

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ИНФОРМАТИКА

DOI 10.15507/2079-6900.28.202602.115-129

Оригинальная статья

ISSN 2079-6900 (Print)

ISSN 2587-7496 (Online)

УДК 515.163

Моделирование зонной структуры одиночного гетероперехода

И. В. Бодрова¹, А. Б. Дюбуа¹, С. И. Кучерявый², А. С. Сафошкин¹¹ФГБОУ ВО «Рязанский государственный радиотехнический университет им. В.Ф. Уткина» (г. Рязань, Российская Федерация)²Обнинский институт атомной энергетики ИАТЭ НИЯУ МИФИ (г. Обнинск, Калужская обл., Российская Федерация)

Аннотация. Для описания кинетических процессов, протекающих в низкоразмерной квантовой структуре (например, электрон-электронных взаимодействий), необходим расчет распределения потенциала $V(z)$ и волновых функций $\Psi(z)$ её зоны проводимости. В качестве внешнего возмущения выступает потенциал экранирования, который включает в себя диэлектрическую функцию электронного газа. В большинстве работ потенциальная яма аппроксимируется прямоугольным профилем, однако попытка применения аналитических результатов оказалась неудачной. В работе приведено совместное самосогласованное решение системы дифференциальных уравнений Шредингера и Пуассона для расчета волновых функций и распределения потенциала одиночного умеренно легированного гетероперехода $AlGaAs(Si)/GaAs$. Решение этой системы необходимо для описания кинетических процессов в двумерном электронном газе, прежде всего, электрон-электронных взаимодействий, которые являются определяющими при низких температурах. В работе показано, что эти уравнения удобно решать в безразмерных величинах потенциала и волновых функций. Построение потенциального профиля квантовой ямы, т.е. решение системы уравнений Шредингера и Пуассона, является одной из важных задач при исследовании графеновых структур со схожей геометрией.

Ключевые слова: моделирование зонной структуры гетероперехода, совместное решение дифференциальных уравнений Шредингера и Пуассона, электрон-электронные взаимодействия

Для цитирования: Бодрова И.В., Дюбуа А.Б., Кучерявый С.И., Сафошкин А.С. Моделирование зонной структуры одиночного гетероперехода // *Журнал Средневолжского математического общества*. 2026. Т. 28, № 2. С. 115–129. DOI: 10.15507/2079-6900.28.202602.115-129



Об авторах:

Бодрова Ирина Валерьевна, кандидат технических наук, доцент кафедры высшей математики ФГБОУ ВО «Рязанский государственный радиотехнический университет им. В.Ф. Уткина» (390005, Россия, г. Рязань, ул. Гагарина, д. 59/1), ORCID: <http://orcid.org/0009-0003-6677-7461>, bodrovamilyutina@mail.ru

Дюбуа Александр Борисович, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры высшей математики ФГБОУ ВО «Рязанский государственный радиотехнический университет им. В.Ф. Уткина» (390005, Россия, г. Рязань, ул. Гагарина, д. 59/1), ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-5924-4128>, abd-69@mail.ru

Кучерявый Сергей Иванович, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей и специальной физики Обнинского института атомной энергетики ИАТЭ НИЯУ МИФИ (249039, г. Обнинск, Калужская область, тер. Студгородок, д. 1), ORCID: <http://orcid.org/0000-0001-6030-9286>, kucheryavyu@iate.obninsk.ru

Сафoshкин Алексей Сергеевич, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры высшей математики ФГБОУ ВО «Рязанский государственный радиотехнический университет им. В.Ф. Уткина» (390005, Россия, г. Рязань, ул. Гагарина, д. 59/1), ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-1419-979X>, safoshkin.a.s@rsreu.ru

Original article

MSC2020 57N10

Modeling of the band structure of a single heterojunction

I. V. Bodrova¹, A. B. Dubois¹, S. I. Kucheryavy², A. S. Safoshkin¹

¹*V.F. Utkin Ryazan State Radioengineering University (Ryazan, Russian Federation)*

²*Obninsk Institute for Nuclear Power Engineering (OINPE) NRNU MEPhI (Obninsk, Russian Federation)*

Abstract. To describe the kinetic processes occurring in a low-dimensional quantum structure (e.g., electron-electron interactions), it is necessary to calculate the potential distribution $V(z)$ and the wave functions $\Psi(z)$ of its conduction band. The screening potential, which includes the dielectric function of an electron gas, acts as an external perturbation. In most studies, the potential well is approximated by a rectangular profile, but attempts to apply analytical results were unsuccessful. The paper presents a joint self-consistent solution of the system of Schrodinger and Poisson differential equations for calculating wave functions and potential distribution of a single moderately doped heterojunction $AlGaAs(Si)/GaAs$. Solving this system is necessary to describe kinetic processes in a two-dimensional electron gas, primarily electron-electron interactions, which are dominant at low temperatures. The paper demonstrates that these equations can be conveniently solved for dimensionless potential and wave functions. Constructing a quantum well potential profile, i.e., solving the system of Schrodinger and Poisson equations, is an important task in studying graphene structures with similar geometries.

Keywords: modeling of the band structure of a heterojunction, joint solution of Schrodinger and Poisson differential equations, electron-electron interactions

For citation: I. V. Bodrova, A. B. Dubois, S. I. Kucheryavy, A. S. Safoshkin. Modeling of the band structure of a single heterojunction. *Zhurnal Srednevolzhskogo matematicheskogo obshchestva*. 28:2(2026), 115–129. DOI: 10.15507/2079-6900.28.202602.115-129

I. V. Bodrova, A. B. Dubois, S. I. Kucheryavy, A. S. Safoshkin. Modeling of the band structure of a single ...

About the authors:

Irina V. Bodrova, Ph.D. (Engineering), Associate Professor of the Department of Higher Mathematics, V.F. Utkin Ryazan State Radioengineering University (59/1 Gagarina St., Ryazan 390005, Russia), ORCID: <http://orcid.org/0009-0003-6677-7461>, bodrovamilyutina@mail.ru

