

УДК 51-73, 519-245

**СТОХАСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
РЕКОМБИНАЦИИ ЭЛЕКТРОНОВ И ДЫРОК
В ДВУМЕРНЫХ И ТРЁХМЕРНЫХ
НЕОДНОРОДНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ.
Ч. I. СТОХАСТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И АЛГОРИТМЫ***

К. К. Сабельфельд, А. Е. Киреева

*Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН,
630090, г. Новосибирск, просп. Академика Лаврентьева, 6
E-mail: karl@osmf.sccc.ru
kireeva@ssd.sccc.ru*

Представлены стохастические модели рекомбинации электронов и дырок в неоднородном полупроводнике в двумерном и трёхмерном случаях, разработанные на основе двух подходов: дискретного (клеточный автомат) и непрерывного (метод Монте-Карло). Описана математическая модель рекомбинации электронов и дырок, построенная на базе системы неоднородных по пространству нелинейных интегродифференциальных уравнений типа Смолуховского. Изложены непрерывный алгоритм метода Монте-Карло и дискретный клеточно-автоматный алгоритм, использующиеся для моделирования рекомбинации частиц в полупроводнике.

Ключевые слова: рекомбинация, полупроводник, диффузия, туннелирование, стохастическое моделирование, клеточный автомат.

DOI: 10.15372/AUT20170114

Введение. Приборы на основе полупроводниковых материалов широко используются в микроэлектронике, солнечной энергетике, оптоэлектронике для создания лазеров, светодиодов и фотоприёмников [1, 2]. В последнее время интенсивно исследуются процессы рекомбинации, протекающие в неоднородных полупроводниках, в целях создания новых полупроводниковых материалов с улучшенными характеристиками, а также расширения области их применения. Широкозонный полупроводник нитрид галлия (GaN) является одним из таких перспективных материалов для разработки полевых транзисторов и современной оптоэлектроники [3].

В [4–7] создана стохастическая модель рекомбинации электронов и дырок в неоднородном полупроводнике GaN, где под неоднородностью понимается пространственная неоднородность, возникающая из-за дефектов и случайного распределения электронов и дырок в объёме полупроводника. Решается нестационарная задача, когда в начальный момент времени с помощью фемтосекундного лазера в полупроводнике создаётся избыток электронов и дырок. Частицы аннигилируют друг с другом путём туннелирования, а также при непосредственном столкновении вследствие диффузии. Кроме того, при наличии различных дефектов и дислокаций, которые всегда имеются даже в самых чистых материалах, важно учитывать нерадиационную рекомбинацию электронов и дырок в таких рекомбинационных центрах. Все эти процессы были включены в интегродифференциальную стохастическую модель, предложенную в [4].

В данном исследовании на основе алгоритмов метода Монте-Карло для моделирования рекомбинации электронов и дырок, представленных в [4–7], разработаны клеточно-автоматные (КА) и непрерывные модели рекомбинации для 2D- и 3D-полупроводников.

*Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 14-11-00083).

В клеточно-автоматной модели рекомбинации моделируемое пространство является дискретным и состоит из множества клеток. Каждой клетке ставятся в соответствие пространственная координата и состояние, отражающее присутствие либо отсутствие в клетке частиц, участвующих в моделируемом процессе. Состояние изменяется по правилам, имитирующим кинетику процесса рекомбинации. В непрерывной модели рекомбинации пространство непрерывно и моделируется взаимодействие и перемещение частиц, распределённых в этом пространстве.

При моделировании рекомбинации электронов и дырок наиболее существенно различаются непрерывный и дискретный (или клеточно-автоматный) алгоритмы, описывающие диффузию частиц, поэтому целью данной работы является создание стохастических алгоритмов рекомбинации диффузионно подвижных электронов и дырок в неоднородных полупроводниках и их имплементация для непрерывной и дискретной диффузионных моделей.

