

# ЕЛЕКТРОННИЙ СПЕКТР У ВІДКРИТІЙ ДВОБАР'ЄРНІЙ НАНОСИСТЕМІ З ПЛАВНОЮ ПРОСТОРОВОЮ ЗАЛЕЖНІСТЮ ПОТЕНЦІАЛУ ТА ЕФЕКТИВНОЇ МАСИ

Ю. О. Сеті, М. В. Ткач

*Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича,  
вул. Коцюбинського, 2, Чернівці, 58012, Україна*

(Отримано 18 лютого 2018 р.; в остаточному вигляді — 05 червня 2018 р.)

У моделі плавних просторово-залежних ефективної маси та потенціальної енергії електрона з їхньою лінійною залежністю від координати у приграничних шарах між ямами та бар'єрами відкритої симетричної двобар'єрної резонансно-тунельної наноструктури отримано  $S$ -матрицю розсіювання. Досліджено вплив розміру приграничних шарів на резонансні енергії та ширини квазістаціонарних станів електрона. Встановлено, що збільшення розміру приграничного шару приводить до: i) високоенергетичного зміщення резонансних енергій усіх підбар'єрних станів, ii) зменшення резонансних ширин нижніх підбар'єрних квазістаціонарних станів, iii) зростання резонансних ширин верхніх підбар'єрних квазістаціонарних станів. Виконано порівняльний аналіз отриманих залежностей у досліджуваній моделі з результатами двох інших спрощених моделей наносистеми.

**Ключові слова:** просторово-залежна ефективна маса, просторово-залежний потенціальний профіль, резонансно-тунельна наноструктура,  $S$ -матриця розсіювання, квазістаціонарний стан.

DOI: <https://doi.org/10.30970/jps.22.3701>

PACS number(s): 72.10.-d, 73.21.-b, 03.65.Ca

## I. ВСТУП

Проблема коректного запису оператора кінетичної енергії в гамільтоніані системи з координато-залежною ефективною масою відома давно [1–4]. Її вивченню присвячено багато праць [5–7], у більшості з яких використовується ермітовий оператор кінетичної енергії у загальній формі  $T = -\hbar^2(m^\alpha \nabla m^\beta \nabla m^\gamma + m^\gamma \nabla m^\beta \nabla m^\alpha)/4$ , запропонований von Roos [8]. Оскільки в такому підході константи  $\alpha$ ,  $\beta$  та  $\gamma$  невизначені, хоча й задовольняють єдину умову  $\alpha + \beta + \gamma = -1$ , то це приводить до різноманіття неоднозначних форм запису — оператор кінетичної енергії з різними значеннями  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ . Для їх визначення застосовують різні математичні підходи. Зокрема, у підході Леві–Леблона [9] використано еквівалентний гамільтоніан, що містить оператор кінетичної енергії у формі БенДанієла–Дюка [1] та ефективний потенціал, залежний від  $m$ ,  $m'$  та  $m''$ , а також констант ( $\alpha$ ,  $\gamma$ ) як множників. У цьому формалізмі залишається й активно досліджується [10–15] проблема пошуку таких ефективних потенціалів, з якими є точні розв'язки рівняння Шредінгера.

Із появою та розвитком нанотехнологій актуальність теорії координато-залежної ефективної маси та потенціального рельєфу електрона в околах поверхонь контактних шарів наносистеми значно зросла. Зокрема, робочі параметри створених унікальних наноприладів — квантових каскадних лазерів та детекторів [16–19] — ще далекі від оптимальних, оскільки залишається чимало не з'ясованих властивостей їхніх основних робочих елементів, якими є плоскі багатшарові наногетеросистеми. Для розуміння фі-

зичних процесів, що відбуваються в базових елементах наноприладів, необхідна адекватна теорія електронного тунелювання крізь багатшарові резонансно-тунельні структури, яка вимагає застосування моделей із достатньо реалістичними потенціальним рельєфом і ефективною масою. З фізичних міркувань зрозуміло, що через недосконалість гетеромереж наносистеми в її приграничних шарах ефективна маса та потенціальна енергія електрона відрізняються від енергії та маси в обох контактних середовищах і в першому наближенні є лінійними функціями координати в межах таких шарів.

Цікаво зазначити, що хоча вплив плавної просторово-залежної ефективної маси квазічастинок на їхні спектри детально вивчали в багатьох теоретичних працях [20–24], однак у них не розглядали питання тунелювання крізь багатшарові резонансно-тунельні наноструктури, а досліджували точні чи наближенні розв'язки рівняння Шредінгера із заданими умовами задач залежностями потенціалів і мас від координат.

Водночас ще донедавна в переважній більшості теоретичних праць [25–27] електронне тунелювання крізь резонансно-тунельні структури вивчали на основі простої моделі стрибкоподібної зміни потенціального рельєфу та ефективної маси електрона на гетеромережах наносистеми. Лише в роботі [28] у моделі плавноміної ефективної маси електрона з лінійною залежністю від координати у приграничних шарах наносистеми та стрибкоподібної зміни на гетеромережах потенціального рельєфу на основі точних розв'язків рівняння Шредінгера досліджено вплив розміру приграничного шару на енергетичний спектр.

Метою пропонованої статті є побудова теорії ква-

зістаціонарних станів (КСС) електрона в моделі з плавними просторово-залежними ефективною масою та потенціальною енергією електрона у всіх приграничних шарах відкритої симетричної двобар'єрної резонансно-тунельної структури (ДБРТС).

