

ДИСКРЕТНЫЕ МОДЕЛИ РЕАЛЬНЫХ ПРОЦЕССОВ

УДК 51.73, 519.245

ДИСКРЕТНОЕ СТОХАСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
РЕКОМБИНАЦИИ ЭЛЕКТРОНОВ И ДЫРОК
В 2D- И 3D-НЕОДНОРОДНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ¹

К. К. Сабельфельд, А. Е. Киреева

*Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского
отделения РАН, г. Новосибирск, Россия*

Представлены клеточно-автоматные стохастические модели рекомбинации электронов и дырок в неоднородном полупроводнике в двумерном и трёхмерном случаях. Исследована кинетика процесса рекомбинации электронов и дырок в режимах чистой диффузии, диффузии с туннелированием и диффузии частиц при наличии рекомбинационных центров. Изучен характер электронно-дырочных пространственных корреляций, полученных с помощью клеточно-автоматной модели, и связанного с этим формирования сегрегации в 2D- и 3D-полупроводниках. Путём численного моделирования вычислены и исследованы основные характеристики процесса рекомбинации: плотности частиц и интенсивность фотолюминесценции. Кроме того, проанализирована зависимость времени выполнения параллельных программ, реализующих клеточно-автоматные модели рекомбинации в двумерном и трёхмерном случаях, от значений таких модельных параметров, как начальная плотность электронно-дырочных пар и размер моделируемой области.

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

DOI 10.17223/20710410/34/9

DISCRETE STOCHASTIC SIMULATION OF THE ELECTRONS AND
HOLES RECOMBINATION IN THE 2D AND 3D INHOMOGENEOUS
SEMICONDUCTOR

K. K. Sabelfeld, A. E. Kireeva

*Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics SB RAS, Novosibirsk,
Russia***E-mail:** karl@osmf.sgcc.ru, kireeva@ssd.sgcc.ru

Stochastic models of electron-hole recombination in 2D and 3D inhomogeneous semiconductors based on a discrete cellular automata approach are presented in the paper. These models are derived from a Monte Carlo algorithm based on spatially inhomogeneous nonlinear Smoluchowski equations with the random initial distribution density

¹Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 14-11-00083.

used to simulate the annihilation of spatially separate electrons and holes in a disordered semiconductor characterized by the heterogeneous properties of the material. Recombination kinetics in different regimes such as a pure diffusion, diffusion in vicinity of tunneling and diffusion in the presence of recombination centers are investigated by a cellular automata simulation. Statistical characteristics of the recombination process (particle concentrations and the radiative intensity) obtained by the cellular automaton models are compared with the theoretically known asymptotics derived for a pure diffusion case. The results obtained for a two-dimensional domain correspond to the theoretical asymptotics, whereas in three-dimensional case, they differ from the exact asymptotics. It is found out by simulations that a spatial electron and hole separation (segregation) occurs under certain conditions on the diffusion and tunneling rates. The electron-hole spatial segregation in 2D and 3D semiconductors is analyzed by using the probability density of the electron-hole separation. In addition, the execution time of the codes implementing the cellular automaton model of the recombination in 2D and 3D semiconductors is studied in dependence on the number of simulated electron-hole pairs and the size of the semiconductor domain. It is shown that the execution time for semiconductors of dimension d is proportional to a polynomial of order d .

Keywords: *recombination, semiconductor, diffusion, tunnelling, stochastic simulation, cellular automata.*

Введение

В последнее время ведутся интенсивные исследования процессов рекомбинации, протекающих в неоднородных полупроводниках, направленные на создание новых полупроводниковых материалов с улучшенными характеристиками, а также на расширение области их применения. Широкозонный полупроводник нитрид галлия (GaN) является одним из таких перспективных материалов в области разработок полевых транзисторов и современной оптоэлектроники [1]. В экспериментах нескольких исследовательских групп, в том числе из Института твердотельной электроники имени П. Друде [1, 2] и из Монреальского университета [3], получены графики интенсивности фотолюминесценции в GaN, отличные от графиков, вычисленных с помощью традиционных методов математического моделирования, предполагающих усреднённое однородное распределение частиц в области полупроводника.

В [4–7] разработана стохастическая модель рекомбинации электронов и дырок в неоднородном полупроводнике GaN. В этих работах рассматривается пространственно неоднородный полупроводник, в объёме которого случайным образом распределены дефекты — центры рекомбинации, а также электроны и дырки. 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, при этом происходит радиационная рекомбинация электронов и дырок, сопровождающаяся излучением фотонов. 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]. Характеристики, полученные с помощью этой модели, хорошо согласуются с экспериментальными данными [3], что

подтверждает физическую обоснованность модели и позволяет её использовать для выявления зависимости характера рекомбинации от значений различных параметров.

В данной работе на основе алгоритмов метода Монте-Карло для моделирования рекомбинации электронов и дырок, представленных в [4–7], разработаны клеточно-автоматные модели рекомбинации электронов и дырок для 2D- и 3D-полупроводников.

В клеточно-автоматной (КА) модели рекомбинации моделируемое пространство является дискретным и состоит из множества клеток. Каждой клетке ставится в соответствие пространственная координата и состояние. Состояния клеток показывают присутствие либо отсутствие в клетке частиц, участвующих в моделируемом процессе. Состояния изменяются в соответствии с правилами, имитирующими поведение моделируемой системы. КА-подход позволяет непосредственно исследовать влияние пространственного распределения частиц на характер процесса рекомбинации.

По сравнению с непрерывным алгоритмом метода Монте-Карло [4] при КА-моделировании рекомбинации электронов и дырок наиболее существенно различаются алгоритмы, описывающие диффузию частиц, поэтому в работе основное внимание уделяется анализу результатов КА-моделирования рекомбинации частиц вследствие диффузии, хотя описание КА-модели представлено в общем случае.

В п. 1 даётся краткое описание моделируемой задачи и приводятся КА-алгоритмы моделирования рекомбинации электронов и дырок в общем случае. В п. 2 представлены результаты КА-моделирования рекомбинации электронов и дырок для диффузионных режимов и приведены графики, отражающие поведение интегральных характеристик процесса рекомбинации. П. 3 посвящён исследованиям времени исполнения программ, реализующих КА-алгоритмы моделирования рекомбинации частиц в 2D- и 3D-полупроводниках, в зависимости от значений модельных параметров.

1. Модель рекомбинации электронов и дырок в полупроводнике

1.1. Математическая модель рекомбинации электронов и дырок в полупроводнике

В [4, 7] предложена стохастическая модель рекомбинации электронов и дырок в полупроводнике. Предполагается, что в начальный момент времени электроны n , дырки p и рекомбинационные центры случайно распределены в объёме полупроводника. Электроны и дырки способны аннигилировать друг с другом путём туннелирования со скоростью $B(|\mathbf{x}|) = B_0 \cdot \exp(-|\mathbf{x}|/a_{np})$, где B_0 — коэффициент радиационной рекомбинации электронов и дырок; $|\mathbf{x}|$ — расстояние между взаимодействующими электроном и дыркой; a_{np} — характерное расстояние взаимодействия электронов и дырок. Процесс аннигиляции электронов и дырок называется радиационной рекомбинацией и сопровождается выделением энергии в виде фотона.

Рекомбинационные центры — это дефекты и дислокации на поверхности и в объёме полупроводника. Они могут находиться в двух состояниях: центры N_n , ожидающие электрон, и центры N_p , ожидающие дырку. Свободный рекомбинационный центр способен захватить электрон, после чего он переходит в состояние N_p и становится способен захватить дырку. Суммарное количество рекомбинационных центров в процессе моделирования остаётся постоянным, меняется только число рекомбинационных центров, свободных для электронов, и центров, свободных для дырок. Захват электронов в свободные рекомбинационные центры происходит со скоростью $b_n(|\mathbf{x}|) = b_{n0} \cdot \exp(-|\mathbf{x}|/a_{nN_n})$, где b_{n0} — коэффициент захвата электронов в центры N_n ; $|\mathbf{x}|$ — расстояние между взаимодействующими электроном и центром N_n ; a_{nN_n} — характерное расстояние взаимодействия электронов и центров N_n . Скорость захвата дырок в ре-

комбинационные центры, содержащие электроны, равна $b_p(|\mathbf{x}|) = b_{p0} \cdot \exp(-|\mathbf{x}|/a_{pN_p})$, 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 нерадиационная рекомбинация электрона и дырки, сопровождающаяся выделением тепловой энергии.