1. Математическая модель рекомбинации электронов и дырок в полупроводнике. В [4, 7] предложена стохастическая модель рекомбинации электронов и дырок в полупроводнике. Предполагается, что электроны (n), дырки (p) и рекомбинационные центры случайно распределены в объёме G с плотностями $\rho_n(\mathbf{r}; t)$, $\rho_p(\mathbf{r}; t)$ и $\rho_N(\mathbf{r})$, где \mathbf{r} обозначает пространственную координату, а t — момент времени. Рекомбинационные центры могут находиться в двух состояниях: центры N_n , ожидающие электрон, и центры N_p , ожидающие дырку. Свободный рекомбинационный центр N_n способен захватить электрон, после чего переходит в состояние N_p и становится способным захватить дырку. Суммарная плотность рекомбинационных центров $\rho_N(\mathbf{r}; t) = \rho_{N_n}(\mathbf{r}) + \rho_{N_p}(\mathbf{r}; t)$ в процессе моделирования остаётся постоянной, меняются только плотности $\rho_{N_n}(\mathbf{r})$ и $\rho_{N_p}(\mathbf{r})$.

Электроны и дырки могут аннигилировать друг с другом путём туннелирования со скоростью $B(|\mathbf{x}|) = B_0 \exp(-|\mathbf{x}|/a_{np})$, где B_0 — коэффициент радиационной рекомбинации n и p ; $|\mathbf{x}|$ — расстояние между взаимодействующими электроном и дыркой; a_{np} — характерное расстояние взаимодействия n и p . Процесс аннигиляции электронов и дырок вследствие туннелирования либо диффузии называется радиационной рекомбинацией и сопровождается выделением энергии в виде фотона. Захват электронов в свободные рекомбинационные центры происходит со скоростью $b_n(|\mathbf{x}|) = b_{n0} \exp(-|\mathbf{x}|/a_{nN_n})$, где b_{n0} — коэффициент захвата электронов в центры N_n ; $|\mathbf{x}|$ — расстояние между взаимодействующими n и N_n ; a_{nN_n} — характерное расстояние взаимодействия n и N_n . Скорость захвата дырок в рекомбинационные центры, содержащие электроны, $b_p(|\mathbf{x}|) = b_{p0} \exp(-|\mathbf{x}|/a_{pN_p})$, где параметры b_{p0} , $|\mathbf{x}|$, a_{pN_p} определяются аналогично случаю взаимодействия электронов и центров N_n . При захвате дырки в центр N_p , содержащий электрон, происходит их нерадиационная рекомбинация, сопровождающаяся выделением тепловой энергии.

Электроны и дырки также могут диффундировать в объёме G с константами диффузии D_n и D_p . При перемещении вследствие диффузии встретившиеся электроны и дырки аннигилируют друг с другом с коэффициентом β_d , где d — размерность пространства: $\beta_2 = 4\pi D$ при $d = 2$ и $\beta_3 = 4\pi D r_0$ при $d = 3$ ($D = D_n + D_p$ — суммарный коэффициент диффузии электронов и дырок, r_0 — радиус частицы ($r_0 = 1$ нм)). Аналогичным образом вводятся коэффициенты захвата электронов и дырок в рекомбинационные центры соответствующего типа (N_n либо N_p) при попадании частиц в эти центры из-за диффузии.

Изменение плотности частиц в результате процессов рекомбинации и диффузии, представленных выше, запишем в виде системы уравнений Смолуховского [7]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_n(\mathbf{r}; t)}{\partial t} = & D_n \Delta \rho_n(\mathbf{r}; t) - \rho_n(\mathbf{r}; t) \int B(|\mathbf{x}|) \rho_p(\mathbf{r} + \mathbf{x}; t) d\mathbf{x} - \\ & - \beta_d \rho_n(\mathbf{r}; t) \rho_p(\mathbf{r}; t) - \rho_n(\mathbf{r}; t) \int b_n(|\mathbf{x}|) \rho_{N_n}(\mathbf{r} + \mathbf{x}; t) d\mathbf{x}; \end{aligned}$$

