01

Электронный спектр сложных одномерных сверхрешеток (на основе полупроводниковых гетероструктур в системе Al/Ga/As)

© И.Е. Драгунов,[1] Е.А. Пилипенко,[1] Ю.А. Семенюк,[1] И.Л. Любчанский[1,2]

[1] Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина,
283048 Донецк, ДНР, Россия
[2] Донецкий государственный университет,
283001 Донецк, ДНР, Россия
e-mail: pilipenko.katerina@mail.ru, igorl@donfti.ru

Поступило в Редакцию 19 февраля 2025 г.
В окончательной редакции 1 апреля 2025 г.
Принято к публикации 4 апреля 2025 г.

На основе модели Кронига–Пенни исследована одномерная сверхрешетка со сложной элементарной ячейкой, состоящей из двух потенциальных ям и двух потенциальных барьеров с различными ширинами и высотами. В явном виде получено дисперсионное уравнение для такой структуры. Проведен численный анализ полученных уравнений и исследовано поведение электронного спектра сверхрешетки $GaAs/Al_{0.5}Ga_{0.5}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ в зависимости от ширин ям и барьеров, а также их высот.

Ключевые слова: сверхрешетка, модель Кронига–Пенни, потенциальная яма, потенциальный барьер, зонная структура.

DOI: 10.61011/JTF.2025.08.60895.23-25

Введение

Исследование электронных спектров периодических структур представляет несомненный интерес, поскольку различные типы сверхрешеток (СР) находят широкое применение в современной микро-, нано- и оптоэлектронике [1–15]. В классической статье Р. де Кронига и У. Пенни [16] впервые была решена квантово-механическая задача о нахождении спектра электрона в поле периодического потенциала кристаллической решетки и получено аналитическое выражение для дисперсионного уравнения, решения которого определяют спектр электронов. Решение этого уравнения показывает, что в энергетическом спектре электронов возникают запрещенные зоны, т. е. такие интервалы значений энергий, которыми не могут обладать свободные электроны. Иными словами, электронный спектр СР характеризуется зонной структурой [16], а соответствующая модель, которая используется при теоретическом исследовании подобных задач в физике твердого тела, называется моделью Кронига–Пенни (МКП) [17,18]. Несмотря на то, что статья [16] была опубликована в начале 30-х гг. XX столетия, модель, предложенная в ней, успешно применяется для расчетов различных одномерных периодических структур вплоть до настоящего времени [19–22].

Практически во всех публикациях, посвященных применению МКП, исследуются двухкомпонентные СР, элементарная ячейка (ЭЯ) которых образована из одного потенциального барьера (ПБ) и одной потенциальной ямы (ПЯ).

Однако еще в работе [23] было отмечено, что перспективным является исследование сложных мультикомпонентных структур, названными политипными (polytype) СР, которые характеризуются более разнообразными физическими свойствами. Примером таких структур являются, например, бипериодические СР [24–27]. Следует отметить работы, в которых получены общие формулы для нахождения спектров СР, в элементарной ячейке которых содержится N-слоев [28–30] (см. также обзорную статью [31]). В статьях [28,31] в качестве примера исследованы СР с четырьмя элементами в ЭЯ, а именно, с двумя ПЯ и двумя ПБ. В них проведен численный анализ зависимости энергии электронов от ширин ям и барьеров в исследуемых структурах. Однако в этих публикациях не было учтено влияние высоты барьеров на электронные спектры в СР. Следует ожидать, что различие в высотах ПБ, наряду с ширинами ям и барьеров, также будет играть существенную роль в формировании электронных спектров СР. Например, в работе [32] методом матрицы переноса было получено дисперсионное уравнение для бипериодической СР, которая получается путем введения дополнительного барьера другой высоты в потенциальную яму. Как было показано в этой статье [32], такое усложнение ЭЯ сверхрешетки позволяет управлять характеристиками минизон.

Подобные исследования необходимы для поиска новых структур, которые могут найти применение в качестве элементной базы устройств наноэлектроники следующих поколений. Достижения последних лет в получении новых функциональных сред с заранее программируемыми свойствами позволяют создавать сложные гетероструктуры, состоящие из чередующихся слоев различных материалов. Такие структуры можно моделировать, обобщая МКП, развитую для бинарных

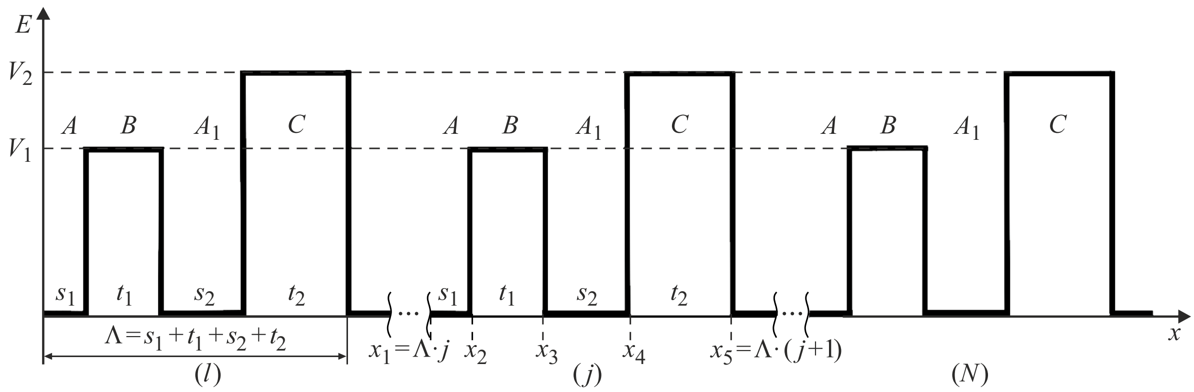

Рис. 1. Потенциальный профиль СР с элементарной ячейкой, состоящей из двух ПЯ и двух ПБ, где j — номер ЭЯ.

СР [16], на СР с большим числом элементов в ЭЯ, например, содержащие несколько ПЯ и ПБ. Это позволит увеличить число независимых параметров для прогнозирования новых особенностей в электронных свойствах таких гетероструктур с заданными ширинами минизон и минищелей.

Целью настоящей работы является изучение зависимости электронных спектров в СР с четырьмя элементами (двумя ПЯ и двумя ПБ) в элементарной ячейке от изменения не только ширин ям и барьеров, но и высот барьеров. Насколько нам известно, подобные исследования ранее не проводились.

