

УДК 621.315.592

## Аналитическое решение одномерного уравнения Шредингера с линейным потенциалом в диоде

© М.В. Давидович

Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского, 410012 Саратов, Россия

E-mail: davidovichmv@info.sgu.ru

Поступила в Редакцию 27 июня 2024 г.

В окончательной редакции 1 января 2025 г.

Принята к публикации 6 января 2025 г.

Для коэффициента туннелирования в диоде с линейным потенциалом получено аналитическое решение уравнения Шредингера в функциях Эйри, а также два других равносильных ему решения на основе интегрирования методом рядов. Их результаты соответствуют друг другу и численному решению. Рассчитан туннельный ток в диоде с учетом температуры. Результаты могут быть использованы при моделировании диодов типа металл-изолятор-металл и аналогичных им устройств.

**Ключевые слова:** уравнение Шредингера, туннелирование, диод, термополевая эмиссия.

DOI: 10.61011/FTP.2024.12.59825.6826

### 1. Введение

Потенциальный барьер в диодной структуре может быть определен весьма точно на основе метода многократных изображений [1,2]. Часто в литературе используют задачи с прямоугольными барьерами [3] как точно решаемые. В ряде случаев реальный барьер в диоде очень близок к треугольному (рис. 1). Треугольная форма (рис. 2) рассматривается в ряде работ, например, [4]. Фактически она означает линейную зависимость потенциала от координаты, т.е. не зависящую от координаты силу, действующую на электрон. Треугольная форма барьера более близка к реальности, возникающей при моделировании реальных полупроводниковых приборов, включая резонансно-туннельные диоды [5–8]. Однако отсутствие строгих моделей для нее приводит к использованию более грубых моделей, барьеров, например, даже в виде  $\delta$ -функций [7]. Хотя в приближении (вычисление в квантовой механике) ВКБ имеется формула для туннелирования через треугольный барьер [9], на которой основана теория Фаулера–Нордгейма (ФН), она не совсем удовлетворительная, что будет отмечено далее. Несмотря на то что для треугольной квантовой ямы известно аналитическое решение в виде функций Эйри, для конечного треугольного квантового барьера в диоде оно не использовалось, поэтому его получение является актуальной задачей. Часто рассматривается трапециевидная форма барьера в виде треугольника на прямоугольном постаменте [4–6] (рис. 2, б). Для нее также можно применить решение для линейного потенциала, поскольку прямоугольный постамент учитывается весьма просто. Исследованию туннелирования через треугольный барьер в последнее время уделяется существенное внимание [10–12]. Большое значение имеет поиск точно решаемых моделей [11,12] для коэффициента туннелирования, например, с использованием

гармонических вейвлетов [12] и с помощью метода функции Эйри с помещением начала координат во внешнюю классическую точку поворота (ТП) электрона [13]. Туннелирование через треугольный барьер явилось основой теории ФН, поэтому поиск точных решений является актуальной задачей.

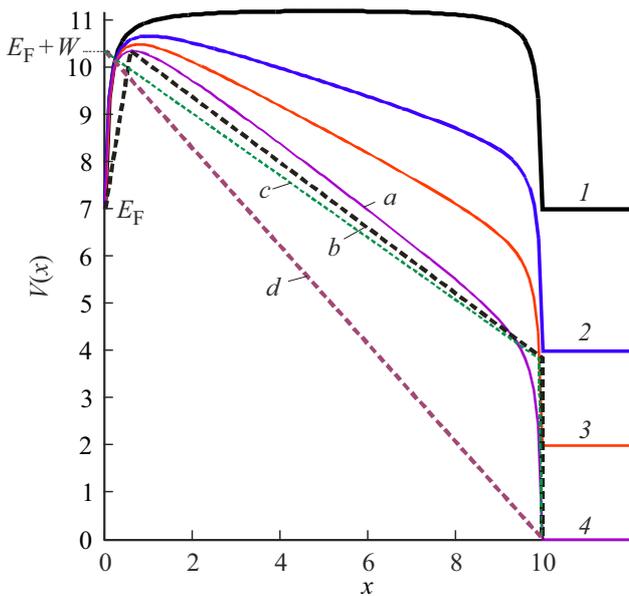
Одномерное уравнение Шредингера (УШ)

$$[-\hbar^2 \partial_{xx}^2 / (2m_e) + V(x/d) - E] \psi(x/d) = 0$$

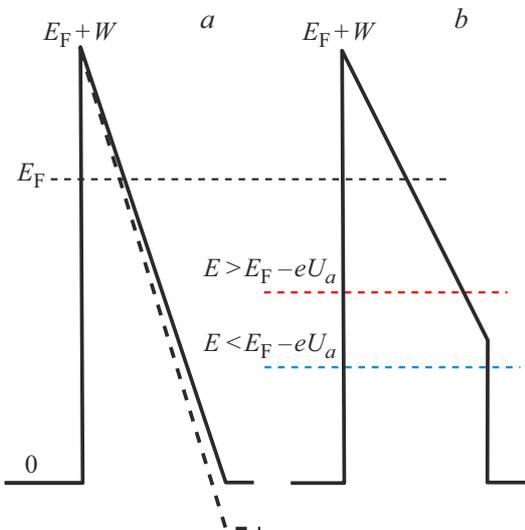
с линейной функцией квантового потенциала

$$V(x/d) = E_F + \tilde{W} - (\tilde{W} + eU_a)x/d$$

при  $0 \leq x \leq d$  в диоде имеет вид  $\psi^*(x/d) = (ax/d - b)\psi(x/d)$ . В нем обозначены безразмерные постоянные  $a = 2m_e d^2 (eU_a + \tilde{W}) / \hbar^2$  и  $b = 2m_e d^2 (E_F + \tilde{W} - E) / \hbar^2$ ,  $m_e$  — масса (эффективная масса) электрона,  $U_a$  — потенциал анода,  $\psi$  — волновая функция (ВФ),  $\tilde{W} = W/\varepsilon$  — эффективная работа выхода (РВ) с учетом диэлектрика,  $W$  — РВ в вакуум,  $\varepsilon$  — диэлектрическая проницаемость (ДП) зазора. Далее везде будем использовать следующие обозначения для безразмерных координат:  $y = ax/d - b$ ,  $z = y/a = x/d - b/a$ ,  $t = x/d$ ,  $\tau = z^3 a = \xi^3$ ,  $\xi = a^{1/3}(t - c)$ , а также отношение  $c = b/a$ . Поэтому УШ можно записать как  $\phi^*(t) = (at - b)\psi(t)$  или  $\phi^*\psi(\xi) = \xi\varphi(\xi)$ . Для вакуумного диода  $\varepsilon = 1$ ,  $W = W$ . На катоде при  $x < 0$  необходимо  $V = 0$ , ВФ имеет вид  $\psi = \exp(ik_0x) + R \exp(-ik_0x)$  (при единичной амплитуде падающей волны). Здесь  $k_0 = \sqrt{2m_e E} / \hbar$  — волновое число (ВЧ), а при  $x = d$  линейная аппроксимация потенциала дает  $V(1) = E_F - eU_a$ . Внутри барьера ВЧ  $k(x/d) = \sqrt{2m_e (E - V(x/d))} / \hbar$  может быть как мнимым, так и действительным, однако на аноде ( $x > d$ ) ВЧ следует взять в виде



**Рис. 1.** Форма потенциального барьера  $V$  (эВ) в вакуумном диоде  $d = 10$  нм в зависимости от координаты  $x$  (нм) при разных анодных напряжениях, В: 1 — 0, 2 — 3, 3 — 5, 4 — 7. Материал электродов медь:  $E_F = 7$ ,  $W = 4.36$  (эВ). Штриховыми линиями  $b, c$  и  $d$  показаны линейные аппроксимации барьера  $a$ . (Цветной вариант рисунка представлен в электронной версии статьи).



**Рис. 2.** Треугольный барьер ( $a$ ) при  $eU_a = E_F$  и  $eU_a > E_F$  (показан штриховой линией), ( $b$ ) — барьер типа треугольник на постаменте при  $eU_a < E_F$ .

