



www.volsu.ru

DOI: <https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2021.1.3>

УДК 004.942, 538.935  
ББК 22.379, 32.972.1

Дата поступления статьи: 08.02.2021  
Дата принятия статьи: 03.03.2021

## МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ – КАРЛО КИНЕТИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТЕХНОЛОГИИ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ OPENASS

**Владимир Леватович Абдрахманов**

Ассистент кафедры электронно-вычислительных машин и систем,  
Волгоградский государственный технический университет  
369565@gmail.com  
просп. им. В.И. Ленина, 28, 400005 г. Волгоград, Российская Федерация

**Дмитрий Леватович Абдрахманов**

Ассистент кафедры электронно-вычислительных машин и систем,  
Волгоградский государственный технический университет  
565963@gmail.com  
просп. им. В.И. Ленина, 28, 400005 г. Волгоград, Российская Федерация

**Дмитрий Викторович Завьялов**

Доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой физики,  
Волгоградский государственный технический университет  
sinegordon@gmail.com  
<https://orcid.org/0000-0002-9497-9613>  
просп. им. В.И. Ленина, 28, 400005 г. Волгоград, Российская Федерация

**Владимир Игоревич Конченков**

Кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики,  
Волгоградский государственный технический университет  
kontchenkov@yandex.ru  
<https://orcid.org/0000-0002-2525-0191>  
просп. им. В.И. Ленина, 28, 400005 г. Волгоград, Российская Федерация

**Аннотация.** Представлена разработка программного пакета, использующего технологию параллельных вычислений OpenACC для моделирования методом Монте — Карло кинетических коэффициентов однородных полупроводниковых материалов. Пакет представляет собой набор взаимосвязанных классов, параметры материала и внешних полей переопределяются в дочерних классах, доступных пользователю, что дает возможность проводить моделирование широкого круга материалов. Пакет позволяет использовать модели упругого (акустические фононы, заряженные примеси) и неупругого (полярные и неполярные оптические фононы) рассеяния электронов в однозонном приближении. Применение технологии OpenACC дает возможность использования в качестве вычислительной платформы как систем с общей памятью, так и гибридных систем, оснащенных графическими процессорами. Реализована возможность сохранения данных о каждой частице на каждом шаге моделирования, что позволило, в частности, проследить зависимость средней частоты столкновений от энергии носителей заряда и напряженности постоянного электрического поля, приложенного к образцу, в бета-модификации оксида галлия, оценить применимость моделей проводимости, предложенных в работах других исследовательских групп. Показано, что наибольший вклад в проводимость бета-модификации оксида галлия при комнатных температурах вносит рассеяние электронов на полярных оптических фононах, и средняя частота столкновений, а также процентное соотношение столкновений электрона с различными типами неоднородностей кристаллической решетки, слабо зависят от напряженности постоянного электрического поля. При температуре около 100 К с ростом приложенного к образцу постоянного электрического поля, во-первых, существенно растет доля рассеяний с испусканием полярных оптических фононов и уменьшается доля рассеяний на заряженных примесях, во-вторых, растет суммарная частота столкновений. Это связано, с одной стороны, с разогревом электронного газа электрическим полем и активацией каналов рассеяния с испусканием фонона при данной температуре, с другой стороны, недостаточно быстрым ростом концентрации носителей тока за счет ионизации примесей. Благодаря моделированию методом Монте — Карло удалось напрямую оценить справедливость использования поправки Фарвака (Farvaque correction) для приближенного описания процессов неупругого рассеяния электронов на полярных оптических фононах путем введения некоторого эффективного времени релаксации.

**Ключевые слова:** OpenACC, метод Монте — Карло, полярные оптические фононы, оксид галлия, среднее время релаксации.

### Введение

За последнее десятилетие стремительное уменьшение полупроводниковых структур с сотен до единиц нанометров стало возможным благодаря использованию технологических систем автоматизированного проектирования. Именно они позволили произвести моделирование процессов, происходящих в нанoeлектронных устройствах, и разработать процесс их изготовления. К таким системам относятся коммерческие MEDICI и

SUPREM4 от Synopsys Corporation, ATHENA и ATLAS от SILVACO, TCAD studio и другие [31; 32].

Основным недостатком приведенных выше программных комплексов является тот факт, что они позволяют моделировать только устройства на основе тех материалов, которые есть в их библиотеке. Для моделирования транспорта в новых материалах или материалах с некоторым модельным спектром они не подходят. Целью настоящей работы является разработка пакета, использующего технологию OpenACC [7; 22] для организации параллельных вычислений, в котором пользователь может задавать константы основных механизмов рассеяния и спектр носителей в достаточно широких пределах.

В последнее время интерес к использованию технологии OpenACC для распараллеливания расчетов существенно расширился (см., например, [4; 5; 8; 10; 16; 17; 27]). Связано это с тем, что данная технология позволяет использовать для параллельных расчетов как системы с общей памятью, так и гетерогенные системы, прежде всего, системы с графическими ускорителями (GPU), без существенного изменения исходного кода программы. Для систем с общей памятью базовой технологией распараллеливания расчетов является OpenMP, и, как видно из результатов сравнения вычислений при помощи различных технологий (OpenACC, OpenMP, Kokkos), выполненных в работе [5], нет большого преимущества в скорости вычислений у других технологий по сравнению с OpenMP. С другой стороны, при работе с графическими ускорителями, обладающими сотнями вычислительных ядер и многоуровневой памятью, написание программы с использованием прагм, подобных прагмам OpenMP, — большой шаг вперед в смысле удобства написания и отладки программного кода, вовлечения в процесс численного моделирования специалистов из различных предметных областей, а не только узких специалистов в области параллельных вычислений [7]. В статье [17] представлена реализация численного решения уравнения Пуассона на гибридной системе, основанная на совместном использовании OpenACC и MPI. Стоит отметить работы [8; 27], в которых представлены реализации различных вариантов методов Монте — Карло, использующие технологию OpenACC.

В настоящей работе представлена реализация вычислительного пакета, предназначенного для моделирования методом Монте — Карло электронного транспорта в полупроводниковых материалах, использующая для распараллеливания расчетов технологию OpenACC, описан пример использования пакета — исследование относительного вклада различных механизмов рассеяния электронов на проводимость бета-модификации оксида галлия в зависимости от температуры. В первом разделе описываются особенности применяемого квазиклассического моделирования методом Монте — Карло кинетических коэффициентов твердых тел, во втором разделе кратко описана программная реализация вычислительного пакета, в третьем разделе представлены результаты исследования проводимости оксида галлия.

## 1. Постановка задачи и описание методики квазиклассического моделирования

В рамках квазиклассического подхода к исследованию электронного транспорта носители тока рассматриваются как классические частицы, а процесс их переноса описывается кинетическим уравнением Больцмана:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = \sum_{\mathbf{p}'} (f(\mathbf{p}', \mathbf{r}, t)W(\mathbf{p}', \mathbf{p}) - f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)W(\mathbf{p}, \mathbf{p}')). \quad (1)$$

Здесь  $f(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)$  — функция распределения электронов;  $W(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$  — вероятность перехода в единицу времени электрона из состояния с импульсом  $\mathbf{p}$  в состояние с импульсом  $\mathbf{p}'$  в результате рассеяния на неоднородностях кристаллической решетки, рассчитываемая из квантово-механических соображений;  $\mathbf{v}$  — скорость носителей заряда;  $\mathbf{F}$  — результирующая сила, действующая на заряд. В случае однородного образца выражение (1) преобразуется к виду:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = \sum_{\mathbf{p}'} (f(\mathbf{p}', t)W(\mathbf{p}', \mathbf{p}) - f(\mathbf{p}, t)W(\mathbf{p}, \mathbf{p}')). \quad (2)$$

Это интегро-дифференциальное уравнение, поэтому его решение сеточными методами требует больших вычислительных ресурсов и имеет ограниченные возможности параллелизации.

Методы Монте — Карло позволяют приближенно решить это уравнение и при этом из-за своих особенностей очень легко позволяют строить параллельные алгоритмы. Метод Монте — Карло был предложен Уламом и Метрополисом для решения задачи о прохождении нейтронов через вещество. Решение интегро-дифференциального кинетического уравнения заменяется задачей о моделировании движения частиц, подчиняющихся законам классической ньютоновской механики, а интеграл рассеяния проявляется в случайных процессах смены направления этих частиц.

Метод Монте — Карло, применяемый в настоящей статье, аналогичен используемому в предыдущих работах (например, [2; 20]).

Основная идея метода состоит в том, что искомая величина представляется в виде математического ожидания некоторой случайной величины. Далее эта случайная величина моделируется каким-либо образом, и по результатам моделирования мы можем судить об искомой величине.

Ключевой особенностью метода является зависимость точности от размера выборки моделируемой случайной величины. Мерой точности является среднеквадратическое отклонение среднего, которое связано с выборочным среднеквадратичным соотношением

$$\sigma_{\langle x \rangle} = \sigma / \sqrt{n}. \quad (3)$$

Из (3) следует, что для увеличения точности в 2 раза следует увеличить количество вычислений в 4.

Процедура моделирования выглядит следующим образом. Генерируется ансамбль частиц, удовлетворяющий равновесному распределению. Далее, для каждой из частиц производится решение уравнения движения с учетом процессов рассеяния. Предполагается, что между актами рассеяния движение электронов подчиняется законам классической механики

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F}. \quad (4)$$

При этом промежутки времени между столкновениями и конечный импульс моделируются случайными величинами, закон распределения которых определяется вероятностями рассеяния.

Процесс рассеяния является пуассоновским процессом с переменной интенсивностью. Вероятность рассеяния за время  $t$  для такого процесса определяется соотношением

$$P(T < t) = 1 - \exp \left[ - \int_0^t W(t) dt \right], \quad (5)$$

где  $W(t) \equiv W(\mathbf{p}(t))$  — частота рассеяния — количество переходов в единицу времени из состояния с импульсом  $\mathbf{p}$  в состояние с любым другим значением импульса  $\mathbf{p}'$ . Эта величина связана с вероятностью  $W(\mathbf{p}', \mathbf{p})$  перехода из состояния с квазиимпульсом  $\mathbf{p}$  в состояние с квазиимпульсом  $\mathbf{p}'$ , входящей в (1), соотношением

$$W(\mathbf{p}) = \sum_{\mathbf{p}'} W(\mathbf{p}', \mathbf{p}), \quad (6)$$

где суммирование ведется по всем состояниям первой зоны Бриллюэна. За счет зависимости от времени импульса  $\mathbf{p}$ , определяемой уравнением движения (4), частота рассеяния  $W(\mathbf{p})$  начинает также зависеть от времени.