Alexander B. Dubois, Ph.D. (Phys. and Math.), Associate Professor of the Department of Higher Mathematics, V.F. Utkin Ryazan State Radioengineering University (59/1 Gagarina St., Ryazan 390005, Russia), ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-5924-4128>, abd69@mail.ru

Sergei I. Kucheryavyy, Ph.D. (Phys. and Math.), Associate Professor of the Department of General and Special Physics, Obninsk Institute for Nuclear Power Engineering (OINPE) NRNU MEPhI (1 Studgorodok, Obninsk 249039, Kaluga region, Russia), ORCID: <http://orcid.org/0000-0001-6030-9286>, kucheryavyy@iate.obninsk.ru

Alexey S. Safoshkin, Ph.D. (Phys. and Math.), Associate Professor of the Department of Higher Mathematics, V.F. Utkin Ryazan State Radioengineering University (59/1 Gagarina St., Ryazan 390005, Russia), ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-1419-979X>, safoshkin.a.s@rsreu.ru

1. Введение

Изучение кинетических процессов в низкоразмерных квантовых структурах представляет собой одну из главных задач современной наноэлектроники. В ряде работ (например, [1] - [14]) по исследованию многочастичных взаимодействий была показана подавляющая роль электрон-электронных взаимодействий в гетероструктурах, которые при низких температурах (2-30 К) играют определяющую роль по сравнению с остальными процессами. В настоящей работе в качестве объекта исследований была принята гетероструктура $AlGaAs(Si)/GaAs$, однако приведенные расчеты позволяют определить кинетические зависимости и для других структур, например, $InAs/GaSb$. Кроме того, намечены пути решения задачи об электрон-электронных взаимодействиях в графеновых наноструктурах.

В настоящей работе проведены следующие исследования:

1. Расчет зонной структуры гетероперехода. С этой целью проведено совместное решение дифференциальных уравнений Пуассона и Шредингера при заданных начальных условиях: геометрия структуры и распределение объемного заряда.
2. Анализ экспериментально наблюдаемых осцилляций поперечного магнитосопротивления в квантующем магнитном поле (эффект Шубникова – де Гааза [12]). Данные осцилляции позволяют построить экспериментальные температурные и концентрационные зависимости электрон-электронных взаимодействий $\tau_{ee}^{exp}(T, n_s)$.
3. Построение теоретических зависимостей $\tau_{ee}^{th}(T, n_s)$ при гелиевых ($T \leq 15K$) температурах. Для умеренно легированного гетероперехода ($n_s \leq 10^{12} \text{см}^{-2}$) при заполнении одной подзоны размерного квантования решение кинетического уравнения Больцмана не представляет особых трудностей и может нуждаться лишь в некоторых математических уточнениях. В этом случае будет присутствовать лишь внутриподзонное электрон-электронное взаимодействие, т. е. $\tau_{ee}^{th}(T, n_s) \approx \tau_{ee}^{intra}(T, n_s)$. В сильно легированных гетеропереходах ($n_s > 10^{12} \text{см}^{-2}$) происходит заполнение нескольких подзон размерного квантования. В этом случае

наряду с внутриподзонным будет присутствовать межподзонное взаимодействие. Это приводит к появлению дополнительных каналов рассеяния, которое может ограничивать электронную подвижность в обеих подзонах [3].

В случае как одной заполненной подзоны, так и для нескольких подзон в интеграл столкновений в уравнении Больцмана входит тензор Фурье-образа полного потенциала экранирования $V_{tot}^{ijkl}(\mathbf{q}, \omega)$ [4], [5] как функция реакции электронной системы от внешнего возмущения. Непосредственное интегрирование уравнения Больцмана в случае двух заполненных подзон размерного квантования представляет собой достаточно громоздкую математическую задачу. В настоящей работе показано, что для корректной интерпретации особенностей экспериментально наблюдаемых температурных и концентрационных зависимостей времени электрон-электронной релаксации необходимы не только учет реального профиля гетероперехода [6] (что уже представляет определенные математические трудности), но и возможные переходы между подзонами с учетом их тонкой структуры [7–8].

2. Решение уравнений Шредингера и Пуассона

Исследуемая наноструктура представляет собой *i*-легированную тонкую пленку арсенида галлия *GaAs* толщиной 200 Å, в которой реализуется двумерный электронный газ (2DEG) с концентрацией электронов $n_s \sim 10^{12} \text{ см}^{-2}$ (рис. 2.1).

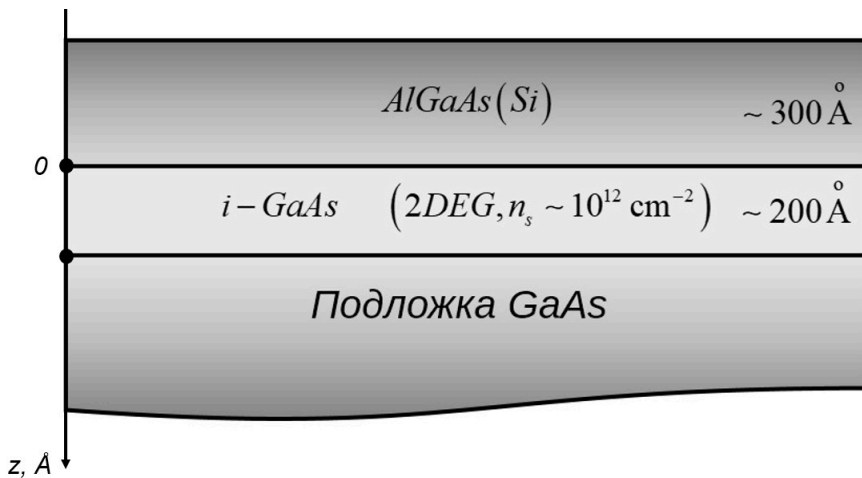


Рис. 2.1. Фрагмент геометрии наноструктуры

Fig. 2.1. Fragment of the nanostructure geometry

Рассмотрим систему дифференциальных уравнений Шредингера и Пуассона

$$E_F \left(-\frac{1}{k_F^2} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{E(z)}{E_F} \right) \psi_j(z) = \varepsilon_j \psi_j(z) \quad (2.1)$$

$$-\frac{d^2 V}{dz^2} = \frac{4\pi\rho(z)}{\chi} \quad (2.2)$$

с граничными условиями

$$\psi_j(\infty) = 0, \quad E(\infty) = 0, \quad -\frac{dV}{dz}\Big|_{z=0} = E_0, \quad (2.3)$$

