

О ВРЕМЕНАХ ЖИЗНИ КВАЗИСТАЦИОНАРНЫХ УРОВНЕЙ ПРИ ТУННЕЛИРОВАНИИ В РЕЗОНАНСНО-ТУННЕЛЬНОЙ СТРУКТУРЕ

М. В. Давидович^{a,}, И. С. Нефедов^{a,b}*

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

^b Российский университет Дружбы народов
117198, Москва, Россия

Поступила в редакцию 8 марта 2024 г.,
после переработки 8 марта 2024 г.
Принята к публикации 28 марта 2024 г.

Мы исследуем полевую эмиссию в резонансно-туннельных гетероструктурах с одной квантовой ямой и двумя барьерами, а также влияние на нее времен жизни резонансных метастабильных уровней, образующихся в яме. Также рассмотрена задача о времени туннелирования квантовой частицы (электрона) через структуру с барьером и двумя барьерами и ямой. Используются стационарное и нестационарное уравнения Шредингера. Время установления процесса туннелирования всегда конечно, но может быть меньше времени пролета структуры частицей со скоростью Ферми. Определены времена жизни метастабильных уровней и исследовано их влияние на туннельный ток. Он возрастает при увеличении ширины ям и выравнивании высот барьеров.

DOI: 10.31857/S0044451025010018

1. ВВЕДЕНИЕ

Резонансно-туннельные структуры (РТС), представляющие собой наноразмерные гетероструктуры с полевой эмиссией, широко используются в электронике как источники весьма высоких плотностей тока (до 10^{14} А/м²) [1–3]. Они также являются основой при проектировании резонансно-туннельных диодов (РТД), транзисторов, квантово-каскадных лазеров (ККЛ) типа «штарковской лестницы», ТГЧ транзисторов и переключателей [4–11], а также других устройств. Для всех них важны времена переключения, срабатывания и вообще времена переходных процессов [11,12]. РТС характеризуется тем, что имеет одну, две или несколько квантовых ям, разделенных барьерами, в которых могут возникать квазистационарные резонансные уровни [13]. Будем называть имитирующий электроны левый электрод катодом (и обозначать все относящиеся к нему величины индексом c), а правый — анодом (индекс

a). Для промежуточного электрода (сетки) используем индекс g . В случае одинаковых электрохимических потенциалов электродов $\mu_c = \mu_a$ квантовый потенциал $V(x)$ между двумя электродами (в диодной структуре) похож на перевернутую параболу на постаменте, и может быть строго описан бесконечным рядом изображений, в котором учтены работы выхода электронов [1]. Аппроксимация этого ряда перевернутой параболой весьма грубая [1,14]. Более точна аппроксимация перевернутой параболой четвертого порядка [1,2]. Мы будем использовать еще более точную аппроксимацию для потенциала в диоде $0 < x < d$ с анодным напряжением U_a :

$$V(x) = E_{Fc} + W_c \frac{(1 - \alpha/d)(1 + \delta/d)^2}{(1 - \delta/d)^2 \varepsilon} \times \left[1 - \frac{\delta d}{(x + \delta(1 - x/d))(d - x + x\delta/d)} \right] - \frac{eU_a x}{d}. \quad (1)$$

В этой формуле $\alpha = \delta(2 \ln(2) + 1)$, работы выхода (РВ) катода и анода считаются одинаковыми

* E-mail: davidovichmv@info.sgu.ru

$W_c = W_a$ и связаны с параметром (размером) δ формулой

$$W_a = e^2 / (16\pi\epsilon_0\delta).$$

Также для упрощения далее считаем одинаковыми энергии Ферми (ЭФ) $E_{Fc} = E_{Fa}$ электродов. Для потенциала (1) на катоде $V(0) = E_{Fa}$, а на аноде

$$V(d) = E_{Fa} - eU_a = \mu_a,$$

т.е. квантовый потенциал V совпадает с электрохимическими потенциалами. В случае разных РВ (и материалов катода и анода) надо в (1) добавить член $(E_{Fa} - E_{Fc})x/d$. Точность формулы (1) не хуже 1%. Диодная структура не позволяет получать очень большие плотности тока. Увеличение тока происходит за счет резонансного туннелирования (РТ), когда имеется одна или несколько квантовых ям, окруженных барьерами [1–3]. Отражения от барьеров интерферируют, и полный коэффициент отражения погашается. Далее для упрощения рассматриваем одноямную структуру с тремя электродами: катодом (исток), сеткой (затвором) и анодом (сток). Формула (1) применима как к вакуумному промежутку ($\epsilon=1$), так и к диэлектрическому промежутку между электродами. При отсутствии анодного напряжения $U_a = 0$ она дает в центре промежутка значение

$$V(d/2) = E_{Fc} + \frac{W_c(1 - \alpha/d)(1 + \delta/d)^2}{(1 - \delta/d)^2 \epsilon}.$$

РВ 3.6 эВ соответствует величина $\delta = 0.1$ нм, поэтому в обычном диапазоне РВ веществ 2–5 эВ и обычных размерах электродов и зазоров РТС порядка нм имеют место неравенства $\delta/d \ll 1$, $\alpha/d \ll 1$, при этом в отсутствии анодного напряжения $V(d/2) \approx E_{Fc} + W_c/\epsilon$. Диэлектрик с диэлектрической проницаемостью (ДП) ϵ снижает барьер в ϵ раз.

Хорошими и удобными диэлектриками для РТС является CVD (Chemical Vapor Deposition) алмаз ($\epsilon = 5.6$, ширина запрещенной зоны 2.5 эВ) [15] и окись бериллия BeO ($\epsilon = 6.7$, ширина запрещенной зоны 10.6 эВ). Эти диэлектрики сильно снижают барьер и обладают самой высокой теплопроводностью, что важно при высоких плотностях тока [2,3]. Хотя плотность CVD алмаза с 88% sp^3 -гибридизацией составляет 88.2 % от плотности кристаллического алмаза, его ДП можно брать такой же 5.6 из-за наличия небольшой графитовой фазы. Для электродов можно использовать металлы и легированные полупроводники. Наибольшей ЭФ обладает бериллий 14.6 эВ. Кроме того, он имеет относительно низкую

РВ 3.92 эВ, и самую высокую из металлов теплопроводность. Для построения сложного профиля V рис. 1 формулу (1) используем дважды, применяя к промежутку катод-сетка (заменяя $U_a \rightarrow U_g$) и к промежутку сетка-анод, полагая в (1) $E_{Fc} \rightarrow E_{Fc} - eU_g$. На сетке квантовый потенциал постоянный и определяется ее электростатическим потенциалом U_g . В РТД и ККЛ обычно хорошо проводящие слои выполняют электрически свободными, т.е. потенциал вдоль них не фиксирован и спадает [4–12]. На рис. 1 изображены типичные профили $V(x)$ диодных и триодных структур при разных анодных U_a и сеточных U_g напряжениях для медных электродов. Для образования ямы взято $U_g = E_{Fc}/e$. Энергия E отсчитывается от дна зоны проводимости катода. Оно в данном случае совпадает с дном ямы. Если в образованной квантовой яме существует уровень энергии E_n , то он квазистационарный, поскольку как на катоде, так и на аноде всегда есть точно такой же уровень, и электрон из ямы может на него перейти. Возможно туннелирование как влево на катод, так и вправо на анод. Далее с этого уровня электрон переходит на уровень Ферми (УФ) соответствующего электрода. Такой электрон далее может попасть в источник питания, поскольку только электроны вблизи УФ участвуют в переносе диффузионного тока проводимости.

Вопросу времени жизни (распада) квазистационарного уровня в сферически симметричной квантовой яме посвящено несколько работ, например, [16–18]. Время жизни квазистационарных уровней РТС в одномерном декартовом рассмотрении строго не исследовалось. Это время тесно связано с вопросом о времени туннелирования одиночной частицы через структуру (временем ее пребывания в ней). Вопросам введения различных подобных времен посвящена обширная литература (см., например, список литературы в работе [19]). Относительно времен туннелирования до сих пор идет дискуссия. Имеет место ряд парадоксов. Времена туннелирования тесно связаны с временами срабатывания туннельных приборов [11]. Обычно РТД, ККЛ и другие РТС моделируют, используя прямоугольные потенциалы, измененные членом $-eU_ax/d$ [11], что является грубым приближением, поскольку большие напряжения приводят к форме барьера близкой к треугольнику, поставленному на постамент [1]. Расчет на основе уравнения Шредингера (УШ) показывает, что прозрачность такого барьера на порядки лучше, чем прямоугольного той же высоты и с тем же основанием. Часто используют квазиклассическое приближение [16], которое для треуголь-

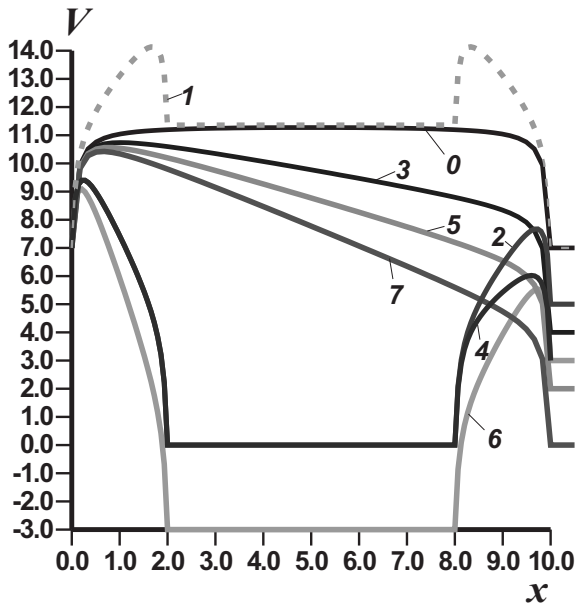


Рис. 1. Форма потенциального барьера V (эВ) в зависимости от расстояния x (нм) в вакуумном диоде (кривые 0, 3, 5, 7) и в вакуумном триоде (1, 2, 4, 6). Номер кривых для диода соответствует анодному напряжению U_a в В. Для триодных кривых 2, 4 напряжение на сетке $U_g = E_{Fc}/e$, а их номер соответствует анодному напряжению. Для кривой 1 $U_a = 0$, $U_g = W_c/e$. Для кривой 6 $U_a = 4$ В, $U_g = 3$ В. $E_{Fc} = 7$ эВ, $W_c = 4.36$ эВ (медные электроды)

ного барьера точно интегрируется [20]. Однако оно определено с точностью до предэкспоненциального множителя и весьма неточное в верхней узкой части барьера, поскольку для его получения отброшена обратная электронная волна [20]. Для узкого барьера эта волна вносит существенный вклад. При анализе РТС на основе двух и более прямоугольных барьеров обычно резонансные уровни определяют как проникновение частицы через одинаковые барьеры влево или вправо с той же энергией, что и в яме [13]. В реальных РТС это не так. Попадая на катод или анод с некой энергией, частица переходит на УФ электрода, отдавая или поглощая квант энергии, и далее уходит от структуры с этой энергией, поскольку любой ток в проводниках создается электронами на УФ. При стационарном туннелировании (постоянном напряжении на аноде) число туннелирующих с катода электронов экспоненциально больше, чем число туннелирующих с анода, и получаем постоянный эмиссионный ток, замыкающийся через источник питания. Возникновение резонансных уровней E'_n приводит к резонансному туннелированию (РТ), сопровождающемуся усилением тока, поскольку для электронов с энергией $E = E'_n$ барьер

полностью прозрачный. Квазистационарные уровни возникают с увеличением ширины ямы. Эти уровни энергии комплексные: $\tilde{E}_n = E'_n - iE''_n$. Величина E''_n определяет время жизни уровня $\tau_n = 2\hbar/E''_n$. Чем оно меньше, тем более уширяется уровень, тем большая область энергий соответствует условию $E \approx E'_n$, и тем больше электронов резонансно туннелируют. Поэтому важным является определение времен жизни (комплексных энергий $\tilde{E}_n$) квазистационарных уровней и влияние на них конфигураций квантового потенциала, что является целью работы. При полевой эмиссии число набегающих в секунду на барьер электронов в интервале скоростей v_z , $v_z + dv_z$ будет

$$d\nu(v_z) = n^+(k) v_z dv_z,$$

где

$$n^+(k) = \frac{m_e^2 k_B T}{2\pi^2 \hbar^3} \times \ln \left(1 + \exp \left(\frac{E_{Fc} - E(k)}{k_B T} \right) \right) v_z. \quad (2)$$

Формула (2) получается усреднением по всем поперечным скоростям Ферми-газа электронов металлического катода и приведена для конечной температуры. При холодной эмиссии ($T=0$) спектр ограничен Φ :

$$n^+(k) = m_e^2 (E_{Fc} - E(k)) / (2\pi^2 \hbar^3) v_z.$$

Хотя реально туннелирует многоскоростной поток электронов, и он определяет полную туннельную плотность тока

$$J^+(U_a) = \frac{-em_e}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\mu_c} D^+(E, U_a) (\mu_c - E) dE, \quad (3)$$

задачу можно рассматривать как одночастичное туннелирование электронов с заданной энергией E . Заряд электрона взят как $q_e = -e$, поэтому положительный поток электронов с катода приводит к положительному анодному току $-J^+(U_a)$ через единичное сечение. Верхний предел в (3) порядка нескольких эВ, что вполне соответствует нерелятивистской квантовой механике. При термополевой эмиссии (температуры $T \sim 2000$ К) следует использовать (2), и верхний предел в (3) из-за сильного убывания логарифма достаточно увеличить на несколько эВ. Далее рассматриваем случай $T=0$. Полная плотность тока $J = J^+ - J^-$ определяется туннелированием в обоих направлениях с коэффициентами туннелирования (прозрачности) $D^\pm(E) = 1 - |R^\pm|^2$,

которые определяются на основе вычисления коэффициентов отражения $R^\pm$. Для определения $R^\pm$ решаем УШ. Формула для J^- получается заменой $\mu_c \rightarrow \mu_a$, $D^+ \rightarrow D^-$. Для симметричного потенциала ($U_a=0$) всегда $D^+ = D^-$. Для слабо несимметричного потенциала $D^+ \approx D^-$, причем слабое отличие наблюдается при малых энергиях.

