

УДК 51-73, 519-245

**СТОХАСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
РЕКОМБИНАЦИИ ЭЛЕКТРОНОВ И ДЫРОК
В ДВУМЕРНЫХ И ТРЁХМЕРНЫХ
НЕОДНОРОДНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ.
Ч. II. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ***

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 результаты стохастического моделирования рекомбинации электронов и дырок в неоднородном полупроводнике в двумерном и трёхмерном случаях, основанного на дискретном (клеточный автомат) и непрерывном (метод Монте-Карло) подходах. Исследована кинетика процесса рекомбинации частиц в режимах чистой диффузии и диффузии с туннелированием. Обнаружено различие в поведении электронно-дырочных пространственных корреляций, вычисляемых дискретной и непрерывной моделями, и связанного с этим характера формирования сегрегации в трёхмерных полупроводниках. Проведён сравнительный анализ характеристик моделирования, вычисленных с помощью клеточно-автоматной и непрерывной моделей рекомбинации.

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

DOI: 10.15372/AUT20170214

Введение. Широкозонный полупроводник нитрид галлия (GaN) является перспективным материалом для разработок полевых транзисторов и современной оптоэлектроники. Исследование процессов, протекающих в полупроводниках, способствует созданию полупроводниковых материалов с улучшенными характеристиками, а также расширению области применения приборов на их основе.

Созданная в [1–3] стохастическая модель рекомбинации электронов и дырок в неоднородном полупроводнике GaN описана в [4]. В этих работах под неоднородностью понимается пространственная неоднородность полупроводника, в объёме которого случайным образом распределены электроны, дырки и дефекты — центры рекомбинации. В модели изучается случай, когда в начальный момент времени с помощью фемтосекундного лазера в полупроводнике создаётся избыток электронов и дырок, затем частицы аннигилируют друг с другом путём туннелирования и при непосредственном столкновении вследствие диффузии. Предложенная модель также учитывает нерадиационную рекомбинацию электронов и дырок в ловушках. Кроме того, в [4] изложены алгоритмы моделирования рекомбинации частиц, использующие непрерывный и дискретный (клеточно-автоматный (КА)) подходы.

В данной работе представлены результаты моделирования рекомбинации электронов и дырок с помощью клеточно-автоматного и непрерывного алгоритмов. При использовании дискретного и непрерывного подходов наиболее существенно различаются алгоритмы

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

диффузии частиц, поэтому рассматриваются результаты моделирования рекомбинации электронов и дырок вследствие диффузии.

Результаты моделирования рекомбинации электронов и дырок вследствие чистой диффузии. Интерес для исследования представляет как изучение кинетики процесса рекомбинации электронов и дырок в полупроводнике, так и сравнение результатов моделирования этого процесса, полученных с помощью клеточно-автоматной и непрерывной моделей. Критериями для сравнения выбраны значения плотностей частиц $\rho_n(t)$, $\rho_p(t)$, $\rho_{N_n}(t)$, $\rho_{N_p}(t)$ и потока фотонов $\phi(t)$, а также пространственно-временное распределение частиц. В качестве модельных параметров взяты значения начального количества частиц $C_n(0)$, $C_p(0)$, $C_{N_n}(0)$, $C_{N_p}(0)$, размер области $|G|$, коэффициенты взаимодействия частиц B_0 , b_{n0} , b_{p0} , коэффициенты диффузии D_n , D_p и характерные расстояния взаимодействия частиц a_{np} , a_{nN_n} , a_{pN_p} . В непрерывной модели рекомбинации изменяемым параметром также является значение ϵ -окрестности, определяющее радиус сферы (окружности), внутри которой происходит аннигиляция электрона и дырки. Для сопоставления результатов моделирования рекомбинации с данными физических экспериментов в качестве единиц измерения используются нанометры и наносекунды.

Рассмотрим рекомбинацию частиц вследствие чистой диффузии для следующих значений модельных параметров: $C_n(0) = C_p(0) = 10000$, $|G| = 1000 \times 1000$ нм при $d = 2$, $|G| = 100 \times 100 \times 100$ нм при $d = 3$, $D_n = 1$, $D_p = 0$ нм² · нс⁻¹. При моделировании применяются периодические граничные условия. Число экспериментов M с различными начальными распределениями координат частиц, выполняемых для вычисления значений характеристик, равно 1000. В непрерывной модели рекомбинации $\epsilon = 1$. Вычислительные эксперименты проводились на ресурсах Сибирского суперкомпьютерного центра Сибирского отделения РАН [5].

