

01

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

© И.Е. Драгунов,<sup>1</sup> Е.А. Пилипенко,<sup>1</sup> Ю.А. Семенюк,<sup>1</sup> И.Л. Любчанский<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина,  
283048 Донецк, ДНР, Россия

<sup>2</sup> 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<sub>0,5</sub>Ga<sub>0,5</sub>As/GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As в зависимости от ширины 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 мультикомпо-

нентных 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 ширины 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

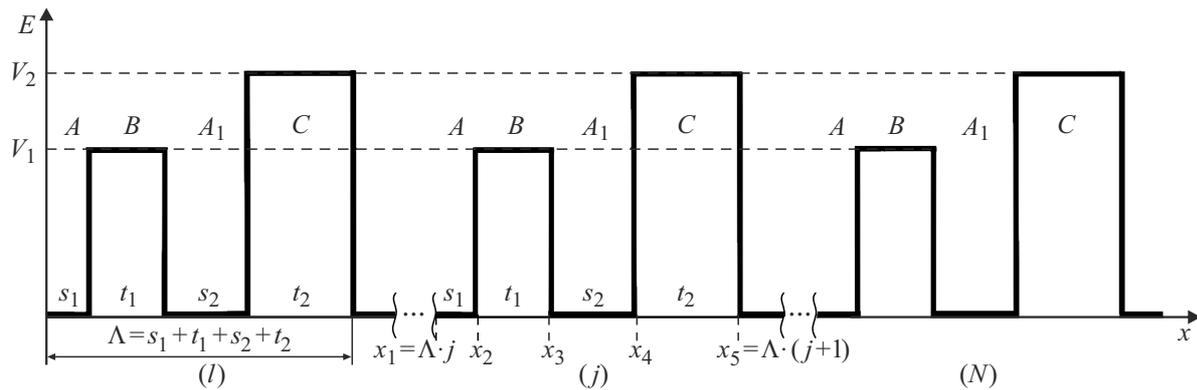


Рис. 1. Потенциальный профиль СР с элементарной ячейкой, состоящей из двух ПЯ и двух ПБ, где  $j$  — номер ЭЯ.

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 ширины 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 результатам.

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

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

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

$$V(x) = \sum_i V_i(x), \quad (2)$$

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

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

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

$$\psi(x + \Lambda) = \exp(iK\Lambda)\psi(x), \quad (4)$$

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:

$$\begin{aligned} \cos K\Lambda &= \text{ch } \gamma_B t_1 \text{ ch } \gamma_C t_2 \cos \gamma_A (s_1 + s_2) \\ &+ \left( \frac{\gamma_B^{*2} - \gamma_A^{*2}}{2\gamma_A^* \gamma_B^*} \text{sh } \gamma_B t_1 \text{ ch } \gamma_C t_2 + \frac{\gamma_C^{*2} - \gamma_A^{*2}}{2\gamma_A^* \gamma_C^*} \text{ch } \gamma_B t_1 \text{ sh } \gamma_C t_2 \right) \\ &\times \sin \gamma_A (s_1 + s_2) + \frac{\text{sh } \gamma_B t_1 \text{ sh } \gamma_C t_2}{4\gamma_A^{*2} \gamma_B^* \gamma_C^*} \left\{ -(\gamma_B^{*2} - \gamma_A^{*2})(\gamma_C^{*2} - \gamma_A^{*2}) \right. \\ &\times \cos \gamma_A (s_1 + s_2) + (\gamma_A^{*2} + \gamma_B^{*2})(\gamma_A^{*2} + \gamma_C^{*2}) \cos \gamma_A (s_1 - s_2) \left. \right\}, \end{aligned} \quad (5)$$

где

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

( $l = B, C$ ) — 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  $\gamma_B$  является мнимой величиной:

