &: \{(n, \mathbf{x}), (a, \psi(\mathbf{x}))\} \xrightarrow{p_4 \cdot \omega_4} \{(\emptyset, \mathbf{x}), (a', \psi(\mathbf{x}))\}, \\
 \theta_5(\mathbf{x}) &: \{(p, \mathbf{x}), (b, \psi(\mathbf{x}))\} \xrightarrow{p_5 \cdot \omega_5} \{(\emptyset, \mathbf{x}), (b', \psi(\mathbf{x}))\}, \\
 a' &= \begin{cases} n, & \text{если } a = \emptyset, \\ \emptyset, & \text{если } a = p, \\ N_p, & \text{если } a = N_n, \end{cases} \quad b' = \begin{cases} p, & \text{если } b = \emptyset, \\ \emptyset, & \text{если } b = n, \\ N_n, & \text{если } b = N_p, \end{cases}
 \end{aligned} \tag{6}$$

где  $\varphi(\mathbf{x})$  и  $\psi(\mathbf{x})$  - это координаты клеток, выбранных для взаимодействия с клеткой  $\mathbf{x}$ . Клетка  $\varphi(\mathbf{x})$  выбирается случайным образом из множества всех клеток  $T_{Size} = \{\mathbf{y} \in X, \mathbf{y} \neq \mathbf{x}\}$ . Клетка  $\psi(\mathbf{x})$  выбирается случайным образом из соседних клеток клетки  $\mathbf{x}$  по шаблону "крест", который в двумерном случае состоит из четырех клеток  $T_4 = \{(i, j-1), (i+1, j), (i, j+1), (i-1, j)\}$ , а в трехмерном случае - из шести клеток  $T_6 = \{(i, j-1, k), (i+1, j, k), (i, j+1, k), (i-1, j, k), (i, j, k-1), (i, j, k+1)\}$ .

При применении  $\Theta$  выбирается одно из правил  $\theta_l, l = 1, \dots, 5$ , с вероятностью  $p_l$ . Вероятности применения правил переходов вычисляются по формуле (7):

$$\begin{aligned}
 p_l &= \lambda_l / \lambda, \quad l = 1, \dots, 5, \quad \lambda = \sum_{l=1}^5 \lambda_l, \\
 \lambda_1 &= C_n \cdot C_p \cdot B_0 \cdot \exp\{-r_{np}^{min} / a_{np}\}, \\
 \lambda_2 &= C_n \cdot C_{N_n} \cdot b_{n0} \cdot \exp\{-r_{nN_n}^{min} / a_{nN_n}\}, \\
 \lambda_3 &= C_p \cdot C_{N_p} \cdot b_{p0} \cdot \exp\{-r_{pN_p}^{min} / a_{pN_p}\}, \\
 \lambda_4 &= C_n \cdot \tilde{D}_n^d, \quad \text{где } \tilde{D}_n^2 = D_n, \quad \tilde{D}_n^3 = D_n \cdot r_0, \\
 \lambda_5 &= C_p \cdot \tilde{D}_p^d, \quad \text{где } \tilde{D}_p^2 = D_p, \quad \tilde{D}_p^3 = D_p \cdot r_0,
 \end{aligned} \tag{7}$$

где  $C_n, C_p, C_{N_n}, C_{N_p}$  - это количество электронов, дырок, рекомбинационных центров для электронов и рекомбинационных центров для дырок в клеточном массиве.  $B_0$  - это коэффициент радиационной рекомбинации электронов и дырок,  $b_{n0}$  - коэффициент захвата электронов в свободные рекомбинационные центры,  $b_{p0}$  - коэффициент захвата дырок в рекомбинационные центры, содержащие электроны.  $D_n$  и  $D_p$  - это коэффициенты диффузии электронов и дырок,  $r_0$  - радиус частицы.  $r_{uv}^{min}$  - это минимальное расстояние между всеми частицами типа  $u$  и  $v$ , где  $u \in \{n, p\}$ ,  $v \in \{p, N_n, N_p\}$ . Аналогично,  $a_{uv}$  - это характерное расстояние взаимодействия частиц типа  $u$  с частицами типа  $v$ , где  $u \in \{n, p\}$ ,  $v \in \{p, N_n, N_p\}$ .

После выбора одного из правил  $\theta_l$ , с соответствующей вероятностью  $p_l$  случайным образом выбирается клетка  $\mathbf{x} \in X^d$  и взаимодействующая с ней клетка  $\varphi(\mathbf{x})$  либо  $\psi(\mathbf{x})$ . В

выбранных клетках правила переходов  $\theta_l$ ,  $l = 1, 2, 3$ , реализуются с вероятностью  $\omega_l = \exp((r_{uv}^{min} - r_{uv})/a_{uv})$ , где  $u, v$  соответствуют типам частиц в выбранном правиле  $\theta_l$ . Вероятности реализации правил  $\theta_4$  и  $\theta_5$  зависят от состояния соседней клетки: если клетка  $\psi(\mathbf{x})$  свободна ( $a = \emptyset, b = \emptyset$ ), тогда  $\omega_l = 1$ ,  $l = 4, 5$ , иначе  $\omega_l = \beta^d$ , где коэффициент  $\beta^d$  вычисляется как определено в разделе 2 при  $r_0 = 1$ .

Каждой попытке применения одного из правил переходов  $\theta_l$ ,  $l = 1, \dots, 5$ , соответствует локальный временной шаг  $\Delta\tau = -\ln(rand_1)/\lambda$ , где  $rand_1 \in (0, 1)$  - случайное число. Кроме локального временного шага, в модели используется глобальный временной шаг  $\Delta t = t_0 \cdot q^k$ , где  $t_0$  - это начальное время в секундах,  $q$  - коэффициент, отвечающий за длину глобального шага  $t_k$ ,  $k$  - номер глобального временного шага. В данной модели глобальный временной шаг соответствует одной итерации КА.