2. ВРЕМЯ ЖИЗНИ УРОВНЯ НА ОСНОВЕ РЕШЕНИЯ СТАЦИОНАРНОГО УШ

Стационарное УШ

$$\left(-\frac{(\hbar \partial_x)^2}{2m_e} + V(x) \right) \psi(x) = 0$$

для потенциала $V(x)$ удобнее всего решать методом трансформации волнового импеданса. При постоянном в области $x_n < x < x_{n+1}$ потенциале V_n волновой импеданс вводим как

$$z_n(E) = -i\psi(x)/\psi'(x) = 1/k_n,$$

где

$$\psi(x) = A \exp(ik_n x)$$

— волновая функция (ВФ) движущегося в направлении x электрона,

$$k_n = \sqrt{2m_e(E - V_n)}/\hbar.$$

Пусть $z_0(x_{n+1})$ — импеданс справа. Он трансформируется во входной импеданс слева по формуле

$$Z_i(x_n) = z_n \frac{z_0 - iz_n \operatorname{tg}(k_n(x_{n+1} - x_n))}{z_n - iz_0 \operatorname{tg}(k_n(x_{n+1} - x_n))}. \quad (4)$$

Полагая $z_0 = Z_i(x_n)$, снова применяем указанную формулу для другого участка, пока не получим входной импеданс на катоде $Z_{ic}(0)$ и коэффициент отражения со стороны катода

$$R^+ = (1 - k_0 Z_{ic}(0)) / (1 + k_0 Z_{ic}(0)).$$

Здесь

$$k_0 = k_c = \sqrt{2m_e E}/\hbar.$$

Для начала итераций на аноде берем

$$k_a = \sqrt{2m_e(E - E_{Fc} + eU_a)}/\hbar,$$

$$z_0 = 1/k_a.$$

Следует отметить, что обычно при туннелировании через барьер берут $k_a = k_0$, т.е. рассматривают

движение до точки поворота. Такие прозрачности равны $\tilde{D}^+ = \tilde{D}^-$. Но после прохождения этой точки электрон движется квазиклассически, приобретая энергию eU_a . Это приводит к опусканию УФ на аноде на eU_a и к необходимости использования величины k_a . Указанное иллюстрирует бесконечно узкий барьер в виде ступеньки: $V = 0$ на катоде при $x < 0$ и $V = -eU_a$ при $x > 0$ на аноде. Для него квазиклассическое приближение дает полную прозрачность $D = 1$, $R = 0$. Однако при строгом решении отражение от ступеньки есть

$$R = (k_0 - k_a) / (k_0 + k_a)$$

и $D < 1$. Применение формулы (4) эквивалентно сшиванию ВФ и ее производной. Очевидно, уровни

$$E_n = E'_n - iE''_n$$

можно определить как комплексные корни уравнения

$$R^+(E_n) = 0.$$

Прозрачность с анода на катод D^- определяется обратным пересчетом, при этом на аноде следует взять

$$k_a = \sqrt{2m_e E}/\hbar,$$

$$z_0 = 1/k_a$$

и

$$R^- = (1 - k_0 Z_{ia}(d)) / (1 + k_0 Z_{ia}(d)).$$

Отличие D^+ и D^- тем больше, чем больше U_a . При $eU_a > E_{Fc}$ туннелирование с анода невозможно. После туннелирования электрон всегда переходит на УФ соответствующего электрода, отдавая ему или забирая у него энергию $e|E - E_{F(a,c)}|$ в зависимости от знака разности. Этот процесс диффузионный. Он происходит на длине порядка длины свободного пробега и не влияет на волновой процесс туннелирования. При туннелировании с уровня ниже УФ происходит нагрев соответствующего электрода (эффект Ноттингема): уходящий электрон замещается электроном с УФ. При $U_a = 0$ имеем симметричную структуру в виде ямы между двумя барьерами (рис. 1, кривые θ , 1). В этом случае условие

$$R^+(E_n) = R^-(E_n) = 0$$

приводит к уровням, с которых частица одинаково туннелирует влево или вправо. В противном случае условие $R^+(E_n) = 0$ дает уровни, с которых частица может уйти на анод, а условие $R^-(E_n) = 0$ соответствует уровням перехода на катод. Вычисления

показывают, что уровни примерно совпадают в пределах их ширины. Пусть, например, $eU_a > E_{FA}$. Все уровни энергии на аноде становятся отрицательными, и с них невозможны переходы на положительные уровни энергии катода. Нетрудно видеть, что для $E < 0$ в этом случае $|R^-(E)| \equiv 1$, т.е. нет решений уравнения $R^-(E) = 0$. В этом случае импеданс катода $1/k_c$ мнимый, и катод для анода выступает как бесконечно длинная полностью отражающая ступенька. Положительными энергии на аноде могут быть только при ненулевой температуре, т.е. при термоэмиссии. Решения уравнения $R^+(E) = 0$ всегда существуют для уровней на катоде. Таким образом, для несимметричного потенциала существуют два типа уровней. Реально РТ рассматривается для несимметричных потенциалов, поскольку только в этом случае существует полный ток.

Другой возможный подход к решению стационарного УШ может состоять в использовании матриц переноса [1–3] $\hat{T}(E)$. Матрица структуры определяется путем кусочно-постоянной аппроксимации потенциала V и перемножения матриц участков. Характеристическое уравнение для определения уровней туннелирования на анод принимает вид [1, 3]

$$ik_c(E) = \frac{T_{21}(E) - ik_a(E)T_{22}(E)}{T_{11}(E) - ik_a(E)T_{12}(E)}. \quad (5)$$

Еще один способ решения УШ состоит в использовании метода прогонки. Кроме нахождения $R^\pm(E)$ и $D^\pm(E)$ он позволяет определить амплитуды $A_n^\pm \psi(\pm ik_n(x - x_n))$ у волновых функций и распределение заряда в области барьера и ямы при известном входном потоке падающих частиц с катода $n^+(k) v_z dv_z$ и с анода $n^-(k) v_z dv_z$. Это, в свою очередь, позволяет оценить изменение квантового потенциала V за счет влияния пространственного заряда при сильном токе [2]. Такая оценка требует совместного итерационного решения уравнения Пуассона (УП) и УШ. Для наших целей анализа влияния резонансных уровней на эмиссию вышеупомянутые численные методы не удобны.

Получим строгое решение УШ для модельного потенциала $\hat{V}(x)$, описываемого двумя прямоугольными барьерами высоты V_c у катода и V_a у анода рис. 2. Для лучшего соответствия реальному потенциалу размеры барьеров t_c и t_a берем примерно в два раза меньше, чем основания реальных почти треугольных барьеров на прямоугольном постаменте (рис. 1, кривые 2, 4, 6), при этом размер ямы t_w соответственно увеличиваем. Можно получить строгое соответствие ширины треугольного

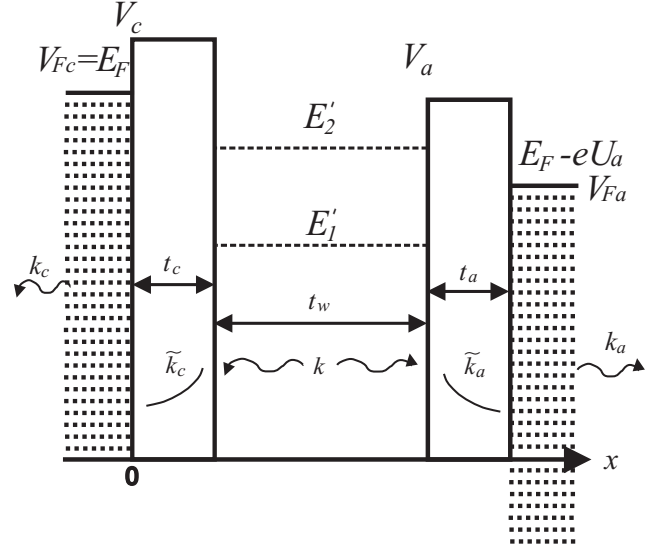


Рис. 2. Схематическое распределение потенциала V в одноячейной РТС при $U_g = E_F/e$. Штриховыми линиями обозначены уровни на катоде, аноде и два метастабильных уровня

барьера и ширины прямоугольного барьера с одинаковыми высотами, приравнивая их прозрачности $D_{rec}(E) = D_{tre}(E)$. Такое соответствие зависит от энергии. Усредняя по энергиям, получим коэффициент примерно $t_{rec} \approx 0.5 t_{tre}$. В яме решение УШ имеет вид

$$\psi(x) = A_w^+ \exp(ik_0(x - t_c)) + A_w^- \exp(-ik_0(x - t_c)).$$

В барьере у катода имеем ВФ

$$\psi(x) = A_c^+ \exp(-\tilde{k}_A x) + A_c^- \exp(\tilde{k}_A x),$$

а в барьере у анода ВФ принимает вид

$$\psi(x) = A_a^+ \exp(-\tilde{k}_a(x - t_c - t_w)) + A_a^- \exp(\tilde{k}_a(x - t_c - t_w)).$$

Здесь обозначено

$$\tilde{k}_c = \sqrt{2m_e(V_c - E)},$$

$$\tilde{k}_a = \sqrt{2m_e(V_a - E)},$$

$$k_0 = \sqrt{2m_e E}.$$

ВФ на катоде есть уходящая от него волна

$$\psi(x) = A_c \exp(-ik_0 x).$$

Аналогично на аноде

$$\psi(x) = A_a \exp(ik_0(x - d)).$$

Здесь $A_a = k_0$, $d = t_c + t_w + t_a$ — размер структуры. Задача, как обычно, состоит в спивании ВФ и их производных. Всего неизвестных восемь, границ четыре, и условий тоже восемь. Вычислять определитель восьмого порядка без использования численных методов — задача не из легких. Будем последовательно исключать неизвестные. Результаты такого исключения приведены в Приложении. Определяя функцию $f(E)$ по формуле (П2) Приложения, имеем характеристическое уравнение

$$E = V_a \frac{(f(E) - 1)^2}{(f(E) - 1)^2 - (f(E) + 1)^2}. \quad (6)$$

для итерационного поиска комплексных корней $\tilde{E}_n$. Считая функцию f большой по модулю (барьеры широкими), получим $E \approx -V_c f(E)/4$. При расширении ямы от весьма узкой сначала уровень возникает около V_a [21]. Для такого уровня $\tilde{k}_a \approx 0$. В этом случае должно быть

$$\operatorname{tg}(k_0 t_w) \approx k_0 / \tilde{k}_a.$$

Пусть имеется такой уровень

$$\tilde{E}_1 = V_a (1 - \delta_1),$$

где δ_1 — малая величина. Пусть также

$$\delta \ll \Delta = V_c / V_a - 1.$$

Вычислим функцию f . Имеем

$$\begin{aligned} \tilde{k}_c &\approx \tilde{k} (1 + \delta / (2\Delta)), \\ \exp(2\tilde{k}_c t_c) &\approx \exp(2\tilde{k} t_c) (1 + \delta / (2\Delta)), \end{aligned}$$

где обозначена величина

$$\tilde{k} = \sqrt{2m_e V_a \Delta} / \hbar.$$

Также

$$k_0 \approx \tilde{k} (1 - \delta/2) / \sqrt{\Delta},$$

$$k_0 / \tilde{k}_c \approx (1 - \delta_1 (1 + 1/\Delta) / 2 + \delta_1^2 / (4\Delta)) / \sqrt{\Delta}.$$

Положим $\tilde{k}_a = 0$, а введенное условие запишем в виде

$$\operatorname{tg}(t_w \tilde{k} / \sqrt{\Delta}) = \sqrt{\Delta}.$$

Тогда имеем

$$f \approx \frac{\exp(2\tilde{k} t_c)}{4\Delta - \delta_1 (\Delta + 1) (1 + t_w \tilde{k})} \times$$

$$\begin{aligned} &\times \left\{ \delta_1 (\Delta + 1) (1 + t_w \tilde{k}) - \right. \\ &\left. - (\delta_1^2 / 2) \left[\Delta + 2\Delta (t_w \tilde{k})^2 + (\Delta + 1) (1 + t_w \tilde{k}) \right] \right\}. \end{aligned}$$