В первом разделе статьи в явном виде получено дисперсионное уравнение для четырехкомпонентной СР, которое в предельном случае двухкомпонентной СР совпадает с соответствующим уравнением в рамках стандартной МКП. Во втором разделе представлены результаты численных расчетов электронных зонных спектров для четырехкомпонентной СР на примере структуры, состоящей из $Al_xGa_{1-x}As$ и GaAs, для различных значений концентраций алюминия. В заключении сформулированы основные полученные результаты.

1. Дисперсионное уравнение: аналитическое решение

Наиболее распространенным подходом для определения электронных состояний в слоистых полупроводниковых структурах является приближение огибающей волновой функции (приближение эффективной массы) [33,34]. Основным преимуществом этого метода является относительная простота вычисления как объемных, так и поверхностных электронных состояний при использовании экспериментальных данных для параметров компонентов структуры. Кроме того, для периодических структур с многокомпонентными ЭЯ, объем численных расчетов достаточно мал и приводит к адекватным результаты.

Рассмотрим одномерную бесконечную СР, представленную на рис. 1. Она состоит из элементарных ячеек, каждая из которых содержит четыре слоя с соответствующими толщинами, ПБ и эффективными массами. В слоях A и A_1 с толщинами s_1 и s_2, потенциалы $V_A = V_{A_1} = 0$, а эффективная масса электронов равна m_A^*. В слоях B и C с толщинами t_1 и t_2, потенциалы V_B и $V_C = V_B + \Delta$, а эффективные массы электронов равны m_B^* и m_C^* соответственно. Для определенности будем считать, что $V_B < V_C$. Период каждой элементарной ячейки равен $\Lambda = s_1 + s_2 + t_1 + t_2$.

Стационарные состояния электронов в СР определяются из решений одномерного уравнения Шредингера [17] для каждого элемента в ЭЯ

$$-\frac{\hbar^2}{2m_i^*}\frac{d^2\psi_i(x)}{dx^2} + V_i(x)\psi_i(x) = E\psi_i(x), \tag{1}$$

где E, $\psi_i(x)$ — энергия и волновая функция электрона в каждом i-м слое элементарной ячейки $(i = A, B, A_1, C)$ соответственно [17]. Потенциал $V(x)$ имеет вид

$$V(x) = \sum_i V_i(x), \tag{2}$$

где суммирование проводится по всем элементарным ячейкам СР, а потенциал $V_j(x)$ в каждой ЭЯ может быть представлен как

$$V_i(x) = \begin{cases} 0, & \Lambda j < x < \Lambda j + s_1, \\ V_B, & \Lambda j + s_1 < x < \Lambda j + s_1 + t_1, \\ 0, & \Lambda j + s_1 + t_1 < x < \Lambda j + s_1 + t_1 + s_2, \\ V_C, & \Lambda(j+1) - t_2 < x < \Lambda(j+1). \end{cases} \tag{3}$$

Решение уравнения Шредингера (1) на отрезке $x \in [\Lambda j, \Lambda(j+1)]$ описывается функцией Блоха [17,18]:

$$\psi(x + \Lambda) = \exp(iK\Lambda)\psi(x), \tag{4}$$

где K — волновое число Блоха в СР.

Дисперсионное уравнение для нахождения спектра электронных состояний в рассматриваемой структуре получается стандартным образом из решения уравнения (1) с потенциалом (2), (3) путем обобщения

МКП для четырехкомпонентной элементарной ячейки с использованием граничных условий Бастарда [12] (см. Приложение).

Для СР с четырьмя слоями в периоде при энергиях из интервала $E \in (0, V_B)$ дисперсионное уравнение имеет следующий вид:

$$\cos K\Lambda = \operatorname{ch}\gamma_B t_1 \operatorname{ch}\gamma_C t_2 \cos\gamma_A(s_1+s_2)$$
$$+\left(\frac{\gamma_B^{*2}-\gamma_A^{*2}}{2\gamma_A^*\gamma_B^*}\operatorname{sh}\gamma_B t_1 \operatorname{ch}\gamma_C t_2 + \frac{\gamma_C^{*2}-\gamma_A^{*2}}{2\gamma_A^*\gamma_C^*}\operatorname{ch}\gamma_B t_1 \operatorname{sh}\gamma_C t_2\right)$$
$$\times \sin\gamma_A(s_1+s_2) + \frac{\operatorname{sh}\gamma_B t_1 \operatorname{sh}\gamma_C t_2}{4\gamma_A^{*2}\gamma_B^*\gamma_C^*}\Big\{-(\gamma_B^{*2}-\gamma_A^{*2})(\gamma_C^{*2}-\gamma_A^{*2})$$
$$\times\cos\gamma_A(s_1+s_2) + (\gamma_A^{*2}+\gamma_B^{*2})(\gamma_A^{*2}+\gamma_C^{*2})\cos\gamma_A(s_1-s_2)\Big\}, \tag{5}$$

где

$$\gamma_A = \hbar^{-1}\sqrt{2m_A^* E},\ \ \gamma_l = \hbar^{-1}\sqrt{2m_l^*(V_l - E)}$$

$(l = B, C)$ — волновые числа в ПЯ и барьерах соответственно, а $\gamma_i^* = \gamma_i/m_i^*$, $i = A, B, C$.

Если энергия электрона лежит в интервале $E \in (V_B, V_C)$, то γ_B является мнимой величиной:

$$\gamma_B = i\hbar^{-1}\sqrt{2m_B^*(E - V_B)} = i\beta_B,$$

а уравнение (5) приобретает вид

$$\cos K\Lambda = \cos\beta_B t_1 \operatorname{ch}\gamma_C t_2 \cos\gamma_A(s_1+s_2)$$
$$-\left(\frac{\beta_B^{*2}+\gamma_A^{*2}}{2\gamma_A^*\beta_B^*}\sin\beta_B t_1 \operatorname{ch}\gamma_C t_2 - \frac{\gamma_C^{*2}-\gamma_A^{*2}}{2\gamma_A^*\gamma_C^*}\cos\beta_B t_1 \operatorname{sh}\gamma_C t_2\right)$$
$$\times \sin\gamma_A(s_1+s_2) - \frac{\sin\beta_B t_1 \operatorname{sh}\gamma_C t_2}{4\gamma_A^{*2}\beta_B^*\gamma_C^*}\Big\{(\gamma_A^{*2}+\beta_B^{*2})(\gamma_A^{*2}-\gamma_C^{*2})$$
$$\times\cos\gamma_A(s_1+s_2) - (\gamma_A^{*2}-\beta_B^{*2})(\gamma_A^{*2}+\gamma_C^{*2})\cos\gamma_A(s_1-s_2)\Big\}, \tag{6}$$

