

# ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ СТОХАСТИЧЕСКОЙ КЛЕТОЧНО-АВТОМАТНОЙ МОДЕЛИ РЕКОМБИНАЦИИ ЭЛЕКТРОНОВ И ДЫРОК В 2D И 3D НЕОДНОРОДНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ\*

© 2017 г. К.К. Сабельфельд, А.Е. Киреева

*Институт вычислительной математики и математической геофизики*

*Сибирского отделения Российской академии наук*

*(630090 Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, д. 6)*

*E-mail: karl@osmf.ssc.ru, kireeva@ssd.ssc.ru*

Поступила в редакцию: 28.10.2016

В работе представлены стохастические клеточно-автоматные модели рекомбинации электронов и дырок в неоднородном полупроводнике для двумерного и трехмерного случаев. С помощью разработанных клеточно-автоматных моделей рекомбинации исследовано пространственно-временное распределение частиц, обнаружено и исследовано формирование макрокластеров электронов и дырок. В связи с тем, что интегральные характеристики процесса рекомбинации вычисляются с помощью осреднения по большому ансамблю начальных данных, для сокращения времени вычислений разработаны параллельные программы, реализующие клеточно-автоматные модели рекомбинации в двумерном и трехмерном случаях. Параллельная реализация программ 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.*

## ОБРАЗЕЦ ЦИТИРОВАНИЯ

Сабельфельд К.К., Киреева А.Е. Параллельная реализация стохастической клеточно-автоматной модели рекомбинации электронов и дырок в 2D и 3D неоднородных полупроводниках // Вестник ЮУрГУ. Серия: Вычислительная математика и информатика. 2017. Т. 6, № 1. С. 87–103. DOI: 10.14529/cmse170106.

## 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  $GaN$ .

Изучению зависимости интенсивности фотолюминесценции от структуры полупроводника и внешних параметров посвящены работы российских и зарубежных исследовательских групп. Фотолюминесценция является одной из основных характеристик, измеряемых

\*Статья рекомендована к публикации программным комитетом Международной научной конференции «Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ) 2016».

при исследовании свойств полупроводниковых приборов. В [2] влияние температуры и плотности оптического возбуждения на мощность лазеров на основе нитрида галлия анализируется с помощью измерения спектров фотолюминесценции при различных параметрах. В работе [3] немецкой группы из Института твердотельной электроники им. П. Друде исследуется рост нановискеров  $GaN$  путем выявления зависимости интенсивности фотолюминесценции от диаметра и длины отдельного нановискера. В [4] делаются выводы об оптических свойствах выращенного кристалла  $GaN$  на основе анализа спектра фотолюминесценции при различной концентрации примеси кремния.

Для описания динамики процессов, протекающих в полупроводниках, существуют различные физико-математические модели, основанные на дифференциальных уравнениях и стохастических методах. Работа [5] посвящена моделированию переноса зарядов и рекомбинации электронов и дырок в светодиодах, использующих нитриды третьей группы, к которым относится  $GaN$ . Одномерная модель переноса зарядов основана на уравнениях Больцмана, Пуассона и Шредингера, которые решаются методом конечных элементов. Полученные результаты сопоставляются с экспериментальными данными. В [6] разработана стохастическая модель транспорта электронов в полупроводнике с учетом его зонной структуры. В этой работе с помощью метода Монте-Карло моделируется движение зарядов с учетом взаимного влияния друг на друга электронов и фононов, а также воздействия ионизации на энергию электронов. Дополнительно, для моделирования электрического поля с помощью разностной схемы решается уравнение Пуассона. Построенная модель позволила вычислить скорости движения зарядов, среднюю энергию электронов, плотность, а также пространственные распределения частиц для различных параметров полупроводников в зависимости от температуры и электрического поля.

Рекомбинацию электронов и дырок можно рассматривать как бимолекулярный процесс [7]. Изучению бимолекулярных процессов посвящены работы нескольких исследовательских групп, в том числе работы американского ученого Д.Т. Джиллеспы. В [8] рассматривается стохастический подход к моделированию реакционно-диффузионного взаимодействия молекул двух видов в хорошо перемешанном разреженном газе, и выводится формула для вычисления вероятности взаимодействия молекул двух разных типов.

Стохастическому моделированию реакционно-диффузионных бимолекулярных процессов посвящены работы К.К. Сабельфельда. В отличие от упомянутых выше моделей, где рассматриваются преимущественно однородные по пространству процессы, в работах К.К. Сабельфельда развивается общий подход, который применим к неоднородным по пространству задачам. В [9–12] разработана стохастическая модель взаимодействия электронов и дырок, основанная на стохастических интегро-дифференциальных уравнениях типа Смолуховского с учетом пространственной неоднородности, диффузии, наличия центров рекомбинации и возможности флуктуаций начальных концентраций. В этих работах изучается процесс рекомбинации электронов и дырок в неоднородном двумерном 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). На основе [9, 12] 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 интенсивность 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 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 1 описана математическая постановка задачи, приведена система уравнений Смолуховского и формулы, описывающие асимптотическое поведение характеристик процесса рекомбинации при больших временах. Раздел 2 посвящен описанию КА-модели рекомбинации, в нем объясняются основные термины теории клеточных автоматов. В разделе 3 приводятся результаты распараллеливания КА-модели рекомбинации для трехмерного и двумерного случаев. В разделе 4 представлены результаты КА-моделирования рекомбинации, приведены эволюции КА и значения характеристик для различных параметров моделирования. В заключении статьи перечислены основные результаты, полученные в данной работе, и сделаны выводы о влиянии диффузии, туннелирования и центров рекомбинации на кинетику процесса рекомбинации, промоделированного для двумерного и трехмерного случаев.

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

Для описания процесса рекомбинации электронов и дырок в полупроводнике в [9, 12] предложена стохастическая модель, основанная на системе уравнений Смолуховского (1):

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

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 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 с выделением тепловой энергии.