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

а уравнение (5) приобретает вид

$$\begin{aligned} \cos K\Lambda &= \cos \beta_B t_1 \text{ ch } \gamma_C t_2 \cos \gamma_A (s_1 + s_2) \\ &- \left( \frac{\beta_B^{*2} + \gamma_A^{*2}}{2\gamma_A^* \beta_B^*} \sin \beta_B t_1 \text{ ch } \gamma_C t_2 - \frac{\gamma_C^{*2} - \gamma_A^{*2}}{2\gamma_A^* \gamma_C^*} \cos \beta_B t_1 \text{ sh } \gamma_C t_2 \right) \\ &\times \sin \gamma_A (s_1 + s_2) - \frac{\sin \beta_B t_1 \text{ sh } \gamma_C t_2}{4\gamma_A^{*2} \beta_B^* \gamma_C^*} \left\{ (\gamma_A^{*2} + \beta_B^{*2})(\gamma_A^{*2} - \gamma_C^{*2}) \right. \\ &\times \cos \gamma_A (s_1 + s_2) - (\gamma_A^{*2} - \beta_B^{*2})(\gamma_A^{*2} + \gamma_C^{*2}) \cos \gamma_A (s_1 - s_2) \left. \right\}, \end{aligned} \quad (6)$$

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

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

а закон дисперсии задается уравнением:

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

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

$$\begin{aligned} \cos K\Lambda &= \text{ch } \gamma (t_1 + t_2) \cos \gamma_A (s_1 + s_2) \\ &+ \frac{(\gamma_A^{*2} + \gamma^{*2})^2}{2\gamma_A^* \gamma^{*2}} \sin \gamma_A s_1 \sin \gamma_A s_2 \text{sh } \gamma t_1 \text{sh } \gamma t_2 \\ &+ \frac{\gamma^{*2} - \gamma_A^{*2}}{2\gamma_A^* \gamma^*} \text{sh } \gamma (t_1 + t_2) \sin \gamma_A (s_1 + s_2). \end{aligned} \quad (8)$$

При  $E > V$  для (8) имеем

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

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

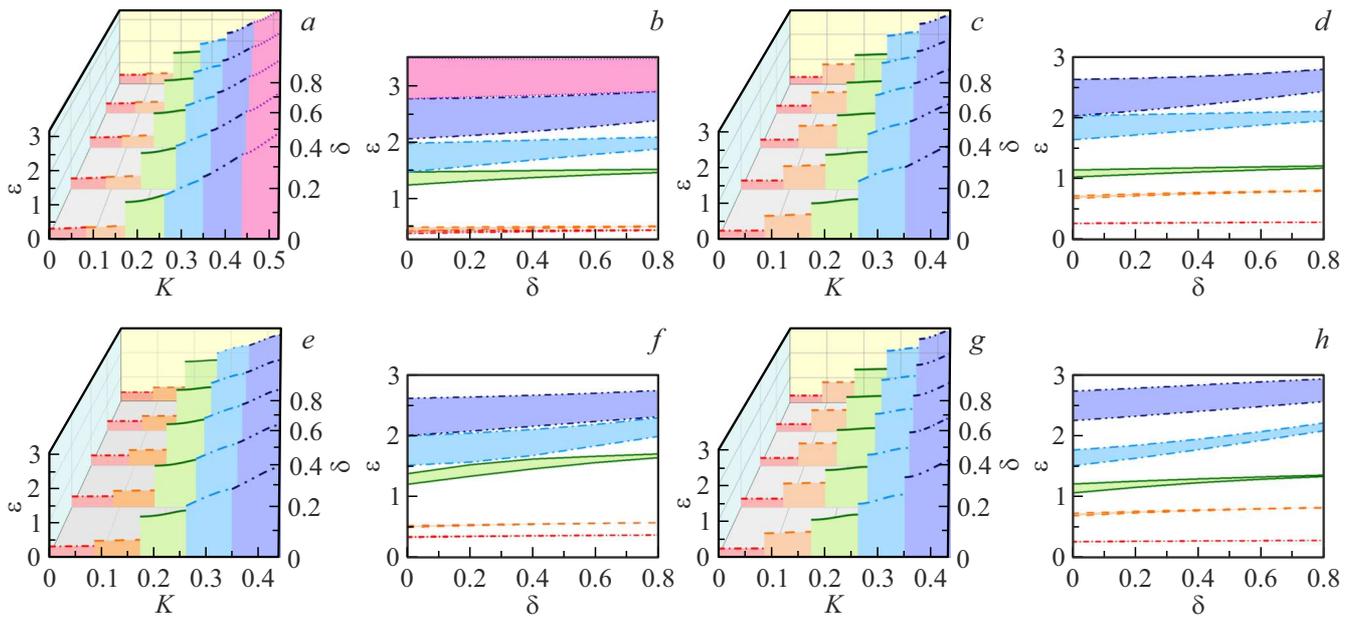
$$\begin{aligned} \cos K\Lambda &= \text{ch } 2\gamma t \cos 2\gamma_A s + \frac{\gamma^{*2} - \gamma_A^{*2}}{2\gamma_A^* \gamma^*} \text{sh } 2\gamma t \sin 2\gamma_A s \\ &+ \frac{(\gamma_A^{*2} + \gamma^{*2})^2}{8\gamma_A^{*2} \gamma^{*2}} (\text{ch } 2\gamma t - 1)(1 - \cos 2\gamma_A s). \end{aligned} \quad (10)$$