## II. S-МАТРИЦЯ РОЗСИВАННЯ ДБРТС З ЛІНІЙНО-ЗАЛЕЖНИМИ ЕФЕКТИВНОЮ МАСОЮ ТА ПОТЕНЦІАЛЬНОЮ ЕНЕРГІЄЮ ЕЛЕКТРОНА У ПРИГРАНИЧНИХ ШАРАХ

Розглянуто відкриту плоску симетричну ДБРТС у декартовій системі координат із віссю  $z$ , перпендикулярною до границь поділу між ямами та бар'єрами наносистеми. Властивості спектральних параметрів КСС електрона, рух якого одномірний уздовж осі  $z$ , будемо вивчати в розширеній моделі I, яка враховує лінійну неперервну координатну залежність у приграничних шарах наносистеми не лише ефективною масою електрона (суцільна лінія на рис. 1,а)

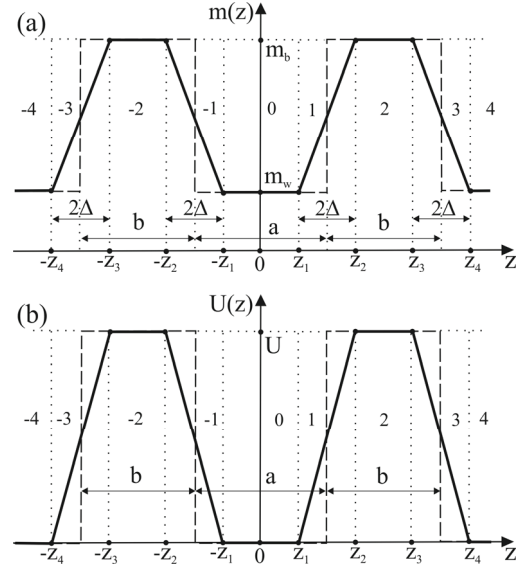


Рис. 1. Залежності від координати  $z$  ефективною масою електрона (а) та потенціальною енергією (б) у трьох моделях симетричної ДБРТС.

$$m(z) = m_w \begin{cases} 1, & 0 \leq |z| \leq z_1, \quad z_4 \leq |z| < \infty, \\ 1 + \delta m \frac{|z| - z_1}{2\Delta}, & z_1 \leq |z| \leq z_2, \\ \frac{m_b}{m_w}, & z_2 \leq |z| \leq z_3, \\ \frac{m_b}{m_w} - \delta m \frac{|z| - z_3}{2\Delta}, & z_3 \leq |z| \leq z_4, \end{cases} \quad (1)$$

а й потенціальною енергією (суцільна лінія на рис. 1,б)

$$U(z) = U \begin{cases} 0, & 0 \leq |z| \leq z_1, \quad z_4 \leq |z| < \infty, \\ \frac{|z| - z_1}{2\Delta}, & z_1 \leq |z| \leq z_2, \\ 1, & z_2 \leq |z| \leq z_3, \\ -\frac{|z| - z_3}{2\Delta}, & z_3 \leq |z| \leq z_4. \end{cases} \quad (2)$$

У формулах (1), (2):  $U$  — висота потенціального бар'єра,  $a$  — ширина квантової ями,  $2\Delta$  — ширина приграничної області,  $m_w$ ,  $m_b$  — ефективні маси електрона в ямах та бар'єрах ДБРТС відповідно та  $\delta m = (m_b - m_w)/m_w$ .

Для подальшого порівняння властивостей спектральних параметрів у розширеній моделі (I) будемо розглядати цю ж наносистему ще у двох простіших моделях. А саме, у моделі II [28] з неперервною ефек-

тивною масою (1), але зі сходиноподібною потенціальною енергією, що стрибкоподібно змінюється на межах між ямами та бар'єрами наносистеми (штрихова лінія на рис.1б)

$$U(z) = U \begin{cases} 0, & 0 < |z| < z_1 + \Delta, \quad z_3 + \Delta < |z| < \infty, \\ U, & z_1 + \Delta < |z| < z_3 + \Delta, \end{cases} \quad (3)$$

а також у найбільш поширеній у літературі найпростішій моделі III [25–27] сходиноподібних як потенціальною енергією (3), так і ефективною масою (штрихові лінії на рис. 1а, б)

$$m(z) = m_w \begin{cases} 1, & 0 < |z| < z_1 + \Delta, \quad z_3 + \Delta < |z| < \infty, \\ \frac{m_b}{m_w}, & z_1 + \Delta < |z| < z_3 + \Delta. \end{cases} \quad (4)$$

Ураховуючи координатну залежність ефективною масою та потенціальною енергією, у всіх трьох моделях для електрона справедливе одномірне рівняння Шре-

дінгера у формі БенДаніела–Дюка [1]

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m(z)} \frac{d}{dz} + U(z) \right] \Psi(z) = E \Psi(z), \quad (5)$$

розв'язки якого в моделях II та III відомі [26, 28], тому далі наведемо теорію лише для моделі I.

