01

Туннелирование и термополевой ток в диодной структуре металл–диэлектрик–металл

© М.В. Давидович

Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского,
410012 Саратов, Россия
e-mail: davidovichmv@info.sgu.ru

Поступило в Редакцию 1 июля 2024 г.
В окончательной редакции 18 ноября 2024 г.
Принято к публикации 6 декабря 2024 г.

Получено аналитическое решение одномерного уравнения Шредингера с потенциалом в виде квадратичной функции координаты и функции четвертого порядка от координаты. Найдено аналитическое выражение для прозрачности диода в зависимости от энергии электрона и анодного напряжения. Определена явная аналитическая вольт-амперная характеристика диода как функция анодного напряжения и температур электродов. Рассчитан туннельный ток в диоде с учетом температуры и построены его вольт-амперные характеристики.

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

DOI: 10.61011/JTF.2025.06.60455.219-24

Введение

Хотя плоский диод является простой структурой, аналитические выражения для зависимости прозрачности $D(E, U_a)$ от энергии и анодного напряжения при туннелировании электронов для него не известны. Также аналитически не известны вольт-амперные характеристики (ВАХ) и $J(U_a, T_c, T_a)$ — зависимости плотности тока от анодного напряжения U_a (электростатического потенциала анода) и температур катода T_c и анода T_a. Хотя эти величины могут быть вычислены в используемых моделях туннелирования [1–6], они важны для вакуумной электроники (включая наноэлектронику), а также для твердотельной и полупроводниковой электроники. В ряде задач при моделировании указанные параметры многократно изменяются и вычисляются. Знание аналитических ВАХ весьма важно при рассмотрении взаимодействия диода со схемой включения. Моделирование туннельных приборов с начала возникновения этого понятия (1928 г.) постоянно совершенствуется (см. [7–9] и литературу там). Сначала рассматривалось туннелирование из плоского удаленного металлического катода с заданием на нем электрического поля. Затем началось исследование влияния структуры поверхности катода и его материала на туннелирование [7–9]. Выяснилось влияние проникновения поля в полупроводниковые и углеродные структуры, включая нанопористые структуры. Получены формы потенциального барьера и влияние на него электродов в наноразмерных структурах [1–4]. Разделение эмиссии на автоэлектронную (полевую) и термоэлектронную [8] свелось к единой термополевой эмиссии [3].

Мы рассматриваем простейшую модель диода металл–диэлектрик–металл (или металл–изолятор–металл MIM) без проникновения поля в металлические электроды. Металлы полагаем хорошо проводящими, т. е. глубина проникновения Дебая $L_D = \sqrt{\varepsilon_0 \varepsilon k_B T (e^2 N_e)}$ в них порядка размера атомного слоя при концентрация свободных электронов $N_e \sim 10^{29}\,\mathrm{m}^{-3}$, а низкочастотная диэлектрическая проницаемость (ДП) кристаллических решеток $\varepsilon \sim 10$.

Цель настоящей работы — получение аналитических соотношений для диода. Структура работы следующая: сначала получаем точные профили квантового потенциала, затем получаем их параболические аппроксимации, на основе которых решаем уравнение Шредингера (УШ) и находим прозрачности при заданной энергии. Затем вычисляем интегральную плотность тока в зависимости от напряжения на аноде и приближенно аналитически вычисляем полученные интегралы с целью получения явных зависимостей. Относящиеся к катоду величины помечаем индексами „c“ или „+“, а к аноду соответственно „a“ или „–“. Далее соответствующие катоду индексы иногда будем опускать. Туннелирование, особенно в резонансно-туннельных структурах (РТС) при большом токе, сопровождается разогревом электродов [1], поэтому знание температурных зависимостей ВАХ также важно. Теория Фаулера–Нордгейма (ФН) (или ВКБ приближение) применима для холодной эмиссии при весьма удаленном аноде и при энергиях, на уровне которых потенциальный барьер достаточно широкий, что для наноструктур не выполняется. Кроме того, получаемая прозрачность содержит неизвестный предэкспоненциальный множитель [10]. Поэтому для диода необходимо решать одномерное УШ вида $(-\hbar\partial_{xx}^2/(2m_e) + V(x) - E)\psi(x) = 0$ с квантовым по-

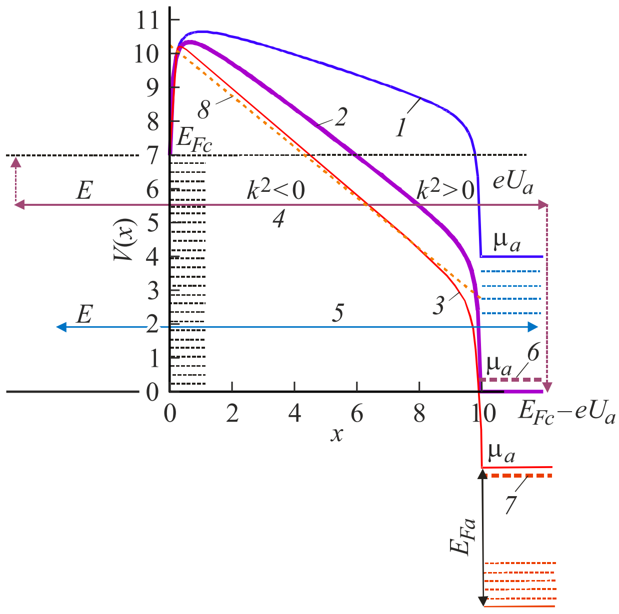

Рис. 1. Форма потенциального барьера V [eV] и энергетические диаграммы в вакуумном диоде $d = 10$ nm в зависимости от координаты x [nm] при разных анодных напряжениях (V): 3 (кривая *1*), 7 (кривая *2*), 9 (кривая *3*). Материал электродов — медь: $E_F = 7$, $W = 4.36$ eV. Линиями *4* и *5* показано туннелирование через барьер 2 и 1 соответственно. Уровни 6 и 7 соответствуют кривым *2* и *3* при $W_a < W_c$ (6) и $W_a > W_c$ (7). Штриховая линия *8* — треугольная аппроксимация барьера 3.

тенциалом $V(x)$, приведенным на рис. 1 и учитывающим влияния электродов [1–4]. Так, $V(0) = E_{Fc}$, $V(d) = E_{Fc} - eU_a$, где U_a — анодное напряжение. Если работы выхода (РВ) $W_{c,a}$ катода и анода различаются, то $V(d) = E_{Fc} - eU_a + W_c - W_a$. Вакуумный диод можно рассматривать как источник электронов и как элемент электронной пушки для электронных приборов [2–4]. Твердотельные диоды обычно используют в генераторах различных диапазонов частот. Переход к вакуумному диоду в полученных соотношениях происходит при подстановке ДП $\varepsilon = 1$. Модель не учитывает полупроводниковые электроды с глубиной проникновения поля от долей нанометров до десятков и сотен нанометров. Также она не применима к туннельным диодам, в которых рассматриваются туннельный и диффузионный токи, т. е. между электродами должен быть диэлектрик, который полагается идеальным. В рассматриваемом диоде при малых температурах ток носит в основном туннельный характер, а учет температуры приводит к появлению обычно малой температурной составляющей. Однако при больших напряжениях и токах возможен сильный разогрев, и модель учитывает термополевую эмиссию с разными температурами электродов. Считаем поверхности атомарно гладкими.

1. Параболическая аппроксимация потенциала

Входящий в УШ точный потенциал для диода определяется методом многократных изображений [1–4] и приведен в приложении (П1) вместе с обозначениями. Расчеты по (П1) приведены на рис. 1 вместе с энергетическими диаграммами. Далее формулу (П1) аппроксимируем параболой второго и четвертого порядков. Отсчет энергии идет от дна зоны проводимости катода. При большом размере d барьер относительно энергии Ферми (ЭФ) имеет высоту W_c/ε, а при наложении потенциала снижается из-за эффекта Шоттки. При малых d более сильное снижение происходит из-за взаимного влияния электродов. Это снижение весьма сильное при большом анодном напряжении и малом d, при этом максимум барьера смещается к катоду. При критическом потенциале барьер относительно уровня Ферми (УФ) катода пропадает, когда точка максимума попадает на катод. Этот критический потенциал находим из условия $V'(0) = 0$ или $U_a = W_c d/(e\varepsilon\delta_c)$. Для рассмотренного случая вакуумного диода это соответствует анодному напряжению $U_a = 44.4$ V при критическом поле $4.4 \cdot 10^9$ V/m. При таких полях барьер превращается в почти линейный скос к аноду, а для энергий ниже УФ он становится почти треугольным на небольшом прямоугольном пьедестале.

Потенциал (П1) неудобен для аналитического решения УШ. Обычно УШ решают численно, используя кусочно-постоянную аппроксимацию [2–4]. Для построения барьера используются также параболическая аппроксимация [3,4], $s = 2$ в (1), а также более точная аппроксимация параболой четвертого порядка [4], $s = 4$:

$$V(x) = E_F + \frac{W_c}{\varepsilon}\left(1 - \frac{a}{d}\right)\left[1 - \left(\frac{2x}{d} - 1\right)^s\right] - \frac{eU_a x}{d}. \quad (1)$$

Еще более точная аппроксимация, отличающаяся от (П1) не более чем на 1%, также может быть построена [1–4], но она неудобна для аналитического решения. В работе [3] приведено сравнение точной формулы (П1) с параболической аппроксимацией по формуле (1) при $s = 2$ и 4 при $U_a = 0$, а также с приведенной там более точной аппроксимацией. Расчеты показывают, что аппроксимация (1) с $s = 2$ достаточно хорошо описывает узкий барьер и дает погрешность порядка нескольких процентов для широкого. Формула с $s = 4$ имеет погрешность порядка 1%. В ней точно учтена высота барьера в центре и его значения на электродах. Учет анодного потенциала в виде добавления точного линейного члена $-eU_a x/d$ не изменяет точность. Решение УШ с барьером (1) имеет ту же погрешность, что и сама его форма. Приближенное описание барьера в виде фигуры прямоугольной формы, треугольной формы, треугольной формы на постаменте (трапеции), часто используемое в литературе, вносит существенную погрешность в ток. Так, треугольный барьер сильно занижает, а прямоугольный барьер той же ширины — завышает ток в разы. В формуле (1) материалы электродов считаются одинаковыми, величина $\widetilde{W} = W_c(1 - \alpha/d)$ означает РВ, сниженную за счет влияния электродов, а учитывающий это параметр $\alpha = \delta(2.7716 - 16\delta/(3d)) \approx 2.7716\delta$ мал. Далее РВ и ЭФ для электродов берем одинаковыми, поскольку эффект разных материалов просто сводится к добавлению члена $(W_c - W_a)x/(\varepsilon d)$ к потенциалу V. Вводим также величину $W = \widetilde{W}/\varepsilon$, определяющую уменьшение барьера за счет диэлектрика. Для получения аналитического решения УШ используем аппроксимацию (1) при $s = 2$ и 4. В этом случае, делая в (1) при $s = 2$ замену переменных $\tau = 2x/d - 1$, имеем квантовый потенциал