$$\frac{\partial \rho_p(\mathbf{r}; t)}{\partial t} = D_p \Delta \rho_p(\mathbf{r}; t) - \rho_p(\mathbf{r}; t) \int B(|\mathbf{x}|) \rho_n(\mathbf{r} + \mathbf{x}; t) d\mathbf{x} - \quad (1)$$

$$- \beta_d \rho_p(\mathbf{r}; t) \rho_n(\mathbf{r}; t) - \rho_p(\mathbf{r}; t) \int b_p(|\mathbf{x}|) \rho_{N_p}(\mathbf{r} + \mathbf{x}; t) d\mathbf{x};$$

$$\frac{\partial \rho_{N_n}(\mathbf{r}; t)}{\partial t} = -\rho_n(\mathbf{r}; t) \int b_n(|\mathbf{x}|) \rho_{N_n}(\mathbf{r} + \mathbf{x}; t) d\mathbf{x} + \rho_p(\mathbf{r}; t) \int b_p(|\mathbf{x}|) \rho_{N_p}(\mathbf{r} + \mathbf{x}; t) d\mathbf{x}.$$

Для упрощения в системе уравнений (1) нерадиационная рекомбинация частиц вследствие диффузии не рассматривается.

В начальный момент времени $t = 0$ частицы случайно распределены в объёме G с плотностями

$$\rho_n(\mathbf{r}; 0) = \sum_{i=1}^{n_0} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i), \quad \rho_p(\mathbf{r}; 0) = \sum_{i=1}^{p_0} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j),$$

$$\rho_{N_n}(\mathbf{r}; 0) = \sum_{i=1}^{N_{n0}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_k), \quad \rho_{N_p}(\mathbf{r}; 0) = \sum_{i=1}^{N_{p0}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l),$$

где $\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k, \mathbf{r}_l$ — равномерно и независимо распределённые случайные координаты; n_0, p_0, N_{n0}, N_{p0} — количество электронов, дырок, рекомбинационных центров типа N_n и N_p .

Поток фотонов, образующихся в результате радиационной рекомбинации, вычисляется по формуле

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

где $\langle \cdot \rangle$ — математическое ожидание по начальным распределениям частиц, $|G|$ — объём области G . Интенсивность фотолюминесценции пропорциональна потоку фотонов: $I(t) = \hbar\omega\phi(t)$ ($\hbar\omega$ — энергия фотона [4]).

В [4] с помощью корреляционного анализа получены формулы для вычисления асимптотических значений плотности электронов ρ'_n и потока фотонов ϕ' в двумерном и трёхмерном пространствах при бесконечно больших временах для двух случаев:

1) радиационной рекомбинации вследствие чистого туннелирования, т. е. без рекомбинационных центров и диффузии частиц:

$$\text{для } d = 2: \quad \rho'_{n-2d}(t) \sim 1/\ln(t); \quad \phi'_{2d}(t) \sim 1/\{t(\ln(t))^2\}, \quad (2)$$

$$\text{для } d = 3: \quad \rho'_{n-3d}(t) \sim 1/(\ln(t))^{1,5}; \quad \phi'_{3d}(t) \sim 1/(t(\ln(t))^{2,5}); \quad (3)$$

2) радиационной рекомбинации из-за чистой диффузии частиц, т. е. без рекомбинационных центров и туннелирования:

$$\text{для } d = 2: \quad \rho'_{n-2d}(t) \sim 1/\sqrt{t}; \quad \phi'_{2d}(t) \sim 1/(t\sqrt{t}), \quad (4)$$

$$\text{для } d = 3: \quad \rho'_{n-3d}(t) \sim 1/t^{0,75}; \quad \phi'_{3d}(t) \sim 1/t^{1,75}. \quad (5)$$

1.1. *Моделирование рекомбинации электронов и дырок в полупроводнике с помощью метода Монте-Карло.* Для решения системы уравнений Смолуховского (1) в [4] разработан алгоритм метода Монте-Карло. Метод прямого статистического моделирования Монте-Карло предполагает, что процесс попарного взаимодействия частиц является марковским, т. е. зависит только от текущего состояния системы.