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:  $V_B = V_C = V$ ,  $t_1 = t$ ,  $t_2 \rightarrow 0$ ,  $s_1 = s_2 = s/2$ . В результате этой процедуры получаем

$$\cos K\Lambda = \text{ch } \gamma t \cos \gamma_A s + \frac{\gamma^{*2} - \gamma_A^{*2}}{2\gamma_A^* \gamma^*} \text{sh } \gamma t \sin \gamma_A s, \quad (11)$$

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  $\delta$  (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  $100 \text{ \AA}$ , образованную двойным соединением GaAs (слой A и  $A_1$ ) и тройными сплавами —  $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$  (слой B, в котором концентрация Al фиксирована), и  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  (слой C), где  $x$  определяет концентрацию Al. Как было отмечено в работе [35], величины ПБ и эффективных масс электронов в слоях  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  определяются эмпирическими соотношениями  $V(x) = 944x \text{ meV}$  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

$$s_{1,2}^* = \hbar^{-1} \sqrt{2m_0 V_B s_{1,2}}, \quad t_{1,2}^* = \hbar^{-1} \sqrt{2m_0 V_B t_{1,2}}$$

(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:  $4.5 \rightarrow 12.5 \text{ \AA}$ ,  $9 \rightarrow 25 \text{ \AA}$ ,  $13.5 \rightarrow 37.5 \text{ \AA}$ ).

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  $\delta$  для различных ширин ПЯ и барьеров представлена на рис. 2, *b, d, f, h*. Видно, что с увеличением  $\delta$  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  $\delta$  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<sub>0.5</sub>Ga<sub>0.5</sub>As/GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>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. Stroschio. *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. Akjouj, 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

$$\psi_A(x) = a_{1j} \cos \gamma_A(x - \Lambda_j) + a_{2j} \sin \gamma_A(x - \Lambda_j),$$

$$x \in [\Lambda_j, \Lambda_j + s_1],$$

$$\psi_B(x) = b_{1j} \operatorname{ch} \gamma_B(x - \Lambda_j) + b_{2j} \operatorname{sh} \gamma_B(x - \Lambda_j),$$

$$x \in [\Lambda_j + s_1, \Lambda_j + s_1 + t_1],$$

$$\psi_{A_1}(x) = a_{11j} \cos \gamma_A(x - \Lambda_j) + a_{12j} \sin \gamma_A(x - \Lambda_j),$$

$$x \in [\Lambda_j + s_1 + t_1, \Lambda_j + s_1 + s_2 + t_1],$$

$$\psi_C(x) = c_{1j} \operatorname{ch} \gamma_C(x - \Lambda(j+1)) + c_{2j} \operatorname{sh} \gamma_C(x - \Lambda(j+1)),$$