Для левой части (П2) получим

$$\frac{1 + ik_0 / \tilde{k}_a}{1 - ik_0 / \tilde{k}_a} \approx 1 + \delta_1 \frac{1 + i\sqrt{\Delta}}{(\Delta + 1)^2},$$

откуда можно найти поправку δ_1 . Пренебрегая вторым порядком, найдем

$$\begin{aligned} \delta_1 &= \frac{16 \exp(-2\tilde{k} t_c)}{(1 + 1/\Delta) (1 + t_w \tilde{k})} + \\ &+ \frac{4\delta \exp(-2\tilde{k} t_c)}{(1 + 1/\Delta) (1 + t_w \tilde{k})} \times \\ &\times \left[4 \frac{1 + i\sqrt{\Delta}}{(\Delta + 1)^2} - (1 + 1/\Delta) (1 + t_w \tilde{k}) \right]. \end{aligned}$$

Второй член можно опустить. Для точного поиска корней уравнения (6) рассмотрим яму, окруженную бесконечно широкими барьерами, т. е. ступеньками потенциала высоты V_c и V_a . Пусть $V_a < V_c$. В такой яме возможны стационарные уровни энергии $E_n < V_a$. Задача о несимметричной яме решена и исследована в [21]. С обозначением

$$k_{0n} = \sqrt{2m_e E_n} / \hbar$$

она имеет решение

$$\begin{aligned} k_{0n} t_w &= n\pi - \arcsin\left(\frac{k_{0n} \hbar}{\sqrt{2m_e V_c}}\right) - \\ &- \arcsin\left(\frac{k_{0n} \hbar}{\sqrt{2m_e V_a}}\right) = g(E_n) \quad (7) \end{aligned}$$

и дает действительные уровни. Уравнение (7) запишем в виде

$$\operatorname{tg}(k_{0n} t_w) = k_{0n} t_n,$$

где

$$t_n = \frac{k_{0n} + \tilde{k}_c}{\tilde{k}_c \tilde{k}_a - k_{0n}^2}.$$

Выбирая ширину ямы из условия существования одного уровня

$$t_w > t_0 = \frac{\pi/2 - \arcsin(V_a/V_c)}{\sqrt{2m_e V_c} / \hbar},$$

имеем

$$E_n = \frac{(\hbar g(E_n)/t_w)^2}{2m_e}.$$

Из этого уравнения методом деления пополам на отрезке $(0, V_0)$ находим действительные значения E_1 . Для существования нескольких уровней яма должна быть в несколько раз шире, чем t_0 . Тогда находим E_n , $n = 1, 2, \dots, N$. Значения E_n используем как начальные $\tilde{E}_n^{(0)} = E_n$ для итераций по формуле (6). В результате получаем все уровни, с которых частица может уйти как на анод, так и на катод. Для повышения тока следует использовать максимально широкую яму, для чего материал соответствующего электрода должен обладать максимально большой длиной свободного пробега (ДСП) электронов. Кратно увеличить ДСП можно, используя криогенные температуры. Рассмотрим вывод уравнения (7), когда ВФ со стороны катода и анода взяты в виде

$$\psi(x) = A_c \exp\left(\tilde{k}_a(1 - i\delta_c)x\right),$$

$$\psi(x) = A_a \exp\left(-\tilde{k}_a(1 - i\delta_a)(x - t_w)\right),$$

т. е. барьеры частично прозрачные. Здесь

$$\tilde{k}_c = \sqrt{2m_e(V_c - E'_n)}/\hbar,$$

$$\tilde{k}_a = \sqrt{2m_e(V_a - E'_n)}/\hbar,$$

а малые поправки берем в виде

$$\delta_c = E''_n / (2V_c - 2E'_n),$$

$$\delta_a = E''_n / (2V_a - 2E'_n).$$

Реально они связаны с конечной шириной барьеров и конечным временем жизни уровней. В яме $0 < x < t_w$ берем

$$\psi(x) = A \sin(k_{0n}(1 + \delta_n)x + \delta),$$

где

$$\tilde{E}_n = (1 + \delta_n)^2 (k_{0n}\hbar)^2 / (2m_e),$$

а малую поправку δ_n требуется найти. В результате для нее получаем характеристическое уравнение

$$\begin{aligned} \operatorname{tg}(k_{0n}(1 + \delta_n)t_w) &= k_{0n}(1 + \delta_n) \times \\ &\times \frac{\tilde{k}_a(1 - i\delta_a) + \tilde{k}_c(1 - i\delta_c)}{\tilde{k}_c\tilde{k}_a(1 - i\delta_a)(1 - i\delta_c) - k_{0n}^2(1 + \delta_n)^2}. \end{aligned}$$

Введем обозначения

$$\delta'_{an} = \delta_a/\delta_n, \quad \delta'_{cn} = \delta_c/\delta_n.$$

Штрихованные величины не являются малыми. Учитывая (8), для получения поправки следует использовать разложение вплоть до второго порядка по δ_n^2 . Получаем $\delta_n = A_n/B_n$, где

$$\begin{aligned} A_n &= \frac{t_w}{t_n} + k_{0n}^2 t_n t_w - 1 + \frac{i(\delta'_{an}\tilde{k}_a + \delta'_{cn}\tilde{k}_c)}{\tilde{k}_a + \tilde{k}_c} - \\ &- \frac{2i\tilde{k}_c\tilde{k}_a(\delta'_{an} + \delta'_{cn}) + 2k_{0n}^2}{\tilde{k}_c\tilde{k}_a - k_{0n}^2}, \\ B_n &= \frac{\tilde{k}_c\tilde{k}_a\delta'_{an}\delta'_{cn} + k_{0n}^2}{\tilde{k}_c\tilde{k}_a - k_{0n}^2} - k_{0n}^2 t_n t_w + \\ &+ 4 \left[\frac{i\tilde{k}_c\tilde{k}_a(\delta'_{an} + \delta'_{cn}) + k_{0n}^2}{\tilde{k}_c\tilde{k}_a - k_{0n}^2} \right]^2 + \\ &+ \frac{2i\tilde{k}_c\tilde{k}_a(\delta'_{an} + \delta'_{cn}) + 2k_{0n}^2}{\tilde{k}_c\tilde{k}_a - k_{0n}^2}. \end{aligned}$$

При вычислении поправки можно полагать $\tilde{E}'_n = E_n$, и тогда

$$\tilde{E}_n''/E_n = -\operatorname{Im}(\delta_n),$$

а реальная часть также изменяется:

$$E'_n = E_n(1 + \operatorname{Re}(\delta_n)).$$

На рис. 2 показаны два уровня. С катода возможно туннелирование на оба уровня с уходом на анод. При этом катод нагревается, поскольку его уровень выше УФ (эффект Ноттингема). При переходе с первого уровня на анод последний охлаждается, а при переходе со второго — нагревается. Туннелирование с анода на второй уровень при $T=0$ невозможно. Время жизни уровня экспоненциально уменьшается с уменьшением ширин барьеров. Последние уменьшаются с ростом U_g (эффект Шоттки), т. е. с увеличением глубины ямы. При $U_g > U_a + E_{Fc}/\hbar$ в яме возможны стационарные уровни. Сужает барьеры увеличение напряжения U_g и уменьшение размеров t_c и t_a . Имеет место критическое напряжение, когда барьер относительно УФ исчезает, т. е. становится почти треугольным. Действительно, используя формулу (1), в которой обозначаем

$$W' = W_c \frac{(1 - \alpha/d)(1 + \delta/d)^2}{(1 - \delta/d)^2 \varepsilon},$$

считая $d = t_g$ и пренебрегая в ней малыми членами, это условие можно записать так:

$$V(x_0) = E_{Fc} =$$

$$= E_{Fc} + W'_c(1 - \delta d / (x_0(d - x_0))) - eU_g x_0 / d.$$

Из него находим точку x_0 , где это имеет место. Она весьма близка к катоду, поэтому упрощаем кубическое уравнение, заменяя $d - x_0$ на d :

$$x_0 = eU_g x_0^2 / (W'_c d) + \delta.$$

Решить это квадратное уравнение проще итерациями, полагая сначала $x_0 = \delta$, а затем уточняя:

$$x_0 = \delta + \delta^2 eU_g / (W'_c d).$$

Уточнение весьма мало, поэтому получаем критическое напряжение

$$U_g = W'(d/\delta - 1) / (2e) \approx W'd / (2e\delta).$$

Для РВ порядка 4 эВ при $d=2$ нм ему соответствует напряженность критического электрического поля на катоде $2.35 \cdot 10^{10}$ В/м. Таким образом, в РТС с ямой с шириной порядка нескольких t_0 при малых ширинах барьеров t_c и t_a возможно сильное увеличение эмиссионного тока, для чего достаточно увеличить размер t_w . Однако туннелирование — транспорт баллистический без потери энергии, поэтому ширина t_w должна быть существенно меньше ДСП электрона в соответствующем материале. Характерный размер t_w при комнатной температуре — несколько нм. Для уменьшения времени жизни уровней с целью увеличения тока барьеры следует выполнять узкими. Их сужение также достигается увеличением напряжений на электродах. Получить точные решения уравнения (6) не сложно, но эти уравнения модельные, поэтому для реальных потенциалов рис. 1 следует решать строгие уравнения (5) или $R^\pm(E) = 0$. В таблице приведены результаты итерационного вычисления комплексных энергий. Вычисления по формуле (5) и из условий $R^\pm(E) = 0$ совпадают.

Весьма простым методом определения комплексных уровней является расчет прозрачности структур. На рис. 3 приведен пример вычисления D^+ и в ряде двухъямных РТС, имеющих от 2 до 4 метастабильных уровней. Такие структуры получаются при сдвоенной сетке [1–3] и более удобны для получения РТ, поскольку можно сформировать два примерно одинаковых барьера при существенном электростатическом потенциале U_a . Отметим, что пики для D^+ и D^- , вообще говоря, немного различаются, причем в приведенных случаях различие имеет место при малых энергиях после нескольких знаков от запятой. При $E > E_{Fc}$ всегда $D^\pm \approx 1$. Этот случай соответствует термоэмиссии, если температуры

электродов $T^\pm > 0$. Отметим, что при разных барьерах могут быть пики, не доходящие до единицы (неполное РТ). Это связано с неполным погашением отраженных электронных волн. Величины E'_n определяются по максимумам пиков, что можно сделать достаточно точно. Величины E''_n определяются по ширине резонансов. Обычно уровни расположены вблизи верхних областей ямы.

Рассмотрим, как влияет положение уровня и его ширина на вклад в ток. Пусть имеется один уровень $E'_1 - iE''_1$. Аппроксимируя его в (3) равнобедренным треугольником единичной высоты, получаем вклад от уровня

$$\Delta J^+ = -em_e(E_{Fc} - E'_1)E''_1 / (4\pi^2 \hbar^3).$$

Для уровней вблизи УФ катода он мал. Поэтому важно получать низколежащие уровни с малым временем жизни (большой шириной). Для одиночного треугольного потенциального барьера при закритическом поле квазиклассическое приближение дает его прозрачность D в виде

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

см. [20]. Здесь высота барьера W отсчитывается от кинетической энергии набегающего на барьер электрона, т. е. в нашем случае $W = V - E$. Для глубоких

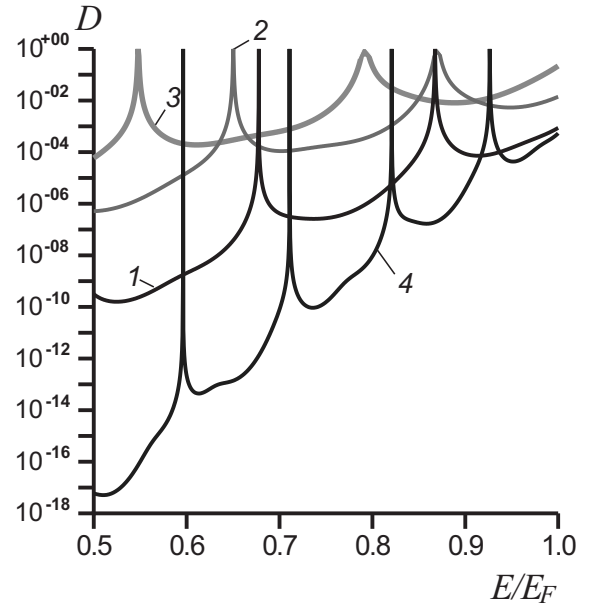


Рис. 3. Коэффициент туннелирования с катода $D = D^+$ в двухъямной структуре $t = t_1 = t_2 = t_3$ в зависимости от отношения E/E_{Fc} при $t = t_g = 1$ нм, $d = 5$ нм (1, 3) и $t = 2$ нм, $t_g = 1.5$ нм, $d = 9$ нм (4). Работы выхода $W_c = W_g = W_a = 4.0$ эВ, энергии Ферми $E_{Fc} = E_{Fa} = 5$ эВ, $U_a = 11$ В. $U_g = 13$ В (1, 4); $U_g = 20$ В (2); $U_g = 25$ В (3)

Таблица. Метастабильные уровни (эВ) в области $(0, E_{Ec})$ для потенциала рис. 1 при разных анодных напряжениях U_a (В)

U_a	1.0	2.0	3.0	4.0
$E'_1 - iE''_1$	$0.14467 - i3.1 \cdot 10^{-4}$	$0.1445 - i2.9 \cdot 10^{-4}$	$0.1399 - i2.7 \cdot 10^{-4}$	$0.1405 - i2.7 \cdot 10^{-4}$
$E'_2 - iE''_2$	$1.815 - i2.5 \cdot 10^{-3}$	$1.807 - i2.6 \cdot 10^{-3}$	$1.798 - i2.8 \cdot 10^{-3}$	$1.789 - i2.9 \cdot 10^{-3}$
$E'_3 - iE''_3$	$4.4938 - i8.9 \cdot 10^{-3}$	$4.369 - i9.5 \cdot 10^{-3}$	$4.328 - i9.9 \cdot 10^{-3}$	$4.279 - i1.2 \cdot 10^{-2}$
$E'_4 - iE''_4$		$6.872 - i7.2 \cdot 10^{-2}$	$6.982 - i8.3 \cdot 10^{-2}$	

уровней прозрачность одиночного барьера экспоненциально мала по сравнению с $D = 1$ при РТ. Для глубоких уровней формула работает достаточно хорошо, однако при $E = V$ видна ее ограниченность: $D = 1$ при $W = 0$, тогда как решение УШ дает $D < 1$. Этим, в частности, ограничено применение формулы Фаулера – Нордгейма к одиночному барьеру. Тем не менее, результат можно использовать для оценки времен жизни глубоких уровней, вычисляя $D_{(c,a)}$ при $W = V_{c,a} - E_n$ и определяя $\delta_c = D_c$ и $\delta_a = D_a$.