Для энергий из интервала $E \in (V_C, \infty)$ параметр γ_C, тоже становится мнимым

$$\gamma_C = i\hbar^{-1}\sqrt{2m_C^*(E - V_C)} = i\beta_C,$$

а закон дисперсии задается уравнением:

$$\cos K\Lambda = \cos\beta_B t_1 \cos\beta_C t_2 \cos\gamma_A(s_1+s_2)$$
$$+\frac{\sin\beta_B t_1 \sin\beta_C t_2}{4\gamma_A^{*2}\beta_B^*\beta_C^*}(\Gamma_- - \Gamma_+) - \frac{1}{2\gamma_A^*}$$
$$\times\left(\frac{\gamma_A^{*2}+\beta_B^{*2}}{\beta_B^*}\sin\beta_B t_1 \cos\beta_C t_2 + \frac{\gamma_A^{*2}+\beta_C^{*2}}{\beta_C^*}\cos\beta_B t_1 \sin\beta_C t_2\right)$$
$$\times\sin\gamma_A(s_1+s_2), \tag{7}$$

где

$$\Gamma_\pm = (\gamma_A^{*2} \pm \beta_B^{*2})(\gamma_A^{*2} \pm \beta_C^{*2})\cos\gamma_A(s_1 \pm s_2).$$

Отметим, что уравнения (5)−(7) симметричны относительно одновременной замены всех пар параметров V, t и s, а именно $V_B \leftrightarrow V_C$, $t_1 \leftrightarrow t_2$, $s_1 \leftrightarrow s_2$. Это означает, что выбор элементарной ячейки не влияет на вид дисперсионных уравнений.

Если высоты ПБ в слоях одинаковы — $V_B = V_C = V$, то эффективные массы в них равны: $m_B^* = m_C^* = m^*$, а $\gamma_B = \gamma_C = \gamma = \hbar^{-1}\sqrt{2m^*(V-E)}$. Тогда уравнение (5) приобретает вид

$$\cos K\Lambda = \operatorname{ch}\gamma(t_1+t_2)\cos\gamma_A(s_1+s_2)$$
$$+\frac{(\gamma_A^{*2}+\gamma^{*2})^2}{2\gamma_A^{*2}\gamma^{*2}}\sin\gamma_A s_1 \sin\gamma_A s_2 \operatorname{sh}\gamma t_1 \operatorname{sh}\gamma t_2$$
$$+\frac{\gamma^{*2}-\gamma_A^{*2}}{2\gamma_A^*\gamma^*}\operatorname{sh}\gamma(t_1+t_2)\sin\gamma_A(s_1+s_2). \tag{8}$$

При $E > V$ для (8) имеем

$$\cos K\Lambda = \cos\beta(t_1+t_2)\cos\gamma_A(s_1+s_2)$$
$$+\frac{(\gamma_A^{*2}-\beta^{*2})^2}{2\gamma_A^{*2}\beta^{*2}}\sin\gamma_A s_1 \sin\gamma_A s_2 \sin\beta t_1 \sin\beta t_2$$
$$-\frac{\beta^{*2}+\gamma_A^{*2}}{2\gamma_A^*\beta^*}\sin\beta(t_1+t_2)\sin\gamma_A(s_1+s_2). \tag{9}$$

В случае, когда толщины слоев с ПЯ одинаковы, и одинаковы толщины слоев с ПБ, то период ЭЯ равен $\Lambda = 2(s+t)$. Тогда рассматриваемая модель выглядит аналогично классической МКП [16], но с удвоенным периодом, а соответствующее дисперсионное уравнение принимает вид

$$\cos K\Lambda = \operatorname{ch}2\gamma t\cos 2\gamma_A s + \frac{\gamma^{*2}-\gamma_A^{*2}}{2\gamma_A^*\gamma^*}\operatorname{sh}2\gamma t\sin 2\gamma_A^* s$$
$$+\frac{(\gamma_A^{*2}+\gamma^{*2})^2}{8\gamma_A^{*2}\gamma^{*2}}(\operatorname{ch}2\gamma t - 1)(1-\cos 2\gamma_A s). \tag{10}$$

Появление третьего слагаемого в (10) обусловлено тем, что элементарная ячейка в рассмотренной выше модели содержит два ПБ и две ПЯ. Это принципиальное отличие рассматриваемой модели от классической МКП. Однако от уравнения (5) можно перейти к уравнению МКП посредством предельного перехода: $V_B = V_C = V$, $t_1 = t$, $t_2 \to 0$, $s_1 = s_2 = s/2$. В результате этой процедуры получаем

$$\cos K\Lambda = \operatorname{ch}\gamma t\cos\gamma_A s + \frac{\gamma^{*2}-\gamma_A^{*2}}{2\gamma_A^*\gamma^*}\operatorname{sh}\gamma t\sin\gamma_A s, \tag{11}$$

что и соответствует дисперсионному уравнению МКП для простой СР с двумя элементами в ЭЯ с периодом $\Lambda = s + t$.

Следует отметить, что в случае структур с двухъямным и двухбарьерным базисами дисперсионные уравне-