$$x \in [\Lambda(j+1) - t_2, \Lambda(j+1)]. \quad (\text{П1})$$

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]:

$$\psi_C(\Lambda(j+1)) = \exp(iK\Lambda)\psi_A(\Lambda_j),$$

$$m_C^{*-1}\psi'_C(\Lambda(j+1)) = \exp(iK\Lambda)m_A^{*-1}\psi'_A(\Lambda_j),$$

$$\psi_A(\Lambda_j + s_1) = \psi_B(\Lambda_j + s_1),$$

$$m_A^{*-1}\psi'_A(\Lambda_j + s_1) = m_B^{*-1}\psi'_B(\Lambda_j + s_1),$$

$$\psi_B(\Lambda_j + s_1 + t_1) = \psi_{A_1}(\Lambda_j + s_1 + t_1),$$

$$m_B^{*-1}\psi'_B(\Lambda_j + s_1 + t_1) = m_{A_1}^{*-1}\psi'_{A_1}(\Lambda_j + s_1 + t_1),$$

$$\psi_{A_1}(\Lambda_j + s_1 + s_2 + t_1) = \psi_C(\Lambda(j+1) - t_2),$$

$$m_{A_1}^{*-1}\psi'_{A_1}(\Lambda_j + s_1 + s_2 + t_1) = m_C^{*-1}\psi'_C(\Lambda(j+1) - t_2). \quad (\text{П2})$$

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

$$c_{1j} = \exp(iK\Lambda)a_{1j}, \quad c_{2j} = (\gamma_A^*/\gamma_C^*) \exp(iK\Lambda)a_{2j}. \quad (\text{П3})$$

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:

$$\left\{ \begin{aligned} & a_{1j} \cos \gamma_A s_1 + a_{2j} \sin \gamma_A s_1 - b_{1j} \operatorname{ch} \gamma_B s_1 - b_{2j} \operatorname{sh} \gamma_B s_1 = 0, \\ & - a_{1j} \gamma_A^* \sin \gamma_A s_1 + a_{2j} \gamma_A^* \cos \gamma_A s_1 \\ & \quad - b_{1j} \gamma_B^* \operatorname{sh} \gamma_B s_1 - b_{2j} \gamma_B^* \operatorname{ch} \gamma_B s_1 = 0, \\ & - a_{1j} \exp(iK\Lambda) \operatorname{ch} \gamma_C t_2 + a_{2j} \exp(iK\Lambda) (\gamma_A^*/\gamma_C^*) \operatorname{sh} \gamma_C t_2 \\ & \quad + a_{11j} \cos \gamma_A (s_1 + s_2 + t_1) + a_{12j} \sin \gamma_A (s_1 + s_2 + t_1) = 0, \\ & a_{1j} \gamma_C^* \operatorname{sh} \gamma_C t_2 - a_{2j} \gamma_A^* \operatorname{ch} \gamma_C t_2 - a_{11j} \gamma_A^* \exp(iK\Lambda) \sin \gamma_A \\ & \quad \times (s_1 + s_2 + t_1) + a_{12j} \gamma_A^* \exp(-iK\Lambda) \cos \gamma_A (s_1 + s_2 + t_1) = 0, \\ & b_{1j} \operatorname{ch} \gamma_B (s_1 + t_1) + b_{2j} \operatorname{sh} \gamma_B (s_1 + t_1) \\ & \quad + a_{11j} \cos \gamma_A (s_1 + t_1) - a_{12j} \sin \gamma_A (s_1 + t_1) = 0, \\ & b_{1j} \gamma_B^* \operatorname{sh} \gamma_B (s_1 + t_1) + b_{2j} \gamma_B^* \operatorname{ch} \gamma_B (s_1 + t_1) \\ & \quad + a_{11j} \gamma_A^* \sin \gamma_A (s_1 + t_1) - a_{12j} \gamma_A^* \cos \gamma_A (s_1 + t_1) = 0, \end{aligned} \right. \quad (\text{П4})$$