3. ВРЕМЯ ЖИЗНИ УРОВНЯ ПРИ НЕСТАЦИОНАРНОМ ПОДХОДЕ

Нестационарное УШ, записываемое как

$$\hat{S}(t, x) \psi(t, x) = V(t, x) \psi(t, x),$$

является релятивистски нековариантным. Здесь мы обозначили оператор Шредингера свободной частицы

$$\hat{S}(t, x) = i\hbar \partial_t + \frac{(\hbar \partial_x)^2}{2m_e}.$$

Это означает, что пропагаторная функция Грина (ПФГ), описывающая распространение частицы из точки x' в момент t' в точку x в момент t и имеющая вид [22, 23]

$$K_0(t - t', x - x') = \text{sgn}(t - t') \sqrt{\frac{m_e}{2\pi i \hbar |t - t'|}} \times \exp\left(\frac{i(x - x')^2 m_e}{2\hbar |t - t'|}\right), \quad (8)$$

дает бесконечно быстрое распространение возмущения. Действительно, ПФГ (8) определяет частицу в

точке x в момент t по ее амплитуде $\psi_0(x', t')$ в точке x' в момент t'

$$\psi_0(t, x) = \int_{-\infty}^{\infty} K_0(x - x', t - t') \psi_0(t', x') dx'.$$

Если в точке x_0 в момент t_0 возникла плотность вероятности

$$\psi_0(t_0, x) = \delta(x - x_0),$$

т.е. частица локализована в этой точке, то при $t > t_0$ она существует во всех точках бесконечной области:

$$\psi_0(x, t) = K_0(x - x_0, t - t_0),$$

т.е. скорость распространения плотности вероятности бесконечна. Однако плотность вероятности в удаленных точках бесконечно мала. Здесь индекс ноль означает свободную частицу ($V=0$). Такая частица в общем случае описывается как волновой пакет (ВП) с неким спектром волновых чисел k и энергий E . Отметим, что набегающий поток частиц с распределением (2) также есть ВП. ПФГ (8) удовлетворяет начальному условию

$$K_0(t - t', x - x')_{t \rightarrow t'} = \delta(x - x')$$

и уравнению

$$\hat{S}K_0(t - t', x - x') = i\hbar \delta(t - t') \delta(x - x'),$$

см. [22]. Решать нестационарное УШ надо при определенных начальных условиях. Удобно брать в качестве начальных условий при $t = t_0$ стационарный случай, т.е. при $t < t_0$ использовать ВФ $\psi_0(x)$ и потенциал $V_0(x)$. В момент $t \geq t_0$ потенциал $V(x, t)$ начинает изменяться, а ВФ удовлетворяет нестационарному УШ. Она при $t_0 > 0$

определяется интегральным уравнением (ИУ) типа Липпмана – Швингера:

$$\psi(x, t) = \psi_0(x) - i\hbar^{-1} \int_0^t \int_{-\infty}^{\infty} K_0(t - t', x - x') \times \\ \times [V(t', x') - V_0(x')] \psi(t', x') dx' dt'. \quad (9)$$

Действительно, при $t \leq 0$ имеем $\psi(x, t) = \psi_0(x)$. При $t > 0$, действуя на (9) оператором $\hat{S}$, получаем

$$\hat{S}\psi(x, t) = V(t, x) \psi(t', x').$$

Если потенциал

$$\Delta V(t, x) = V(t, x) - V_0(x)$$

локализован в некоторой области, уравнение (9) для малых времен решить достаточно просто. Пример решения для двухбарьерного РТД дан в работе [12]. Это уравнение удобно для исследования переходных процессов и времен туннелирования. Возможны случаи $\Delta V(0, x) = 0$ (плавное изменение потенциала) и $\Delta V(0, x) \neq 0$ (резкое изменение потенциала). Рассмотрим второй случай. Пусть при $t < 0$ имеем яму с одним метастабильным уровнем между двумя барьерами. Этот уровень не может быть заселен, поскольку за бесконечное время состояние всегда распадется. Для простоты рассмотрим уровень между двумя одинаковыми барьерами высоты V . Ничто не мешает считать высоты барьеров разными, но это приводит к более громоздким выкладкам. Такой уровень между одинаковыми барьерами V определяется из уравнения

$$\text{th}(\tilde{k}_1 t_b) \text{th}(kt_w) = \\ = \alpha = \frac{\sqrt{\tilde{E}_1(V - \tilde{E}_1)}}{\tilde{E}_1 - V/2},$$

см. [13]. Здесь величина

$$\tilde{k}_1 = \tilde{k}'_1 + i\tilde{k}''_1 = \frac{\sqrt{2m_e(V - \tilde{E}_1)}}{\hbar}$$

комплексная, $t_1 = t_2 = t_b$ — толщина барьеров. Из этого уравнения можно определить время жизни $\tau_1 = 2\hbar/E_1''$. Удобно искать численное решение в виде

$$E_1 = V_0 \arctg^2(\alpha(E_1)) / \text{th}^2(\tilde{k}_1 t_b),$$

$$V_0 = \hbar^2/2m_e t_w^2,$$

представив арктангенс через логарифм. Величины

$$\alpha = \alpha' + i\alpha'' = \sqrt{E_1(V - E_1)}/(E_1 - V/2)$$

и

$$\tilde{k}' = \tilde{k}'_1 + i\tilde{k}''_1$$

комплексные. Для широких барьеров имеем

$$\tilde{k}'_1 = \sqrt{2m_e(V - E'_1)}/\hbar,$$

$$\tilde{k}''_1 = E'_1 \sqrt{m_e/(2V - 2E'_1)}/\hbar,$$

$$\text{th}^2(\tilde{k}_1 t_b) \approx 1 - 4 \exp(-2\tilde{k}'_1 t_b) \exp(-2i\tilde{k}''_1 t_b).$$

Для входящих в уравнение величин получаем

$$\alpha' = \sqrt{E'_1(V - E'_1)}/(E'_1 - V/2),$$

$$\alpha'' = E'_1 \alpha'_1 (1/(2V - 2E'_1) + 2/(2E'_1 - V) - 1/(2E'_1)).$$

Проще всего оценить уровень, считая, что он возникает у границы барьера. Тогда величина α' мала, а

$$\alpha'' \approx 3\alpha'_1 E'_1 / 2V$$

еще более малая величина. Обозначая

$$\delta = 4 \exp(-2\tilde{k}'_1 t_b) \exp(-2i\tilde{k}''_1 t_b),$$

получаем энергию в виде

$$E_1 = (V + V_0)/2 + \sqrt{V_0^2/4 + 3V_0V/2 + \delta\Delta E_1},$$

где

$$\Delta E_1 = \frac{(V_0^2/4 + 3V_0V/4)}{\sqrt{V_0^2/4 + 3V_0V/2}} + \frac{V_0}{2}.$$

Углубим яму на величину ΔV . Тогда на дне ямы энергия отрицательная. Пусть возможен только один стабильный уровень. Пусть также центр ямы находится при $x=0$. Волновая функция в яме либо четная

$$\psi_0(x) = A_c \cos(k_1 x),$$

либо нечетная

$$\psi_0(x) = A_s \sin(k_1 x),$$

при этом

$$\psi_0(t_w/2) \neq 0, \quad \psi'_0(t_w/2) \neq 0,$$

$$k_1 = \sqrt{2m_e E_1}/\hbar.$$

Обозначим

$$\tilde{k}_0 = \sqrt{2m_e(\Delta V - E_1)}/\hbar,$$

$$\tilde{k}_1 = \sqrt{2m_e(V + \Delta V - E_1)/\hbar},$$

$$z_0 = -i/\tilde{k}_0, \quad \tilde{z}_1 = -i/\tilde{k}_1, \quad z_1 = 1/k_1.$$

Тогда в случае нечетной волновой функции имеем характеристическое уравнение

$$\operatorname{tg}(k_1 t_w/2) = iZ_i/\rho_1,$$

а для четной функции

$$\operatorname{tg}(k_1 t_w/2) = -i\rho_1/Z_i.$$

Величина

$$Z_i = \frac{\tilde{\rho}_1 \left(\tilde{\rho}_0 - \tilde{\rho}_1 \operatorname{th}(\tilde{k}_1 t) \right)}{\tilde{\rho}_1 - \tilde{\rho}_0 \operatorname{th}(\tilde{k}_1 t)}$$

мнимая, поэтому уравнения действительные и определяют действительные энергии. Нормировку ВФ возьмем из условия нахождения частицы в области ямы $|x| \leq t_w/2$. Это приближенное условие, поскольку есть просачивание вероятности через барьеры. Но при достаточно большой ширине барьеров оно мало. Можно выполнить строгую нормировку, но это дает громоздкие значения амплитуд. В нашем случае для амплитуд имеем

$$|A_c|^2 = [t_w (1 + \sin(t_w k_1) / (t_w k_1))]^{-1},$$

$$|A_s|^2 = [t_w (1 - \sin(t_w k_1) / (t_w k_1))]^{-1}.$$

Понятно, что первым должен возникнуть четный уровень, поскольку ее ВФ примерно соответствует полувогне де-Бройля. Итак, при $t < 0$ существует такой заселенный уровень. В момент $t = 0$ резко включается потенциал $\Delta V > 0$, и дно ямы поднимается до нулевой энергии. В такой яме частица бесконечно долго существовать не может, и начинается распад состояния. Он описывается ИУ

$$\psi(x, t) = \psi_0(x) - i\hbar^{-1}\Delta V \times$$

$$\times \int_0^t \int_{-t_w/2}^{t_w/2} K_0(t-t', x-x') \psi(t', x') dx' dt'. \quad (10)$$

Эту задачу можно решать численно или методом возмущений. В последнем случае первое приближение есть

$$\psi_{(1)}(x, t) = \psi_0(x) - i\hbar^{-1}\Delta V \times$$

$$\times \int_0^t \int_{-t_w/2}^{t_w/2} K_0(t-t', x-x') \psi_0(x') dx' dt'.$$

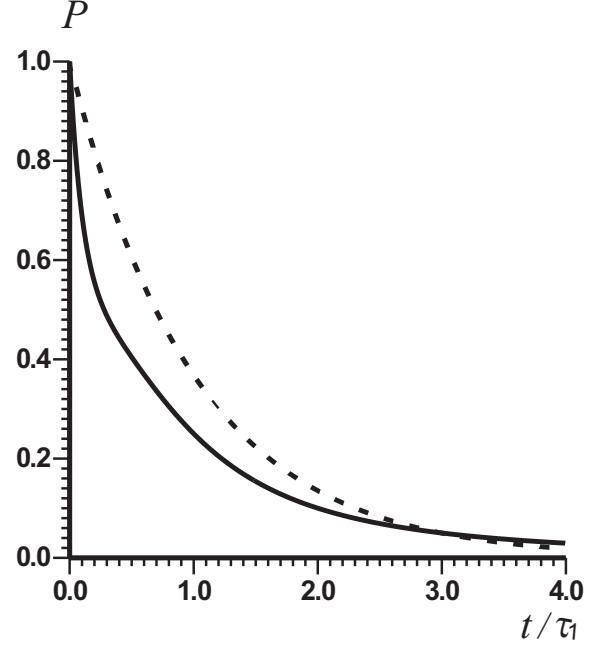


Рис. 4. Вероятность перехода $P(t)$ согласно формуле (12) для распада одиночного уровня. Штриховая кривая обозначает экспоненциальный распад $P_0(t) = \exp(-t/\tau_1)$

