

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ГРАФИЧЕСКИХ УСКОРИТЕЛЕЙ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ РЕЛАКСАЦИИ МАССИВА КРЕМНИЕВЫХ НАНОКРИСТАЛЛОВ ПО МЕТОДУ МОНТЕ-КАРЛО

В.А. Беляков¹, К.В. Сидоренко², И.Б. Крылов¹

¹*Нижегородский госуниверситет им. Н.И. Лобачевского*

²*Научно-исследовательский физико-технический институт, Нижний Новгород*

Рассматривается задача моделирования релаксации массива кремниевых нанокристаллов. Предлагается схема решения задачи с использованием метода Монте-Карло, включающая случайное размещение массива нанокристаллов в плоском слое и моделирование процесса эмиссии массива. Описаны используемые алгоритмы и схема их распараллеливания и адаптации к выполнению на графическом ускорителе. Приведены результаты вычислительных экспериментов.

Введение

Кремний является основным элементом современной микроэлектроники. Возможность высокой очистки кремния, его доступность и дешевизна, высокие качества границы раздела Si/SiO₂ обеспечили кремнию лидирующие позиции в создании различных приборов микроэлектроники и их применении. Однако в оптоэлектронике кремний пока не получил широкого распространения по причине фундаментальной особенности кремниевой зонной структуры – ее непрямозонности. Волновые функции электронов (в зоне проводимости) и дырок (в валентной зоне) являются полностью локализованными в импульсном пространстве. При этом значения импульсов для электронов и дырок очень сильно различаются, и разница эта превосходит на 3–4 порядка импульс фотона, который мог бы быть излучен при межзонном электронно-дырочном переходе. В результате, закон сохранения импульса при излучательном межзонном переходе не выполняется, что приводит к полному запрету таких переходов в системе.

Преодоление этого препятствия видится в наноструктурировании кремния, т.е. создании различных структур на основе квантовых точек – нанокристаллов – кремния, динамика электронов в которых описывается чисто квантовыми законами. В нанокристалле, помещенном в широкозонную диэлектрическую матрицу, например в SiO₂, электронное состояние оказывается локализованным внутри нанокристалла, что ведет к «размытию» волновых функций электронов и дырок в импульсном пространстве. Это, в свою очередь, делает электронно-дырочный излучательный переход разрешенным.

Теоретическое изучение оптических свойств нанокристаллов кремния чаще всего выполняется для одного нанокристалла, в то время как в экспериментах всегда приходится иметь дело с их ансамблями, содержащими миллионы или даже миллиарды кристаллитов. Эти ансамбли характеризуются разбросом по размерам кристаллитов, что само по себе может приводить к некоторым особенностям в спектрах излучения, а кроме того, в плотных массивах нанокристаллов становится возможным энергообмен между нанокристаллами, что самым существенным образом может сказаться на люминесценции массива.

1. Задача численного моделирования

Адекватное описание световой эмиссии массива нанокристаллов должно учитывать возможность энергообмена между элементами массива, а также различные безызлуча-

тельные релаксационные процессы, идущие в самих нанокристаллах и составляющие конкуренцию излучательным межзонным переходам. Энергообмен между нанокристаллами может проявляться в первую очередь посредством туннельной миграции возбужденных носителей (электронов и дырок), а также посредством экситонного переноса, идущего по механизму Ферстера-Декстера. Среди безызлучательных процессов, идущих «внутри» нанокристалла независимо от наличия «соседей», следует выделить захват электронов на оборванные связи на поверхности нанокристалла и Оже-рекомбинацию. Все эти безызлучательные процессы, как и излучательные межзонные переходы, носят вероятностный характер и описываются скоростями (вероятностями за единицу времени), значения которых известны.

Количество нанокристаллов в массиве должно быть таким, чтобы позволить набрать достаточную статистику излучательных переходов при релаксации массива. Число нанокристаллов не может быть величиной порядка сотни или тысячи, поскольку безызлучательные процессы обладают на несколько порядков большими скоростями, чем излучательные переходы, вследствие чего из сотни или даже тысячи нанокристаллов подавляющее большинство срелаксирует безызлучательно, и только единицы сумеют испустить фотон. Мы используем количества нанокристаллов в массиве на уровне 10^8 .

Задача моделирования люминесценции в плотных ансамблях нанокристаллов кремния разбивается на два логических этапа:

- случайное размещение нанокристаллов в плоском слое;
- непосредственное моделирование процесса эмиссии массива.