Для моделирования времени свободного пробега можно воспользоваться методом обратной функции:

$$r = 1 - \exp \left[ - \int_0^t W(t) dt \right], \quad \int_0^t W(t) dt = -\ln(1 - r) = -\ln r, \quad (7)$$

где  $r$  — случайная величина, распределенная равномерно на отрезке  $[0, 1]$ . Здесь определенную трудность составляет вычисление интеграла, так как если  $W(t)$  изменяется достаточно быстро, то временной шаг моделирования должен выбираться достаточно маленьким.

Ризом был предложен способ обойти проблему с интегрированием при помощи введения механизма саморассеяния [28; 29]. Если в ходе моделирования  $W(t)$  меняется в некотором диапазоне  $[W_{\min}, W_{\max}]$ , то можно ввести дополнительный вид рассеяния с частотой

$$W_s = W_{\max} - W(t). \quad (8)$$

Этот механизм называется саморассеянием, так как при нем не должно изменяться состояние частицы. Тогда полная вероятность рассеяния станет равна  $W_{\max} = \Gamma$ , и уравнение, определяющее время свободного пробега, примет вид

$$\int_0^t (W(t) + W_s(t)) dt = \Gamma t = -\ln(r), \quad t = -\frac{\ln r}{\Gamma}. \quad (9)$$

Определив время свободного пробега, моделируем движение частицы до момента рассеяния. Так как был введен дополнительный механизм рассеяния, то нужно определить, какой именно из видов рассеяния произойдет. Для этого используется случайная величина  $s$ , равномерно распределенная на отрезке  $[0, 1]$ : если  $s < W(t)/\Gamma$ , то происходит рассеяние, в противном случае рассеяния не происходит.

Характеристики каждой частицы ансамбля выступают здесь случайными величинами, математические ожидания которых связаны с интересующими нас макроскопическими параметрами. Для определения плотности тока достаточно определить среднюю скорость частиц в ансамбле.

Основная проблема рассмотренных выше методов состоит в том, что для удобства шаг по времени определяется частотой процессов рассеяния. Так как она, вообще говоря, зависит от состояния электрона (его импульса) и является переменной величиной, то вводится понятие саморассеяния. В случае рассмотрения прохождения частиц через вещество это достаточно удобно, так как вероятности рассеяния не очень сильно зависят от импульса, а энергетический спектр частиц параболический. Поэтому уравнения движения очень просты — траектории движения между актами рассеяния прямолинейны. В случае рассмотрения электронного транспорта спектр электрона проводимости может достаточно сильно отличаться от параболического, а вероятности электрон-фононного рассеяния сильно изменяются в рассматриваемом диапазоне энергий. С одной стороны, это приводит к тому, что при движении в магнитном поле траектория электрона в импульсном пространстве может быть рассчитана только численно, и это ограничивает выбор временного шага моделирования. С другой стороны, сильно изменяющаяся вероятность рассеяния приводит к тому, что использование саморассеяния сильно занижает временной шаг моделирования, и большую часть процессов рассеяния представляют из себя саморассеяние.

Есть и иной подход к моделированию транспорта без введения процессов саморассеяния, заключающийся в том, что на каждом шаге определяется оставшаяся часть свободного пробега электрона. Однако, если при этом учитываются несколько процессов рассеяния, то выбор механизма рассеяния происходит случайно с вероятностью, пропорциональной частоте рассеяния данного механизма.

Так как процессы рассеяния независимы друг от друга, то вместо определения времени свободного пробега, учитывающего все рассматриваемые механизмы рассеяния, можно использовать время свободного пробега для каждого из механизмов рассеяния. При этом для каждого из механизмов среднее время свободного пробега больше, чем время движения электрона при учете всех механизмов рассеяния, что позволяет увеличить шаг по времени. Таким образом, мы можем для каждого механизма рассеяния ввести свое время свободного пробега. Предлагаемый алгоритм состоит в следующем:

- 1) для каждого механизма рассеяния рассчитать длину свободного пробега  $\lambda_i = -\ln(r)$ , где  $r$  — случайное число, равномерно распределенное на отрезке  $[0, 1]$ ;
- 2) на каждом шаге симуляции:
  - a) для каждого механизма рассеяния рассчитать вероятность рассеяния на этом временном шаге  $w_i \Delta t$ ;
  - b) для каждого механизма рассеяния определить оставшуюся длину свободного пробега  $\lambda_i \leftarrow \lambda_i - w_i \Delta t$ ;
  - c) если длина свободного пробега стала меньше 0, то произвести рассеяние и для каждого механизма рассеяния рассчитать новую длину свободного пробега;
  - d) если нет, то решить уравнение движения частицы и получить новое значение импульса;
  - e) обновить данные о вычисляемой характеристике частицы.

По окончании симуляции для всех частиц определить средние значения вычисляемых характеристик по ансамблю.

## 2. Программная реализация

Опишем реализацию разрабатываемого программного комплекса. Комплекс реализован на языке C++ с использованием библиотеки OpenACC. OpenACC — это высокоуровневая модель программирования на основе директив для C, C++ и Fortran. Она разработана таким образом, чтобы требовать значительно меньших усилий по программированию, чем низкоуровневое программирование под аппаратные архитектуры гетерогенных высокопроизводительных вычислений (HPC).

Модель программирования OpenACC основана на использовании прагм, подсказывающих компилятору C, C++ или Fortran, как можно распараллелить код, и в этом она похожа на OpenMP. Но, в отличие от OpenMP, модель OpenACC изначально разрабатывалась, чтобы упростить для программиста реализацию алгоритма на различных вычислительных архитектурах, в число которых входят и графические ускорители, что в случае алгоритмов Монте — Карло обещает большой выигрыш в производительности.

Рассмотрим возможности по распараллеливанию, предоставляемые библиотекой OpenACC. Ниже представлены два способа параллелизации цикла, заполняющего массив значениями

```
char *status = new char[nCount];
#pragma acc parallel loop copyout( status[0:nCount] )
for(int i=0; i < nCount; i++)
    status[i] = 1;
char *status = new char[nCount];
#pragma acc kernels create( status[0:nCount] )
{
    for(int i=0; i < nCount; i++)
        status[i] = 1;
}
```

В этом фрагменте кода `#pragma acc` сообщает компилятору, что это прагма OpenACC. Далее возможны два варианта параллельного выполнения кода:

- `parallel` — знакомый по OpenMP, запускает последующий блок кода во всех потоках выполнения; ответственность за безопасность распараллеливания здесь лежит на программисте;
- `kernels` — эта конструкция дает компилятору гораздо больше гибкости для генерации эффективного параллельного кода для целевого устройства (видеокарта, например), включая объединение циклов в одно параллельное ядро или создание нескольких параллельных ядер; здесь ответственность за обеспечение безопасности распараллеливания цикла лежит на компиляторе, в отличие от директивы `parallel`.

На текущий момент для параллельного выполнения кода мы пользуемся конструкцией `parallel`. При квазиклассическом моделировании движения электронов в твердом теле мы не учитываем их взаимодействие друг с другом, поэтому расчеты для каждого отдельного электрона можно производить параллельно с остальными. Ниже приведен листинг основного цикла симуляции с использованием директив OpenACC.

```
#pragma acc parallel loop
for (size_t i = 0; i < ensemble_size; ++i) {
    Results &result = results[i];
```

```

if (flags != DumpFlags::none) {
    result = Results(alloc, flags);
}
result.average_velocity = {0, 0, 0};
result.scattering_count.assign(mechanisms.size(), 0);
Vec3 p = material.create_particle(temperature);
std::vector<double> free_flight(mechanisms.size(), 0);
for (double &l : free_flight) {
    l = -log(uniform());
}

for (size_t j = 0; j < steps; ++j) {
    Vec3 p_ = p;
    Vec3 v = material.velocity(p_);
    double e = material.energy(p_);
    size_t scattering_mechanism = 0; // means no scattering
    for (size_t k = 0; k < mechanisms.size(); ++k) {
        free_flight[k] -= mechanisms[k]->rate(p_) * time_step;
        if (free_flight[k] < 0) {
            p = mechanisms[k]->scatter(p_);
            free_flight[k] = -log(uniform());
            scattering_mechanism = k + 1; // enumerate mechanisms from 1
            break;
        }
    }
    result.append(j, j * time_step, p_, v, e, scattering_mechanism);
    if (not scattering_mechanism) {
        p += -consts::e*(electric_field+v.cross(magnetic_field))*time_step;
    }
}
}

```

Здесь внешний цикл проходится по индексам частиц в ансамбле. Как было сказано ранее, независимость движения электронов позволяет распараллелить этот процесс при помощи директивы `#pragma acc parallel loop`. Остановимся подробнее на моделировании поведения частиц.

Массив `results` содержит результаты моделирования для каждой частицы, такие как средняя скорость и количество актов рассеяния. В элемент этого массива, соответствующий рассматриваемой частице, на каждом шаге моделирования добавляются данные о ее состоянии при помощи метода `result.append(j, j * time_step, p_, v, e, scattering_mechanism)`. Для симуляции больцмановского распределения при создании ансамбля частиц используется метод `material.create_particle(temperature)`. Массив `free_flight` хранит в себе безразмерные длины свободного полета для каждого из механизмов рассеяния, указанных в массиве `mechanisms`. Между актами рассеяния уравнения движения интегрируются с использованием метода Эйлера. При обращении в нуль длины свободного пробега происходит рассеяние, при этом новое значение импульса частицы определяется при помощи метода `scatter(p)`.

Опишем теперь структуру классов библиотеки (см. рис. 1).

Структура `Material` описывает свойства материала, такие как плотность вещества, скорость звука в нем, акустический и неполярный оптический деформационный потенциалы, необходимые для расчетов соответствующих процессов рассеяния, а также высокочастотную и статическую диэлектрические проницаемости.



