

## МОДЕЛЮВАННЯ ВАРІЗОННИХ НАДГРАТОК З ВИКОРИСТАННЯМ ГЕНЕТИЧНОГО АЛГОРИТМУ

Б. Соколовський, Л. Монастирський, О. Сінькевич

*Факультет електроніки та комп'ютерних технологій,  
Львівський національний університет імені Івана Франка,  
вул. Драгоманова, 50, 79005 Львів, Україна*

[bohdan.sokolovsky@lnu.edu.ua](mailto:bohdan.sokolovsky@lnu.edu.ua)

В роботі з використанням генетичного алгоритму виконано числовий розрахунок координатних розподілів електростатичного потенціалу у несиметричній варізонній надгратці з кусочно-лінійними координатними профілями ширини забороненої зони та електронної спорідненості. Сформульовано математичну модель, що представлена двома нелінійними рівняннями Пуассона та чотирма граничними умовами.

Розв'язання триточкової крайової задачі для електростатичного потенціалу зведено до розв'язання в ітераційному циклі двох задач Коші з початковими умовами, що визначаються за допомогою генетичного алгоритму. Описано процедуру отримання розв'язку та проаналізовано його особливості

*Ключові слова:* варізонні напівпровідники, надгратки, моделювання, генетичні алгоритми.

### Вступ

Варізонні напівпровідникові структури, в яких ширина забороненої зони, а також інші фізичні параметри плавно змінюються з координатою, привертають значну увагу дослідників та розробників напівпровідникових приладів завдяки ряду притаманних їм унікальних властивостей [1-3]. Насамперед слід вказати на присутність у варізонних напівпровідниках квазіелектричних полів, які зумовлені координатною залежністю країв зони провідності та валентної зони та можуть досягати значних напруженостей, а їх дія по-різному проявляється на поведінці нерівноважних електронів та дірок. Варізонним напівпровідникам властивий “ефект широкозонного вікна”, за якого світлове випромінювання, згенероване у активній області структури можна без суттєвих втрат виходити через її широкозонну частину, що робить такі матеріали перспективними для оптоелектронних та фотоелектричних застосувань. На сьогоднішній день номенклатура приладів на основі варізонних напівпровідників досить широка та включає, зокрема, сонячні елементи [2, 4], приймачі ІЧ випромінювання [5], лазери [2], швидкодіючі транзистори [3, 6]. Специфічні риси варізонних структур найбільш виразно проявляються при великих градієнтах ширини забороненої зони, які можна легко досягнути в багатошарових варізонних структурах, зокрема в таких, що володіють просторовою періодичністю – квантових та класичних варізонних надгратках (ВН). В класичних ВН, які легше отримати технологічно, довжина вільного пробігу електронів набагато менша від періоду ґратки і в них відсутнє розмірне квантування енергетичного

спектру електронів та дірок. Моделювання таких ВН можна здійснювати квазікласичним підходом без явного використання рівняння Шредінгера.

Для адекватного аналізу процесів, які відбуваються у ВН, необхідно, насамперед, знати форму її енергетичної діаграми, яка відображає координатні залежності країв зони провідності та валентної зони. При заданих координатних залежностях ширини забороненої зони та електронної спорідненості енергетична діаграма ВН отримується як результат розв'язку відповідного рівняння Пуассона. Слід зазначити, що знання рівноважної енергетичної діаграми ВН має принципіальне значення як для інтерпретації експериментальних даних, так і для прогнозування особливостей перебігу електричних та оптико-електронних явищ в таких структурах, а також оцінки характеристик приладів, створених на їх основі.

Моделювання енергетичної діаграми класичних ВН симетричного та несиметричного типів було проведено в роботах [7- 9], зокрема в [9] розглянено випадок, коли зміна ширини забороненої зони у ВН набагато менша теплової енергії  $kT$ . Разом з тим, найбільший практичний інтерес становить несиметричні ВН, в який перепад ширини забороненої зони значно перевищує теплову енергію. В цьому випадку задача розрахунку енергетичної діаграми ВН стає суттєво нелінійною і для її розв'язання стандартні математичні методи виявляються не досить ефективними.

В даній роботі для моделювання асиметричних ВН використано генетичні алгоритми, які продемонстрували свою ефективність для розв'язання широкого класу оптимізаційних задач [10, 11].