Рівняння (5) доцільно розв'язувати перейшовши до безрозмірної змінної  $\eta = z/a_0$  ( $a_0$  – постійна ґратки середовища–ями). Увівши безрозмірні величини: координати  $\eta_p = z_p/a_0$  ( $p = 1 - 4$ ), півширину приграничної області  $d = \Delta/a_0$ , енергії  $\mathcal{E} = E/Ry$ ,  $V = U/Ry$

(тут  $Ry$  – стала Рідберга),

$$U(\eta) = V \begin{cases} 0, & 0 \leq |\eta| \leq \eta_1, \quad \eta_4 \leq |\eta| < \infty, \\ \frac{|\eta| - \eta_1}{2d}, & \eta_1 \leq |\eta| \leq \eta_2, \\ 1, & \eta_2 \leq |\eta| \leq \eta_3, \\ -\frac{|\eta| - \eta_3}{2d}, & \eta_3 \leq |\eta| \leq \eta_4 \end{cases} \quad (6)$$

та ефективну масу

$$m(\eta) = \begin{cases} 1, & 0 \leq |\eta| \leq \eta_1, \quad \eta_4 \leq |\eta| < \infty, \\ 1 + \delta m \frac{|\eta| - \eta_1}{2d}, & \eta_1 \leq |\eta| \leq \eta_2, \\ \frac{m_b}{m_w}, & \eta_2 \leq |\eta| \leq \eta_3, \\ \frac{m_b}{m_w} - \delta m \frac{|\eta| - \eta_3}{2d}, & \eta_3 \leq |\eta| \leq \eta_4, \end{cases} \quad (7)$$

хвильову функцію  $\Psi(z)$  виразимо через знерозмірену функцію  $\Psi(\eta)$  співвідношенням

$$\Psi(z) = C \Psi(\eta) = C \sum_{p=0}^4 \Psi_p(\eta_p \leq |\eta| \leq \eta_{p+1}), \quad (\eta_0 = 0, \eta_5 = \infty). \quad (8)$$

Тоді з (5) для функції  $\Psi(\eta)$  отримуємо рівняння

$$\left[ \frac{1}{m(\eta)} \frac{d^2}{d\eta^2} - \frac{1}{m(\eta)^2} \frac{dm(\eta)}{d\eta} \frac{d}{d\eta} - \frac{2a_0^2 m_w Ry}{\hbar^2} (U(\eta) - \mathcal{E}) \right] \Psi(\eta) = 0, \quad (9)$$

розв'язки якого будемо шукати з урахуванням умов неперервності хвильової функції та потоку густини ймовірності на всіх гетеромежах ( $\eta_p, p = 1 - 4$ ) наносистеми

$$\begin{cases} \Psi_{p-1}(\eta_p) = \Psi_p(\eta_p), \\ \frac{d}{d\eta} \Psi_{p-1}(\eta)|_{\eta=\eta_p} = \frac{d}{d\eta} \Psi_p(\eta)|_{\eta=\eta_p} \end{cases} \quad (10)$$

та умови нормування

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{k'}(\eta)^* \Psi_k(\eta) d\eta = \delta(k - k'). \quad (11)$$

У тих областях симетричної ДБРТС, де потенціальна енергія та ефективна маса електрона стали, рівняння (9) еквівалентне системі рівнянь

$$\left[ \frac{d^2}{d\eta^2} + K_p^2 \right] \Psi_p(\eta) = 0, \quad (p = 0, 2, 4), \quad (12)$$

де

$$K_p = \sqrt{(-1)^{p/2}} \begin{cases} k = a_0 \hbar^{-1} \sqrt{2 m_w Ry \mathcal{E}}, & p = 0, 4, \\ \chi = a_0 \hbar^{-1} \sqrt{2 m_b Ry (V - \mathcal{E})}, & p = 2. \end{cases} \quad (13)$$

Точні симетричні (S) й антисиметричні (A) розв'язки рівнянь системи (12) відомі і мають вигляд:

$$\Psi_{p=0}^{S,A}(\eta) = \begin{cases} A_0^S \cos(k\eta), \\ A_0^A \sin(k\eta), \end{cases} \quad (14)$$

$$\Psi_{p=2}^{S,A}(\eta) = A_2^{S,A} e^{\chi\eta} + B_2^{S,A} e^{-\chi\eta}, \quad (15)$$

$$\Psi_{p=4}^{S,A}(\eta) = A_4^{S,A} (e^{-i k \eta} - S^{S,A} e^{i k \eta}), \quad (16)$$

де  $S$  – матриця розсіювання.

У приграничних шарах ДБРТС, де потенціальна енергія та ефективна маса електрона є лінійними функціями координати  $\eta$ , рівняння (9) не має точного розв'язку. Тому для його розв'язання неперервна лінійно-залежна функція  $U(\eta)$  в інтервалах  $\eta_1 \leq \eta \leq \eta_2$  та  $\eta_3 \leq \eta \leq \eta_4$  задається у вигляді суми  $N$  сталих кусково-неперервних функцій

$$\tilde{U}(\eta_p \leq \eta \leq \eta_{p+1}) = \sum_{j=1}^N U_{p,j} [\theta(\eta - \eta_{p,j}) - \theta(\eta - \eta_{p,j-1})], \quad (17)$$

( $p = 1, 3$ )

де

$$U_{p,j} = U(\eta_{p,j} - d/N), \quad \eta_{p,j} = \eta_p + j \frac{2d}{N},$$

$$\eta_{p,0} = \eta_p, \quad \eta_{p,N} = \eta_{p+1}.$$

Очевидно, що за великих значень  $N \gg 1$  неперервну функцію  $U(\eta)$  з потрібною точністю завжди можна замінити на кусково-неперервну функцію  $\tilde{U}(\eta)$ . Тоді з рівняння (9), як показано в додатку, отримуємо систему рівнянь

$$\left[ \xi_{p,j} \frac{d^2}{d\xi_{p,j}^2} - \frac{d}{d\xi_{p,j}} - \xi_{p,j}^2 \right] \Psi_{p,j}^{S,A}(\xi_{p,j}) = 0, \quad (18)$$