Вероятность нахождения частицы в области ямы теперь будет

$$P(t) = \int_{-t_w/2}^{t_w/2} |\psi(t, x)|^2 dx. \quad (11)$$

Она убывает со временем. Решая ИУ (10), вычисляем (8). Очевидно, при взятой нормировке $P(0) = 1$. Аппроксимируя (8) функцией $P_0(t) = \exp(-t/\tau_1)$, определяем время жизни уровня. Соответствующий результат приведен на рис. 4. Он соответствует значению $E_1''/E_1' = 0.021$, $\tau_1 = 59.5$ фс. Следует отметить, что распад такого состояния, вообще говоря, происходит не по экспоненциальному закону [24–35], который выполняется в пределе бесконечно долго живущего уровня [36]. В яме существуют состояния с непрерывным спектром, которые искажают экспоненциальный закон. Непрерывный спектр и интерференция приводят к более быстрому начальному распаду, а затем возникает замедление [17, 24]. Еще более сложный случай соответствует нескольким уровням. Нестационарный подход существенно сложнее, чем определение комплексных корней. Интересно отметить, что для задач туннелирования вычисление плотности вероятности

$$\rho(E) = \int |\psi_0(x, E)|^2 dx$$

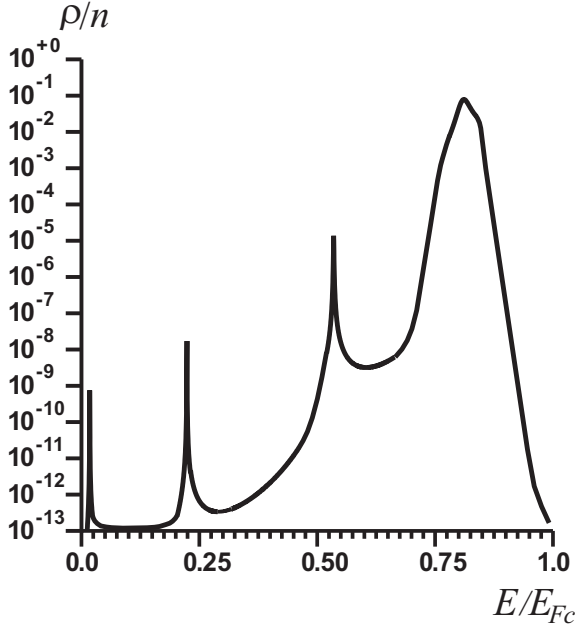


Рис. 5. Нормированная плотность числа частиц ρ в яме в зависимости от энергии E при трех резонансных уровнях (эВ): 0.140552, 1.78936 эВ, 4.27933 (см. таблицу, $U_a = 4$ В)

как по области ямы, так и по области барьеров дает максимумы при энергиях, совпадающих со значениями резонансных уровней E'_n рис. 5. Результат нормирован на плотность числа частиц в обоих потоках

$$n(E) = n^+(E) + n^-(E) = \sqrt{2Em_e^{3/2}}(E_{Fc} - E)/\pi^2\hbar^3.$$

Это связано с тем, что все падающие слева и справа потоки с резонансными энергиями E'_n проходят в яму, а для других энергий они сильно отражаются. Как туннельная плотность тока J , так и плотность потока вероятности j непрерывны вдоль всей структуры, считая и электроды, что есть следствие закона сохранения частиц (вероятности) в нерелятивистской квантовой механике.

4. ПРИМЕНЕНИЕ НЕСТАЦИОНАРНОГО УШ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ВРЕМЕНИ ТУННЕЛИРОВАНИЯ

Относительно времени туннелирования с 1930 г. (когда возникло это понятие) по настоящее время нет установившегося понимания в литературе (см. [19] и литературу там). До сих пор рассматриваются парадоксы типа Хартмана, «сверхсветового» туннелирования, отрицательного времени туннелирования и т.п. ИУ (10) вполне удобно для решения

вопроса в таких временах и вообще о переходных процессах [12]. Время жизни (пребывания в структуре) часто связывают со временем туннелирования. Здесь вместо ИУ (9) мы рассмотрим другой подход, основанный на методе рядов для решения нестационарного УШ. Пусть при $t < 0$ в области $0 < x < d$ структуры с тремя электродами $U_a = 0$, а $U_g = -W_c/e$. Пусть также величина d достаточно большая. В этом случае потенциал близок к прямоугольному ширины d и высоты W_c относительно УФ (рис. 1, кривая 0). Относительно нуля его высота $V = W_c + E_{Fc}$. Если бы на сетке было нулевое напряжение, то потенциал (относительно УФ E_{Fc}) имел бы вид двух горбов высоты W_c , разделенных промежутком с нулевой высотой. Кривая 1 на рис. 1 демонстрирует потенциал при отрицательном напряжении на сетке $U_g = -W_c$, когда вся кривая поднята на W_c . Такой потенциал запирает ток. Пусть в момент $t = 0$ потенциалы переключаются так, что $U_a > 0$ и $U_g = E_{Fc}/e$, т.е. задача становится такой, как при РТ. Соответственно надо рассматривать переходные процессы установления туннелирования при $t > 0$ при переключении от кривой 1 к кривым типа 2, 4. Для диодной структуры это переключение от кривой 0 к кривым 3, 5, 7, но без РТ. Макроскопическое изменение тока при таком процессе весьма просто измерить, в отличие от времени туннелирования отдельной частицы. Следует отметить, что при $t < 0$ ток отсутствовал в силу симметрии структуры. Также в эти времена плотность числа частиц в структуре была ничтожно мала, поскольку ничтожно мала вероятность туннелирования через широкий барьер. Вблизи краев плотность экспоненциально спадает. Выбирая d большим, можно считать, что в области барьера частицы отсутствовали. Переключение потенциалов приводит к появлению тока. Он не может появиться мгновенно, поскольку частицам надо пройти область d , что и создает конечное время переходного процесса. Будем решать нестационарное УШ разложением в ряды в области $0 < x < d$:

$$\Psi(t, x) = A \left(\sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n(t) \cos(\chi_n x) + \sum_{n=1}^{\infty} \beta_n(t) \sin(\chi_n x) \right), \quad (12)$$

$$V(t, x) = \sum_{n=0}^{\infty} \nu_n(t) \cos(\chi_n x), \quad (13)$$

где $\chi_n = n\pi/d$. Метод пригоден для нескольких электродов, но далее численные результаты пред-

ставлены для диода. Использовать либо косинусы, либо синусы в разложении (12) нельзя, поскольку в этом случае всегда будет нулевая плотность потока вероятности. Для упрощения применим метод к диодной структуре. Амплитуда A введена для нормировки, т. е. при ее задании можно положить $\alpha_0 = 1$. Для вычислений обрежем ряды (12), (13) индексом N . Подставляя (12) и (13) в УШ и используя ортогональность тригонометрических функций, получаем связанные дифференциальные уравнения

$$\begin{aligned} \alpha'_n(t) = & i \sum_{m=0}^N A_{nm}^{cc} \omega_m \alpha_m(t) + \\ & + i \sum_{m=1}^{\infty} A_{nm}^{cs} \omega_m \beta_m(t) \sin(\chi_m x) - \\ & - \frac{i}{\hbar} \left(\sum_{m=0}^N V_{nm}^{\alpha cc}(t) \alpha_m(t) + \right. \\ & \left. + \sum_{m=1}^{\infty} V_{nm}^{\beta cs}(t) \beta_m(t) \sin(\chi_m x) \right), \quad (14) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \beta'_n(t) = & i \sum_{m=0}^N A_{nm}^{sc} \omega_m \alpha_m(t) + \\ & + i \sum_{m=1}^{\infty} A_{nm}^{ss} \omega_m \beta_m(t) \sin(\chi_m x) - \\ & - \frac{i}{\hbar} \left(\sum_{m=0}^N V_{nm}^{\alpha sc}(t) \alpha_m(t) + \right. \\ & \left. + \sum_{m=1}^{\infty} V_{nm}^{\beta ss}(t) \beta_m(t) \sin(\chi_m x) \right). \quad (15) \end{aligned}$$

В них обозначены частоты $\omega_n = \hbar \pi^2 n^2 / (2m_e d^2)$ и матричные элементы, приведенные в Приложении. Это довольно сложные уравнения, если потенциал зависит от времени произвольно. В случае резкого установления потенциала он перестает зависеть от времени, и уравнения упрощаются. Переобозначая матричные элементы, эти уравнения можно записать в более простом виде. Для первого уравнения имеем

$$\begin{aligned} \alpha'_n(t) - i\omega_n \alpha_n(t) = \\ = f_n(t) = -\frac{i}{\hbar} V_{nn}^{\alpha cc}(t) + i \sum_{m=1}^{\infty} \tilde{A}_{nm}^{cs}(t) \beta_m(t) + \\ + i \sum_{m=0, m \approx n}^N \tilde{A}_{nm}^{cc}(t) \alpha_m(t). \end{aligned}$$

Решая это уравнение методом Бернулли или методом вариации произвольной постоянной, получим

$$\begin{aligned} \alpha_n(t) = & \alpha_n(0) \exp(i\omega_n t) + \\ & + \exp(i\omega_n t) \int_0^t f_n(t') \exp(-i\omega_n t') dt'. \quad (16) \end{aligned}$$

Аналогично получим

$$\begin{aligned} \beta_n(t) = & \beta_n(0) \exp(i\omega_n t) + \\ & + \exp(i\omega_n t) \int_0^t g_n(t') \exp(-i\omega_n t') dt'. \end{aligned}$$

Здесь обозначены функции

$$\begin{aligned} g_n(t) = & -\frac{i}{\hbar} V_{nn}^{\beta ss}(t) + i \sum_{m=0}^N \tilde{A}_{nm}^{sc}(t) \alpha_m(t) + \\ & + i \sum_{m=1, m \approx n}^{\infty} \tilde{A}_{nm}^{ss}(t) \beta_m(t). \end{aligned}$$

Решение во времени ищем методом дискретизации по времени $t_m = m\Delta t$, $m = 1, 2, \dots$, при этом интегралы вычисляем методом средних. Если известны начальные значения $\alpha_n(0)$, $\beta_n(0)$, то уравнения позволяют найти $\alpha_n(m\Delta t)$, $\beta_n(m\Delta t)$, при этом можно использовать как явные, так и неявные схемы. Входящие сюда модифицированные матричные элементы имеют простой и понятный вид, например,

$$\tilde{A}_{nm}^{\alpha cc}(t) = A_{nm}^{cc} - V_{nm}^{\alpha cc}(t)$$

и т. п. Если такой барьер в момент $t = 0$ мгновенно изменяет форму до $V(x)$, то эти элементы перестают зависеть от времени:

$$\tilde{A}_{nm}^{\alpha cc} = \omega_m A_{nm}^{cc} - V_{nm}^{\alpha cc} / \hbar$$

и т. п. Их можно явно найти, если форма $V(x)$ простая. При большом U_a она близка к треугольнику, поставленному на прямоугольный постамент (рис. 1, кривые 3, 5, 7). При $eU_a = E_F$ высоту постамент можно взять как W , а высоту треугольника как E_F . Реально из-за эффекта Шоттки барьер несколько ниже. Вычисляя интегралы, имеем

$$\begin{aligned} V_{nm}^{\alpha cc} = & (v_{n+m}^c + v_{n-m}^c) / (1 + \delta_{n0}), \\ V_{nm}^{\beta ss} = & (v_{n+m}^s - v_{n-m}^s) / (1 + \delta_{n0}), \\ V_{nm}^{\alpha sc} = & v_{n-m}^s + v_{n+m}^s, \\ V_{nm}^{\beta ss} = & v_{m-n}^c - v_{m+n}^c. \end{aligned}$$

Здесь обозначены значения следующих интегралов

$$\nu_n^c = \frac{1}{d} \int_0^d V(x) \cos(\chi_n x) dx,$$

$$\nu_n^s = \frac{1}{d} \int_0^d V(x) \sin(\chi_n x) dx.$$

Для начального симметричного широкого барьера (кривая 0) высота $V_0 = W + E_F$, а коэффициенты $\alpha_n(t) = 0$ и $\beta_n(t) = 0$ при $t < 0$, поскольку внутри плотность вероятности практически отсутствует. Это приближение тем лучше, чем больше d . Оно означает, что $\alpha_n(t) = 0$, $\beta_n(t) = 0$, т.е. внутри $\Psi(x, t) = 0$, $t < 0$. Берем начальный барьер прямоугольным. Тогда интегралы вычисляются просто, например,

$$\nu_n(0) = V_0 \text{sinc}(n\pi) = V_0 \delta_{n0}.$$

Когда такой барьер при приложении напряжения $U_a = E_F/e$ принимает вид зависимости

$$V(x) \approx W + E_F(1 - x/d)$$

(см. рис. 1, кривая 7), то

$$\nu_n^c = (W + E_F) \delta_{n0} + E_F \text{conc}(n\pi),$$

$$\nu_n^s = W \text{conc}(n\pi) + E_F \text{sinc}(n\pi).$$

В нашем случае

$$\nu_n^s = W \text{conc}(n\pi).$$

Считаем, что в момент включения напряжения некоторые коэффициенты $\alpha_n(0)$ и $\beta_n(0)$ мгновенно изменяются от нуля. Это происходит за счет включения потока плотности вероятности. Найдем их из условия непрерывности плотности этого потока. Слева перед барьером спектральная ВФ имеет вид

$$\psi(x, k) = a^+(k) [\exp(ikx) + R^+(k) \exp(ikx)],$$

а справа соответственно

$$\begin{aligned} \psi(x, \tilde{k}) &= \\ &= a^-(\tilde{k}) [\exp(-i\tilde{k}(x-d)) - \exp(i\tilde{k}(x-d))]. \end{aligned}$$