### Постановка задачі

Розглянемо несиметричну ВН, в якій ширина забороненої зони  $E_g$  і електронна спорідненість  $\chi$  є кусково-лінійними функціями координати  $x$  в межах періоду ВН, який формується двома шарами з товщинами  $d_1$  та  $d_2$  (рис. 1). ВН однорідно легована донорними або (і) акцепторними домішками з концентраціями  $N_d$  і  $N_a$ , відповідно.

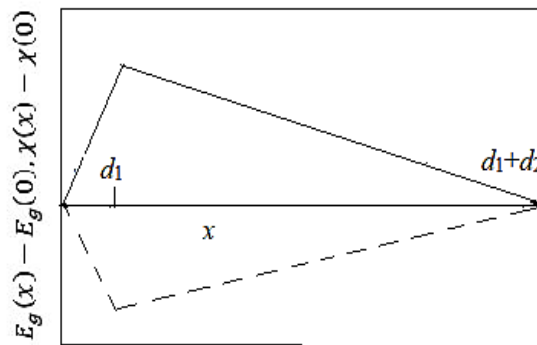


Рис.1. Координатні профілі ширини забороненої зони (суцільні лінії) та електронної спорідненості (штрихові) у досліджуваній ВН

Краї зони провідності  $E_c(x)$  і валентної зони  $E_v(x)$  ВН визначаються співвідношеннями [12]

$$E_c(x) = E_0 - \chi(x) - e\varphi(x), \quad (1)$$

$$E_v(x) = E_0 - \chi(x) - E_g(x) - e\varphi(x), \quad (2)$$

де  $E_0$  – рівень відліку енергії, який співпадає з локальним рівнем вакууму у точці  $x=0$ ,  $\varphi$  – електростатичний потенціал,  $e$  – абсолютне значення заряду електрона.

Як впливає з (1) та (2), для побудови енергетичної діаграми ВП необхідно розрахувати координатну залежність електростатичного потенціалу. Що стосується координатних залежностей ширини забороненої зони та електронної спорідненості, то будемо вважати, що вони відомі на основі експериментальних даних, або отримані шляхом квантово-механічних розрахунків.

Для визначення координатної залежності електростатичного потенціалу необхідно розв'язати рівняння Пуассона, яке у випадку невідродженої статистики електронів і дірок та незалежності від координати ефективних густин станів у зонах дозволених енергій можна записати таким чином [12]

$$\varepsilon\varepsilon_0 \frac{d^2\varphi}{dx^2} = e \left[ n_0(0) \exp\left(\frac{e\varphi + \Delta\chi}{kT}\right) - p_0(0) \exp\left(\frac{\Delta E_g + \Delta\chi - e\varphi}{kT}\right) + N_a - N_d \right] \quad (3)$$

де  $\varepsilon$ ,  $\varepsilon_0$  – діелектричні проникності напівпровідника та вакууму,  $n_0(0)$ ,  $p_0(0)$  – рівноважні концентрації електронів та дірок в однорідному напівпровіднику з параметрами, що відповідають точці  $x = 0$  у ВН,  $\Delta\chi = \chi(x) - \chi(0)$ ,  $\Delta E_g = E_g(x) - E_g(0)$ .

Врахуючи кусочно-лінійний характер координатних залежностей  $\Delta E_g$  та  $\Delta\chi$ , рівняння (3) можна записати в безрозмірних змінних у такому вигляді

$$\frac{d^2\bar{\varphi}}{d\xi^2} = (1 - \kappa) \exp(\bar{\varphi} + \beta_1\xi) - \kappa \exp[-\bar{\varphi} - (\delta_1 + \beta_1)\xi] + \bar{N} \quad \text{при } 0 \leq \xi < \bar{d}_1, \quad (4)$$

$$\frac{d^2\bar{\varphi}}{d\xi^2} = (1 - \kappa) \exp\{(\bar{\varphi} - \beta_2 [v(\xi - \bar{d}_1) + \bar{d}_1])\} - \kappa \exp\{-\bar{\varphi} - (\delta_2 + \beta_2)[v\xi - (v + 1)\bar{d}_1]\} + \bar{N} \quad \text{при } \bar{d}_1 \leq \xi < \bar{d}_1 + \bar{d}_2, \quad (5)$$