2. Размещение нанокристаллов в плоском слое

Нанокристаллы представляют собой окружности со случайными радиусами, разброс значений которых будем описывать логарифмическим нормальным распределением (как показывают эксперименты, именно логарифмическое нормальное распределение наиболее точно описывает статистику размеров нанокристаллов в реальных структурах).

В рамках первого этапа равномерно размещаются окружности (нанокристаллы) внутри заданного прямоугольника на плоскости так, чтобы они не пересекались (пуассоновское размещение). Для этого используется иерархическое итерационное разбиение области и бросание центров окружностей в рамках полученных подобластей – так называемое параллельное пуассоновское размещение окружностей, включающее выполнение следующей последовательности действий:

- 1) на заданную прямоугольную область вбрасывается точка (центр окружности), при этом проверяется, нет ли пересечений данной окружности с уже имеющимися;
- 2) область разбивается на четыре равные непересекающиеся подобласти (делением пополам по вертикали и горизонтали), брошенная точка приписывается той новой подобласти, куда она попала после разбиения;
- 3) в каждую из получившихся подобластей, не содержащую точки, снова бросается точка, как на шаге 1.

Обход подобластей на шаге 3 осуществляется в случайном порядке. В случае когда при размещении окружности в подобласти имеет место пересечение с уже размещенными окружностями, делается еще несколько попыток случайного размещения, количество этих попыток является параметром алгоритма. Алгоритм завершается либо по достижении нужной плотности, либо когда размер подобластей будет недостаточен для дальнейшего размещения окружностей.

Следующие дополнения обеспечивают распараллеливание алгоритма:

- после разбиения области из всех ее подобластей выделяются фазовые группы: подобласти принадлежат одной фазовой группе, если размещение окружностей в них возможно независимо и параллельно; в частности, к одной фазовой группе могут относиться подобласти, которые расположены на определенном расстоянии друг от друга;
- выполняется последовательная обработка фазовых групп, при этом области из одной фазовой группы обрабатываются параллельно; выбор фазовой группы для обработки на каждом шаге происходит случайным образом.

Были реализованы последовательная и параллельная (для систем с общей памятью с использованием технологии OpenMP) версии описанного алгоритма для CPU.

3. Моделирование люминесценции массива нанокристаллов

Для каждого нанокристалла рассматриваются четыре конкурирующих между собой процесса – межзонная излучательная рекомбинация (скорость τ_R^{-1}), безызлучательная рекомбинация (захват экситона на оборванную связь плюс Оже-рекомбинация), идущая со скоростью $\tau_{NR}^{-1} = \tau_c^{-1} + \tau_A^{-1}$, туннелирование электрона или дырки (скорость τ_t^{-1}) и экситонный переход (скорость τ_x^{-1}). Также может реализоваться еще одно, так называемое «нулевое», событие, в результате которого система остается в исходном состоянии, т.е. ни одно из вышеперечисленных четырех событий не происходит. Шаг по времени δt выбирается так, чтобы нулевое событие обладало наибольшей вероятностью, много большей вероятности любого из других событий, – самое быстрое из всех событий, исключая нулевое, среди всех нанокристаллов массива имеет вероятность, не превышающую 0.01.

При инициализации алгоритма выполняются следующие предварительные вычисления:

- для каждого нанокристалла рассчитываются энергии основного уровня по формулам: $E_e = 0.7/R^{3/2}$ эВ – для электронов; $E_h = 0.8/R^{3/2}$ эВ – для дырок; $E_{ph} = E_e + E_h + 1.12$ эВ – для фотонов (радиус R берется в нанометрах);
- для каждого нанокристалла в соответствии с его размером задаются скорости излучательного перехода, Оже-процесса и захвата носителя на оборванную связь;
- задается начальное число электронов N_e , дырок N_h и фотонов N_{ph} в каждом нанокристалле (в экспериментах использовались значения $N_e = 1$, $N_h = 1$, $N_{ph} = 0$);
- случайным образом определяется наличие оборванной связи в нанокристалле (вероятность 0.6);
- для каждого нанокристалла определяется набор соседей, с которыми он способен обмениваться электронами, дырками и экситонами, посредством проверки выполнения условий $L < 2$ нм и $R_1 < R_2$, где L – расстояние между краями нанокристаллов, R_1 – радиус нанокристалла, у которого ищется окружение, R_2 – радиус соседнего нанокристалла; для всех соседей рассчитываются скорости туннелирования электронов и дырок и скорости экситонных переходов.