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

Поток фотонов  $\phi(t)$  согласно [12] 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. Интенсивность фотолюминесценции  $I(t)$  пропорциональна потоку фотонов  $\phi(t)$ :  $I(t) = \hbar\omega \cdot \phi(t)$ , где  $\hbar\omega$  — энергия фотона [12].

В [12] с помощью корреляционного анализа выведены формулы для асимптотического поведения плотности электронов и интенсивности фотолюминесценции при  $t \rightarrow \infty$ :

1. Для режима 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 режима 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 моделирования процесса рекомбинации, описанного системой уравнений Смолуховского (1), в [12] представлен алгоритм Монте-Карло. На основе этого метода в данной работе разработана клеточно-автоматная модель рекомбинации электронов и дырок.

## 2. 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  $X$  [13–15]. 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 состояний самой клетки и 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 клеточного автомата [14] КА-модель рекомбинации электронов и дырок в полупроводнике задается в следующем виде:  $\aleph = \langle A, X^d, \Theta, \alpha \rangle$ . В соответствии с математической моделью рекомбинации (1) и алгоритмом Монте-Карло [12] 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 (5):

$$\begin{aligned} \theta_1(\mathbf{x}) &: \{(n, \mathbf{x}), (p, \varphi_p(\mathbf{x}))\} \xrightarrow{p_1 \cdot \omega_1} \{(\emptyset, \mathbf{x}), (\emptyset, \varphi_p(\mathbf{x}))\}, \\ \theta_2(\mathbf{x}) &: \{(n, \mathbf{x}), (N_n, \varphi_{N_n}(\mathbf{x}))\} \xrightarrow{p_2 \cdot \omega_2} \{(\emptyset, \mathbf{x}), (N_p, \varphi_{N_n}(\mathbf{x}))\}, \\ \theta_3(\mathbf{x}) &: \{(p, \mathbf{x}), (N_p, \varphi_{N_p}(\mathbf{x}))\} \xrightarrow{p_3 \cdot \omega_3} \{(\emptyset, \mathbf{x}), (N_n, \varphi_{N_p}(\mathbf{x}))\}, \\ \theta_4(\mathbf{x}) &: \{(n, \mathbf{x}), (a, \psi(\mathbf{x}))\} \xrightarrow{p_4 \cdot \omega_4} \{(\emptyset, \mathbf{x}), (a', \psi(\mathbf{x}))\}, \\ \theta_5(\mathbf{x}) &: \{(p, \mathbf{x}), (b, \psi(\mathbf{x}))\} \xrightarrow{p_5 \cdot \omega_5} \{(\emptyset, \mathbf{x}), (b', \psi(\mathbf{x}))\}, \end{aligned} \quad (5)$$

$$a' = \begin{cases} n, & \text{если } a = \emptyset, \\ \emptyset, & \text{если } a = p, \\ N_p, & \text{если } a = N_n, \end{cases} \quad b' = \begin{cases} p, & \text{если } b = \emptyset, \\ \emptyset, & \text{если } b = n, \\ N_n, & \text{если } b = N_p, \end{cases}$$

где  $\varphi_u(\mathbf{x})$ ,  $u \in \{p, N_n, N_p\}$ , и  $\psi(\mathbf{x})$  — это координаты клеток, выбранных для взаимодействия с клеткой  $\mathbf{x}$ . Клетка  $\varphi_u(\mathbf{x})$  выбирается случайным образом из множества всех клеток с состоянием  $u$ , присутствующих в клеточном массиве в данный момент времени  $t$ :  $T_u(t) = \{(a, \mathbf{y}) : a = u, \mathbf{y} \in X\}$ . 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 (6):

$$p_l = \lambda_l / \lambda, \quad l = 1, \dots, 5, \quad \lambda = \sum_{l=1}^5 \lambda_l, \quad (6)$$

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

здесь  $C_n, C_p, C_{N_n}, C_{N_p}$  — 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  $\varphi_u(\mathbf{x})$  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  $\theta_5$ :  $\omega_4 = \omega_5 = 1$ .

Каждой попытке применения одного из правил переходов  $\theta_l$ ,  $l = 1, \dots, 3$ , соответствует локальный временной шаг  $\Delta\tau_{tun} = -\ln(rand_1)/\lambda$ , где  $rand_1 \in (0, 1)$  — случайное число. Попытке применения правил  $\theta_4, \theta_5$ , моделирующих диффузию частиц, соответствует локальный временной шаг  $\Delta\tau_{diff} = 1/(2D_u \cdot C_u)$ , где  $u \in \{n, p\}$ ,  $D_u$  — это коэффициент диффузии, соответствующий выбранному правилу,  $C_u$  — количество частиц, для которых моделируется диффузия. 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 плотности частиц и интенсивность фотолюминесценции. В КА-модели рекомбинации  $\aleph$  плотность частиц типа  $u$  вычисляется как отношение количества клеток  $C_u$  с состоянием  $u$  в клеточном массиве в момент времени  $t_k$  к размеру клеточного массива  $|X^d|$ :

$$\rho_u(t_k) = C_u(t_k)/|X^d|, \quad u \in \{n, p, N_n, N_p\}. \quad (7)$$

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  $\rho_u(t_k)$ ,  $u \in \{n, p, N_n, N_p\}$ , 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. 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.

### 3. 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  $\varphi_u(\mathbf{x})$  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 потоки независимо вычисляют значения характеристик на временных шагах  $[t_0; t_{fin}]$ , затем полученные значения суммируются главным потоком.