$$V(\tau) = E_F + W(1 - \tau^2) - eU_a(1 + \tau)/2,$$

а также УШ $\phi''(\tau) = (a\tau^2 + b\tau + c)\phi(\tau)$. В нем обозначены безразмерные коэффициенты

$$a = d^2 m_e W/(2\hbar^2),$$

$$\tilde{b} = d^2 m_e U_a/(4\hbar^2),$$

$$\tilde{c} = d^2 m_e(E - E_F - W + eU_a/2)/(2\hbar^2). \qquad (2)$$

Также

$$\tilde{c} = -d^2 m_e(E_F - E)/(2\hbar^2) - a + \tilde{b}.$$

Здесь при $0 \le x \le d$ новая переменная изменяется в пределах $-1 \le \tau \le 1$. Удобнее сделать еще одну замену: $t = (\tau + 1)/2$, $\varphi(t) = \phi(2t - 1)$, $\varphi''(t) = 4\phi''(\tau)$. Тогда переменная t изменяется в пределах $0 \le t \le 1$, а УШ принимает вид $\varphi''(t) = \big(a(2t - 1)^2 + \tilde{b}(2t - 1) + \tilde{c}\big)\varphi(t)/4$. Его перепишем в виде

$$\varphi''(t) = (at^2 + bt + c)\varphi(t),$$

где

$$b = \tilde{b}/2 - a = d^2 m_e(eU_a/4 - W)/(2\hbar^2),$$

$$c = (\tilde{c} - \tilde{b} + a)/4 = d^2 m_e(E - E_F)/(8\hbar^2).$$

Отметим, что $a > 0$, $\tilde{b} > 0$, а $\tilde{c} > 0$, если $E > E_F + W - eU_a/2$ (прохождение над барьером при малых напряжениях). При малых напряжениях $E < E_F + W - eU_a/2$ соответствует $\tilde{c} < 0$, при этом в основном имеет место туннелирование. При $E = E_F$ $c = 0$. Условию $c < 0$ соответствует туннелирование, а $c > 0$ — надбарьерному прохождению. Если $0 < E < E_F - eU_a$, то туннелирование на уровень E анода возможно, если предварительно электрон с этого уровня переходит на УФ анода $E_F - eU_a$ с поглощением кванта энергии $E_F - eU_a - E$. При этом за счет эффекта Ноттингема на катоде выделяется квант энергии $E_F - E$, т.е. полная выделяемая энергия при переходе одного электрона с катода на анод равна eU_a. Она выделяется за счет работы источника питания. Если $eU_a > 2(E_F + W)$ (большие анодные напряжения), то $\tilde{c} > 0$ для всех энергий. Если $W = 0$, то $a = 0$, и потенциал становится линейным. Наиболее простой вид УШ в этом случае принимает при $E = E_F$ или $c = 0$: $\varphi''(t) = bt\varphi(t)$. Его решение удовлетворяет интегральному уравнению (ИУ)

$$\varphi(t) = \varphi(0) + \varphi'(0)t + b\int_0^t\int_0^\tau t'\varphi(t')dt'd\tau.$$

Заменой $\xi = b^{1/3}t$, $\varphi(t) = u(\xi)$ УШ приводится к виду $u''(\xi) = \xi u(\xi)$ и имеет решения в функциях Бесселя [4]: $u(z) = \sqrt{\xi}Z_{1/3}(2i\xi^{3/2}/3)$ или $u(b^{1/2}x/d) = \sqrt{(b^{1/3}x/d)}Z_{1/3}\big(2i(b^{1/3}x/d)^{3/2}/3\big)$. Здесь $Z_\nu(z) = C_1 J_\nu(z) + C_2 Y_\nu(z)$ — общее решение уравнения Бесселя индекса $\nu = \pm 1/3$, C_1, C_2 — произвольные коэффициенты (постоянные интегрирования). Используя эти функции или функции Эйри, легко решить задачу с инейным потенциалом. Решения в специальных функциях при $a \ne 0$ возможны лишь в частных случаях, а в общем случае не известны.

2. Решение УШ. Параболическая аппроксимация

Решение ищем при заданной энергии E и волновом числе (ВЧ) $k_0 = \sqrt{2m_e E}/\hbar$ на катоде в виде $\psi(x) = \exp(ik_0x) + R\exp(-ik_0x)$. На катоде при $x < 0$ имеем $V(x) = 0$ (рис. 1), т.е. потенциал скачком изменяется от 0 до E_{Fc}. Из граничных условий при $x = 0$ следует

$$1 + R = \varphi(0) = \alpha_0, \quad 1 - R = \varphi'(0) = \alpha_1/(ik_0d),$$

$$Y = (1 - R)/(1 + R) = \alpha_1/(ik_0d\alpha_0), \ 2R = \alpha_0 - \alpha_1/(ik_0d),$$

$$2 = \alpha_0 + \alpha_1/(ik_0d).$$

ВЧ в области барьера $k(x) = \sqrt{2m_e(E - V(x))}/\hbar$ может быть мнимым (рис. 1, область $k^2 < 0$ для кривой *2* до ее пересечения с линией E) или действительным (рис. 1, область $k^2 > 0$ после пересечения кривой *2* с линией E). Точки пересечения соответствуют точкам поворота. Обычно области $k^2 > 0$ при туннелировании не учитываются, т.е. рассматриваются движения до точки поворота x_{pt}. Однако область $x_{pt} < x < d$ изменяет фазу волновой функции (ВФ) и должна быть учтена. В ней частица движется квазиклассически. Обозначим ряд используемых ВЧ. На катоде для энергии E имеем ВЧ k_0. Если частица движется на УФ катода, то $k_c = \sqrt{2m_eE_c}/\hbar$. Если она движется на УФ анода, то (рис. 1)

$$k_a = \sqrt{2m_e(E_{Fc} + W_c - W_a - eU_a)}/\hbar.$$

В области барьера перед анодом

$$k(d) = \sqrt{2m_e(E - E_{Fc} + W_a - W_c + eU_a)}/\hbar.$$

Эти соотношения упрощаются при одинаковых электродах. Электрон с энергией E с катода движется волновым образом до рассеяния на УФ анода, т.е. до достижения анода. Следовательно, ВФ на аноде следует взять в виде $\psi(x) = \bar{T}\exp(ik_0(x-d))$. После рассеяния электрон уходит в источник питания с ВФ

$$\psi(x) = \bar{T}\exp(ik_a(x-d-\lambda_e)).$$

Здесь λ_e — длина свободного пробега (ДСП) электрона на аноде. Для меди $\lambda_e = 42\,\mathrm{nm}$, т.е. эта не подчиняющаяся УШ область может быть существенно больше d. Переход с уровня E на уровень $\mu_a = E_{Fc} + W_c - W_a - eU_a$ анода может сопровождаться выделением (если $E > \mu_a$) или поглощением (если $E < \mu_a$) кванта энергии (рис. 1), т.е. анод либо разогревается, любо охлаждается за счет перехода. Аналогично, обратное туннелирование на катод либо его охлаждает, либо нагревает на величину $|E - \mu_c|$. В среднем электроды разогреваются, причем при большом напряжении анод греется сильнее. При обратном туннелировании на аноде падающая ВФ имеет вид $\psi(x) = R^-\exp\big(-ik_0(x-d)\big)$, а уходящая к источнику волна на катоде — вид $\psi(x) = T^-\exp(-ik_0x)$. Если решать задачу до точки поворота, то коэффициенты отражения и прохождения в обе стороны совпадут: $R^+ = R^- = R$, $T^+ = T^- = \tilde{T}$, причем $|R^\pm|^2 + |T^\pm|^2 = 1$. Точка поворота x_{pt} определяется из условия $E = V(x_{pt})$. Если $eU_a \sim E_F$, то $x_{pt} \approx d$ (рис. 1). Если $eU_a = E_F$,то имеет место равенство $x_{pt} = d$, при этом обратное туннелирование с холодного анода (при $T = 0$) невозможно: все уровни энергии на нем становятся отрицательными. С уровня $E > 0$ анода электрон туннелирует на уровень E катода, а затем переходит на УФ E_{Fc} (рис. 1, линии *4* и *5*). При переходе с уровня E любого из электродов электрон переходит на его УФ, отдавая или поглощая квант энергии, после чего уходит в источник питания. Это процесс уже не волновой или баллистический (как туннелирование), а диффузионный. Он происходит на ДСП и не подчиняется закону сохранения энергии $|R|^2 + |\tilde{T}|^2 = 1$. В любом случае, при переходе одного электрона с катода на анод источник совершает работу eU_a. При $eU_a < E_{Fc}$ обратное туннелирование для положительных уровней на аноде также возможно. Переходя на такой же уровень катода, такой электрон на ДСП замещается электроном с УФ катода, переходя на его уровень. Далее горячий электрон двигается от катода к источнику питания. При таком переходе на катоде поглощается квант энергии и уносится к источнику, т.е. катод охлаждается. Это противоположный эффекту Ноттингема эффект имеет место для обратного туннельного тока. Поскольку число обратно туннелирующих электронов существенно меньше, чем число прямых туннельных переходов, в целом плотность полного анодного тока J положительна, и источник питания в целом нагревает как катод, так и анод. При туннелировании высокоэнергетических тепловых электронов они охлаждают электрод, с которого туннелируют, а попадая на другой электрод, нагревают его, переходя на его более низкий УФ. Эти вклады обычно меньше туннельных. В любом случае мощность источника JU_a расходуется на нагревание электродов. Если на аноде есть уровень энергии E, то коэффициенты прохождения в обе стороны также совпадают, т.е. прозрачности барьера одинаковые и могут быть вычислены как $D(E) = 1 - |R(E)|^2$. Если такого уровня нет (при нуле температуры), то $D^-(E) = 0$, $D^+(E) = |\tilde{T}|^2 = 1 - |R|^2 > 0$. При отличной от нуля температуре $T > 0$ такие уровни есть всегда, поэтому удобно рассматривать одинаковые прозрачности $D^+ = D^- = D$. В таком рассмотрении имеют место скачки волновых сопротивлений (ВС) как на катоде, так и на аноде. Определим нормированные ВС, как

$$\rho = k_0/k = k_0/\sqrt{2m_e(E-V)}/\hbar.$$

Тогда на катоде $\rho = k_0/k_0 = 1$, в прикатодной области $\rho = 1/\sqrt{1 - E_{Fc}/E}$ мнимое (при энергии меньше ЭФ), в прианодной области $\rho_a = 1/\sqrt{1 - E_{Fc}/E + eU_a/E}$ (при одинаковых РВ), а на аноде $\rho_a = \rho_0 = 1$.