При этом

$$\psi(d, k) = 0, \quad \psi'(d, \tilde{k}) = -2i\tilde{k}a^-(\tilde{k}),$$

и при большом напряжении

$$|\psi'(d, k)/\psi'(0, \tilde{k})| \ll 1.$$

При включении напряжения электрохимический потенциал на катоде скачком увеличивается, поэтому

$$\begin{aligned} \sqrt{2m_e e U_a}/\hbar < k < \sqrt{2m_e (E_{Fc} + e U_a)}/\hbar, \\ 0 < \tilde{k} < \sqrt{2m_e E_{Fa}}/\hbar. \end{aligned}$$

Теперь коэффициенты α_n , β_n в ВФ (13) при $t > 0$ становятся отличными от нуля. Они безразмерные, поэтому следует определить амплитуду A из нормировки на поток частиц. Поток справа при большом U_a вполне можно взять равным нулю:

$$j(d) = 0.$$

Поток слева для волновой функции

$$\psi(x, k) = a^+(k) [\exp(ikx) + R^+(k) \exp(ikx)]$$

имеет вид

$$j(0, k) = \frac{\hbar k |a^+(k)|^2}{m_e} (1 - |R^+(k)|^2).$$

Полный поток получаем интегрированием:

$$\begin{aligned} j(0) &= \frac{\hbar}{m_e} \int_0^{k_F} |a^+(k)|^2 (1 - |R^+(k)|^2) k dk = \\ &= \frac{m_e}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^{E_F} (1 - |R^+(E)|^2) (E_F - E) dE. \end{aligned}$$

Вычисляя поток внутрь барьера слева при $x = 0$, найдем условие

$$\begin{aligned} j(0) &= -i \frac{\hbar}{m_e} \text{Re} \Psi'(0, 0) \Psi^*(0, 0) = \\ &= -\frac{\hbar |A|^2}{m_e} \text{Re} \left(i \sum_{n=1}^{\infty} \chi_n \beta_n(0) \right) \left(\sum_{m=0}^{\infty} \alpha_m^*(0) \right). \end{aligned}$$

Для потока справа (с анода) найдем

$$\begin{aligned} &-\frac{\hbar |A|^2}{m_e} \text{Re} \left(i \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \chi_n \beta_n(0) \right) \times \\ &\times \left(\sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \alpha_m^*(0) \right) = 0. \end{aligned}$$

Необходимо также приравнять ВФ и их производные на границах области:

$$\Psi(0, 0) = A \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n(0),$$

$$\begin{aligned}\Psi'(0,0) &= A \sum_{n=1}^{\infty} \chi_n \beta_n(0), \\ \Psi(0,d) &= A \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \alpha_n(0) = 0, \\ \Psi'(0,d) &= A \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \chi_n \beta_n(0) = 0.\end{aligned}$$

Последнее равенство мы приравняли нулю, поскольку считаем напряжение большим, а энергию отсчитываем от нуля зоны проводимости катода. Имеем шесть дополнительных уравнений для определения бесконечного числа начальных условий $\alpha_n(0)$, $\beta_n(0)$. Однако использование полного набора синусов в (12) избыточно, поскольку система косинусов полна для аппроксимации ВФ. Мы ввели синусы для получения ненулевых потоков и ненулевых производных ВФ на границах. Вполне можно положить $\alpha_n(0) = 0$, $n > 2$, $\beta_n(0) = 0$, $n > 3$. Тогда неизвестных шесть, как и условий. Однако ненулевыми достаточно взять коэффициенты $\alpha_0(0)$, $\alpha_1(0)$, $\beta_1(0)$, $\beta_2(0)$. Тогда

$$\alpha_1(0) = \alpha_0(0), \quad \beta_2(0) = \beta_1(0)/2,$$

и все шесть уравнений удовлетворяются, при этом

$$j(0) = -\frac{4\pi\hbar|A|^2}{m_e d} \operatorname{Re}(i\beta_1(0)\alpha_0^*(0)).$$

Удобно взять

$$\beta_1(0) = i\alpha_0(0), \quad \alpha_0(0) = 1.$$

Тогда

$$j(0) = \frac{4\pi\hbar|A|^2}{m_e d},$$

и ВФ примет вид

$$\begin{aligned}\Psi(t,x) &= \sqrt{\frac{j(0)m_e d}{4\pi\hbar}} \times \\ &\times \left(\sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n(t) \cos(\chi_n x) + \sum_{n=1}^{\infty} \beta_n(t) \sin(\chi_n x) \right). \quad (17)\end{aligned}$$

Из него находим $\Psi(t,d)$ и $\Psi'(t,d)$. Другой способ получения решений уравнений (14), (15) — использование преобразований Фурье

$$\begin{pmatrix} \alpha_n(t) \\ \beta_n(t) \end{pmatrix} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \begin{pmatrix} \alpha_n(\omega) \\ \beta_n(\omega) \end{pmatrix} \exp(i\omega t) d\omega,$$

что связано с необходимостью вычисления интегралов. Это можно сделать методом вычетов, но это вопрос, требующий отдельного рассмотрения.

Для решения задачи надо определить начальную ВФ $\Psi(0,x)$ и ее производную, что будет сделано далее. Удобно ввести частоту $\omega = E/\hbar$. Тогда падающий слева ВП можно записать так:

$$\Psi(t,0) = \int_0^{E/\hbar} \psi^+(0,\omega) \exp(-i\omega t) d\omega,$$

$$\psi^+(0,\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(0,\omega) \exp(i\omega t) d\omega.$$

Здесь

$$\omega = k^2 \hbar / 2m_e, \quad k = \sqrt{2m_e \omega / \hbar}.$$

Пренебрегая обратным туннелированием, имеем слева

$$\Psi(t,0) = \int_0^{E/\hbar} a^+(\omega) (1 + R^+(\omega)) \exp(-i\omega t) d\omega,$$

а справа получаем

$$\Psi(t,d) = \int_0^{E_F/\hbar} a^+(\omega) T^+(\omega) \exp(-i\omega t) d\omega.$$

Падающий слева ВП обозначим

$$\Psi^+(t) = \int_0^{E/\hbar} a^+(\omega) \exp(-i\omega t) d\omega.$$

Здесь

$$\psi^+(0,\omega) = a^+(\omega), \quad \psi^+(d,\omega) = a^+(\omega) T^+(\omega).$$

Определяя $\Psi(x,t)$ как решение нестационарного УШ в момент t , построим функцию

$$\tilde{\Psi}(x,t) = \Psi(x,t) - \Psi(x,0).$$

Она равна нулю вне интервала $(0,t)$, т. е. имеет ограниченный носитель, и

$$\tilde{\Psi}(x,\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_0^t \tilde{\Psi}(x,t') \exp(i\omega t') dt',$$

$$\Psi(x,\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^t \Psi(x,t') \exp(i\omega t') dt'.$$

Можно построить зависящие от времени коэффициенты отражения и прохождения $R^+(t)$, $T^+(t)$. Именно, следует взять

$$R^+(t) = \Psi(0,t) / \Psi^+(t) - 1,$$

$$T^+(t) = \Psi(d, t) / \Psi^+(t).$$

При учете обратного туннелирования определим падающий справа ВП

$$\Psi^-(t) = \int_0^{E/\hbar} a^-(\omega) \exp(-i\omega t) d\omega.$$

Тогда имеем

$$\Psi(t, 0) = \Psi^+(t) (1 + R^+(t)) + T^-(t) \Psi^-(t),$$

$$\Psi(t, d) = \Psi^+(t) T^+(t) + \Psi^-(t) (1 + R^-(t)).$$

Чтобы найти все коэффициенты, надо еще определить $\Psi'(t, x)$, Ψ'^+ и Ψ'^- . Находить производные можно, дифференцируя ряды.

Плотность тока на аноде определяем через плотность потока вероятности

$$J(t_m) = -ej(t_m, d).$$

Для нее при нормировке ВФ на плотность вероятности надо взять [20]

$$\begin{aligned} j(t_m, x) = \\ = -\frac{i\hbar}{2m_e} \left[\Psi^*(t_m, x) \partial_x \Psi(t_m, x) - \right. \\ \left. - \Psi(t_m, x) \partial_x \Psi^*(t_m, x) \right]. \end{aligned}$$

Для произвольного момента времени получим

$$\begin{aligned} j(t, x) = \frac{j(0)}{4} \times \\ \times \operatorname{Re} \left(-i \sum_{m=0}^{\infty} [\alpha_m^*(t) \cos(\chi_m x) + \beta_n^*(t) \sin(\chi_m x)] \times \right. \\ \left. \times \sum_{n=1}^{\infty} n [-\alpha_n(t) \sin(\chi_n x) + \beta_n(t) \cos(\chi_n x)] \right), \\ j(t, d) = \frac{j(0)}{4} \times \\ \times \operatorname{Re} \left(-i \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \alpha_m^*(t) \cdot \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n n \beta_n(t) \right). \end{aligned}$$

Из этого уравнения следует

$$j(0, d) = 0, \quad j(\Delta t, d) \sim \Delta t,$$

т.е. не может быть мгновенного туннелирования и отрицательного времени туннелирования. Через

спектры $\Psi(d, \omega)$ и $\Psi'(d, \omega)$ результат можно представить в виде

$$\begin{aligned} j(t, d) = \frac{\hbar}{(2\pi)^2 m_e} \times \\ \times \operatorname{Re} \int_{-\infty}^{\infty} (-i) \Psi^*(d, \omega) \Psi'(d, \omega') \exp(i(\omega' - \omega)t) d\omega' d\omega. \end{aligned}$$

Для установившегося процесса спектральная ФВ на аноде

$$\psi(x, k) = a^+(k) T^+(k) \exp(ik_a(x - d))$$

легко определяется. Плотность потока вероятности для нее

$$dj(d, k) = v_a(k) |a^+(k) T^+(k)|^2 dk,$$

где скорость на аноде

$$v_a(k) = \sqrt{v^2(k) + 2eU_a/m_e}.$$

Следует отметить, что эта скорость больше $v(k)$ из-за ускорения анодом прошедших сквозь барьер электронов. На длине свободного пробега они рассеиваются и переходят на УФ анода, при этом $v_a(k)$ падает до $v(k)$, а анод нагревается. Рассмотренный метод рядов удобен и для совместного решения УШ и УП.

5. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 6 и 7 приведены результаты вычисления переходного процесса в виде установления анодного тока в диоде с ЭФ 7 эВ и распределения плотности вероятности $|\Psi(x, t)|^2$, когда на аноде скачком возникают напряжения 3, 5 и 7 В. На рис. 7 представлено распределение плотности вероятности для кривой 1 рис. 6 в разные моменты времени. Колебания плотности вероятности есть следствие конечности сумм. С увеличением членов в суммах размах колебаний и период уменьшаются. Использовано интегрирование УШ методом рядов с учетом 40 членов в рядах с явным методом вычисления коэффициентов в (12). Разложение по другим базисам в (12) позволяет исключить колебания. Например, можно использовать конечные элементы. Однако предложенный метод рядов удобен при одновременном решении УШ и УП. Для УП он использован в [2].