( $p = 1, 3; j = 1, \dots, N$ )

з новими знерозміреними змінними

$$\xi_{p,j}(\eta) = 2m(\eta) \left( \frac{m_w a_0^2 d^2 \text{Ry} (U_{p,j} - \mathcal{E})}{\delta m^2 \hbar^2} \right)^{1/3}. \quad (19)$$

За виконання умов неперервності типу (10) у кожній точці  $\eta_{p,j}$  рівняння системи (18) уже розв'язуються точно. Їхніми точними розв'язками є лінійні суперпозиції похідних від функцій Ейрі [29, 30]

$$\Psi_{p,j}^{S,A}(\xi_{p,j}) = A_{p,j}^{S,A} \text{Ai}'(\xi_{p,j}) + B_{p,j}^{S,A} \text{Bi}'(\xi_{p,j}), \quad (20)$$

( $p = 1, 3$ ).

Тепер із системи граничних умов (10), записавши її у матричному вигляді, отримуємо трансфер-матрицю системи [31]

$$T = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{pmatrix}, \quad (21)$$

матричні елементи якої визначають  $S$ -матриці

$$S^S = -\frac{t_{22}}{t_{21}}, \quad S^A = -\frac{t_{12}}{t_{11}}, \quad (22)$$

що дозволяють розрахувати [26] резонансні енергії (РЕ)  $E_n$  та резонансні ширини (РШ)  $\Gamma_n$  КСС електрона та дослідити їх еволюцію зі зміною розмірів приграничних шарів між ямами й бар'єрами симетричної ДБРТС.

### III. АНАЛІЗ ОТРИМАНИХ РЕЗУЛЬТАТІВ

Щоб виявити вплив приграничних шарів на спектральні параметри ( $E_n, \Gamma_n$ ) КСС електрона, розраховали їх у всіх трьох описаних вище моделях на прикладі відкритої симетричної ДБРТС з  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$  – ямами та  $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$  – бар'єрами з відомими фізичними параметрами [31]:  $m_w = 0.047 m_e$ ,  $m_b = 0.089 m_e$ ,  $U = 516 \text{ meV}$ ,  $m_e$  – маса вільного електрона. Така наносистема є основним робочим елементом активних зон, інжекторів та екстракторів квантових каскадних лазерів і детекторів [19], тому її геометричні параметри вибирали типовими для складників наночастин каскадів наноприладів у межах від декількох одиниць до десятка нанометрів.

На рис. 2,а,б наведено результати розрахованих у трьох моделях (I, II, III) залежностей РЕ ( $E_n$ ) і РШ ( $\Gamma_n$ ) КСС електрона від ширини квантової ями ( $a$ ) симетричної ДБРТС з ширинами обох потенціальних бар'єрів  $b = 2 \text{ nm}$ . З рис. 2 а, б видно, що в усіх трьох моделях зі збільшенням розміру квантової ями ( $a$ ) розраховані величини РЕ і РШ чотирьох нижніх КСС електрона зменшуються. Тому що в масштабах цих рисунків різниця між величинами відповідних спектральних параметрів у різних моделях практично не помітна, то на рис. 2 с-ф наведені залежності від величини  $a$  при двох розмірах приграничного шару  $\Delta = 0.3 \text{ nm}$ ,  $0.6 \text{ nm}$  різниць РЕ ( $\Delta E_n^{\text{I-III}} = E_n^{\text{I}} - E_n^{\text{II}}$ ,  $\Delta E_n^{\text{II-III}} = E_n^{\text{II}} - E_n^{\text{III}}$ ) і РШ ( $\Delta \Gamma_n^{\text{I-III}} = \Gamma_n^{\text{I}} - \Gamma_n^{\text{II}}$ ,  $\Delta \Gamma_n^{\text{II-III}} = \Gamma_n^{\text{II}} - \Gamma_n^{\text{III}}$ ) у вказаних моделях.

Із рис. 2,с-ф видно, що для довільного  $n$ -го стану різниці величин РЕ ( $\Delta E_n^{\text{I-III}}$  та  $\Delta E_n^{\text{II-III}}$ ) та РШ ( $\Delta \Gamma_n^{\text{I-III}}$  та  $\Delta \Gamma_n^{\text{II-III}}$ ) в обох парах моделей мають якісно подібні між собою залежності від  $a$ . Причому, незалежно від розмірів ( $\Delta$ ) приграничних шарів, функції  $\Delta E_n^{\text{I-III}}(a)$  та  $\Delta E_n^{\text{II-III}}(a)$  є сильно нелінійними з вираженими максимумами на кожній з них (рис. 2 с,d), а  $\Delta \Gamma_n^{\text{I-III}}(a)$  та  $\Delta \Gamma_n^{\text{II-III}}(a)$  є швидко спадними функціями. Максимальні різниці між величинами РЕ ( $\Delta E_n^{\text{I-III}}$ ,  $\Delta E_n^{\text{II-III}}$ ) та РШ ( $\Delta \Gamma_n^{\text{I-III}}$ ,  $\Delta \Gamma_n^{\text{II-III}}$ ) для  $n$ -го стану в обох парах моделей спостерігаються за таких розмірів ями  $a$ , коли  $n$ -тий електронний рівень перебуває у верхній частині підбар'єрної області енергій, і швидко зникають зі збільшенням  $a$ . У всьому інтервалі досліджуваної зміни розміру ями ( $1.5 \text{ nm} \leq a \leq 15 \text{ nm}$ ) ДБРТС абсолютні величини різниць відповідних спектральних параметрів між моделями I та III ( $\Delta E_n^{\text{I-III}}$ ,  $\Delta \Gamma_n^{\text{I-III}}$ ) більші за відповідні їм різниці між моделями II та III ( $\Delta E_n^{\text{II-III}}$ ,  $\Delta \Gamma_n^{\text{II-III}}$ ).