На рис. 1 представлены значения потока фотонов, полученные с помощью непрерывной и КА-моделей в двумерном и трёхмерном случаях.

В двумерном случае плотности электронов и потоки фотонов, вычисленные с помощью непрерывной и КА-моделей, хорошо согласуются с поведением соответствующих теоретических асимптотик $\rho'_{n,2d}(t) \sim 1/\sqrt{t}$ и $\phi'_{2d}(t) \sim 1/(t\sqrt{t})$. Значения характеристик для обеих моделей совпадают до $t < 10^5$ нс, далее при малых концентрациях поведение моделей различается. Аннигиляция частиц при КА-моделировании завершается быстрее, чем при моделировании рекомбинации с помощью непрерывной модели.

В трёхмерном случае поведение характеристик $\rho_n(t)$ и $\phi(t)$, полученных при использовании непрерывного и КА-подходов, различается и соответствует разным асимптотикам.

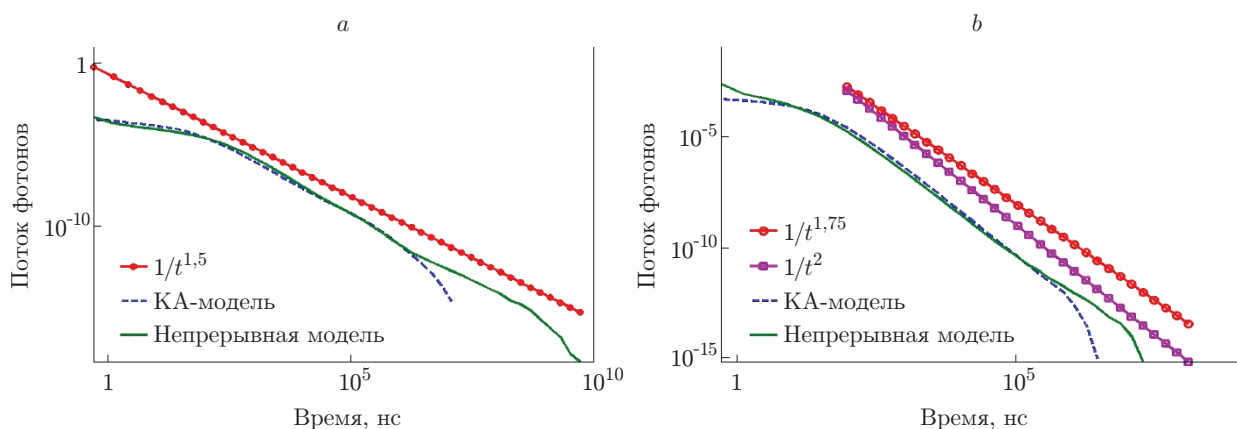


Рис. 1. Значения потока фотонов, полученные при моделировании чистой диффузии: в двумерном (а) и трёхмерном (б) случаях

График плотности электронов, вычисленный с помощью КА-модели рекомбинации, согласуется с поведением функции $\tilde{\rho}_{n,3d}(t) = 1/t$, а график потока фотонов $\phi(t)$ соответствует поведению функции $\tilde{\phi}_{n,3d}(t) = 1/t^2$. При использовании непрерывной модели рекомбинации графики характеристик $\rho_n(t)$ и $\phi(t)$ согласуются с поведением теоретических асимптотик $\rho'_{n,3d}(t) \sim 1/t^{0,75}$ и $\phi'_{3d}(t) \sim 1/t^{1,75}$.

Для более детального анализа кинетики рекомбинации электронов и дырок вследствие диффузии на рис. 2 представлены пространственные распределения частиц в моменты времени t_1, t_2 и t_3 , полученные с помощью непрерывного подхода в двумерном и трёхмерном случаях для значений модельных параметров, приведённых выше.