Электроны и дырки также могут диффундировать в объёме полупроводника с константами диффузии D_n и D_p . При перемещении вследствие диффузии встретившиеся электроны и дырки аннигилируют друг с другом, а при попадании в рекомбинационные центры происходит захват частиц и соответствующее изменение состояний рекомбинационных центров.

На основе алгоритма Монте-Карло, представленного в [4, 7], разработана клеточно-автоматная модель рекомбинации электронов и дырок.

1.2. Клеточно-автоматная модель рекомбинации электронов и дырок в полупроводнике

При КА-моделировании физических процессов область задаётся в виде множества клеток, плотно заполняющих d -мерное пространство X [8, 9]. Каждая клетка характеризуется парой значений $(a, \mathbf{x})$, $a \in A$, $\mathbf{x} \in X$, где a — состояние клетки; A — алфавит состояний; $\mathbf{x}$ — целочисленная координата клетки в области X . Алфавит состояний клеток выбирается в соответствии с моделируемыми объектами. Множество всех клеток с различными координатами образует клеточный массив. Поведение моделируемой системы описывается правилами переходов Θ , на основании которых изменяются состояния клеток. В классическом определении клеточного автомата правила переходов являются локальными [10], то есть вычисляют новые состояния клеток в зависимости от состояний клеток её ближайшего соседства, которое называется шаблоном моделирования T . При моделировании сложных физико-химических явлений понятие шаблона моделирования может быть расширено, например, он может задаваться как множество случайных клеток, выбираемых в соответствии с заданным законом распределения из множества всех клеток пространства. Правила переходов могут применяться к клеткам $\mathbf{x} \in X$ в различном порядке. Этот порядок называется режимом функционирования КА. Для моделирования стохастических физико-химических процессов используется асинхронный режим работы α , при котором правила переходов применяются к случайно выбранным клеткам, сразу же изменяя их состояния. В классическом определении КА применение правил переходов ко всем клеткам клеточного массива $\mathbf{x} \in X$ называется итерацией. Однако для сопоставления модельного времени с реальным временем протекания физико-химических процессов понятие итерации может быть расширено, и итерация может определяться в соответствии с моделируемым явлением.

Формально КА-модель рекомбинации электронов и дырок в полупроводнике можно записать в следующем виде:

$$\aleph = \langle A, X^d, \Theta, \alpha \rangle.$$

На основании математической модели рекомбинации, описанной выше, алфавит состояний выбирается в виде $A = \{n, p, N_n, N_p, \emptyset\}$, где n обозначает электрон, p — дырку, N_n — свободный рекомбинационный центр, ожидающий электрон, N_p — рекомбинационный центр, содержащий электрон и способный захватить дырку, $\emptyset$ — свободное место. Множество координат клеток X^d в двумерном случае ($d = 2$) представимо в виде квадратной решётки $X^2 = \{\mathbf{x} = (i, j) : i = 1, \dots, \text{Size}_x, j = 1, \dots, \text{Size}_y\}$, а в трёхмерном ($d = 3$) — в виде куба $X^3 = \{\mathbf{x} = (i, j, k) : i = 1, \dots, \text{Size}_x,$

$j = 1, \dots, \text{Size}_y, k = 1, \dots, \text{Size}_z$. На множестве координат вводятся периодические граничные условия, то есть если координата клетки выходит за границу области, ей ставится в соответствие координата противоположной границы области, например, координате $\mathbf{x} = (i, j)$, $i < 0$, $j > \text{Size}_y$, соответствует $\mathbf{x}' = (i', j')$, $i' = \text{Size}_x + i$, $j' = \text{Size}_y - j$.

Правила переходов Θ моделируют процессы, происходящие в объёме полупроводника, на основании математической модели рекомбинации [4, 7] и задаются в следующем виде: $\Theta = R\{\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4, \theta_5\}$. Символ R обозначает вероятностный выбор одного из правил θ_l , $l = 1, \dots, 5$. Правило перехода θ_1 моделирует радиационную рекомбинацию электрона и дырки, θ_2 — захват электрона в свободный рекомбинационный центр, θ_3 — захват дырки в рекомбинационный центр, содержащий электрон, θ_4 имитирует диффузию электрона и θ_5 — диффузию дырки. Формально правила переходов записываются в следующем виде:

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

где $\varphi_u(\mathbf{x})$ (при $u \in \{p, N_n, N_p\}$) и $\psi(\mathbf{x})$ — 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 на данной итерации: $T(u) = \{(a, \mathbf{y}) : a = u, \mathbf{y} \in X\}$. Клетка $\psi(\mathbf{x})$ выбирается случайным образом из соседних клеток клетки $\mathbf{x}$ по шаблону моделирования «крест», который в двумерном случае состоит из четырёх клеток $T_4 = \{(i, j-1), (i+1, j), (i, j+1), (i-1, j)\}$, а в трёхмерном 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 правил Θ выбирается одно из правил θ_l , $l = 1, \dots, 5$, с вероятностью p_l . Вероятности применения правил переходов вычисляются по формуле

$$\begin{aligned} p_l &= \lambda_l / \lambda, \quad l = 1, \dots, 5, \quad \lambda = \sum_{k=1}^5 \lambda_k, \\ \lambda_1 &= C_n \cdot C_p \cdot B_0 \cdot \exp(-r_{np}^{\min} / a_{np}), \\ \lambda_2 &= C_n \cdot C_{N_n} \cdot b_{n0} \cdot \exp(-r_{nN_n}^{\min} / a_{nN_n}), \\ \lambda_3 &= C_p \cdot C_{N_p} \cdot b_{p0} \cdot \exp(-r_{pN_p}^{\min} / a_{pN_p}), \\ \lambda_4 &= C_n \cdot D_n, \\ \lambda_5 &= C_p \cdot D_p, \end{aligned}$$

где $C_n, C_p, C_{N_n}, C_{N_p}$ — количество электронов, дырок, рекомбинационных центров для электронов и рекомбинационных центров для дырок в клеточном массиве на данной итерации. Символ $r_{uv}^{\min}$ обозначает минимальное из расстояний 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 $u \in \{n, p\}$, $v \in \{p, N_n, N_p\}$.

Для выбранного с вероятностью p_l правила перехода θ_l случайным образом выбирается клетка $(a, \mathbf{x})$ и взаимодействующая с ней клетка $(u, \varphi_u(\mathbf{x}))$ либо $(u, \psi(\mathbf{x}))$, состояния которых соответствуют типам частиц, участвующим в правиле θ_l :

- для θ_1 : $a = n$ и $u = p$;
- для θ_2 : $a = n$ и $u = N_n$;
- для θ_3 : $a = p$ и $u = N_p$;
- для θ_4 : $a = n$ и $u \in \{\emptyset, p, N_n\}$;
- для θ_5 : $a = p$ и $u \in \{\emptyset, n, N_p\}$.

В выбранных клетках правила переходов θ_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 θ_l . Вероятности реализации правил θ_4 и θ_5 равны единице: $\omega_l = 1$, $l = 4, 5$.

Каждой попытке применения одного из правил переходов θ_l , $l = 1, 2, 3$, соответствует локальный временной шаг $\Delta\tau_{\text{tun}} = -\ln(\text{rand}_1)/\lambda$, где $\text{rand}_1 \in (0, 1)$ — случайное число. Попытке применения правил θ_4, θ_5 , моделирующих диффузию частиц, соответствует локальный временной шаг $\Delta\tau_{\text{diff}} = 1/(2d \cdot D_u \cdot C_u)$, где d — размерность пространства; $u \in \{n, p\}$; D_u — коэффициент диффузии частиц типа u ; C_u — количество клеток с состоянием u в клеточном массиве. Кроме локального временного шага, в модели используется глобальный временной шаг $\Delta t = t_0 \cdot q^k$, где t_0 — 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 процесса рекомбинации электронов и дырок, измеряемыми экспериментально, являются плотности частиц и интенсивность фотолуминесценции. В КА-модели рекомбинации $\aleph$ плотность частиц типа u вычисляется как $\rho_u(t_k) = C_u(t_k)/|X^d|$, $u \in \{n, p, N_n, N_p\}$. Интенсивность фотолуминесценции вычисляется по формуле

$$I(t_k) = C_{\text{photon}}/(t_k - t_{k-1}),$$

где C_{photon} — число образовавшихся фотонов, то есть число взаимодействий электронов и дырок, произошедшее за промежуток времени $(t_k - t_{k-1})$.