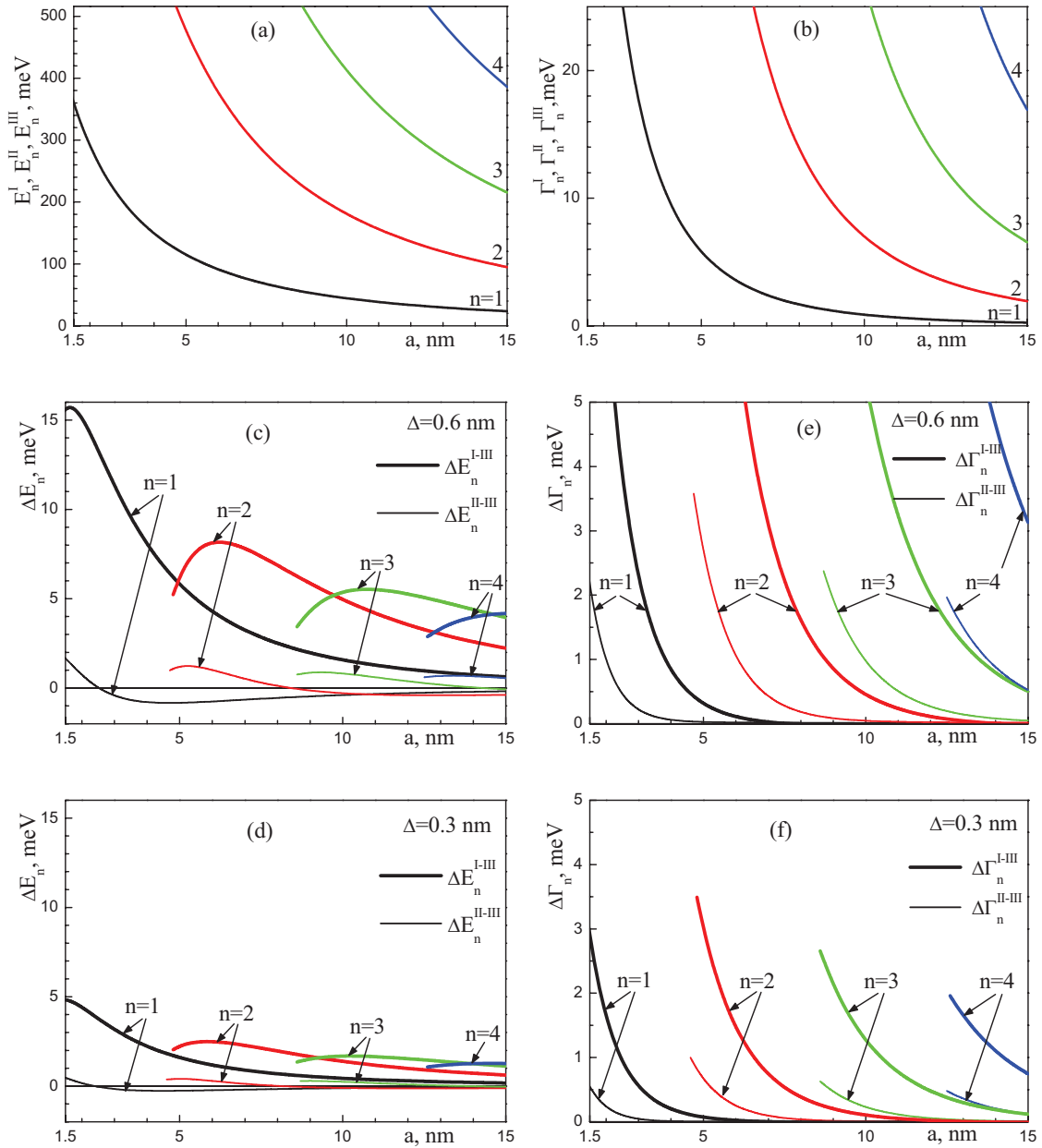


Рис. 2. Залежності резонансних енергій  $E_n^I, E_n^{II}, E_n^{III}$  (a) і резонансних ширин  $\Gamma_n^I, \Gamma_n^{II}, \Gamma_n^{III}$  (b) та різниць резонансних енергій  $\Delta E_n^{I-III}, \Delta E_n^{II-III}$  (c, d) і різниць резонансних ширин  $\Delta \Gamma_n^{I-III}, \Delta \Gamma_n^{II-III}$  (e, f) у різних моделях від розміру  $a$  квантової ями симетричної, якщо ДБРТС при  $b = 2$  nm,  $\Delta = 0.3$  nm,  $0.6$  nm.

У моделі I з плавними координато-залежними ефективною масою та потенціальною енергією електрона також виконували розрахунки РЕ та РШ двох електронних КСС залежно від розміру приграничного шару ( $\Delta$ ) симетричної ДБРТС ( $b = 2$  nm) при двох ширинах ями  $a = 7$  nm та  $a = 10$  nm. Отримані залежності наведені на рис. 3, де для порівняння також наведені залежності РЕ та РШ, розраховані в моделях II та III.