де

$$\delta_1 = (L_D/kT) dE_g/dx \quad (0 \leq x < d_1), \quad \delta_2 = (L_D/kT) dE_g/dx \quad (d_1 \leq x < d_1 + d_2),$$

$$\beta_1 = (L_D/kT) d\chi/dx \quad (0 \leq x < d_1), \quad \beta_2 = (L_D/kT) d\chi/dx \quad (d_1 \leq x < d_1 + d_2),$$

$$\bar{N} = (N_a - N_d)/[n_0(0) + p_0(0)], \quad \kappa = p_0(0)/[n_0(0) + p_0(0)], \quad v = d_1/d_2.$$

Очевидно, що параметри  $\delta_1$ ,  $\delta_2$  та  $\beta_1$ ,  $\beta_2$  не є незалежними – між ними, як впливає з рис.1, існують такі співвідношення

$$\delta_2 = -\delta_1(\bar{d}_2 - \bar{d}_1)/\bar{d}_1, \quad \beta_2 = -\beta_1(\bar{d}_2 - \bar{d}_1)/\bar{d}_1. \quad (6)$$

Рівняння (4), (5) потрібно доповнити крайовими умовами, що відображають неперервність електростатичного потенціалу та напруженості електричного поля на краях шарів, з яких утворена ВН:

$$\bar{\varphi}(\xi = +0) = \bar{\varphi}(\xi = \bar{d}_1 + \bar{d}_2 - 0), \quad (7)$$

$$\bar{\varphi}(\xi = \bar{d}_1 - 0) = \bar{\varphi}(\xi = \bar{d}_1 + 0), \quad (8)$$

$$\frac{d\bar{\varphi}}{d\xi}(\xi = +0) = \frac{d\bar{\varphi}}{d\xi}(\xi = \bar{d}_1 + \bar{d}_2 - 0), \quad (9)$$

$$\frac{d\bar{\varphi}}{d\xi}(\xi = \bar{d}_1 - 0) = \frac{d\bar{\varphi}}{d\xi}(\xi = \bar{d}_1 + 0). \quad (10)$$

#### Алгоритм розв'язання задачі та аналіз результатів

Основна складність, яка виникає при розв'язанні триточкової крайової задачі, заданої рівняннями (4), (5) та крайовими умовами (7) – (10), зумовлена її нелінійністю. Для отримання розв'язку даної задачі можна використовувати два підходи. Перший підхід передбачає зведення даної задачі до сукупності лінійних задач з використанням методу квалінеаризації Беллмана-Калаби [13] та розв'язання на кожному ітераційному кроці відповідних лінійних диференціальних рівнянь різницеvim методом. Такий метод є досить громіздким (через постійне оновлень значень похідних по шуканій функції) та дуже чутливим до величини кроку квазінеаризації. При другому підході крайова задача зводиться до послідовності задач Коші з початковими значеннями, що підлягають уточненню до досягнення їх оптимального набору, при якому з наперед заданою точністю отримується шуканий розв'язок.

В даній роботі для знаходження оптимальних початкових значень для задачі Коші, що відповідає сформульованим вище рівнянням, використано генетичний алгоритм, в якому реалізовані аналоги принципів природної еволюції [10,11]. Важливою перевагою генетичного алгоритму є те, що ймовірнісний процес знаходження розв'язку задачі стартує не з одної точки простору пошуку, а цілого сімейства (популяції) потенційно можливих розв'язків (особин, хромосом), які зазнають модифікації під дією операторів відбору, схрещування та мутації.

Щоб використати генетичний алгоритм для знаходження координатного розподілу електростатичного потенціалу у ВН, перейдемо до системи диференціальних рівнянь першого порядку (при цьому обмежимося частковим випадком ВН з власним типом провідності), яка може бути представлена у такому вигляді

$$\frac{dY}{d\xi} = F(\xi, Y), \quad (11)$$

де

$$Y^T = [y_1, y_2] = [\bar{\varphi}, d\bar{\varphi}/d\xi], \quad F^T(\xi, Y) = [F_1, F_2], \quad F_1 = y_2,$$

$$F_2 = \exp(y_1 + \beta_1 \xi) - \exp[-y_1 - (\beta_1 + \delta_1)\xi] \quad \text{при } 0 \leq \xi < \bar{d}_1,$$

$$F_2 = \exp[y_1 + \beta_2(\xi - \bar{d}_1) + \beta_1 \bar{d}_1] + \exp[-y_1 - (\delta_2 - \beta_2)(\xi - \bar{d}_1) - (\delta_1 + \beta_1)\bar{d}_1] \\ \text{при } \bar{d}_1 \leq \xi < \bar{d}_1 + \bar{d}_2.$$