Рассмотрим более подробно функционирование КА на примере применения правил перехода θ_4 и θ_5 , моделирующих диффузию частиц.

Алгоритм моделирования диффузии электронов и дырок в объёме полупроводника

В КА-модели рекомбинации диффузия моделируется как перемещение частицы в соседнюю клетку в случайном направлении. Алгоритм моделирования диффузии можно представить в следующем виде:

- 1) Если выбрано правило перехода θ_4 — диффузия электрона, то случайно равномерно выбирается одна из клеток с состоянием $a = n$.
 - Для выбранной клетки случайно равномерно выбирается соседняя клетка $\psi(\mathbf{x})$ по шаблону «крест».
 - Проверяется состояние соседней клетки $(u, \psi(\mathbf{x}))$:
 - Если $u = \emptyset$, то моделируется перемещение электрона на свободное место, то есть состояния клеток изменяются на $(\emptyset, \mathbf{x})$, $(n, \psi(\mathbf{x}))$, количество частиц при этом остаётся неизменным.
 - Если $u = p$, то есть в соседней клетке находится дырка, то электрон и дырка аннигилируют с друг другом, состояния клеток изменяются на $(\emptyset, \mathbf{x})$,

- $(\emptyset, \psi(\mathbf{x}))$, 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 $u = N_n$, то есть в соседней клетке находится свободный рекомбинационный центр, то электрон захватывается в рекомбинационный центр, состояния клеток изменяются на $(\emptyset, \mathbf{x})$, $(N_p, \psi(\mathbf{x}))$, количество частиц пересчитывается: $C_n := C_n - 1$, $C_{N_n} := C_{N_n} - 1$, $C_{N_p} := C_{N_p} + 1$.
 - Вычисляется значение локального временного шага $\Delta\tau_{\text{diff}} = 1/(4D_n \cdot C_n)$ при $d = 2$ и $\Delta\tau_{\text{diff}} = 1/(6D_n \cdot C_n)$ при $d = 3$.
- 2) Если выбрано правило перехода θ_5 — диффузия дырки, то случайно равномерно выбирается одна из клеток с состоянием $a = p$.
- Для выбранной клетки случайно равномерно выбирается соседняя клетка $\psi(\mathbf{x})$ по шаблону «крест».
 - Проверяется состояние соседней клетки $(u, \psi(\mathbf{x}))$:
 - Если $u = \emptyset$, то моделируется перемещение дырки на свободное место, то есть состояния клеток изменяются на $(\emptyset, \mathbf{x})$, $(p, \psi(\mathbf{x}))$, количество частиц остаётся неизменным.
 - Если $u = n$, то есть в соседней клетке находится электрон, то электрон и дырка аннигилируют с друг другом, состояния клеток изменяются на $(\emptyset, \mathbf{x})$, $(\emptyset, \psi(\mathbf{x}))$, 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 $u = N_p$, то есть в соседней клетке находится рекомбинационный центр, содержащий электрон, то дырка захватывается в рекомбинационный центр и там аннигилирует с электроном, состояния клеток изменяются на $(\emptyset, \mathbf{x})$, $(N_n, \psi(\mathbf{x}))$, количество частиц пересчитывается: $C_p := C_p - 1$, $C_{N_n} := C_{N_n} + 1$, $C_{N_p} := C_{N_p} - 1$.
 - Вычисляется значение локального временного шага $\Delta\tau_{\text{diff}} = 1/(4D_p \cdot C_p)$ при $d = 2$ и $\Delta\tau_{\text{diff}} = 1/(6D_p \cdot C_p)$ при $d = 3$.

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

Согласно описанию математической модели рекомбинации [4, 7], в начальный момент времени электроны, дырки и рекомбинационные центры случайно и равномерно распределяются в клеточном массиве. Правила переходов Θ применяются к случайно выбранным клеткам массива, пока время моделирования не достигнет заданного значения t_{fin} либо пока все электроны и дырки не исчезнут. На каждом временном шаге $t_k \in [t_0; t_{\text{fin}}]$ вычисляются значения характеристик $\rho_u(t_k)$, $u \in \{n, p, N_n, N_p\}$, и $I(t_k)$, которые являются случайными величинами, так как начальные данные задаются случайным образом и правила переходов вероятностные. В соответствии с законом больших чисел [11] значения характеристик $\rho_u(t_k)$ и $I(t_k)$ оцениваются на основе их математических ожиданий, для этого выполняется КА-моделирование процесса рекомбинации для различных начальных распределений частиц и производится осреднение вычисленных значений характеристик. Вычисление оценок характеристик с высокой точностью требует проведения большого количества численных экспериментов (10^5 – 10^6). Для сокращения времени вычислений разработана параллельная версия программы, реализующей КА-модель рекомбинации. Описание и эффективность параллельных программ для 2D- и 3D-полупроводников на кластере НКС-30Т Сибирского Суперкомпьютерного Центра СО РАН (<http://www2.sscc.ru/>) представлены в [12].

Модельными параметрами в КА-модели рекомбинации являются значения начального количества частиц $C_n(0), C_p(0), C_{N_n}(0), C_{N_p}(0)$, размер области $|X^d| = \text{Size}_x \times \text{Size}_y \times \text{Size}_z$, коэффициенты взаимодействия частиц B_0, b_{n0}, b_{p0} , коэффициенты диффузии D_n, D_p и характерные расстояния взаимодействия частиц $a_{np}, a_{nN_n}, a_{pN_p}$. Для сопоставления результатов моделирования рекомбинации с данными физических экспериментов в качестве единиц измерения используются нанометры и наносекунды.

В зависимости от значений модельных параметров возможны различные режимы процесса рекомбинации электронов и дырок. Кинетика процесса рекомбинации для режимов с туннелированием подробно рассмотрена в [4, 7, 12]. В данной работе исследуются режимы рекомбинации вследствие диффузии частиц.

Для анализа поведения КА-модели рекомбинации значения характеристик, вычисленные с помощью КА-моделирования, сопоставляются с асимптотическими значениями характеристик, полученными с помощью корреляционного анализа в [4]. Для радиационной рекомбинации вследствие чистой диффузии частиц, то есть без рекомбинационных центров и туннелирования, выведены следующие формулы асимптотических оценок плотности частиц и интенсивности фотолуминесценции для больших времён:

$$\begin{aligned} \text{для } d = 2 : \quad \rho'_{n_2d}(t) &\sim 1/\sqrt{t}, \quad I'_{2d}(t) \sim 1/(t\sqrt{t}); \\ \text{для } d = 3 : \quad \rho'_{n_3d}(t) &\sim 1/t^{0,75}, \quad I'_{3d}(t) \sim 1/t^{1,75}. \end{aligned} \quad (1)$$

Поведение КА-модели рекомбинации также изучается на основе графического представления пространственно-временного распределения частиц, при котором состояния всех клеток клеточного массива отображаются различными цветами и символами.

2.1. Моделирование рекомбинации электронов и дырок вследствие чистой диффузии

Рассмотрим режим чистой диффузии при низких значениях температуры для следующих значений модельных параметров в двумерном случае: $C_n(0) = C_p(0) = 10000$, $|X^2| = 1000 \times 1000$ нм, $D_n = 1$, $D_p = 0$ нм²·нс⁻¹, и в трёхмерном случае: $C_n(0) = C_p(0) = 10000$, $|X^3| = 100 \times 100 \times 100$ нм, $D_n = 1$, $D_p = 0$ нм²·нс⁻¹. При низкой температуре коэффициент диффузии электронов существенно превышает коэффициент диффузии дырок, поэтому здесь D_p предполагается равным нулю. Число экспериментов M с различными начальными распределениями координат частиц, выполняемых для вычисления осреднённых значений характеристик, выбрано равным 1000. Вычислительные эксперименты проводились на ресурсах Сибирского Суперкомпьютерного Центра СО РАН.