Із рис. 3 видно, що, згідно з фізичними міркуваннями, якщо  $\Delta = 0$ , то енергії  $E_n^I, E_n^{II}$  та ширини  $\Gamma_n^I, \Gamma_n^{II}$  у моделях I та II збігаються з відповідними значеннями енергій  $E_n^{III}$  і ширин  $\Gamma_n^{III}$  у сходинкоподібній моделі III. Збільшення розміру приграничного шару ( $\Delta$ ) за довільних ширин ями ( $a$ ) приводить лише до зрос-

тання величин РЕ  $E_n^I$  обох станів ( $n = 1, 2$ ) на відміну від енергій  $E_n^{II}$ , які, залежно від величини  $a$ , можуть як зменшуватися, так і збільшуватися зі зміною  $\Delta$ . У моделі I РШ  $\Gamma_n^I$  основного стану ( $n = 1$ ), залежно від ширини ями  $a$ , зі збільшенням величини  $\Delta$  може або спадати, або зростати, а РШ  $\Gamma_n^I$  збудженого стану ( $n = 2$ ) — тільки зростати. У моделі II збільшення розміру  $\Delta$  приграничного шару приводить лише до збільшення величин РШ  $\Gamma_n^{II}$  обох станів.

Із рис. 3 також видно, що незалежно від розміру ями, симетричної ДБРТС різниця між величинами РЕ ( $E_n^I, E_n^{II}$ ) і РШ ( $\Gamma_n^I, \Gamma_n^{II}$ ) довільного  $n$ -го стану зростає як зі збільшенням розміру приграничного шару ( $\Delta$ ), так і при фіксованому  $\Delta$  зі збільшенням  $n$ .

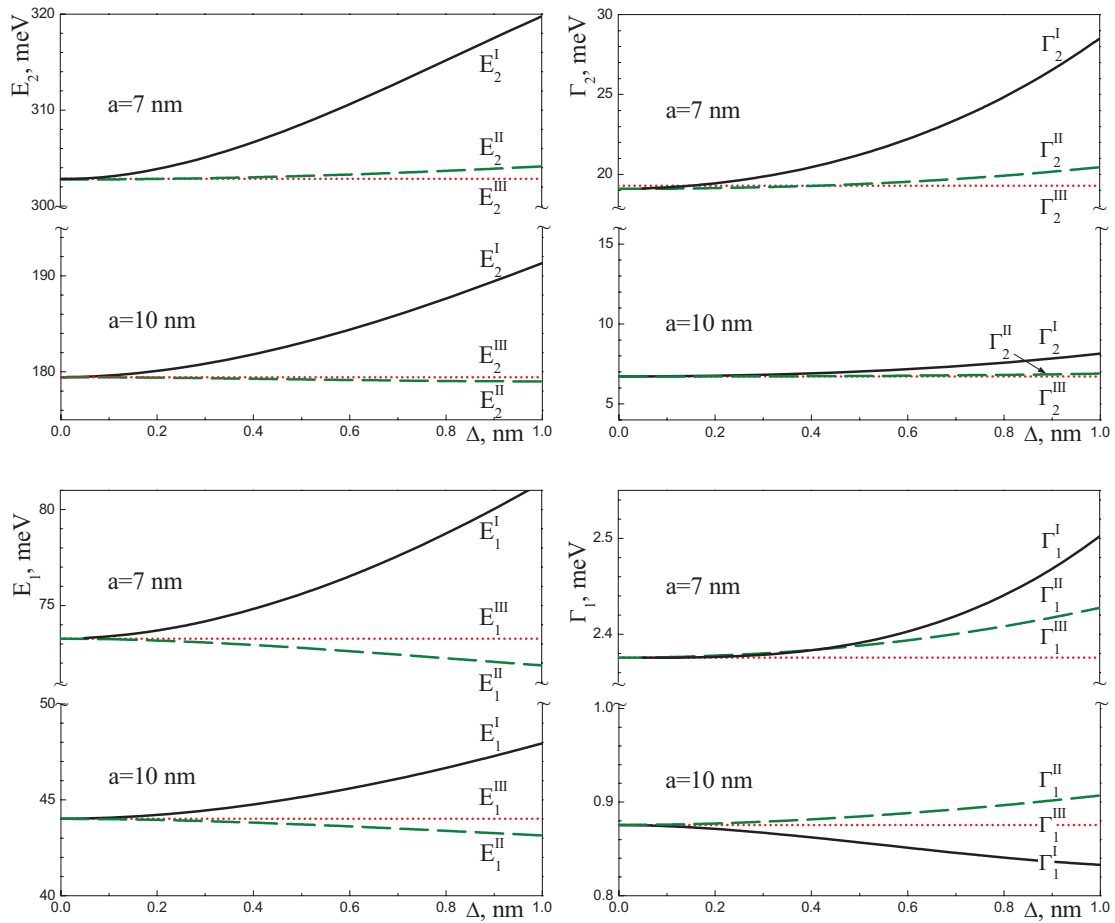


Рис. 3. Залежності РЕ ( $E_n^I, E_n^{II}, E_n^{III}$ ) та РШ ( $\Gamma_n^I, \Gamma_n^{II}, \Gamma_n^{III}$ ) перших двох КСС електрона від розміру ( $\Delta$ ) приграничного шару симетричної ДБРТС у трьох моделях за двох значень ширини квантової ями  $a = 7$  nm та  $a = 10$  nm.