Основными характеристиками, измеряемыми экспериментально, являются концентрации частиц и интенсивность фотолюминесценции. В КА-модели рекомбинации  $\aleph$  концентрация частиц типа  $u$ :  $C_u(t_k)$ ,  $u \in \{n, p, N_n, N_p\}$ , вычисляется как число клеток с состоянием  $u$  в клеточном массиве в момент времени  $t_k$ . Интенсивность фотолюминесценции вычисляется по формуле (8):

$$I(t_k) = \sigma / (t_k - t_{k-1}), \quad (8)$$

где  $\sigma$  - число фотонов, то есть число взаимодействий электронов и дырок, произошедшее за время  $(t_k - t_{k-1})$ .

В начальный момент времени электроны, дырки и рекомбинационные центры случайно и равномерно распределены в клеточном массиве. В связи с тем, что правила переходов и начальные данные КА-модели  $\aleph$  являются вероятностными, значения характеристик  $C_u(t_k)$ ,  $u \in \{n, p, N_n, N_p\}$ , и  $I(t_k)$  являются случайными величинами, поэтому на основе закона больших чисел вычисляются оценки этих характеристик как математические ожидания значений характеристик, полученных в результате КА-моделирования рекомбинации для различных начальных распределений частиц [10]. Для вычисления оценок характеристик с высокой точностью необходимо, чтобы объем выборки был достаточно большим ( $10^5 - 10^6$ ), для этого требуется провести большое количество численных экспериментов. В зависимости от размеров задачи время вычислений составляет от нескольких часов до нескольких суток. Например, КА-моделирование рекомбинации для двумерной области размером  $1000 \times 1000$  клеток занимает 27.7 часов. Параллельная реализация задачи дает возможность существенно сократить время вычислений.

#### 4. Параллельная реализация клеточно-автоматной модели рекомбинации электронов и дырок в полупроводнике

Традиционный метод распараллеливания клеточных автоматов - разбиение области на подобласти и распределение этих подобластей между процессами, для КА-модели рекомбинации оказывается малоэффективным в связи с тем, что в данной модели парами для взаимодействия являются не соседние клетки, а любые две клетки массива. Следовательно, при каждом вычислении новых состояний клеток  $\mathbf{x}$  и  $\varphi(\mathbf{x})$  необходимо убедиться, что их состояния не были изменены другим процессом и обеспечить передачу новых состояний клеток при использовании их другими процессами. Это требует значительных накладных расходов на обмен данными.

Более эффективным для КА-модели рекомбинации является метод распределения вычислительных экспериментов с различными начальными данными между процессами. В работе для параллельной реализации КА-модели  $\aleph$  используется технология OpenMP. Множество вычислительных экспериментов распределяется между доступными потоками. Каждый поток генерирует свою последовательность случайных чисел, которая используется для начального распределения частиц в клеточном массиве, а также для выбора и применения правил переходов  $\Theta$ . Все процессы независимо вычисляют значения характеристик

на временных шагах  $[t_0; t_{fin}]$ , затем полученные значения суммируются главным (master) потоком.

Эффективность параллельной реализации КА-модели  $\aleph$  проанализирована на примере задачи рекомбинации электронов и дырок при наличии рекомбинационных центров и диффузии электронов:  $B_0 = 0.04 \text{ ns}^{-1}$ ,  $b_{n0} = b_{p0} = 0.02 \text{ ns}^{-1}$ ,  $a_{np} = 4 \text{ nm}$ ,  $a_{nN_n} = a_{pN_p} = 2 \text{ nm}$ ,  $t_0 = 0.5 \text{ ns}$ ,  $t_{fin} = 10^8 \text{ ns}$ ,  $C_n(0) = C_p(0) = 10000$ ,  $C_{N_n}(0) = 5000$ ,  $C_{N_p}(0) = 0$ ,  $D_n = 1 \text{ nm}^2 \cdot \text{ns}^{-1}$ ,  $D_p = 0 \text{ nm}^2 \cdot \text{ns}^{-1}$ ,  $|X^d| = 10^6$  клеток. Число численных экспериментов с различными начальными данными, по которым оценивались значения характеристик, выбрано равным 1024. Вычисления проводились на кластере НКС-30Т Сибирского Суперкомпьютерного Центра СО РАН.

Для оценки качества параллельной реализации КА-модели рекомбинации вычисляются ускорение  $S(th) = T(1)/T(th)$  и эффективность распараллеливания  $Q(th) = T(1)/(T(th) \cdot th)$ , где  $T(th)$  - время вычислений при использовании  $th$  потоков. Значения  $S(th)$  и  $Q(th)$ , полученные в результате параллельной реализации КА-модели  $\aleph$  со значениями параметров, указанными выше, в двумерном и трехмерном случаях представлены на Рис. 1.

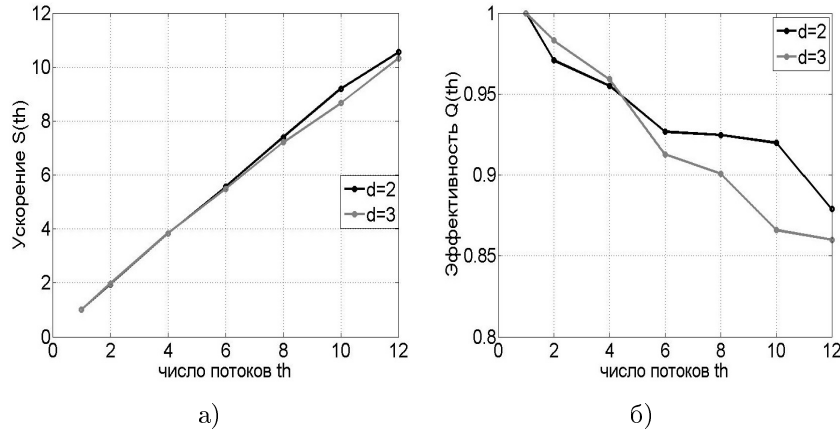


Рис. 1. Оценки качества параллельной реализации КА-модели рекомбинации: а) ускорение и б) эффективность распараллеливания.