Интегрировать УШ будем методом рядов, взяв разложение $\varphi(t) = \alpha_0\big(1 + \varphi_0(t)\big) + \alpha_1\varphi_1(t)$ в виде степенного ряда с коэффициентами $t^n\alpha_n/n!$:

$$\varphi''(t) = \sum_{n=2}^{\infty} t^{n-2}\frac{\alpha_n}{(n-2)!} = (at^2 + bt + c)\sum_{n=0}^{\infty} t^n\frac{\alpha_n}{n!}. \quad (3)$$

Решение получаем, приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях. Имеем $\alpha_2 = c\alpha_0$, $\alpha_3 = c\alpha_1 + b\alpha_0$, а для $n \geq 4$ рекуррентное соотношение

$$\alpha_n = (n-2)!(c\alpha_{n-2} + b\alpha_{n-3} + a\alpha_{n-4}).$$

С его использованием получаем следующие соотношения:

$$\alpha_4 = 2!(c\alpha_2 + b\alpha_1 + a\alpha_0) = 2!\big((c^2 + a)\alpha_0 + b\alpha_1\big),$$

$$\alpha_5 = 3!(c\alpha_3 + b\alpha_2 + a\alpha_1) = 3!\big(2bc\alpha_0 + (a + c^2)\alpha_1\big), \ldots.$$

Таким образом, общее решение имеет вид

$$\varphi(t) = \alpha_0 + \alpha_0\varphi_0(t) + \alpha_1\varphi_1(t),$$

где

$$\varphi_0(t) = ct^2/2 + bt^3/6 + (c^2 + a)t^4/12 + \ldots,$$

$$\varphi_1(t) = t + ct^3/6 + bt^4/12 + \ldots,$$

причем

$$\varphi_0(0) = \varphi_1(0) = 0, \quad \varphi_0'(0) = 0, \quad \varphi_1'(0) = 1.$$

Если использовать предыдущую замену и разложение по $\tau^n\tilde{\alpha}_n/n!$, то рекуррентные соотношения и вид решения примут ту же форму:

$$\tilde{a}_n = (n-2)!(\tilde{c}\tilde{\alpha}_{n-2} + \tilde{b}\tilde{\alpha}_{n-3} + a\alpha_{n-4}),$$

$$\phi(\tau) = \tilde{\alpha}_0\big(1 + \phi_0(\tau)\big) + \alpha_1\phi_1(\tau)$$

и

$$\phi(\tau) = \tilde{\alpha}_0 + \tilde{\alpha}_0\phi_0(\tau) + \tilde{\alpha}_1\phi_1(\tau),$$

где

$$\phi_0(\tau) = \tilde{c}\tau^2/2 + \tilde{b}\tau^3/6 + (\tilde{c}^2 + a)\tau^4/12 + \ldots,$$

$$\phi_1(\tau) = \tau + \tilde{c}\tau^3/6 + \tilde{b}\tau^4/12 + \ldots.$$

Коэффициент отражения и прохождения определяем, налагая граничные условия на ВФ и ее производную. Результаты приведены в Приложении (формулы (П2)−(П5)). Используя конечное число членов в рядах, можно приближенно вычислить функции и их производные $\varphi_0'(1) = c + b/2 + (c^2 + a)/3 + \ldots$, $\varphi_1'(t) = 1 + c/2 + b/3 + \ldots$. Далее из (П4) и (П5) определяем приближенное значение G, связывающего α_1 и α_0, а также коэффициент α_0, при этом $\alpha_1 = ik_0d(2 - \alpha_0)$. Кроме того, $\alpha_1 = 2ik_0d/(1 + ik_0dG)$. Затем, используя рекуррентную формулу, вычисляем все коэффициенты α_n, $n + 2, 3, \ldots$ до тех номеров, когда члены $\alpha_n/n!$ станут пренебрежимо малыми. Используя эти коэффициенты, вычисляем $\varphi(1)$ и $\varphi'(1)$. Имеем следующие формулы:

$$\widetilde{T} = \varphi(1) = \alpha_0\varphi_0(1) + \alpha_1\varphi_1(1),$$

$$\widetilde{T} = \varphi'(1)/(ik_0d) = [\alpha_0\varphi_0'(1) + \alpha_1\varphi_1'(1)]/(ik_0d),$$
$$R = \alpha_0 - 1.$$

Из них можно определить следующие невязки: (погрешности):

$$\Delta = \varphi(1) - \varphi'(1)/(ik_od),$$

$$\Delta_1 = \varphi(1) - \alpha_0\varphi_0(1) - \alpha_1\varphi_1(1),$$

$$\Delta_2 = \varphi'(1) - [\alpha_0\varphi_0'(1) + \alpha_1\varphi_0'(1)].$$

Теперь можем уточнить коэффициенты из условий $\Delta_1 = \Delta_2 = 0$, что дает

$$\alpha_1 = \big(\varphi(1) - \alpha_0\varphi_0(1)\big)/\varphi_1(1),$$

$$\alpha_0 = [\varphi'(1)\varphi_1(1) - \varphi(1)\varphi_0'(1)]/(\varphi_0'(1)\varphi_1(1) - \varphi_0'(1)\varphi_0(1)).$$

Продолжая вычисления с этими коэффициентами, снова определяем погрешности, и так до сходимости. Точность определяет относительная погрешность решения $\delta_\varphi = |1 - \varphi'(1)/(ik_0d\varphi(1))|$. Поскольку туннелирование — процесс без потери энергии, для точного решения должна также обращаться в нуль невязка $\widetilde{\Delta} = 1 - |R|^2 - |\widetilde{T}|^2 = 0$. Соответственно имеем прозрачность барьера $D = 1 - |R|^2$ или $D = |\widetilde{T}|^2$.

Имеет место аналогия между УШ и уравнением Гельмгольца в оптике при прохождении (туннелировании) фотонов через слой идеального диэлектрика [8]. Туннелированию электрона соответствует $k^2 < 0$, а туннелированию фотона — отрицательная ДП $\varepsilon < 0$ (плазма). Соответствие задач такое: $\varepsilon = 1 - V/E$. Для прошедшего через конечный непоглощающий слой фотона также выполнено $|R|^2 + |\widetilde{T}|^2 = 1$. Как фотон в слое, так и электрон в потенциале — квазичастицы. При вхождении в диэлектрик скорость квазифотона изменяется на малой длине (порядка) нескольких атомных слоев (теорема погашения) из-за коллективного взаимодействия, а при выходе из слоя — восстанавливается. При $\varepsilon < 0$ скорость становится мнимой, как и скорость электрона внутри барьера. При прохождении барьера электрон также сохраняет импульс и энергию. Структура диода при большом U_a соответствует движению фотона через стык областей с $\varepsilon = 1$, $\varepsilon(x) < 0$ и $\varepsilon(d) > 1$. При $d = 0$ имеем $1 + R = \widetilde{T}$, $R = (k_0 - k(d))/(k_0 + k(d))$ и при $\varepsilon \gg 1$ для фотона $R \approx -1$, т. е. он полностью отражается от диэлектрического полупространства. Для электрона это неверно, т. е. аналогия не полная: переход на УФ с рассеянием нарушает волновой процесс.

Таблица 1.

n	Коэффициенты в разложении $\varphi_0(t)$
1	0
2	c
3	b
4	$2!(c^2 + a)$
5	$3!2bc$
6	$4!(ac + 2!(ac + b^2 + c^3))$
7	$5!\lfloor ab + 2!b(c^2 + a) + 2 \cdot 3!bc^2 \rfloor$
8	$6!\lfloor 2!a(c^2 + a) + 3!2b^2c + 4!c(ac + 2!(ac + b^2 + c^3))\rfloor$

Получить точное решение уравнений можно методом прямой итерации, взяв $\alpha_0^{(0)} = \alpha_0$, $\Delta_0 = \Delta$ и вычисляя $\alpha_0^{(k+1)} = \alpha_0^{(k)} - \tau_k\Delta_{(k)}$ до сходимости $(k = 0, 1, 2, \ldots)$. На каждой итерации для вычисления невязок следует пересчитывать $\alpha_1 = ik_0d\big(2 - \alpha_0^{(k+1)}\big)$. Здесь τ_k — параметр итерации (для метода простой итерации все $\tau_k \equiv 1$). Можно использовать метод минимальных невязок, подбирая на каждом шаге τ_k из условия минимума невязки [11]. Для вычисления $\Delta_{(k+1)}$ определяем $\alpha_1^{(k+1)} = ik_0d\big(2 - \alpha_0^{(k+1)}\big)$ и вычисляем все функции $\varphi_0(1)$, $\varphi_1(1)$, $\varphi_0'(1)$, $\varphi_1'(1)$. Другой способ решения — учесть в рядах достаточное число членов, когда сходимость функций уже имеет место. В табл. 1 и 2 приведены первые соответствующие коэффициенты. Рассмотрим способ численного вычисления коэффициентов из таблиц до любых значений n. Для этого определяем функции

$$f_1(\alpha_1, \alpha_0) = \alpha_1, \quad f_2(\alpha_0, \alpha_1) = \alpha_0 c,$$

$$f_3(\alpha_0, \alpha_1) = \alpha_0 b + \alpha_1 c, \ldots,$$

$$f_n(\alpha_0, \alpha_1) = (n-2)!\big(cf_{n-2}(\alpha_0, \alpha_1) + bf_{n-3}(\alpha_0, \alpha_1) + af_{n-4}(\alpha_0, \alpha_1)\big).$$

Пусть надо вычислить все коэффициенты $\alpha_n = \alpha_n^{(0)} + \alpha_n^{(1)}$ до номера n, где $\alpha_n^{(0)}$ — коэффициенты

Таблица 2.

n	Коэффициенты в разложении $\varphi_1(t)$
1	1
2	0
3	c
4	$2b$
5	$3!(a+c^2)$
6	$4!(2!+1)bc$
7	$5![ca+2!b^2+3!c(a+c^2)]$
8	$6![2!ab+3!b(a+c^2)+4!(2!+1)bc^2]$

в φ_0, а $\alpha_n^{(1)}$ — коэффициенты в φ_1. Тогда $\alpha_n^{(0)} = f_n(1,0)$, $\alpha_n^{(1)} = f_n(0,1)$. Так, $f_5(1,0) = 3!2bc$. Неудобство для вакуумных диодов состоит в необходимости определять большое число функций, или использовать рекурсивные вычисления. Однако для твердотельных диодов при малой эффективной массе носителей и малых d введенные коэффициенты становятся малыми, и использование нескольких коэффициентов приводит к хорошей точности, поэтому можно получать аналитические выражения для их параметров.