Розрахунки показали, що в підбар'єрній області енергій, де відбуваються квантові переходи між електронними КСС у каскадах квантових касадних лазерів та детекторів [25–30], максимальні відносні різниці енергій  $(E_n^I - E_n^{II})/E_n^I$  та  $(E_n^I - E_n^{III})/E_n^I$  у найбільш реалістичній моделі I та у двох інших спрощених моделях II та III відповідно при  $\Delta = 0.6$  nm не перевищують 3%, а відносні різниці ширин  $(\Gamma_n^I - \Gamma_n^{II})/\Gamma_n^I$  та  $(\Gamma_n^I - \Gamma_n^{III})/\Gamma_n^I$  — 14% та 18% відповідно.

#### IV. ВИСНОВКИ

Уперше в моделі плавних просторово-залежних ефективної маси та потенціальної енергії електрона з їхньою лінійною залежністю від координати у приграничних шарах між ямами та бар'єрами відкритої симетричної ДБРТС знайдені розв'язки рівняння Шредінгера, S-матриця розсіювання та спектральні параметри електронних КСС.

Досліджено вплив розмірів приграничних шарів ДБРТС на резонансні енергії та ширини підбар'єрних КСС. Показано, що збільшення розмірів приграничних шарів приводять до високоенергетичних зміщень

резонансних енергій усіх станів, розширення резонансних ширин високоенергетичних і звуження ширин низькоенергетичних станів.

Показано, що в межах фізично коректних розмірів приграничних шарів у моделі плавних просторово-залежних і ефективної маси, і потенціальної енергії електрона, величини резонансних енергій відрізняються від аналогічних величин у двох інших спрощених моделях зі стрибкоподібною зміною на межах наносистеми потенціальної енергії та плавно-змінної або стрибкоподібної ефективної маси не більше ніж на 3%, а резонансні ширини — не більше ніж на 14% і 18% відповідно.

Отримані в запропонованій розширеній моделі симетричної ДБРТС результати дають ясну відповідь на питання: чому максимально спрощена модель стрибкоподібної зміни ефективної маси та потенціальної енергії електрона на межах між ямами та бар'єрами наносистеми, яка використовувалася в переважній більшості теоретичних робіт, у яких вивчали фізичні властивості багатшарових наногетеросистем, давала результати, що задовільно узгоджувалися з експериментом.

## ДОДАТОК

Узявши похідні від функції  $m(\eta)$  за змінною  $\eta$  у приграничних областях ДБРТС з лінійно-залежною ефективною масою рівняння (9) зводимо до вигляду

$$\left[ \frac{1}{m(\eta)} \frac{d^2}{d\eta^2} \mp \frac{\delta m}{2d m(\eta)^2} \frac{d}{d\eta} - \frac{2a_0^2 m_w \text{Ry}}{\hbar^2} (U(\eta) - \mathcal{E}) \right] \Psi_p^{S,A}(\eta) = 0, \quad (p = 1, 3). \quad (23)$$

Для розв'язання рівнянь (23) лінійно-залежна функція  $U(\eta)$  задається у вигляді суми  $N$  постійних кусково-неперервних функцій

$$\tilde{U}(\eta_p \leq \eta \leq \eta_{p+1}) = \sum_{j=1}^N U_{p,j} [\theta(\eta - \eta_{p,j}) - \theta(\eta - \eta_{p,j-1})], \quad (p = 1, 3) \quad (24)$$

де

$$U_{p,j} = U(\eta_{p,j} - d/N), \quad \eta_{p,j} = \eta_p + j \frac{2d}{N}, \quad \eta_{p,0} = \eta_p, \quad \eta_{p,N} = \eta_{p+1}.$$

Тоді рівняння (23) еквівалентні системам рівнянь

$$\left[ \frac{1}{m(\eta)} \frac{d^2}{d\eta^2} \mp \frac{\delta m}{2d m(\eta)^2} \frac{d}{d\eta} - \frac{2a_0^2 m_w \text{Ry}}{\hbar^2} (U_{p,j} - \mathcal{E}) \right] \Psi_{p,j}^{S,A}(\eta) = 0, \quad (p = 1, 3; j = 1 - N). \quad (25)$$

Зробивши перехід до нових безрозмірних змінних за правилом

$$\xi_{p,j}(\eta) = 2m(\eta) \left( \frac{m_w a_0^2 d^2 \text{Ry} (U_{p,j} - \mathcal{E})}{\delta m^2 \hbar^2} \right)^{1/3}, \quad (26)$$

взявши відповідні похідні

$$\frac{d}{d\eta} = \frac{d\xi_{p,j}(\eta)}{d\eta} \frac{d}{d\xi_{p,j}} = \pm \frac{\delta m}{d} \left( \frac{m_w a_0^2 d^2 \text{Ry} (U_{p,j} - \mathcal{E})}{\delta m^2 \hbar^2} \right)^{1/3} \frac{d}{d\xi_{p,j}}, \quad (27)$$

$$\frac{d^2}{d\eta^2} = \frac{\delta m^2}{d^2} \left( \frac{m_w a_0^2 d^2 \text{Ry} (U_{p,j} - \mathcal{E})}{\delta m^2 \hbar^2} \right)^{2/3} \frac{d^2}{d\xi_{p,j}^2} \quad (28)$$

та підставивши їх у рівняння (25), отримуємо

$$\left[ \xi_{p,j} \frac{d^2}{d\xi_{p,j}^2} - \frac{d}{d\xi_{p,j}} - \xi_{p,j}^2 \right] \Psi_{p,j}^{S,A}(\xi_{p,j}) = 0, \quad (p = 1, 3; j = 1, \dots, N). \quad (29)$$