$k_a = k_0$ . Это соответствует скачку нормированного волнового сопротивления (ВС)  $\rho(x/d) = k_0/k(x/d)$  как на катоде  $\rho(0)/\rho_0 = \sqrt{1 - (E_F + \tilde{W})/E}$ , так и на аноде  $\rho_0/\rho(1) = 1/\sqrt{1 - (E_F - \tilde{W} - eU_a)/E}$ ,  $\rho_0 = 1$  (рис. 2). Пусть отсутствует анодное напряжение:  $U_a = 0$ . Тогда барьер (для вакуумного зазора) становится

прямоугольным с высотой  $\tilde{W} + E_F$ . Перед ним и за ним  $V = 0$ , т.е. имеем скачок потенциала  $\pm(E_F + \tilde{W})$ , а также скачки ВС  $\sqrt{1 - (E_F + \tilde{W})/E}$  и  $1/\sqrt{1 - (E_F - \tilde{W})/E}$ . Здесь две ТП  $x = 0$  и  $x = d$ . Решать задачу следует между двумя ТП, т.е. треугольный барьер в этом случае сводится к прямоугольному. Пусть  $eU_a < E_F + \tilde{W}$ . Скачок волнового сопротивления на аноде может быть как мнимым (при  $E > E_F - \tilde{W} - eU_a$ ), так и действительным (при  $E < E_F - \tilde{W} - eU_a$ ). В первом случае надо решать задачу от ТП  $x = 0$  до ТП  $x = d$ , а во втором также до точки  $x = d$ , но ТП уже лежит левее:  $x_{tp} < d$  (рис. 2). После ТП  $x_{tp}$  электрон движется квазиклассически, ускоряясь анодом, а его ВФ приобретает фазовый набег. Его следует учесть. При попадании на анод электрон рассеивается на длине свободного пробега, его импульс релаксирует к импульсу Ферми анода, энергия изменяется, а волновое уравнение на этапе рассеяния становится неприменимым. Поэтому следует использовать ВЧ  $k_0$ , обеспечивающее закон сохранения энергии в виде  $|R| + |\tilde{T}| = 1$ . Величины на катоде обозначаем индексом  $c$ , на аноде — индексом  $a$  (будем опускать их при одинаковых материалах электродов).

Приведенное УШ возникает в вакуумном туннельном диоде при большом анодном напряжении  $U_a$ . Оно также возможно в туннельном диоде типа металл–изолятор–металл (МИМ) с металлическими электродами и диэлектрическим заполнением. Заметим, что  $b = 0$ , если для энергии выполнено  $E = E_F + \tilde{W}$ . Это точка на вершине треугольного барьера. Для нее имеем общее решение через функции Эйри  $\psi(t) = A \text{Ai}(a^{1/3}t) + B \text{Bi}(a^{1/3}t)$  [14,15]. Согласно ему,

$$1 + R = A \text{Ai}(0) + B \text{Bi}(0),$$

$$ik_0d(1-R) = a^{1/3}[A \text{Ai}'(0) + B \text{Bi}'(0)],$$

$$\tilde{T} = A \text{Ai}(a^{1/3}) + B \text{Bi}(a^{1/3}),$$

$$ik_0da^{-1/3}\tilde{T} = A \text{Ai}'(a^{1/3}) + B \text{Bi}'(a^{1/3}),$$

откуда получаем для узкого барьера входную проводимость

$$Y = (1-R)/(1+R) = 1 + ik_0d(3a)^{-1/3}\Gamma(1/3)/\Gamma(2/3),$$

т.е. коэффициент отражения  $R$  стремится к нулю при стремлении к нулю ширины барьера  $d$ . Для конечной ширины получаем неравный нулю коэффициент отражения (вопреки формуле ФН). При  $d \rightarrow 0$  и, соответственно,  $a \rightarrow 0$  имеем  $\psi(1) = \psi(0)$ ,  $\psi'(1) = \psi'(0)$ ,  $1 + R = \tilde{T}$ ,  $1 - R = \tilde{T}$ , т.е.  $R = 0$ ,  $\tilde{T} = 1$ . При малом  $d$  нетрудно получить  $R \approx -ik_0d/4$ . При  $d \rightarrow \infty$  имеем  $B = 0$ ,  $(1-R)/(1+R) = a^{1/3}\text{Ai}'(0)/(ik_0d\text{Ai}(0)) \rightarrow 0$ , т.е.  $R = 1$ , что означает абсолютно непрозрачную на ее уровне бесконечную ступеньку.

Если УШ соответствует вакуумному диоду длины  $d$ , то на поверхности катода  $V(0) = E_{Fc} + \tilde{W}$ , где  $E_{Fc}$  — энергия Ферми (ЭФ) катода,  $\tilde{W}$  — эффективная РВ с катода относительно ЭФ с учетом эффекта Шоттки,

эффекта влияния проводников и диэлектрика (реальная РВ материала катода  $W_c$  может быть существенно больше). Внутри катода  $V = 0$ . Потенциал и энергия отсчитываются от дна зоны проводимости катода, поэтому на катоде уровень Ферми (УФ)  $\mu_c$  (электрохимический потенциал) соответствует ЭФ:

$$\mu_c = E_{Fc} (1 - (\pi^2/12)(k_B T/E_{Fc})^2 + \dots) \approx E_{Fc}.$$

На аноде УФ ниже на  $eU_a$ , поэтому  $V(d) = E_F - eU_a$ . Это линейная аппроксимация реального барьера [1,2] рис. 1. Его максимум немного сдвинут от катода, а сдвиг легко определяется [1] рис. 1, кривая *a*. Поэтому более точно аппроксимировать  $V(x)$  можно двумя линейными функциями: от катода до максимума и от максимума до анода (кривая *b*). Будем рассматривать большие напряжения (сильные поля) и малые размеры  $d$ , когда вершина барьера весьма близка к катоду, РВ  $\tilde{W}$  мала, а функция  $V$  почти линейная (рис. 1, кривые *c, d*), т.е. будем брать аппроксимацию рис. 2. В предельном случае большого напряжения  $\tilde{W} \approx 0$ , и скос потенциала к аноду начинается прямо от ЭФ катода. Внутри катода для  $x < 0$  электроны свободные,  $V(x) = 0$ , поэтому на катоде ВЧ  $k_0$ , а у катода (на бесконечно малом расстоянии)  $\kappa(0) = \sqrt{2m_e(E_F + \tilde{W} - E)}/\hbar$ . В области барьера ВЧ мнимое  $k(x) = ik$ ,  $\kappa(x) = \sqrt{2m_e(V(x) - E)}/\hbar$ . Вблизи анода ВЧ  $k_a = \sqrt{2m_e(E + eU_a - E_F)}/\hbar$ . Для численного решения использованы нормированные ВС электронных волн [3]  $\rho(x) = k_0/k(x)$ . Внутри барьера они мнимые, на катоде и на аноде  $\rho_0 = 1$ .

Далее рассматриваем барьер, резко возникающий от нуля при  $x < 0$  до  $E_F + W$  при  $x = 0$ , а затем линейно спадающий до  $V(d)$  на аноде (рис. 1, кривая *d*, рис. 2). При этом скачок ВС возникает на обоих электродах. Заметим, что при  $eU_a = E_F$  будет  $k_a = k_c$ , и скачка ВС на аноде нет (рис. 2, *a*). Считаем для простоты материалы катода и анода одинаковыми. Если это не так, а также если имеет место диэлектрическое заполнение пространства катод–анод материалом с диэлектрической проницаемостью (ДП)  $\epsilon$ , то потенциал следует брать в виде

$$V(x) = E_{Fc} + W_c/\epsilon - [(W_c - W_a)/\epsilon + eU_a]x/d.$$

РВ понимаем с учетом эффекта Шоттки и взаимного влияния электродов, т.е. с учетом размера  $d$ . Учет диэлектрика приводит к снижению в  $\epsilon$  раз барьера, т.е. к замене  $W \rightarrow W/\epsilon$ . Удобно положить  $W = 0$ , что имеет место для больших напряжений (сильных полей), когда максимум потенциала перемещается на катод (барьер относительно ЭФ исчезает). В вакуумном диоде это имеет место при критическом напряжении  $U_a = 8W_c(1 - \alpha/d)/(e\epsilon)$  (взята аппроксимация потенциала  $V$  параболой 4-го порядка [2] без приложения поля). Малый параметр  $\alpha \ll d$  будет приведен далее и определяет снижение РВ  $W_c$  из катода за счет близости электродов.

Для  $W_c = 4$  эВ и  $d = 2$  нм  $\epsilon = 1$  имеем критический потенциал анода  $U_a \sim 34$  В, т.е. напряженность критиче-

ского поля для вакуумного диода  $\sim 1.7 \cdot 10^{10}$  В/м. Для диода, выполненного на пленке алмаза по технологии CVD (chemical vapor deposition) с ДП  $\epsilon = 5.6$ , она в  $\sim 6$  раз ниже. Если рассматривать удаленный анод и барьер

$$V(x) = E_F + W_c/\epsilon - e^2/[16\pi\epsilon_0\epsilon(x + \delta)] - E_x x,$$

создаваемый электрическим полем  $E_x$ , то из условия  $V'(0) = 0$  нахождения максимума на катоде получаем критическое поле  $E_{xc} = e^2/(16\pi\epsilon_0\epsilon\delta^2) = W_e/(\epsilon\delta)$ . Здесь  $\delta \ll d$  — малый параметр с размерностью длины:  $W_e = e^2/(16\pi\epsilon_0\delta)$ , т.е. у катода  $V(0) = E_F$ . Для РВ  $W_c = 4$  эВ имеем  $\delta = 0.09$  нм, а критическое поле существенно выше:  $2.2 \cdot 10^{10}$  В/м, поскольку в наноразмерных структурах существенно снижается барьер. Именно при таких полях реальный потенциал становится почти линейным, а для электрона с энергией  $E < E_F$  возникает треугольный барьер. Для него известно приближенное решение для прозрачности в квазиклассическом (ВКБ) приближении [9]:  $D \approx A \exp(-4d\kappa(0)/(3eU_a))$ , где обозначены ВЧ  $\kappa(x) = \sqrt{2m_e(V(x) - E)}/\hbar$  и  $\kappa(0) = \kappa_0 = \sqrt{2m_e(E_F - E)}/\hbar$ . В нем мы заменили электрическое поле —  $E_x$  на  $U_a/d$ . В случае ненулевой РВ  $W$  будет  $\kappa_0 = \sqrt{2m_e(E_F + W - E)}/\hbar$ . В работе [9] предэкспоненциальный множитель  $A$  найден в пренебрежении величиной  $\alpha = -\beta \exp(-2\gamma)$  — обратной (отраженной от заднего фронта треугольного барьера) нарастающей волной

$$\alpha \exp\left(\int_0^x \kappa(y) dy\right) / \sqrt{\kappa(x)}$$

в области  $0 < x < l$  (в работе [9] положено  $\alpha = 0$ ), где интеграл

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} \int_0^l \sqrt{2m_e(V(x) - E)} dx$$