При расчетах использовано 200 временных точек. Кривые 2, 3 на рис. 5 построены для 50 временных точек. Для меди (ЭФ 7 эВ) имеем концентрацию электронов $8.5 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ и скорость Ферми $v_F = 1.57 \cdot 10^6 \text{ м/с}$, т.е. частица с такой скоростью проходит дистанцию $d = 10 \text{ нм}$ за время

$\tau = 6.37$ фс. Мы считали, что в момент включения напряжения плотность вероятности внутри барьера была нулевая. Более точно она распределена симметрично относительно центра примерно по гиперболическому косинусу, т.е. возрастает к краям, но на этих краях она экстремально мала, поскольку коэффициенты отражения широкого почти прямоугольного барьера близки к минус единице. При этом нет потока плотности вероятности внутрь барьера. Результаты рис. 6 говорят о том, что средняя скорость переноса плотности вероятности несколько больше v_F , что позволяет сделать вывод: движение плотности вероятности есть коллективный эффект, обусловленный интерференцией парциальных волн ВП. Электрон внутри барьера или вообще в некотором потенциальном поле есть квазичастица, определяемая взаимодействием с множеством других частиц. Это усредненное взаимодействие и определяет потенциал. Наглядный пример — потенциал метода изображений. Такая квазичастица не обязана вести себя подобно свободному электрону. Кроме того, пройдя точку поворота для одиночного барьера, электрон движется квазиклассически и ускоряется анодом. Дополнительно приобретаемая скорость при $U_a = 5$ В равна $1.33 \cdot 10^6$ м/с, т.е. примерно такая, как v_F . Соответственно время пролета сокращается в два раза. Аналогичная задача для РТ приводит к существенно большему времени переходного процесса. Это можно объяснить тем, что для РТ необходимо сформировать отражения от барьеров. Формально можно рассматривать времена жизни уровней как дополнительный вклад во время переходного процесса. На рис. 6 видно, что при малых временах плотность вероятности весьма мала. Эта функция несимметричная и в среднем у начала барьера больше, а при больших временах уравнивается. Аналогичные вычисления переходных процессов для переключения от широкого барьера к структуре с узкими неравными барьерами и ямой дает более медленное нарастание тока. Это объясняется отражениями от барьеров для получения резонансных уровней в яме. Для достижения полного РТ высоты барьеров должны быть достаточно близкими. Численное вычисление прозрачностей кроме полных резонансов демонстрирует и пики с неполным РТ, когда максимумы $D < 1$. Что касается времен жизни $\tau_n = 2\hbar/E_n''$, то они существенно меньше аналогичных времен, определяемых на малых временах из нестационарных процессов как результат эволюции ВП. Это связано с тем, что ВП содержит широкий спектр энергий. На больших временах проявляется неэкспоненциальный характер за-

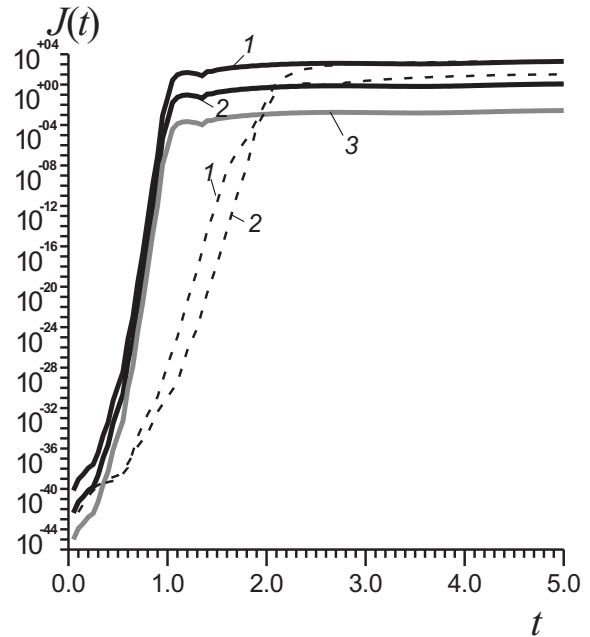


Рис. 6. Переходные процессы ($-J$ в А/см², время в фс) при переключении от почти прямоугольного барьера 1 к барьерам 2, 3, 4, рис. 1 (соответственно, кривые 1, 2, 3)

тухания уровня (см., например, [30–34]) и вклад в него алгебраических членов. Определять таким способом времена жизни уровней можно для весьма узких ВП, что экспериментально весьма сложно реализовать для нерелятивистских квантовых частиц, а тем более сложно обнаружить их прохождение через барьер. Здесь возникают проблемы с отражением спектрально узкого (т.е. весьма пространственно широкого) ВП от барьера [18], особенно когда он изменяется во времени. Макроскопическую же плотность тока можно весьма точно измерить.

Имеющую размерность скорости величину

$$v(x, t) = j(x, t) / |\Psi(x, t)|^2$$

можно трактовать как скорость движения плотности вероятности в точке x в момент t . Она соответствует концепции Н. А. Умова, однако не может трактоваться как скорость отдельной частицы. Для односкоростного потока частиц она совпадает со скоростью частиц в потоке. Возрастание тока сопровождается возрастанием плотности вероятности нахождения частиц внутри барьера. Среднюю мгновенную скорость движения ВП через точку x за время τ можно определить как

$$\bar{v}(x, t, \tau) = \frac{1}{\tau} \int_{t-\tau}^t \frac{j(x, t')}{|\Psi(x, t')|^2} dt'. \quad (18)$$

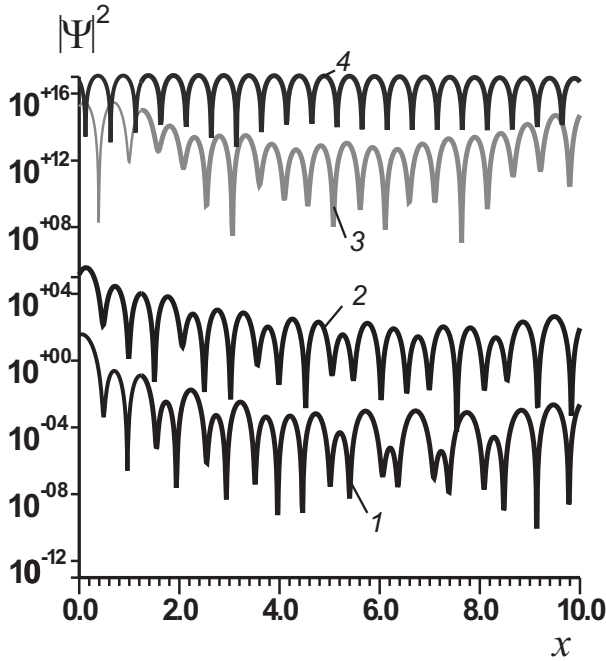


Рис. 7. Плотность числа частиц (м^3) в зависимости от координаты x (нм) в вакуумной диодной структуре для разных моментов времени (фс): 0.1 (1), 0.3 (2), 0.5 (3), 1.0 (4)

Если ВП конечный во времени, можно определить и его среднюю скорость.

Малые времена жизни квазистационарных уровней необходимы для получения больших плотностей тока полевой эмиссии. Желательно иметь как можно больше таких уровней, причем достаточно глубоких. Увеличение числа уровней достигается увеличением ширины квантовой ямы, а уменьшение времен жизни — использованием барьеров малой ширины. Также увеличению тока способствует выравнивание высот барьеров, что можно регулировать сеточным напряжением и изменением РВ сетки.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках государственного задания №FSRR-2023-0008 и при поддержке Программы стратегического академического лидерства РУДН, проект № 021934-0-000.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Для ямы из условий у катодного барьера имеем

$$A_w^+ = \frac{A_c^+ \exp(-\tilde{k}_c t_c) + A_c^- \exp(\tilde{k}_c t_c)}{2} +$$

$$+ \frac{\tilde{k}_c A_c^- \exp(\tilde{k}_c t_c) - \tilde{k}_c A_c^+ \exp(-\tilde{k}_c t_c)}{2ik},$$

$$A_w^- = \frac{A_c^+ \exp(-\tilde{k}_c t_c) + A_c^- \exp(\tilde{k}_c t_c)}{2} - \frac{\tilde{k}_c A_c^- \exp(\tilde{k}_c t_c) - \tilde{k}_c A_c^+ \exp(-\tilde{k}_c t_c)}{2ik}.$$

В случае широких барьеров, пренебрегая экспоненциально малыми членами (отражениями от левой границы барьера с амплитудой A_c^+), найдем из условий согласования на барьере около катода

$$A_w^+ \approx \frac{A_c^- \exp(\tilde{k}_c t_c) (1 - i\tilde{k}_a/k_0)}{2},$$

$$A_w^- \approx \frac{A_c^- \exp(\tilde{k}_c t_c) (1 + i\tilde{k}_a/k_0)}{2}.$$

С другой стороны, согласование у анодного барьера дает

$$A_w^+ = \frac{\exp(-ik_0 t_w) [A_a^+ + A_a^- + i(A_a^+ - A_a^-) \tilde{k}_a/k_0]}{2},$$

$$A_w^- = \frac{\exp(ik_0 t_w) [A_a^+ + A_a^- - i(A_a^+ - A_a^-) \tilde{k}_a/k_0]}{2}.$$

На границе катода имеем соотношения

$$A_c^+ = \frac{A_c (1 + ik_0/\tilde{k}_c)}{2},$$

$$A_c^- = \frac{A_c (1 - ik_0/\tilde{k}_c)}{2}.$$

На границе анода имеем соответственно

$$A_a^+ = \frac{A_a \exp(\tilde{k}_a t_a) (1 - ik_a/\tilde{k}_a)}{2},$$

$$A_a^- = \frac{A_a \exp(-\tilde{k}_a t_a) (1 - ik_a/\tilde{k}_a)}{2}.$$

Для широких барьеров амплитуды A_a^- и A_a^+ малы. Полагая их равными нулю, получаем

$$A_w^+ \approx \frac{A_a \exp(\tilde{k}_a t_a) (1 - ik_0/\tilde{k}_a) (1 + i\tilde{k}_a/k_0) \exp(-ik_0 t_w)}{4},$$

$$A_w^+ \approx \frac{A_c \exp(\tilde{k}_c t_c) (1 - ik_0/\tilde{k}_c) (1 - i\tilde{k}_c/k_0)}{4},$$

$$A_w^- = \frac{A_a \exp(\tilde{k}_a t_a) (1 - ik_0/\tilde{k}_a) (1 - i\tilde{k}_a/k_0) \exp(ik_0 t_w)}{4},$$

$$A_w^- \approx \frac{A_c \exp(\tilde{k}_c t_c) A_c (1 - ik_0/\tilde{k}_c) (1 + i\tilde{k}_c/k_0)}{4}.$$

Приравнявая коэффициенты $A_w^\pm$, имеем два уравнения

$$A_a \exp(\tilde{k}_a t_a) (1 - ik_0/\tilde{k}_a) (1 + i\tilde{k}_a/k_0) \exp(-ik_0 t_w) =$$

$$= A_c \exp(\tilde{k}_c t_c) (1 - ik_0/\tilde{k}_c) (1 - i\tilde{k}_c/k_0),$$

$$A_a \exp(\tilde{k}_a t_a) (1 - ik_0/\tilde{k}_a) (1 - i\tilde{k}_a/k_0) \exp(ik_0 t_w) =$$

$$= A_c \exp(\tilde{k}_c t_c) (1 - ik_0/\tilde{k}_c) (1 + i\tilde{k}_c/k_0).$$

Разделив первое на второе, получаем приближенное характеристическое уравнение

$$\frac{(1 - i\tilde{k}_A/k_0) (1 - i\tilde{k}_a/k_0)}{(1 + i\tilde{k}_A/k_0) (1 + i\tilde{k}_a/k_0)} = \exp(-2ik_0 t_w). \quad (\text{П } 1)$$

Для получения точного уравнения следует оставить все амплитуды. В этом случае, приравнявая коэффициенты, получаем

$$\begin{pmatrix} A_A^+ \\ A_A^- \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} A_a^+ \\ A_a^- \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} A_a^+ \\ A_a^- \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} M_{11}^{-1} & M_{12}^{-1} \\ M_{21}^{-1} & M_{22}^{-1} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} A_c^+ \\ A_c^- \end{pmatrix}.$$

Элементы матрицы $\hat{M}$ имеют вид

$$M_{11} = \exp(\tilde{k}_A t_c) \tilde{M}_{11} = \exp(\tilde{k}_A t_c) \times$$

$$\times \frac{\cos(k_0 t_w) (1 + \tilde{k}_a/\tilde{k}_c) + (\tilde{k}_a/k_0 - k_0/\tilde{k}_A) \sin(k_0 t_w)}{2},$$

$$M_{12} = \exp(\tilde{k}_A t_c) \tilde{M}_{12} = \exp(\tilde{k}_A t_c) \times$$

$$\times \frac{\cos(k_0 t_w) (1 - \tilde{k}_a/\tilde{k}_A) - (\tilde{k}_a/k_0 + k_0/\tilde{k}_A) \sin(k_0 t_w)}{2},$$

$$M_{21} = \exp(-\tilde{k}_A t_c) \tilde{M}_{21} = \exp(-\tilde{k}_A t_c) \times$$

$$\times \frac{\cos(k_0 t_w) [1 - \tilde{k}_a/\tilde{k}_A] + (\tilde{k}_a/k_0 + k_0/\tilde{k}_c) \sin(k_0 t_w)}{2},$$

$$M_{22} = \exp(-\tilde{k}_A t_c) \tilde{M}_{22} = \exp(-\tilde{k}_A t_c) \times$$

$$\times \frac{\cos(k_0 t_w) (1 + \tilde{k}_a/\tilde{k}_c) - (\tilde{k}_a/k_0 - k_0/\tilde{k}_c) \sin(k_0 t_w)}{2}.$$