Эффективность параллельной реализации КА-модели  $\aleph$  проанализирована на примере задачи рекомбинации электронов и дырок при наличии рекомбинационных центров и диффузии электронов:  $B_0 = 0,04 \text{ нс}^{-1}$ ,  $b_{n0} = b_{p0} = 0,02 \text{ нс}^{-1}$ ,  $a_{np} = 4 \text{ нм}$ ,  $a_{nN_n} = a_{pN_p} = 2 \text{ нм}$ ,  $t_0 = 0,5 \text{ нс}$ ,  $t_{fin} = 10^8 \text{ нс}$ ,  $C_n(0) = C_p(0) = 10000$ ,  $C_{N_n}(0) = 5000$ ,  $C_{N_p}(0) = 0$ ,  $D_n = 1 \text{ нм}^2 \cdot \text{нс}^{-1}$ ,  $D_p = 0 \text{ нм}^2 \cdot \text{нс}^{-1}$ ,  $|X^d| = 10^6$  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  $\aleph$  в двумерном и трехмерном случаях представлены на рис. 1.

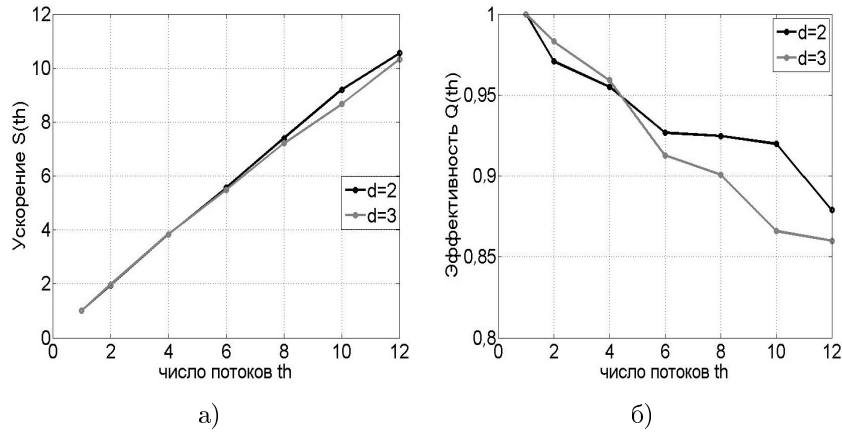


Рис. 1. Оценки качества параллельной реализации КА-модели рекомбинации: а) ускорение и б) эффективность распараллеливания

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.

#### 4. 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 ( $D_n, D_p$ ), начальное количество 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  $t_k$  вычисляются плотности частиц  $\rho_u(t_k)$ ,  $u \in \{n, p, N_n, N_p\}$ , (7) и интенсивность фотолюминесценции  $I(t_k)$  (8).

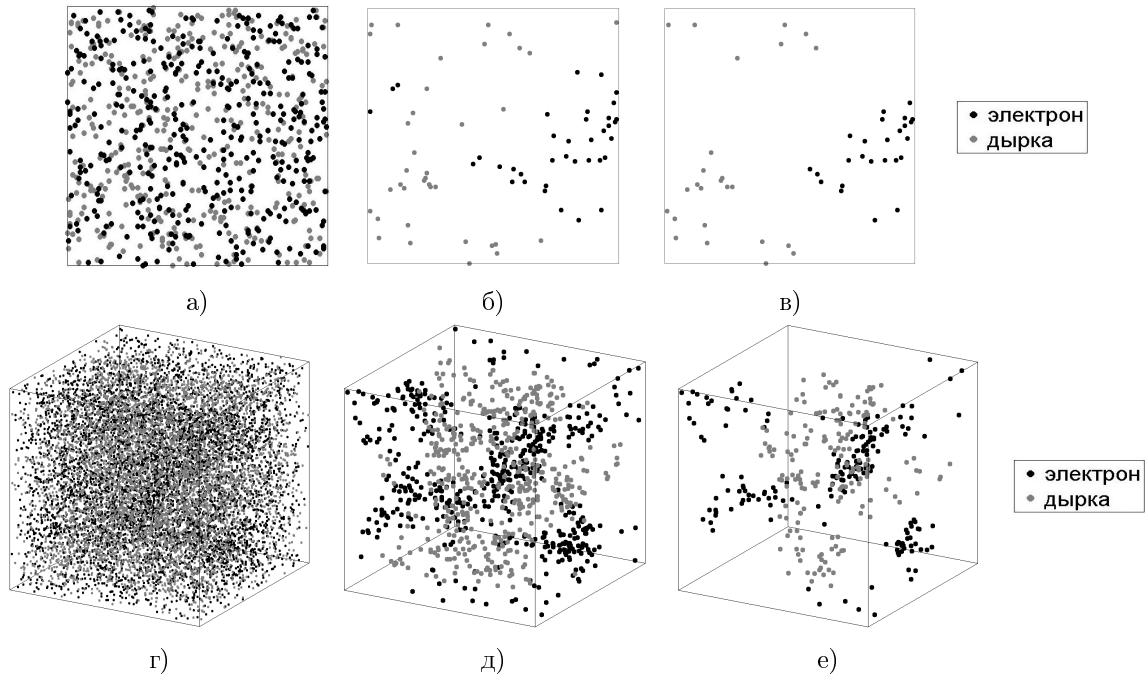
С помощью КА-моделирования исследовалась динамика рекомбинации электронов и дырок в двумерной и трехмерной области для следующих режимов протекания процесса:

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 частиц при наличии диффузии.