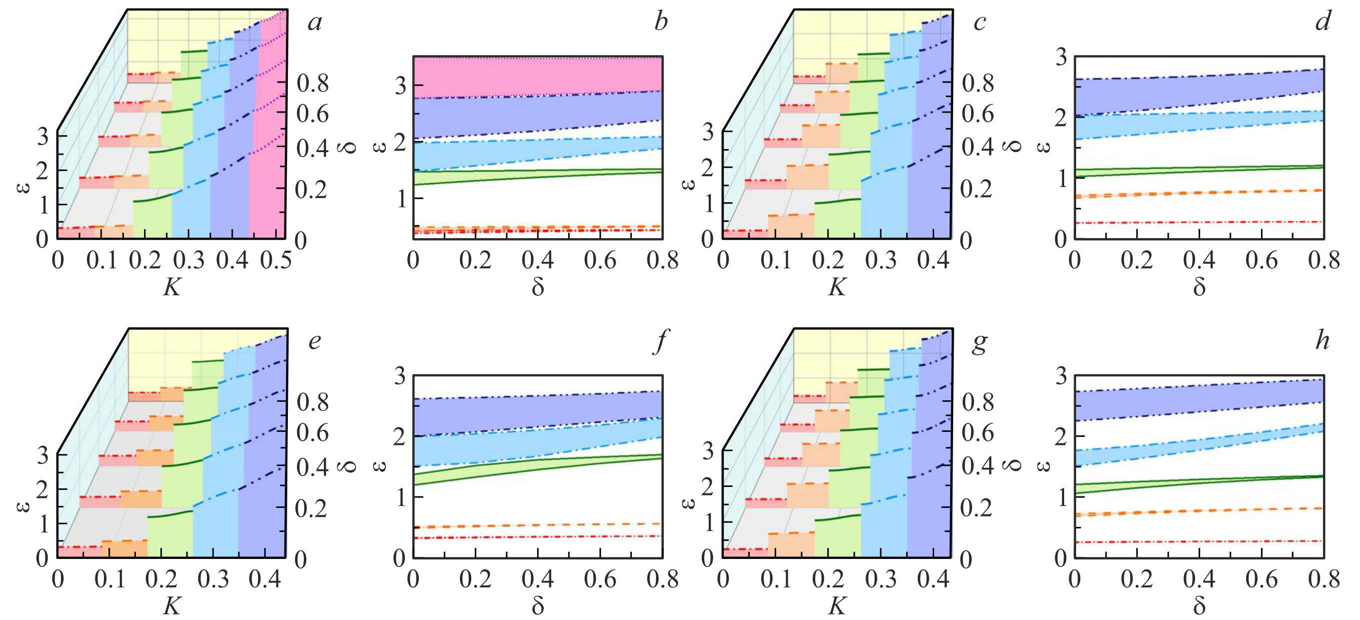

Рис. 2. Зависимость электронной зонной структуры от относительной разности высот ПБ δ (11) и от волнового числа K для следующих параметров СР: a, b — $s_1^* = s_2^* = t_1^* = t_2^* = 9$; c, d — $s_1^* = 4.5$, $s_2^* = 13.5$ и $t_1^* = t_2^* = 9$; e, f — $t_1^* = 4.5$, $t_2^* = 13.5$ и $s_1^* = s_2^* = 9$; g, h — $s_1^* = t_1^* = 4.5$ и $s_2^* = t_2^* = 13.5$.

ния (5)–(7) совпадают с предельным случаем, полученным в работе [29]. В следующем разделе приведены результаты численного анализа дисперсионных уравнений для СР с четырехкомпонентной элементарной ячейкой, образованной двумя ПЯ различной ширины и двумя ПБ различной ширины и высоты.

2. Дисперсионные уравнения: численные решения

В качестве примера рассмотрим четырехкомпонентную СР с периодом 100 Å, образованную двойным соединением GaAs (слои A и A_1) и тройными сплавами — $Al_{0.5}Ga_{0.5}As$ (слой B, в котором концентрация Al фиксирована), и $Al_xGa_{1-x}As$ (слой C), где x определяет концентрацию Al. Как было отмечено в работе [35], величины ПБ и эффективных масс электронов в слоях $Al_xGa_{1-x}As$ определяются эмпирическими соотношениями $V(x) = 944x$ meV и $m(x) = (0.067 + 0.083x)m_0$, где m_0 — масса свободного электрона. Для численных расчетов используем параметры соответствующих материалов из обзора [31] и статьи [35].

Исследуем зависимость зонной структуры такой СР при изменении ширин ПЯ и барьеров, а также высот ПБ для различных концентраций Al в слое C.

Для упрощения процедуры нахождения численных решений в уравнениях (5)–(7) целесообразно перейти к безразмерным переменным

$$s_{1,2}^* = \hbar^{-1}\sqrt{2m_0V_B}s_{1,2}, \quad t_{1,2}^* = \hbar^{-1}\sqrt{2m_0V_B}t_{1,2}$$

(детали см. в Приложении). В этих единицах период рассматриваемой СР равен 36.

Результаты решения дисперсионных уравнений (П6)–(П8), приведены на рис. 2, *a,c,e,g*, где показана зависимость энергии электронов (в безразмерных единицах) от волнового числа K при различных значениях относительных высот ПБ $\delta = (V_C - V_B)V_B^{-1}$ ($0 < \delta < 0.8$) для следующих случаев:

a — ширины ям и барьеров равны между собой ($s_1^* = s_2^* = t_1^* = t_2^* = 9$);

c — ширины барьеров равны между собой, а ширины ям различны ($s_1^* = 4.5$ и $s_2^* = 13.5$);

e — ширины ям равны между собой, а ширины барьеров различны ($t_1^* = 4.5$ и $t_2^* = 13.5$);

g — ширины ям и барьеров различны ($s_1^* = 4.5$, $s_2^* = 13.5$ и $t_1^* = 4.5$, $t_2^* = 13.5$).

(Соответствие безразмерных параметров решетки реальным размерам: $4.5 \to 12.5$ Å, $9 \to 25$ Å, $13.5 \to 37.5$ Å).

Из рис. 2, *a,c,e,g* видно, что при некоторых значениях K в энергетическом спектре электронов возникают щели, т.е. запрещенные зоны. Из результатов численного анализа следует, что в случае, когда ширины ям и барьеров одинаковы (рис. 2, *a*), в интервале энергий возникает шесть минизон. Если ямы и барьеры имеют различную ширину (рис. 2, *c,e,g*), то число разрешенных зон уменьшается до пяти.

Зависимость зонной структуры от относительной разности высот ПБ δ для различных ширин ПЯ и барьеров представлена на рис. 2, *b,d,f,h*. Видно, что с увеличением δ наблюдается сужение разрешенных зон в энергетическом спектре электронов. Это соответствует тому, что туннелирование электронов в такой структуре будет наблюдаться в более узком интервале энергий. Также отметим, что увеличение разности высот ПБ приводит к появлению новых разрешенных минизон с более высокими энергиями. Это способствует дополнительному туннелированию через ПБ в исследуемой структуре.

В случае, когда ширины ям и барьеров равны между собой, наблюдается слияние соседних минизон (1 и 2, 3 и 4, 5 и 6) при одинаковых высотах барьеров ($\delta = 0$), а также пятой и шестой зон при относительной разности высот барьеров $\delta = 0.8$ (рис. 2, b). Кроме того, слияние четвертой и пятой зон при $\delta = 0$ наблюдается для одинаковых ширин либо ям, либо барьеров. Отметим, что подобный результат был получен в работах [31,35] для двухъямных и двухбарьерных базисов (с ПБ равной высоты) в четырехкомпонентной СР. В случае, когда ширины ПЯ и барьеров различны (рис. 2, h), при любых δ наблюдаются широкие запрещенные зоны, которые не сливаются.

Заключение

В работе получены аналитические выражения для определения зонной структуры в электронных спектрах одномерных четырехкомпонентных СР, образованных двумя ПЯ различной ширины и двумя ПБ с различными ширинами и высотами. Проведен численный анализ этих дисперсионных уравнений для СР с составом $GaAs/Al_{0.5}Ga_{0.5}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$, из которого следует, что:

• Наибольшее число минизон будет появляться в случае, когда ширины ПЯ и ПБ одинаковы (рис. 2, *a,b*).