вычисляется до ТП  $l$  (формулы (24.4), (24.7) из работы [9]). Она определяется из условия  $E = V(l)$ . В нашем случае  $l = d(E_F - E + W)/(W + eU_a)$ . Это оправдано при существенной длине барьера  $l$ . Однако при  $W = 0$  и вблизи ЭФ  $E \approx E_F$  (где максимальная прозрачность) будет  $l = 0$  и  $\alpha = -\beta$ , поэтому формула для прозрачности не верна. Более того, полученный таким образом множитель  $A$  (формула (24.7)) обратно пропорционален бесконечно малой величине  $\kappa(l) = 0$ . Эта формула приведена для случая нулевого потенциала слева и справа от барьера. Учет обоих коэффициентов при произвольных потенциалах приводит к уточнению приведенной далее в монографии [9] формулы:

$$A = \frac{16k_a}{k_0(\kappa(l) + k_a^2/\kappa(l)) [(1 - \exp(-2\gamma))^2/\kappa(0) + \kappa(0)(1 + \exp(-2\gamma))^2 k_a^2/k_0^2]},$$

которая обладает теми же недостатками. Причиной этого является квазиклассическая ВФ запрещенной об-

ласти, перед экспонентами в которой имеет место множитель  $1/\sqrt{\kappa(x)}$ . При вычислении производной ВФ  $\partial\psi/\partial x$  дифференцируются только экспоненты, поскольку считается, что множитель  $1/\sqrt{\kappa(x)}$  является плавной функцией. Однако в ТП эта функция таковой не является. Проблема корректности определения множителя  $A$  просто сводится к тому, что он заменяется единицей. Это же имеет место и в формуле ФН. В этом случае для  $E = E_F$  получаем  $D = 1$ , что не верно. Конечно, можно корректно учесть производную от  $1/\sqrt{\kappa(x)}$ , что приводит к весьма громоздким формулам, но и такой подход приближенный. Поэтому получение аналитического решения УШ является актуальной задачей.

Цель данной работы — получение аналитического решения УШ с линейным потенциалом. Поскольку сложные потенциальные барьеры имеют большие почти линейные участки [1,2], такое решение позволит улучшить точность численного решения подобных задач с использованием кусочно-линейной аппроксимации, поскольку обычно они решаются на основе кусочно-постоянных аппроксимаций потенциала [1,2]. Кроме того, оно позволит оценить точность формулы ФН.

## 2. Решение через цилиндрические функции

Исходное УШ  $\psi''(t) = a(t-c)\psi(t)$  сводится к уравнению Эйри  $\varphi''(\xi) = \xi\varphi(\xi)$  для функции  $\varphi(\xi) = \psi(\xi/a^{1/3} + c)$  путем замены  $\xi = a^{1/3}(t-c)$ . Оно имеет решение в функциях Бесселя (см. работу [14], 2.162(11)):  $\varphi(\xi) = \sqrt{\xi}Z_{1/3}(2i\xi^{3/2}/2)$  при  $\xi > 0$  и  $\varphi(\xi) = \sqrt{\xi}Z_{1/3}(2\xi^{3/2}/3)$  при  $\xi < 0$ . Здесь  $Z_\nu(z) = C_1J_\nu(z) + C_2Y_\nu(z)$  — общее решение уравнения Бесселя индекса  $\nu = \pm 1/3$ ,  $C_1, C_2$  — произвольные коэффициенты (постоянные интегрирования). Однако эти решения для диода неудобны, поскольку  $\xi$  может обращаться в нуль в области, и следует взять конечное решение при  $\xi = 0$ , т.е. отбросить функцию Неймана. Поэтому берем общее решение в виде [15]  $\varphi(\xi) = C_1 \text{Ai}(a^{1/3}\xi) + C_2 \text{Bi}(a^{1/3}\xi)$ . Здесь использованы функции Эйри 1-го и 2-го рода:  $\text{Ai}(x) = \pi^{-1}\sqrt{x/3}K_{1/3}(2x^{3/2}/3)$ ,  $\text{Bi}(x) = -\sqrt{x/3}(I_{1/3}(2x^{3/2}/3) + I_{-1/3}(2x^{3/2}/3))$ ,  $K_\nu$  — функция Макдональда

$$K_\nu(x) = (\pi/2)[I_{-\nu}(x) - I_\nu(x)]/\sin(\nu\pi),$$

$I_{\pm\nu}$  — функции Бесселя 2-го рода. В окрестности нуля имеем

$$\begin{aligned} \text{Ai}(x) &= \frac{1}{3^{2/3}\Gamma(2/3)} - \frac{x}{3^{1/3}\Gamma(1/3)} \\ &+ \frac{x^3}{3^{2/3}6\Gamma(2/3)} - \frac{x^4}{3^{1/3}12\Gamma(1/3)} + \dots \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Bi}(x) &= \frac{1}{3^{1/6}\Gamma(2/3)} + \frac{3^{1/6}}{\Gamma(1/3)}\left(x + \frac{x^4}{12}\right) \\ &+ \frac{1}{3^{1/6}\Gamma(2/3)}\frac{x^3}{6} + \dots \end{aligned}$$

Эти функции связаны в нуле:

$$\text{Ai}(0) = 3^{-2/3}/\Gamma(2/3) = \text{Bi}(0)/\sqrt{3} = 0.355028053$$

как и их производные:

$$\text{Ai}'(0) = 3^{-1/3}/\Gamma(1/3) = -\text{Bi}'(0)/\sqrt{3} = -0.258819403.$$

Рассмотрим решение УШ. Слева от барьера имеем ВФ  $\psi(x, E) = \exp(ik_0x) + R(E)\exp(-ik_0x)$ , а справа —  $\psi(x, E) = \tilde{T}\exp(ik_0(x-d))$ . Из граничных условий получаем:

$$1 + R = \text{Ai}(-c)C_1 + \text{Bi}(-c)C_2,$$

$$ik_0d(1-R) = a^{1/3}[\text{Ai}'(-c)C_1 + \text{Bi}'(-c)C_2]$$

на левой границе, а также

$$\tilde{T} = \text{Ai}(a^{1/3}(1-c))C_1 + \text{Bi}(a^{1/3}(1-c))C_2,$$

$$ik_0d\tilde{T} = a^{1/3}[\text{Ai}'(a^{1/3}(1-c))C_1 + \text{Bi}'(a^{1/3}(1-c))C_2]$$

на правой границе. Исключая неизвестные постоянные, имеем  $C_2 = GC_1$  и

$$G = \frac{\text{Ai}'(a^{1/3}(1-c)) - ik_0da^{-1/3}\text{Ai}(a^{1/3}(1-c))}{ik_0da^{-1/3}\text{Bi}(a^{1/3}(1-c)) - \text{Bi}'(a^{1/3}(1-c))}, \quad (1)$$

$$C_1 =$$

$$= \frac{2ik_0d}{ik_0d\text{Ai}(-c) + a^{1/3}\text{Ai}'(-c) + [ik_0d\text{Bi}(-c) + a^{1/3}\text{Bi}'(-c)]G}. \quad (2)$$

Решение задачи принимает вид

$$Y = \frac{a^{1/3}[\text{Ai}'(-c) + \text{Bi}'(-c)G]}{ik_0d[\text{Ai}(-c) + \text{Bi}(-c)G]}, \quad (3)$$

$$\tilde{T} = [\text{Ai}(a^{1/3}(1-c)) + \text{Bi}(a^{1/3}(1-c))G]C_1. \quad (4)$$

При этом коэффициент отражения выражается в виде  $R = (1-Y)/(1+Y)$  или в виде

$$\begin{aligned} R &= C_1 [\text{Ai}(-c) + \text{Bi}(-c)G - (a^{1/3}/ik_0d) \\ &\times [\text{Ai}'(-c) + \text{Bi}'(-c)G]]/2, \end{aligned}$$