В начальный момент времени (t_1) частицы случайно распределены на поверхности полупроводника. При диффундировании электроны сталкиваются с дырками и аннигилируют (t_2). В результате аннигиляции происходит пространственное разделение электронов и дырок (t_3). Именно такая кластеризация, или сегрегация, является причиной замедления аннигиляции и выхода плотности на асимптотику, отличную от гиперболической, имеющей место в случае детерминированной модели с равномерным перемешиванием электронов и дырок [2].

При применении КА-модели рекомбинации наблюдается такая же пространственная динамика электронов и дырок, как и при непрерывном подходе. В двумерном и трёхмерном случаях пространственные распределения частиц, полученные с помощью непрерывной и КА-моделей, имеют одинаковый характер, но разную плотность частиц в одни и те же моменты времени. При КА-моделировании скорость аннигиляции электронов и дырок выше, и следовательно, количество частиц в одни и те же моменты времени меньше, чем при использовании непрерывного подхода.

Оценкой степени пространственного разделения электронов и дырок может служить плотность вероятности расстояния от электрона до ближайшей дырки. Заметим, что для

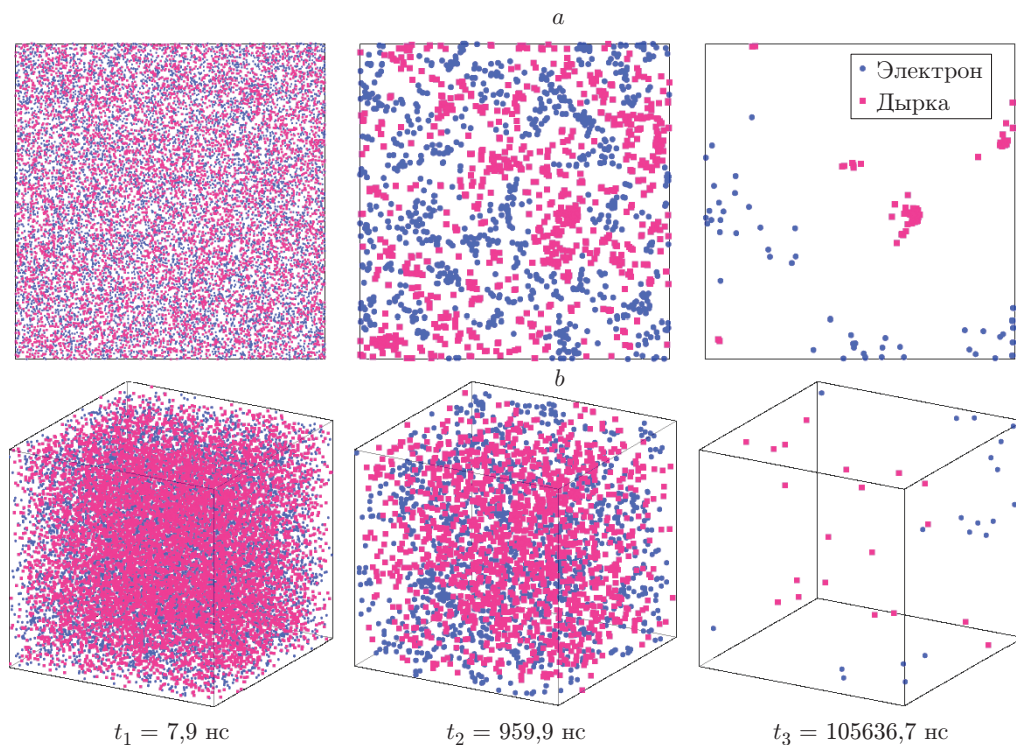


Рис. 2. Пространственное распределение электронов и дырок в случае чистой диффузии, полученное с помощью непрерывной модели: в двумерной (a) и трёхмерной (b) областях