где $E(z) = -eV(z)$, $E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*}$ – энергия Ферми, $k_F = \sqrt{2\pi n_s}$ – волновой вектор, n_s – поверхностная плотность электронов, χ – диэлектрическая функция 2D-электронного газа, $m^* = 0.06m_e$ – эффективная масса электрона. Для $n_s \approx 8 \cdot 10^{11} \text{см}^{-2}$ получим $E_F = 26.2 \text{meV}$, $k_F = 2.24 \cdot 10^6 \text{см}^{-1}$. Диэлектрическая функция χ определяется формулой:

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = \frac{e^2}{\varepsilon q^2 L^2} \lim_{\alpha \rightarrow 0} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(E_{\mathbf{k}}) - f(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}} - \hbar\omega - i\hbar\alpha}, \quad (2.4)$$

где f – функция распределения Ферми-Дирака, L^2 – площадь, занимаемая структурой. При температуре абсолютного нуля и использовании простейшего закона дисперсии $E_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m^*$ выражение для диэлектрической функции может быть представлено в виде суммы двух слагаемых $\chi = \chi_1 + i\chi_2$, каждое из которых имеет вид [15]:

$$\chi_1 = \frac{2m^* e^2 n_s}{\hbar^2 k_F q^3} \left\{ \frac{q}{k_F} - C_- \left[\left(\frac{q}{2k_F} - \frac{m^* k_F \omega q}{\hbar} \right)^2 - 1 \right]^{1/2} - C_+ \left[\left(\frac{q}{2k_F} + \frac{m^* k_F \omega q}{\hbar} \right)^2 - 1 \right]^{1/2} \right\},$$

$$\chi_2 = \frac{2m^* e^2 n_s}{\hbar^2 k_F q^3} \left\{ D_- \left[1 - \left(\frac{q}{2k_F} - \frac{m^* k_F \omega q}{\hbar} \right)^2 \right]^{1/2} - D_+ \left[1 - \left(\frac{q}{2k_F} + \frac{m^* k_F \omega q}{\hbar} \right)^2 \right]^{1/2} \right\},$$

где при $\left| \frac{q}{2k_F} \pm \frac{m^* k_F \omega q}{\hbar} \right| > 1$ имеем $C_{\pm} = \text{sgn} \left(\frac{q}{2k_F} \pm \frac{m^* k_F \omega q}{\hbar} \right)$, $D_{\pm} = 0$, а при $\left| \frac{q}{2k_F} \pm \frac{m^* k_F \omega q}{\hbar} \right| < 1$ имеем $C_{\pm} = 0$, $D_{\pm} = 1$.

Уравнения (2.1) и (2.2) удобно решать в безразмерных величинах. Для этого введем следующие обозначения:

$$\frac{\varepsilon_j}{E_F} = E_j, \quad \frac{E(z)}{E_F} = \varphi(z), \quad \tilde{z} = zk_F, \quad \rho(z) = -en(\tilde{z})k_F^3, \quad \psi(z) = \tilde{\psi}(\tilde{z})k_F^{1/2}. \quad (2.5)$$

Таким образом, получаем систему уравнений в безразмерных переменных:

$$-\frac{d^2 \varphi}{d\tilde{z}^2} = \kappa n(\tilde{z}), \quad (2.6)$$

$$-\frac{d^2 \psi(\tilde{z})}{d\tilde{z}^2} + [\varphi(\tilde{z}) - E_j] \psi(\tilde{z}) = 0, \quad (2.7)$$

где $\kappa = 8\pi m e^2 k_F / \chi \hbar^2$. Удобно искать решение системы в виде

$$\varphi(\tilde{z}) = c(\beta) \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \beta^n e^{-(n+1)\lambda \tilde{z}}, \quad (2.8)$$

где λ и $\beta < 1$ – некоторые подгоночные параметры, а

$$c(\beta) = \frac{E_0}{E_F \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \beta^n} = \frac{E_0}{E_F} (\beta + 1), \quad (2.9)$$

где $E_0 = E(z=0)$. Уравнение (2.6) будет иметь вид:

$$\frac{d^2 \varphi(\tilde{z})}{d\tilde{z}^2} = c(\beta) \lambda^2 \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \beta^n (n+1)^2 e^{-(n+1)\lambda\tilde{z}} \quad (2.10)$$

с граничными условиями:

$$\varphi(\infty) = 0, \quad \varphi(0) = \varphi_0, \quad \frac{d\varphi(\tilde{z})}{d\tilde{z}} = \kappa Q, \quad Q = \int_0^{+\infty} n(\tilde{z}) d\tilde{z}. \quad (2.11)$$

Тогда

$$\varphi(\tilde{z}) = -\frac{V_0}{E_F \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \beta^n} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \beta^n e^{-(n+1)\lambda\tilde{z}}. \quad (2.12)$$

Переходя к исходным переменным, получим:

$$E(z) = -E_0 \frac{\sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \beta^n e^{-(n+1)\lambda k_F z}}{\sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \beta^n}. \quad (2.13)$$

На рис. 2.2 представлены графики профиля для различного количества учитываемых членов разложения.

Так как ряд в (2.13) равномерно сходится, рассмотрим первые два члена разложения в выражении для профиля потенциальной ямы:

$$V(z) \cong -\frac{V_0}{1-\beta} (e^{-\lambda k_F z} - \beta e^{-2\lambda k_F z}), \quad (2.14)$$

где $V_0 = V(z=0)$.