Ускорение и эффективность распараллеливания программы, реализующей двумерную КА-модель рекомбинации, выше, чем программы, реализующей трехмерную КА-модель  $\aleph$ . На Рис. 1 видно, что ускорение  $S(th)$  в обоих случаях ( $d = 2$  и  $d = 3$ ) близко к линейному, эффективность распараллеливания  $Q(th)$  при использовании 12 потоков выше 0.85.

## 5. Результаты клеточно-автоматного моделирования рекомбинации электронов и дырок в полупроводнике

Основными параметрами КА-модели  $\aleph$ , влияющими на динамику процесса рекомбинации электронов и дырок, являются: константы скорости взаимодействия частиц ( $B_0$ ,  $b_n$ ,  $b_p$ ), характерные расстояния взаимодействия ( $a_{np}$ ,  $a_{nN_n}$ ,  $a_{pN_p}$ ), коэффициенты диффузии ( $D_n$ ,  $D_p$ ), начальные концентрации частиц ( $C_n(0)$ ,  $C_p(0)$ ,  $C_{N_n}(0)$ ,  $C_{N_p}(0)$ ), и размер области ( $Size_i$ ,  $Size_j$ ,  $Size_k$ ).

В ходе КА-моделирования на каждом глобальном шаге  $t_k \in [t_0; t_{fin}]$  вычисляются следующие характеристики процесса:

- плотности частиц - среднее число частиц, приходящееся на одну клетку:  $\rho_u(t_k) = C_u(t_k)/|X^d|$ , где  $u \in \{n, p, N_n, N_p\}$ , для  $d = 2$  :  $|X^2| = Size_i \cdot Size_j$ , и для  $d = 3$  :  $|X^3| = Size_i \cdot Size_j \cdot Size_k$ .
- интенсивность фотолуминесценции  $I(t_k)$  - число фотонов, образовавшихся за время  $(t_k - t_{k-1})$  (8).

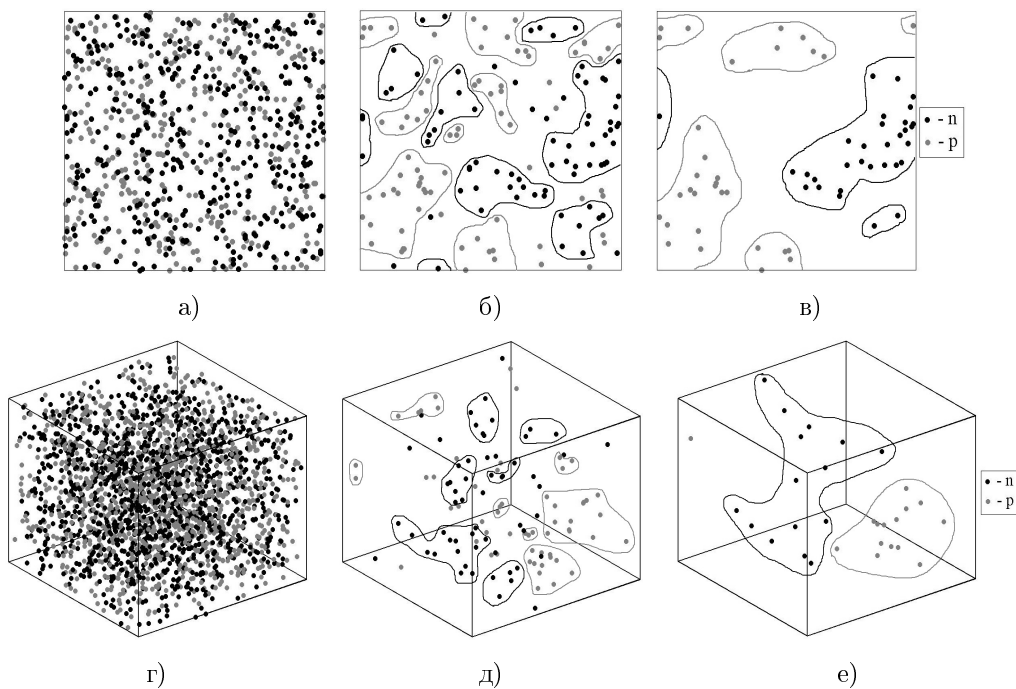
С помощью КА-моделирования исследовалась динамика процесса рекомбинации в дву-

мерном и трехмерном пространстве для следующих случаев:

1. радиационная рекомбинация электронов и дырок вследствие чистого туннелирования,
2. радиационная рекомбинация электронов и дырок вследствие чистой диффузии частиц,
3. радиационная и нерадиационная рекомбинация электронов и дырок,
4. радиационная и нерадиационная рекомбинация электронов и дырок при наличии диффузии частиц.

Рассмотрим динамику процесса рекомбинации электронов и дырок на примере КА-модели  $\aleph$  со следующими значениями параметров:  $B_0 = 0.04 \text{ ns}^{-1}$ ,  $b_{n0} = b_{p0} = 0.02 \text{ ns}^{-1}$ ,  $a_{np} = 4 \text{ nm}$ ,  $a_{nN_n} = a_{pN_p} = 2 \text{ nm}$ ,  $D_n = D_p = 0.5 \text{ nm}^2 \cdot \text{ns}^{-1}$ ,  $t_0 = 0.5 \text{ ns}$ ,  $C_n(0) = C_p(0) = 10000$ ,  $C_{N_n}(0) = 5000$ ,  $C_{N_p}(0) = 0$ ,  $|X^d| = 10^6$  клеток.