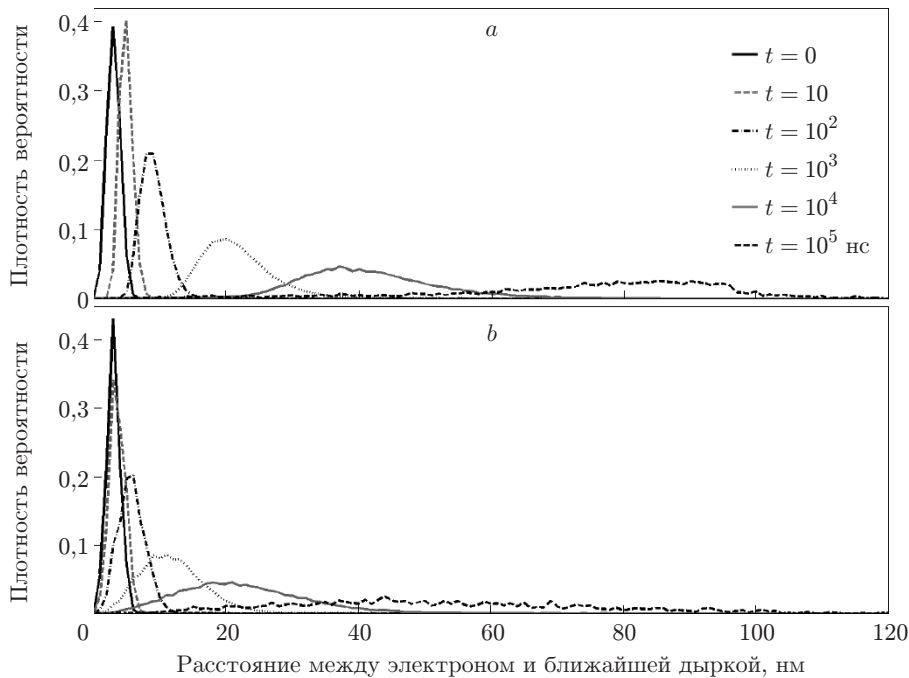


Рис. 3. Плотности распределения расстояний от электрона до ближайшей дырки в трёхмерном случае: вычисленные с помощью непрерывной (а) и клеточно-автоматной (b) моделей

случая равномерного перемешивания эта плотность известна и является пуассоновской [3].

На рис. 3 показаны графики плотностей распределения расстояний от электрона до ближайшей дырки, вычисленные в различные моменты времени с помощью непрерывной и КА-моделей рекомбинации в трёхмерном случае.

С течением времени в двумерном и трёхмерном пространствах минимальные расстояния между электронами и дырками увеличиваются, так как ближайшие электроны и дырки аннигилируют друг с другом. При применении обеих моделей рекомбинации высота плотности распределения уменьшается, а длина, т. е. количество возможных значений расстояний, увеличивается. Причём графики плотности, полученные при использовании непрерывного подхода, с течением времени смещаются по оси абсцисс (малые значения минимальных расстояний между электронами и дырками исчезают) (рис. 3, а), тогда как графики плотности, вычисленные с помощью КА-подхода, растягиваются по оси абсцисс, но не сдвигаются, что свидетельствует о наличии и малых, и больших значений минимальных расстояний между электронами и дырками (рис. 3, б). Различие в поведении моделей рекомбинации связано с тем, что в КА-модели диффузионный шаг фиксирован и равен 1 нм, поэтому, несмотря на аннигиляцию ближайших электронов и дырок, из-за диффузии частицы вновь оказываются на близком расстоянии друг от друга. В непрерывной модели диффузионный шаг изменяется в зависимости от минимальных расстояний между электронами и дырками, а при аннигиляции частиц длина диффузионного шага увеличивается и вероятность частиц оказаться на малых расстояниях относительно друг друга уменьшается.

В зависимости от значений коэффициентов диффузии D_n и D_p изменяется скорость аннигиляции частиц. Вышепредставленные результаты получены при моделировании только диффузии электронов при неподвижных дырках. Совместная диффузия электронов и дырок так же, как и увеличение коэффициентов D_n и D_p , приводит к увеличению скорости