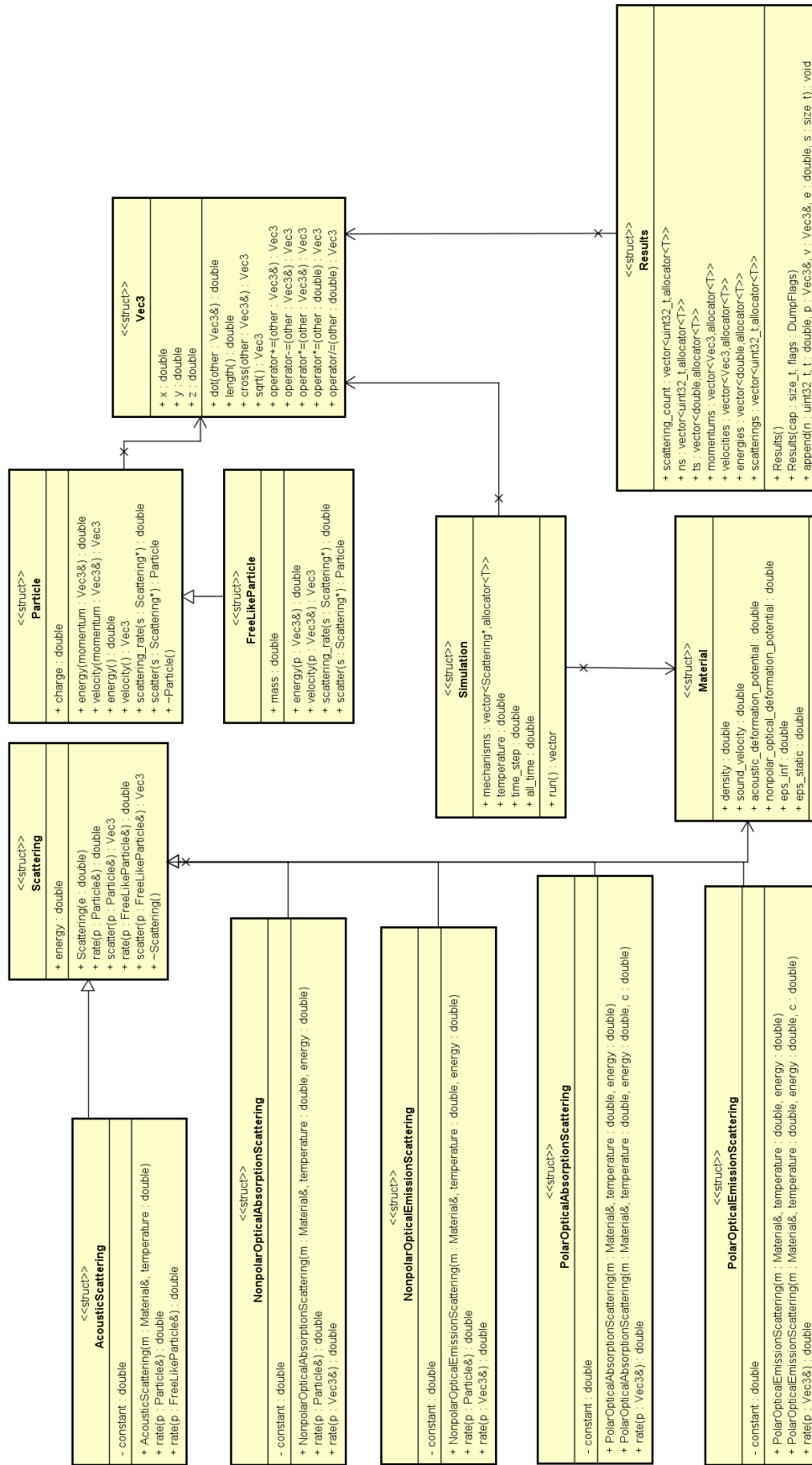


Рис. 1. Диаграмма классов

Для описания процесса рассеяния используется абстрактный класс `Scattering`, который содержит информацию о типе рассеяния (упругое или неупругое), энергию, теряемую частицей при рассеянии, частоту рассеяния в зависимости от импульса частицы и метод `scatter`, рассчитывающий импульс частицы после акта рассеяния. Наиболее часто моделируемые механизмы рассеяния — это рассеяния на акустических, полярных оптических и неполярных оптических фонах. Для каждого из этих механизмов представлены классы:

- `AcousticScattering`,
- `NonpolarOpticalAbsorptionScattering`,
- `NonpolarOpticalEmissionScattering`,
- `PolarOpticalAbsorptionScattering`,
- `PolarOpticalEmissionScattering`.

Пользователь может самостоятельно описывать необходимые ему типы рассеяния, унаследовав соответствующий класс от абстрактного класса `Scattering` и определив его чисто виртуальные методы.

Для описания частиц существует абстрактный класс `Particle`. Он содержит информацию об импульсе частицы, а также энергетический спектр данного типа частиц и зависимость скорости от квазиимпульса частицы. В простейшем случае спектра, близкого к параболическому, частицу можно описать в приближении эффективной массы. Для этого введен класс `FreeLikeParticle`, для инициализации которого нужно указать эффективную массу частицы.

Для описания вычислительного эксперимента используется структура `Simulation`. Она позволяет задать механизмы рассеяния, которые необходимо учесть при моделировании, температуру, определяющую начальное распределение частиц ансамбля. Также здесь задаются временной шаг и полное время моделирования, а также рассчитываемые значения при помощи указания соответствующих флагов, описанных в перечислении `DumpFlags`. Для запуска процесса моделирования используется метод `run`, а результатом его выполнения является массив экземпляров класса `Results`, содержащий статистику для каждой отдельной частицы, участвовавшей в симуляции процессов электронного транспорта.

Структура `Results` содержит информацию о событиях, происходивших с частицей в ходе моделирования. В зависимости от выставленных флагов, данная структура может содержать информацию о количестве актов рассеяния по каждому из каналов, тип механизма рассеяния для каждого из произошедших актов рассеяния, скорости, импульсе и энергии частицы в каждый момент времени, среднюю скорость частицы. Если требуется вычислить только такие величины, как средняя скорость или частоты рассеяний, то использование соответствующих флагов позволяет значительно уменьшить объем используемой памяти при расчетах.

Отметим, что в случае если требуется вычислить только средние величины и не требуется хранить всю информацию об импульсах и координатах частиц во все моменты времени, для организации распараллеливания рабочего цикла применяется самый простой подход с использованием прагмы

```
#pragma acc kernels loop independent,
```

и вычисления могут весьма эффективно и практически независимо по ансамблю частиц выполняться на GPU.

В силу архитектурных особенностей организации памяти хранение больших объемов информации на самом ускорителе неэффективно, и поэтому распараллелить работу в случае, когда нужна полная информация о процессе движения частицы, а не только средние величины, сложнее, и обойтись без копирования блоков данных рассчитанных величин между центральным процессором и графическим ускорителем не представляется возможным.

Для удобства обработки и представления результатов были написаны биндинги для языка Python, позволяющие запускать процесс моделирования и получать результаты прямо из языка Python. Это упрощает обработку данных и позволяет удобно запускать серии симуляций для построения зависимостей, таких как вольтамперные характеристики.

Отметим, что на данный момент комплекс позволяет проводить исследования только однородных в пространстве структур с геометрией параллелепипеда. В данный момент ведется его доработка, позволяющая проводить моделирование наноструктур произвольной геометрии и состава (в том числе слоистых).

Также существует и MPI-версия пакета для работы на кластерах, и планируется совместить использование распараллеливания по узлам кластера с помощью MPI и использование на каждом узле графического ускорителя с помощью OpenACC.

Программный комплекс был протестирован на расчетах электронных транспортных свойств оксида галлия [1; 3], графена и нелинейных эффектов в средах с неаддитивным спектром на примере графеновых сверхрешеток.

### 3. Пример использования разработанного пакета — исследование проводимости оксида галлия

#### 3.1. Электронные и транспортные свойства бета-модификации оксида галлия

Транспортные свойства бета-модификации оксида галлия ( $\beta - Ga_2O_3$ ) — широкозонного полупроводника, представляющего интерес в качестве основы для перспективных приборов высоковольтной и силовой электроники — в последние десять лет активно исследуются как экспериментально, так и теоретически. Энергетический спектр  $\beta - Ga_2O_3$  вблизи  $\Gamma$ -точки параболичен, и существенные отклонения от параболичности начинают проявляться при энергии носителей заряда порядка 1 эВ [13; 25].

Важной особенностью рассматриваемого материала является сложная структура элементарной ячейки, содержащей 10 атомов, поэтому у оксида галлия наблюдается 30 ветвей нормальных колебаний кристаллической решетки, три из которых являются акустическими, остальные — оптическими. Среди оптических мод 12 являются активными в инфракрасном диапазоне, восемь из них имеют симметрию  $B_u$ , четыре имеют симметрию  $A_u$ , среди оставшихся пятнадцати мод, активных в рамановских спектрах, десять мод имеют симметрию  $A_g$ , пять мод имеют симметрию  $B_g$  [6; 21; 26]. В работе [14] вычислены относительные доли в общем числе рассеяний носителей тока на активных в инфракрасном диапазоне полярных оптических колебаниях кристаллической решетки, имеющих симметрию  $A_u$  и  $B_u$ , учет пространственной зависимости коэффициентов электрон-фононного взаимодействия выполнен непосредственно, используя при вычислении правой части уравнения Больцмана зависящие от направления матричные элементы. Показано, что при комнатных температурах основное число рассеяний электрона происходит на моде  $B_u^1$ , энергия фононов которой составляет 21 мэВ. В рабо-