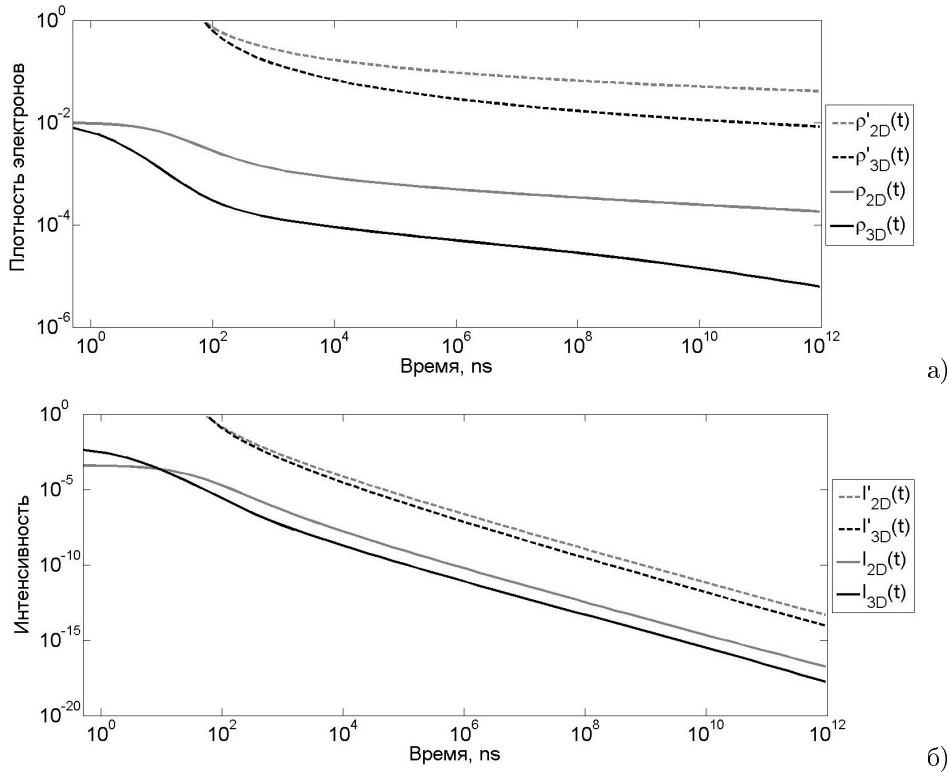
В случае чистого туннелирования (случай 1) отсутствуют рекомбинационные центры и диффузия частиц:  $C_{N_n}(0) = C_{N_p}(0) = 0$ ,  $b_{n0} = b_{p0} = 0 \text{ ns}^{-1}$  и  $D_n = D_p = 0 \text{ nm}^2 \cdot \text{ns}^{-1}$ . Эволюция  $\aleph$ , имитирующая динамику процесса рекомбинации, для приведенных выше значений параметров, представлена на Рис. 2. Для наглядности на рисунке представлены части



**Рис. 2.** Пространственное распределение электронов и дырок в случае чистого туннелирования в двумерной области: а) равномерное распределение при  $t_0 = 0 \text{ ns}$ , б) формирование кластеров электронов и дырок при  $t = 374 \text{ ns}$ , в) формирование макрокластеров при  $t = 1.06 \cdot 10^5 \text{ ns}$ ; и в трехмерной области: г) равномерное распределение при  $t_0 = 0 \text{ ns}$ , д) формирование кластеров электронов и дырок при  $t = 374 \text{ ns}$ , е) формирование макрокластеров при  $t = 1.06 \cdot 10^5 \text{ ns}$ .

клеточных массивов размером  $X^2 = 200 \times 200$  и  $X^3 = 50 \times 50 \times 50$  клеток. В начальный момент времени электроны и дырки равномерно распределены в объеме с плотностью  $\rho_n(0) = \rho_p(0) = 0.01 \text{ nm}^{-1}$  (Рис. 2 а, г). Чем ближе расположены электрон и дырка, тем с большей вероятностью они взаимодействуют с друг другом. Следовательно, электроны и дырки, расположенные на близком расстоянии, достаточно быстро аннигилируют, в результате происходит пространственное разделение электронов и дырок (Рис. 2 б, д). Далее происходит взаимодействие электронов и дырок, расположенных на границах кластеров, в результате мелкие кластеры исчезают и формируются макрокластеры электронов и дырок (Рис. 2 в, е). Причем в трехмерном случае аннигиляция электронов и дырок происходит быстрее, чем в двумерном. Это можно объяснить тем, что в трехмерной области при одинаковой концентрации частиц направлений для поиска электронно-дырочных пар больше, чем в двумерной области, следовательно, пара для взаимодействия будет найдена с большей вероятностью в трехмерном случае.

Значения плотности электронов и интенсивности фотолюминесценции, полученные при КА-моделировании чистого туннелирования в двумерном и трехмерном случаях, представлены на Рис. 3 в логарифмической шкале по обеим осям. Параллельность графиков асимптотического поведения характеристик  $\rho'_{2D}(t)$ ,  $\rho'_{3D}(t)$ ,  $I'_{2D}(t)$ ,  $I'_{3D}(t)$ , вычисленных по формуле (3), и графиков характеристик  $\rho_{2D}(t)$ ,  $\rho_{3D}(t)$ ,  $I_{2D}(t)$ ,  $I_{3D}(t)$ , полученных с помощью компьютерного моделирования, свидетельствует о соответствии теоретических и модельных результатов. Отличие значений плотности электронов  $\rho_{3D}(t)$  от асимптотических значений  $\rho'_{3D}(t)$  для  $t > 10^8 ns$  в трехмерном случае связано с высокой скоростью аннигиляции электронов и дырок и малым количеством частиц, оставшихся при больших временах  $t > 10^8 ns$ .