Подставляя (2.14) в (2.2), получим:

$$-\frac{d^2}{dz^2} \left(-\frac{V_0}{1-\beta} (e^{-\lambda k_F z} - \beta e^{-2\lambda k_F z}) \right) = \frac{4\pi\rho(z)}{\chi}, \quad (2.15)$$

откуда следует

$$\frac{V_0 \lambda k_F (1-2\beta)}{1-\beta} = \kappa Q. \quad (2.16)$$

Поскольку суммарный интеграл равен нулю:

$$Q = \int_0^{+\infty} \rho(z) dz = 0, \quad (2.17)$$

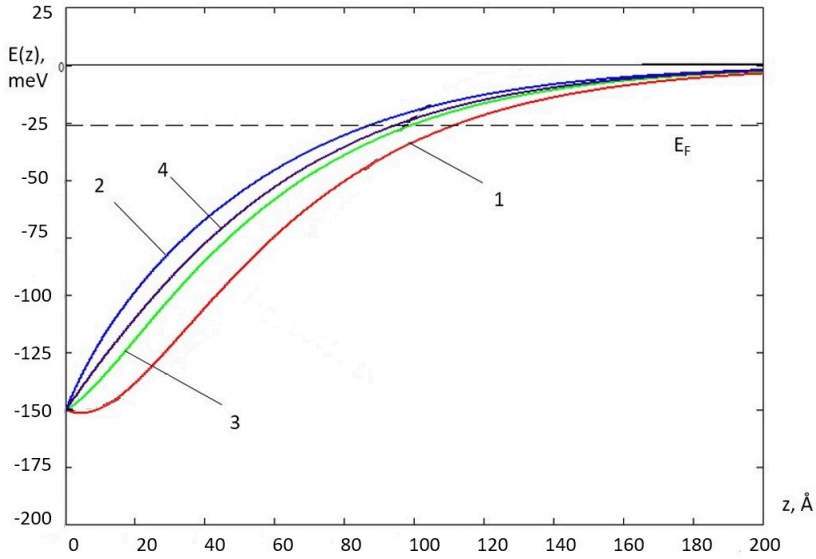


Рис. 2.2. Зависимость профиля потенциальной ямы от количества n учитываемых членов разложения. Кривая (1) – $n = 2$, кривая (2) – $n = 3$, кривая (3) – $n = 4$, кривая (4) – $n \rightarrow \infty$. Параметры $\lambda = 1.0$, $\beta = 0.55$

Fig. 2.2. Dependence of the potential well profile on the number n of expansion terms taken into account. Curve (1) – $n = 2$, curve (2) – $n = 3$, curve (3) – $n = 4$, curve (4) – $n \rightarrow \infty$. Parameters $\lambda = 1.0$, $\beta = 0.55$

то получаем, что можно выделить две области: $z < D$ и $z > D$ с условием $\rho(z = D) = 0$. Так как $\rho(z = 0) = eN_0^{2/3}$, то наиболее простое решение для уравнения Больцмана имеет вид:

$$\begin{cases} \rho(z) = eN_0^{2/3} \left(1 - \frac{z}{D}\right), & z < D, \\ \rho(z) = -A(z - D)e^{-\frac{z-D}{a}}, & z > D, \end{cases} \quad (2.18)$$

где $D \cong 2/k_F = 89 \text{ \AA}$, a – длина потенциала экранирования Томаса-Ферми [16] - [18]. Подставим (2.18) в (2.17) и проинтегрируем:

$$\begin{aligned} Q &= \int_0^D \rho(z) dz + \int_D^{+\infty} \rho(z) dz = \int_0^D eN_0^{2/3} \left(1 - \frac{z}{D}\right) dz - \int_D^{+\infty} A(z - D)e^{-\frac{z-D}{a}} dz = \\ &= eN_0^{2/3} \left(z - \frac{z^2}{2D}\right) \Big|_0^D - A \left(-a(z - D)e^{-\frac{z-D}{a}} \Big|_D^{+\infty} + a \int_D^{+\infty} e^{-\frac{z-D}{a}} dz\right) = \\ &= \frac{eN_0^{2/3} D}{2} - A \left(-a^2 e^{-\frac{z-D}{a}} \Big|_D^{+\infty}\right) = \frac{eN_0^{2/3} D}{2} - Aa^2 = 0. \end{aligned}$$

Получим выражение для нормировочной постоянной:

$$A = \frac{eN_0^{2/3} D}{2a^2}. \quad (2.19)$$

Подставим (2.18) в уравнение Шредингера (2.1), получим распределение потенциала:

Для $z < D$:

$$\begin{aligned} V(z) &= -\frac{4\pi}{\chi} \int_0^z \left(\int_0^z eN_0^{2/3} \left(1 - \frac{z}{D}\right) dz \right) dz = -\frac{4\pi eN_0^{2/3}}{\chi} \int_0^z \left(z - \frac{z^2}{2D} \right) dz = \\ &= -\frac{4\pi eN_0^{2/3}}{\chi} \left(\frac{z^2}{2} - \frac{z^3}{6D} \right) + V(0) = -\frac{2\pi eN_0^{2/3}}{\chi} \left(z^2 - \frac{z^3}{3D} \right) + V(0). \end{aligned}$$

Для $z > D$:

$$\begin{aligned} V(z) &= -\frac{4\pi}{\chi} \int_0^z \left(\int_0^z \left[-A(z-D)e^{-\frac{z-D}{a}} \right] dz \right) dz = \\ &= \frac{4\pi A}{\chi} \int_0^z \left(-a^2 e^{-\frac{z-D}{a}} - a(z-D)e^{-\frac{z-D}{a}} \right) dz = \\ &= -\frac{4\pi Aa}{\chi} \left(-2a^2 e^{-\frac{z-D}{a}} - a(z-D)e^{-\frac{z-D}{a}} \right) + C = \\ &= \frac{4\pi Aa^2}{\chi} (z-D+2a)e^{-\frac{z-D}{a}} + C = \\ &= \frac{2\pi eN_0^{2/3} D}{\chi} (z-D+2a)e^{-\frac{z-D}{a}} + C. \end{aligned}$$

С учетом условия $V(+\infty) = 0$ получим $C = 0$.