те [24] предпринята попытка объяснить проводимость  $\beta - Ga_2O_3$  рассеянием носителей заряда на неполярных оптических фононах. Фактически такой подход представляет собой подбор некоторого процесса неупругого рассеяния, эффект от которого совпадает с эффектом от рассеяния на всех имеющихся в наличии полярных фононных модах. В последующей работе [23] акцент сделан на учете совместного влияния на проводимость оптических фононных мод, активных на инфракрасных спектрах. Коэффициенты электрон-фононного взаимодействия получены за счет усреднения по первой зоне Бриллюэна матричных элементов перехода, вычисленных в [15], и подбора по графикам эффективных коэффициентов электрон-фононного взаимодействия. Такой подход позволил вычислить среднее время релаксации, пользуясь правилом типа правила Маттисена [30] сложения средних частот столкновения, соответствующих различным каналам рассеяния. Авторы [23] отмечают, что, вообще говоря, использование приближения постоянного времени релаксации для ситуации существенно неупругого рассеяния является достаточно грубым допущением, поскольку само представление о времени релаксации вводится для процессов упругого изотропного рассеяния, поэтому для частичной коррекции допускаемой ошибки используется так называемая поправка Фарвака (Farvacque correction) [11]. Несмотря на хорошее обоснование такого подхода, требуется дополнительная независимая проверка полученных выводов на основе более точных приближений. В первую очередь, учитывая вычисленные из квантовохимического моделирования коэффициенты электрон-фононного взаимодействия для различных мод полярных оптических фононов, необходимо вычислить проводимость образца, не вводя среднего времени релаксации для рассеяния на оптических фононах, исследовать зависимость среднего времени релаксации от энергии электрона, определить относительный вклад в среднюю частоту столкновений различных типов рассеяния. Такие расчеты можно выполнить, используя моделирование методом Монте — Карло. Моделирование проводимости  $\beta - Ga_2O_3$  методом Монте — Карло рассматривалось в работах [9; 15]. В [15] применялся метод Монте — Карло, учитывающий состояния электрона по всей зоне проводимости, то есть выходя за рамки приближения эффективной массы (full-band Monte Carlo simulation method), причем явно коэффициенты электрон-фононного взаимодействия выписаны не были, использовалась матрица переходов между состояниями в пространстве квазиимпульсов, вычисленная для всех доступных для учета процессов рассеяния на колебаниях решетки. В этой работе показано, во-первых, что вид зависимости средней скорости электронов от напряженности постоянного электрического поля слабо меняется при изменении направления приложения электрического поля к кристаллу, во-вторых, что при напряженностях электрического поля, меньших  $E = 10^7$  В/см, и комнатных температурах электроны крайне редко достигают таких значений квазиимпульса, при которых становится существенной непараболичность зоны проводимости. Таким образом, в слабых полях можно считать зону проводимости параболической, что существенно упрощает расчеты. В работе [9] как раз приводится моделирование методом Монте — Карло проводимости оксида галлия в области слабых полей с учетом рассеяния электронов на нескольких модах полярных оптических фононов. В этой работе рассматриваются 8 фононных мод, имеющих симметрию  $B_u$ , активных в инфракрасных спектрах и поляризованных в плоскости  $x\tilde{z}$ , поскольку в работе [9] поставлена задача исследовать проводимость материала вдоль оси  $x$ . Авторы [9] занулили коэффициенты электрон-фононного взаимодействия, выполняющие также роль относительных весов фононных мод в полной вероятности рассеяния, для низкоэнергетических фононов, поскольку более высокоэнергетические фононы могут скрыть эффект, вызываемый

рассеянием на сравнительно низкоэнергетических фононных модах. Такие допущения (касающиеся выбора определенных типов колебаний из соображений пространственной анизотропии и выбора весов этих мод в полной вероятности рассеяния электрона), на наш взгляд, требуют дополнительного обоснования — хотя макроскопические свойства материала имеют слабую анизотропию, коэффициенты электрон-фононного взаимодействия сильно зависят от направления, поэтому для корректного приближенного учета этой зависимости нужно проводить некоторое усреднение по направлению этих коэффициентов (как сделано, например, в работе [23]), которое позволит оценить вес каждой фононной моды в полной вероятности рассеяния. Разработанный в рамках настоящей работы пакет моделирования транспортных явлений в твердых телах, основанный на технологии распараллеливания расчетов OpenACC, использовался для исследования проводимости оксида галлия в слабых полях, в частности, выяснения относительного вклада различных механизмов рассеяния в проводимость, выяснения характера зависимости среднего времени релаксации от энергии носителей заряда при рассеянии на нескольких модах полярных оптических фононов и сравнения этой зависимости с предсказанной в [23]. Часть результатов этого исследования опубликована в работе [3].

### 3.2. Полные вероятности рассеяния электронов на акустических, полярных оптических фононах и заряженных примесях в $\beta - Ga_2O_3$

Выпишем полные вероятности рассеяния носителей тока в оксиде галлия на акустических, полярных оптических фононах и заряженных примесях.

Полная вероятность рассеяния электронов на акустических фононах в материале с параболическим энергетическим спектром определяется выражением [30]:

$$W^{ADP}(\mathbf{p}) = \frac{D_a^2 k T m}{\pi \hbar^4 \rho v_s^2} p. \quad (10)$$

Здесь  $D_a = 6,9$  эВ — константа деформационного потенциала акустических фононов;  $v_s = 6,8 \cdot 10^5$  см/с — скорость звука;  $\rho = 5,88$  г/см<sup>3</sup> — объемная плотность материала;  $m = 0,28m_e$  — эффективная масса электрона в оксиде галлия;  $m_e$  — масса свободного электрона [19]. Рассеяние на акустических фононах будем считать упругим.

Полная вероятность перехода электрона из состояния с квазиимпульсом  $\mathbf{p}$  в результате рассеяния на полярном оптическом фононе с энергией  $\hbar\omega_0^j$  определяется выражением [30]:

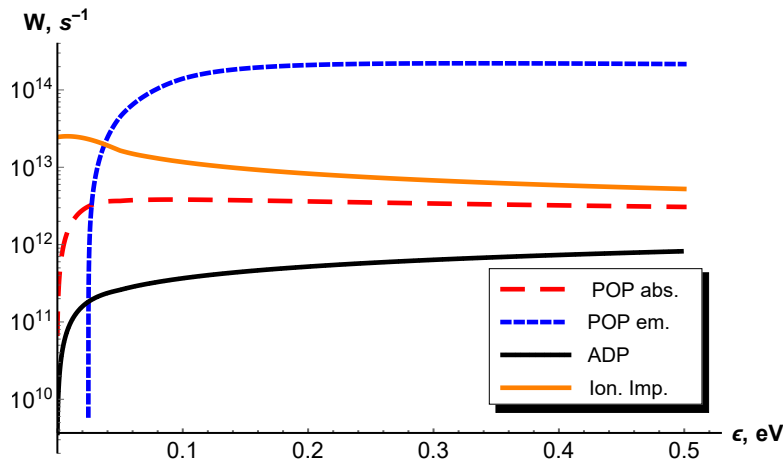
$$W_j^{POP}(\mathbf{p}) = \frac{1}{2\pi\rho v \cdot \hbar\omega_0^j} \left( \frac{4\pi e^* e^-}{V_0} \right)^2 \times \\ \times \left[ n(\omega_0^j) \operatorname{arsh} \sqrt{\frac{\varepsilon(p)}{\hbar\omega_0^j}} + (n(\omega_0^j) + 1) \operatorname{arsh} \sqrt{\frac{\varepsilon(p)}{\hbar\omega_0^j} - 1} \right]. \quad (11)$$

Здесь  $\varepsilon(p) = p^2/(2m)$  — энергия электрона;  $n(\omega_0) = (\exp(\hbar\omega_0/kT) - 1)^{-1}$  — числа заполнения фононных состояний;  $v = p/m$  — скорость электрона;  $V_0$  — объем элементарной ячейки;  $e^*$  — величина связанного заряда, возникающего в ячейке вследствие поляризации;  $e^-$  — заряд электрона. Величина  $e^*$  зависит от типа колебаний решетки, соответствующего рассматриваемой фононной ветке, и определить ее из измерений статической и высокочастотной диэлектрической проницаемости возможно только

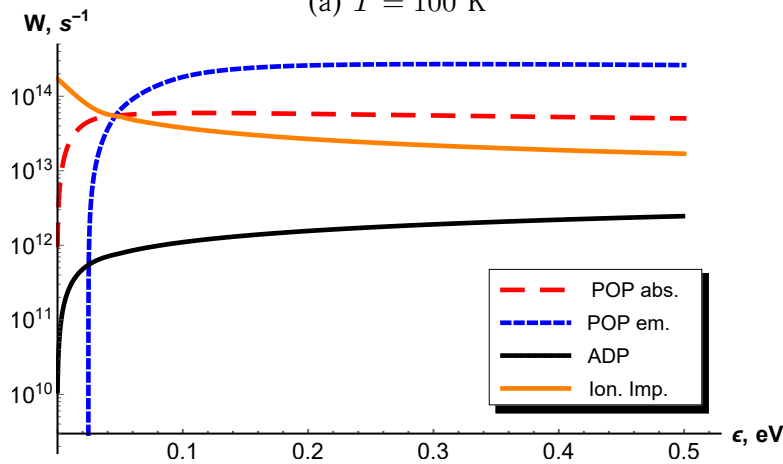
в полностью изотропном случае [30]. Таким образом, для учета рассеяния электронов на различных фоновых ветвях приходится из аппроксимации, полученной по результатам моделирования из первых принципов, вычислять величину, включающую в себя  $e^*$  [23]. Выражение для полной вероятности рассеяния электрона на одной из полярных оптических мод принимает вид:

$$W_j^{POP}(\mathbf{p}) = \frac{C_j^2}{2\pi\rho v \cdot \hbar\omega_0^j} \cdot \left[ n(\omega_0^j)\text{arsh}\sqrt{\frac{\varepsilon(p)}{\hbar\omega_0^j}} + (n(\omega_0^j) + 1)\text{arsh}\sqrt{\frac{\varepsilon(p)}{\hbar\omega_0^j} - 1} \right]. \quad (12)$$

Мы используем значения  $C_j$  и  $\omega_0^j$ , вычисленные в [23]. Первое слагаемое в квадратных скобках соответствует испусканию, второе — поглощению оптического фона.



(a)  $T = 100$  K



(b)  $T = 300$  K

Рис. 2. Зависимость полных вероятностей рассеяния электронов на различных типах неоднородностей кристаллической решетки от энергии электрона при температуре: а) 100 К; б) 300 К.