Рассмотрим примеры. Пусть $d = 3\,\text{nm}$, $E_F = 7$, $eU_a = 7$, $W_c = 2$, $W = 1.823$, $E = 5\,(\text{eV})$, $\delta = 0.18$, $\alpha = 0.43\,(\text{nm})$. Это вакуумный диод с медными электродами. В этом случае $a = 108.2$, $\tilde{b} = 208$, $\tilde{c} = -38.4$, $b = -4.2$, $c = 18,5$. Здесь $c^2 > a$. Видим, что основной вклад в четные коэффициенты $\alpha_4^{(0)}$, $\alpha_6^{(0)}$, $\alpha_8^{(0)}$ дают соответственно члены $2!c^2$, $4!2!c^3$, $6!4!2!c^4$. Нечетные коэффициенты пропорциональны степеням b и существенно меньше. Основной вклад в $\alpha_3^{(1)}$, $\alpha_5^{(1)}$, $\alpha_7^{(1)}$ имеет значения соответственно c, $3!c^2$, $5!3!c^3$, а четные коэффициенты существенно меньше. Для больших номеров при $t = 1$ члены рядов для четных n приближенно равны $(n-2)!!c^{n/2}/n!$, а для нечетных n соответственно $(n-2)!!c^{(n-1)/2}/n!$. Поскольку $(n-2)!! = n!/(n-1)!!$, из условия $(n-2)!!c^{n/2}/n! = 1$ получаем $n \sim 30$, т.е. для сходимости необходимо учесть весьма большое число членов в рядах. Пусть теперь $d = 1\,\text{nm}$, $E_F = 0.6$, $eU_a = 1$, $W_c = 4.2\,\text{eV}$, $\delta = 0.086\,\text{nm}$, $\alpha = 0.237\,\text{nm}$, $\widetilde{W} = 3.02$, $W = 0.53$, $E = 0.5$, $E_F = 0.6\,(\text{eV})$, $\varepsilon = 5.7$ (диод в виде обкладок из n-InSb с концентрацией электронов $10^{24}\,\text{m}^{-3}$ и эффективной массой 0.013 m_e на пленке CVD-алмаза). Имеем $a = 0.0455$, $\tilde{b} = 0.043$, $\tilde{c} = -0.0042$, $b = -0.024$, $c = -0.021$. В этом случае все члены весьма малы, при этом достаточно взять несколько (порядка 3–5) членов. В этом случае получаем весьма точные аналитические решения. Из этого следует, что для получения хорошо сходящихся выражений величина d и приведенная масса должны быть малыми. Все безразмерные константы имеют вид квадратов произведений размера d на некие величины типа ВЧ, связанные с различными комбинациями энергий. ВЧ соответствуют некие длины волн типа волн де-Бройля для соответствующих энергий. Константы имеют порядок единицы, если соответствующие длины волн равны d. Условия, когда все они по модулю меньше единицы, имеют вид: $|c| < 1$, если $E < E_F$ и $d < \hbar/\sqrt{m_e E_F/2}$, или $d < \hbar/\sqrt{m_e E/2}$ при $E > E_F$; $|b| < 1$, если $eU_a > 8W$ и $d < \hbar/(4\sqrt{m_e eU_a})$, или $d < \hbar/(\sqrt{m_e W/8})$ при $eU_a < 8W$; $a < 1$, если $d < \hbar/\sqrt{m_e W/2}$. Обозначим

$$d_0 = \min\left(\hbar/\sqrt{m_e W/2},\, \hbar/(4\sqrt{m_e eU_a}),\right.$$
$$\left.\hbar/\sqrt{m_e E/2},\, \hbar/\sqrt{m_e E_F/2}\right).$$

Далее под m_e также будем понимать эффективную массу. Если рассмотреть размер диода $d = d_0$, то вполне можно ограничиться восемью членами, приведенными в таблицах. Как видно, все они дают убывающие вклады, каждый из которых меньше единицы по модулю. Причем эти вклады могут быть знакопеременными. Очевидно, для такого диода можно связать все безразмерные амплитуды $1+R$ и $ik_0d_0(1-R)$ слева с амплитудами $\widetilde{T}$ и $(ik_0d_0)\widetilde{T}$ справа матрицей переноса $\hat{a}(d_0, E)$ в виде

$$\begin{pmatrix} 1+R \\ ik_0d_0(1-R) \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11}(d_0,E) & a_{12}(d_0,E) \\ a_{21}(d_0,E) & a_{11}(d_0,E) \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \widetilde{T} \\ ik_ad_0\widetilde{T} \end{pmatrix}. \tag{4}$$

Поскольку при $d = 0$ (или $t = 0$) должно быть $1 + R = \widetilde{T}$ и $Y = k_a/k_0$, необходимо $a_{11}(d_0, E) = \varphi(1)$, $a_{11}(0, E) = \varphi(0) = \alpha_0 = 2k_0/(k_a + k_0)$. Два других параметра определяем из условий

$$G = (a_{21} + ik_ad_0a_{11})/(a_{11} + ik_ad_0a_{12})$$

и

$$\widetilde{T} = 2/[a_{11} + ik_ad_0a_{12} + (a_{21} + ik_ad_0a_{11})/(ik_0d_0)],$$

сравнивая их с (П4) и (П2). В результате получаем

$$a_{12} = \frac{1}{(ik_0d_0)[(1+\varphi_0(1)) + (ik_0d_0)Y\varphi_1(1)]} - \frac{\varphi(1)}{ik_ad_0}, \tag{5}$$

$$a_{21} = (G - ik_ad_0)\varphi(1) + ik_ad_0a_{12}G. \tag{6}$$

Разбивая отрезок $(0, d)$ на n частей с размерами $d_0 = d/n$, получаем коэффициенты a_n, b_n, c_n для параболической аппроксимации потенциала $V(x)$ на этих участках. Полная матрица переноса диода есть произведение n матриц участков. В случае триода, т.е. наличия сетки с размером d_g и сеточным напряжением U_g вместо анода, а также наличия области сетка–анод с размером d_a, полная матрица триода (транзистора) есть произведение трех матриц переноса: матрицы катод–сетка, матрицы переноса сетки и матрицы переноса сетка–анод. При построении первой матрицы следует заменить $U_a \to U_g$. При построении третьей матрицы следует заменить $U_a \to U_a - U_g$ и $d \to d_a$. Вторая матрица в области сетки связана с

ВФ $\psi(x) = A^+ \exp\Big(ik_g(x-d)\Big) + A^- \exp\Big(-ik_g(x-d)\Big)$ и имеет вид

$$\hat{a}(d_g, E) = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -i\rho\sin(\theta) \\ -i\rho^{-1}\sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix}, \tag{7}$$

$\theta = k_g d_g$, $k_g = d_g\sqrt{2m_e(E - E_F + eU_g)}/\hbar$, $\rho = 1/(k_g d_g)$.

3. Решение УШ. Аппроксимация параболой четвертого порядка

Это случай $s = 4$ в формуле (1). Здесь удобнее сделать замену $\tau = 2x/d - 1$, $\phi(\tau) = \psi\Big(d(\tau+1)/2\Big)$, поскольку замена $t = x/d$ приводит к более сложной рекуррентной формуле с пятью членами. Имеем УШ

$$\phi''(\tau) = (a\tau^4 + b\tau + c)\phi(\tau),$$

где

$$a = d^2 m_e W/(2\hbar^2), \quad b = d^2 m_e eU_a/(4\hbar^2),$$
$$c = d^2 m_e(E - E_F - W + eU_a/2)/(2\hbar^2).$$

Теперь рекуррентная формула принимает вид

$$\alpha_n = (n-2)!(c\alpha_{n-2} + b\alpha_{n-3} + a\alpha_{n-6}).$$

Согласно ей, первые несколько коэффициентов имеют вид:

$$\alpha_2 = c\alpha_0, \quad \alpha_3 = c\alpha_1 + b\alpha_0,$$
$$\alpha_4 = 2(c^2\alpha_0 + b\alpha_1), \quad \alpha_5 = 6(c^2\alpha_1 + 2cb\alpha_0),$$
$$\alpha_6 = 24\big((c^2 + a)\alpha_0 + b\alpha_1\big).$$

Граничные условия приводят к соотношениям (П6)–(П8) Приложения. Они позволяют определить неизвестные коэффициенты:

$$\widetilde{G} = \frac{\phi_0'(1) - ik_0 d\phi_0(1)}{ik_0 d\phi_1(1) - \phi_1'(1)}, \tag{8}$$

$$\alpha_0 = \frac{2ik_0 d}{[ik_0 d\phi_0(-1) + \phi_0'(-1)] + G[ik_0 d\phi_1(-1) + \phi_1'(-1)]}, \tag{9}$$

при этом $\alpha_1 = \widetilde{G}\alpha_0$. Кроме того, эти соотношения дают две невязки $\Delta_1 = 2 - \phi(-1) - \phi'(-1)/ik_0 d$ и $\Delta_2 = \phi(1) - \phi'(1)/ik_a d$. Если задача решена достаточно точно, то $\Delta_1 \approx 0$, $\Delta_2 \approx 0$. Удобно ввести относительные невязки $\delta_1 = |1 + \phi'(-1)/(ik_0 d\phi(-1))|$, $\delta_2|1 - \phi'(1)/(ik_0 d\phi(1))|$. Также имеем

$$2R = \phi(-1) - \frac{\phi'(-1)}{ik_0 d} \approx \alpha_0\left[\phi_0(-1) - \frac{\phi_0'(-1)}{ik_0 d}\right]$$
$$+ \alpha_1\left[\phi_1(-1) - \frac{\phi_1'(-1)}{ik_0 d}\right], \tag{10}$$

$$2\widetilde{T} = \phi(1) + \frac{\phi'(1)}{ik_0 d} \approx \alpha_0\left[\phi_0(1) + \frac{\phi_0'(1)}{ik_0 d}\right] + \alpha_1\left[\phi_1(1) + \frac{\phi_1'(1)}{ik_0 d}\right]. \tag{11}$$

Из этих уравнений определяются коэффициент отражения и коэффициент прохождения. Также при подстановке найденных коэффициентов эти уравнения дают еще две невязки:

$$\Delta_3 = 2 - \Delta_1 - \alpha_0\left[\phi_0(-1) - \frac{\phi_0'(-1)}{ik_0 d}\right] - \alpha_1\left[\phi_1(-1) - \frac{\phi_1'(-1)}{ik_0 d}\right], \tag{12}$$

$$\Delta_4 = \Delta_2 - \alpha_0\left[\phi_0(1) + \frac{\phi_0'(1)}{ik_0 d}\right] - \alpha_1\left[\phi_1(1) + \frac{\phi_1'(1)}{ik_0 d}\right]. \tag{13}$$

Подстановка в них $\alpha_1 = \widetilde{G}\alpha_0$ позволяет исключить коэффициенты и получить еще одну невязку

$$\Delta = \frac{\Delta_2 - \Delta_4}{2 - \Delta_1 - \Delta_3}$$
$$- \frac{ik_0 d\phi_0(1) + \phi_0'(1) + \widetilde{G}[ik_0 d\phi_1(1) + \phi_1'(1)]}{ik_0 d\phi_0(-1) - \phi_0'(-1) + \widetilde{G}[ik_0 d\phi_1(-1) - \phi_1'(-1)]}. \tag{14}$$

С другой стороны, накладывая условия $\Delta_3 = \Delta_4 = 0$, получаем два уточнения

$$\alpha_1 = \frac{ik_0 d\Delta_2 - \alpha_0[ik_0 d\phi_0(1) + \phi_0'(1)]}{ik_0 d\phi_1(1) + \phi_1'(1)}, \tag{15}$$

$$\alpha_0 = \frac{\begin{gathered} ik_0 d[(2-\Delta_1)(ik_0 d\phi_1(1) + \phi_1'(1)) - \\ -\Delta_2(ik_0 d\phi_1(-1) - \phi_1'(-1))] \end{gathered}}{\begin{gathered} [ik_0 d\phi_0(-1) - \phi_0'(-1)][ik_0 d\phi_1(1) + \phi_1'(1)] - \\ -[ik_0 d\phi_0(1) + \phi_0'(1)][ik_0 d\phi_1(-1) - \phi_1'(-1)] \end{gathered}}. \tag{16}$$

Следует отметить, что эти уточнения определяются невязками Δ_1 и Δ_2, полученными на основе вычисления функций ϕ и ϕ' с любым числом коэффициентов, определяемых итерационно. Итак, алгоритм решения УШ может состоять в следующем. Определяем α_0 по формуле (П5) или (9) и $\alpha_1 = \widetilde{G}\alpha_0$. Итерационно вычисляем коэффициенты $\alpha_n = (n-2)!(c\alpha_{n-2} + b\alpha_{n-3} + a\alpha_{n-6})$ до номера, когда $|\alpha_n/n!|$ станет меньше заданной погрешности. Вычисляем четыре значения $\phi(\pm 1)$, $\phi'(\pm 1)$. Вычисляем Δ_1 и Δ_2. Определяем новые коэффициенты (16) и (15), а также соответствующие им погрешности решения. Если погрешности все еще существенны, снова вычисляем значения $\phi(\pm 1)$, $\phi'(\pm 1)$ до сходимости. Таким образом, имеем $\widetilde{T}(E, U_a) = \phi(1) = \alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2/2! + \ldots \alpha_n/n!$. В случае всех коэффициентов, не превышающих по модулю единицы, как и выше, можно ограничиться несколькими членами, т. е. получить явный вид прозрачности $D(E, U_a)$. Явный вид этой функции представляет собой сумму отношений полиномов относительно E и U_a. Также можно построить матрицу переноса.