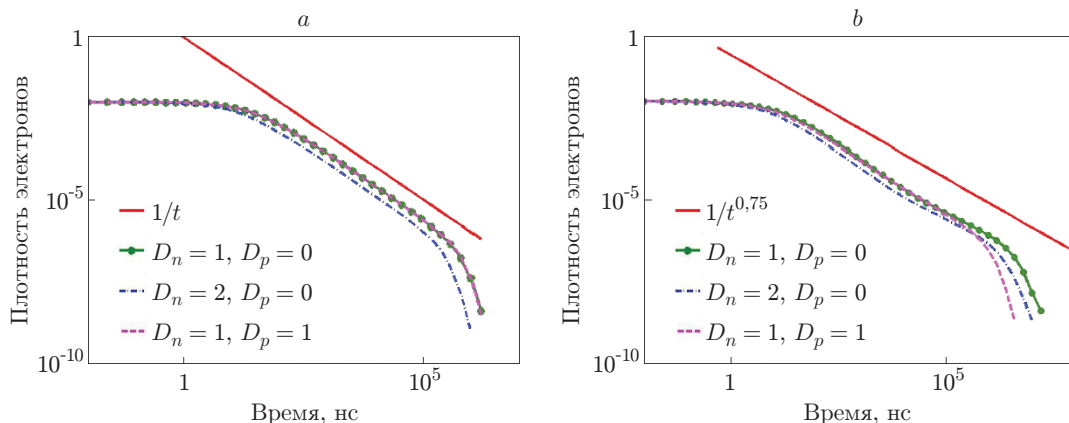


Рис. 4. Значения плотности электронов, вычисленные для различных режимов диффузии в трёхмерном случае: с помощью КА-модели (а) и непрерывной модели (б)

аннигиляции частиц. На рис. 4 показаны графики плотности электронов для различных режимов диффузии:

- 1) электронов с коэффициентом $D_n = 1$ и неподвижных дырок с $D_p = 0$;
- 2) электронов и дырок с коэффициентами $D_n = 1, D_p = 1$;
- 3) электронов с суммарным коэффициентом $D_n = 2$ и неподвижных дырок с $D_p = 0$.

Значения плотности электронов, полученные в режимах 1 и 2, совпадают в начале моделирования и различаются при больших временах. Причём при использовании КА-модели в трёхмерном случае плотности электронов для $D_n = 1, D_p = 0$ и $D_n = 1, D_p = 1$ полностью совпадают в течение всего времени моделирования. В третьем случае, когда диффундируют только электроны с коэффициентом $D_n = 2$, равным сумме коэффициентов диффузии электронов $D_n = 1$ и дырок $D_p = 1$, аннигиляция частиц происходит быстрее, чем во втором случае при $D_n = 1, D_p = 1$. Стоит отметить, что во втором случае при диффузии электронов и дырок соотношение значений коэффициентов D_n и D_p для одного и того же значения $D = D_n + D_p = 2$ не влияет на процесс аннигиляции частиц. Например, графики плотности электронов, полученные для $D_n = 0,8, D_p = 1,2$ и $D_n = 1,2, D_p = 0,8$, полностью совпадают с графиками, вычисленными для $D_n = 1, D_p = 1$.

Моделирование радиационной рекомбинации электронов и дырок вследствие туннелирования и диффузии. Рассмотрим режим радиационной рекомбинации электронов и дырок вследствие туннелирования и диффузии для коэффициента радиационной рекомбинации $B_0 = 0,04 \text{ нс}^{-1}$, характерного расстояния взаимодействия электронов и дырок $a_{np} = 4 \text{ нм}$ и таких же значений остальных модельных параметров, как для режима чистой диффузии.

В режиме туннелирования с диффузией скорость аннигиляции частиц выше по сравнению с режимом чистой диффузии (рис. 5 и 6). При моделировании процесса рекомбинации с помощью КА-модели плотность электронов уменьшается немонотонно, в этом случае график плотности $\rho_n(t)$ представляет собой волнистую линию (см. рис. 5).

Такое поведение можно объяснить изменениями скорости туннелирования частиц под одновременным влиянием двух процессов: туннелирования и диффузии. Скорость туннелирования определяется минимальным расстоянием между электронами и дырками. При взаимодействии электронов и дырок, находящихся на близком расстоянии, скорость туннелирования существенно не меняется. Под воздействием туннелирования и диффузии ближайшие частицы быстро аннигилируют друг с другом. В результате минимальное расстояние между электронами и дырками увеличивается и скорость их туннелирования уменьшается, следовательно, процесс рекомбинации в целом замедляется. Однако вследст-