На рис. 1 представлены значения характеристик (плотности электронов и интенсивности фотолуминесценции), полученные с помощью клеточно-автоматной модели в двумерном и трёхмерном случаях.

В двумерном случае значения плотности электронов и интенсивности фотолуминесценции, вычисленные с помощью КА-модели, хорошо согласуются с поведением соответствующих теоретических асимптотик $\rho'_{n_2d}(t)$ и $I'_{2d}(t)$ (рис. 1, а). Отклонение графиков характеристик от теоретических значений при $t > 10^5$ нс связано с малым количеством частиц, оставшихся в области.

В трёхмерном случае поведение характеристик $\rho_n(t)$ и $I(t)$, полученное при использовании клеточно-автоматного подхода, отличается от значений теоретических асимптотик $\rho'_{n_3d}(t) \sim 1/t^{0,75}$ и $I'_{3d}(t) \sim 1/t^{1,75}$ (рис. 1, б, в). График плотности электронов,

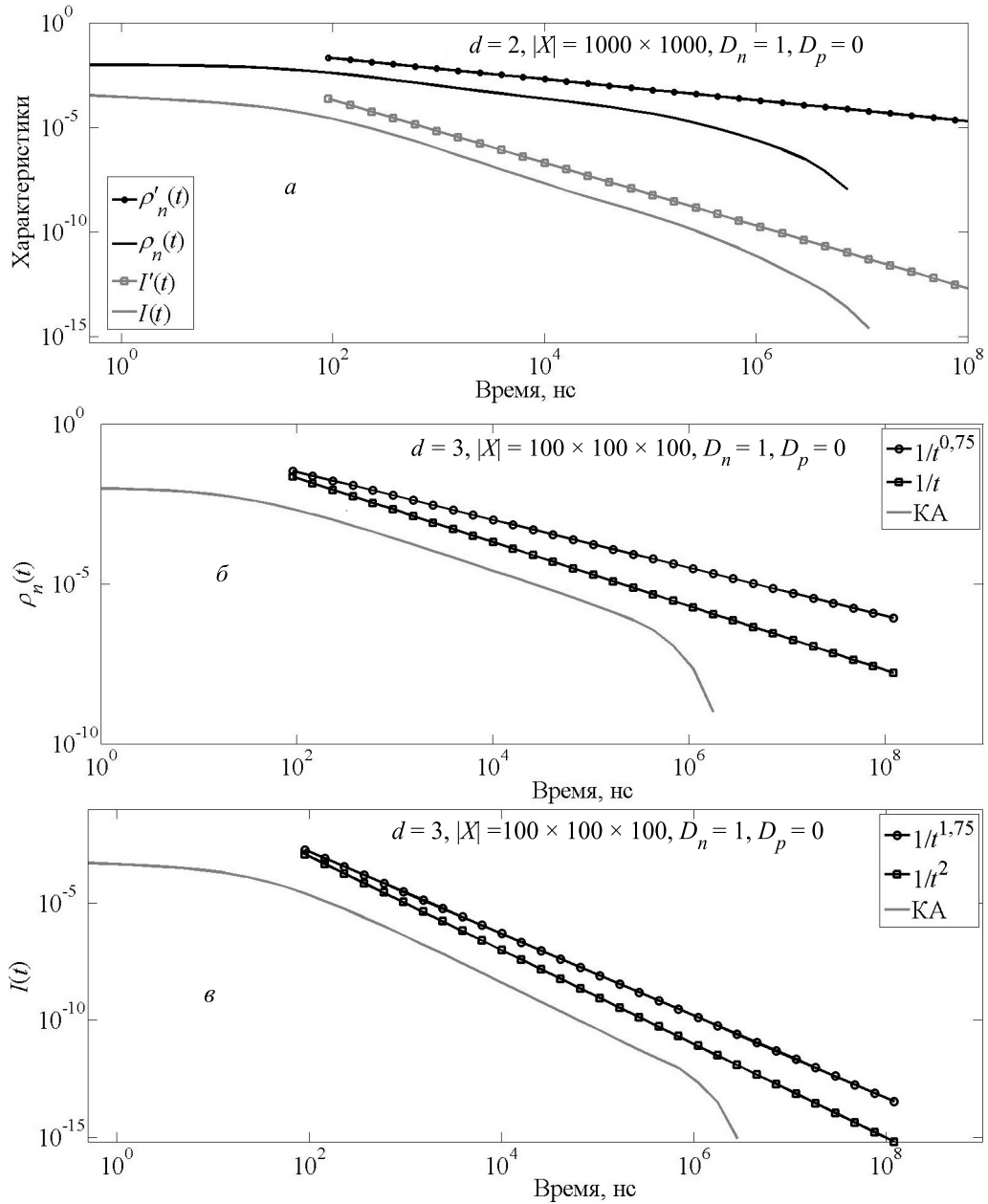


Рис. 1. Значения характеристик, полученные при КА-моделировании чистой диффузии: *a* — значения $\rho_n(t)$ и $I(t)$ в двумерном случае; *б* — плотность электронов в трёхмерном случае; *в* — интенсивность фотолюминесценции в трёхмерном случае

вычисленный с помощью КА-модели рекомбинации, согласуется с поведением функции $\tilde{\rho}_{n_3d}(t) = 1/t$, а график интенсивности фотолюминесценции $I(t)$ соответствует поведению функции $\tilde{I}_{3d}(t) = 1/t^2$. Сравнительный анализ значений характеристик, полученных в результате КА-моделирования и вычисленных с помощью непрерывной модели, основанной на методе Монте-Карло [4–7], показал, что отличие значений $\rho_{n_3d}(t)$ и $I_{3d}(t)$ от значений теоретических асимптот является особенностью именно КА-подхода. При использовании непрерывной модели рекомбинации результаты моделирования совпадают с поведением асимптот $\rho'_{n_3d}(t)$ и $I'_{3d}(t)$.

Для более детального анализа кинетики рекомбинации электронов и дырок вследствие диффузии на рис. 2 представлены пространственные распределения частиц в мо-

менты времени t_1, t_2 и t_3 , полученные в результате КА-моделирования в двумерном и трёхмерном случаях для значений модельных параметров, приведённых выше. На рисунках электроны обозначены кругами, а дырки — квадратами.

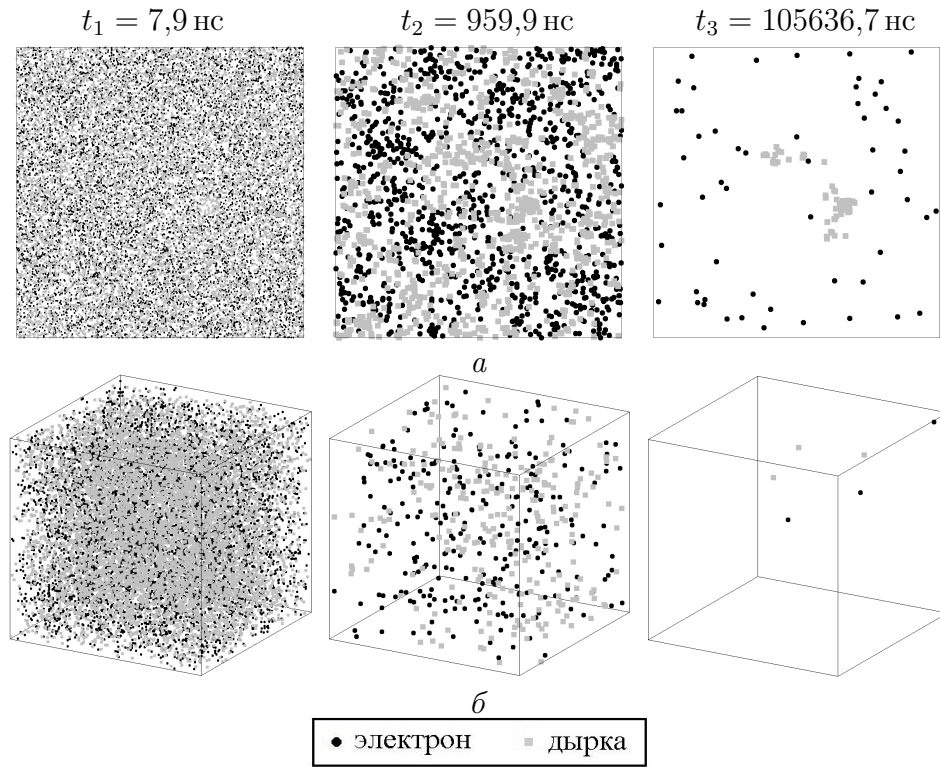


Рис. 2. Пространственное распределение электронов и дырок в случае чистой диффузии, полученное с помощью КА-моделирования в двумерном (а) и трёхмерном (б) случаях

В начальный момент времени частицы случайно распределены на поверхности полупроводника. При диффундировании электроны сталкиваются с дырками и аннигилируют. В результате аннигиляции происходит пространственное разделение электронов и дырок. Именно такая кластеризация, или сегрегация, является причиной замедления аннигиляции и выхода концентрации на асимптотику, отличную от гиперболической, имеющей место в случае детерминированной модели с равномерным перемешиванием электронов и дырок [4].