На каждом шаге алгоритма выполняются следующие действия:

- рассчитывается оптимальный шаг по времени по формуле $\delta t = 10^{-[\lg(P_m)+2]}$, где P_m – максимальная среди всех кристаллитов вероятность наступления ненулевого события;
- для каждого нанокристалла строится линейка вероятностей наступления возможных событий и выбирается одно из них путем генерации случайного значения.

Были реализованы последовательная версия данного алгоритма для CPU, параллельная для CPU для систем с общей памятью (OpenMP), параллельная версия для графического ускорителя GPU (CUDA), а также версия для работы на системе с распределенной памятью, использующей GPU, выполняющая расчет для многослойных систем – каждый отдельный слой моделируется на своем узле кластера, используя при этом вычислительные возможности GPU (использовалась технология MPI).

Были проведены эксперименты моделирования экситонного переноса для массива из 1000 нанокристаллов, размещенных с разной плотностью. Рисунок 1 показывает зависимость общего количества экситонов от времени при четырех вариантах плотности размещения нанокристаллов.

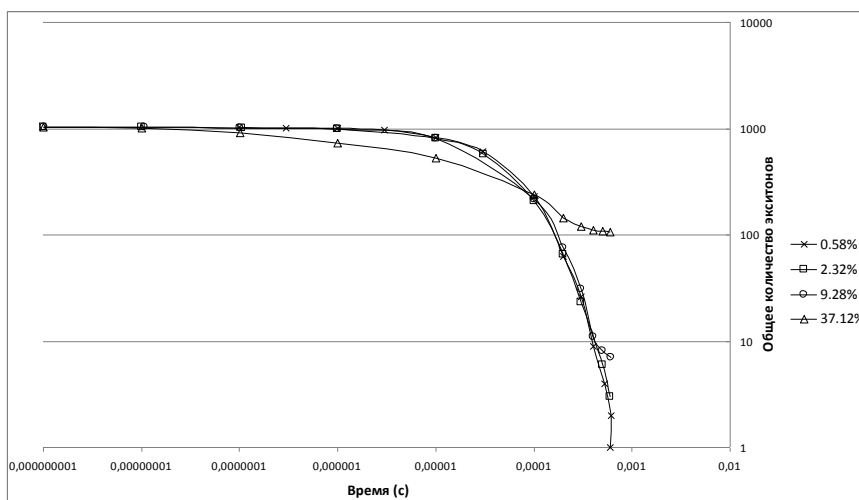


Рис. 1. Зависимость общего количества экситонов в системе от времени для различных плотностей заполнения области нанокристаллами

4. Производительность решения

Вычислительные эксперименты проводились на следующей платформе:

- язык программирования: C;
- используемые технологии: OpenMP, CUDA, MPI;
- операционная система: Microsoft Windows Server 2008 HPC Edition SP2 x64;
- среда разработки: Microsoft Visual Studio 2010;
- компилятор: Intel C++ Compiler XE 12.1;
- 16 узлов: 2 CPU Intel Xeon L5630 2.13 ГГц, 4 ядра; 24 Гб оперативной памяти; NVidia Tesla M2050.

На рис. 2-4 представлены временные результаты и ускорение параллельных алгоритмов размещения окружностей, моделирования люминесценции и экситонного переноса (максимально использовалось 7168 графических ядер).