В модели рекомбинации электронов и дырок моделируются события: s_1 — радиационная рекомбинация вследствие чистого туннелирования; s_2 — захват электрона в свободный рекомбинационный центр N_n ; s_3 — захват дырки в рекомбинационный центр N_p , содержащий электрон, в результате чего происходит нерадиационная рекомбинация электрона и дырки; s_4 — диффузия электрона; s_5 — диффузия дырки.

Алгоритм (1) моделирования рекомбинации электронов и дырок состоит в следующем.

1. В начальный момент времени $t = 0$ генерируются координаты n_0 электронов, p_0 дырок, N_{n0} рекомбинационных центров N_n и N_{p0} рекомбинационных центров N_p . Координаты частиц распределяются в объеме G случайно, равномерно и независимо.

2. Для событий s_i вычисляются значения мажорантных частот λ_i :

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= C_n C_p B_0 \exp\left(-\frac{r_{np}^{\min}}{a_{np}}\right); & \lambda_2 &= C_n C_{N_n} b_{n0} \exp\left(-\frac{r_{nN_n}^{\min}}{a_{nN_n}}\right); \\ \lambda_3 &= C_p C_{N_p} b_{p0} \exp\left(-\frac{r_{pN_p}^{\min}}{a_{pN_p}}\right); & \lambda_4 &= C_n D_n; & \lambda_5 &= C_p D_p, \end{aligned} \quad (6)$$

где $C_n, C_p, C_{N_n}, C_{N_p}$ — количество электронов, дырок, центров N_n и N_p в объеме G . Константы B_0, b_{n0}, b_{p0}, D_n и D_p определены в разд. 1. Символы $r_{np}^{\min}, r_{nN_n}^{\min}, r_{pN_p}^{\min}$ обозначают минимальное из расстояний между электронами и дырками, электронами и центрами N_n , дырками и центрами N_p соответственно.

На основании значений мажорантных частот вычисляются вероятности событий s_i :

$$p_i = \lambda_i / \lambda, \quad i = 1, \dots, 5, \quad \lambda = \sum_{i=1}^5 \lambda_i.$$

3. Выбирается одно из событий s_i с вероятностью p_i .

4. Для выбранного события s_i вычисляется значение временного шага Δt :

— если выбрано одно из событий $s_i, i = 1, 2, 3$, то $\Delta t = -\log(\text{rand})/\lambda$;

— если выбрана диффузия электрона s_4 , то $\Delta t = t_{\text{diff}}/C_n$, где t_{diff} — время диффузионного шага;

— аналогично, если выбрана диффузия дырки s_5 , то $\Delta t = t_{\text{diff}}/C_p$.

Значение времени увеличивается: $t = t + \Delta t$.

5. Для выбранного события s_i выбирается пара частиц либо одна частица:

— для s_1 случайно, равномерно и независимо выбирается электрон и дырка;

— для s_2 случайно, равномерно и независимо выбирается электрон и центр N_n ;

— для s_3 случайно, равномерно и независимо выбирается электрон и центр N_p ;

— для s_4 случайно, равномерно выбирается один из электронов;

— для s_5 случайно, равномерно выбирается одна из дырок.

Выбранное событие s_i реализуется с вероятностью P_{s_i} :

— если выбрано событие s_1 , вероятность его реализации $P_{s_1} = \exp\left(\frac{r_{np}^{\min} - |\mathbf{x}|}{a_{np}}\right)$, где $|\mathbf{x}|$ — расстояние между выбранными n и p ; если случайное число $\text{rand} < P_{s_1}$, где $\text{rand} \in$

$\in (0; 1)$, то s_1 реализуется: выбранные электрон и дырка исчезают ($C_n = C_n - 1$, $C_p = C_p - 1$), число фотонов увеличивается ($C_{\text{photon}} = C_{\text{photon}} + 1$);