• В случае, когда ПЯ и барьеры различны, ширины запрещенных зон возрастают, а ширины минизон — уменьшаются (рис. 2, h).

• С ростом различия высот ПБ ширины минизон уменьшаются, а ширины запрещенных зон увеличиваются.

• При определенных значениях относительных ширин ПЯ некоторые соседние минизоны могут соприкасаться (рис. 2, *b,d,f*).

Отметим, что приведенные выше результаты были получены для относительных ширин ПЯ и барьеров и относительных высот ПБ. Это позволило представить результаты расчетов в общем виде. Используя данные для конкретных соединений [36], можно прогнозировать и моделировать электронные свойства заданных гетероструктур на основе полупроводниковых материалов с различными величинами ПБ.

Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда „Проведение фундаментальных научных исследований и поисковых научных исследований малыми отдельными научными группами“ за счет гранта № 25-22-00134, https://rscf.ru/project/25-22-00134/.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] А.П. Силин. УФН, **147**, 485 (1985). DOI: 10.3367/UFNr.0147.198511c.0485
[2] F.G. Bass, A.P. Tetervov. Phys. Repts., **140**, 237 (1986). DOI: 10.1016/0370-1573(86)90083-9
[3] Ф.Г. Басс, А.А. Булгаков, А.П. Тетервов. *Высокочастотные свойства полупроводников со сверхрешетками* (Наука, М., 1989)
[4] М. Херман. *Полупроводниковые сверхрешетки* (Мир, М., 1989)
[5] D.L. Smith, C. Maihiot. Rev. Mod. Phys., **62**, 173 (1990). DOI: 10.1103/RevModPhys.62.173
[6] Х. Кейси, М. Паниш. *Лазеры на гетероструктурах* (в 2-х томах) (Мир, М., 1981)
[7] E.L. Ivchenko, G.E. Pikus. *Superlattices and Other Heterostructures: Symmetry and Optical Phenomena. 2-nd Edition* (Springer, Berlin, 1997)
[8] A. Yariv, P. Yeh. Photonics: *Optical Electronics in Modern Communications* (Oxford University Press. NY. and Oxford, 2007)
[9] A. Wacker. Phys. Repts. **357**, 1 (2002). DOI: 10.1016/S0370-1573(01)00029-1
[10] R. Tsu. *Superlattice to Nanoelectronics* 2-nd Ed. (Elsevier, Amsterdam, 2011)
[11] S. Roy, C.K. Ghosh, S. Dey, A.K. Pal. *Solid State and Microelectronics Technology* (Bentham Books, Singapore, 2023)
[12] G. Bastard. *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures* (Les Editions de Physique, Les Ulis Cedex, France, 1988)
[13] J.H. Davies. *The physics of low-dimensional semiconductors. An introduction* (Cambridge University Press 1998)
[14] V.V. Mitin, V.K. Kochelap, M.A. Stroscio. *Quantum Heterostructures: Microelectronics and Optoelectronics* (Cambridge University Press, 1999)
[15] E.L. Ivchenko. *Optical Spectroscopy of Semiconductor Nanostructures* (Alpha Science, Harrow, 2005)
[16] R. de L. Kronig, W.G. Penney. Proc. R. Soc. London, Ser. A., **130**, 499 (1931). DOI: 10.1098/rspa.1931.0019
[17] В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. *Физика полупроводников* (Наука, М., 1990)
[18] Н. Ашкрофт, Н. Мермин. *Физика твердого тела* (Мир, М., 1997)
[19] T.B. Smith, A. Principi. J. Phys.: Condens. Matter, **32**, 055502 (2020). DOI: 10.1088/1361-648X/ab4d67
[20] I. Guarneri. J. Phys. A: Math. Theor., **55**, 424008 (2022). DOI: 10.1088/1751-8121/ac9356
[21] U. Smilansky. J. Phys. A: Math. Theor., **55**, 424007 (2022). DOI: 10.1088/1751-8121/ac9357
[22] T. Li, H. Chen, K. Wang, Yi. Hao, L. Zhang, K. Watanabe, T. Taniguchi, X. Hong. Phys. Rev. Lett., **132**, 056204 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevLett.132.056204

[23] L. Esaki, L.L. Chang, E.E. Mendez. Jpn. J. Appl. Phys., **20**, L529 (1981). DOI: 10.1143/JJAP.20.L529
[24] D.W.L. Sprung, L.W.A. Vanderspek, W. Van Dijk, J. Martorell, C. Pacher. Phys. Rev. B, **77**, 035333 (2008). DOI: 10.1103/PhysRevB.77.035333
[25] J.J. Alvarado-Goytia, R. Rodríguez-González, J.C. Martínez-Orozco, I. Rodríguez-Vargas. Scientific Reports, 12, 832 (2022). DOI: 10.1038/s41598-021-04690-x
[26] M. Coquelin, C. Pacher, M. Kast, G. Strasser, E. Gornik. Phys. Stat. Sol. (b), **243**, 3692 (2006). DOI: 10.1002/pssb.200642246
[27] J.P. Ruz-Cuen, J.C. Gutiérrez-Vega. J. Opt. Soc. Am. B., **38**, 2742 (2021). DOI: 10.1364/JOSAB.424431
[28] B. Djafari-Rouhani, L. Dobrzynski. Sol. St. Comms., **62**, 609 (1987). DOI: 10.1016/0038-1098(87)90200-6
[29] E.H. El Boudouti, B. Djafari-Rohani, A. Akjoju, L. Dobrzynski, R. Kucharczyk, M. Steslicka. Phys. Rev. B, **56**, 9603 (1997). DOI: 10.1103/PhysRevB.56.9603
[30] W.J. Hsueh, J.C. Lin, H.C. Chen. J. Phys.: Condens. Matter, **19**, 266007 (2007). DOI: 10.1088/0953-8984/19/26/266007
[31] M. Steslicka, R. Kucharczyk, A. Akjouj, B. Djafari-Rouhani, L. Dobrzynski, S.G. Davidson. Surf. Sci. Repts., **47**, 93 (2002). DOI: 10.1016/S0167-5729(02)00052-3
[32] F.M. Peeters, P. Vasilopoulos, Appl. Phys. Lett. **55**, 1106 (1989). DOI: 10.1063/1.101671
[33] G. Bastard. Phys. Rev. B, **25**, 7584 (1982). DOI: 10.1103/PhysRevB.25.7584
[34] M. Altarelli. *Band Structure, Impurities and Excitons in Superlattices.* In: G. Allan, M. Lannoo, G. Bastard, M. Voos, N. Boccara (eds). *Heterojunctions and Semiconductor Superlattices* (Springer, Berlin, Heidelberg, 1986), DOI: 10.1007/978-3-642-71010-0_2
[35] R. Kucharczyk, M. Steslicka, B. Brzostowski, B. Djafari-Rouhani. Physica E, **5**, 280 (2000). DOI: 10.1016/S1386-9477(99)00328-8
[36] I. Vurgaftman, J.R. Meyer, L.R. Ram-Mohan. J. Appl. Phys., **89**, 5815 (2001). DOI: 10.1063/1.1368156