Обозначения: POP abs. — рассеяние с поглощением полярных оптических фононов (просуммировано по всем фоновым ветвям); POP em. — рассеяние с испусканием полярных оптических фононов (просуммировано по всем фоновым ветвям); Ion. Imp. — рассеяние на ионизированных примесях; ADP — рассеяние на акустических фононах

Заряженные примеси рассматриваются в модели Брукса — Херринга. Полная вероятность рассеяния электрона с квазиимпульсом  $\mathbf{p}$  на примеси имеет вид [30]:

$$W^{Ion.Imp.}(\mathbf{p}) = \frac{16\pi n_{ci} Z^2 e^4 r_0^4 m}{\epsilon^2 \hbar^4} \cdot \frac{\sqrt{2m\epsilon(p)}}{1 + 8m\epsilon(p)r_0^2/\hbar^2}, \quad (13)$$

где  $n_{ci}$  — концентрация заряженных примесей;  $Ze$  — заряд примеси;  $r_0$  — дебаевский радиус экранирования;  $\epsilon = 11,4$  — статическая диэлектрическая проницаемость [9]. Обратный квадрат радиуса экранирования определяется выражением:

$$\frac{1}{r_0^2} = \frac{4\pi e^2}{\epsilon kT} \left( n + \frac{(N_D - N_A - n)(N_A + n)}{N_D} \right). \quad (14)$$

Здесь  $N_D = 1.43 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$  — концентрация доноров,  $N_A = 4.2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$  — концентрация акцепторов (значения взяты из работы [24]),  $n$  — концентрация свободных носителей тока,

$$n = -\frac{N_C}{2g} \exp\left(-\frac{E_D}{kT}\right) - \frac{N_A}{2} + \frac{1}{2g} \sqrt{\left(N_C \exp\left(-\frac{E_D}{kT}\right) + gN_A\right)^2 + 4gN_C(N_D - N_A) \exp\left(-\frac{E_D}{kT}\right)}, \quad (15)$$

где  $E_D = 28,5 \text{ мэВ}$  — энергия ионизации донора [24];  $g$  — фактор вырождения донорного уровня (полагаем  $g = 2$ );  $N_C$  — эффективная плотность состояний в зоне проводимости,

$$N_C = 2 \left( \frac{2\pi m kT}{(2\pi\hbar)^2} \right)^{3/2}. \quad (16)$$

Концентрация ионизированных примесей, входящая в (13), определяется выражением:

$$n_{ci} = 2N_A + n. \quad (17)$$

На рисунке 2 приведена зависимость полных вероятностей рассеяния электрона на полярных оптических, акустических фононах и заряженных примесях от энергии электрона для температуры  $T = 100 \text{ К}$  и  $T = 300 \text{ К}$ . Вероятность рассеяния на оптических фононах разделена на вероятность рассеяния с поглощением и испусканием фононов (просуммированы, соответственно, первые и вторые слагаемые в квадратных скобках (12) по всем фоновым модам). Видно, что суммарная вероятность рассеяния с испусканием полярного оптического фонона мало зависит от температуры, в то время как вероятность рассеяния с поглощением оптического фонона на порядок возрастает при возрастании температуры от 100 до 300 К. Вероятность рассеяния на примесях в области малых энергий при температуре 300 К приобретает более острый максимум по сравнению с вероятностью рассеяния на примесях при 100 К.

### 3.3. Результаты моделирования электронного транспорта в оксиде галлия

Наибольший интерес представляет рассеяние электронов полярными оптическими фононами. В [23] исследуется зависимость средней частоты столкновений  $1/\tau$  электронов и полярных оптических фононов от энергии  $\varepsilon$  носителей заряда. Выражение для средней частоты столкновений имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau(\varepsilon)} = \sum_j \frac{C_j^2}{4\pi\rho v \cdot \hbar\omega^j} \left\{ n(\omega^j)B^+ \left[ \sqrt{1 + \frac{\hbar\omega_j}{\varepsilon}} - \frac{\hbar\omega_j}{\varepsilon} \operatorname{arsh} \sqrt{\frac{\varepsilon}{\hbar\omega^j}} \right] + \right. \\ \left. + (n(\omega^j) + 1)B^- \left[ \sqrt{1 - \frac{\hbar\omega_j}{\varepsilon}} + \frac{\hbar\omega_j}{\varepsilon} \operatorname{arsh} \sqrt{\frac{\varepsilon}{\hbar\omega^j} - 1} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (18)$$

Здесь  $B^\pm$  — так называемая поправка Фарвака (Farvacque correction) [11]:

$$B^\pm = \pm \frac{f_0(\varepsilon \pm \hbar\omega_j) - f_0(\varepsilon)}{\hbar\omega_j(\partial f_0/\partial \varepsilon)}. \quad (19)$$

Вообще говоря, поправка Фарвака позволяет уточнить описание существенно неупругого рассеяния электронов на оптических фононах, используя приближение постоянного времени релаксации. Знание энергетической зависимости среднего времени релаксации позволяет делать выводы об относительном вкладе различных типов рассеяния в проводимость. Зависимость средней частоты столкновений от энергии носителей заряда, построенная для температуры 300 К, представлена на рисунке 3. Кривая 1 соответствует учету рассеяния на 12 модах полярных оптических фононов, построенная по выражению (18) в предположении  $B^\pm = 1$  (без учета поправки Фарвака), кривая 2 учитывает рассеяние электронов на 12 модах полярных оптических фононов с учетом поправки Фарвака,  $B^\pm$  вычисляется в соответствии с (19). Кривая 3 получена из моделирования методом Монте — Карло при учете рассеяния только на полярных оптических фононах (учитываются те же 12 фононных мод), кривая 4 — из моделирования методом Монте — Карло при учете всех исследуемых здесь типов рассеяния электронов (на полярных оптических фононах, акустических фононах и заряженных примесях). Графики построены для случая напряженности электрического поля 50 кВ/см, размер ансамбля — 1000 частиц.

Выражение (18) для средней частоты столкновений на основе моделирования методом Монте — Карло проверялось следующим образом. Поскольку в разработанном пакете моделирования при помощи флагов можно потребовать сохранения состояния каждой частицы на каждом временном шаге в объекты типа `Result`, используя эти данные, во вспомогательный массив помещаем номер временного шага, на котором произошло столкновение, энергию электрона в момент столкновения, номер канала рассеяния. По окончании моделирования вычисляем время  $\tau$  между двумя последовательными столкновениями, собираем записи о рассеянии электронов на различных каналах в отдельные списки (рассматриваем акустические фононы, заряженные примеси, 12 оптических мод с поглощением фонона и 12 оптических мод с испусканием фонона). Далее для каждой  $i$ -й моды разбиваем интервал энергии от 0 до некоторого значения  $\varepsilon_{\max}$  на  $M$  бинов ( $\varepsilon_{\max}$  и  $M$  выбираем одинаковыми для всех мод) и собираем записи о рассеяниях электрона с энергией  $\varepsilon_j < \varepsilon(p) \leq \varepsilon_{j+1}$  в  $j$ -й список,  $j \in [0, M - 1]$ . Затем вычисляем



$\langle 1/\tau \rangle_j^i$  для каждого  $j$ -го бина в списке, соответствующем  $i$ -му каналу рассеяния, после чего вычисляем  $\langle 1/\tau \rangle_j$ , усредняя эффективные частоты столкновений по всем каналам рассеяния и учитывая относительный вес каждого канала рассеяния (отношение столкновений, соответствующих  $j$ -му бину  $i$ -й моды к сумме столкновений в  $j$ -м бине по всем модам).

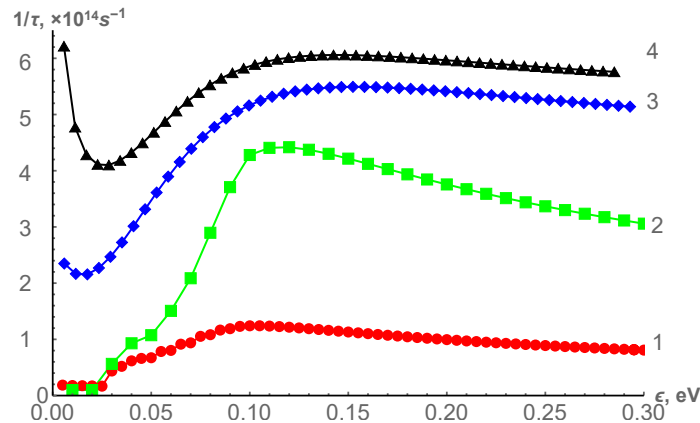


Рис. 3. Зависимость средней частоты столкновений от энергии электрона при температуре  $T = 300$  К

Из рисунка 3 видно, что зависимости средней частоты столкновений, учитывающие рассеяние на оптических фононах (кривая 3), полученные из моделирования, имеют форму, подобную форме зависимости, построенной по формуле (18) (кривая 2) при энергиях электрона выше 0,05 эВ, что подтверждает, что применение поправки Фарвака является хорошим приближением для определения средней частоты столкновений в материале с преобладанием неупругих процессов электронного рассеяния. Учет упругих процессов рассеяния (рассеяние на акустических фононах и заряженных примесях) приводит к возрастанию средней частоты столкновений при малых энергиях электрона (кривая 4 на рис. 3).

На рисунке 4 показаны средние частоты столкновений, соответствующие разным типам рассеяния (сверху вниз: 1) рассеяние с испусканием оптического фонона (розовый цвет в электронной версии статьи, POP em.); 2) рассеяние с поглощением оптического фонона (зеленый цвет в электронной версии статьи, POP abs.); 3) рассеяние на заряженных примесях (коричневый цвет в электронной версии статьи, Ion. Imp.); 4) рассеяние на акустических фононах (синий цвет в электронной версии статьи, ADP).

Для сложения вкладов различных типов рассеяния используется правило типа правила Маттисена (см., например, [30]):

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{ADP}} + \frac{1}{\tau_{Ion.Imp.}} + \sum_j \frac{1}{\tau_j^{POP}}. \quad (20)$$

Из рисунка 4 видно, что при температуре 100 К средняя частота столкновений возрастает примерно на 20 % от своего среднего значения при изменении напряженности электрического поля от нуля до 100 кВ/см, причем вклад рассеяния на примесях с ростом напряженности поля уменьшается, а вклад рассеяния с испусканием оптических фононов увеличивается. При повышении температуры рост средней частоты столкновений с ростом поля становится незначительным, относительный вклад разных

типов рассеяния слабо зависит от напряженности приложенного поля. Видно также, что рассеяние на акустических фононах вносит очень малый вклад в суммарную частоту столкновений.