Сшивка решений при $z = D$:

$$\begin{aligned} -\frac{2\pi eN_0^{2/3}}{\chi} \left(D^2 - \frac{D^3}{3D} \right) + V(0) &= \frac{2\pi eN_0^{2/3} D}{\chi} 2a \\ V(0) &= \frac{4\pi eN_0^{2/3}}{\chi} \left(\frac{1}{3} D^2 + aD \right). \end{aligned}$$

Окончательно получим:

$$V(z) = -\frac{2\pi}{\chi} \left[eN_0^{2/3} \left(z^2 - \frac{z^3}{3D} \right) \right] + \frac{4\pi eN_0^{2/3}}{\chi} \left(\frac{1}{3} D^2 + Da \right), \quad z < D, \quad (2.20)$$

$$V(z) = \frac{2\pi eN_0^{2/3} D}{\chi} (z-D+2a)e^{-\frac{z-D}{a}}, \quad z > D. \quad (2.21)$$

С учетом граничных условий (2.3) получим:

$$E(0) = eV_0 = \frac{4\pi e^2 N_0^{2/3}}{\chi} \left(\frac{1}{3} D^2 + aD \right), \quad (2.22)$$

тогда длина потенциала экранирования Томаса-Ферми может быть выражена следующим образом:

$$a = \frac{\chi E(0)}{4\pi e^2 N_0^{2/3} D} - \frac{1}{3} D. \quad (2.23)$$

Для рассматриваемой структуры в длинноволновом пределе ($\omega = 0$) получим $\chi \approx 3.5 \cdot 10^{-6}$ см, откуда $a \approx 10.9 \text{ \AA}$.

На рис. 2.3–2.4 построены по формуле (2.13) кривые $E(z) = eV(z)$ как функции от подгоночных параметров λ и β , проведено сравнение данных кривых с профилем, построенным по формулам (2.20)–(2.21).

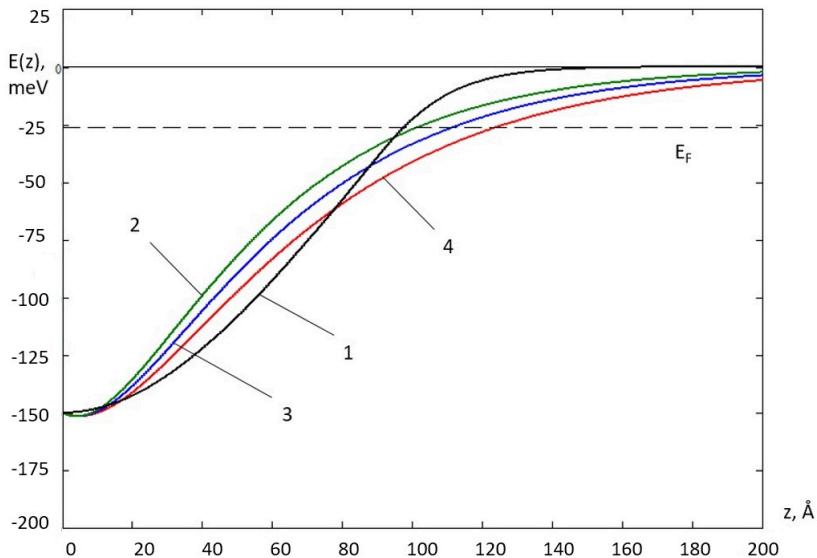


Рис. 2.3. Зависимость профиля потенциальной ямы от значения параметра λ . Кривая (1) – профиль потенциальной ямы, рассчитанный по формулам (2.20)–(2.21), кривые (2)–(4) – вычисленные по формуле (2.13) профили потенциальной ямы для значений параметра $\lambda = 1.1$, $\lambda = 1.0$ и $\lambda = 0.9$ соответственно

Fig. 2.3. Dependence of the potential well profile on the value of the parameter λ . Curve (1) is the potential well profile calculated using formulas (2.20)–(2.21), curves (2)–(4) are the potential well profiles calculated using formula (2.13) for the parameter values $\lambda = 1.1$, $\lambda = 1.0$ and $\lambda = 0.9$, respectively

Анализ зависимостей профилей от параметров позволяет подобрать значения $\lambda = 1.0$ и $\beta = 0.55$, при которых аппроксимация профиля наиболее точно соответствует профилю, построенному по формулам (2.20)–(2.21).

3. Обсуждение результатов

Представим решение уравнения (2.7) в виде

$$\psi_k^+(\tilde{z}) = e^{ik\tilde{z} + i\eta(k)} \sum_{j=0}^{\infty} b_j(k) e^{-j\lambda\tilde{z}} \tag{3.1}$$

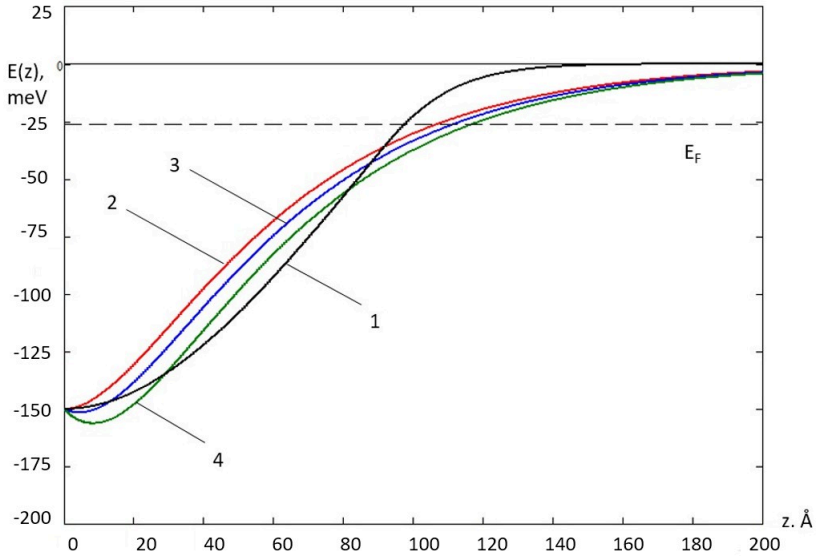


Рис. 2.4. Зависимость профиля потенциальной ямы от значения параметра β .
 Кривая (1) – профиль потенциальной ямы, рассчитанный по формулам (2.20)–(2.21), кривые (2)–(4) – вычисленные по формуле (2.13) профили потенциальной ямы для значений параметра $\beta = 0.5$, $\beta = 0.55$ и $\beta = 0.6$ соответственно