4. Решение интегрального уравнения

УШ $\varphi''(t) = (at^2 + bt + c)\varphi(t)$ соответствует ИУ

$$\varphi(t)=\varphi(0)+ik_0(2-\varphi(0))t+\int_0^t\int_0^{t''}(at'^2+bt'+c)\varphi(t')dt'dt'', \tag{17}$$

при условиях $\varphi(0) = 1 + R$,

$$\widetilde{T} = \varphi(0) + ik_0(1 - R) + \int_0^1\int_0^{t''}(at'^2 + bt' + c)\varphi(t')dt'dt'',$$

$$\widetilde{T} = 1 - R + \frac{1}{ik_0}\int_9^1 (at'^2 + bt' + c)\varphi(t')dt'.$$

Из этих условий находим

$$\widetilde{T} = 1 + ik_0(1 - \varphi(0)) + \frac{1}{2ik_0}\int_0^1 (at'^2 + bt' + c)\varphi(t')dt'$$

$$+\frac{1}{2}\int_0^1\int_0^{t''}(at'^2 + bt' + c)\varphi(t')dt'dt'',$$

$$R = \frac{k_0^2 + \int_0^1 (at'^2 + bt' + c)\varphi(t')dt' - ik_0\int_0^1\int_0^{t''}(at'^2 + bt' + c)\varphi(t')dt'}{ik_0(2 - ik_0)}.$$

Взяв линейное нулевое приближение $\varphi_{(0)}(t) = \varphi(0) + ik_0(2 - \varphi(0))t$, в первом борновском приближении имеем ВФ в виде

$$\varphi(t) = \varphi(0) + ik_0(2 - \varphi(0))t + \int_0^t\int_0^{t''}(at'^2 + bt' + c)$$
$$\times[\varphi(0) + ik_0(2 - \varphi(0))t']dt'dt'',$$

$$\varphi^{(1)}(t) = \varphi(0) + ik_0(2 - \varphi(0))t + \varphi(0)(at^4/12 + bt^3/6$$
$$+ ct^2/2) + ik_0(2 - \varphi(0))(at^5/20 + bt^4/12 + ct^3/6),$$

$$\varphi^{(1)}(1)=\varphi(0)+ik_0(2-\varphi(0))+\varphi(0)(a/12+b/6+c/2)$$
$$+ ik_0(2 - \varphi(0))(a/20 + b/12 + c/6),$$

$$\varphi^{(1)} = \frac{1+a/4+b/3+c/2-ik_0(1+a/20+b/12+c/6)}{1 - ik_0(1 + a/20 + b/12 + c/6)/2}. \tag{18}$$

Отсюда находим

$$\widetilde{T} = \varphi_{(1)}(1), \quad ik_0\widetilde{T} = \varphi'_{(1)}(1), \quad ik_0 = \varphi'_{(1)}(1)/\varphi_{(1)}(1)$$

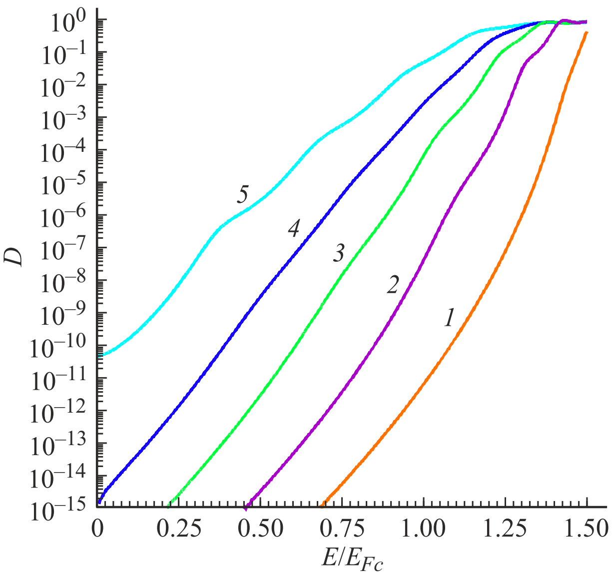

Рис. 2. Прозрачность барьера вакуумного диода $d = 2$ nm в зависимости от E/E_{Fc} при разных напряжениях U_a, V: 1 (кривая *1*), 4 (кривая *2*), 7 (кривая *3*), 10 (кривая *4*), 15 (кривая *5*).

и

$$\varphi(0) = \frac{1+a/4+b/3+c/2-ik_0(1+a/20+b/12+c/6)}{1 - ik_0(1 + a/20 + b/12 + c/6)/2}. \tag{19}$$

Соотношение (27) позволяет определить коэффициент отражения

$$R \approx \frac{a/2 + 2b/3 + c - ik_0(1 + a/20 + b/12 + c/6)}{2 - ik_0(1 + a/20 + b/12 + c/6)}. \tag{20}$$

Заметим, что для функции $\varphi^{(0)}(t)$ получается $R = 0$. Подставляя функцию (18) в ИУ (17), получим более точное приближение $\varphi_{(2)}(t)$, позволяющее получить более точное значение R. Такое решение имеет хорошую точность при малых d. Другой способ решения ИУ (17) может состоять в использовании квадратурных формул для вычисления интегралов. Это приводит к системе линейных алгебраических уравнений для определения значений ВФ в заданных точках. Это метод не требует малых d.

5. ВАХ диода

Приведенные на рис. 1 профили барьеров получены по формуле (П1) и весьма близки к параболической аппроксимации (1) при $s = 4$. Считаем далее материалы электродов одинаковыми. Аппроксимация параболой второго порядка больше подходит для малых d. На рис. 2 приведены прозрачности D, вычисленные путем численного решения УШ методом трансформации волнового импеданса. Далее они применены для вычисления плотности тока (рис. 3), определяемой для термополевой

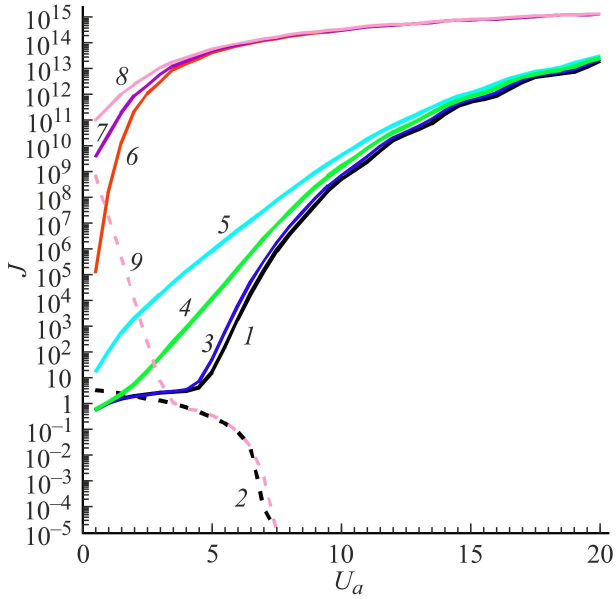

Рис. 3. ВАХ вакуумного диода [$\mathrm{Am^{-2}/V}$] длины $d = 2\,\mathrm{nm}$ (кривые *1–5*) и такого же диода с заполнением CVD-алмазом (кривые *7–9*) при разных температурах [K]: $T_c = T_a = 300$ (кривые *1, 2, 6*), $T_c = T_a = 800$ (кривые *3, 7*), $T_c = 1500$, $T_a = 300$ (кривая *4*), $T_c = T_a = 1200$ (кривые *5, 8, 9*). Штриховые кривые *2* и *9* показывают обратные плотности тока соответственно для кривых *1* и *8*. $E_{Fc} = E_{Fa} = 7$, $W_c = W_a = 4.36\,\mathrm{eV}$.

эмиссии в виде $J(U_a, T_c, T_a) = J^+(U_a, T_c) - J^-(U_a, T_a)$ интегралами

$$J^{\pm}(U_a, T_{\pm}) = \frac{em_e}{2\pi^2\hbar^3}\int_0^{3E_F} D(E, U_a) f^{\pm}(E, T_{\pm})dE. \quad (21)$$

Здесь

$$f^{\pm}(E, T_{\pm}) = k_B T_{\pm}\ln\big(1 + \exp((\mu_{\pm} - E)/(k_B T_{\pm}))\big),$$

$$\mu_+ = \mu_c = E_{Fc}, \quad \mu_- = \mu_a = E_F - eU_a$$

— электрохимические потенциалы, а вместо бесконечного предела взят предел $3E_F$. Это более чем достаточно для учета термоэмиссии при температуре катода $T_c \sim 2000\,\mathrm{K}$. Вполне достаточен и верхний предел $2E_F$, поскольку при $k_B T_c \sim 0.2\,\mathrm{eV}$ логарифм можно заменить малой экспонентой, и при $D(E, U_a) \approx 1$ для остатка интеграла при $E_F = 7\,\mathrm{eV}$ получим значение $1.26 \cdot 10^{-16}$. При нулевых температурах $f^{\pm}(E, T_{\pm}) = (\mu_{\pm} - E)$. Плотность тока (21) положительна и определяет анодный ток, хотя туннелируют отрицательно зараженные электроны с катода ($e > 0$). При $T_a = 0$ имеем $D^-(E, U_a) = 0$ при $E > \mu_a$. Число обратных электронов с анода пропорционально $f^-(E, T_a)$, т.е. существенно меньше, чем на катоде. 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 максимальна, поэтому величина $E_F - eU_a - E$ определяет более высокие уровни энергии относительно дна зоны проводимости анода, чем $E_F - E$ относительно аналогичного дна катода. При $eU_a = E_F$ и $T = 0$ на аноде нет электронов с положительными энергиями, которые могли бы туннелировать на катод (все существующие уровни отрицательны), $D^- = 0$, и обратный ток отсутствует. При туннелировании в диоде при малых анодных напряжениях или при сильно нагретом аноде поток электронов с него может быть существенным.