а для прозрачности барьера имеем  $D = 1 - |R|^2 = |\tilde{T}|^2$ . Для узкого барьера при  $c = 0$  нетрудно получить

$$G \approx 1/\sqrt{3} - 2ik_0da^{-1/3}\text{Ai}(0)/(\text{Ai}'(0)\sqrt{3}).$$

Коэффициенты  $\beta_n$  и  $\gamma_n$

$n$	$\beta_n$	$\gamma_n$
3	$a/3!$	$-b/3!$
4	$b^2/4!$	$2a/4!$
5	$-4ab/5!$	$b^2/5!$
6	$(4a^2-b^3)/6!$	$-6ab/6!$
7	$\beta_1 = 9b^2a/7!$	$\gamma_7 = (10a^2-b^3)/7!$
8	$\beta_8 = (b^4-28a^2b)/8!$	$\gamma_8 = 12ab^2/8!$
9	$\beta_9 = (28a^3-16ab^3)/9!$	$\gamma_9 = (b^4-52a^2b)/9!$
10	$\beta_{10} = (100(ab)^2-b^5)/10!$	$\gamma_{10} = (80a^3-20ab^3)/10!$

### 3. Интегрирование методом рядов

Вычисления функций Эйри и их производных могут быть неудобны, поэтому получим другую форму решения, интегрируя исходное УШ  $\psi''(t) = a(t-b/a)\psi(t)$  методом рядов, т.е. путем разложения в степенной ряд по  $t^n$ :  $\psi(t) = \alpha_0 + \alpha_1 t + \dots$  с приравнованием коэффициентов при одинаковых степенях. Здесь  $0 \leq t \leq 1$ . Имеем формулу

$$\partial_t^2 \psi(t) = \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1)\alpha_n t^{n-2} = a \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n t^{n+1} - b \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n t^n, \tag{5}$$

откуда получаем рекуррентную формулу

$$\alpha_n = (n-2)!(a\alpha_{n-3} - b\alpha_{n-2})/n!$$

и коэффициенты  $\alpha_2 = -b\alpha_0/2!$ ,  $\alpha_3 = a(\alpha_0 - c\alpha_1)/3!$ ,  $\alpha_4 = (b^2\alpha_0 + 2!a\alpha_1)/4!$ , ... Находим общее решение

$$\psi(t) = \alpha_0(1 - bt^2/2 + \varphi_0(t)) + \alpha_1(t + \varphi_1(t))$$

с функциями

$$\varphi_0(t) = \beta_3 t^3 + \beta_4 t^4 + \dots$$

и

$$\varphi_1(t) = \gamma_3 t^3 + \gamma_4 t^4 + \dots,$$

$$\varphi_0(0) = \varphi_1(0) = 0.$$

Построенные на основе рекуррентной формулы первые несколько коэффициентов  $\beta_n$  и  $\gamma_n$  приведены в таблице.

Все коэффициенты также можно вычислить через комплексные функции

$$f_n(\alpha_0, \alpha_1) = (af_{n-3}(\alpha_0, \alpha_1) - bf_{n-2}(\alpha_0, \alpha_1))/[n(n-1)],$$

$n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, \dots$ , где первые три функции имеют вид:  $f_0(\alpha_0, \alpha_1) = \alpha_0$ ,  $f_1(\alpha_0, \alpha_1) = \alpha_1$ ,  $f_2(\alpha_0, \alpha_1) = -b\alpha_0/2!$ . Используя их, вычисляем коэффициенты по формулам

$$\alpha_n = (n-2)!(af_{n-3}(\alpha_0, \alpha_1) - bf_{n-2}(\alpha_0, \alpha_1))/n!,$$

$$n = 4, 5, \dots$$

Затем вычисляем  $\beta_n = f_n(1, 0)$ ,  $\gamma_n = f_n(0, 1)$ . Мнимые части  $f_n(1, 0)$  и  $f_n(0, 1)$  равны нулю. Для решения задачи достаточно знать  $\psi(0) = \alpha_0$ ,  $\psi'(0) = \alpha_1$ ,  $\psi(1)$  и  $\psi'(1)$ . Зная две первые константы, значения  $\psi(1)$  и  $\psi'(1)$  легко вычислить по рекуррентной формуле  $\alpha_n = (a\alpha_{n-3} - b\alpha_{n-2})/[n(n-1)]$ .

Для решения задачи имеем уравнения  $1 + R = \alpha_0$ ,  $1 - R = \alpha_1/(ik_0d)$ ,  $\varphi(1) = \tilde{T}$ ,  $\varphi'(1) = ik_0d\tilde{T}$ . Из двух последних соотношений находим невязку  $\Delta = \varphi'(1)/\varphi(1) - ik_0d = 0$ . Из двух первых получаем  $2 = \alpha_0 + \alpha_1/(ik_0d)$  и  $Y = (1-R)/(1+R) = \alpha_1/(ik_0d\alpha_0)$ . Решение с использованием функций  $\varphi_0$ ,  $\varphi_1$  и их производных имеет вид:  $\alpha_1 = \tilde{G}\alpha_0$ ,  $\alpha_0 = 2/(1 + \tilde{G}/(ik_0d))$ , где

$$\tilde{G} = \frac{b - \varphi'_0(1) + ik_0d(1 - b/2 + \varphi_0(1))}{1 + \varphi'_1(1) - ik_0d\varphi_1(1)}. \tag{6}$$

Входящие в (6) значения функций можно вычислить по формулам с конечным числом членов. Поскольку  $t^n \leq 1$ , для характерного размера  $d = 2$  нм и обычных значений  $eU_a \sim 5$  эВ имеем  $a \sim 500$ , при этом если  $E_F = 7$  эВ, то величина  $b$  при туннелировании изменяется от нуля до 740. Во всех коэффициентах  $\beta_n$  и  $\gamma_n$  максимальные степени меньше  $n/2$ . Отбрасывая в формуле Стирлинга несущественные коэффициенты, из условия  $n! \approx (500)^{n/2}$  имеем оценку максимального числа членов ряда  $n \sim 60$ , когда его коэффициенты начинают убывать. Это весьма жесткая оценка, поскольку величина (6) вычисляется как отношения функций. Для диодов типа MIM (metal-isolator-metal) необходимость в большом числе членов ряда не совсем удобна. Для диодов типа SIS (semiconductor-isolator-semiconductor) число членов существенно меньше. Так, в полупроводниковом диоде из GaAs с эффективной массой  $m^* = 0.067m_e$  ДП  $\varepsilon = 14$  в слое  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  толщиной  $d = 0.5$  нм и при РВ 4.5 эВ,  $U_a = 0.5$  В имеем  $a = 2m^*d^2(eU_a + W/\varepsilon)/\hbar^2 = 0.36$  и  $b = 0.14$  на уровне  $E = E_F$ . В этом случае достаточно 2–3 членов, т.е. получаем практически аналитическое решение. При туннелировании ( $E < E_F$ )  $b$  с ростом энергии уменьшается, а при надбарьерном прохождении становится отрицательной, но небольшой по модулю (при небольшом превышении барьера). В общем случае, используя конечное число членов в рядах, вычисляем (6) и определяем  $\alpha_0$  и  $\alpha_1$ . Далее по рекуррентной формуле вычисляем все остальные коэффициенты  $\alpha_n$  до таких номеров, когда они начнут сильно убывать. Это и определяет число необходимых членов ряда. При точном вычислении невязка  $\Delta = \varphi'(1)/\varphi(1) - ik_0d$  должна быть нулевой (малой). Вычисляем эту невязку и уточняем коэффициент итерационно:  $\alpha_0^{(n+1)} = \alpha_0^{(n)} - \tau_n \Delta_n$ . Здесь  $\tau_n$  — параметр итерации (при  $\tau_n = 1$  — это метод простой итерации). После каждого вычисления  $\alpha_0^{(n+1)}$  следует вычислить  $\alpha_1^{(n+1)}$   $\alpha_1^{(n+1)} = (ik_0d)(2 - \alpha_0^{(n+1)})$  и через них определять новую невязку  $\Delta$ . Параметр итерации можно подбирать, используя метод минимальной невязки  $\Delta_{n+1}$  [16]. Итерационный алгоритм требует определения нескольких коэффициентов, но может быть неудобным.

Однако все коэффициенты до необходимых больших порядков можно вычислить численно без итераций на основе приведенного выше алгоритма. Сходимость метода весьма быстрая, если  $d < 1$  нм, высота барьера порядка и  $< 0.5$  эВ, напряжение  $< 1$  В, а эффективная масса порядка и менее  $0.1m_e$ . Такие параметры характерны для полупроводниковых туннельных диодов, когда в тонком обедненном носителями слое ДП имеет значения 12–17, т.е. барьер снижается более чем на порядок за счет ДП и малой ширины. Именно такие барьеры возникают в резонансно-туннельных структурах, выполненных по технологии GaAs–Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As и аналогичным технологиям.