- 
- |   |   |
|---|---|
| [1] D. J. BenDaniel, C. B. Duke, Phys. Rev. <b>152</b> , 683 (1966).                    | (2005).   |
| [2] T. Gora, F. Williams, Phys. Rev. <b>177</b> , 1179 (1969).                          | [13] A. Ganguly, M. V. Ioffe, L. M. Nieto, J. Phys. A <b>39</b> , 14659 (2006).                 |
| [3] G. Bastard, Phys. Rev. B <b>24</b> , 5693 (1981).                                   | [14] C.-S. Jia, L.-Z. Yi, Y. Sun, J. Math. Chem. <b>43</b> , 435 (2008).                        |
| [4] Q.-G. Zhu, H. Kroemer, Phys. Rev. B <b>27</b> , 3519 (1983).                        | [15] M. Chabab, A. El Batoul, M. Oulne, J. Math. Phys. <b>56</b> , 062111 (2015).               |
| [5] R. A. Morrow, K. R. Brownstein, Phys. Rev. B <b>30</b> , 678 (1984).                | [16] J. Faist <i>et al.</i> , Science <b>264</b> , 533 (1994).                                  |
| [6] Ch. Schnittler, M. Kirilov, Phys. Status Solidi (b) <b>176</b> , 143 (1993).        | [17] C. Gmachl, F. Capasso, D. L. Sivco, A.Y. Cho, Rep. Prog. Phys. <b>64</b> , 1533 (2001).    |
| [7] T. L. Li, K. J. Kuhn, Phys. Rev. B <b>47</b> , 12760 (1993).                        | [18] L.Gendron <i>et al.</i> , Appl. Phys. Lett. <b>85</b> , 2824 (2004).                       |
| [8] O. von Roos, Phys. Rev. B <b>27</b> , 7547(1983).                                   | [19] B. Schwarz <i>et al.</i> , Appl. Phys. Lett. <b>107</b> , 071104 (2015).                   |
| [9] J.-M. Levy-Leblond, Phys. Rev. A <b>52</b> , 1845 (1995).                           | [20] A. Sinha, Europhys. Lett. <b>96</b> , 20008 (2011).  |
| [10] B. Roy, P. Roy, J. Phys. A <b>35</b> , 3961 (2002).                                | [21] M. V. Ioffe, E. V. Kolevatova, D. N. Nishnianidze, Phys. Lett. A <b>380</b> , 3349 (2016). |
| [11] B. Gonul, O. Ozer, B. Gonul, F. Uzgun, Mod. Phys. Lett. A <b>17</b> , 2453 (2002). |   |
| [12] L. Jiang, L.-Z. Yi, C.-S. Jia, Phys. Lett. A <b>345</b> , 279                      |   |

- [22] M. Chabab, A. El Batoul, M. Oulne, *J. Math. Phys.* **56**, 062111 (2015).
- [23] B. Bagchi, A. Banerjee, C. Quesne, V. M. Tkachuk, *J. Phys. A* **38**, 2929 (2005).
- [24] V. M. Tkachuk, O. Voznyak, *Eur. Phys. J. Plus* **130**, 161 (2015).
- [25] C. Jirauschek, T. Kubis, *Appl. Phys. Rev.* **1**, 011307 (2014).
- [26] N. V. Tkach, Yu. A. Seti, *Fiz. Nizk. Temp.* **35**, 710 (2009); *Low Temp. Phys.* **35**, 556 (2009).
- [27] M. V. Tkach, Ju. O. Seti, I. V. Boyko, O. M. Voitsekhivska, *Rom. Rep. Phys.* **65**, 1443 (2013).
- [28] M. Tkach, Ju. Seti, O. Voitsekhivska, *Superlat. Microstruct.* **109**, 905 (2017).
- [29] M. Abramowitz, I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables* (Courier Corporation, 1964).
- [30] <http://functions.wolfram.com/Bessel-TypeFunctions/AiryAiPrime/13/01/01/>.
- [31] J. H. Davies, *The Physics of Low-Dimensional Semiconductors* (Cambridge University Press, 1998).

**ELECTRON SPECTRUM IN OPEN DOUBLE-BARRIER NANOSTRUCTURE WITH SMOOTH POSITION-DEPENDENT POTENTIAL AND EFFECTIVE MASS**

Ju. O. Seti, M. V. Tkach  
*Fedkovych Chernivtsi National University,*  
*2, Kotsyubinskogo St., Chernivtsi, UA-58012, Ukraine*  
*e-mail: ktj@chnu.edu.ua*

Solutions of Schrödinger equation are obtained and the scattering  $S$ -matrix is analytically calculated using the model of smooth position-dependent electron effective mass and potential energy, which linearly depend on the coordinate in the near-interface regions between the wells and the barriers of the plane open symmetrical double-barrier resonant tunnelling nanostructure. The effect of the size of the near-interface region on the resonance energies and widths of sub-barrier electron quasi-stationary states are studied for the nanostructure with  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$  wells and  $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$  barriers. It is established that the increase in the size of the near-interface region leads to: i) a high-energy shift of resonance energies of all sub-barrier states, ii) a bigger or smaller resonance width of the ground state, depending on the potential well width, iii) an increase in the resonance width of all excited sub-barrier states. The results obtained for the spectral parameters in the model under study are analyzed against those of other simplified models: the step-like potential energy and either abrupt or smooth effective mass at nanostructure interfaces. It is shown that in the interval of physically correct sizes of the near-interface regions in the models of smooth position-dependent effective mass and potential energy, the magnitudes of resonance energies differ from those obtained in the other two simplified models by not more than at 3% and the resonance widths — by not more than at 18%, respectively.