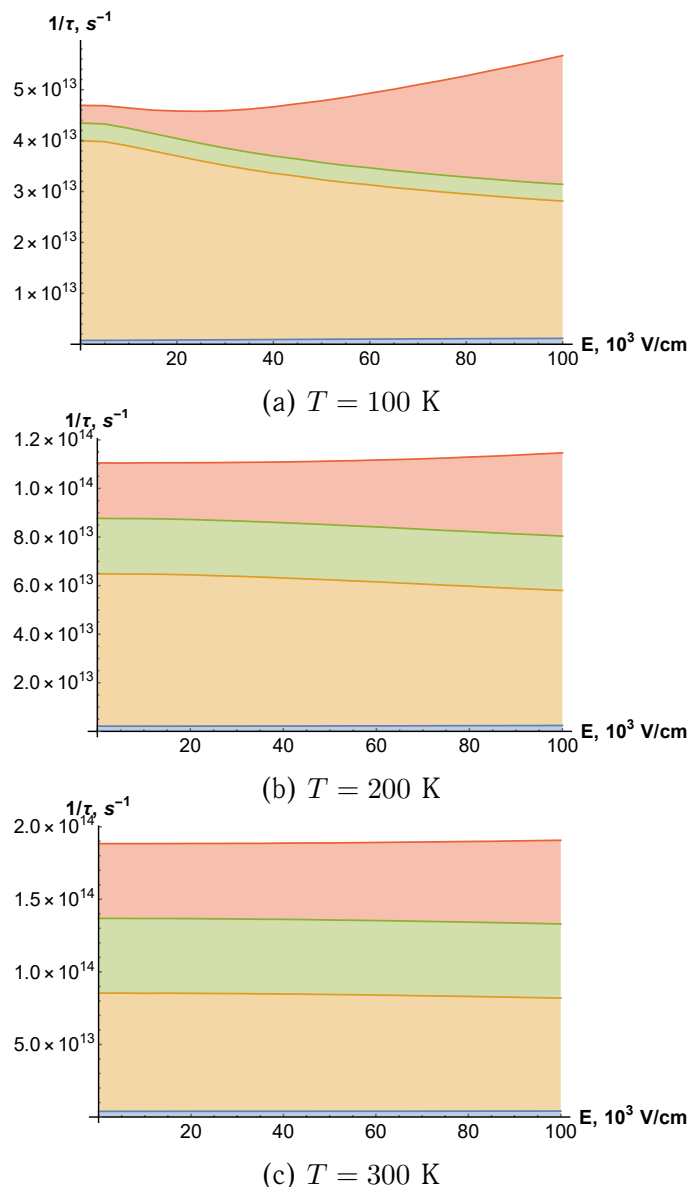


Рис. 4. Зависимость средней частоты столкновений от напряженности приложенного электрического поля при разных температурах: а) 100 К; б) 200 К; в) 300 К. Вклады разных типов рассеяния (сверху вниз): рассеяние с поглощением полярных оптических фононов (POP abs.), рассеяние с испусканием полярных оптических фононов (POP em.), рассеяние на ионизированных примесях (Ion. Imp.), рассеяние на акустических фононах (ADP)

На рисунке 5 представлены зависимости плотности постоянного тока в рассматриваемом материале от напряженности приложенного к образцу постоянного электрического поля при разных температурах, построенные по результатам моделирования методом Монте — Карло. При температуре 300 К вольт-амперная характеристика линейна. Полученные значения подвижности (около  $100 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$ ) близки к значениям, приведенным

в теоретических и экспериментальных работах других авторов (например, [12; 18; 19]). Нелинейная форма вольт-амперной характеристики при температурах порядка 100 К может быть объяснена следующим образом. Вероятность рассеяния на заряженных примесях имеет резкий максимум вблизи  $\varepsilon = 0$ , затем при  $\varepsilon \geq 0,1$  эВ медленно уменьшается (рис. 2). При температуре около 100 К ( $kT \simeq 0,009$  эВ) при значениях напряженности электрического поля  $E \simeq 50$  кВ/см добавка к энергии электрона в результате действия электрического поля в среднем составляет примерно 0,006 эВ, поэтому при таких температурах разогрев электронного газа электрическим полем приводит к активизации рассеяния носителей тока на оптических фононах (см. рис. 4а) и возрастанию общей вероятности рассеяния и, соответственно, снижению роста средней скорости носителей заряда. При температуре порядка 300 К большая часть электронов обладает энергией, достаточной для активации рассеяния на полярных оптических фононах, поэтому разогрев электронного газа электрическим полем уже не оказывает существенного влияния на полную вероятность рассеяния.

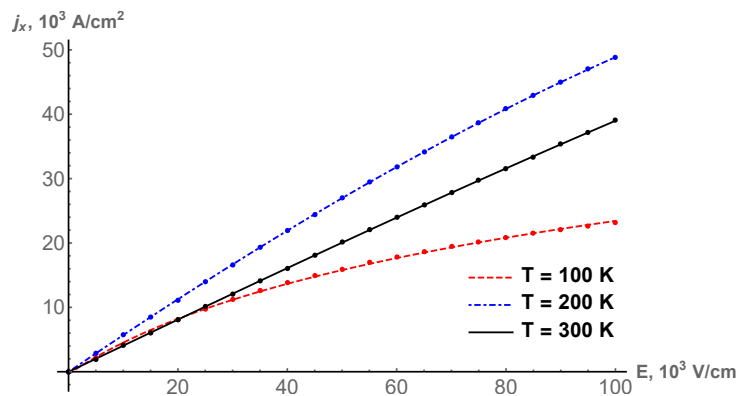


Рис. 5. Зависимость средней частоты столкновений от энергии электрона при температуре  $T = 300 \text{ К}$

Обсудим вычислительную эффективность представленного выше алгоритма. Вся вычислительная сложность задачи сосредоточена в интегрировании уравнения движения частиц. Так как частицы в рамках рассмотренной модели считаются невзаимодействующими, то это позволяет решать уравнения движения частиц параллельно.

На графике, представленном на рисунке 6, показана зависимость относительной скорости  $v_{rel}$  выполнения расчета от количества потоков  $n$  при использовании системы с общей памятью. Под относительной скоростью понимается величина, обратная времени  $t_n$  работы программы на  $n$  ядрах, измеренному в единицах времени  $t_1$  работы программы на одном ядре:  $v_{rel} = 1/(t_n/t_1)$ . Расчет производился для 100 частиц. Скорость выполнения программы линейно растет от количества потоков как  $0,68 + 0,72n$ .

### Заключение

Таким образом, используя параметры электрон-фононного взаимодействия, полученные в [14; 15], и аппроксимацию этих данных, полученную в [23], выполнено квазиклассическое моделирование статической проводимости бета-модификации оксида галлия в случае слабых полей, учитывающее рассеяние носителей тока на полярных оптических фононах, акустических фононах и заряженных примесях. Исследована зависи-

мость средней частоты столкновений носителей тока с неоднородностями кристаллической решетки, результаты моделирования сравниваются с расчетами, выполненными по явным (приближенным) формулам. Выявлено, что при комнатных температурах средняя частота столкновений практически не зависит от напряженности прикладываемого электрического поля, в то время как при температурах около 100 К наблюдается рост средней частоты столкновений с ростом поля, что обусловлено активизацией рассеяния носителей тока с испусканием оптических фононов и уменьшением числа рассеяний на примесях в результате разогрева электронного газа электрическим полем.

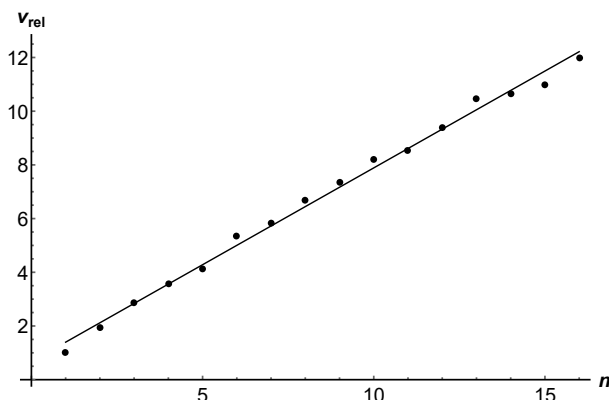


Рис. 6. Зависимость скорости расчетов от количества вычислительных ядер

Разработанный программный пакет, распараллеливание расчетов в котором ведется на основе технологии OpenACC, показал свою работоспособность. Поскольку основное внимание было обращено к удобству использования кода в прикладных исследованиях, существенного прироста производительности по сравнению с ранними версиями программы, построенными на технологии OpenMP, получить не удалось, зато подготовлен базис для переноса расчетов на графический ускоритель без необходимости существенной переделки программного кода.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Влияние сильной электромагнитной волны на проводимость  $\beta - Ga_2O_3$  / В. Л. Абдрахманов, Д. В. Завьялов, В. И. Конченков, С. В. Крючков // Известия Российской академии наук. Серия физическая. — 2020. — № 84 (1). — С. 61–66. — DOI: <https://doi.org/10.3103/S1062873820010037>.
2. Завьялов, Д. В. О векторизации алгоритма Монте — Карло решения классического уравнения Больцмана / Д. В. Завьялов, В. А. Егунов, В. И. Конченков // Математическая физика и компьютерное моделирование. — 2020. — № 23 (1). — С. 13–21. — DOI: <https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2020.1.2>.
3. Abdrakhmanov, V. L. Monte Carlo study of beta-Ga(2)O(3) conductivity / V. L. Abdrakhmanov, V. I. Konchenkov, D. V. Zav'yalov // Journal of Physics: Conference Series. — 2019. — Vol. 1400. — Article ID: 044024. — DOI: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1400/4/044024>.
4. Accelerated molecular dynamics simulation of Silicon Crystals on TaihuLight using OpenACC / J. Liang, R. Hua, H. Zhang, W. Zhu, Y. Fu // Parallel Computing. — 2020. — Vol. 99. — Article ID: 102667. — DOI: <https://doi.org/10.1016/j.parco.2020.102667>.
5. A comparison of the shared-memory parallel programming models OpenMP, OpenACC and Kokkos in the context of implicit solvers for high-order FEM / J. Eichstadt, M. Vymazal,

D. Moxey, J. Peiro // Computer Physics Communications. — 2020. — Vol. 255. — Article ID: 107245. — DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2020.107245>.