Рассмотрим динамику процесса рекомбинации электронов и дырок на примере КА-модели  $\aleph$  со следующими значениями параметров:  $B_0 = 0,04 \text{ нс}^{-1}$ ,  $b_{n0} = b_{p0} = 0,02 \text{ нс}^{-1}$ ,  $a_{np} = 4 \text{ нм}$ ,  $a_{nN_n} = a_{pN_p} = 2 \text{ нм}$ ,  $D_n = D_p = 0,5 \text{ нм}^2 \cdot \text{нс}^{-1}$ ,  $t_0 = 0,5 \text{ нс}$ ,  $\rho_n(0) = \rho_p(0) = 0,01$ ,  $\rho_{N_n}(0) = 0,00025$ ,  $\rho_{N_p}(0) = 0$ ,  $Size_i = Size_j = Size_k = 200$  клеток. В двумерном случае начальное количество частиц:  $C_n(0) = C_p(0) = 400$ ,  $C_{N_n}(0) = 10$ ,  $C_{N_p}(0) = 0$ , в трехмерном случае  $C_n(0) = C_p(0) = 80000$ ,  $C_{N_n}(0) = 2000$ ,  $C_{N_p}(0) = 0$ .

В режиме чистого туннелирования (режим 1) отсутствуют рекомбинационные центры и диффузия частиц:  $C_{N_n}(0) = C_{N_p}(0) = 0$ ,  $b_{n0} = b_{p0} = 0 \text{ нс}^{-1}$  и  $D_n = D_p = 0 \text{ нм}^2 \cdot \text{нс}^{-1}$ . Эволюция  $\aleph$ , имитирующая динамику процесса рекомбинации, для приведенных выше значений параметров, представлена на рис. 2. В начальный момент времени электроны и дырки равномерно распределены в объеме с плотностью  $\rho_n(0) = \rho_p(0) = 0,01$  (рис. 2 а, г). В связи с тем, что в трехмерной области в начале моделирования число частиц очень ве-





**Рис. 2.** Пространственное распределение частиц в режиме чистого туннелирования для  $d = 2$ : а) равномерное распределение при  $t_0 = 0$  нс, б) формирование кластеров электронов и дырок при  $t = 10^4$  нс, в) формирование макрокластеров при  $t = 1,2 \cdot 10^7$  нс; и для  $d = 3$ : г) равномерное распределение при  $t_0 = 21,5$  нс, д) формирование кластеров электронов и дырок при  $t = 10^4$  нс, е) формирование макрокластеров при  $t = 1,2 \cdot 10^7$  нс

лико ( $C_n(0) = C_p(0) = 80000$ ), для наглядности на рисунке представлено распределение частиц в момент времени  $t_0 = 21,5$  нс. 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 (рис. 2 в, е).

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. Отклонение графиков плотности электронов  $\rho_{2D}(t)$  и  $\rho_{3D}(t)$  от асимптотических значений при больших временах  $t > 10^{10}$  нс связано с малым количеством частиц, оставшихся в области. В начале моделирования, когда плотность частиц высокая, скорость аннигиляции электронов и дырок выше в трехмерной области, так как при одинаковой концентрации частиц направлений для поиска электронно-дырочных пар больше в трехмерной области, чем в двумерной. Следовательно, при применении правила перехода  $\theta_1$ , моделирующего радиационную рекомбинацию электрона и дырки вследствие туннелирования, при  $d = 3$  пара для взаимодействия будет найдена с большей вероятностью, чем при  $d = 2$ . Далее, при  $t > 10^3$  нс, графики характеристик, полученные с помощью КА-моделирования рекомбинации в двумерной и трехмерной области, становятся параллельны друг другу, что свидетельствует об одинаковой скорости аннигиляции частиц.

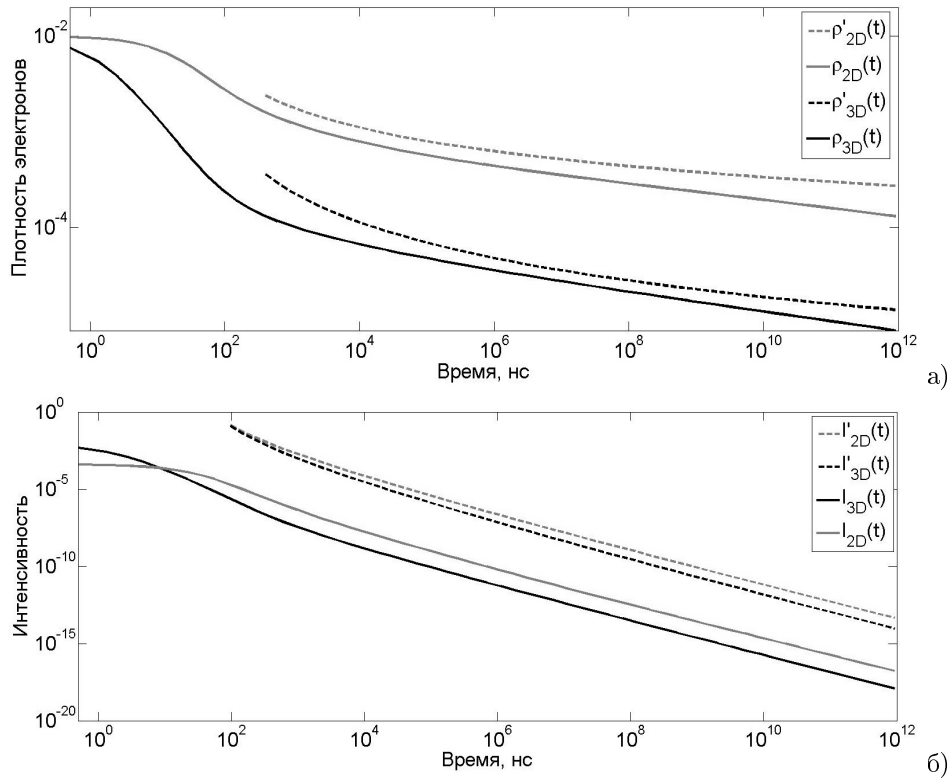


Рис. 3. Значения характеристик, полученные при КА-моделировании чистого туннелирования: а) плотность электронов, б) интенсивность фотолюминесценции