Оценкой степени пространственного разделения электронов и дырок может служить плотность вероятности расстояния от электрона до ближайшей дырки. Заметим, что для случая равномерного перемешивания эта плотность известна, она является пуассоновской [7].

На рис. 3 представлены плотности распределения расстояний от электрона до ближайшей дырки, вычисленные в различные моменты времени с помощью КА-модели рекомбинации для $d = 2$ и 3.

С течением времени и в двумерном, и в трёхмерном пространстве минимальные расстояния между электронами и дырками увеличиваются, так как ближайшие электроны и дырки аннигилируют друг с другом, плотность частиц уменьшается, а расстояния между ними увеличиваются. Высота плотности распределения уменьшается, а длина, то есть количество возможных значений расстояний, увеличивается. Причём графики плотности с течением времени растягиваются по оси абсцисс, но не сдвигаются, что свидетельствует о наличии и малых, и больших значений минимальных рас-

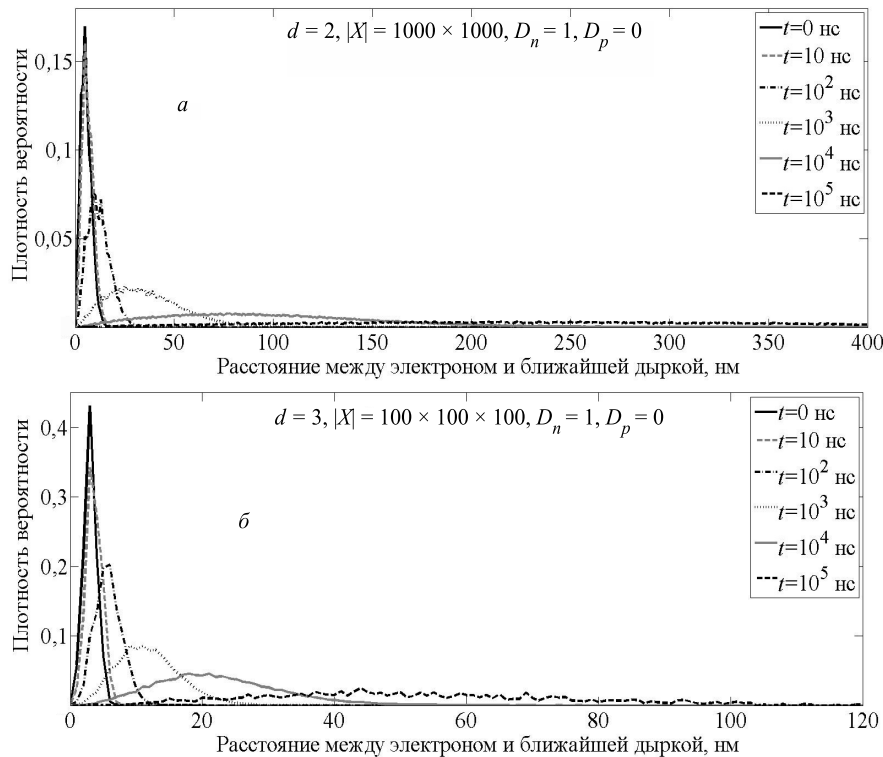


Рис. 3. Плотности распределения расстояний от электрона до ближайшей дырки, вычисленные с помощью КА-моделирования в различные моменты времени, в двумерном (а) и трёхмерном (б) случаях

стояний между электронами и дырками на протяжении всего времени моделирования. Это связано с тем, что при КА-подходе диффузионный шаг фиксирован и равен 1 нм, поэтому, несмотря на аннигиляцию ближайших электронов и дырок, из-за диффузии частицы вновь перемешиваются и оказываются на близком расстоянии друг от друга. Этим объясняется и отличие значений характеристик, полученных при КА-моделировании чистой диффузии, от теоретических значений, вычисленных по формуле (1).

В зависимости от значений коэффициентов диффузии D_n и D_p изменяется скорость аннигиляции электронов и дырок. Результаты, представленные выше, 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 аннигиляции частиц. На рис. 4 показаны графики плотности электронов для различных режимов диффузии:

- 1) диффузии электронов с коэффициентом $D_n = 1$ и неподвижных дырках;
- 2) диффузии электронов и дырок с коэффициентами $D_n = D_p = 1$;
- 3) диффузии электронов с коэффициентом $D_n = 2$ и неподвижных дырках.

Значения плотности электронов, полученные в случае диффузии только электронов ($D_n = 1$, $D_p = 0$) и диффузии всех частиц, совпадают в начале моделирования и различаются при больших временах, причём 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 $D_n = 2$, 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

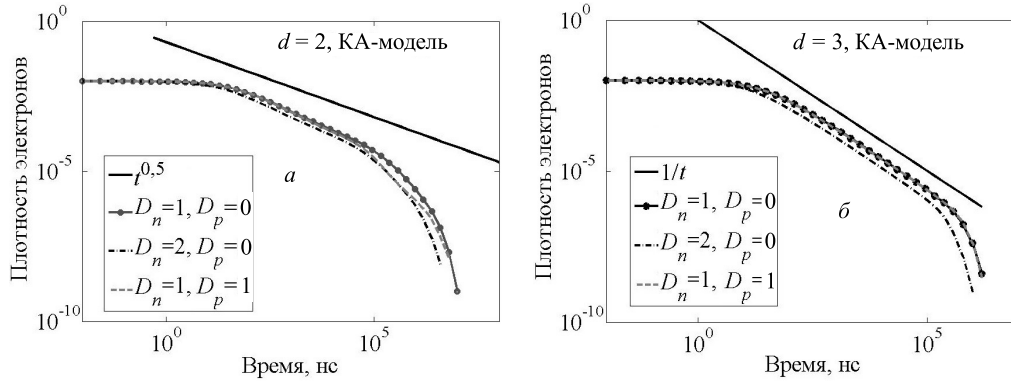


Рис. 4. Значения плотности электронов, вычисленные для различных значений коэффициентов диффузии с помощью КА-модели рекомбинации, в двумерном (а) и трёхмерном (б) случаях

$D = D_n + D_p = 2$ не влияет на процесс аннигиляции частиц. Например, графики плотности электронов, полученные для случаев $D_n = 0,8, D_p = 1,2$ и $D_n = 1,2, D_p = 0,8$, полностью совпадают с графиками, вычисленными для $D_n = D_p = 1$.

2.2. 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 и для режима чистой диффузии, выбранных в соответствии с экспериментальными данными [4].