Оскільки, згідно (7) та (9)

$$y_1(0) = y_1(\bar{d}_1 + \bar{d}_2) = a, \quad (12)$$

$$y_2(0) = y_2(\bar{d}_1 + \bar{d}_2) = b \quad (13)$$

то рівняння (11) можна розв'язувати шляхом послідовного інтегрування його правих частин від точки  $\xi = 0$  до точки  $\xi = \bar{d}_1$  та від точки  $\xi = \bar{d}_1 + \bar{d}_2$  до точки  $\xi = \bar{d}_1$ , причому

при неправильно підібраних числових значеннях  $a$  та  $b$  отримані розв'язки мають розриви при  $\xi = \bar{d}_1$ . На рис.2 приведені результати такого розрахунку методом Рунге - Кутта 4-го порядку при значеннях  $a$  та  $b$ , які відповідають випадку, коли функції  $F_2$  в (11) можна лінеаризувати ( $\delta_1 \bar{d}_1, |\beta_1| \bar{d}_1 \ll 1$ ). Зазначені значення  $a$  та  $b$  можна отримати аналітично, взявши до уваги фундаментальні розв'язки в обох частинах періоду надгратки та використавши умови (7) – (10) [9].

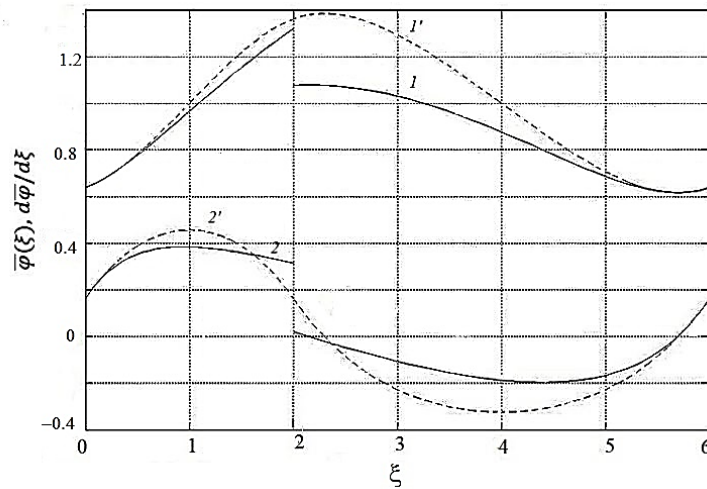


Рис.2. Координатні залежності електростатичного потенціалу ( $I$ ) та його похідної ( $2$ ) при  $\delta_1 = -\beta_1 = 2, \bar{d}_1 = 2, \bar{d}_2 = 4$  та значеннях  $\varphi(0)$  та  $\varphi'(0)$ , що відповідають лінеаризованій задачі (криві  $I', 2'$ )

Серед множини значень  $a$  та  $b$ , які беруться як початкові умови для задач Коші, що розв'язуються на інтервалах  $[0, \bar{d}_1)$  та  $[\bar{d}_1 + \bar{d}_2, \bar{d}_1)$  потрібно знайти такі значення, для яких відсутні розриви в точці  $\bar{d}_1$  як для потенціалу, так і його похідної, яка з точністю до знаку представляє собою напруженість внутрішнього електричного поля. Тоді можна стверджувати, що отримано правильний розв'язок, що задовольняє рівнянням (11) та умовам неперервності в точці  $\xi = \bar{d}_1$  в якій відбувається стрибкоподібна зміна нахилів координатних залежностей  $E_g$  та  $\chi$  (рис.1). При цьому згідно з (12) та (13) виконуються також умови неперервності на краях періоду ВН (точки з координатами  $\xi = 0$  та  $\xi = \bar{d}_1 + \bar{d}_2$ ).