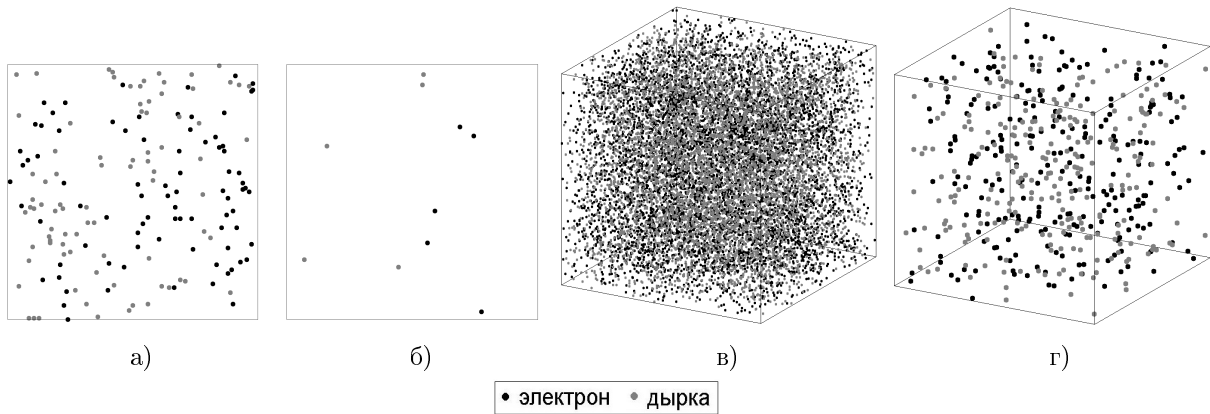
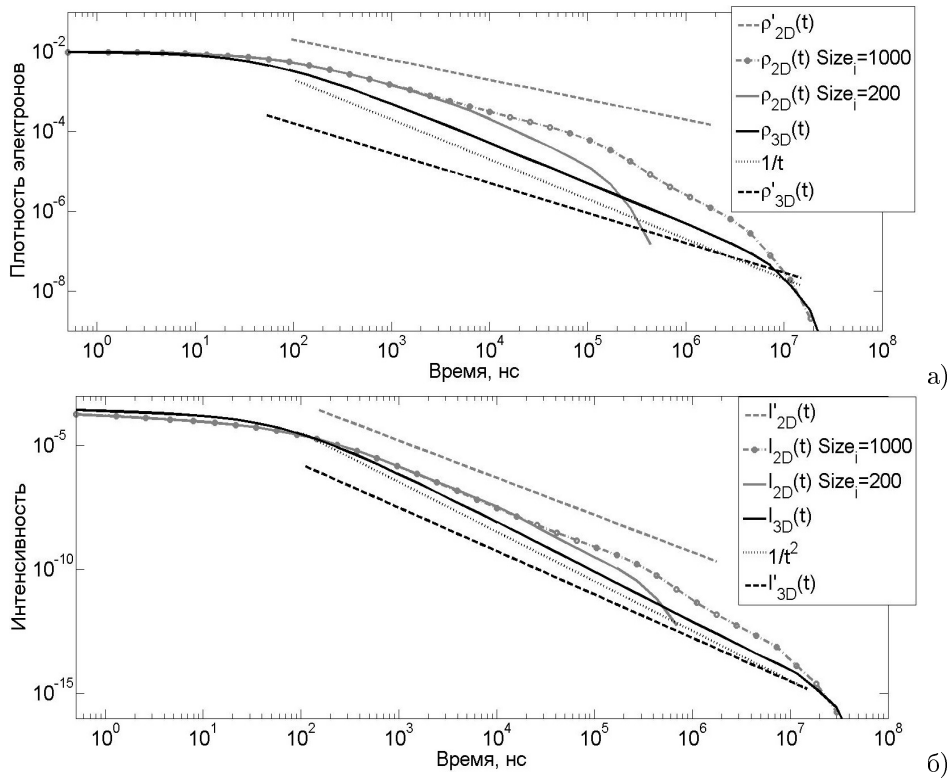


Рис. 4. Пространственное распределение электронов и дырок в режиме чистой диффузии: а)  $d = 2, t = 600$  нс, б)  $d = 2, t = 1,6 \cdot 10^4$  нс; в)  $d = 3, t = 600$  нс, г)  $d = 3, t = 1,6 \cdot 10^4$  нс

В режиме чистой диффузии (режим 2) туннелирование и рекомбинационные центры отсутствуют:  $B_0 = 0 \text{ нс}^{-1}$ ,  $C_{N_n}(0) = C_{N_p}(0) = 0$ ,  $b_{n0} = b_{p0} = 0 \text{ нс}^{-1}$ , коэффициенты диффузии  $D_n = D_p = 0,5 \text{ нм}^2 \cdot \text{нс}^{-1}$ . На рис. 4 показан характер эволюции  $\mathcal{N}$ , моделирующей динамику процесса рекомбинации вследствие диффузии. В этом случае рекомбинация электронов и дырок происходит при непосредственном столкновении частиц в одной клетке. В отличие от режима чистого туннелирования, из-за постоянного перемешивания частиц вследствие диффузии явного пространственного разделения электронов и дырок не происходит.