Приложение

Рассмотрим область энергий из интервала $E \in (0, V_B)$. Для каждого слоя в элементарной ячейке на отрезке $x \in [\Lambda j, \Lambda(j+1)]$ общее решение уравнения (1) имеет вид

$$\psi_A(x) = a_{1j}\cos\gamma_A(x-\Lambda j) + a_{2j}\sin\gamma_A(x-\Lambda j),$$
$$x \in [\Lambda j, \Lambda j + s_1],$$
$$\psi_B(x) = b_{1j}\operatorname{ch}\gamma_B(x-\Lambda j) + b_{2j}\operatorname{sh}\gamma_B(x-\Lambda j),$$
$$x \in [\Lambda j + s_1, \Lambda j + s + t_1],$$
$$\psi_{A_1}(x) = a_{11j}\cos\gamma_A(x-\Lambda j) + a_{12j}\sin\gamma_A(x-\Lambda j),$$
$$x \in [\Lambda j + s_1 + t_1, \Lambda j + s_1 + s_2 + t_1],$$
$$\psi_C(x) = c_{1j}\operatorname{ch}\gamma_C\big(x-\Lambda(j+1)\big) + c_{2j}\operatorname{sh}\gamma_C\big(x-\Lambda(j+1)\big),$$
$$x \in [\Lambda(j+1) - t_2, \Lambda(j+1)]. \qquad (\text{П}1)$$

Произвольные постоянные a_{1j}, a_{2j}, b_{1j}, b_{2j}, a_{11j}, a_{12j}, c_{1j}, c_{2j} можно найти из граничных условий на соответствующих границах раздела. В качестве таковых граничных условий мы будем использовать условия Бастарда [12]:

$$\psi_C\big(\Lambda(j+1)\big) = \exp(iK\Lambda)\psi_A(\Lambda j),$$
$$m_C^{*-1}\psi'_C\big(\Lambda(j+1)\big) = \exp(iK\Lambda)m_A^{*-1}\psi'_A(\Lambda j),$$
$$\psi_A(\Lambda j + s_1) = \psi_B(\Lambda j + s_1),$$
$$m_A^{*-1}\psi'_A(\Lambda j + s_1) = m_B^{*-1}\psi'_B(\Lambda j + s_1),$$
$$\psi_B(\Lambda j + s_1 + t_1) = \psi_{A_1}(\Lambda j + s_1 + t_1),$$
$$m_B^{*-1}\psi'_B(\Lambda j + s_1 + t_1) = m_A^{*-1}\psi'_{A_1}(\Lambda j + s_1 + t_1),$$
$$\psi_{A_1}(\Lambda j + s_1 + s_2 + t_1) = \psi_C\big(\Lambda(j+1) - t_2\big),$$
$$m_A^{*-1}\psi'_{A_1}(\Lambda j + s_1 + s_2 + t_1) = m_C^{*-1}\psi'_C\big(\Lambda(j+1) - t_2\big). \qquad (\text{П}2)$$

Подставляя функции из (П1) в граничные условия (П2), получаем систему линейных алгебраических уравнений для определения констант a_j, b_j, c_j, d_j, f_j, g_j, m_j, r_j. В частности, из (П2) следует, что

$$c_{1j} = \exp(iK\Lambda)a_{1j}, \quad c_{2j} = (\gamma_A^*/\gamma_C^*)\exp(iK\Lambda)a_{2j}. \qquad (\text{П}3)$$

и эти соотношения позволяют уменьшить число уравнений для определения констант a_j, b_j, c_j, d_j, f_j, g_j, m_j, r_j. В результате после элементарных преобразований получим однородную систему из шести линейных алгебраических уравнений:

$$\begin{cases} a_{1j}\cos\gamma_A s_1 + a_{2j}\sin\gamma_A s_1 - b_{1j}\operatorname{ch}\gamma_B s_1 - b_{2j}\operatorname{sh}\gamma_B s_1 = 0, \\ -a_{1j}\gamma_A^*\sin\gamma_A s_1 + a_{2j}\gamma_A^*\cos\gamma_A s_1 \\ \qquad - b_{1j}\gamma_B^*\operatorname{sh}\gamma_B s_1 - b_{2j}\gamma_B^*\operatorname{ch}\gamma_B s_1 = 0, \\ -a_{1j}\exp(iK\Lambda)\operatorname{ch}\gamma_C t_2 + a_{2j}\exp(iK\Lambda)(\gamma_A^*/\gamma_C^*)\operatorname{sh}\gamma_C t_2 \\ \quad + a_{11j}\cos\gamma_A(s_1+s_2+t_1) + a_{12j}\sin\gamma_A(s_1+s_2+t_1) = 0, \\ a_{1j}\gamma_C^*\operatorname{sh}\gamma_C t_2 - a_{2j}\gamma_A^*\operatorname{ch}\gamma_C t_2 - a_{11j}\gamma_A^*\exp(iK\Lambda)\sin\gamma_A \\ \quad \times(s_1+s_2+t_1) + a_{12j}\gamma_A^*\exp(-iK\Lambda)\cos\gamma_A(s_1+s_2+t_1) = 0, \\ b_{1j}\operatorname{ch}\gamma_B(s_1+t_1) + b_{2j}\operatorname{sh}\gamma_B(s_1+t_1) \\ \qquad + a_{11j}\cos\gamma_A(s_1+t_1) - a_{12j}\sin\gamma_A(s_1+t_1) = 0, \\ b_{1j}\gamma_B^*\operatorname{sh}\gamma_B(s_1+t_1) + b_{2j}\gamma_B^*\operatorname{ch}\gamma_B(s_1+t_1) \\ \qquad + a_{11j}\gamma_A^*\sin\gamma_A(s_1+t_1) - a_{12j}\gamma_A^*\cos\gamma_A(s_1+t_1) = 0, \end{cases} \qquad (\text{П}4)$$