6. Anisotropy, phonon modes, and free charge carrier parameters in monoclinic  $\beta$ -gallium oxide single crystals / M. Schubert, R. Korlacki, S. Knight, T. Hofmann, S. Schoche, V. Darakchieva, V. Janzen, B. Monemar, D. Gogova, Q.-T. Thieu, R. Togashi, H. Murakami, Y. Kumagai, K. Goto, A. Kuramata, S. Yamakoshi, M. Higashiwaki // Physical Review B. — 2016. — Vol. 93. — Article ID: 125209. — DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.93.125209>.

7. Chandrasekaran, S. OpenACC for Programmers. Concepts and Strategies / S. Chandrasekaran, G. Juckeland. — Boston : Addison-Wesley, 2017. — 317 p.

8. Chang, T. Portable Monte Carlo Transport Performance Evaluation in the PATMOS Prototype / T. Chang, E. Brun, C. Calvin // Wyrzykowski, R., Deelman, E., Dongarra, J., Karczewski, K. (eds.): PPAM 2019, LNCS. — 2020. — Vol. 12043. — P. 528–539. — DOI: [https://doi.org/10.1007/978-3-030-43229-4\\_45](https://doi.org/10.1007/978-3-030-43229-4_45).

9. Electron mobility in  $\beta - Ga_2O_3$ : An ensemble Monte Carlo study / Z.-Ch. Zhang, Y. Wu, Ch. Lu, S. Ahmed // Applied Physics A. — 2018. — Vol. 124. — P. 637. — DOI: <https://doi.org/10.1007/s00339-018-2053-z>.

10. Evaluation of performance portability frameworks for the implementation of a particle-In-cell code / V. Artigues, K. Kormann, M. Rampp, K. Reuter // Concurrency and Computation. Practice and Experiment. — 2020. — Vol. 32 (11). — Article ID: e5640. — DOI: <https://doi.org/10.1002/cpe.5640>.

11. Farvacque, J. L. Extension of the collision-time tensor to the case of inelastic scattering mechanisms: Application to GaAs and GaN / J. L. Farvacque // Physical Review B. — 2000. — Vol. 62. — Article ID: 2536. — DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.62.2536>.

12. Fundamental limits on the electron mobility of  $\beta - Ga_2O_3$  / Y. Kang, K. Krishnaswamy, H. Peelaers, Ch. G. Van de Walle // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2017. — Vol. 29. — Article ID: 234001. — DOI: <https://doi.org/10.1088/1361-648X/aa6if66>.

13. Gallium oxide: properties and applications — A review / S. I. Stepanov, V. I. Nikolaev, V. E. Bougrov, A. E. Romanov // Reviews on Advanced Material Science. — 2016. — Vol. 44. — P. 63–86.

14. Ghosh, K. Ab initio calculation of electron-Phonon coupling in monoclinic  $\beta - Ga_2O_3$  crystal / K. Ghosh, U. Singiseti // Applied Physics Letters. — 2016. — Vol. 109. — Article ID: 072102. — DOI: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1400/4/044024>.

15. Ghosh, K. Ab initio velocity-field curves in monoclinic  $\beta - Ga_2O_3$  crystal / K. Ghosh, U. Singiseti // Journal of Applied Physics. — 2017. — Vol. 122. — Article ID: 035702. — DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4986174>.

16. GPU Implementation of a Sophisticated Implicit Low-Order Finite Element Solver with FP21-32-64 Computation Using OpenACC / T. Yamaguchi, K. Fujita, T. Ichimura, A. Naruse, M. Lalith, M. Hori // S. Wienke and S. Bhalachandra (eds.): WACCPD 2019, LNCS. — 2020. — Vol. 12017. — P. 3–24. — DOI: [https://doi.org/10.1007/978-3-030-49943-3\\_1](https://doi.org/10.1007/978-3-030-49943-3_1).

17. Hasbestan, J. J. PittPack: An open-source Poisson's equation solver for extreme-scale computing with accelerator / J. J. Hasbestan, Ch.-N. Xiao, I. Senocak // Computer Physics Communications. — 2020. — Vol. 254. — Article ID: 107272. — DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2020.107272>.

18. High-mobility  $\beta - Ga_2O_3$  (-201) Single crystals grown by edge-defined film-fed growth method and their Schottky barrier diodes with Ni contact / T. Oishi, Y. Koga, K. Harada, M. Kasu // Applied Physics Express. — 2015. — Vol. 8. — Article ID: 031101. — DOI: <https://doi.org/10.7567/APEX.8.031101>.

19. Intrinsic electron mobility limits in  $\beta - Ga_2O_3$  / N. Ma, N. Tanen, A. Verma, Z. Guo, T. Luo, H. Xing // Applied Physics Letters. — 2016. — Vol. 109. — Article ID: 212101. — DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4968550>.

20. Konchenkov, V. I. Influence of constant electric field on circular photogalvanic effect in material with Rashba Hamiltonian / V. I. Konchenkov, S. V. Kryuchkov, D. V. Zav'yalov // Journal of Computational Electronics. — 2014. — Vol. 13. — P. 996–1009. — DOI:

<https://doi.org/10.1007/s10825-014-0622-8>.

21. Liu, B. Lattice dynamical, dielectric, and thermodynamic properties of  $\beta - Ga_2O_3$  from first principles / B. Liu, M. Gu, X. Liu // *Applied Physics Letters*. — 2007. — Vol. 91. — Article ID: 172102. — DOI: <https://doi.org/10.1063/1.2800792>.

22. OpenACC Homepage. — Electronic text data. — Mode of access: <https://www.openacc.org>. — Title from screen.

23. Parisini, A. Assessment of phonon scattering-related mobility in  $\beta - Ga_2O_3$  / A. Parisini, U. Singiseti, R. Fornari // *Semiconductor Science and Technology*. — 2018. — Vol. 33. — Article ID: 105008. — DOI: <https://doi.org/10.1088/1361-6641/aad5cd>.

24. Parisini, A. Analysis of the scattering mechanisms controlling electron mobility in  $\beta - Ga_2O_3$  crystals / A. Parisini, R. Fornari // *Semiconductor Science and Technology*. — 2016. — Vol. 31. — Article ID: 035023. — DOI: <https://doi.org/10.1088/0268-1242/31/3/035023>.

25. Pearton, S. Gallium Oxide: Technology, Devices and Applications / S. Pearton, F. Ren, M. Mastro. — Amsterdam : Elsevier, 2019. — 507 p.

26. Polarized Raman spectra in  $\beta - Ga_2O_3$  single crystals / T. Onuma, S. Fujioka, T. Yamaguchi, Y. Itoh, M. Higashiwaki, K. Sasaki, T. Masui, T. Honda // *Journal of Crystal Growth*. — 2014. — Vol. 401. — P. 330–333. — DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2013.12.061>.

27. Portable multi-node LQCD Monte Carlo simulations using OpenACC / C. Bonati, E. Calore, M. D'Elia, M. Mesiti, F. Negro, F. Sanfilippo, S. Fabio Schifano, G. Silvi, R. Tripiccione // *International Journal of Modern Physics C*. — 2018. — Vol. 29 (1). — Article ID: 1850010(1). — DOI: <https://doi.org/10.1142/S0129183118500109>.

28. Rees, H. D. Calculation of distribution functions by exploiting the stability of the steady state / H. D. Rees // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. — 1969. — Vol. 30. — P. 643–655.

29. Rees, H. D. Calculation of steady-state distribution function by exploiting stability / H. D. Rees // *Physics Letters A*. — 1968. — Vol. 26. — P. 416–417.

30. Ridley, B. K. Quantum Processes in Semiconductors / B. K. Ridley. — Oxford : Oxford University Press, 2013. — 430 p.

31. Taurus TSUPREM-4 Homepage. — Electronic text data. — Mode of access: <https://www.synopsys.com/silicon/tcad/process-simulation/taurus-tsuprem-4.html>. — Title from screen.

32. TCAD Studio Homepage. — Electronic text data. — Mode of access: <https://silvaco.com/services/tcad-services>. — Title from screen.

## REFERENCES

1. Abdrakhmanov V.L., Zav'yalov D.V., Konchenkov V.I., Kryuchkov S.V. Vliyanie silnoy elektromagnitnoy volny na provodimost  $\beta - Ga_2O_3$  [Effect of a Strong Electromagnetic Wave on the Conductivity of  $\beta - Ga_2O_3$ ]. *Izvestiya Rossiyskoy akademii nauk. Seriya fizicheskaya* [Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics], 2020, no. 84 (1), pp. 61-66. DOI: <https://doi.org/10.3103/S1062873820010037>.

2. Zav'yalov D.V., Egunov V.A., Konchenkov V.I. O vektorizatsii algoritma Monte — Karlo resheniya klassicheskogo uravneniya Boltsmana [On Vectorization of Monte Carlo Algorithm Solving Classical Boltzmann Equation]. *Matematicheskaya fizika i kompyuternoe modelirovanie* [Mathematical Physics and Computer Simulation], 2020, no. 23 (1), pp. 13-21. DOI: <https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2020.1.2>.

3. Abdrakhmanov V.L., Konchenkov V.I., Zav'yalov D.V. Monte Carlo Study of Beta-Ga(2)O(3) Conductivity. *Journal of Physics: Conference Series*, 2019, vol. 1400, article ID: 044024. DOI: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1400/4/044024>.

4. Liang J., Hua R., Zhang H., Zhu W., Fu Y. Accelerated Molecular Dynamics Simulation of Silicon Crystals on TaihuLight Using OpenACC. *Parallel Computing*, 2020, vol. 99, article ID: 102667. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.parco.2020.102667>.