Теперь

$$A_c^+ = A_c (1 + ik_0/\tilde{k}_c) =$$

$$= 2 (M_{11} A_a^+ + M_{12} A_a^-),$$

$$A_c^- = A_c (1 - ik_0/\tilde{k}_c) =$$

$$= 2 (M_{21} A_a^+ + M_{22} A_a^-).$$

Подставляя в эти уравнения $A_a^\pm$, получаем

$$A_c (1 + ik_0/\tilde{k}_c) = M_{11} A_a \exp(\tilde{k}_a t_a) (1 - ik_0/\tilde{k}_a) +$$

$$+ M_{12} A_a \exp(-\tilde{k}_a t_a) (1 - ik_0/\tilde{k}_a),$$

$$A_c (1 - ik_0/\tilde{k}_c) = M_{21} A_a \exp(\tilde{k}_a t_a) (1 - ik_0/\tilde{k}_a) +$$

$$+ M_{22} A_a \exp(-\tilde{k}_a t_a) (1 - ik_0/\tilde{k}_a).$$

Разделив первое уравнение на второе, имеем характеристическое уравнение

$$\frac{1 + ik_0/\tilde{k}_c}{1 - ik_0/\tilde{k}_c} = f(E) = \quad (\text{П } 2)$$

$$= \frac{\tilde{M}_{11} \exp(\tilde{k}_c t_c + \tilde{k}_a t_a) + \tilde{M}_{12} \exp(\tilde{k}_c t_c - \tilde{k}_a t_a)}{\tilde{M}_{21} \exp(\tilde{k}_a t_a - \tilde{k}_c t_c) + \tilde{M}_{22} \exp(-\tilde{k}_a t_a - \tilde{k}_c t_c)}.$$

Для широких барьеров в нем можно опустить малые члены, и тогда

$$f(E) \approx \exp(2\tilde{k}_c t_c) \times$$

$$\times \frac{1 + \tilde{k}_a/\tilde{k}_c + (\tilde{k}_a/k_0 - k_0/\tilde{k}_c) \operatorname{tg}(k_0 t_w)}{1 - \tilde{k}_a/\tilde{k}_c + (\tilde{k}_a/k_0 + k_0/\tilde{k}_c) \operatorname{tg}(k_0 t_w)}.$$

Входящие в уравнения (14), (15) матричные элементы имеют вид

$$A_{nm}^{cc} = \frac{\operatorname{sinc}((\chi_n - \chi_m)d) + \operatorname{sinc}((\chi_n + \chi_m)d)}{1 + \operatorname{sinc}(2\chi_n d)} =$$

$$= \frac{\delta_{nm}}{1 + \delta_{n0}},$$

$$A_{nm}^{cs} = \frac{\text{conc}((\chi_n - \chi_m)d) - \text{conc}((\chi_n + \chi_m)d)}{1 + \text{sinc}(2\chi_n d)} =$$

$$= \frac{(-1)^{n+m} - (-1)^{n-m}}{1 + \delta_{n0}}, \quad (\text{П3})$$

$$A_{nm}^{sc} = \frac{\text{conc}((\chi_n - \chi_m)d) + \text{conc}((\chi_n + \chi_m)d)}{1 + \text{sinc}(2\chi_n d)} =$$

$$= \frac{2 - (-1)^{n-m} - (-1)^{n+m}}{1 + \delta_{n0}},$$

$$A_{nm}^{ss} = \frac{\text{sinc}((\chi_n - \chi_m)d) - \text{sinc}((\chi_n + \chi_m)d)}{1 - \text{sinc}(2\chi_n d)} = \delta_{nm}.$$

В них обозначены интегралы

$$V_{nm}^{\alpha cc}(t) = \frac{2}{(1 + \delta_{n0})d} \int_0^d V(t, x) \cos(\chi_n x) \cos(\chi_m x) dx,$$

$$V_{nm}^{\beta ss}(t) = \frac{2}{(1 + \delta_{n0})d} \int_0^d V(t, x) \cos(\chi_n x) \sin(\chi_m x) dx,$$

$$V_{nm}^{\beta ss}(t) = 2 \int_0^d V(t, x) \sin(\chi_n x) \sin(\chi_m x) dx,$$

$$V_{nm}^{\alpha sc}(t) = 2 \int_0^d V(t, x) \sin(\chi_n x) \cos(\chi_m x) dx.$$

В (П3) входят функции $\text{sinc}(x) = \sin(x)/x$ и $\text{conc}(x) = (1 - \cos(x))/x$. Эти функции в нуле следует определить как $\text{sinc}(0) = 1$, $\text{conc}(0) = 0$. При этом $\text{sinc}(2n\pi) = \delta_{n0}$.

ЛИТЕРАТУРА

1. M. V. Davidovich, I. S. Nefedov, O. E. Glukhova, and M. M. Slepchenkov, *Toward the Theory of Resonant-Tunneling Triode and Tetrode with CNT-Graphene Grids*, J. Appl. Phys. **130**(20), 204301 (2021), DOI: 10.1063/5.0067763.
2. М. В. Давидович, *Особенности вакуумного резонансного туннелирования на одноямном и двухъямном барьерных потенциалах*, ЖЭТФ **92**(9), 1387 (2022) [M. V. Davidovich, *Peculiarities of Vacuum Resonant Tunneling at One- and Two-Well Barrier Potentials*, Technical Physics **67**(9), 1196 (2022), DOI: 10.21883/TP.2022.09.54684.257-21].
3. M. V. Davidovich, I. S. Nefedov, O. E. Glukhova, M. M. Slepchenkov, and J. M. Rubi, *Field Emission in Vacuum Resonant Tunneling Heterostructures with High Current Densities*, Scientific Reports **13**, 19365 (2023), DOI: 10.1038/s41598-023-44900-2.
4. R. Tsu and L. Esaki, *Tunneling in a Finite Superlattice*, Appl. Phys. Lett. **22**(11) 562 (1973), DOI: 10.1063/1.1654509 (1973).
5. L. L. Chang, L. Esaki, and R. Tsu, *Resonant Tunneling in Semiconductor Double Barriers*, Appl. Phys. Lett. **24**, 593 (1974), DOI: 10.1063/1.1655067.
6. E. X. Ping and H. X. Jiang, *Resonant Tunneling of Double-Barrier Quantum Wells Affected by Interface Roughness*, Phys. Rev. B **40**(17), 11792 (1989).
7. O. Pinaud, *Transient Simulations of a Resonant Tunneling Diode*, J. Appl. Phys. **92**(4), 1987 (2002), DOI: 10.1063/1.1494127.
8. В. Ф. Елесин, *Перестраиваемый терагерцовый генератор на двухъямной наноструктуре с когерентной электронной подсистемой*, ЖЭТФ **128**(5), 922 (2005) [V. F. Elesin, *A Tunable Terahertz-Band Oscillator Based on a Two-Well Nanostructure with a Coherent Electron Subsystem*, JETP **101**(5), 795 (2005), DOI: 10.1134/1.2149060].
9. В. Ф. Елесин, *Переходные процессы в двухбарьерных наноструктурах*, ЖЭТФ **145**(6), 1078 (2014) [V. F. Elesin, *Transient Processes in Two-Barrier Nanostructures*, JETP **118**(6), 951 (2014), DOI: 10.1134/S1063776114060041].
10. В. Ф. Елесин, Ю. В. Копаев, *Лазер на «штарковской лестнице» с когерентной электронной подсистемой*, ЖЭТФ **123**(6), 1308 (2003) [V. F. Elesin and Yu. V. Kopayev, *Stark Ladder Laser with a Coherent Electron Subsystem*, JETP **96**(6), 1149 (2003), DOI: 10.1134/1.1591227].
11. К. С. Гришаков, В. Ф. Елесин, *Времена перехода резонансно-туннельного диода между экстремальными точками гистерезисной вольт-амперной характеристики*, ФТП **50**(8), 1113 (2016) [K. S. Grishakov

- and V. F. Elesin, *Transition Times Between the Extremum Points of the Current-Voltage Characteristics of a Resonant Tunneling Diode with Hysteresis*, *Semiconductors* **50**(8), 1092 (2016), DOI: 10.1134/S1063782616080121].
12. М. В. Давидович, *Нестационарное резонансное туннелирование в диодной двухбарьерной структуре*, Письма в ЖЭТФ **110**(7), 465 (2019) [M. V. Davidovich, *Time-Dependent Resonant Tunneling in a Double-Barrier Diode Structure*, *JETP Letters* **110**(7), 472 (2019), DOI: 10.1134/S0370274X19190068].
 13. Е. А. Нелин, *Импедансная модель для «барьерных задач» квантовой механики*, УФН **177**(3) (2007), 307 [E. A. Nelín, *Impedance Model for Quantum Mechanical Barrier Problems*, *Phys. Usp.* **50**, 293 (2007), DOI: 10.3367/UFNr.0177.200703d.0307].
 14. J. G. Simmons, *Generalized Formula for the Electric Tunnel Effect between Similar Electrodes Separated by a Thin Insulating Film*, *J. Appl. Phys.* **34**, 1793 (1963), DOI: 10.1063/1.1702682.
 15. J. Robertson, *Diamond-Like Amorphous Carbon*, *Materials Science and Engineering R*, 129 (2002), DOI:10.1016/S0927-796X(02)00005-0.
 16. Е. Р. Лубенец, *К вопросу о распаде квазистационарных состояний нерелятивистской квантовой механике*, ТМФ **32** (1977), 279 [E. R. Lubenets, *On the decay of quasistationary states in nonrelativistic quantum mechanics*, *Theor. Math. Phys.* **32**, 741 (1977), DOI: 10.1007/BF01036339].
 17. Г. Ф. Друкарев, *К теории прохождения частицы через потенциальный барьер*, ЖЭТФ **51**(1), 59 (1951).
 18. А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике*, Наука, Москва (1971).
 19. М. В. Давидович, *О временах и скоростях нестационарного квантового и электромагнитного туннелирования*, ЖЭТФ **157**(1), 44 (2020) [M. V. Davidovich, *On Times and Speeds of Time-Dependent Quantum and Electromagnetic Tunneling*, *JETP* **130**(1), 35 (2020), DOI: 10.1134/S1063776119120161].
 20. А. С. Давыдов, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1972) [A. S. Davydov, *Quantum Mechanics*, Pergamon (1965)].
 21. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, ГИФФМЛ, Москва (1962) [L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics. Nonrelativistic Theory*, Pergamon (1965)].
 22. В. Н. Грибов, *Квантовая электродинамика*, НИЦ Регулярная и хаотическая динамика, Ижевск (2001).
 23. А. Н. Тихонов, А. А. Самарский, *Уравнения математической физики*, Наука, Москва (1977).
 24. L. Fonda, G. C. Ghirardi, and A. Rimini, *Decay Theory of Unstable Quantum Systems*, *Rep. Prog. Phys.* **41**(4), 587 (1978), DOI: 10.1088/0034-4885/41/4/003.
 25. E. C. G. Sudarshan, C. B. Chiu, and G. Bhamathi, *Unstable Systems in Generalized Quantum Theory*, *Adv. Chem. Phys.* **99**(3), 121 (1997), DOI: 10.1002/9780470141588.ch2.
 26. L. M. Krauss and J. Dent, *Late Time Behavior of False Vacuum Decay: Possible Implications for Cosmology and Metastable Inflating States*, *Phys. Rev. Lett.* **100**(17), 171301 (2008), DOI: 10.1103/PhysRevLett.100.171301.
 27. Л. А. Халфин, *Вклад в теорию распада квазистационарного состояния*, ЖЭТФ **33**(6), 1371 (1958).
 28. C. B. Chiu, E. C. G. Sudarshan, and B. Misra, *Time Evolution of Unstable Quantum States and a Resolution of Zeno's Paradox*, *Phys. Rev. D* **16**(2), 520 (1977), DOI: 10.1103/PhysRevD.16.520.
 29. G. Garcia-Calderon and R. Romo, *Interference in the Time Domain of a Decaying Particle with Itself as the Physical Mechanism for the Exponential-Nonexponential Transition in Quantum Decay*, *Phys. Rev. A* **100**(3), 032121 (2019), DOI: 10.1103/PhysRevA.100.032121.
 30. P. Facchi and S. Pascazio, *Quantum Zeno Dynamics: Mathematical and Physical Aspects*, *J. Phys. A* **41**(49), 493001 (2008), DOI:10.1016/S0375-9601(00)00566-1.

31. C. Rothe, S. I. Hintschich, and A. P. Monkman, *Violation of the Exponential-Decay Law at Long Times*, Phys. Rev. Lett. **96**(16), 163601 (2006).
32. C. Anastopoulos, *Decays of Unstable Quantum Systems*, Int. J. Theor. Phys. **58**(3), 890 (2019), DOI: 10.1007/s10773-018-3984-z.
33. S. D. Druger and M. A. Samuel, *Nonexponential Decay in Autoionization Near Threshold*, Phys. Rev. A **30**(1), 640 (1984), DOI: 10.1103/PhysRevA.30.640.
34. C. A. Nicolaides, *Physical Constraints on Nonstationary States and Nonexponential Decay*, Phys. Rev. A **66**(2), 022118 (2002), DOI: 10.1103/PhysRevA.66.022118.
35. N. G. Kelkar, M. Nowakowski, and K. P. Khemchandani, *Hidden Evidence of Nonexponential Nuclear Decay*, Phys. Rev. C **70**(2), 024601, (2004), DOI: 10.1103/PhysRevC.70.02460.
36. R. G. Newton, *The Exponential Decay Law of Unstable Systems*, Ann. Phys. **14**(1), 333 (1961), DOI: 10.1016/0003-4916(61)90060-4.