Интерес представляет аналитический вид ВАХ диода. Учитывая обратный ток (туннелирование с анода), для нее получаем

$$J(U_a, T) = \frac{em_e}{2\pi^2\hbar^3}\int_0^{3E_F} D(E, U_a)[f^+(E, T) - f^-(E, T)]dE. \quad (22)$$

Для простоты мы предположили, что температуры катода и анода одинаковы и обозначены как T. Далее считаем температуру не очень высокой, т.е. $k_B T < 0.1\,\mathrm{eV}$. В этом случае все характерные потенциалы и энергии существенно больше $k_B T$, термоток учитывать надо, но он мал. При $T = 0$ туннелирование с анода возможно при $U_a < E_F/e$. При большем напряжении возможен только малый термоток. Результат интегрирования (22) имеет вид

$$J_3(U_a, T) = J_1(U_a, T) + J_2(U_a, T) + J_3(U_a, T), \quad (23)$$

где $J_1(U_a, T_c) = J_{11}(U_a) + J_{12}(U_a, T)$. Интегралы вычислены в Приложении (формулы (П9)–(П16)). Общий вид ВАХ типа (23) нетрудно получить при разных температурах катода и анода.

Рассмотрим ВАХ (22) при нулевой температуре. При $U_a = 0$ из нее следует $J(O, t) = J(0, 0) = 0$. С увеличением напряжения ток начинает нарастать. При малых напряжениях вклад в ток вносят электроны с уровней на катоде $E_F - eU_a < E < E_F$, поскольку этих уровней нет на аноде. На более низких уровнях есть взаимное туннелирование, но начинает влиять разность в плотности состояний на катоде $E_F - E$ и на аноде $E_F - eU_a - E$. При $eU_a = E_F$ туннелирование с анода невозможно (все его уровни энергии отрицательны), а все электроны из зоны проводимости катода могут туннелировать. При $eU_a > E_F$ ток продолжает расти, поскольку барьер сужается. При $eU_a \gg E_F$ барьер превращается в линейный скос к аноду. При этом если d мало, то приближенно задачу можно рассматривать как рассеяние волны $\psi(x) = \exp(ik_0x) + R\exp(-ik_0x)$ на ступеньке. Если для нее взять ВФ $\psi(x) = \widetilde{T}\exp(ik_0x)$, то $1 + R = \widetilde{T}$, $R = 0$, т.е. ступенька не рассеивает. Если взять ВФ $\psi(x) = \widetilde{T}\exp(ik_0x)$, то $Y = k_a/k_0$, $R = (k_0 - k_a)/(k_0 + k_a)$. В этом случае при большом напряжении k_a — большая величина, и $R \approx -1$. Очевидно, последний вариант следует отбросить, хотя для него есть аналоги дифракции волн в оптике. Использование весьма сильных полей теоретически приводит к значению $D = 1$ и к насыщению J. Теоретически возможный предел $J_{\max} = em_e E_F^2/(4\pi^2\hbar^3)$. Он означает туннелирование всех набегающих электронов и не достижим в силу квантовых свойств, ограничений, связанных с пространственным зарядом и с температурной неустойчивостью. Уже при напряжениях $U_a = E_F/e$ и $d = 10$ nm получаем поля порядка 10^9 V/m. Дальнейшее увеличение может приводить к взрывной эмиссии и нецелесообразно. При произвольной температуре могут туннелировать все электроны с положительными энергиями, но вероятность туннелирования определяется не только прозрачностью, но и логарифмическими зависимостями в (22).

При малых d и малых коэффициентах a, b, c интегралы (П11)–(П14) могут быть вычислены с использованием явных выражений для $D(E, U_a)$ в диоде, при этом подынтегральная функция имеет вид отношения полиномов по E и U_a или отношения полиномов, умноженных на экспоненту. В первом приближении отношение полиномов можно заменить полиномом или даже линейным членом. Для аппроксимации параболой четвертого порядка при малом d и малых коэффициентах в первом порядке по d^2 имеем (см. Приложение, формулы (П17)–(П19)):

$$J_1(U_a, T) = \frac{4em_e}{\pi^2\hbar^3}\left(1 + \frac{b}{12} - \frac{a}{15}\right)\left\{g_1\left[f_{11}(E_F, T) - \frac{k_c}{k_a}k_B T \times \exp\left(-\frac{eU_a - E_F}{k_B T}\right) f_{12}(E_F, T)\right] - \frac{4d^2 m_e g_2}{15\hbar^2}\Big[(14W - 2E_F - eU_a) f_{13}(E_F, T) + f_{14}(E_F, T)\Big] + \frac{4d^2 m_e g_2}{15\hbar^2}k_B T \times \exp\left(-\frac{eU_a - E_F}{k_B T}\right)\Big[(14W - 2E_F - eU_a) f_{15}(E_F, T) + f_{16}(E_F, T)\Big]\right\}. \tag{24}$$

Аналогично вычисляются интегралы (П9) и (П10). Поскольку их вычисление принципиально не отличается от проведенного выше, мы его не приводим. Тем самым построена ВАХ диода. Она имеет разные представления в зависимости от соотношений между U_a, E_F, $k_B T$ и описывается функциями от этих величин. Несколько более сложную зависимость можно построить при разных температурах электродов.

Результаты и выводы

Результаты расчета ВАХ по формуле (22) для вакуумного диода при разных температурах электродов проведены на рис. 3. Там же приведены обратная и полная плотности тока. Рассмотренные плотности тока

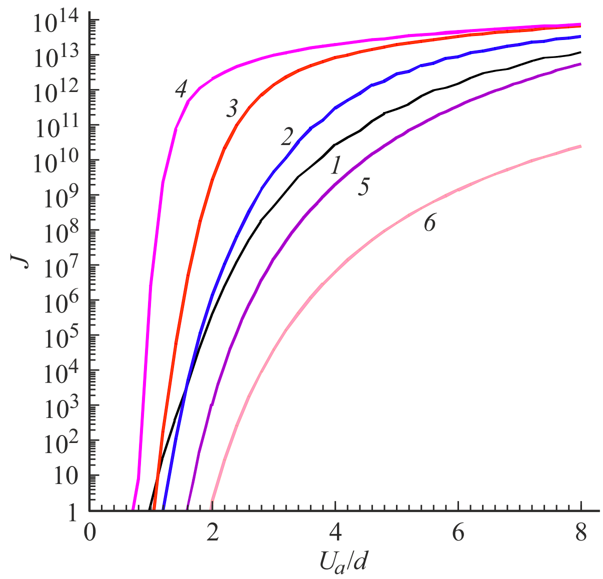

Рис. 4. Плотность туннельного тока [A/m^2] с катода по формуле (22) при $T = 0$ для $d = 3$ nm (кривая *1*), $d = 5$ nm (кривая *2*), $d = 10$ nm (кривая *3*) и $d = 20$ nm (кривая *4*) в зависимости от напряженности электрического поля [V/nm]. Кривая *4* — расчет по формуле ФН, кривая *5* — расчет по формуле ФН без учета корректирующего множителя.

таковы, что пространственным зарядом можно пренебречь. В случае большой плотности тока (например, в РТС) плотность пространственного заряда следует учитывать. В рамках рассмотренного подхода она может быть определена как

$$\rho_e(x) = \int_0^{3E_F} A^+(E) D^+(U_a, E)|\psi(x, E)|^2 dE$$

где $\psi(x, E)$ — найденная выше ВФ как решение УШ, а амплитуда имеет вид

$$A^+(E) = m_e k_B T_c \ln\big(1 + \exp\big((\mu_c - E)/(k_B T_c)\big)\big)/(2\pi^2\hbar^3).$$

Мы ограничились только электронами, эмитируемыми катодом. В общем случае надо рассматривать оба эмиссионных потока. Максимальная плотность электронов будет вблизи катода. Она ограничивает вылет электронов и ток, что эквивалентно увеличению РВ W. Это увеличение и дополнительно возникающий потенциал можно определить из уравнения Пуассона и добавить к (1). Для плоского диода оно решается аналитически, например, методом рядов [4], поэтому сразу можно скорректировать параметры квантового потенциала и прозрачность. В этом состоит преимущество аналитического решения. На рис. 4 приведено сравнение результатов холодной эмиссии из диода по формуле (22) при $T = 0$ с формулой ФН (формула (6.23) из [8]). Взята РФ 4 eV. Там же приведены результаты без учета корректирующего множителя Нордгейма в экспоненте.

При этом входящее в формулу электрическое поле определялось как U_a/d. Поскольку результаты ФН широко сравнивались с экспериментом (см. [7–9]), расчеты находятся в качественном согласии и с ними. Следует иметь в виду, что формула ФН определена с точностью до предэкспоненциального множителя в прозрачности барьера [10], а также что экспериментальные данные для наноструктур отсутствуют.

В качестве заключения отметим следующее. Приведенные формулы интегрирования УШ хорошо работают при малых d, малых барьерах и напряжениях, когда имеет место хорошая сходимость и не нужно использовать итерационные методы. В этом случае параболическая аппроксимация существенно более эффективна, чем кусочно-постоянная. Использование матриц переноса при параболической аппроксимации сильно сокращает их число по сравнению с кусочно-постоянной аппроксимацией, где необходимое их число составляет до нескольких сотен. В диодных структурах при малых анодных напряжениях следует учитывать туннелирование в обе стороны. Диодные наноструктуры с большими плотностями тока следует выполнять, используя хорошие диэлектрики с высокой теплопроводностью типа алмаза и BeO. При этом сильно снижаются барьер и рабочие напряжения, увеличивается ток и устойчивость к разогреву. В общем случае следует использовать формулу (22) и численные методы интегрирования УШ. Рассмотренный подход можно распространить и на триодные структуры и на РТС с квантовыми ямами. Однако для них соотношения приобретают еще большую сложность, что делает непосредственное численное моделирование более простым. Для современных ЭВМ время счета и объем алгоритма не являются значимыми величинами в сравнении с точностью модели. Поэтому получение каких-либо приближений для интеграла (22) может иметь смысл только в наглядности: как разные параметры (анодное напряжение, температура, свойства электродов и диэлектрика) влияют на анодный ток. Если получена достаточно точная нелинейная ВАХ для наноразмерного диода (что при малых размерах возможно), то это позволяет моделировать во временной области его включение в схему, и тогда время счета сокращается на порядки.