Приведем другой более простой алгоритм, основанный на методе рядов для переменной  $z = x/d - c$ . Для такой замены УШ для ВФ  $\varphi(z) = \psi(z + c)$  упрощается и принимает вид  $\varphi''(z) = az\varphi(z)$ ,  $-c \leq z \leq 1 - c$ . Это также уравнение для функций Эйри  $\text{Ai}(a^{1/3}z)$ ,  $\text{Bi}(a^{1/3}z)$ . Но мы будем использовать интегрирование методом рядов  $\varphi(z) = \alpha_0 + \alpha_1 z + \alpha_2 z^2 + \dots$ , которое приводит к рекуррентной формуле  $\alpha_n = a\alpha_{n-1}/[n(n-1)]$ ,  $n = 3, 4, \dots$  и к соотношениям  $\alpha_{3m+2}$ ,  $m = 0, 1, 2, 3, \dots$ . Согласно рекуррентной формуле, все коэффициенты  $\alpha_{3m}$  выражаются через  $\alpha_0$ , а коэффициенты  $\alpha_{3m+1}$  — через  $\alpha_1$ ,  $m = 1, 2, 3, \dots$  в виде  $\alpha_{3m} = \alpha_0 a^m \times (3m-2)!!! / (3m)!$ ,  $\alpha_{3m+1} = \alpha_1 a^m (3m-1)!!! / (3m+1)!$ . Здесь мы обозначили тройной факториал:  $n!!! = n(n-3)!!!$ , где  $1!!! = 1$ ,  $2!!! = 2$ ,  $3!!! = 3$  (аналогично определяется двойной факториал:  $n!! = n(n-2)!!$ ,  $1!! = 1$ ,  $2!! = 2$ ). Имеем формулы  $(3n)!!! = 3^n n!$ ,  $n! = n!!!(n-1)!!!(n-2)!!!$ . Делаем замены  $3m = k$ ,  $\tau = z^3 a$  и получаем общее решение  $\Psi(\tau) = \alpha_0(1 + \psi_0(\tau)) + \alpha_1(\tau/a)^{1/3}(1 + a\psi_1(\tau))$ , где обозначены функции

$$\psi_0(\tau) = \sum_{k=1}^{\infty} \tau^k \frac{(3k-2)!!!}{(3k)!} = \sum_{k=1}^{\infty} \tau^k \frac{1}{(3k)!!!(3k-1)!!!}, \quad (7)$$

$$\psi_1(\tau) = \sum_{k=1}^{\infty} \tau^k \frac{(3k-1)!!!}{(3k+1)!} = \sum_{k=1}^{\infty} \tau^k \frac{1}{(3k+1)!!!(3k)!!!}. \quad (8)$$

Переменная в них изменяется в пределах  $\tau_0 \leq \tau \leq \tau_1$ ,  $\tau_0 = -b^3/a^2$ ,  $\tau_1 = (1-c)^3 a$ . Далее необходимо будет вычислять их производные. Очевидно,  $\partial_x \psi_{0,1}(\tau) = 3az^2 \psi'_{0,1}(\tau)/d$ . Производные по  $\tau$  введенных функций имеют вид

$$\psi'_0(\tau) = \sum_{k=1}^{\infty} \tau^{k-1} k \frac{(3k-2)!!!}{(3k)!} = \sum_{k=1}^{\infty} \tau^{k-1} \frac{k}{(3k)!!!(3k-1)!!!}, \quad (9)$$

$$\psi'_1(\tau) = \sum_{k=1}^{\infty} \tau^{k-1} k \frac{(3k-1)!!!}{(3k+1)!} = \sum_{k=1}^{\infty} \tau^{k-1} \frac{k}{(3k+1)!!!(3k)!!!}. \quad (10)$$

Графики этих функций и их производных приведены на рис. 3. Максимальное по модулю значение  $|\tau| \sim \max(a, b^3/a^2)$ , при этом  $\tau_0$  — отрицательное,

а  $\tau_1$  — отрицательное при  $b < a$  (в этом случае ряды — знакопеременные и быстро сходящиеся), а при  $b \sim a$  и  $b < a$  величина  $\tau_1$  мала. Поэтому условие  $(\max|\tau|)^k (3k-2)!!! = (3k)!$  приводит к оценке  $k \sim 25$ . При  $\tau < 1$  сходимость рядов в (7), (8) чрезвычайно высокая и достаточна для того, чтобы удержать в рядах несколько членов. При  $\tau = 10$  имеем в (7) пятнадцать точных знаков после запятой при учете 15 членов ряда. При  $\tau = 100$  имеем девять точных знаков после запятой для 15 членов ряда, и все 15 точных знаков для 18 членов ряда. При  $\tau = 1000$  необходимое число членов ряда для получения 15 точных знаков равно 34. Из граничных условий следует

$$1 + R(E) = \alpha_0(1 + \psi_0(\tau_0)) - \alpha_1 c(1 + a\psi_1(\tau_0)), \quad (11)$$

$$1 - R(E) = \frac{\alpha_0(3b^2/a)\psi'_0(\tau_0) + \alpha_1[1 + a\psi_1(\tau_0) - (3b^3/a)\psi'_1(\tau_0)]}{ik_0 d}, \quad (12)$$

$$\alpha_0(1 + \psi_0(\tau_1)) + \alpha_1(1 - c)(1 + a\psi_1(\tau_1)) = \tilde{T}, \quad (13)$$

$$\frac{\alpha_0 3a(1-c)^2 \psi'_0(\tau_1) + \alpha_1[1 + a\psi_1(\tau_1) + 3a^2(1-c)^3 \psi'_1(\tau_1)]}{ik_0 d} = \tilde{T}. \quad (14)$$

Решение задачи принимает вид

$$Y(E) = \frac{1 - R}{1 + R} = \frac{(3b^2/a)\psi'_0(\tau_0) + \ddot{G}[1 + a\psi_1(\tau_0) - (3b^3/a)\psi'_1(\tau_0)]}{ik_0 d[1 + \psi_0(\tau_0) - \ddot{G}(c + b\psi_1(\tau_0))]}, \quad (15)$$

$$\ddot{G} = \frac{ik_0 d(1 + \psi_0(\tau_1)) - 3a(1-c)^2 \psi'_0(\tau_1)}{1 + a\psi_1(\tau_1) + 3a^2(1-c)^3 \psi'_1(\tau_1) - ik_0 d(1-c)(1 + a\psi_1(\tau_1))}. \quad (16)$$

Коэффициенты вычисляются по формулам  $\alpha_1 = \ddot{G}\alpha_0$ ,

$$\alpha_0 = 2 \left[ 1 + \psi_0(\tau_0) + \frac{3b^2 \psi'_0(\tau_0)}{ik_0 d a} - \ddot{G} \left( c + ca\psi_1(\tau_0) - \frac{1 + a\psi_1(\tau_0) - 3b^3 \psi'_1(\tau_0)/a}{ik_0 d} \right) \right]^{-1}. \quad (17)$$

При большом анодном напряжении правая ТП почти равна  $d$  (рис. 2), и тогда треугольный барьер стоит на постаменте  $\Delta V$ , т.е.  $V(x) \approx E_F + W - (W + eU_a - \Delta V)x/d$ . Для аппроксимации кривой  $a$  (или 4) (рис. 1) имеем  $\Delta V \approx 4$  эВ. В этом случае  $a = 2m_e d^2 (eU_a - \Delta V + W)/\hbar^2$ , и для  $d = 1$  нм в вакуумном диоде имеем  $a = 163$ . Функции (7), (8) и их производные (9), (10) легко вычисляются при малых или отрицательных  $\tau$  (при знакопеременных коэффициентах), но также и при достаточно больших  $\tau$ . Они не зависят от параметров структуры, могут быть вычислены один раз (рис. 3), затабулированы или аппроксимированы, а также выражены через функции Эйри (здесь мы не касаемся этого вопроса). Использовано 100 членов ряда. Результаты