причем эта система уравнений имеет нетривиальные решения, если определитель матрицы ее коэффициентов равняется нулю. Этот определитель можно представить в виде суммы

$$\Delta = \sum_{i=1}^{5}\Delta_i,$$

где каждое из слагаемых Δ_i определяется следующими выражениями:

$$\Delta_1 = -(\gamma_A^{*4}/\gamma_C^*)\operatorname{sh}\gamma_B t_1\operatorname{sh}\gamma_C t_2\sin\gamma_A s_1\sin\gamma_A s_2,$$

$$\begin{aligned}\Delta_2 = {} & (\gamma_A^{*3}/\gamma_C^*)(\gamma_C^* \operatorname{sh}\gamma_B t_1 \operatorname{ch}\gamma_C t_2 + \gamma_B^* \operatorname{ch}\gamma_B t_1 \operatorname{sh}\gamma_C t_2) \\ & \times (\sin\gamma_A s_1 \cos\gamma_A s_2 + \cos\gamma_A s_1 \sin\gamma_A s_2),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Delta_3 = {} & 2\gamma_A^{*2}\gamma_B^* \cos K\Lambda - (\gamma_A^{*2}/\gamma_C^*)\big((\gamma_B^{*2} + \gamma_C^{*2}) \operatorname{sh}\gamma_B t_1 \operatorname{sh}\gamma_C t_2 \\ & \times \cos\gamma_A s_1 \cos\gamma_A s_2 + 2\gamma_B^*\gamma_C^* \operatorname{ch}\gamma_B t_1 \operatorname{ch}\gamma_C t_2 \\ & \times (\cos\gamma_A s_1 \cos\gamma_A s_2 - \sin\gamma_A s_1 \sin\gamma_A s_2)\big),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Delta_4 = {} & -\gamma_A^*\gamma_B^*(\gamma_B^* \operatorname{sh}\gamma_B t_1 \operatorname{ch}\gamma_C t_2 + \gamma_C^* \operatorname{ch}\gamma_B t_1 \operatorname{sh}\gamma_C t_2) \\ & \times (\sin\gamma_A s_1 \cos\gamma_A s_2 + \cos\gamma_A s_1 + \cos\gamma_A s_1 \sin\gamma_A s_2),\end{aligned}$$

$$\Delta_5 = -\gamma_B^{*2}\gamma_C^* \operatorname{sh}\gamma_B t_1 \operatorname{sh}\gamma_C t_2 \sin\gamma_A s_1 \sin\gamma_A s_2. \quad (\text{П}5)$$

Решение уравнения $\Delta = 0$ определяет спектр электронов для энергий из интервала $E \in (0, V_B)$.

Для численных решений в уравнениях (5)−(7) удобно перейти к безразмерным переменным. Пусть $V_C = V_B + \Delta$, $E/V_B = \varepsilon$, $\delta = \Delta/V_B$, $m_l^* = \alpha_l m_0$, m_0 — масса свободного электрона, тогда для параметров, входящих в (5)−(7) получаем:

$$\gamma_j = \hbar^{-1}\sqrt{2m_0V_B}\sqrt{\alpha_j\varepsilon_j}, \quad \gamma_j^* = (\hbar m_0)^{-1}\sqrt{2m_0V_B}\sqrt{\varepsilon_j/\alpha_j},$$

$$s_{1,2}^* = \hbar^{-1}\sqrt{2m_0V_B}s_{1,2}, \quad t_{1,2}^* = \hbar^{-1}\sqrt{2m_0V_B}t_{1,2},$$

где

$$\varepsilon_j = \begin{cases} \varepsilon, & j = A, \\ (1-\varepsilon), & j = B, \\ (1+\delta-\varepsilon), & j = C. \end{cases}$$

После простых преобразований уравнения (5)−(7) в этих переменных примут вид:

I. Для $\varepsilon \in (0, 1)$:

$$\begin{aligned}\cos K\Lambda = {} & \operatorname{ch}\sqrt{\alpha_B\varepsilon_B}t_1^* \operatorname{ch}\sqrt{\alpha_C\varepsilon_C}t_2^* \cos\sqrt{\alpha_A\varepsilon}(s_1^* + s_2^*) \\ & + \frac{1}{2\sqrt{\alpha_A\varepsilon}}\bigg(\frac{\alpha_A - (\alpha_A+\alpha_B)\varepsilon}{\sqrt{\alpha_B\varepsilon_B}} \operatorname{sh}\sqrt{\alpha_B\varepsilon_B}t_1^* \operatorname{ch}\sqrt{\alpha_C\varepsilon_C}t_2^* \\ & + \frac{\alpha_A(1+\delta) - (\alpha_A+\alpha_B)\varepsilon}{\sqrt{\alpha_C\varepsilon_C}} \operatorname{ch}\sqrt{\alpha_B\varepsilon_B}t_1^* \operatorname{sh}\sqrt{\alpha_C\varepsilon_C}t_2^*\bigg) \\ & \times \sin\sqrt{\alpha_A\varepsilon}(s_1^* + s_2^*) - \frac{\operatorname{sh}\sqrt{\alpha_B\varepsilon_B}t_1^* \operatorname{sh}\sqrt{\alpha_C\varepsilon_C}t_2^*}{4\alpha_A\varepsilon\sqrt{\alpha_B\alpha_C\varepsilon_B\varepsilon_C}} \\ & \times \Big\{\big(\alpha_A - (\alpha_A+\alpha_B)\varepsilon\big)\big(\alpha_A(1+\delta) - (\alpha_A+\alpha_C)\varepsilon\big) \\ & \times \cos\sqrt{\alpha_A\varepsilon}(s_1^* + s_2^*) - \big(\alpha_A - (\alpha_A-\alpha_B)\varepsilon\big) \\ & \times \big(\alpha_A(1+\delta) - (\alpha_A-\alpha_C)\varepsilon\big) \cos\sqrt{\alpha_A\varepsilon}(s_1^* - s_2^*)\Big\}.\end{aligned} \quad (\text{П}6)$$