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

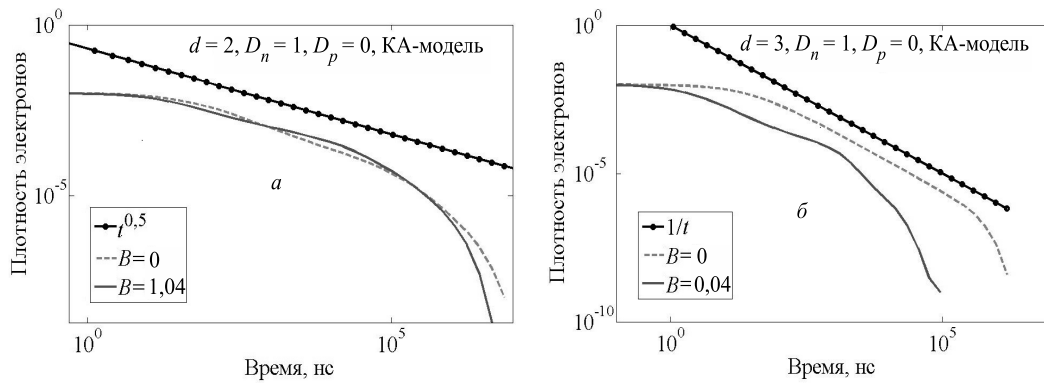


Рис. 5. Сравнение графиков плотности электронов, вычисленных с помощью КА-модели рекомбинации, в режимах чистой диффузии и туннелирования с диффузией для двумерного (а) и трёхмерного (б) случаев

Такое поведение можно объяснить изменением скорости туннелирования частиц в течение моделирования вследствие формирования кластеров электронов и дырок.

В начальные моменты времени частицы распределены равномерно и однородно (рис. 6, $t_1 = 35$ нс). Под воздействием двух процессов — туннелирования и диффузии — ближайшие электроны и дырки аннигилируют друг с другом, в результате происходит пространственное разделение частиц (рис. 6, $t_2 = 234$ нс). Скорость туннелирования электронов и дырок определяется минимальным расстоянием между ними. При взаимодействии частиц из одних и тех же кластеров расстояния существенно не изменяются, тогда как при аннигиляции всех частиц из кластеров новые минимальные расстояния между электронами и дырками увеличиваются (рис. 6, $t_3 = 1536$ нс), а следовательно, скорость туннелирования частиц уменьшается и процесс рекомбинации в целом замедляется.

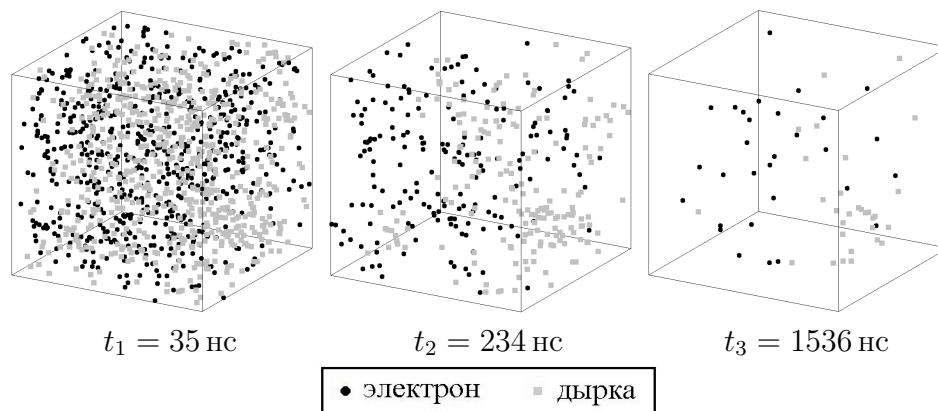


Рис. 6. Пространственное распределение электронов и дырок в различные моменты времени для случая туннелирования с диффузией в трёхмерной области, полученное с помощью КА-моделирования рекомбинации

2.3. Моделирование радиационной и нерадиационной рекомбинации электронов и дырок вследствие диффузии

Рассмотрим режим радиационной и нерадиационной рекомбинации электронов и дырок вследствие диффузии при наличии рекомбинационных центров. Значения модельных параметров выбраны такими же, как и в случае КА-моделирования чистой диффузии, кроме значения коэффициента диффузии дырок $D_p = 1 \text{ нм}^2 \cdot \text{нс}^{-1}$, и количества свободных рекомбинационных центров $N_n(0)$, которое варьировалось от 100 до 1000.

На рис. 7 представлены графики плотности электронов, вычисленные с помощью КА-моделирования для различного числа свободных рекомбинационных центров. При добавлении рекомбинационных центров процесс рекомбинации электронов и дырок завершается быстрее, чем в режиме чистой диффузии. Как в двумерном, так и в трёхмерном случае с увеличением количества рекомбинационных центров скорость аннигиляции частиц возрастает.

Пространственные распределения частиц, полученные в результате КА-моделирования при наличии центров рекомбинации (для $N_n(0) = 100$), показаны на рис. 8.

Как и в случае чистой диффузии, в начальный момент времени (t_1) частицы случайно и однородно распределены на поверхности полупроводника. Аннигиляция частиц происходит за счёт двух процессов: радиационной и нерадиационной рекомбинации. При диффундировании электроны и дырки сталкиваются с друг другом, в результате чего происходит радиационная рекомбинация частиц. Дополнительно частицы

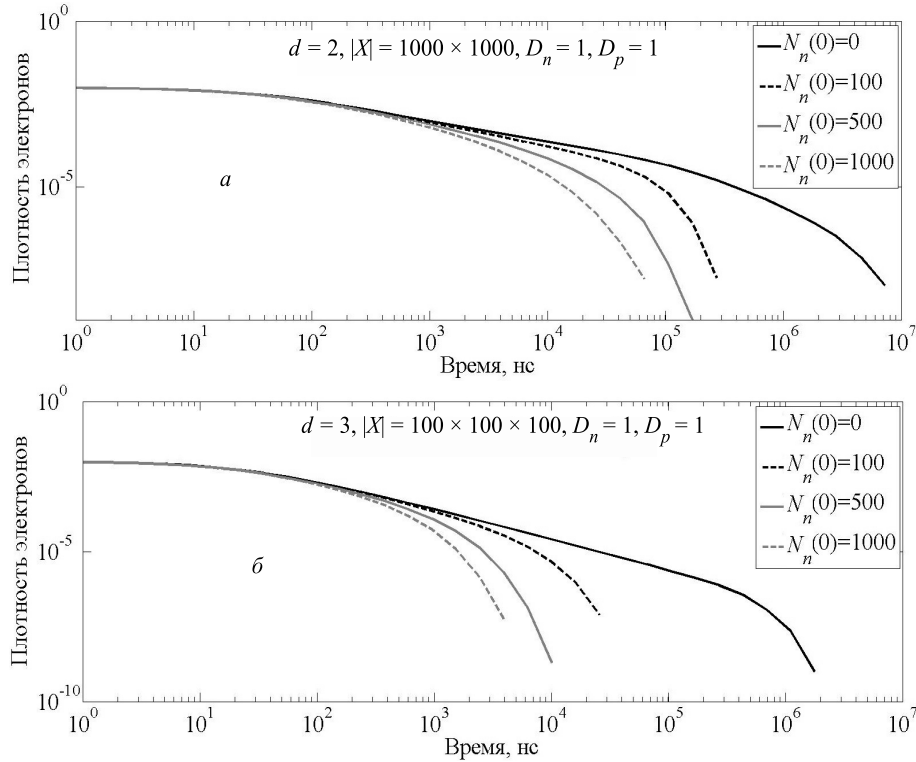


Рис. 7. Сравнение графиков плотности электронов, полученных с помощью КА-моделирования рекомбинации, при различном количестве рекомбинационных центров $N_n(0)$ для двумерного (а) и трёхмерного (б) случаев

при перемещении попадают в рекомбинационные центры, в которых происходит нерадиационная рекомбинация электронов и дырок. Наличие нерадиационных центров не нарушает процесс сегрегации электронов и дырок (момент времени t_2 на рис. 8). Однако в трёхмерном случае из-за более высокой скорости аннигиляции частиц пространственное разделение электронов и дырок менее выражено, чем в двумерном случае.

3. Производительность программ, реализующих клеточно-автоматную модель рекомбинации электронов и дырок в 2D- и 3D-полупроводниках

Точность результатов моделирования рекомбинации электронов и дырок определяется значениями модельных параметров и числом экспериментов M , по которым производится осреднение значений характеристик. В связи с тем, что значения характеристик являются случайными величинами, точность их вычислений зависит от количества моделируемых частиц, а следовательно, и от размера области $|X^d|$, так как для моделирования одной и той же начальной плотности частиц с увеличением их числа необходимо увеличивать и размер пространства.