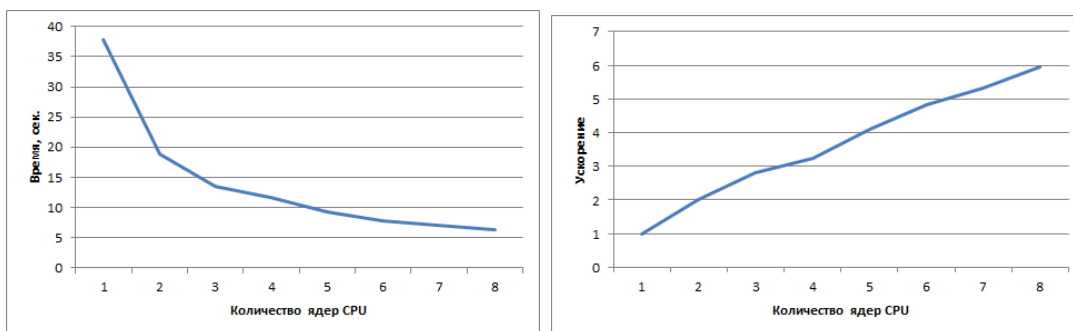


Рис. 2. Время работы и ускорение алгоритма размещения окружностей

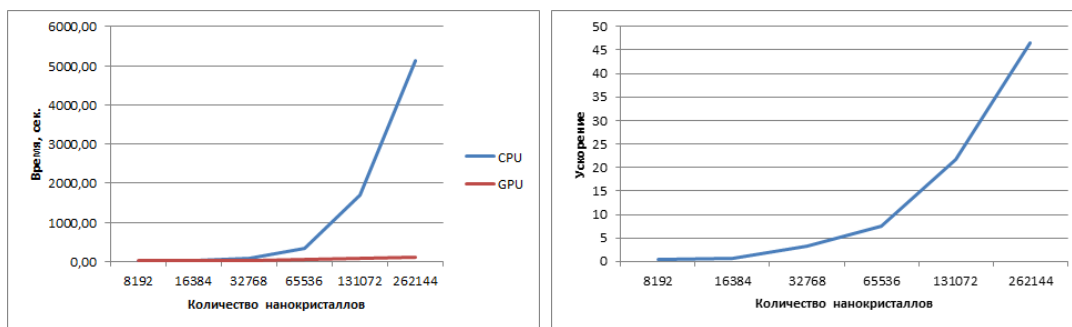


Рис. 3. Время работы и ускорение алгоритма моделирования люминесценции и экситонного переноса (параллельная CPU-версия и параллельная GPU-версия)

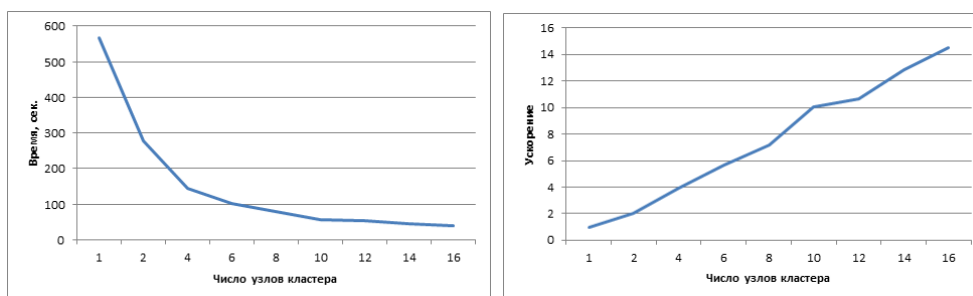


Рис. 4. Масштабируемость алгоритма моделирования люминесценции и экситонного переноса на системе с распределенной памятью, использующей графические ускорители

Заключение

Авторами была исследована возможность выполнения численного моделирования релаксации массива кремниевых нанокристаллов по методу Монте-Карло на гибридных вычислительных системах с распределенной памятью, использующих графические ускорители. Были предложены и реализованы схемы распараллеливания алгоритмов формирования массива нанокристаллов и моделирования люминесценции. Результаты экспериментов показывают, что предложенные параллельные решения обладают хорошей масштабируемостью.

Результаты вычислительных экспериментов были использованы для обоснования модели энергообмена между кремниевыми квантовыми точками посредством переноса элементарных возбуждений (экситонов).

Литература

1. Takagi H., Ogawa H., Yamazaki Y., Ishizaki A., and Nakagiri T. Quantum size effects on photoluminescence in ultrafine Si particles // *Appl. Phys. Lett.* 56, 1990. P. 2379–2380.
2. Pavesi L., Dal Negro L., Mazzoleni C., Franzo G., and Priolo F. Optical gain in silicon nanocrystals // *Nature* 408, 2000. P. 440–444.
3. Forster T. Versuche zum zwischenmolekularen. Ubergang von elektronenanregungsenergie // *Zeitschrift fur Elektrochemie* 53, 1949. S. 93.
4. Forster T. Experimentelle und theoretische Untersuchung des zwischenmolekularen Ubergangs von Elektronenanregungsenergie // *Zeitschrift fur Naturforschung A* 4, 1949. 321 s.
5. Dexter D.L. A theory of sensitized luminescence in solids // *J. Chem. Phys.* 21, 1952. 836 p.
6. Беляков В.А., Конаков А.А., Бурдов В.А. Миграция возбужденных носителей в ансамблях нанокристаллов кремния, легированных фосфором // *ФТП* 44, 2010. С. 1466.
7. Lagae A., Dutre P. A Comparison of Methods for Generating Poisson Disk Distributions // *Computer Graphics*, 2008. Vol. 27, № 1, P. 114–129.
8. Wei L.-Y. Parallel Poisson Disk Sampling // *Microsoft Research Asia*, 2008.