— если выбрано событие s_2 , вероятность его реализации $P_{s_2} = \exp\left(\frac{r_{nN_n}^{\min} - |\mathbf{x}|}{a_n N_n}\right)$, где $|\mathbf{x}|$ — это расстояние между выбранными n и N_n ; если $\text{rand} < P_{s_2}$, то s_2 реализуется: выбранный электрон исчезает ($C_n = C_n - 1$), состояние центра N_n меняется на N_p ($C_{N_n} = C_{N_n} - 1$, $C_{N_p} = C_{N_p} + 1$);

— если выбрано событие s_3 , вероятность его реализации $P_{s_3} = \exp\left(\frac{r_{pN_p}^{\min} - |\mathbf{x}|}{a_p N_p}\right)$, где $|\mathbf{x}|$ — расстояние между выбранными p и N_p ; если $\text{rand} < P_{s_3}$, то s_3 реализуется: выбранная дырка исчезает ($C_p = C_p - 1$), состояние центра N_p меняется на N_n ($C_{N_p} = C_{N_p} - 1$, $C_{N_n} = C_{N_n} + 1$);

— если выбрано событие s_4 , то вероятность его реализации $P_{s_4} = 1$; выбранный электрон диффундирует по алгоритму, описанному в разд. 2;

— если выбрано событие s_5 , то вероятность его реализации $P_{s_5} = 1$; выбранная дырка диффундирует по алгоритму, описанному в разд. 2.

7. Если $C_n > 0$, $C_p > 0$ и время моделирования меньше заданного $t < T_{\text{fin}}$, то:

— если событие s_i было реализовано ($\text{rand} < P_{s_i}$), то переход на шаг 2;

— иначе переход на шаг 3.

Плотность частиц типа $u \in \{n, p, N_n, N_p\}$ вычисляется в заданные моменты времени t_k ($k = 1, \dots, K$): $\rho_u(t_k) = C_u(t_k)/|G|$, где $C_u(t_k)$ — количество частиц типа u в области G в момент времени t_k . Поток фотонов рассчитывается как число фотонов, образовавшихся за промежуток времени $[t_{k-1}; t_k]$: $\phi(t_k) = C_{\text{photon}}/(t_k - t_{k-1})$.

В соответствии с определением плотности частиц и потока фотонов в виде математических ожиданий по всем начальным конфигурациям алгоритм моделирования рекомбинации электронов и дырок (шаги 1–7) выполняется для различных начальных распределений координат частиц M раз и вычисленные значения характеристик осредняются.

2. Дискретная и непрерывная модели рекомбинации электронов и дырок в полупроводнике. В данной работе для моделирования рекомбинации электронов и дырок используются два подхода: непрерывный и дискретный.

В непрерывной модели рекомбинации область G рассматривается как непрерывное пространство, в котором случайным образом распределены частицы. Динамика частиц определяется согласно алгоритму (1).

В клеточно-автоматной модели рекомбинации область моделирования задаётся в виде множества клеток [8, 9], каждой из которых сопоставлена пара значений (a, \mathbf{r}) , где a — состояние, \mathbf{r} — целочисленная координата клетки в области G . Состояния клеток $a \in \{n, p, N_n, N_p, \emptyset\}$ отражают наличие в клетке частицы типа $u \in \{n, p, N_n, N_p\}$ либо отсутствие частиц $a = \emptyset$. Множество координат клеток X^d в двумерном случае образует квадратную решётку $X^2 = \{\mathbf{r} = (i, j): i, j = 1 \dots \text{Size}\}$, а в трёхмерном — куб $X^3 = \{\mathbf{r} = (i, j, k): i, j, k = 1 \dots \text{Size}\}$. Состояния клеток изменяются по правилам переходов Θ , определяющимся на основании алгоритма (1).

Диффузия частиц в непрерывной и КА-моделях рекомбинации электронов и дырок моделируется по-разному.