Далее рассматривается зависимость времени выполнения параллельных программ, реализующих КА-модель рекомбинации электронов и дырок в двумерном и трёхмерном пространстве, от значений модельных параметров: размера области моделирования $|X^d|$, начального количества частиц $C_n(0)$ и начальной плотности частиц $\rho_n(0)$. Исследования проводились для режима чистой диффузии с коэффициентами $D_n = 0,5$, $D_p = 0$. Программы выполнялись на восьми OpenMP-потоках для $M = 8$ различных начальных распределений координат частиц.

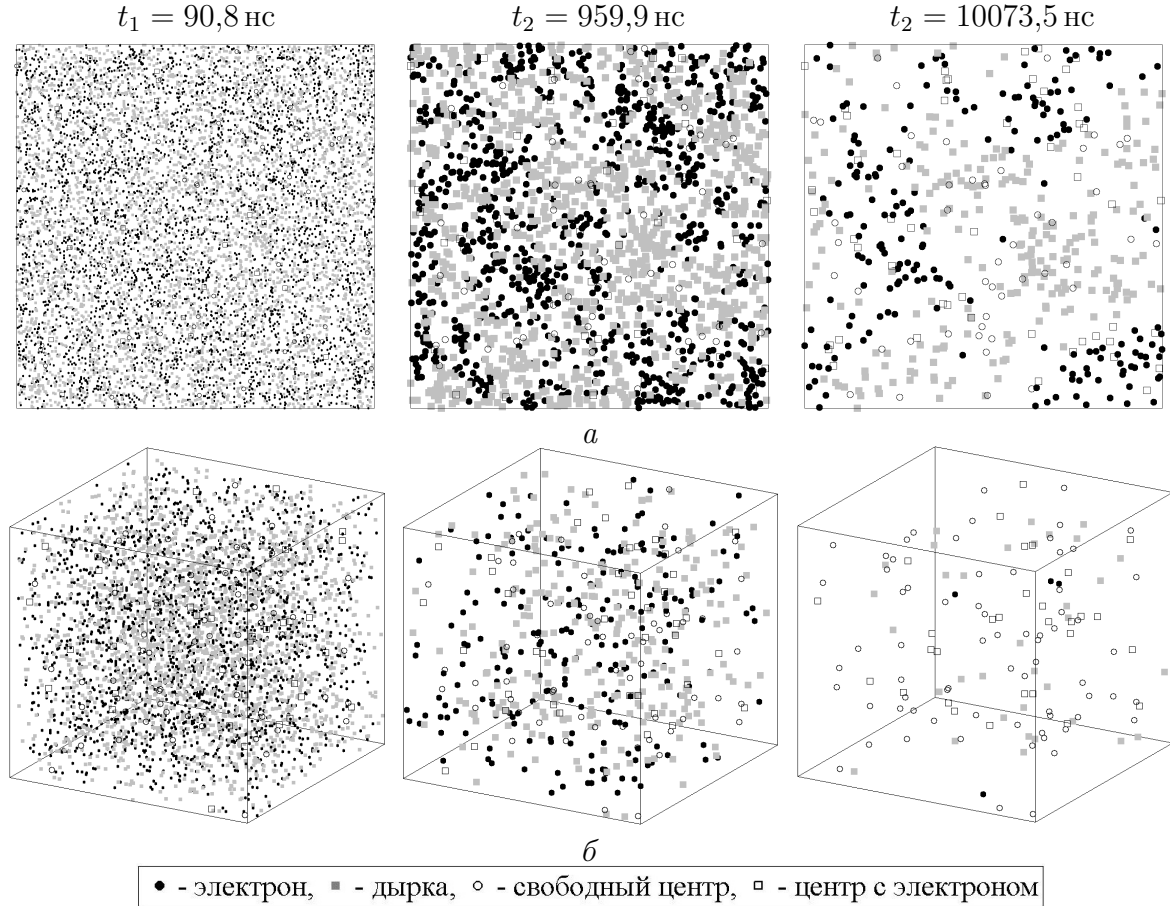


Рис. 8. Пространственное распределение электронов и дырок при наличии центров рекомбинации $N_n(0) = 100$, полученное с помощью КА-моделирования в двумерном (а) и трёхмерном (б) случаях

На рис. 9 представлены графики времени вычислений в зависимости от размера области $|X^d|$ при фиксированном начальном количестве частиц: $C_n(0) = C_p(0) = 2500$ в двумерном случае и $C_n(0) = C_p(0) = 5000$ в трёхмерном случае. Для значений времени исполнения программ, реализующих КА-модель рекомбинации, построены линии тренда. При моделировании процесса рекомбинации в двумерной области время вычислений квадратично зависит от размера области $|X^2|$, а при КА-моделировании рекомбинации в трёхмерной области график времени исполнения программы лучше аппроксимируется кубическим полиномом.

Зависимость времени вычислений от начального количества частиц исследовалась для двух случаев: 1) при постоянном размере области моделирования и 2) при постоянной начальной плотности частиц. В первом случае увеличивалось начальное число частиц $C_n(0) = C_p(0)$ при фиксированном размере области моделирования, плотность частиц соответственно тоже увеличивалась. Во втором случае фиксировалась начальная плотность частиц $\rho_n(0) = \rho_p(0) = C_n(0)/|X^d|$, а размер области $|X^d|$ и количество частиц $C_n(0) = C_p(0)$ увеличивались. Графики времени исполнения программ, реализующих КА-модель рекомбинации, и аппроксимирующие их линии тренда представлены на рис. 10 в логарифмической шкале.

Время вычислений при фиксированном размере области моделирования в двумерном случае квадратично зависит от начальной плотности частиц $\rho_n(0) = \rho_p(0)$, в трёх-

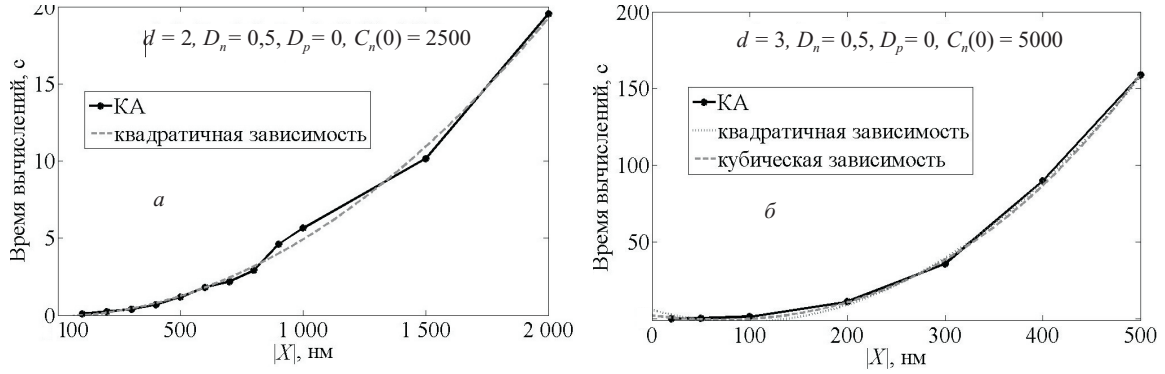


Рис. 9. Время выполнения программ, реализующих КА-модель рекомбинации, в зависимости от размера области моделирования $|X^d|$ при неизменном количестве частиц $C_n(0) = C_p(0)$ для двумерного (а) и трёхмерного (б) случаев