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  $\Delta_i$  определяется следующими выражениями:

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

$$\begin{aligned}\Delta_2 &= (\gamma_A^{*3}/\gamma_C^*)(\gamma_C^* \operatorname{sh} \gamma_{Bt_1} \operatorname{ch} \gamma_{Ct_2} + \gamma_B^* \operatorname{ch} \gamma_{Bt_1} \operatorname{sh} \gamma_{Ct_2}) \\ &\quad \times (\sin \gamma_{As_1} \cos \gamma_{As_2} + \cos \gamma_{As_1} \sin \gamma_{As_2}), \\ \Delta_3 &= 2\gamma_A^{*2}\gamma_B^* \cos K\Lambda - (\gamma_A^{*2}/\gamma_C^*)((\gamma_B^{*2} + \gamma_C^{*2}) \operatorname{sh} \gamma_{Bt_1} \operatorname{sh} \gamma_{Ct_2} \\ &\quad \times \cos \gamma_{As_1} \cos \gamma_{As_2} + 2\gamma_B^*\gamma_C^* \operatorname{ch} \gamma_{Bt_1} \operatorname{ch} \gamma_{Ct_2} \\ &\quad \times (\cos \gamma_{As_1} \cos \gamma_{As_2} - \sin \gamma_{As_1} \sin \gamma_{As_2})), \\ \Delta_4 &= -\gamma_A^*\gamma_B^*(\gamma_B^* \operatorname{sh} \gamma_{Bt_1} \operatorname{ch} \gamma_{Ct_2} + \gamma_C^* \operatorname{ch} \gamma_{Bt_1} \operatorname{sh} \gamma_{Ct_2}) \\ &\quad \times (\sin \gamma_{As_1} \cos \gamma_{As_2} + \cos \gamma_{As_1} + \cos \gamma_{As_1} \sin \gamma_{As_2}), \\ \Delta_5 &= -\gamma_B^{*2}\gamma_C^* \operatorname{sh} \gamma_{Bt_1} \operatorname{sh} \gamma_{Ct_2} \sin \gamma_{As_1} \sin \gamma_{As_2}. \quad (\text{П5})\end{aligned}$$

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  $V_C = V_B + \Delta$ ,  $E/V_B = \varepsilon$ ,  $\delta = \Delta/V_B$ ,  $m_i^* = \alpha_i m_0$ ,  $m_0$  — масса свободного электрона, тогда для параметров, входящих в (5)–(7) получаем:

$$\begin{aligned}\gamma_j &= \hbar^{-1} \sqrt{2m_0 V_B} \sqrt{\alpha_j \varepsilon_j}, \quad \gamma_j^* = (\hbar m_0)^{-1} \sqrt{2m_0 V_B} \sqrt{\varepsilon_j / \alpha_j}, \\ s_{1,2}^* &= \hbar^{-1} \sqrt{2m_0 V_B} s_{1,2}, \quad t_{1,2}^* = \hbar^{-1} \sqrt{2m_0 V_B} t_{1,2},\end{aligned}$$

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  $\varepsilon \in (0, 1)$ :