Fig. 2.4. Dependence of the potential well profile on the value of the parameter β .
 Curve (1) is the potential well profile calculated using formulas (2.20)–(2.21), curves (2)–(4) are the potential well profiles calculated using formula (2.13) for the parameter values $\beta = 0.5$, $\beta = 0.55$ and $\beta = 0.6$, respectively

и подставим в уравнение (2.7). Получим следующие выражения для коэффициентов дифференциального уравнения:

$$\left[-k^2 \sum_{j=0}^{\infty} b_j(k) - 2ik\lambda \sum_{j=0}^{\infty} b_j(k)j + \lambda^2 \sum_{j=0}^{\infty} b_j(k)j^2 + \left[\frac{E_0}{E_F} (\beta + 1) \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \beta^n \exp(-(n+1)\lambda\tilde{z}) - \frac{E_j}{E_F} \right] \sum_{j=0}^{\infty} b_j(k) \right] \exp(-j\lambda\tilde{z}) = 0, \quad (3.2)$$

$$b_1(k) = -\frac{E_0(\beta + 1)}{E_F\lambda(\lambda^2 + 4k^2)} (\lambda + 2ik), \quad (3.3)$$

$$b_j(k) = -\frac{E_0(\beta + 1)}{E_F\lambda(j^3\lambda^2 + 4k^2j)} [j\lambda + 2ik] \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \beta^n b_{j-(n+1)} \quad (3.4)$$

при начальных условиях $b_0 = 1$ и фазовом сдвиге:

$$\sum_{j=0}^{\infty} b_j(k) = -e^{-i\eta(k)}. \quad (3.5)$$

Решим уравнение (2.1), преобразовав его к виду:

$$\left(-\frac{d^2}{dz^2} + \varphi(z) - k^2\right) \psi_k^+(z) = 0. \tag{3.6}$$

Запишем решение уравнения (3.6) в виде (3.1) и после подстановки в уравнение (3.6) и сокращения на фазовый множитель получим уравнение:

$$\sum b_j(k) \left(\frac{j^2 \lambda^2 - 2ikj\lambda}{P(1-\beta)} + 1\right) = 0 \tag{3.7}$$

Тогда при $b_0 = 1$ и фазовом сдвиге (3.5) получим:

$$b_j(k) = -\frac{P(b_{j-1} - \beta b_{j-2})}{\lambda^2 j^2 - 2ikj\lambda}. \tag{3.8}$$

Тогда волновая функция будет иметь вид:

$$\psi_1^+(z) = e^{iz} \sum_{j=0}^{\infty} b_j(1) e^{-j\lambda z}. \tag{3.9}$$

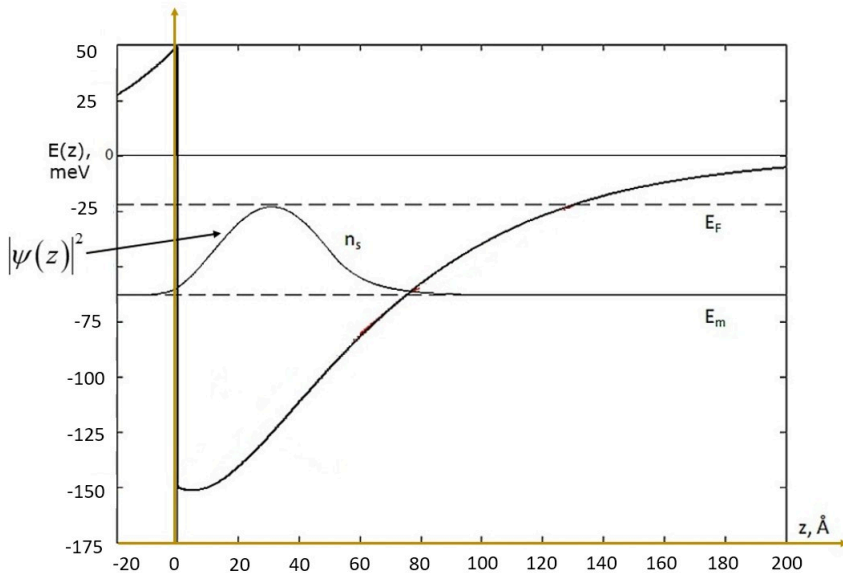


Рис. 3.1. Профиль потенциальной ямы умеренно легированного гетероперехода и волновая функция

Fig. 3.1. Potential well profile of moderately doped heterojunction and wave function

На рис. 3.1 показан профиль потенциальной ямы гетероперехода и волновая функция. В случае умеренно легированного гетероперехода $AlGaAs(Si)/GaAs$ заполнена одна подзона размерного квантования ($k = 1$).

Приведенный расчет зонной структуры гетероперехода используется для расчета времени электрон-электронных взаимодействий [19], а также для описания дифракционных процессов, происходящих в схожих по геометрии графеновых структурах [20–21].

4. Заключение

Таким образом, в работе приведено совместное самосогласованное решение системы дифференциальных уравнений Шредингера и Пуассона для расчета волновых функций и распределения потенциала одиночного умеренно легированного гетероперехода $AlGaAs(Si)/GaAs$. Получено аналитическое решение системы уравнений Шредингера и Пуассона, т.е. найдены удобные для дальнейшего использования выражения для потенциала экранирования и волновых функций. Полученное решение не накладывает ограничений на геометрию и материалы наноструктуры и используется для расчета времени электрон-электронных взаимодействий в умеренно и сильнолегированных гетероструктурах $AlGaAs(Si)/GaAs$ [19–21].