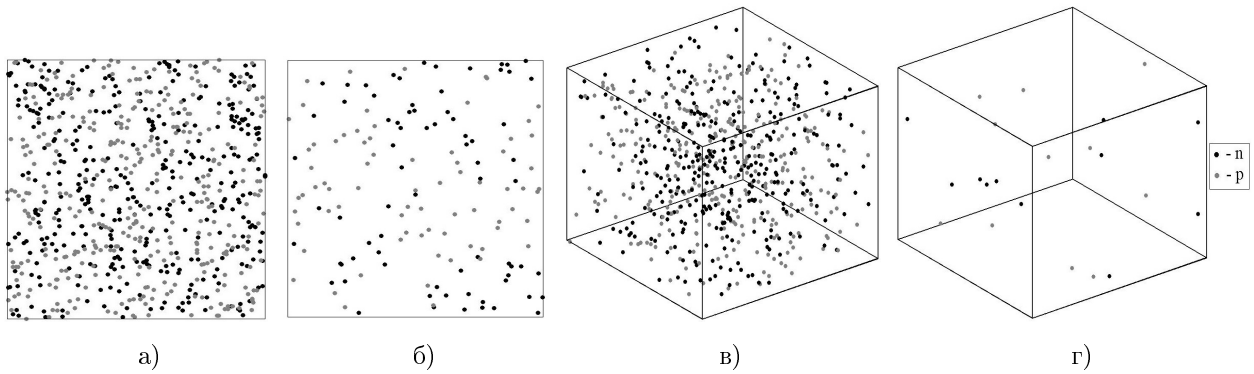


**Рис. 3.** Значения характеристик, полученные при КА-моделировании чистого туннелирования: а) плотность электронов, б) интенсивность фотолюминесценции.

В случае чистой диффузии (случай 2) коэффициенты диффузии частиц равны  $D_n = D_p = 0.5 nm^2 \cdot ns^{-1}$ , радиационная рекомбинация вследствие туннелирования и рекомбинационные центры отсутствуют:  $B_0 = 0 ns^{-1}$ ,  $C_{N_n}(0) = C_{N_p}(0) = 0$ ,  $b_{n0} = b_{p0} = 0 ns^{-1}$ . На Рис. 4 показан характер эволюции  $\aleph$ , моделирующей динамику процесса рекомбинации вследствие диффузии частиц. В этом случае рекомбинация электронов и дырок происходит при непосредственном столкновении частиц в одной клетке, пространственного разделения электронов и дырок не происходит из-за постоянного перемешивания частиц вследствие диффузии. Аналогично случаю чистого туннелирования, в трехмерном пространстве скорость аннигиляции частиц выше, чем в двумерном.

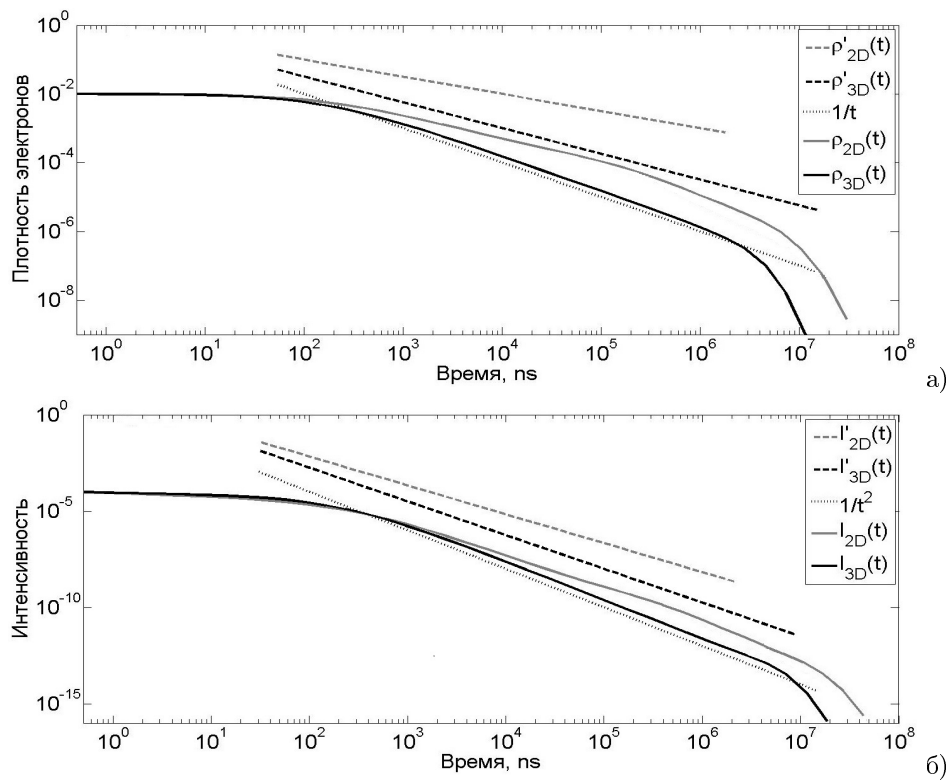
Значения характеристик, полученные в результате КА-моделирования чистой диффузии в двумерном и трехмерном случаях, представлены на Рис. 5. В двумерном случае графики  $\rho_{2D}(t)$  и  $I_{2D}(t)$ , вычисленные с помощью компьютерного моделирования, параллельны графикам асимптотического поведения  $\rho'_{2D}(t)$ ,  $I'_{2D}(t)$ , посчитанным по формуле (4) с  $d = 2$ . Тогда как в трехмерном случае графики  $\rho_{3D}(t)$  и  $I_{3D}(t)$  отличаются от асимптотического поведения  $\rho'_{3D}(t)$ ,  $I'_{3D}(t)$  (4), но хорошо согласуются с кривыми  $\tilde{\rho}_{3D}(t) = 1/t$ ,  $\tilde{I}_{3D}(t) = 1/t^2$ , которые являются асимптотическими значениями характеристик для случая равномерного перемешивания частиц в объеме. Полученный результат показывает, что диффузия в





**Рис. 4.** Пространственное распределение электронов и дырок в случае чистой диффузии: а)  $d = 2, t = 374 \text{ ns}$ , б)  $d = 2, t = 1.6 \cdot 10^4 \text{ ns}$ ; в)  $d = 3, t = 374 \text{ ns}$ , г)  $d = 3, t = 1.6 \cdot 10^4 \text{ ns}$ .