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, достаточно быстро отклоняются от графиков асимптотического поведения  $\rho'_{2D}(t)$ ,  $I'_{2D}(t)$ , посчитанных

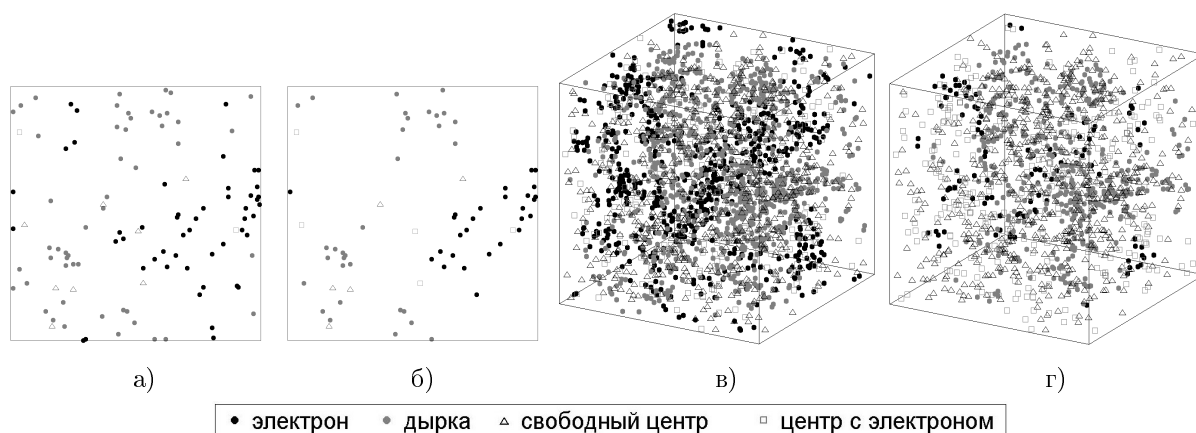


**Рис. 5.** Значения характеристик, полученные при КА-моделировании радиационной рекомбинации вследствие чистой диффузии частиц в двумерном и трехмерном случаях: а) плотность электронов, б) интенсивность фотолюминесценции

по формуле (4) с  $d = 2$ . Однако при увеличении размера области до  $1000 \times 1000$  клеток и той же начальной плотности частиц при соответствующем увеличении количества электронов и дырок  $C_n(0) = C_p(0) = 10000$  графики характеристик  $\rho_{2D}(t)$  и  $I_{2D}(t)$  параллельны графикам асимптотических значений  $\rho'_{2D}(t)$ ,  $I'_{2D}(t)$  до  $t = 10^5$  нс, что подтверждает соответствие поведения КА-модели рекомбинации теоретическим данным. Тогда как в трехмерном случае при любом размере области графики  $\rho_{3D}(t)$  и  $I_{3D}(t)$  отличаются от асимптотического поведения  $\rho'_{3D}(t)$ ,  $I'_{3D}(t)$  (4), и 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 трехмерном случае приводит к равномерному однородному распределению частиц во всем объеме. Кроме того, в отличие от режима чистого туннелирования, в трехмерном пространстве скорость аннигиляции частиц ниже, чем в двумерном.

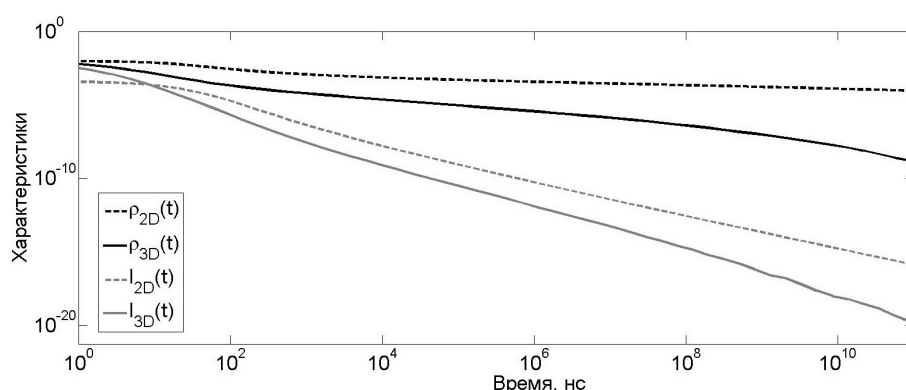
Характер эволюции  $\aleph$  для режима радиационной и нерадиационной рекомбинации (режим 3) в присутствии рекомбинационных центров (для  $d = 2$  :  $C_{N_n}(0) = 10$ , для  $d = 3$  :  $C_{N_n}(0) = 2000$ ) и без диффузии частиц показан на рис. 6. В присутствии рекомбинационных центров так же, как и в режиме 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.

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.



**Рис. 6.** Пространственное распределение электронов и дырок в режиме радиационной и нерадиационной рекомбинации: а)  $d = 2$ ,  $t = 960$  нс, б)  $d = 2$ ,  $t = 1,06 \cdot 10^5$  нс; в)  $d = 3$ ,  $t = 960$  нс, г)  $d = 3$ ,  $t = 1,06 \cdot 10^5$  нс

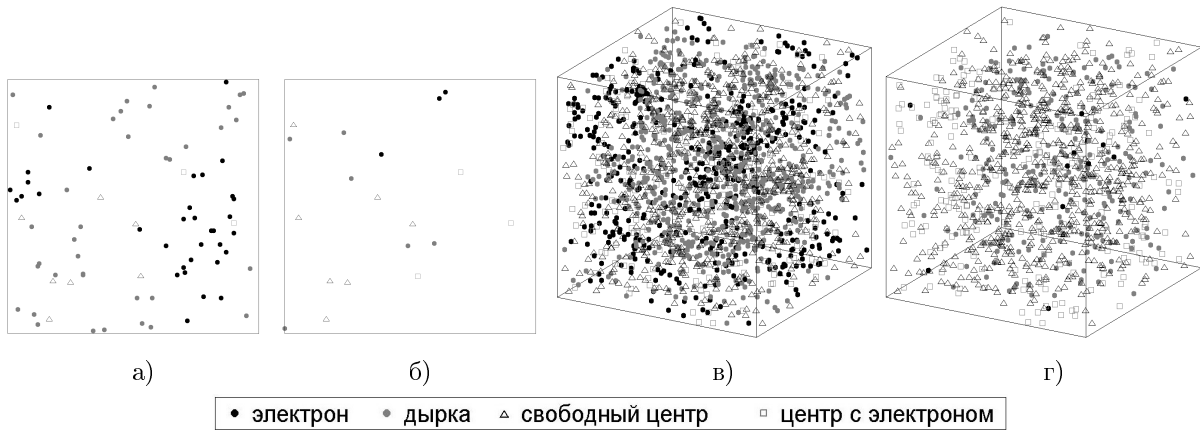
7 и рис. 3 видно, что при добавлении рекомбинационных центров значения характеристик  $\rho_{2D}(t)$  и  $I_{2D}(t)$  отклонились от значений, вычисленных для режима чистого туннелирования, меньше, чем значения  $\rho_{3D}(t)$  и  $I_{3D}(t)$ . Следовательно, наличие рекомбинационных центров оказывает большее влияние на скорость рекомбинации в трехмерном пространстве.