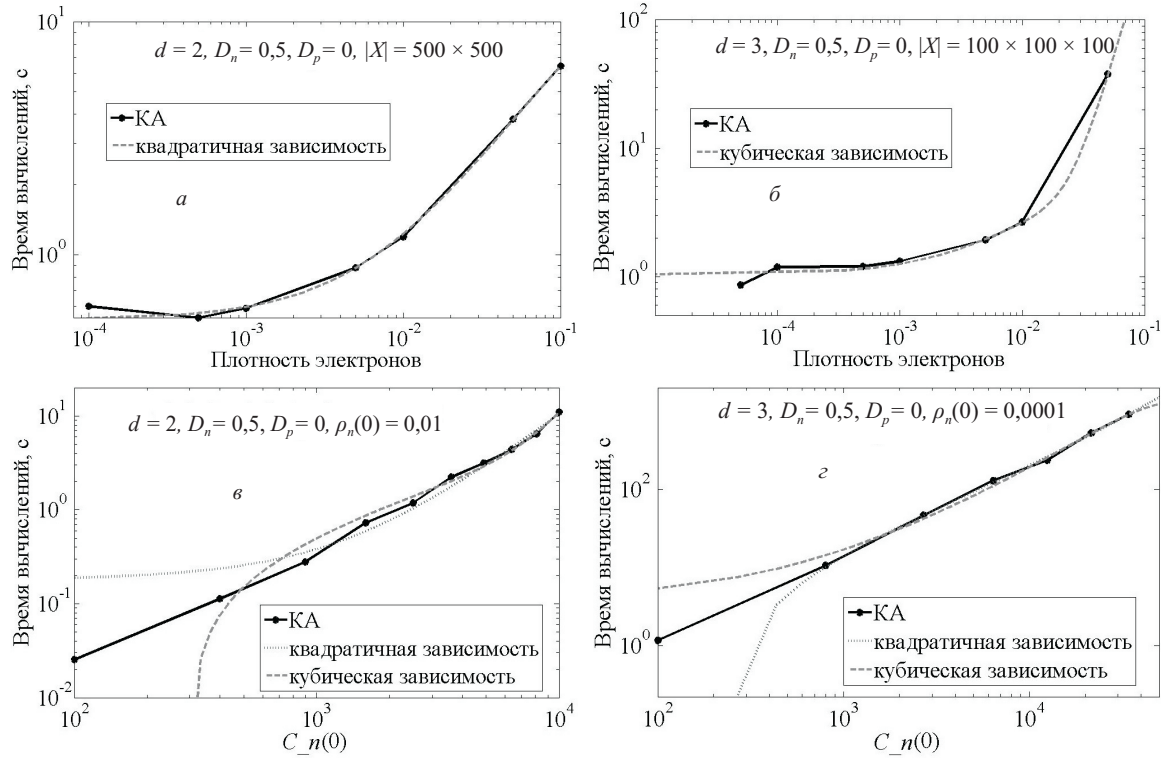


Рис. 10. Время выполнения программ, реализующих КА-модель рекомбинации, в зависимости от начальной плотности частиц в двумерном (а) и трёхмерном (б) случаях, а также в зависимости от начального количества частиц $C_n(0) = C_p(0)$ для двумерного (в) и трёхмерного (г) случаев

мерном случае время вычислений может быть аппроксимировано кубическим полиномом. При фиксированной начальной плотности частиц $\rho_n(0) = \rho_p(0)$ и увеличении размера области $|X^d|$ и начального количества частиц $C_n(0) = C_p(0)$ время исполнения программ, реализующих КА-модель рекомбинации в двумерном и трёхмерном случаях, не согласуется с поведением полиномиальных функций при небольшом количестве частиц ($C_n(0) < 5 \cdot 10^3$) и может быть аппроксимировано квадратичным и кубическим полиномами при больших значениях $C_n(0)$.

На основании графиков времени исполнения программ, реализующих КА-модель рекомбинации, и линий тренда, построенных по этим графикам, можно прогнозировать, сколько времени потребуется для моделирования процесса рекомбинации с нужными параметрами.

Заключение

Реализованы КА-алгоритмы моделирования рекомбинации электронов и дырок в двумерном и трёхмерном пространствах. Численно исследована динамика рекомбинации частиц для режимов чистой диффузии, диффузии с туннелированием и диффузии частиц при наличии центров рекомбинации. В результате анализа пространственного распределения частиц в течение моделирования обнаружено, что при аннигиляции частиц происходит сегрегация электронов и дырок.

Обнаружено, что в режиме чистой диффузии значения плотности электронов и интенсивности фотолуминесценции, вычисленные при использовании КА-подхода, в двумерном случае совпадают со значениями теоретических асимптотик, а в трёхмерном случае отличаются от них. Изучено влияние значений коэффициентов диффузии электронов и дырок на динамику процесса рекомбинации. Выявлено, что увеличение коэффициентов D_n и D_p приводит к увеличению скорости аннигиляции частиц. По сравнению с диффузией только электронов совместная диффузия электронов и дырок также приводит к увеличению 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. Добавление центров рекомбинации также приводит к увеличению скорости аннигиляции электронов и дырок.

Изучена зависимость времени выполнения параллельных программ, реализующих КА-модель рекомбинации электронов и дырок в двумерном и трёхмерном полупроводниках, от значений модельных параметров: размера области моделирования, начального количества частиц и начальной плотности частиц. Установлено, что в двумерном случае время исполнения программы аппроксимируется квадратичным полиномом, а в трёхмерном случае согласуется с поведением кубического полинома.

ЛИТЕРАТУРА

1. Gorgis A., Flissikowski T., Brandt O., et al. Time-resolved photoluminescence spectroscopy of individual GaN nanowires // Phys. Rev. 2012. No. B 86. 041302(R).
2. Brandt O. and Ploog K. H. Solid state lighting: the benefits of disorder // Nat. Mater. 2006. No. 5. P. 769–770.
3. Brosseau C.N., Perrin M., and Silva C. Carrier recombination dynamics in $In_xGa_{1-x}N/GaN$ multiple quantum wells // Phys. Rev. 2010. No. B 82. 085305.
4. Sabelfeld K. K., Brandt O., and 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. V. 53. Iss. 2. P. 651–669.
5. 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. V. 7. No. 3–4. P. 223–228.

6. Kolodko A., Sabelfeld K., and Wagner W. A stochastic method for solving Smoluchowski's coagulation equation // Mathematics and Computers in Simulation. 1999. V.49. No.1–2. P. 57–79
7. Sabelfeld K. K., Levykin A. I., and Kireeva A. E. Stochastic simulation of fluctuation-induced reaction-diffusion kinetics governed by Smoluchowski equations // Monte Carlo Methods and Applications. 2015. V. 21. No. 1. P. 33–48.
8. Toffoli T. and Margolus N. Cellular Automata Machines: A New Environment for Modeling. USA: MIT Press, 1987. 259 p.
9. Бандман О. Л. Клеточно-автоматные модели пространственной динамики // Системная информатика. Методы и модели современного программирования. 2006. № 10. С. 59–113.
10. Wolfram S. A New Kind of Science. Wolfram Media, 2002. 1197 p.
11. Ермаков С. М., Михайлов Г. А. Статистическое моделирование. М.: Физматлит, 1982. 296 с.
12. Kireeva A. E. and Sabelfeld K. K. Cellular automata model of electrons and holes annihilation in an inhomogeneous semiconductor // LNCS. 2015. V.9251. P. 191–200.

REFERENCES

1. Gorgis A., Flissikowski T., Brandt O., et al. Time-resolved photoluminescence spectroscopy of individual GaN nanowires. Phys. Rev., 2012, no. B 86, 041302(R).
2. Brandt O. and Ploog K. H. Solid state lighting: the benefits of disorder. Nat. Mater., 2006, no. 5, pp. 769–770.
3. Brosseau C. N., Perrin M., and Silva C. Carrier recombination dynamics in $In_xGa_{1-x}N/GaN$ multiple quantum wells. Phys. Rev., 2010, no. B 82, 085305.
4. Sabelfeld K. K., Brandt O., and 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, iss. 2, pp. 651–669.
5. 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.
6. 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
7. Sabelfeld K. K., Levykin A. I., and 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.
8. Toffoli T. and Margolus N. Cellular Automata Machines: A New Environment for Modeling. USA, MIT Press, 1987. 259 p.
9. Bandman O. L. Kletочно-avtomatnye modeli prostranstvennoy dinamiki [Cellular automata models of spatial dynamics]. Sistemnaya Informatika. Metody i Modeli Sovremennogo Programirovaniya, 2006, no. 10, pp. 59–113. (in Russian)
10. Wolfram S. A New Kind of Science. Wolfram Media, 2002.
11. Ermakov S. M. and Mikhaylov G. A. Statisticheskoe modelirovanie [Statistical Modeling]. Moscow, Fizmatlit Publ., 1982, 296 p. (in Russian)
12. Kireeva A. E. and Sabelfeld K. K. Cellular automata model of electrons and holes annihilation in an inhomogeneous semiconductor. LNCS, 2015, vol. 9251, pp. 191–200.