$$\begin{aligned}\cos K\Lambda &= \operatorname{ch} \sqrt{\alpha_B \varepsilon_B t_1^*} \operatorname{ch} \sqrt{\alpha_C \varepsilon_C t_2^*} \cos \sqrt{\alpha_A \varepsilon} (s_1^* + s_2^*) \\ &\quad + \frac{1}{2\sqrt{\alpha_A \varepsilon}} \left( \frac{\alpha_A - (\alpha_A + \alpha_B) \varepsilon}{\sqrt{\alpha_B \varepsilon_B}} \operatorname{sh} \sqrt{\alpha_B \varepsilon_B t_1^*} \operatorname{ch} \sqrt{\alpha_C \varepsilon_C t_2^*} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\alpha_A (1 + \delta) - (\alpha_A + \alpha_B) \varepsilon}{\sqrt{\alpha_C \varepsilon_C}} \operatorname{ch} \sqrt{\alpha_B \varepsilon_B t_1^*} \operatorname{sh} \sqrt{\alpha_C \varepsilon_C t_2^*} \right) \\ &\quad \times \sin \sqrt{\alpha_A \varepsilon} (s_1^* + s_2^*) - \frac{\operatorname{sh} \sqrt{\alpha_B \varepsilon_B t_1^*} \operatorname{sh} \sqrt{\alpha_C \varepsilon_C t_2^*}}{4\alpha_A \varepsilon \sqrt{\alpha_B \alpha_C \varepsilon_B \varepsilon_C}} \\ &\quad \times \left\{ (\alpha_A - (\alpha_A + \alpha_B) \varepsilon) (\alpha_A (1 + \delta) - (\alpha_A + \alpha_C) \varepsilon) \right. \\ &\quad \times \cos \sqrt{\alpha_A \varepsilon} (s_1^* + s_2^*) - (\alpha_A - (\alpha_A - \alpha_B) \varepsilon) \\ &\quad \left. \times (\alpha_A (1 + \delta) - (\alpha_A - \alpha_C) \varepsilon) \cos \sqrt{\alpha_A \varepsilon} (s_1^* - s_2^*) \right\}. \quad (\text{П6})\end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}\cos K\Lambda &= \cos \sqrt{-\alpha_B \varepsilon_B t_1^*} \operatorname{ch} \sqrt{\alpha_C \varepsilon_C t_2^*} \cos \sqrt{\alpha_A \varepsilon} (s_1^* + s_2^*) \\ &\quad + \frac{1}{2\sqrt{\alpha_A \varepsilon}} \left( \frac{\alpha_A - (\alpha_A + \alpha_B) \varepsilon}{\sqrt{-\alpha_B \varepsilon_B}} \sin \sqrt{-\alpha_B \varepsilon_B t_1^*} \operatorname{ch} \sqrt{\alpha_C \varepsilon_C t_2^*} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\alpha_A (1 + \delta) - (\alpha_A + \alpha_C) \varepsilon}{\sqrt{\alpha_C \varepsilon_C}} \cos \sqrt{-\alpha_B \varepsilon_B t_1^*} \operatorname{sh} \sqrt{\alpha_C \varepsilon_C t_2^*} \right) \\ &\quad \times \sin \sqrt{\alpha_A \varepsilon} (s_1^* + s_2^*) + \frac{\sin \sqrt{-\alpha_B \varepsilon_B t_1^*} \operatorname{sh} \sqrt{\alpha_C \varepsilon_C t_2^*}}{4\alpha_A \varepsilon \sqrt{-\alpha_B \alpha_C \varepsilon_B \varepsilon_C}} \\ &\quad \times \left\{ ((\alpha_A + \alpha_B) \varepsilon - \alpha_A) (\alpha_A (1 + \delta) - (\alpha_A + \alpha_C) \varepsilon) \right. \\ &\quad \times \cos \sqrt{\alpha_A \varepsilon} (s_1^* + s_2^*) + (\alpha_A + (\alpha_B - \alpha_A) \varepsilon) \\ &\quad \times (\alpha_A + (\alpha_B - \alpha_A) \varepsilon) (\alpha_A (1 + \delta) - (\alpha_A - \alpha_C) \varepsilon) \\ &\quad \left. \times \cos \sqrt{\alpha_A \varepsilon} (s_1^* - s_2^*) \right\}. \quad (\text{П7})\end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}\cos K\Lambda &= \cos \sqrt{-\alpha_B \varepsilon_B t_1^*} \cos \sqrt{-\alpha_C \varepsilon_C t_2^*} \cos \sqrt{\alpha_A \varepsilon} (s_1^* + s_2^*) \\ &\quad - \frac{1}{2\sqrt{\alpha_A \varepsilon}} \left( \frac{(\alpha_A + \alpha_B) \varepsilon - \alpha_A}{\sqrt{-\alpha_B \varepsilon_B}} \sin \sqrt{-\alpha_B \varepsilon_B t_1^*} \cos \sqrt{-\alpha_C \varepsilon_C t_2^*} \right. \\ &\quad \left. + \frac{(\alpha_A + \alpha_C) \varepsilon - \alpha_A (1 + \delta)}{\sqrt{-\alpha_C \varepsilon_C}} \cos \sqrt{-\alpha_B \varepsilon_B t_1^*} \sin \sqrt{\alpha_C \varepsilon_C t_2^*} \right) \\ &\quad \times \sin \sqrt{\alpha_A \varepsilon} (s_1^* + s_2^*) + \frac{\sin \sqrt{-\alpha_B \varepsilon_B t_1^*} \sin \sqrt{-\alpha_C \varepsilon_C t_2^*}}{4\alpha_A \varepsilon \sqrt{\alpha_B \alpha_C \varepsilon_B \varepsilon_C}} \\ &\quad \times \left\{ (\alpha_A - (\alpha_A + \alpha_B) \varepsilon) ((\alpha_A + \alpha_C) \varepsilon - \alpha_A (1 + \delta)) \right. \\ &\quad \times \cos \sqrt{\alpha_A \varepsilon} (s_1^* + s_2^*) + (\alpha_A + (\alpha_B - \alpha_A) \varepsilon) \\ &\quad \left. \times (\alpha_A (1 + \delta) + (\alpha_C - \alpha_A) \varepsilon) \cos \sqrt{\alpha_A \varepsilon} (s_1^* - s_2^*) \right\}. \quad (\text{П8})\end{aligned}$$