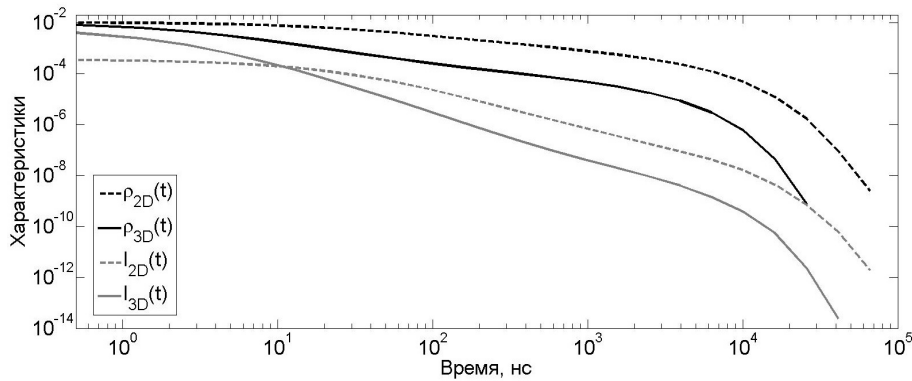
**Рис. 7.** Значения характеристик, полученные при КА-моделировании рекомбинации при наличии рекомбинационных центров в двумерном и трехмерном случаях

Характер эволюции  $\aleph$  в случае радиационной и нерадиационной рекомбинации (режим 4) при наличии рекомбинационных центров, распределенных в области с плотностью  $\rho_{N_n}(0) = 0,00025$ ,  $\rho_{N_p}(0) = 0$  при  $b_{n0} = b_{p0} = 0,02$  нс<sup>-1</sup>, и диффузии частиц  $D_n = D_p = 0,5$  нм<sup>2</sup> · нс<sup>-1</sup> представлен на рис. 8. В результате аннигиляции под воздействием трех процессов: туннелирования, рекомбинации в центрах и диффузии, плотность частиц быстро уменьшается. Скорость туннелирования и рекомбинации в ловушках выше скорости диффузии, поэтому на каждом временном шаге можно выделить кластеры электронов и дырок, но вследствие перемешивания частиц эти кластеры быстро распадаются.

На рис. 9 представлены графики характеристик, полученные в результате КА-моделирования радиационной и нерадиационной рекомбинации при наличии рекомбинационных центров и диффузии частиц (режим 4). Аналогично режимам 1, 3, графики плотности электронов и интенсивности фотolumинесценции, вычисленные для трехмерной области, убывают быстрее, чем графики  $\rho_{2D}(t)$  и  $I_{2D}(t)$ , полученные для двумерной области.



**Рис. 8.** Пространственное распределение электронов и дырок в режиме радиационной и нерадиационной рекомбинации при наличии диффузии: а)  $d = 2$ ,  $t = 960$  нс, б)  $d = 2$ ,  $t = 10^4$  нс; в)  $d = 3$ ,  $t = 960$  нс, г)  $d = 3$ ,  $t = 10^4$  нс



**Рис. 9.** Значения характеристик, полученные при КА-моделировании рекомбинации при наличии рекомбинационных центров и диффузии частиц для  $d = 2$  и  $d = 3$

### Заклучение

На основе системы уравнений Смолуховского (1) и алгоритма Монте-Карло [9, 12] разработана КА-модель рекомбинации электронов и дырок в двумерном и трехмерном полупроводниках. Для моделирования областей больших размеров и вычисления интегральных характеристик процесса рекомбинации (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 режимов: 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 обнаружено формирование кластеров электронов и дырок при малых значениях коэффициентов диффузии частиц. Выявлено, что в режимах, в которых присутствует туннелирование частиц, (режимы 1, 3, 4) скорость аннигиляции электронов и дырок в трехмерном случае выше, чем в двумерном. Кроме того, наличие центров рекомбинации

оказывает большее влияние на процесс рекомбинации в трехмерном пространстве. Однако в режиме чистой диффузии в двумерной области аннигиляция электронов и дырок происходит быстрее, чем в трехмерной, что свидетельствует о более существенном влиянии диффузии частиц на скорость рекомбинации в двумерном случае.