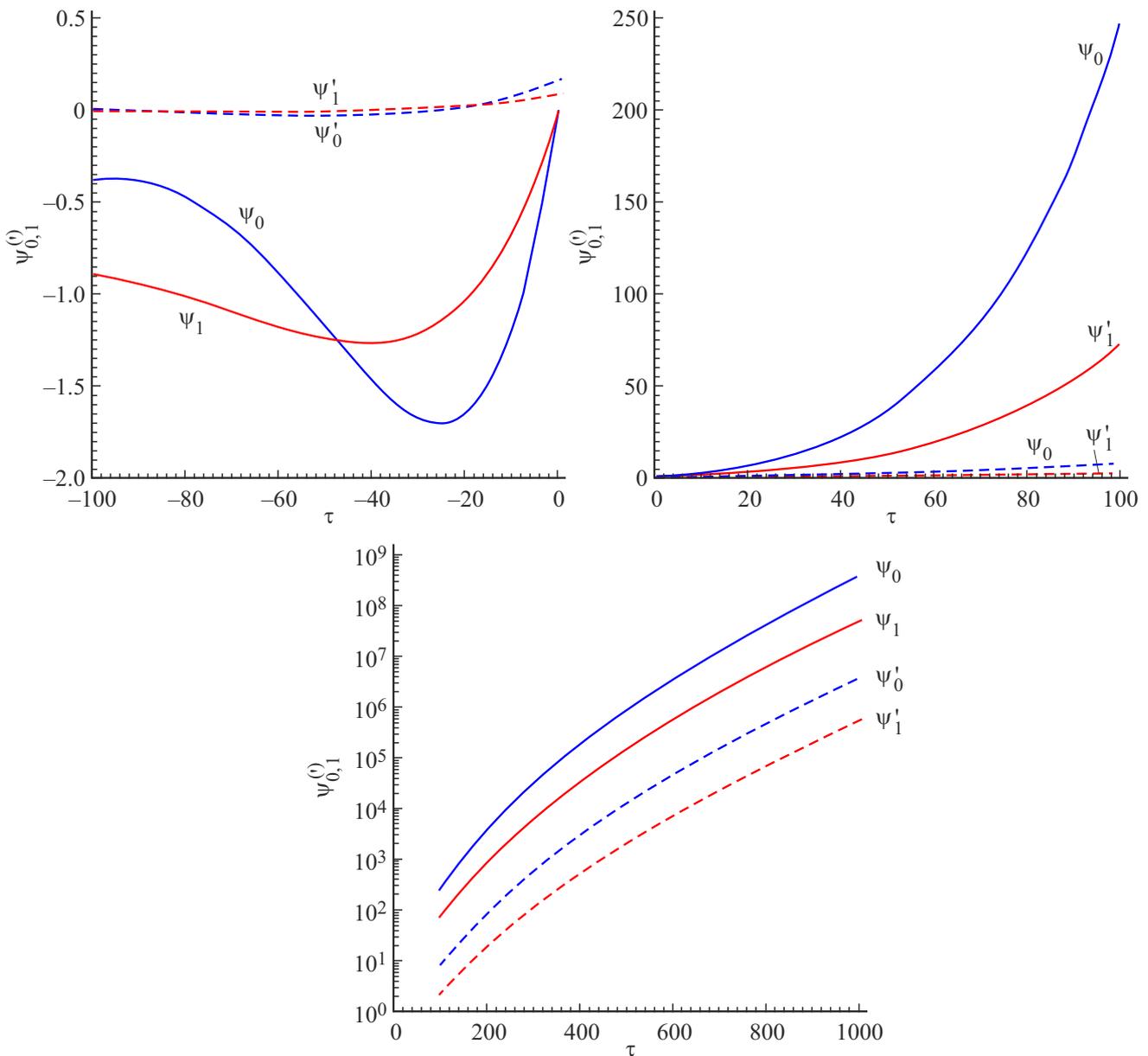


Рис. 3. Графики функций (7)–(10).

не изменяются при учете 200 членов. Коэффициент  $a$  сильно уменьшается при  $d < 1$  и в случае малого  $U_a$ . При этом из-за сближения электродов уменьшается и эффективная РВ  $W$ . При  $U_a = 0$  и  $d > 1$  барьер аппроксимируется прямоугольным (постоянным) потенциалом  $V = W$  (рис. 1, кривая 1), для которого вместо (7) и (8) фундаментальными решениями УШ являются

$$\cos\left(x\sqrt{2m_e(E_F + W_c - E)/\hbar}\right)$$

и

$$\sin\left(x\sqrt{2m_e(E_F + W_c - E)/\hbar}\right).$$

#### 4. Анализ решений, результаты и выводы

Рассмотрим полученные решения. При  $d = 0$  имеем  $a = b = 0$ ,  $\tau_0 = \tau_1 = 0$ ,  $\psi_0'(0) = 1/6$ ,  $\psi_1'(0) = 1/12$ ,  $\psi_0(0) = \psi_1(0) = 0$ . В 1-м порядке по  $d$  берем  $\ddot{G} = ik_0d$ . В этом же порядке  $Y(E) = \ddot{G}/ik_0d = 1_0$ , т.е.  $R = 0$ ,  $D = 1$ ,  $T = 1 + R = 1$ . Это бесконечно узкий барьер. Если  $d > 0$ , то имеем ТП  $l = d(E_F + W - E)/(eU_a + W)$  и прозрачность  $\tilde{D} = |\tilde{T}|^2 = 1 - |\tilde{R}|^2$ . В случае  $l = d$  должно быть  $E = E_F - eU_a$ , и малую окрестность этого уровня надо исключать из решения, поскольку для него ВЧ равно нулю. Если  $E_F - eU_a > 0$ , то барьер принимает форму треугольника высоты  $W + eU_a$  на постаменте

высоты  $E_F - eU_a$  (рис. 2, *b*). Туннелирование на уровень ниже постаменты ( $0 < E \leq E_F - eU_a$ ) возможно, если предварительно с него электрон переходит на УФ анода  $E_F - eU_a$ , поглощая квант энергии  $E_F - eU_a - E$ . При этом на катоде за счет эффекта Ноттингема выделяется квант энергии  $E_F - E$ . Таким образом, полное выделение тепла за один акт перехода электрона равно  $eU_a$  и происходит за счет работы источника питания. Эта же энергия выделяется и при туннелировании с более высоких уровней, когда электрон на аноде отдает энергию  $E - E_F + eU_a$ , переходя на УФ анода. Выделение или поглощение энергии происходит на длине свободного пробега за счет взаимодействия электронов с фононами электродов. Туннелирование при  $E \leq E_F - eU_a$  мало. При очень большом напряжении  $eU_a \gg E_F$  имеем узкий треугольный барьер рис. 2, *a* (штриховая линия).

Для малых  $a$  и  $b$  вполне удобно использовать разложение (5) с коэффициентами из таблицы. Так, при  $d = 1$  нм,  $W = 2$  эВ,  $E_F = 0.5$  эВ, эффективной массе  $0.067m_e$ , ДП  $\varepsilon = 14$  имеем  $a = 2.02$ , и для электрона на вершине барьера ( $E = E_F + W/\varepsilon = 0.64$  эВ) имеем  $b = 0$  и  $\varphi_0(t) \approx 2t^3/3! + 16t^6/6! + 224t^9/9! + \dots$ ,  $\varphi_1(t) \approx 4t/4! + 40t^7/7! + 640t^{10}/10! + \dots$ . Поскольку  $t \leq 1$ , члены рядов сильно убывают, и при  $t = 1$  третьи члены дают максимальные поправки  $< 0.2\%$ , т.е. их можно опустить и взять решение в виде  $\psi(t) = \alpha_0(1 + 2t^3/3! + 16t^6/6!) + \alpha_1(t + 4t^4/4! + 40t^7/7!)$ . Этот случай соответствует диоду из легированного GaAs с обедненным носителями слоем  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  толщиной  $d = 1$  нм. Мы уменьшили РВ согласно взаимному влиянию электродов. При  $d = 2$  нм РВ немного увеличится, однако вклад  $W/\varepsilon$  мал, и все коэффициенты возрастут примерно в 4 раза, а результат можно применять и к такому диоду. Для вершины барьера  $b = 0$ , и получаем  $R \approx -ik_0d/4 - (k_0d)^2/12 \approx -ik_0d/4$ .

Рассмотрим случай частицы на вершине треугольного барьера ( $eU_a = E_F$ ,  $E = E_F + W$ ) для других решений. Для (13) при  $b = 0$  имеем  $\tau_0 = 0$ ,  $\tau_1 = a = k_0^2d^2$ ,  $\tau = at^3$  и  $Y = \ddot{G}/(ik_0d) \neq 1$ , т.е. полного прохождения барьера (как диктует формула ФН) нет. Пусть барьер узкий, т.е.  $a = k_0^2d^2 \ll 1$  и  $\psi_0(a) \approx 1/6$ ,  $\psi_1(a) \approx a/12$ ,  $\psi'_0(a) \approx 1/6$ ,  $\psi'_1(a) \approx 1/12$ . Тогда  $\ddot{G} \approx ik_0d - (k_0d)^2/2$ ,  $Y(E) \approx 1 + ik_0d/2$  и имеем коэффициент отражения  $R \approx -ik_0d/4$  как указано выше. Он мал, но не нулевой. Если  $\tau_1 = a \gg 1$ , то это соответствует широкому барьеру (прямоугольной ступеньке) и должно приводить к полному отражению. При этом  $1 < \psi'_1(\tau_1) \ll \psi'_0(\tau_1) \ll \psi_1(\tau_1) \ll \psi_0(\tau_1)$  (см. также рис. 3), поэтому имеем

$$\ddot{G} = \frac{ik_0d\psi_0(\tau_1) - 3a\psi'_0(\tau_1)}{a\psi_1(\tau_1)[1 - ik_0d] + 3a^2\psi'_1(\tau_1)} \approx -\frac{\psi_0(\tau_1)}{a\psi_1(\tau_1)}. \quad (18)$$

При  $\tau_1 = a = 100$   $\ddot{G} \approx -0.0029268$ , а при  $\tau_1 = a = 5000$  будет  $\ddot{G} \approx -0.000016043$ . В обоих случаях входная проводимость малая, мнимая:  $Y(E) = -i\ddot{G}/(k_0d)$

$= i0.00029288$  в первом и  $Y(E) = i2.269 \cdot 10^7$  во втором случаях. Они соответствуют практически единичным коэффициентам отражения. Только в случае существенного превышения барьера коэффициент отражения стремится к нулю. А именно пусть  $E \gg E_F + W$ . В этом случае движения высоко над барьером величина  $b \approx -(k_0d)^2$  отрицательная и большая по модулю,  $-b \gg a$ ,  $\tau_0 \approx \tau_1 \approx -b^3/a^2$ , все функции и их производные от отрицательных значений малые и  $\psi_{(0,1)}(\tau_0) \approx \psi_{(0,1)}(\tau_1)$ ,  $\psi'_{(0,1)}(\tau_0) \approx \psi'_{(0,1)}(\tau_1)$ . Имеем

$$\ddot{G} = \frac{ik_0da(1 + \psi_0(\tau_0)) + 3b^2\psi'_0(\tau_0)}{a + a\psi_1(\tau_1) - 3b^3\psi'_1(\tau_1) + ik_0db(1 + a\psi_1(\tau_1))}.$$

При больших  $-b$  получаем  $\ddot{G} \approx -\psi'_0(\tau_0)/(b\psi'_1(\tau_0)) \approx 0$ , т.е.  $Y \approx 1$  и  $R \approx 0$ , что соответствует надбарьерному прохождению.