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  $\varepsilon \in (0, 1)$ :

$$\begin{aligned}\cos K\Lambda &= \operatorname{ch} \sqrt{\alpha(1 - \varepsilon)} (t_1^* + t_2^*) \cos \sqrt{\alpha_A \varepsilon} (s_1^* + s_2^*) \\ &\quad + \frac{(\alpha_A + (\alpha - \alpha_A) \varepsilon)^2}{2\alpha_A \alpha \varepsilon (1 - \varepsilon)} \operatorname{sh} t_1^* \sqrt{\alpha(1 - \varepsilon)} \operatorname{sh} t_2^* \sqrt{\alpha(1 - \varepsilon)} \\ &\quad \times \sin s_1^* \sqrt{\alpha_A \varepsilon} \sin s_2^* \sqrt{\alpha_A \varepsilon} + \frac{(\alpha_A - (\alpha + \alpha_A) \varepsilon)}{2\sqrt{\alpha_A \alpha \varepsilon} (1 - \varepsilon)} \\ &\quad \times \operatorname{sh} ((t_1^* + t_2^*) \sqrt{\alpha(1 - \varepsilon)}) \sin \sqrt{\alpha_A \varepsilon} (s_1^* + s_2^*). \quad (\text{П9})\end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}
 \cos K\Lambda &= \cos \sqrt{\alpha(\varepsilon - 1)}(t_1^* + t_2^*) \cos \sqrt{\alpha_A \varepsilon}(s_1^* + s_2^*) \\
 &+ \frac{(\alpha_A + (\alpha - \alpha_A)\varepsilon)^2}{2\alpha_A \alpha \varepsilon (\varepsilon - 1)} \sin t_1^* \sqrt{\alpha(\varepsilon - 1)} \sin t_2^* \sqrt{\alpha(\varepsilon - 1)} \\
 &\times \sin s_1^* \sqrt{\alpha_A \varepsilon} \sin s_2^* \sqrt{\alpha_A \varepsilon} + \frac{(\alpha_A - (\alpha + \alpha_A)\varepsilon)}{2\sqrt{\alpha_A \alpha \varepsilon (\varepsilon - 1)}} \\
 &\times \sin((t_1^* + t_2^*)\sqrt{\alpha(\varepsilon - 1)}) \sin \sqrt{\alpha_A \varepsilon}(s_1^* + s_2^*).
 \end{aligned}
 \tag{П10}$$