Пошук оптимальних значень  $a$  та  $b$  в даній роботі здійснюється за допомогою генетичного алгоритму, для якого необхідно задати функцію пристосованості (фітнес-функцію). Цю функцію доцільно вибрати у такому вигляді

$$F_{fit}(a, b) = \sqrt{\Delta_1^2 + \Delta_2^2}, \quad (14)$$

де  $\Delta_1, \Delta_2$  – величини розривів електростатичного потенціалу та його похідної у точці  $\xi = \bar{d}_1$  при розв'язуванні задач Коші з початковими умовами (12), (13):

$$\Delta_{1,2} = y_{1,2}(\bar{d}_1 + 0) - y_{1,2}(\bar{d}_1 - 0). \quad (15)$$

Пошук оптимальних значень для початкових умов (12) та (13) виконувався в середовищі MatLab з пакетом *Genetic Algorithm*, в якому використовувалась функція *ga*, що повертає оптимальні значення  $a$ ,  $b$  та відповідне їм значення функції пристосованості. Для розв'язання задач Коші використовувалась вбудована програма *ode45*.

Початкова популяція пробних розв'язків (хромосом) створювалась в прямокутній області

$$a \in [a_0(1 - \alpha_1), a_0(1 + \alpha_1)], b \in [b_0(1 - \alpha_2), b_0(1 + \alpha_2)], \quad (16)$$

з центром в точці  $(a_0, b_0)$ , яка відповідає початковим значенням, отриманим для відповідної лінеаризованої задачі Коші [9]. Параметри  $\alpha_{1,2}$  приймали значення з діапазону  $[0.2, 1.0]$ . В генетичному алгоритмі використовувалось кодування хромосом дійсними числами, а також типові оператори селекції, схрещування та мутації [10, 11].

З рис.3, на якому відображено процес наближення до оптимального розв'язку, видно, що для отримання шуканого розв'язку достатньо, щоб змінилось порядку 20–25 поколінь.

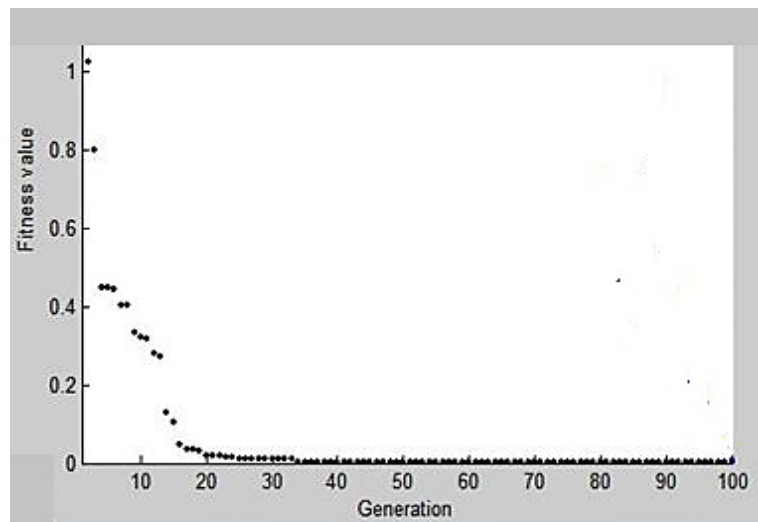


Рис.3. Залежність значення функції пристосованості найкращого пробного розв'язку (хромосоми) в популяції розміром 50 особин від номера покоління

Для прикладу на рис.4 показані координатні залежності електростатичного потенціалу та його похідної для двох надграток з аналогічними товщинами шарів та різними градієнтами ширини забороненої зони.