В модели на основе цилиндрических функций для частицы на вершине барьера при  $b = 0$  и  $c = 0$  имеем коэффициент отражения

$$R = C_1 \left[ ik_0d(\text{Ai}(0) + \text{Bi}(0)G) - a^{1/3}(\text{Ai}'(0) + \text{Bi}'(0)G) \right] / 2 \\ = C_1 \left[ ik_0d\text{Ai}(0)(1 + \sqrt{3}G) - a^{1/3}\text{Ai}'(0)(1 - \sqrt{3}G) \right] / 2,$$

$$C_1 = \frac{2}{\text{Ai}(0) + \text{Bi}(0)G} = \frac{2}{\text{Ai}(0)(1 + \sqrt{3})G},$$

$$G = \frac{a^{1/3}\text{Ai}'(a^{1/3}) - ik_0d\text{Ai}(a^{1/3})}{ik_0d\text{Bi}(a^{1/3}) - a^{1/3}\text{Bi}'(a^{1/3})}.$$

Для малых длин  $d$  получаем

$$G \approx -\text{Ai}'(a^{1/3})/\text{Bi}'(a^{1/3}) \approx -1/\sqrt{3}$$

и соответственно

$$R = -2\sqrt{3}(3a)^{1/3}\Gamma(2/3)/[\Gamma(1/3)(1 + \sqrt{3})] \approx 0.$$

Для больших длин  $G \approx 0$ ,  $C_1 = 2/\text{Ai}(0)$ , проводимость  $Y = i0.729a^{1/3}/(k_0d)$  — величина малая по модулю и  $R \approx 1 - 1.458ia^{1/3}/(k_0d) \approx 1$ .

Приведенные на рис. 1 профили барьеров получены по формуле [1,2]

$$Y(x) = E_F + \tilde{W} \left[ 1 - \frac{\delta d}{(x + \delta(1 - x/d))(d - x + x\delta/d)} \right] - eU_a \frac{x}{d}. \quad (19)$$

Она, естественно, отличается от использованной выше линейной аппроксимации и дает реальный профиль барьера в диоде на основе изображений с учетом РВ материала катода  $W_d = e^2/(16\pi\varepsilon_0\delta)$ . В ней величина  $\tilde{W} = W_c(1 - \alpha/d)/\varepsilon$  определяет высоту барьера с учетом влияния анода и диэлектрика,  $\alpha = \delta(1 + 2\ln(2))$ . Реальная высота барьера  $W = V(x_{\max}) - E_F$  над уровнем Ферми (рис. 1) несколько меньше. Она определяется правым членом и может быть вычислена из уравнения

$V'(x_{\max}) = 0$ . Кривые на рис. 1 соответствуют относительно низким напряжениям в вакуумном диоде с медными электродами и приведены для наглядности. Более близкой к треугольному профилю является кривая 4 (или  $a$ ) для анодного напряжения  $U_a = 7$  В. Линейной аппроксимацией ей соответствует линия  $c$ . Более точная аппроксимация дается ломаной  $b$ . Для ее построения нужно определить энергию  $E_{ip}$ , где имеет место максимум второй производной  $-V''(x_{ip})$ . Это ТП. В нашем случае  $E_{ip} \approx 4$  эВ,  $x_{ip} \approx d$ . Можно аппроксимировать барьер тремя ломаными, однако двух вполне достаточно. С увеличением  $U_a$  точка  $x_{ip}$  приближается к  $d$ , максимум смещается на катод, а профиль типа  $c$  все более точно описывает барьер. На рис. 4 приведены прозрачности  $D(E, U_a)$  для кривых на рис. 1. Далее они использованы для вычисления плотности тока (рис. 5), определяемой для термополевой эмиссии с катода интегралом [1,2]

$$J(U_a, T) = \frac{em_e k_B T}{2\pi^2 \hbar^3} \times \int_0^{3E_F} D(E, U_a) \ln\left(1 + \exp\left(\frac{E_F - E}{k_B T}\right)\right) dE. \quad (20)$$

На рис. 6 приведены прозрачности (в виде символов \*) на основе формул (6) и (15) для треугольного барьера высоты  $E_F + W = 8$  эВ и  $E_F = 7$  эВ при  $d = 2$  нм,  $d = 1$  нм и  $d = 0.5$  нм. Они сравниваются с численным решением УШ методом трансформации волнового импеданса с использованием 300 шагов. Как видно, результаты практически совпадают. Результаты на основе формулы (6) получены с использованием 20 членов в рядах и двух итераций. С вычислительной точки зрения результаты на основе формулы (15) более предпочтительны, чем на основе формул (3) и (6). Они требуют существенно меньше вычислительных затрат, чем численное решение УШ.

Результаты на рис. 5 приведены для разных температур катода и анода. Формула (20) соответствует вырожденному газу электронов в металле, при этом электроны распределены по закону Ферми–Дирака (при  $T = 0$  верхний предел равен  $E_F$ ). В (20) вместо бесконечного предела взят верхний предел  $3E_F$ . Это более чем достаточно для учета термоэмиссии при температуре катода  $T < 2000$  К. Вполне достаточно верхний предел  $2E_F$ , поскольку при  $k_B T \sim 0.2$  эВ логарифм можно заменить малой экспонентой, и при  $D(E, U_a) \approx 1$  для остатка интеграла при  $E_F = 7$  эВ получим значение  $1.26 \cdot 10^{-16}$ . Плотность (20) положительная и определяет анодный ток, хотя туннелируют отрицательно заряженные электроны с катода ( $e > 0$ ). При  $T > 0$  электроны с положительной энергией на аноде также могут туннелировать на катод, при этом коэффициент туннелирования  $D(E, U_a)$  тот же (считаем  $T_e = T_a = T$ ). Однако число таких электронов пропорционально  $k_B T \ln(1 + \exp((E_F - eU_a - E)/(k_B T)))$ , т.е. существенно меньше, чем на катоде в формуле (20).

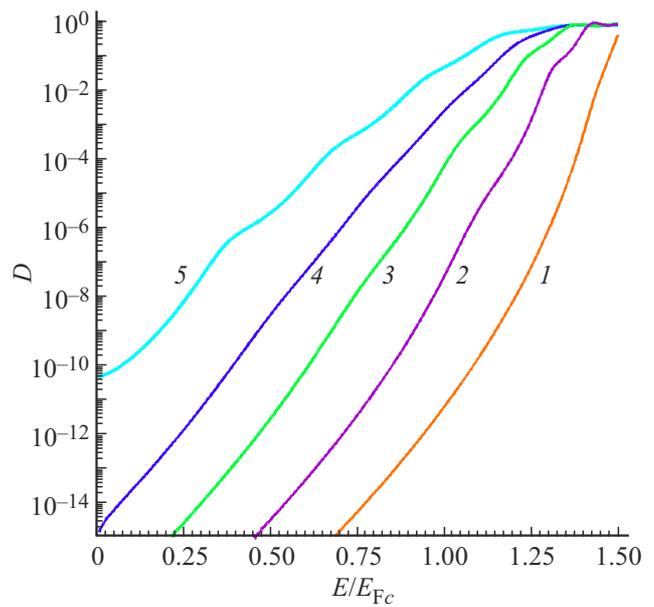


Рис. 4. Прозрачность барьера вакуумного диода  $d = 2$  нм при  $U_a$ , В: 1 — 1, 2 — 4, 3 — 7, 4 — 10, 5 — 15.