5. Eichstadt J., Vymazal M., Moxey D., Peiro J. A Comparison of the Shared-Memory Parallel Programming Models OpenMP, OpenACC and Kokkos in the Context of Implicit Solvers for High-Order FEM. *Computer Physics Communications*, 2020, vol. 255, article ID: 107245. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2020.107245>.
6. Schubert M., Korlacki R., Knight S., Hofmann T., Schoche S., Darakchieva V., Janzen V., Monemar B., Gogova D., Thieu Q.-T., Togashi R., Murakami H., Kumagai Y., Goto K., Kuramata A., Yamakoshi S., Higashiwaki M. Anisotropy, Phonon Modes, and Free Charge Carrier Parameters in Monoclinic  $\beta$ -Gallium Oxide Single Crystals. *Physical Review B*, 2016, vol. 93, article ID: 125209. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.93.125209>.
7. Chandrasekaran S., Juckeland G. *OpenACC for Programmers. Concepts and Strategies*. Boston, Addison-Wesley, 2017. 317 p.
8. Chang T., Brun E., Calvin C. Portable Monte Carlo Transport Performance Evaluation in the PATMOS Prototype. *Wyrzykowski, R., Deelman, E., Dongarra, J., Karczewski, K. (eds.): PPAM 2019, LNCS*, 2020, vol. 12043, pp. 528-539. DOI: [https://doi.org/10.1007/978-3-030-43229-4\\_45](https://doi.org/10.1007/978-3-030-43229-4_45).
9. Zhang Z.-Ch., Wu Y., Lu Ch., Ahmed S. Electron Mobility in  $\beta - Ga_2O_3$ : An Ensemble Monte Carlo Study. *Applied Physics A*, 2018, vol. 124, pp. 637. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00339-018-2053-z>.
10. Artigues V., Kormann K., Rampf M., Reuter K. Evaluation of Performance Portability Frameworks for the Implementation of a Particle-In-Cell Code. *Concurrency and Computation. Practice and Experiment*, 2020, vol. 32 (11), article ID: e5640. DOI: <https://doi.org/10.1002/cpe.5640>.
11. Farvacque J.L. Extension of the Collision-Time Tensor to the Case of Inelastic Scattering Mechanisms: Application to GaAs and GaN. *Physical Review B*, 2000, vol. 62, article ID: 2536. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.62.2536>.
12. Kang Y., Krishnaswamy K., Peelaers H., Van de Walle Ch.G. Fundamental Limits on the Electron Mobility of  $\beta - Ga_2O_3$ . *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2017, vol. 29, article ID: 234001. DOI: <https://doi.org/10.1088/1361-648X/aa6f66>.
13. Stepanov S.I., Nikolaev V.I., Bougrov V.E., Romanov A.E. Gallium Oxide: Properties and Applications — A Review. *Reviews on Advanced Material Science*, 2016, vol. 44, pp. 63-86.
14. Ghosh K., Singiseti U. Ab Initio Calculation of Electron-Phonon Coupling in Monoclinic  $\beta - Ga_2O_3$  Crystal. *Applied Physics Letters*, 2016, vol. 109, article ID: 072102. DOI: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1400/4/044024>.
15. Ghosh K., Singiseti U. Ab Initio Velocity-Field Curves in Monoclinic  $\beta - Ga_2O_3$  Crystal. *Journal of Applied Physics*, 2017, vol. 122, article ID: 035702. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4986174>.
16. Yamaguchi T., Fujita K., Ichimura T., Naruse A., Lalith M., Hori M. GPU Implementation of a Sophisticated Implicit Low-Order Finite Element Solver with FP21-32-64 Computation Using OpenACC. *S. Wienke and S. Bhalachandra (eds.): WACCPD 2019, LNCS*, 2020, vol. 12017, pp. 3-24. DOI: [https://doi.org/10.1007/978-3-030-49943-3\\_1](https://doi.org/10.1007/978-3-030-49943-3_1).
17. Hasbestan J.J., Xiao Ch.-N., Senocak I. PittPack: An Open-Source Poisson's Equation Solver for Extreme-Scale Computing with Accelerator. *Computer Physics Communications*, 2020, vol. 254, article ID: 107272. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2020.107272>.
18. Oishi T., Koga Y., Harada K., Kasu M. High-Mobility  $\beta - Ga_2O_3$  (-201) Single Crystals Grown by Edge-Defined Film-Fed Growth Method and Their Schottky Barrier Diodes with Ni Contact. *Applied Physics Express*, 2015, vol. 8, article ID: 031101. DOI: <https://doi.org/10.7567/APEX.8.031101>.
19. Ma N., Tanen N., Verma A., Guo Z., Luo T., Xing H. Intrinsic Electron Mobility Limits in  $\beta - Ga_2O_3$ . *Applied Physics Letters*, 2016, vol. 109, article ID: 212101. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4968550>.
20. Konchenkov V.I., Kryuchkov S.V., Zav'yalov D.V. Influence of Constant Electric Field on Circular Photogalvanic Effect in Material with Rashba Hamiltonian. *Journal of Computational Electronics*, 2014, vol. 13, pp. 996-1009. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10825-014-0622-8>.
21. Liu B., Gu M., Liu X. Lattice Dynamical, Dielectric, and Thermodynamic Properties of

$\beta - Ga_2O_3$  From First Principles. *Applied Physics Letters*, 2007, vol. 91, article ID: 172102. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.2800792>.

22. *OpenACC Homepage*. URL: <https://www.openacc.org>.

23. Parisini A., Singiseti U., Fornari R. Assessment of Phonon Scattering-Related Mobility in  $\beta - Ga_2O_3$ . *Semiconductor Science and Technology*, 2018, vol. 33, article ID: 105008. DOI: <https://doi.org/10.1088/1361-6641/aad5cd>.

24. Parisini A., Fornari R. Analysis of the Scattering Mechanisms Controlling Electron Mobility in  $\beta - Ga_2O_3$  Crystals. *Semiconductor Science and Technology*, 2016, vol. 31, article ID: 035023. DOI: <https://doi.org/10.1088/0268-1242/31/3/035023>.

25. Pearton S., Ren F., Mastro M. *Gallium Oxide: Technology, Devices and Applications*. Amsterdam, Elsevier, 2019. 507 p.

26. Onuma T., Fujioka S., Yamaguchi T., Itoh Y., Higashiwaki M., Sasaki K., Masui T., Honda T. Polarized Raman Spectra in  $\beta - Ga_2O_3$  Single Crystals. *Journal of Crystal Growth*, 2014, vol. 401, pp. 330-333. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2013.12.061>.

27. Bonati C., Calore E., D'Elia M., Mesiti M., Negro F., Sanfilippo F., Fabio Schifano S., Silvi G., Tripiccione R. Portable Multi-Node LQCD Monte Carlo Simulations Using OpenACC. *International Journal of Modern Physics C*, 2018, vol. 29 (1), article ID: 1850010(1). DOI: <https://doi.org/10.1142/S0129183118500109>.

28. Rees H.D. Calculation of Distribution Functions by Exploiting the Stability of the Steady State. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 1969, vol. 30, pp. 643-655.

29. Rees H.D. Calculation of Steady-State Distribution Function by Exploiting Stability. *Physics Letters A*, 1968, vol. 26, pp. 416-417.

30. Ridley B.K. *Quantum Processes in Semiconductors*. Oxford, Oxford University Press, 2013. 430 p.

31. *Taurus TSUPREM-4 Homepage*. URL: <https://www.synopsys.com/silicon/tcad/process-simulation/taurus-tsuprem-4.html>.

32. *TCAD Studio Homepage*. URL: <https://silvaco.com/services/tcad-services>.

## MONTE CARLO SIMULATION OF KINETIC PHENOMENA IN SOLIDS USING OPENACC PARALLEL COMPUTING TECHNOLOGY

**Vladimir L. Abdrakhmanov**

Assistant Lecturer, Department of Electronic Computational Machines and Systems,  
Volgograd State Technical University  
369565@gmail.com  
Prosp. Lenina, 28, 400005 Volgograd, Russian Federation

**Dmitry L. Abdrakhmanov**

Assistant Lecturer, Department of Electronic Computational Machines and Systems,  
Volgograd State Technical University  
565963@gmail.com  
Prosp. Lenina, 28, 400005 Volgograd, Russian Federation

**Dmitry V. Zav'yalov**

Doctor of Physical and Mathematical Sciences,  
Head of the Department of Physics,  
Volgograd State Technical University  
sinegordon@gmail.com  
<https://orcid.org/0000-0002-9497-9613>  
Prosp. Lenina, 28, 400005 Volgograd, Russian Federation



**Vladimir I. Konchenkov**

Candidate of Physical and Mathematical Sciences,  
Associate Professor, Department of Physics,  
Volgograd State Technical University  
kontchenkov@yandex.ru  
<https://orcid.org/0000-0002-2525-0191>  
Prosp. Lenina, 28, 400005 Volgograd, Russian Federation

**Abstract.** The development of a software package using the OpenACC parallel computing technology for Monte Carlo simulation of the kinetic coefficients of homogeneous semiconductor materials is presented. The package is a set of interconnected classes, the parameters of the material and external fields are redefined in the child classes available to the user, which makes it possible to model a wide range of materials. The package allows using models of elastic (acoustic phonons, charged impurities) and inelastic (polar and nonpolar optical phonons) electron scattering in the single-band approximation. The use of the OpenACC technology makes it possible to use both shared memory systems and hybrid systems equipped with graphics processors as a computing platform. The possibility of saving data about each particle at each time step of the simulation is provided. It allowed, in particular, tracing the dependence of the average collision frequency of the energy of charge carriers and strength of the DC electric field applied to the sample, in the beta-modification of gallium oxide, to assess the applicability of the conductivity models offered by other research groups. It is shown that the greatest contribution to the conductivity of the beta modification of gallium oxide at room temperatures is made by the scattering of electrons on polar optical phonons, and the average collision frequency, as well as the percentage of collisions of an electron with various types of inhomogeneities of the crystal lattice, weakly depend on the strength of the constant electric field. At a temperature of about 100 K, with an increase in the constant electric field applied to the sample, firstly, the proportion of scattering with the emission of polar optical phonons increases significantly and the proportion of scattering on charged impurities decreases, and secondly, the total frequency of collisions increases. This is due, on the one hand, to the heating of the electron gas by an electric field and the activation of scattering channels with the emission of a phonon at a given temperature, on the other hand, to an insufficiently rapid increase in the concentration of current carriers due to the ionization of impurities. Thanks to the Monte Carlo simulation, it was possible to directly evaluate the validity of using of the Farvaque correction for an approximate description of the processes of inelastic electron scattering on polar optical phonons by introducing some effective relaxation time.

**Key words:** OpenACC, Monte Carlo method, polar optical phonons, gallium oxide, mean relaxation time.