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.M. Rubi. Scientific Reports, **13**, 19365 (2023). DOI: 10.1038/s41598-023-44900-2

[2] M.V. Davidovich, I.S. Nefedov, O.E. Glukhova, M.M. Slepchenkov. J. Appl. Phys., **130**, 204301 (2021). DOI: 10.1063/5.0067763

[3] М.В. Давидович. ЖТФ, **94** (1), 32 (2024). DOI: 10.61011/JTF.2024.01.56899.170-23

[4] М.В. Давидович. ЖТФ, **92** (9), 1387 (2022). DOI: 10.21883/JTF.2022.09.52931.257-21

[5] П.И. Арсеев, В.Н. Манцевич, Н.С. Маслова, В.И. Панов. УФН, **187**, 1147 (2017). [P.I. Arseev, V.N. Mantsevich, N.S. Maslova, V.I. Panov. Phys. Usp., **60**, 1067 (2017). DOI: 10.3367/UFNe.2017.01.038055]

[6] L.L. Chang, L. Esaki, R. Tsu. Appl. Phys. Lett., **24**, 593 (1974). DOI: 10.1063/1.1655067

[7] Г.Н. Фурсей, *Автоэлектронная эмиссия* (Лань, М., 2012)

[8] Д.И. Проскуровский, *Эмиссионная электроника* (ТГУ, Томск, 2010)

[9] Е.П. Шешин. *Структура поверхности и автоэмиссионные свойства углеродных материалов* (МФТИ, М., 2001)

[10] А.С. Давыдов. *Квантовая механика* (Наука, М., 1973)

[11] 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

[12] А.П. Прудников, Ю.А. Брычков, О.И. Маричев. *Интегралы и ряды. Элементарные функции* (Наука, М., 1981)

Приложение

Получаемый методом изображений потенциал имеет вид [1–4]:

$$V(x)=E_{Fc}+\frac{W_c}{\varepsilon}-\frac{W_c}{\varepsilon}\delta_c\left\{\frac{1}{x+\delta_c}+\frac{2x^2}{d(d-x+\delta_a)(d+x)}+\frac{2x^2}{d^3}\sum_{n=2}^{\infty}\frac{1}{(n^2-(x/d)^2)n}\right\}-\frac{eU_a x}{d}. \tag{П1}$$

Здесь d — расстояние катод–анод, ε — ДП пространства катод–анод, параметры $\delta_{c,a}$ связаны с РВ из материала катода $W_c = e^2/(16\pi\varepsilon_0\delta_c)$ и с РВ из материала анода $W_a = e^2/(16\pi\varepsilon_0\delta_a)$. Эти параметры вводятся на основе экспериментальных данных. Для $W_c = 4\,\mathrm{eV}$ и $d = 10\,\mathrm{nm}$ имеем $\delta_c/d = 0.009$. На катоде $V(0) = E_{Fc}$, на аноде $V(d) = E_{Fc} + (W_c - W_a)/\varepsilon - eU_a + \Delta$, где $\Delta = \delta_c/(d+\delta_c) + 2\delta_c/(3d)$. Погрешность Δ порядка $\delta_c/d \sim 1\,\%$ и связана с тем, что в изображениях высших порядков, соответствующих членам ряда в (1), положено $\delta_c = \delta_a = 0$. Конечно, можно добиться отсутствия этой погрешности. Для этого достаточно вычесть из (1) малый член $\widetilde{\delta} = x\Delta/d$. Однако это излишнее уточнение. Ряд в (П1) сходится чрезвычайно быстро, но сходимость можно еще увеличить, вычтя под суммой асимптотический член n^{-3} и добавив к сумме результат асимптотического суммирования $\zeta(3) = 1.202$. В такой сумме достаточно учесть два члена. Однако это не потребуется, поскольку выражение (П1) будем аппроксимировать параболами. Если материалы и соответственно РВ катода и анода совпадают, то все энергетические уровни на аноде снижены на eU_a. На рис. 1 приведена также энергетическая диаграмма.

Из граничных условий для УШ при $x = d$ имеем уравнения (П2) и (П3):

$$\widetilde{T} = \varphi(1) = \alpha_0\Big[(1 + \varphi_0(1)) + G\varphi_1(1)\Big], \tag{П2}$$

$$ik_0d\widetilde{T} = \varphi'(1) = \alpha_0\Big[\varphi_0'(1) + G\varphi_1'(1)\Big], \tag{П3}$$

а также связь $\alpha_1 = G\alpha_0$, где G дается уравнением (П4):

$$G = \frac{\varphi_0'(1) - ik_0d(1 + \varphi_0(1))}{ik_0d\varphi_1(1) - \varphi_1'(1)} = (ik_0d)Y. \tag{П4}$$

Из этих уравнений следует невязка $\Delta = ik_0d - \varphi'(1)/\varphi(1)$ и находится значение

$$\alpha_0 = \frac{2ik_0d}{ik_0d + G} = \frac{2}{1 + Y}. \tag{П5}$$

Оно и определяет решение.

Граничные условия при аппроксимации при $s = 4$ приводит к уравнениям

$$\begin{gathered}1 + R = \phi(-1) = \alpha_0\phi_0(-1) + \alpha_1\phi_1(-1),\\ 1 - R = \frac{\phi'(-1)}{ik_0d} = \frac{\alpha_0\phi_0'(-1) + \alpha_1\phi_1'(-1)}{ik_0d},\\ \widetilde{T} = \phi(1) = \alpha_0\phi_0(1) + \alpha_1\phi_1(1),\\ \widetilde{T} = \frac{\phi'(1)}{ik_0d} = \frac{\alpha_0\phi_0'(1) + \alpha_1\phi_1'(1)}{ik_0d}.\end{gathered} \tag{П6}$$

В них использованы функции

$$\phi_0(\tau) = 1 + \frac{c\tau^2}{2!} + \frac{b\tau^3}{3!} + \frac{2c^2\tau^4}{4!} + \frac{12cb\tau^5}{5!} + \frac{4!(c^2+a)\tau^6}{6!}$$
$$+ \frac{5!(14c^2b+a)\tau^7}{7!} + \frac{6!(4!c^3+(4!+1)ca+3!2cb^2)\tau^8}{8!} + \ldots,$$

$$\phi_1(\tau) = \tau + \frac{c\tau^3}{3!} + \frac{2b\tau^4}{4!} + \frac{6c^2\tau^5}{5!} + \frac{24b\tau^6}{6!}$$
$$+ \frac{5!(2b^2 + 6c^3)\tau^7}{7!} + \frac{6!(4!cb + 3!2bc^2)\tau^8}{8!} \ldots.$$

Производные этих функций имеют вид

$$\phi_0'(\tau) = c + b\tau^2/2! + 2c^2\tau^3/3! + \ldots,$$

$$\phi_1'(\tau) = 1 + c\tau^2/2! + 2b\tau^3/3! + \ldots.$$

Исключая, как и выше, из соотношений (П6) R и $\widetilde{T}$, получаем

$$\alpha_0\left[\phi_0(-1) + \frac{\phi_0'(-1)}{ik_0d}\right] + \alpha_1\left[\phi_1(-1) + \frac{\phi_1'(-1)}{ik_0d}\right] = 2$$
$$= \phi(-1) + \frac{\phi'(-1)}{ik_0d}, \tag{П7}$$

$$\alpha_0\left[\phi_0(1) - \frac{\phi_0'(1)}{ik_0d}\right] + \alpha_1\left[\phi_1(1) - \frac{\alpha_1\phi_1'(1)}{ik_ad}\right] = \phi(1) - \frac{\phi'(1)}{ik_ad} = 0. \tag{П8}$$

В интеграле (22) разобьем интегрирование на три области: $E < E_F - k_BT$, $|E_F - E| < k_BT$ и $E > E_F + k_BT$. Для второй в предположении, что $eU_a \gg k_BT$ и $D(E, U_a) \approx 1$, имеем вклад в плотность тока ($\tilde{e}$ — основание натурального логарифма)

$$J_2(U_a, T) \approx \frac{em_e(k_BT)^2}{2\pi^2\hbar^3}\left[2\ln\left(2 + \tilde{e} - \frac{1}{\tilde{e}}\right)\right.$$
$$\left.- \exp\left(\frac{-eU_a}{k_BT}\right)\left(\tilde{e} - \frac{1}{\tilde{e}}\right)\right], \tag{П9}$$

поскольку первый логарифм изменятся от $\ln(1 + \tilde{e})$ до $\ln(1 + 1/\tilde{e})$, т. е. имеет среднее значение $\ln(2 + \tilde{e} + 1/\tilde{e})/2$, а второй логарифм приближенно равен $\exp\big((E_F - eU_a - E)/(k_BT_c)\big)$. Это несколько завышенное значение, поскольку реально $D(E, U_a) < 1$. Его можно скорректировать, умножив (П9) на величину $(1 - k_BT)/(1 + k_BT)$. Для третьей области также полагаем $D(E, U_a) = 1$ и с заменой $x = (E_F - E)/(k_BT)$ имеем

$$J_3(U_a, T) = \frac{em_e(k_BT)^2}{2\pi^2\hbar^3}\left(\frac{1}{\tilde{e}} - \exp\left(-\frac{2E_F}{k_BT}\right)\right)$$
$$\times\left[1 - \exp\left(\frac{eU_a}{k_BT}\right)\right]. \tag{П10}$$

Малые экспоненты здесь вполне можно опустить. Этот вклад соответствует термоэмиссионному току. Первая область соответствует туннелированию. Если $eU_a > E_F - E$, то для нее

$$J_1(U_a, T) = \frac{em_e}{2\pi^2\hbar^3}\int\limits_0^{E_F - k_BT} D(E, U_a)\Big[(E_F - E)$$
$$- k_BT\exp\left(-\frac{eU_a}{k_BT}\right)\exp\left(-\frac{E_F - E}{k_BT}\right)\Big]dE. \tag{П11}$$

Если $eU_a < E_F - E$, то первую область интегрирования надо разбивать на две:

$$0 < E < E_F - eU_a + k_BT$$

и

$$E_F - eU_a + kB_T < E < E_F - k_BT.$$

Получаем два интеграла:

$$J_1(U_a, T_c) = J_{11}(U_a) + J_{12}(U_a, T)$$

и

$$J_{11}(U_a) \approx \frac{e^2m_eU_a}{2\pi^2\hbar^3}\int\limits_0^{E_F - eU_a + k_BT} D(E, U_a)dE, \tag{П12}$$

$$J_{12}(U_a,T)=\frac{em_e}{2\pi^2\hbar^3}\int\limits_{E_F-eU_a+k_BT}^{E_F-k_BT}D(E,U_a)$$

$$\times\left[E_F-E-k_BT\exp\left(\frac{E_F-eU_a}{k_BT}\right)\exp\left(\frac{-E}{k_BT}\right)\right]dE. \quad (\text{П13})$$

Наконец, для весьма малых напряжений $eU_a<k_BT$ при замене $x=(E_F-E)/(k_BT)$ имеем

$$J_1(U_a,T)=\frac{em_e(k_BT)^2}{2\pi^2\hbar^3}\int\limits_1^{E_F/k_BT}D(x,U_a)$$

$$\exp(x)\left[1-\exp\left(-\frac{eU_a}{k_BT}\right)\right]dx. \quad (\text{П14})$$

Для вычисления интегралов (П10)–(П14) необходимо знать явные зависимости прозрачностей от энергии. В случае больших напряжений барьер становится близким к треугольному, а для последнего имеет место аппроксимация [10]:

$$D(E,U_a)\approx\exp\left(-\frac{4d\sqrt{2m_e}}{3\hbar eU_a}(E_F+W-E)^{3/2}\right).$$