Благодарности. Авторы выражают признательность проф. Глазову С.Ю. и проф. Трегулову В.В. за плодотворное сотрудничество и ценные замечания.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Coleridge P. T. Small-angle scattering in two-dimensional electron gases. *Phys. Rev. B*. 1991. Vol. 44, no. 8. P. 3793–3801. DOI: 10.1103/PhysRevB.44.3793
2. Coleridge P. T. Inter-subband scattering in a 2D electron gas. *Semicond. Sci. Technol.* 1990. Vol. 5. P. 961–966.
3. Slutzky M., Entin-Wohlman O., Berk Y., Palevski A., Shtrikman H. Electron-electron scattering in coupled quantum wells. *Phys. Rev. B*. 1996. Vol. 53. P. 4065–4072. DOI: 10.1103/PhysRevB.53.4065
4. Lee S.-C., Galbraith I. Intersubband and intrasubband electronic scattering rates in semiconductor quantum wells. *Phys. Rev. B*. 1999. Vol. 59. P. 15796–15805. DOI: 10.1103/PhysRevB.59.15796
5. Levitov L. S., Shtyk A. V., Feigelman M. V. Electron-electron interactions and plasmon dispersion in graphene. *Phys. Rev. B*. 2013. Vol. 88. 235403. DOI: 10.1103/PhysRevB.88.235403
6. De-Leon S., Shvartsman L. D., Laikhtman B. Band structure of coupled InAs/GaSb quantum wells. *Phys. Rev. B*. 1999. Vol. 60. P. 1861–1870. DOI: 10.1103/PhysRevB.60.1861
7. Itskovsky M. A., Maniv T. Fourier analysis of the de Haas – van Alphen oscillations in two-dimensional electron systems with background reservoir states *Phys. Rev. B*. 2001. Vol. 64. 174421. DOI: 10.1103/PhysRevB.64.174421
8. Пайнс Д., Нозьер Ф. Теория квантовых жидкостей: пер. с англ. М.: Мир, 1967. 382 с.
9. Рыбина Н. В., Рыбин Н. Б., Трегулов В. В., Скопцова Г. Н. Исследование влияния режимов термической обработки на информационно-корреляционные свойства поверхности пленки пористого кремния // *Вестник РГРТУ*. 2023. № 84. С. 207–214. DOI: 10.21667/1995-4565-2023-84-207-214

10. Трегулов В. В., Скопцова Г. Н., Рыбин Н. Б., Рыбина Н. В. Влияние отжига на механизмы переноса носителей заряда в полупроводниковой структуре с пленкой пористого кремния // *Вестник РГРТУ*. 2023. № 84. С. 215–224. DOI: 10.21667/1995-4565-2023-84-215-224
11. Трегулов В. В., Скопцова Г. Н., Рыбин Н. Б., Рыбина Н. В. Особенности зонной диаграммы полупроводниковой структуры со сформированной металл-стимулированным травлением пленкой пористого кремния // *Вестник РГРТУ*. 2023. №86. С. 172–178. DOI: 10.21667/1995-4565-2023-86-172-178
12. Sotirelis P., von Allmen P., Hess K. Electron intersubband relaxation in doped quantum wells. *Phys. Rev. B*. 1993. Vol. 47. 12744. DOI: 10.1103/PhysRevB.47.12744
13. Глазов С. Ю., Мещерякова Н. Е., Подгорная И. А. Проводимость однослойных углеродных нанотрубок полупроводникового типа с учетом ионизации примесных центров // *Известия Российской академии наук. Серия физическая*. 2022. Т. 86, № 1. С. 58–62. DOI: 10.31857/S0367676522010124
14. Глазов С. Ю., Мещерякова Н. Е., Подгорная И. А. Определение параметров многослойных примесных углеродных нанотрубок полупроводникового типа на основе анализа проводимости в статическом и переменном электрических полях // *Ученые записки физического факультета Московского университета*. 2024. № 5. 2450501.
15. Андо Т., Фаулер А., Стерн Ф. Электронные свойства двумерных систем: пер. с англ. М.: Мир, 1985. 416 с.
16. Дюбуа А. Б., Зилотова М. А., Кучерявый С. И., Сафошкин А. С. Кинетические процессы в умеренно легированном гетеропереходе // *Вестник РГРТУ*. 2013. Т. 45, № 3. С. 88–92.
17. Дюбуа А. Б. Электрон-электронные взаимодействия в умеренно легированном гетеропереходе $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ // *Труды МФТИ*. 2010. Т. 2, №1(5). С. 24–27.
18. Baukov A. A., Bukhenskiy K. V., Dubois A. B., Kucheryavyy S. I., Mashina S. N., Safoshkin A. S., Shchigorev E. Yu. Temperature dependences of the time of electron-electron interactions in two-dimensional heterojunction. *Journal of Physics: Conference Series*. 2017. Vol. 941. 012059. DOI:10.1088/1742-6596/941/1/012059
19. Дюбуа А. Б., Кучерявый С. И., Сафошкин А. С. Межподзонные электрон-электронные взаимодействия в двумерном электронном газе // *Известия вузов. Физика*. 2021. Том 64, №4(761). С. 163–169.
20. Bukhenskiy K. V., Dubois A. B., Konukhov A. N., Kucheryavyy S. I., Safoshkin A. S. Surface propagation in structure with a graphene layer. *Journal of Siberian Federal Universit. Mathematics and Physics*. 2022. Vol. 15, №6. P. 742–752. DOI: 10.17516/1997-1397-2022-15-6-742-752
21. Бухенский К. В., Дюбуа А. Б., Конюхов А. Н., Кучерявый С. И., Сафошкин А. С. Распространение электромагнитного излучения в графеновых структурах // *Ученые записки Физического факультета Московского университета*. 2023. №1. 2310301.