В непрерывном случае диффузия частиц моделируется с помощью алгоритма блуждания по сферам [10]. Суть данного метода состоит в том, что вокруг частицы строится сфера в трёхмерном пространстве или окружность в двумерном таким образом, чтобы внутри неё не было частиц других типов. Моделируется случайное время τ выхода частицы из этой сферы (окружности) и случайным образом выбирается точка на сфере, в которую переходит частица, а время увеличивается на τ .

Время выхода из сферы произвольного радиуса R определяется временем выхода из единичной сферы:

$$\tau_R = \tau_1 R^2 / 2D, \quad (7)$$

где D — коэффициент диффузии частицы.

Время выхода из сферы единичного радиуса диффузионного (винеровского) процесса известно [11]. В двумерном случае плотность распределения времени выхода частицы из окружности единичного радиуса вычисляется по формуле

$$p(t, 0, 1) = \sum_{i=1}^I \frac{\mu_i}{J_1(\mu_i)} \exp\left(-\frac{\mu_i^2 t}{2}\right), \quad (8)$$

где J_1 — функция Бесселя; μ_i — положительные нули функции Бесселя J_0 ; I — число удерживаемых членов ряда. В трёхмерном случае плотность распределения времени выхода частицы из сферы единичного радиуса находится по формуле

$$p(t, 0, 1) = \pi^2 \sum_{i=1}^I (-1)^{i+1} i^2 \exp\left(-\frac{\pi^2 i^2 t}{2}\right). \quad (9)$$

Алгоритм моделирования диффузии электронов в непрерывном случае можно представить в следующем виде.

1. Для каждого электрона:

— вычисляются расстояния до ближайшей дырки — r_{np}^{\min} и центра N_n — $r_{nN_n}^{\min}$;

— строится сфера с радиусом, равным минимальному значению $R = \min(r_{np}^{\min}, r_{nN_n}^{\min})$;

— разыгрывается случайное время τ_1 выхода электрона из единичной сферы в соответствии с плотностью распределения (9) (для окружности (8));

— вычисляется время выхода электрона из построенной сферы с радиусом R согласно формуле (7): $\tau_R = \tau_1 R^2 / 2D_n$.

2. Выбирается электрон с минимальным временем выхода из сферы τ_{\min} .

3. Случайно и равномерно выбирается точка на сфере, построенной для данного электрона, и электрон перемещается в неё.

4. Если радиус $R = r_{np}^{\min}$, находится расстояние r от электрона до дырки, соответствующее расстоянию r_{np}^{\min} . Если $r < \epsilon$, где ϵ — достаточно малое число, то частицы аннигилируют ($C_n = C_n - 1$, $C_p = C_p - 1$) и образуется фотон ($C_{\text{photon}} = C_{\text{photon}} + 1$).

5. Если радиус $R = r_{nN_n}^{\min}$, вычисляется расстояние r от электрона до центра N_n , для которого было определено расстояние $r_{nN_n}^{\min}$. Если $r < \epsilon$, то электрон захватывается в этот центр ($C_n = C_n - 1$, $C_{N_n} = C_{N_n} - 1$, $C_{N_p} = C_{N_p} + 1$).

6. Вычисляется значение временного шага $\Delta t = t_{\text{diff}} / C_n$, где время диффузионного шага $t_{\text{diff}} = \tau_{\min}$.

Диффузия дырок моделируется по алгоритму, аналогичному представленному выше, в котором для дырок строятся сферы с радиусом, равным минимальному из расстояний до ближайшего электрона и ближайшего центра N_p .

При КА-подходе диффузия имитируется как перемещение частицы в соседнюю клетку в случайном направлении. Алгоритм моделирования диффузии электронов в дискретном случае можно представить в следующем виде.

Случайно равномерно выбирается одна из клеток с состоянием $a = n$: (n, \mathbf{r}) , $\mathbf{r} \in X^d$.