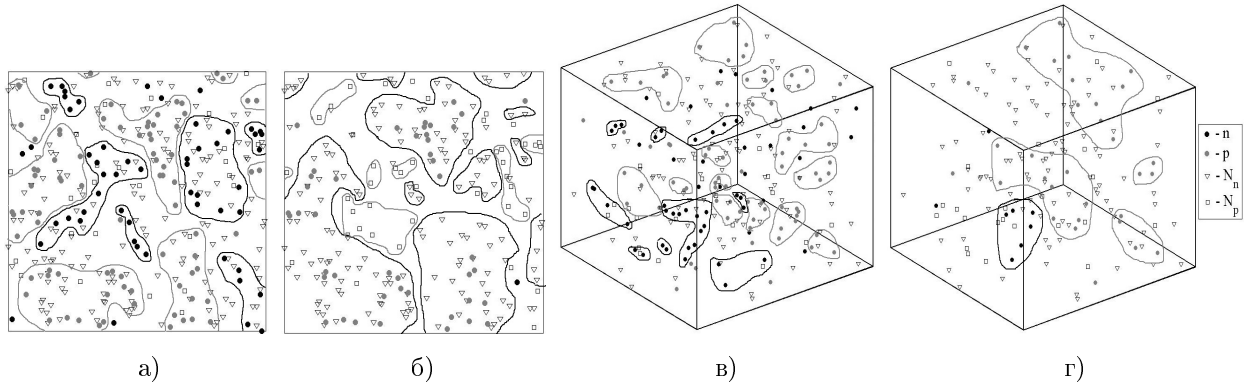
трехмерном случае приводит к равномерному однородному распределению частиц во всем объеме.



**Рис. 5.** Значения характеристик, полученные при КА-моделировании радиационной рекомбинации вследствие чистой диффузии частиц в двумерном и трехмерном случаях: а) плотность электронов, б) интенсивность фотолюминесценции.

Характер эволюции  $\aleph$  для случая радиационной и нерадиационной рекомбинации (случай 3), когда присутствуют рекомбинационные центры  $C_{N_n}(0) = 5000, C_{N_p}(0) = 0, b_{n0} = b_{p0} = 0.02 \text{ ns}^{-1}$ , но отсутствует диффузия частиц  $D_n = D_p = 0 \text{ nm}^2 \cdot \text{ns}^{-1}$ , показан на Рис. 6.

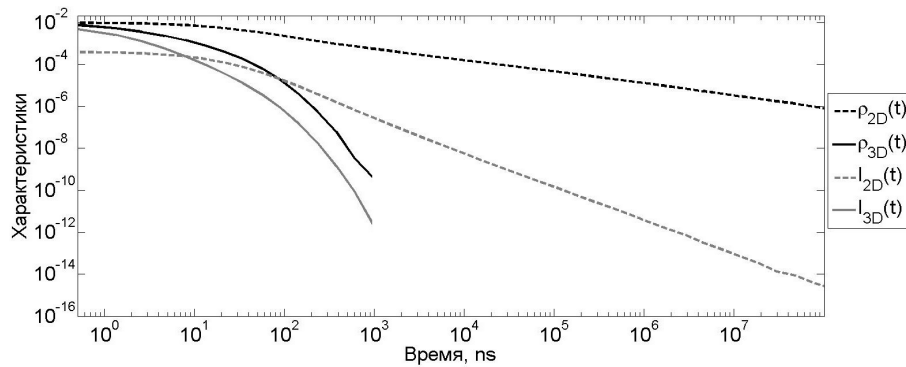
В присутствии рекомбинационных центров так же, как и в случае чистого туннелирования, в результате аннигиляции электронов и дырок, расположенных на близком расстоянии, происходит формирование кластеров частиц. Наличие рекомбинационных центров приводит к увеличению скорости аннигиляции электронов и дырок, причем в трехмерном случае введение центров рекомбинации более существенно влияет на процесс, чем в двумерном случае. В отличие от Рис. 2 и Рис. 4 на Рис. 6 показаны пространственные распределения частиц в двумерной и трехмерной области на разных временных шагах. Это связано с тем,



**Рис. 6.** Пространственное распределение электронов и дырок в случае радиационной и нерадиационной рекомбинации: а)  $d = 2$ ,  $t = 374 \text{ ns}$ , б)  $d = 2$ ,  $t = 1.06 \cdot 10^5 \text{ ns}$ ; в)  $d = 3$ ,  $t = 35 \text{ ns}$ , г)  $d = 3$ ,  $t = 374 \text{ ns}$ .

что в трехмерном случае к моменту времени  $t = 1.06 \cdot 10^5 \text{ ns}$  все частицы аннигилировали.

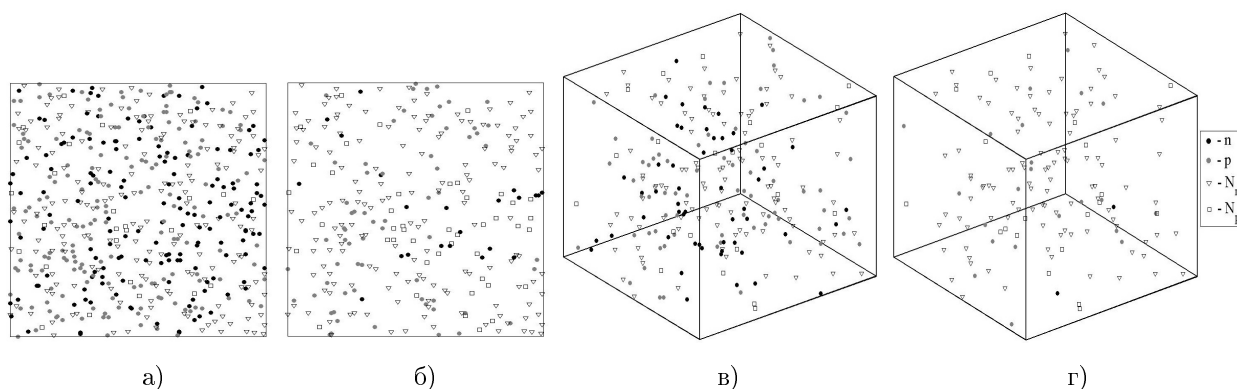
Графики значений плотности электронов и интенсивности фотолюминесценции, полученные в результате КА-моделирования рекомбинации при наличии рекомбинационных центров для двумерного и трехмерного случаев, представлены на Рис. 7. При сравнении Рис. 7 и Рис. 3 видно, что при добавлении рекомбинационных центров значения характеристик  $\rho_{2D}(t)$  и  $I_{2D}(t)$  отклонились от значений, вычисленных для случая чистого туннелирования, меньше, чем значения  $\rho_{3D}(t)$  и  $I_{3D}(t)$ .