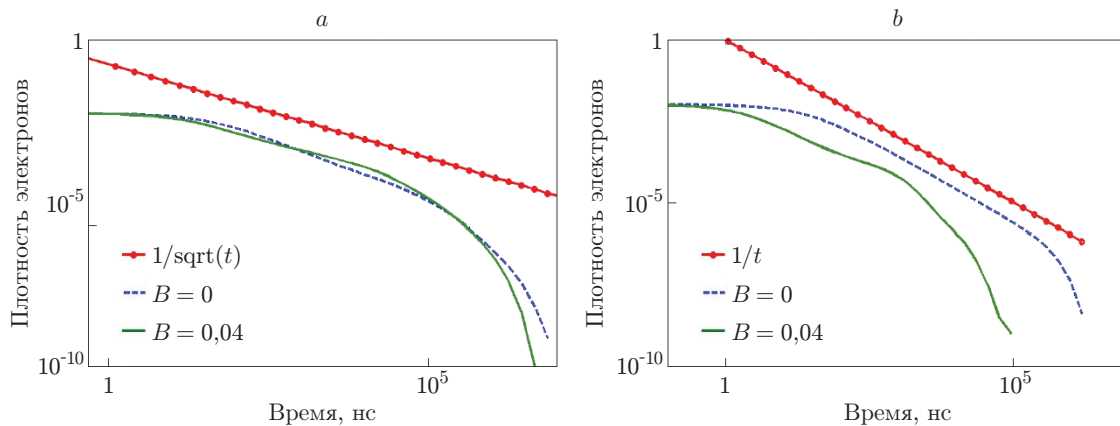


Рис. 5. Сравнение графиков плотности электронов, вычисленных с помощью КА-модели рекомбинации в режимах чистой диффузии и туннелирования с диффузией: для двумерного (а) и трёхмерного (б) случаев

вие диффузии расстояния между электронами и дырками вновь уменьшаются и скорость туннелирования возрастает.

Согласно алгоритму, описанному в [4], в непрерывной модели диффузии для перемещения выбирается частица с минимальным временем выхода из сферы. При моделировании туннелирования с диффузией время диффузии может превышать время туннелирования, т. е. в течение диффундирования частица может аннигилировать путём туннелирования. Для учёта такого события радиус сферы, из которой частица диффундирует, уменьшается в соответствии со значением B_0 . Коэффициент B_0 (нс^{-1}) характеризует частоту взаимодействия электронов и дырок, а значит, время туннелирования частиц в среднем составляет $t_{\text{tun}} = 1/B_0$. Тогда среднее расстояние, на которое частица диффундирует за время t_{tun} , можно вычислить по формуле $r_{\text{tun}} = \sqrt{2Dt_{\text{tun}}}$, где $D = D_n + D_p$ — суммарный коэффициент диффузии частиц.

Таким образом, для моделирования режима туннелирования с диффузией в непрерывный алгоритм диффузии [4] вносятся следующие изменения. После выбора частицы с минимальным временем выхода из сферы радиуса R сравниваются r_{tun} и R . Если $r_{\text{tun}} < R$,

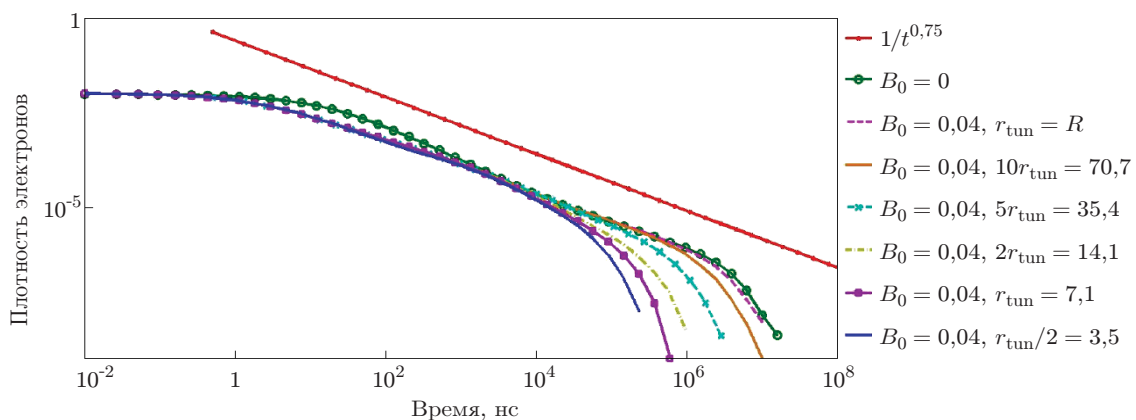


Рис. 6. Сравнение графиков плотности электронов, вычисленных с помощью непрерывной модели рекомбинации в режимах чистой диффузии и туннелирования с диффузией при различных значениях r_{tun} в трёхмерном случае