а) для выбранной клетки случайно и равномерно выбирается соседняя клетка $(a, \mathbf{r} + \mathbf{l})$, где \mathbf{l} — одно из четырёх при $d = 2$ и одно из шести при $d = 3$ возможных направлений перехода;

б) проверяется состояние соседней клетки $(a, \mathbf{r} + \mathbf{l})$:

— если $a = \emptyset$, то электрон переходит в соседнюю клетку, состояния клеток изменяются на (\emptyset, \mathbf{r}) , $(n, \mathbf{r} + \mathbf{l})$, количество частиц остаётся неизменным,

— если $a = p$, то электрон и дырка аннигилируют друг с другом, состояния клеток изменяются на (\emptyset, \mathbf{r}) , $(\emptyset, \mathbf{r} + \mathbf{l})$, количество частиц уменьшается ($C_n = C_n - 1$, $C_p = C_p - 1$), при этом образуется фотон ($C_{\text{photon}} = C_{\text{photon}} + 1$),

— если $a = N_n$, то электрон захватывается в этот центр, состояния клеток изменяются на (\emptyset, \mathbf{r}) , $(N_p, \mathbf{r} + \mathbf{l})$, количество частиц пересчитывается ($C_n = C_n - 1$, $C_{N_n} = C_{N_n} - 1$, $C_{N_p} = C_{N_p} + 1$);

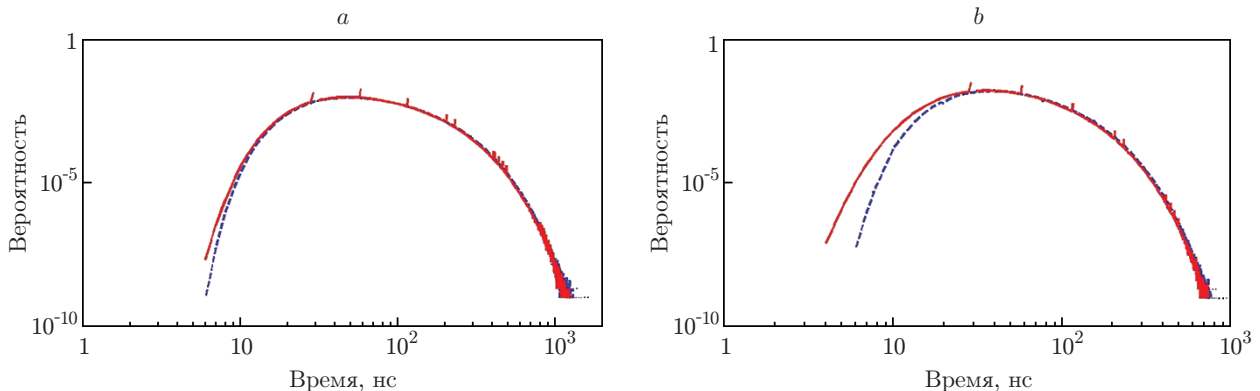
в) вычисляется значение временного шага $\Delta t = t_{\text{diff}}/C_n$, где время диффузионного шага $t_{\text{diff}} = 1/(2dD_n)$, при $d = 2$ время $t_{\text{diff}} = 1/(4D_n)$, при $d = 3$ время $t_{\text{diff}} = 1/(6D_n)$.

Диффузия дырок моделируется по КА-алгоритму, аналогичному представленному выше, в котором имитируются перемещение дырки в соседнюю свободную клетку, взаимодействие дырки с электроном, находящимся в соседней клетке, а также захват дырки в центр N_p и аннигиляция с электроном.

В алгоритмах диффузии время диффузионного шага t_{diff} выбирается по-разному. В непрерывной модели рекомбинации электронов и дырок t_{diff} соответствует минимальному времени выхода частицы из сферы с радиусом R и вычисляется по формуле (7): $\tau_R = \tau_1 R^2/(2D)$. В КА-модели рекомбинации значение t_{diff} подобрано таким образом, чтобы среднее время выхода электрона из сферы с радиусом R в непрерывной и КА-моделях совпадало. Формула для вычисления диффузионного шага при дискретном подходе соответствует (7), где минимальный временной шаг $\tau_1 = 1/d$ и минимальный пространственный шаг $R = 1$. Следовательно, в этом случае $t_{\text{diff}} = 1/(2dD)$.