*Поступила XX.XX.2025; доработана после рецензирования XX.XX.2025;
принята к публикации XX.XX.2025*

Авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи.

Конфликт интересов: авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

REFERENCES

1. P. T. Coleridge, “Small-angle scattering in two-dimensional electron gases”, *Phys. Rev. B*, **44** (1991), 3793–3801. DOI: 10.1103/PhysRevB.44.3793
2. P. T. Coleridge, “Inter-subband scattering in a 2D electron gas”, *Semicond. Sci. Technol.*, **5** (1990), 961–966.
3. M. Slutzky, O. Entin-Wohlman, Y. Berk, A. Palevski, H. Shtrikman, “Electron-electron scattering in coupled quantum wells”, *Phys. Rev. B*, **53** (1996), 4065–4072. DOI: 10.1103/PhysRevB.53.4065
4. S.-C. Lee, I. Galbraith, “Intersubband and intrasubband electronic scattering rates in semiconductor quantum wells”, *Phys. Rev. B*, **59** (1999), 15796–15805. DOI: 10.1103/PhysRevB.59.15796
5. L. S. Levitov, A. V. Shtyk, M. V. Feigelman, “Electron-electron interactions and plasmon dispersion in graphene”, *Phys. Rev. B*, **88** (2013), 235403. DOI: 10.1103/PhysRevB.88.235403
6. S. De-Leon, L. D. Shvartsman, B. Laikhtman, “Band structure of coupled InAs/GaSb quantum wells”, *Phys. Rev. B*, **60** (1999), 1861–1870. DOI: 10.1103/PhysRevB.60.1861
7. M. A. Itskovsky, T. Maniv, “Fourier analysis of the de Haas – van Alphen oscillations in two-dimensional electron systems with background reservoir states”, *Phys. Rev. B*, **64** (2001), 174421. DOI: 10.1103/PhysRevB.64.174421
8. D. Pines, Ph. Nozieres, *The Theory of Quantum Liquids*, New York, W.A. Benjamin, 1966, 355 p.
9. N. V. Rybina, N. B. Rybin, V. V. Tregulov, G. N. Skoptsova, “Study of heat treatment modes influence on information-correlation properties of porous silicon film surface”, *Vestnik of RSREU*, 2023, no. 84, 207–214. DOI: 10.21667/1995-4565-2023-84-207-214
10. V. V. Tregulov, G. N. Skoptsova, N. B. Rybin, N. V. Rybina, “The effect of thermal annealing of semiconductor structure with porous silicon film on mechanisms of carrier transfer”, *Vestnik of RSREU*, 2023, no. 84, 215–224. DOI: 10.21667/1995-4565-2023-84-215-224
11. V. V. Tregulov, G. N. Skoptsova, N. B. Rybin, N. V. Rybina, “Features of band diagram of semiconductor structure with porous silicon film formed by metal-stimulated etching”, *Vestnik of RSREU*, 2023, no. 86, 172–178. DOI: 10.21667/1995-4565-2023-86-172-178
12. P. Sotirelis, P. von Allmen, K. Hess, “Electron intersubband relaxation in doped quantum wells”, *Phys. Rev. B*, **47** (1993), 12744. DOI: 10.1103/PhysRevB.47.12744

13. S. Y. Glazov, N. E. Mescheryakova, I. A. Podgornaya, “Conductivity of Semiconductor Single-Walled Carbon Nanotubes with Allowance for the Ionization of Impurity Centers”, *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*, **86**:1 (2022), 58-62. DOI: 10.31857/S0367676522010124
14. S. Y. Glazov, N. E. Mescheryakova, I. A. Podgornaya, “Determination of the parameters of multilayer impurity semiconductor-type carbon nanotubes based on the analysis of conductivity in static and alternating electric elds”, *Memoirs of the Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University*, **5** (2024), 2450501.
15. T. Ando, A. B. Fowler, F. Stern, “Electronic Properties of Two-Dimensional Systems”, *Reviews of Modern Physics*, **54** (1982), 437.
16. A. B. Dubois, M. A. Zilotova, S. I. Kucheryavyy, A. S. Safoshkin, “Kinetic processes in moderately doped heterojunction”, *Vestnik of RSREU*, **3**:45 (2013), 88–92.
17. A. B. Dubois, “Electron-electron interactions in the moderately doped heterojunction Al_xGa_{1-x}As/GaAs”, *Proceedings of Moscow Institute of Physics and Technology (State University)*, **2**:1(5) (2010), 24–27.
18. A. A. Baukov, K. V. Bukhenskyy, A. B. Dubois, S. I. Kucheryavyy, S. N. Mashnina, A. S. Safoshkin, E. Yu. Shchigorev, “Temperature dependences of the time of electron-electron interactions in two-dimensional heterojunction”, *Journal of Physics: Conference Series*, **941** (2017), 012059. DOI: 10.1088/1742-6596/941/1/012059
19. A. B. Dubois, S. I. Kucheryavyy, A. S. Safoshkin, “Inter-subband electron-electron interactions in two-dimensional electron gas”, *Russian Physics Journal*, **64**:4 (2021), 753–760.
20. K. V. Bukhenskyy, A. B. Dubois, A. N. Konukhov, S. I. Kucheryavyy, A. S. Safoshkin, “Surface propagation in structure with a graphene layer”, *Journal of Siberian Federal Universit. Mathematics and Physics*, **15**:6 (2022), 742-752. DOI: 10.17516/1997-1397-2022-15-6-742-752
21. K. V. Bukhenskyy, A. B. Dubois, A. N. Konukhov, S. I. Kucheryavyy, A. S. Safoshkin, “Propagation of electromagnetic radiation in graphene structures”, *Memoirs of the Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University*, **1** (2023), 2310301.

Submitted XX.XX.2025; Revised XX.XX.2025; Accepted XX.XX.2025

The authors have read and approved the final manuscript.

Conflict of interest: The authors declare no conflict of interest.