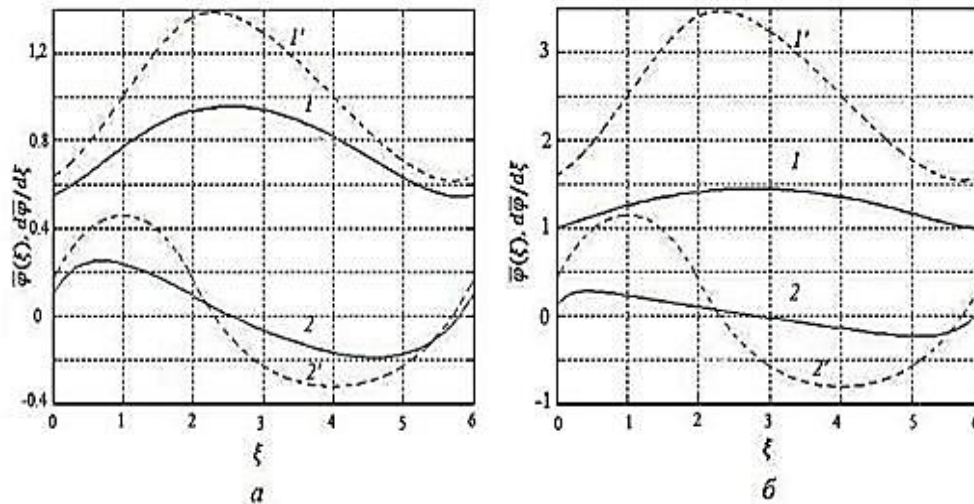


Рис.4. Координатні залежності електростатичного потенціалу ( $1, 1'$ ) та його похідної ( $2, 2'$ ) при  $\bar{d}_1=2, \bar{d}_2=4$  та  $\delta_1=-\beta_1=2$  (а),  $\delta_1=-\beta_1=5$  (б).

Штрихові лінії відповідають лінеаризованій задачі з такими ж наборами параметрів

Отримані просторові залежності електростатичного потенціалу дозволяють побудувати енергетичні діаграми несиметричних ВН та проаналізувати їх особливості. Як видно з рис. 4, максимум електростатичного потенціалу, тобто нульове значення напруженості внутрішнього електричного поля, на відміну від симетричних ВН [7, 8], спостерігається не на межі розділу шарів, а в шарі з більшою товщиною. Відзначимо також суттєву кількісну відмінність значень електростатичного потенціалу для нелінійної та лінеаризованої моделей. Ряд інших особливостей енергетичної діаграми несиметричних ВН буде проаналізовано в окремій публікації.

### Висновки

В роботі виконано числовий розрахунок електростатичного потенціалу в несиметричній ВН з кусочно-лінійними координатними профілями ширини забороненої зони та електронної спорідненості. Математична модель для досліджуваної ВН представлена двома нелінійними рівняннями Пуассона та чотирма граничними умовами, які відображають неперервність електростатичного потенціалу і напруженості електричного поля на межах ВН, а також просторову періодичність фізичних величин ВН.

Показано, що розрахунки сформульованої крайової задачі можна звести до розв'язання двох задач Коші з початковими умовами, що визначаються за допомогою генетичного алгоритму, в якому на етапі ініціалізації використано значення потенціалу та його похідної на краях надгратки, отриманих на основі аналітичних розрахунків лінеаризованої моделі ВН.

