

Моделирование динамики образования кластеров радиационных дефектов с использованием высокопроизводительных вычислений

А.С. Пузанов¹, С.В. Оболенский¹, В.А. Козлов^{1,2}, Е.В. Волкова¹, А.А. Потехин¹,
И.Ю. Забавичев¹

ННГУ им. Н.И. Лобачевского¹, Институт физики микроструктур РАН²

Уменьшение геометрических размеров современных полупроводниковых приборов до величин, сравнимых с размерами КРД, которые составляют порядка 10...100 нм, требует разработки новых подходов к расчетной оценке их радиационной стойкости. Пролет частиц высоких энергий через нанометровые слои гетероструктур вызывает появление в них каскадов точечных дефектов за доли пикосекунд. В результате диффузии и частичной рекомбинации дефектов в течение десятков пикосекунд происходит формирование стабильных КРД, необратимо изменяющих транспортные свойства гетероструктур [1]. Вероятностный характер образования КРД в рабочей области диода, а также малые времена его стабилизации обуславливают проблему получения экспериментальной информации о временной динамике данного процесса.

В работе проведен анализ физических процессов при возникновении и последующей стабилизации КРД, которые инициированы столкновением быстрого нейтрона с атомом кристаллической решетки, находящимся в области пространственного заряда нанометрового диода. Метод Монте-Карло применялся для моделирования возникновения и эволюции радиационных дефектов, а также переноса носителей заряда через диод. В силу большого количества движущихся одновременно атомов (до 10^4 частиц), носителей заряда (до 10^6 частиц) и необходимости расчета самосогласованного электрического поля в рабочей области диода данная задача достаточно ресурсоемка и требует применения высокопроизводительных вычислений.

Для расчета импульса тока, возникающего в процессе формирования КРД, использован суперкомпьютер «Лобачевский». Алгоритм Монте-Карло построен на базе curand.h, решение уравнения Пуассона для расчета самосогласованного электрического поля на каждом шаге моделирования получали на основе алгоритма быстрого преобразования Фурье на базе cufft.h, оба файла входят в состав стандартной библиотеки CUDA параллельных вычислений на видеокартах. Взаимодействие между вычислительными узлами осуществлялось при помощи протокола MPI. Использование стандартных библиотек, содержащих эффективные параллельные алгоритмы, определяет применение данного подхода в области высокопроизводительных вычислений на суперкомпьютерах в качестве базового.

Анализ откликов диодов с разной толщиной рабочей области и сопоставление их с результатами расчетов, позволит получить информацию о динамике формирования КРД. Идея состоит в том, чтобы сопоставить каждому временному интервалу от начала процесса до его завершения конкретный диод с соответствующей толщиной и тем самым преобразовать развертку по толщине во временную развертку. Отметим, что до настоящего времени задача прямого экспериментального исследования динамики образования КРД на пикосекундных временных интервалах не ставилась ввиду отсутствия соответствующей техники ТГц диапазона частот.

Литература

1. Вавилов В.С. Действие излучений на полупроводники. М.: Физматгиз, 1963. 264 с.