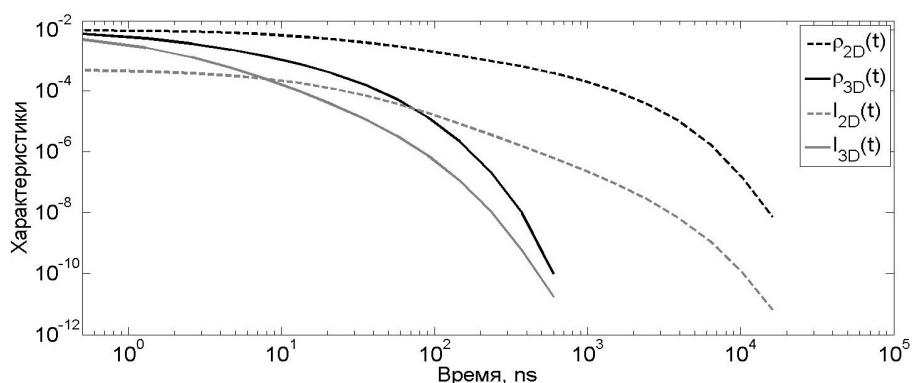
**Рис. 7.** Значения характеристик, полученные при КА-моделировании рекомбинации при наличии рекомбинационных центров в двумерном и трехмерном случаях.

Характер эволюции  $\aleph$  в случае радиационной и нерадиационной рекомбинации (случай 4) при наличии рекомбинационных центров  $C_{N_n}(0) = 5000$ ,  $C_{N_p}(0) = 0$ ,  $b_{n0} = b_{p0} = 0.02 \text{ ns}^{-1}$ , и диффузии частиц  $D_n = D_p = 0.5 \text{ nm}^2 \cdot \text{ns}^{-1}$  представлен на Рис. 8. В результате аннигиляции плотность частиц быстро уменьшается, и, несмотря на перемешивание частиц вследствие диффузии, на каждом временном шаге можно выделить кластеры электронов и дырок, но эти кластеры быстро распадаются и носят случайный характер.

На Рис. 9 представлены графики характеристик, полученные в результате КА-моделирования рекомбинации при наличии рекомбинационных центров и диффузии частиц (случай 4). Аналогично остальным случаям (1, 2, 3), плотность электронов и интенсивность фотолюминесценции, вычисленные для трехмерной области, убывают быстрее, чем  $\rho_{2D}(t)$  и  $I_{2D}(t)$ . Кроме того, при сравнении Рис. 7 и Рис. 9 видно, что диффузия оказывает большее влияние на скорость рекомбинации в двумерном случае: значения  $\rho_{3D}(t)$  и  $I_{3D}(t)$ , полученные при наличии рекомбинационных центров, практически не изменились при добавлении диффузии частиц, тогда как  $\rho_{2D}(t)$  и  $I_{2D}(t)$  убывают существенно быстрее по сравнению со случаем 3.



**Рис. 8.** Пространственное распределение электронов и дырок в случае радиационной и нерадиационной рекомбинации при наличии диффузии: а)  $d = 2$ ,  $t = 35 \text{ ns}$ , б)  $d = 2$ ,  $t = 374 \text{ ns}$ ; в)  $d = 3$ ,  $t = 35 \text{ ns}$ , г)  $d = 3$ ,  $t = 374 \text{ ns}$ .



**Рис. 9.** Значения характеристик, полученные при КА-моделировании рекомбинации при наличии рекомбинационных центров и диффузии частиц в двумерном и трехмерном случаях.

## 6. Заключение

На основе системы уравнений Смолуховского (1) и алгоритма Монте-Карло [3, 6] разработана клеточно-автоматная модель рекомбинации электронов и дырок в двумерном и трехмерном пространстве. Для моделирования областей больших размеров и вычисления интегральных характеристик процесса (плотности частиц и интенсивности фотолюминесценции) разработаны параллельные программы, реализующие КА-модель рекомбинации в двумерном и трехмерном случаях. Параллельные программы реализованы с помощью технологии OpenMP. Эффективность распараллеливания на кластере НКС-30Т Сибирского Суперкомпьютерного Центра СО РАН выше 85% при использовании 12 потоков.

С помощью разработанной параллельной программы изучена кинетика процесса рекомбинации для четырех случаев: 1) радиационной рекомбинации электронов и дырок вследствие чистого туннелирования, 2) радиационной рекомбинации электронов и дырок вследствие чистой диффузии, 3) радиационной и нерадиационной рекомбинации при наличии центров рекомбинации, 4) радиационной и нерадиационной рекомбинации при наличии центров рекомбинации и диффузии частиц. В результате исследования эволюции КА-модели  $N$  обнаружено формирование кластеров электронов и дырок при отсутствии диффузии частиц. Выявлено, что во всех четырех случаях электроны и дырки аннигилируют быстрее в трехмерной области. Кроме того, наличие центров рекомбинации оказывает большее влияние на процесс рекомбинации в трехмерном случае, тогда как диффузия существенно влияет на скорость рекомбинации в двумерном случае.