## Список використаних джерел

- [1] *Kroemer H.* Nobel Lecture: Quasielectric fields and band offsets: teaching electrons new tricks // *Rev. Mod. Phys.* – 2001. – Vol. 73, No.3. – P.783–793. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.73.783>.
- [2] *Alferov Zh. I.* The history and future of semiconductor heterostructures // *Semiconductors.* – 1998. – Vol. 32, No. 1. – P. 1–15, <https://doi.org/10.1134/1.1187350>.
- [3] *Capasso F.* Band-gap engineering: from physics and materials to new semiconductor devices// *Science.* – 1987. – Vol. 235, No.1. – P.172–175, <https://www.science.org/doi/10.1126/science.235.4785.172>.
- [4] *Morales-Acevedo A.* Variable band-gap semiconductors as the basis of new solar cells // *Solar Energy.* – 2009. – Vol. 83, No. 9. – P. 1466–1471, <https://doi.org/10.1016/j.solener.2009.04.004>.
- [5] *Rogalski A.* Infrared detectors: an overview // *Infrared Phys. & Technol.* – 2002.–Vol.23, No.3–5. – P.187–210, [https://doi.org/10.1016/S1350-4495\(02\)00140-8](https://doi.org/10.1016/S1350-4495(02)00140-8).
- [6] *Margaritondo G., Capasso F.* Heterojunction Band Discontinuities: Physics and Device Application. – North-Holland, 1987. – 652 p.
- [7] *Савицкий В. Г., Соколовский Б. С.* Об энергетической диаграмме классических варизонных сверхрешеток // *ФТП.* – 1994. – Т. 28, №2. – С. 356–359.
- [8] *Sokolovskii B. S.* Multilayer structures based on doped graded-band-gap semiconductors: features of energy band diagram // *Phys. Stat. Solidi (a).* –1997.–Vol. 163, No. 2. –P. 425–432, [https://doi.org/10.1002/1521-396X\(199710\)163:2<425::AID-PSSA425>3.0.CO;2-Y](https://doi.org/10.1002/1521-396X(199710)163:2<425::AID-PSSA425>3.0.CO;2-Y)
- [9] *Monastyrskii L.S., B.S. Sokolovskii, M.P. Alekseichyk.* Calculation of energy diagram of asymmetric graded-band-gap superlattices / L.S. Monastyrskii, // *Nanoscale Research Letters.* – 2017. – Vol. 12: 203, <https://doi.org/10.1186/s11671-017-1981-4>.
- [10] *Глибовець А. М., Гулаєва Н. М.* Еволюційні алгоритми. – К.: НаУКМА, 2013. –828 с.
- [11] *Sourabh Katoch, Sumit Singh Chauhan, Vijay Kumar.* A review on genetic algorithm: past, present, and future // *Multimedia Tools and Applications.* – 2021. – Vol. 80. – P. 8091–8126, <https://doi.org/10.1007/s11042-020-10139-6>.
- [12] *Монастирський Л. С., Оленіч І. Б., Соколовський Б. С., Бойко Я.В.* Комп'ютерне моделювання електронних процесів у неоднорідних структурах мікро- та наноелектроніки. – Львів: ЛНУ імені Івана Франка, 2021. – 230 с.
- [13] *Bellman R.E., Roth R.S.* Quasilinearization. In: *Methods in Approximation. Mathematics and Its Applications.* Vol 26. – Dordrecht: Springer, 1986. – P. 71–102, [https://doi.org/10.1007/978-94-009-4600-2\\_4](https://doi.org/10.1007/978-94-009-4600-2_4).



## MODELLING OF VARIABLE BAND-GAP SUPERLATTICES WITH USING A GENETIC ALGORITHM

**B. Sokolovskyy, L. Monastyrskyy, O. Sinkevych**

*Ivan Franko National University of Lviv,  
50 Drahomanov St., UA-79005 Lviv, Ukraine*

[\*bohdan.sokolovskyy@lnu.edu.ua\*](mailto:bohdan.sokolovskyy@lnu.edu.ua)

The numerical calculation of the coordinate distributions of the electrostatic potential in an asymmetric variable-band superlattice with piecewise linear coordinate profiles of the gap width and electron affinity was performed using a genetic algorithm. A mathematical model is formulated, represented by two nonlinear Poisson equations and four boundary conditions, which reflect the continuity of the electrostatic potential and electric field strength at the boundaries of the variable band-gap superlattice, as well as the spatial periodicity of its physical quantities.

The solution of the three-point boundary value problem for the electrostatic potential is reduced to the solution in an iterative cycle of two Cauchy problems with initial conditions determined using a genetic algorithm. The search space was chosen in the form of a rectangular region centered at a point that corresponded to the values of the electrostatic potential and electric field strength on one of the boundaries of the superlattice. These values were obtained by analytically solving the corresponding Poisson equations.

An initial population of 50-100 trial solutions (chromosomes) was created by selection with equal probability in the search area. The coding of chromosomes and their modification under the action of crossover and mutation operations were used. The genetic algorithm was implemented in the Matlab environment using the Genetic Algorithm package. Numerical experiments showed that the initial population of trial solutions no later than after 20–30 generations approaches to the desired initial values for the Cauchy problems. The latter were solved by the Runge-Kutta method of the 4th order.

The obtained dependences of the electrostatic potential show that its maximum value, which corresponds to the zero intensity of the internal electric field, in contrast to symmetric variable band-gap superlattices, is observed not at the interface of layers, but in a layer of greater thickness. The results of the calculations indicate a substantial quantitative difference in the values of the electrostatic potential for the nonlinear and linearized models.

*Key words:* variable band-gap semiconductors, superlattices, modelling, genetic algorithms.

*Стаття надійшла до редакції 22.11.2022.*

*Прийнята до друку 29.11.2022.*