На рисунке для двумерного (a) и трёхмерного (b) случаев представлены плотности распределения времени выхода электрона из сферы с радиусом $R = 20$, посчитанные с помощью непрерывной (сплошные кривые) и клеточно-автоматной (штриховые кривые) моделей диффузии. Плотности вычислены при $C_n(0) = 10^9$ электронов для случая чистой диффузии электронов с коэффициентом $D_n = 1$, остальные параметры равны 0.

Значения плотностей распределения времени выхода электрона из сферы с радиусом $R = 20$, полученные с помощью непрерывной и КА-моделей рекомбинации, совпадают при больших значениях времени выхода и различаются при малых значениях $\tau < 20$. Эти отличия связаны с тем, что в дискретной модели минимальный шаг перемещения частицы равен одной клетке, размер которой принят 1 нм, тогда как в непрерывной модели частицы могут перемещаться за один временной шаг на меньшие расстояния. Следовательно, непрерывная модель позволяет более точно моделировать диффузию частиц на малых расстояниях.



Заключение. В данной работе реализованы непрерывные и клеточно-автоматные алгоритмы моделирования рекомбинации электронов и дырок в двумерном и трёхмерном полупроводниках в общем случае. Представлены непрерывный и КА-алгоритмы моделирования рекомбинации вследствие чистой диффузии частиц. С помощью реализованных алгоритмов моделирования диффузии построены графики плотностей распределения времени выхода электрона из сферы в трёхмерном случае и из окружности в двумерном. Путём сравнительного анализа результатов выведены формулы для вычисления времени диффузионного шага в КА-модели, обеспечивающие совпадение среднего времени выхода электрона из сферы с одинаковым радиусом в непрерывной и КА-моделях. Обнаружено, что значения плотностей распределения времени выхода электрона из сферы, полученные с помощью непрерывного и КА-подходов, различаются при малых значениях времени выхода.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Демьяненко М. А., Есаев Д. Г., Козлов А. И. и др. Исследование технологических ограничений в кремниевых схемах считывания сигналов инфракрасных фотоприёмников на основе многослойных структур с квантовыми ямами // Автометрия. 2015. **51**, № 2. С. 110–118.
2. Неизвестный И. Г., Шумский В. Н. Трёхспектральное многоэлементное фотоприёмное устройство // Автометрия. 2016. **52**, № 5. С. 37–43.
3. Gorgis A., Flissikowski T., Brandt O. et al. Time-resolved photoluminescence spectroscopy of individual GaN nanowires // Phys. Rev. B. 2012. **86**, N 4. 041302.
4. 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 // Journ. Math. Chem. 2015. **53**, Is. 2. P. 651–669.
5. Kolodko A. A., Sabelfeld K. K. Stochastic Lagrangian model for spatially inhomogeneous Smoluchowski equation governing coagulating and diffusing particles // Monte Carlo Methods and Appl. 2001. **7**, Is. 3–4. P. 223–228.
6. Kolodko A., Sabelfeld K., Wagner W. A stochastic method for solving Smoluchowski's coagulation equation // Math. and Comput. in Simulation. 1999. **49**, Is. 1–2. P. 57–79.
7. 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 Appl. 2015. **21**, Is. 1. P. 33–48. DOI:10.1515/mcma-2014-0012.
8. Toffoli T., Margolus N. Cellular Automata Machines: A New Environment for Modeling. Cambridge: The MIT Press, 1987. 259 p.
9. Бандман О. Л. Клеточно-автоматные модели пространственной динамики // Системная информатика. 2006. Вып. 10: Методы и модели современного программирования. С. 57–113.
10. Sabelfeld K. K. Monte Carlo Methods in Boundary Value Problems. Berlin — Heidelberg: Springer-Verlag, 1991. 283 p.
11. Steisunas S. On the sojourn time of the Brownian process in a multidimensional sphere // Nonlinear Analysis: Modelling and Control. 2009. **14**, N 3. P. 389–396.

Поступила в редакцию 11 августа 2016 г.