II. Для $\varepsilon \in (1, 1+\delta)$:

$$\begin{aligned}\cos K\Lambda = {} & \cos\sqrt{-\alpha_B\varepsilon_B}t_1^* \operatorname{ch}\sqrt{\alpha_C\varepsilon_C}t_2^* \cos\sqrt{\alpha_A\varepsilon}(s_1^* + s_2^*) \\ & + \frac{1}{2\sqrt{\alpha_A\varepsilon}}\bigg(\frac{\alpha_A - (\alpha_A+\alpha_B)\varepsilon}{\sqrt{-\alpha_B\varepsilon_B}} \sin\sqrt{-\alpha_B\varepsilon_B}t_1^* \operatorname{ch}\sqrt{\alpha_C\varepsilon_C}t_2^* \\ & + \frac{\alpha_A(1+\delta) - (\alpha_A+\alpha_C)\varepsilon}{\sqrt{\alpha_C\varepsilon_C}} \cos\sqrt{-\alpha_B\varepsilon_B}t_1^* \operatorname{sh}\sqrt{\alpha_C\varepsilon_C}t_2^*\bigg) \\ & \times \sin\sqrt{\alpha_A\varepsilon}(s_1^* + s_2^*) + \frac{\sin\sqrt{-\alpha_B\varepsilon_B}t_1^* \operatorname{sh}\sqrt{\alpha_C\varepsilon_C}t_2^*}{4\alpha_A\varepsilon\sqrt{-\alpha_B\alpha_C\varepsilon_B\varepsilon_C}} \\ & \times \Big\{\big((\alpha_A+\alpha_B)\varepsilon - \alpha_A\big)\big(\alpha_A(1+\delta) - (\alpha_A+\alpha_C)\varepsilon\big) \\ & \times \cos\sqrt{\alpha_A\varepsilon}(s_1^* + s_2^*) + \big(\alpha_A + (\alpha_B-\alpha_A)\varepsilon\big) \\ & \times \big(\alpha_A + (\alpha_B-\alpha_A)\varepsilon\big)\big(\alpha_A(1+\delta) - (\alpha_A-\alpha_C)\varepsilon\big) \\ & \times \cos\sqrt{\alpha_A\varepsilon}(s_1^* - s_2^*)\Big\}.\end{aligned} \quad (\text{П}7)$$

III. Для $\varepsilon \in (1+\delta, \infty)$:

$$\begin{aligned}\cos K\Lambda = {} & \cos\sqrt{-\alpha_B\varepsilon_B}t_1^* \cos\sqrt{-\alpha_C\varepsilon_C}t_2^* \cos\sqrt{\alpha_A\varepsilon}(s_1^* + s_2^*) \\ & - \frac{1}{2\sqrt{\alpha_A\varepsilon}}\bigg(\frac{(\alpha_A+\alpha_B)\varepsilon - \alpha_A}{\sqrt{-\alpha_B\varepsilon_B}} \sin\sqrt{-\alpha_B\varepsilon_B}t_1^* \cos\sqrt{-\alpha_C\varepsilon_C}t_2^* \\ & + \frac{(\alpha_A+\alpha_C)\varepsilon - \alpha_A(1+\delta)}{\sqrt{-\alpha_C\varepsilon_C}} \cos\sqrt{-\alpha_B\varepsilon_B}t_1^* \sin\sqrt{\alpha_C\varepsilon_C}t_2^*\bigg) \\ & \times \sin\sqrt{\alpha_A\varepsilon}(s_1^* + s_2^*) + \frac{\sin\sqrt{-\alpha_B\varepsilon_B}t_1^* \sin\sqrt{-\alpha_C\varepsilon_C}t_2^*}{4\alpha_A\varepsilon\sqrt{\alpha_B\alpha_C\varepsilon_B\varepsilon_C}} \\ & \times \Big\{\big(\alpha_A - (\alpha_A+\alpha_B)\varepsilon\big)\big((\alpha_A+\alpha_C)\varepsilon - \alpha_A(1+\delta)\big) \\ & \times \cos\sqrt{\alpha_A\varepsilon}(s_1^* + s_2^*) + \big(\alpha_A + (\alpha_B-\alpha_A)\varepsilon\big) \\ & \times \big(\alpha_A(1+\delta) + (\alpha_C-\alpha_A)\varepsilon\big) \cos\sqrt{\alpha_A\varepsilon}(s_1^* - s_2^*)\Big\}.\end{aligned} \quad (\text{П}8)$$

Аналогично для СР с равновысокими барьерами при учете соотношений $\varepsilon = E/V$, $m^* = \alpha m_0$, $m_A^* = \alpha_A m_0$, уравнения (8), (9) примут вид для энергий $\varepsilon \in (0, 1)$:

$$\begin{aligned}\cos K\Lambda = {} & \operatorname{ch}\sqrt{\alpha(1-\varepsilon)}(t_1^* + t_2^*) \cos\sqrt{\alpha_A\varepsilon}(s_1^* + s_2^*) \\ & + \frac{\big(\alpha_A + (\alpha-\alpha_A)\varepsilon\big)^2}{2\alpha_A\alpha\varepsilon(1-\varepsilon)} \operatorname{sh} t_1^*\sqrt{\alpha(1-\varepsilon)} \operatorname{sh} t_2^*\sqrt{\alpha(1-\varepsilon)} \\ & \times \sin s_1^*\sqrt{\alpha_A\varepsilon} \sin s_2^*\sqrt{\alpha_A\varepsilon} + \frac{(\alpha_A - (\alpha+\alpha_A)\varepsilon)}{2\sqrt{\alpha_A\alpha\varepsilon(1-\varepsilon)}} \\ & \times \operatorname{sh}\big((t_1^* + t_2^*)\sqrt{\alpha(1-\varepsilon)}\big) \sin\sqrt{\alpha_A\varepsilon}(s_1^* + s_2^*).\end{aligned} \quad (\text{П}9)$$

для энергий $\varepsilon \in (1, \infty)$:

$$\cos K\Lambda = \cos\sqrt{\alpha(\varepsilon-1)}(t_1^*+t_2^*)\cos\sqrt{\alpha_A\varepsilon}(s_1^*+s_2^*)$$
$$+\frac{\big(\alpha_A+(\alpha-\alpha_A)\varepsilon\big)^2}{2\alpha_A\alpha\varepsilon(\varepsilon-1)}\sin t_1^*\sqrt{\alpha(\varepsilon-1)}\sin t_2^*\sqrt{\alpha(\varepsilon-1)}$$
$$\times\sin s_1^*\sqrt{\alpha_A\varepsilon}\sin s_2^*\sqrt{\alpha_A\varepsilon}+\frac{\big(\alpha_A-(\alpha+\alpha_A)\varepsilon\big)}{2\sqrt{\alpha_A\alpha\varepsilon(\varepsilon-1)}}$$
$$\times\sin\big((t_1^*+t_2^*)\sqrt{\alpha(\varepsilon-1)}\big)\sin\sqrt{\alpha_A\varepsilon}(s_1^*+s_2^*). \quad (\text{П}10)$$