то моделируется диффузия частицы из сферы радиуса r_{tun} и время выхода вычисляется по формуле $\tau_R = \tau_1 R^2 / 2D_u$, $u \in \{n, p\}$ [1]. Расстояние, на которое частица диффундирует за время t_{tun} , является модельным параметром и может изменяться относительно исходного значения, вычисленного для $t_{\text{tun}} = 1/B_0$.

На рис. 6 представлены значения плотности электронов, вычисленные в трёхмерном случае при использовании непрерывного подхода для режима туннелирования с диффузией при различных значениях r_{tun} . Для сравнения на рисунке также показаны результаты, полученные без учёта возможности туннелирования во время диффузии внутри сферы, тогда r_{tun} выбирается равным радиусу сферы R . Вычисленные в этом случае значения плотности электронов в двумерном случае совпадают со значениями, полученными для режима чистой диффузии, а в трёхмерном случае очень близки к ним. С уменьшением значений r_{tun} частота выбора процесса туннелирования увеличивается и частицы аннигилируют быстрее. В трёхмерном случае значения плотности электронов, вычисленные при $20r_{\text{tun}}$ и $r_{\text{tun}} = R$, совпадают. Это объясняется тем, что $20r_{\text{tun}}$ превышает средние расстояния между электронами и дырками, а значит, туннелирования во время диффузии частиц из сферы не происходит. Аналогично в двумерном случае плотности электронов, полученные при $100r_{\text{tun}}$, совпадают со значениями, вычисленными для $r_{\text{tun}} = R$.

Заключение. Реализованы непрерывные и клеточно-автоматные алгоритмы моделирования рекомбинации электронов и дырок в двумерном и трёхмерном полупроводниках. Численно исследована динамика рекомбинации частиц для режимов чистой диффузии и диффузии с туннелированием. Проведён сравнительный анализ характеристик, полученных с помощью непрерывного и КА-подходов.

Обнаружено, что в режиме чистой диффузии в трёхмерном случае значения плотности электронов и потока фотонов, вычисленные при использовании непрерывной и КА-моделей рекомбинации, различаются и соответствуют разным асимптотикам. Скорость аннигиляции частиц выше при использовании КА-модели. Изучено влияние значений коэффициентов диффузии электронов и дырок на динамику процесса рекомбинации. Выявлено, что увеличение коэффициентов D_n и D_p приводит к росту скорости аннигиляции частиц. По сравнению с диффузией только электронов совместная диффузия электронов и дырок также приводит к возрастанию скорости рекомбинации, однако соотношение значений коэффициентов D_n и D_p для одного и того же значения $D = D_n + D_p$ практически не влияет на процесс аннигиляции частиц.

Исследована динамика рекомбинации частиц для режима туннелирования с диффузией. В этом режиме скорость аннигиляции частиц выше по сравнению с режимом чистой диффузии. Непрерывный алгоритм рекомбинации модифицирован для учёта туннелирования электронов и дырок во время диффузии. Изучено влияние значений расстояния r_{tun} , на которое частица может переместиться до возможного туннелирования, на поведение характеристик. Обнаружено, что с уменьшением значений расстояния r_{tun} скорость аннигиляции частиц возрастает.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. 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.
2. 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.

3. 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.
4. Сабельфельд К. К., Киреева А. Е. Стохастическое моделирование рекомбинации электронов и дырок в двумерных и трёхмерных неоднородных полупроводниках. Ч. I. Стохастическая модель и алгоритмы // Автометрия. 2017. **53**, № 1. С. 117–124.
5. **Центр** коллективного пользования «Сибирский суперкомпьютерный центр СО РАН» (ЦКП ССКЦ СО РАН) при институте Вычислительной математики и математической геофизики СО РАН. URL: <http://www2.sccc.ru> (дата обращения: 11.08.2016).

Поступила в редакцию 11 августа 2016 г.