## Литература

1. Туркин А. Нитрид галлия как один из перспективных материалов в современной оптоэлектронике // Компоненты и технологии. 2011. № 5. С. 6–10.
  2. Gorgis A., Flissikowski T., Brandt O., Cheze C., Geelhaar L., Riechert H., and Grahn H.T. Time-resolved photoluminescence spectroscopy of individual GaN nanowires // *Physical review B*. 2012. No. 86. 041302(R).
  3. Sabelfeld K.K., Brandt O., Kaganer V.M. Stochastic model for the fluctuation-limited reaction-diffusion kinetics in inhomogeneous media based on the nonlinear Smoluchowski equations // *J. Math. Chem.* 2015. Vol. 53, Issue 2. P. 651–669.
  4. Kolodko A.A. and Sabelfeld K.K. Stochastic Lagrangian model for spatially inhomogeneous Smoluchowski equation governing coagulating and diffusing particles // *Monte Carlo Methods and Applications*. 2001. Vol. 7, No. 3-4. P. 223–228.
  5. Kolodko A., Sabelfeld K. and Wagner W. A stochastic method for solving Smoluchowski's coagulation equation // *Mathematics and Computers in Simulation*. 1999. Vol. 49, No 1-2. P. 57–79.
  6. Sabelfeld K.K., Levykin A.I., Kireeva A.E // Stochastic simulation of fluctuation-induced reaction-diffusion kinetics governed by Smoluchowski equations, *Monte Carlo Methods and Applications*. 2015. Vol. 21, No 1. P. 33–48. (DOI:10.1515/mcma-2014-0012)
  7. Toffoli T., Margolus N. *Cellular Automata Machines: A New Environment for Modeling* // USA: MIT Press, 1987. 259 p.
  8. Бандман О.Л. Клеточно-автоматные модели пространственной динамики // Системная информатика. Методы и модели современного программирования. 2006. № 10, С. 59–113.
  9. Bandman O.L. Mapping physical phenomena onto CA-models // AUTOMATA-2008. In: Adamatzky A., Alonso-Sanz R., Lawniczak A., Martinez G.J., Morita K., Worsch T. (eds.) *Theory and Applications of Cellular Automata*. Luniver Press, UK. 2008. P. 381–397.
  10. Ермаков С.М., Михайлов Г.А. Статистическое моделирование // М.: ФИЗМАТЛИТ, 2-е изд., дополн., 1982. 296 С.
-

# Parallel implementation of stochastic cellular automata model of electron-hole recombination in a semiconductor

A.E. Kireeva<sup>1</sup>, K.K. Sabelfeld<sup>1</sup>,

Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics SB RAS<sup>1</sup>

Parallel programs implementing stochastic cellular automata (CA) model of electron-hole recombination in an inhomogeneous semiconductor for two- and three-dimensional cases are developed. The spatio-temporal distributions of particles are investigated by the CA simulation. Spatial separation of electrons and holes with clusters formation is found and analyzed. Parallel implementation of the CA model allows us to calculate integral characteristics of the recombination process (particle densities and radiative intensity) in acceptable time. Recombination kinetics in the vicinity of the recombination centers and diffusion in two- and three-dimensional space is investigated using the parallel program.

*Keywords:* electron-hole recombination, semiconductor, parallel implementation, stochastic cellular automata, radiative intensity.

## References

1. Turkin A. Nitrid galliya kak odin iz perspektivnykh materialov v sovremennoy optoelektronike [Nitride Gallium as one of the perspective materials in modern optoelectronics] // Komponenty i tekhnologii [Components and technologies], 2011. No. 5. P. 6–10.
2. Gorgis A., Flissikowski T., Brandt O., Cheze C., Geelhaar L., Riechert H., and Grahn H.T. Time-resolved photoluminescence spectroscopy of individual GaN nanowires // Physical review B, 2012. No 86. 041302(R).
3. Sabelfeld K.K., Brandt O., Kaganer V.M. Stochastic model for the fluctuation-limited reaction-diffusion kinetics in inhomogeneous media based on the nonlinear Smoluchowski equations // J. Math. Chem, 2015. Vol. 53, Issue 2. P. 651–669.
4. Kolodko A.A. and Sabelfeld K.K. Stochastic Lagrangian model for spatially inhomogeneous Smoluchowski equation governing coagulating and diffusing particles // Monte Carlo Methods and Applications, 2001. Vol. 7, No. 3-4. P. 223–228.
5. Kolodko A., Sabelfeld K. and Wagner W. A stochastic method for solving Smoluchowski's coagulation equation // Mathematics and Computers in Simulation, 1999. Vol. 49, No 1-2. P. 57–79.
6. Sabelfeld K.K., Levykin A.I., Kireeva A.E // Stochastic simulation of fluctuation-induced reaction-diffusion kinetics governed by Smoluchowski equations, Monte Carlo Methods and Applications, 2015. Vol. 21, No 1. P. 33–48. (DOI:10.1515/mcma-2014-0012)
7. Toffoli T., Margolus N. Cellular Automata Machines: A New Environment for Modeling // USA: MIT Press, 1987. 259 p.
8. Bandman O.L. Kletочно-автоматные модели пространственной динамики [Cellular automata model of spatial dynamics] // Sistemnaya informatika. Metody i modeli sovremennogo programmirovaniya [System informatics. Methods and models of modern programming], 2006. No 10. P. 59–113.

9. Bandman O.L. Mapping physical phenomena onto CA-models // AUTOMATA-2008. In: Adamatzky A., Alonso-Sanz R., Lawniczak A., Martinez G.J., Morita K., Worsch T. (eds.) Theory and Applications of Cellular Automata. Luniver Press, UK. 2008. P. 381–397.
10. Ermakov S.M., Mikhaylov G.A. Statisticheskoe modelirovanie [Statistical modeling] // M.: FIZMATLIT, 2-e izd., dopoln. [Moscow, publishing in FIZMATLIT, the second edition augmented], 1982. 296 P.