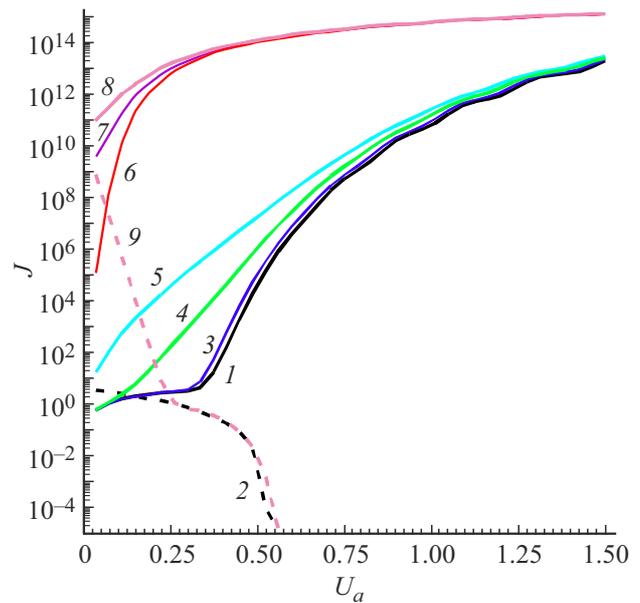
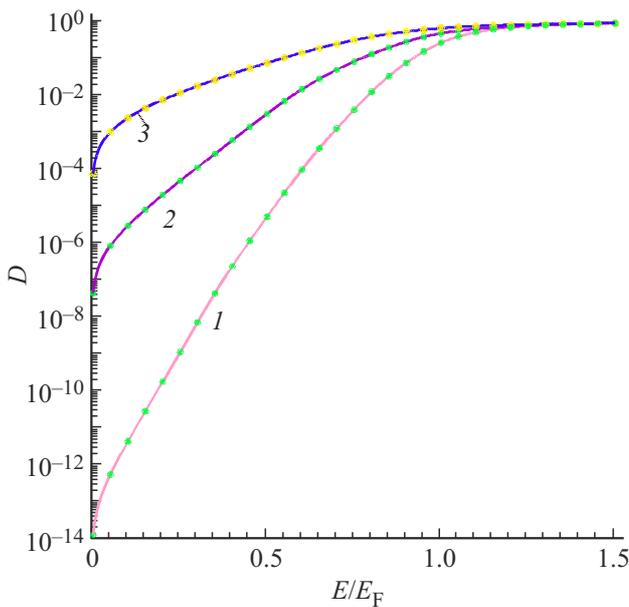


Рис. 5. ВАХ вакуумного диода ( $\text{Ам}^{-2}/\text{В}$ ) длиной  $d = 2$  нм (кривые 1–5) и такого же диода с заполнением CVD алмазом (7–9) при разных температурах, К:  $T_c = T_a = 300$  (1, 2, 6), 800 (3, 7),  $T_c = 1500, T_a = 300$  (4),  $T_c = T_a = 1200$  (5, 8, 9). Штриховые кривые 2 и 9 показывают обратные плотности тока соответственно для кривых 1 и 8.  $E_{Fc} = E_{Fa} = 7$ ,  $W_c = W_a = 4.36$  эВ.

При малой температуре это число пропорционально  $E_F - eU_a - E$ , тогда как на катоде оно пропорционально  $E_F - E$ . Плотность электронов у дна зоны проводимости максимальная, а величина  $E_F - eU_a - E$  определяет более высокие уровни энергии относительно дна зоны



**Рис. 6.** Прозрачность  $D$  на основе численного решения УШ для  $d = 2$  нм (кривая 1), 1 нм (2) и 0.5 нм (3), а также результаты на основе формулы (15) (\*\*\*) для первых двух случаев и формулы (6) (\*\*\*) для третьего случая. (Цветной вариант рисунка представлен в электронной версии статьи).

проводимости анода, чем  $E_F - E$  относительно аналогичного дна катода. При  $eU_a = E_F$  и  $T_a = 0$  на аноде нет электронов с положительными энергиями, которые могли бы туннелировать на катод (все заполненные уровни отрицательные), и обратный ток отсутствует. При малых анодных напряжениях или при сильно нагретых электродах в диоде следует учитывать полный ток как разность двух потоков электронов с катода и с анода.

## 5. Заключение

В работе получены следующие результаты. В диодной структуре с обостренной вершиной квантового потенциала (для узкого барьера) модуль коэффициента отражения для энергии на уровне вершины мал, порядка  $k_0 d$ , и с уменьшением  $d$  стремится к нулю. При весьма высоком анодном напряжении барьер практически пропадает, превращаясь в линейный скос в квантовую яму. Для очень широкого барьера и малого анодного напряжения модуль  $|R|$  близок к единице и только при некотором превышении барьера начинает стремиться к нулю. В диодных структурах при малых анодных напряжениях следует учитывать туннелирование в обе стороны. Сильноточные диодные наноструктуры следует выполнять, используя хорошие диэлектрики с высокой теплопроводностью типа алмаза и BeO. При этом сильно снижается барьер, рабочие напряжения и увеличивается ток.

В качестве заключения отметим следующее. В работе получены точно решаемые модели для треугольного

барьера. Они применимы к диодным и к триодным (транзисторным) структурам, если барьеры имеют близкие к треугольной формы, что зачастую имеет место при узких барьерах и существенных напряжениях. Точно решаемые модели имеют преимущество перед приближенными, заключающиеся в достоверности результатов. В частности, треугольная модель барьера более предпочтительна, чем прямоугольная и тем более чем  $\delta$ -образная. Преимущество полученной модели перед численными решениями УШ в том, что она более быстрая, что существенно в нестационарных моделях приборов при воздействии переменного напряжения при большом числе изменений высот барьеров [8]. Для сложных многоямных и многобарьерных структур полученные модели позволяют строить безразмерную матрицу передачи (переноса) всей структуры и тем самым увеличить скорость моделирования. Матрица связывает ВФ и ее производную на обеих сторонах структуры. Если имеется несколько таких участков, то полная матрица определяется в виде произведения матриц. По сравнению с кусочно-постоянной аппроксимацией потенциала, где необходимо использовать порядка нескольких сотен произведений таких матриц [1], это приводит к существенному выигрышу и уменьшению численной погрешности. Примененный метод интегрирования УШ может быть использован при параболической аппроксимации потенциала, включая параболу 4-го порядка, которые более точно описывают форму (19). Следует отметить, что функции (7)–(10), по-видимому, более удобны, чем функции Эйри.

## Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках государственного задания (№ FSRR-2023-0008).

## Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

## Список литературы

- [1] M.V. Davidovich, I.S. Nefedov, O.E. Glukhova, M.M. Slepchenkov. *J. Appl. Phys.*, **130**, 204301 (2021). DOI: 10.1063/5.0067763
- [2] М.В. Давидович. *ЖТФ*, **94** (1), 32 (2024). DOI: 10.61011/JTF.2024.01.56899.170-23
- [3] Е.А. Нелин. *УФН*, **177**, 307 (2007). DOI: 10.3367/UFN.0177.200703d.0307
- [4] Ю.А. Чаплыгин, В.К. Неволин, В.А. Петухов. *ДАН*, **436** (2), 179 (2011). DOI: 10.1134/S1028335811010058
- [5] К.С. Гришаков, В.Ф. Елесин. *ФТП*, **50** (8), 1113 (2016). [K.S. Grishakov, V.F. Elesin, *Semiconductors*, **50**, 1092 (2016)]. DOI: 10.1134/S1063782616080121

- [6] И.И. Абрамов, И.А. Гончаренко, Н.В. Коломейцева. ФТП, **41** (11), 1395 (2007). [I.I. Abramov, I.A. Goncharenko, N.V. Kolomeitseva. Semiconductors, **41**, 1375 (2007)]. DOI: 10.1134/S106378260711019X
- [7] В.Ф. Елесин, И.Ю. Катеев, М.А. Ремнев. ФТП, **43** (2), 269 (2009). [V.F. Elesin, I.Yu. Kateev, M.A. Remnev. Semiconductors, **43**, 257 (2009)]. DOI: 10.1134/S1063782609020250
- [8] М.В. Давидович. Письма ЖЭТФ, **110** (7), 465 (2019). [M.V. Davidovich. JETP Letters, **110** (7), 472 (2019)]. DOI: 10.1134/S0370274X19190068
- [9] А.С. Давыдов. *Квантовая механика* (М., Наука, 1973).
- [10] Z. Ahmed, D. Ghosh, S. Kumar, N. Turumella. Eur. J. Phys., **39** (2), 025404 (2018). DOI: 10.1088/1361-6404/aa8c0c
- [11] R. Elpelt, O. Wolst, H. Willenberg, S. Malzer, G.H. Döhler. Phys. Rev. B, **69**, 205305 (2004). DOI: 10.1103/PhysRevB.69.205305
- [12] E.-S. Malureanu. U.P.B. Sci. Bull., Ser. A, **76** (2), 251 (2014).
- [13] R.G. Forbes, J. Deane. Proc. Royal Soc. A, **467** (2134), 2927 (2011). DOI: 10.1098/rspa.2011.0025
- [14] Э. Камке. *Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям* (М., Изд-во иностр. лит., 1950).
- [15] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика. Нерелятивистская теория* (М., ГИФМЛ, 1963).
- [16] М.В. Давидович, А.К. Кобец, К.А. Саяпин. Физика волновых процессов и радиотехнические системы, **24** (3), 18 (2021). DOI: 10.18469/1810-3189.2021.24.3.18-27

Редактор Г.А. Оганесян

## Analytical solution of the one-dimensional schrodinger equation with linear potential in diode

M.V. Davidovich

Saratov National Research State University  
named after N.G. Chernyshevsky,  
410012 Saratov, Russia

**Abstract** An analytical solution of the Schrodinger equation with a potential in the form of a linear function is obtained by three methods. Their results correspond to each other and to the numerical solution. The current in the vacuum diode is calculated taking into account the temperature.