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

## Литература

1. Туркин А. Нитрид галлия как один из перспективных материалов в современной оптоэлектронике // Компоненты и технологии. 2011. No 5. С. 6–10.
2. Грузинцев А.Н., Редькин А.Н., Barthou С. Излучательная рекомбинация нанокристаллов GaN при большой мощности оптического возбуждения // Физика и техника полупроводников. 2005. No 10. С. 1200–1203.
3. 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. Vol. 86. 041302(R). DOI: 10.1103/physrevb.86.041302.
4. Hong G., Guoqiang R., Taofei Z., Feifei T., Yu X., Yumin Z., Mingyue W., Zhiqiang Z., Demin C., Jianfeng W., Ke X. Study of optical properties of bulk GaN crystals grown by HVPE // Journal of Alloys and Compounds. 2016. Vol. 674. P. 218–222.
5. Bulashevich K.A., Mymrin V.F., Karpov S.Y., Zhmakin I.A., Zhmakin A.I. Simulation of visible and ultra-violet group-III nitride light emitting diodes // Journal of Computational Physics. 2006, Vol. 213, Issue 1. P. 214–238. DOI: 10.1016/j.jcp.2005.08.011.
6. Massimo V.F., Steven E.L. Monte Carlo analysis of electron transport in small semiconductor devices including band-structure and space-charge effects // Physical Review B. 1988. Vol. 38, No 14. P. 9721–9745. DOI: 10.1103/physrevb.38.9721.
7. Kotomin E., Kuzovkov V. Modern Aspects of Diffusion-Controlled Reactions. Volume 34: Cooperative Phenomena in Bimolecular Processes (Comprehensive Chemical Kinetics) // Elsevier Science, 1996. 611 p. DOI: 10.1016/s0069-8040(96)x8001-4.
8. Gillespie D.T. A diffusional bimolecular propensity function // Journal of Chemical Physics. 2009. Vol. 131, Issue 16. P. 164109-1–164109-13. DOI: 10.1063/1.3253798.
9. 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. DOI: 10.1007/s10910-014-0446-6.
10. 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. DOI: 10.1515/mcma.2001.7.3-4.223.
11. 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. DOI: 10.1016/s0378-4754(99)00008-7.

12. 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.
13. Toffoli T., Margolus N. Cellular Automata Machines: A New Environment for Modeling // USA: MIT Press, 1987. 259 p.
14. Бандман О.Л. Клеточно-автоматные модели пространственной динамики // Системная информатика. Методы и модели современного программирования. 2006. No 10. С. 59–113.
15. 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.

Сабельфельд Карл Карлович, д.ф.-м.н., профессор, главный научный сотрудник, лаборатория стохастических задач, Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН (Новосибирск, Российская Федерация)

Киреева Анастасия Евгеньевна, к.ф.-м.н., научный сотрудник, лаборатория стохастических задач, Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН (Новосибирск, Российская Федерация)

---

DOI: 10.14529/cmse170106

## PARALLEL IMPLEMENTATION OF STOCHASTIC CELLULAR AUTOMATA MODEL OF ELECTRON-HOLE RECOMBINATION IN 2D AND 3D HETEROGENEOUS SEMICONDUCTORS

© 2017 K.K. Sabelfeld, A.E. Kireeva

*Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics SB RAS, Novosibirsk,  
Russian Federation (Academician Lavrentyev Avenue, Novosibirsk, 630090 Russia)*

*E-mail: karl@osmf.sccc.ru, kireeva@ssd.sccc.ru*

Received: 28.10.2016

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 automaton, radiative intensity.*

### FOR CITATION

Sabelfeld K.K., Kireeva A.E. Parallel implementation of stochastic cellular automata model of electron-hole recombination in 2D and 3D heterogeneous semiconductors. *Bulletin of the South Ural State University. Series: Computational Mathematics and Software Engineering*. 2017. vol. 6, no. 1. pp. 87–103. (in Russian) DOI: 10.14529/cmse170106.

## 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. pp. 6–10. (in Russian)
2. Gruzintsev A.N., Red'kin A.N., Barthou C. Izluchatel'naya rekombinatsiya nanokristallov GaN pri bol'shoy moshchnosti opticheskogo возбуждениya [Radiative recombination of GaN nanocrystals at high power optical excitation]. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* [Physics and Technique of Semiconductors], 2005. no. 10. pp. 1200–1203. (in Russian)
3. 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. Vol. 86. 041302(R). DOI: 10.1103/physrevb.86.041302.
4. Hong G., Guoqiang R., Taofei Z., Feifei T., Yu X., Yumin Z., Mingyue W., Zhiqiang Z., Demin C., Jianfeng W., Ke X. Study of optical properties of bulk GaN crystals grown by HVPE. *Journal of Alloys and Compounds*. 2016. Vol. 674. P. 218–222.
5. Bulashevich K.A., Mymrin V.F., Karpov S.Y., Zhmakin I.A., Zhmakin A.I. Simulation of visible and ultra-violet group-III nitride light emitting diodes. *Journal of Computational Physics*. 2006, Vol. 213, Issue 1. P. 214–238. DOI: 10.1016/j.jcp.2005.08.011
6. Massimo V.F., Steven E.L. Monte Carlo analysis of electron transport in small semiconductor devices including band-structure and space-charge effects. *Physical Review B*. 1988. Vol. 38, No 14. P. 9721–9745. DOI: 10.1103/physrevb.38.9721.
7. Kotomin E., Kuzovkov V. Modern Aspects of Diffusion-Controlled Reactions. Volume 34: Cooperative Phenomena in Bimolecular Processes (Comprehensive Chemical Kinetics). Elsevier Science, 1996. 611 p. DOI: 10.1016/s0069-8040(96)x8001-4.
8. Gillespie D.T. A diffusional bimolecular propensity function. *Journal of Chemical Physics*. 2009. Vol. 131, Issue 16. P. 164109-1–164109-13. DOI: 10.1063/1.3253798.
9. 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. pp. 651–669. DOI: 10.1007/s10910-014-0446-6.
10. 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. pp. 223–228. DOI: 10.1515/mcma.2001.7.3-4.223.
11. 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. pp. 57–79. DOI: 10.1016/s0378-4754(99)00008-7
12. 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. pp. 33–48. DOI: 10.1515/mcma-2014-0012.
13. Toffoli T., Margolus N. Cellular Automata Machines: A New Environment for Modeling. USA: MIT Press, 1987. 259 p.
14. Bandman O.L. Kletchno-avtomatnye modeli prostranstvennoy dinamiki [Cellular Automata Model of Spatial Dynamics]. *Sistemnaya informatika. Metody i modeli sovremennogo*



*programmirovaniya* [System Informatics. Methods and Models of Modern Programming], 2006. no 10. pp. 59–113. (in Russian)

15. 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. pp. 381–397.