Это весьма грубая формула, полученная в ВКБ приближении с точностью до неизвестного предэкспоненциального множителя и не для слишком узких барьеров. При $E\approx E_F+W$ она дает $D(E,U_a)\approx 1$, а при $E>E_F+W$ перестает работать. Но для вычисления интеграла (П11) она может быть применена. При больших напряжениях $W\approx 0$, и в этом случае при замене $x=(E_F-E)/(k_BT)$ следует вычислить интеграл

$$J_1(U_a,T)=\frac{em_e(k_BT)^2}{2\pi^2\hbar^3}\int\limits_1^{E_F/k_BT}\exp\left(-\frac{4(k_BT)^{3/2}d\sqrt{2m_e}}{3\hbar eU_a}x^{3/2}\right)$$

$$\times\left[x-\frac{k_c}{k_a}\exp\left(-\frac{eU_a}{k_BT}\right)\exp(x)\right]dx.$$

Обозначая $g=4(k_BT)^{3/2}d\sqrt{2m_e}/(3\hbar eU_a)$, разобьем его на два, и для первого интеграла, при замене $y=x^{3/2}$ и полагая большой верхний предел равным бесконечности, получим

$$I_1(U_a,T)=\int\limits_1^{E_F/k_BT}\exp(-gx^{3/2})x\,dx$$

$$=(2/3)\int\limits_1^{\infty}\exp(-gy)y^{1/3}dy.$$

Этот интеграл вычисляем интегрированием по частям, получая разложение

$$I_1(U_a,T)=\frac{2\exp(-g)}{3}\left[\frac{1}{g}+\frac{1}{3g^2}-\frac{2}{9g^3}\right.$$

$$\left.+3\sum_{n=4}^{\infty}\frac{(-1)^n}{(3g)^n}(n+1)!!!\right].$$

Здесь обозначен тройной факториал: $n!!!=n(n-3)!!!$, $0!!!=1$, $1!!!=1$, $2!!!=2$. Второй интеграл после замены $y=x^{3/2}$ представляем в виде

$$I_2(E_F,T)=\int\limits_0^{\left(\frac{E_F}{k_BT}^{3/2}-\frac{E_F}{k_BT}\right)}\frac{\sqrt{E_F/(k_BT)}}{\sqrt{x+eU_a/(k_BT)}}\frac{\exp(-y)}{3\sqrt{x}/2-1}dy$$

$$\approx-\sqrt{E_F/(eU_a)}+\frac{2\sqrt{kBT}}{\sqrt{E_F+eU_a}}\exp\left(-(E_F/(k_BT))^{3/2}\right). \quad (\text{П15})$$

Здесь мы один раз применили интегрирование по частям, отбросив оставшийся интеграл, поскольку перед этим интегралом стоит малая экспонента. Второй член с экспонентой в (П15) мал и может быть отброшен. Для большого верхнего предела берем $y\approx x^{3/2}=(E_F/k_BT)^{3/2}$. Получаем результат

$$J_1(U_a,T)=\frac{em_e(k_BT)^2}{2\pi^2\hbar^3}\left[I_1(U_a,T)-\exp\left(-\frac{eU_a}{k_BT}\right)I_2(E_F,T)\right]. \quad (\text{П16})$$

При аппроксимации параболой четвертого порядка при малом d и малых коэффициентах в первом порядке по d^2 имеем

$$\phi_0(\tau)\approx 1+c\tau^2/2+b\tau^3/6+a\tau^6/30,$$

$$\phi_1(\tau)=\tau+c\tau^3/6+b\tau^4/12+b\tau^6/30.$$

Пусть все коэффициенты малы: $a\ll 1$, $b\ll 1$, $|c|\ll 1$ и $k_ad\ll 1$, $k_0d\ll 1$. Это возможно для полупроводниковых диодов типа GaAs-Al$_x$Ga$_{1\text{-}x}$AS-GaAs при 77 K и легировании электродов. Для такого диода низкочастотная ДП $\varepsilon=12.9$, величины ЭФ, eU_a и W менее 1 eV, и для эффективных масс менее $0.1m_e$ и $d<1$ nm как раз получаем малые коэффициенты. Далее рассматриваем все величины в первом порядке по коэффициентам, пренебрегая степенями d выше 2. Имеем

$$G\approx\frac{ik_0d(1+c/2+b/6+a/30)-(c+b/2+a/5)}{(1+c/2+8b/15)-ik_0d(1+c/6+2b/15)},$$

или, в более грубом приближении,

$$G\approx 2ik_0d-(c+b/2+a/5)\approx 2il_0d.$$

Также имеем

$$ik_0dY\approx\frac{\begin{array}{l}-c+b/2-a/5+\\ \quad +G(1+c/2-b/3-b/5)\end{array}}{\begin{array}{l}1+c/2-b/6+a/30+\\ \quad +G(-1-c/6+b/12+b/30)\end{array}}.$$

Взяв $G \approx 2ik_0d$, преобразуем это выражение к виду

$$Y \approx \frac{-c+b/2-a/5+2ik_0d}{ik_0d(1+c/2-b/6+a/30)+2k_0^2d^2},$$

откуда находим

$$|R|^2 \approx \frac{\begin{matrix} d^2k_0^2(-1+c/2-b/6+a/30)^2+ \\ +[2k_0^2d^2+c-b/2+a/5]^2 \end{matrix}}{\begin{matrix} d^2k_0^2(3+c/2-b/6+a/30)^2+ \\ +[2k_0^2d^2-c+b/2-a/5]^2 \end{matrix}}.$$

Все коэффициенты пропорциональны d^2, поэтому, опуская члены с d^4, найдем

$$D \approx \frac{8(1+b/12-a/15)}{9}\left[1-\frac{2k_0(c/2-b/6+a/30)}{3k_0}\right]. \tag{П17}$$

Здесь круглая скобка в числителе не зависит от энергии, а квадратную скобку в нашем приближении можно заменить единицей. Если и круглую скобку заменить единицей, то получим приближенную прозрачность $D \approx 8/9$. Используя (П17), надо интегрировать с функцией

$$D(E,U_a) \approx \frac{8\sqrt{E(E+eU_a-E_F)}}{(\sqrt{E}+2\sqrt{(E+eU_a-E_F)})^2}.$$

Дробь в квадратной скобке в (П17) представим в виде

$$\frac{d^2m_e}{30\hbar^2}\sqrt{E}\frac{14W-2E_F-eU_a+E}{\sqrt{E}+2\sqrt{(E+eU_a-E_F)}}.$$

Эти значения необходимо подставлять в интегралы (П11)–(П14). Для приближенного вычисления интегралов рассмотрим вторую теорему о среднем значении, используя подынтегральные функции $g_{1.2}(E)f(E)$, где $f(E)=\sqrt{E}$, $f(E)=E$, $f(E)=E^2$, $f(E)=E\exp(-E/k_BT_c)$, $f(E)=E^2\exp(-E/k_BT_c)$, а весовые функции имеют вид

$$g_1(E) = \frac{\sqrt{E+eU_a-E_F}}{\left(\sqrt{E}+2\sqrt{(E+eU_a-E_F)}\right)^2},$$

$$g_2(E) = \frac{\sqrt{E+eU_a-E_F}}{\left(\sqrt{E}+2\sqrt{(E+eU_a-E_F)}\right)^3}.$$

Они изменяются от значений $g_1(0)=1/(4\sqrt{eU_a-E_F})$ и $g_2(0)=1/(8(U_a-E_F))$ до соответственно

$$\sqrt{eU_a-k_BT_c}/(\sqrt{E_F}+2\sqrt{eU_a-k_BT_c})^2$$

и

$$\sqrt{eU_a-k_BT_c}/(\sqrt{E_F}+2\sqrt{eU_a-k_BT_c})^3$$

при верхнем пределе. Будем брать их значения в средней точке $E_F/2$:

$$g_1 = \sqrt{eU_a-E_F/2}/(\sqrt{E_F/2}+2\sqrt{2eU_a-E_F/2})^2,$$

$$g_2 = \sqrt{eU_a-E_F/2}/(\sqrt{E_F/2}+2\sqrt{eU_a-E_F/2})^3.$$

Теперь прозрачность принимает вид

$$D \approx 8\left(1+\frac{b}{12}-\frac{a}{15}\right)\Bigg[\sqrt{E}g_1-\frac{4d^2m_eg_2}{15\hbar^2} \times \left((14W-2E_F-eU_a)E+E^2\right)\Bigg]. \tag{П18}$$

Для вычисления интегралов с квадратным корнем делаем замену $x=\sqrt{E}$. В случае (П11) имеем интегралы

$$\int\limits_0^{\sqrt{E_F-k_BT_c}} 2x^2(E_F-x^2)dx = \frac{2(E_F-k_BT_c)^{3/2}(6k_BT_c-E_F)}{15} = f_{11}(E_F,T_c),$$

$$\int\limits_0^{\sqrt{E_F-k_BT_c}} 2x^2\exp\left(-\frac{x^2}{k_BT_c}dx\right) = -k_BT_c\sqrt{E_F-k_BT_c} \times \exp\left(1-\frac{E_F}{k_BT_c}\right)+\frac{\sqrt{\pi}}{2}(k_BT_c)^3\mathrm{erf}\left(\sqrt{E_F/(k_BT_c)-1}\right) = f_{12}(E_F,T_c). \tag{П19}$$

Последний интеграл табличный и представляется по формуле 1.3.3.8 из [12] через функцию ошибок Гаусса. Если заменить верхний предел на бесконечность, то для второго интеграла получим простой результат $\sqrt{\pi}(k_BT_b)^{3/2}/2$. Осталось вычислить интегралы с линейной и квадратичной зависимостями в D. Для линейного члена имеем два интеграла

$$\int\limits_0^{E_F-k_BT_c}(E_F-E)EdE = (E_F-k_BT_c)^2(E_F/6+k_BT_c/3) = f_{13}(E_F,T_c),$$

$$\int\limits_0^{E_F-k_BT_c} E\exp\left(-\frac{E}{k_BT_c}\right)dE = (k_BT_c)^2-k_BT_c(E_F-k_BT_c) \times \exp\left(1-\frac{E_F}{k_BT_c}\right) = f_{14}(E_F,T_c).$$

Для квадратичного получаем соответственно

$$\int\limits_0^{E_F-k_BT_c}(E_F-E)E^2dE = E_FE^3/3-E^4/4 = (E_F-k_BT_c)^3 \times (E_F/12+k_BT_c/4) = f_{15}(E_F,T_c),$$

$$\int\limits_0^{E_F-k_BT_c} E^2\exp\left(-\frac{E}{k_BT_c}\right)dE = -2(k_BT_c)^3+k_BT_cE_F \times\exp\left(1-\frac{E_F}{k_BT_c}\right)\left(E_F^2-2k_BT_cE_F+3(k_BT_c)^2\right) = f_{16}(E_F,T_c).$$

Реконструируя интеграл (П11), имеем формулу (24).