Физика низких температур, 1996, т. 22, № 1, с. 86–98 УДК 538.935

Динамические силы изображения и туннелирование в трехслойных системах

А. И. Войтенко, А. М. Габович, В. М. Розенбаум

Институт физики НАН Украины, Украина, 252650, г. Киев, пр. Науки, 46

Статья поступила в редакцию 6 июня 1995 г., после переработки 4 сентября 1995 г.

С учетом пространственной и временной дисперсий диэлектрических проницаемостей электродов рассчитаны динамические силы изображения в симметричных трехслойных M–I–M-структурах в первом порядке теории возмущений по параметру неадиабатичности. Показано, что в случае тонкого диэлектрического слоя толщиной $2l \ll \kappa^{-1}$, где κ^{-1} — длина экранирования в электродах, координатная зависимость энергии сил изображения $W(z)$ $(-l < z < l)$ коренным образом отличается от известных классических выражений. А именно, статическое слагаемое $W_{\rm st}(z)$ является медленно меняющейся функцией z и в пределе $\kappa l \to 0$ равно $-e^2\kappa/2$ (e — заряд электрона). В том же пределе динамическая поправка $\Delta W(z)$ к $W_{\rm st}(z)$ линейна по z и имеет разные знаки вблизи разных электродов. Указанные закономерности позволили получить простые аналитические зависимости туннельного тока от напряжения на электродах, которые сводятся к квазиклассическим выражениям для треугольного (трапецеидального) потенциального барьера с нетривиальными перенормировками значений работы выхода и электрического поля. Подробно обсуждаются вопросы применимости предложенной теории к различным экспериментальным ситуациям.

З урахуванням просторової та часової дисперсій діелектричних проникностей електродів розраховано динамічні сили зображення в симетричних тришарових M–I–M-структурах у першому порядку теорії збурень за параметром неадіабатичності. Показано, що у випадку тонкого діелектричного прошарку товщиною $2l \ll \kappa^{-1}$, де κ^{-1} — довжина екранування в електродах, координатна залежність енергії сил зображення $W(z)$ $(-l < z < l)$ докорінно відрізняється від відомих класичних виразів. А саме, статичний доданок $W_{\rm st}(z)$ повільно змінюється як функція z і в граничному випадку $\kappa l \to 0$ дорівнює $-e^2\kappa/2$ (e — заряд електрона). В тому ж граничному випадку динамічний доданок $\Delta W(z)$ до $W_{\rm st}(z)$ є лінійною функцією z та має різні знаки поблизу різних електродів. Вказані закономірності дозволили отримати прості аналітичні залежності тунельного струму від напруги на електродах, які зводяться до квазікласичних виразів для трикутного (або трапеціїдального) потенціального бар'єру з нетривіальними перенормуваннями роботи виходу та електричного поля. Детально обговорюються питання застосовності запропонованої теорії до різних експериментальних ситуацій.

Введение

Начиная с первых работ, в которых концепция квантовомеханического туннелирования была использована в физике твердого тела [1], возник вопрос о взаимодействии электрона с электродами в процессе туннелирования. В рамках электростатики такое взаимодействие описывается классическими статическими силами изображения [1,2]. Однако для описания реальных экспериментов требуется учитывать поляризацию твердотельной плазмы электродов, которая в макроскопическом подходе описывается диэлектрической проницаемостью $\varepsilon(\mathbf{k}, \omega)$, зависящей от передаваемых волнового вектора $\mathbf{k}$ и частоты ω. При этом для медленного движения электронов можно ограничиться учетом только пространственной дисперсии, т.е. положить $\varepsilon(\mathbf{k}, \omega) = \varepsilon(\mathbf{k}, 0)$ и учесть дополнительно динамические поправки, связанные с зависимостью ε от ω. Характерным малым безразмерным параметром здесь является величина $(\omega_p \tau_{\rm tun})^{-1} \ll 1$, где ω_p — плазменная частота носителей тока в электроде, а

$$\tau_{\rm tun} = \left(\frac{m}{2}\right)^{1/2} \int_{z_1}^{z_2} dz \left[V_{\rm pot}(z) - E\right]^{-1/2} \qquad (1)$$

— время туннелирования через одномерный потенциальный барьер $V_{\rm pot}(z)$. Здесь E — энергия; m — масса туннелирующей частицы; $z_{1,2}$ — нули знаменателя в (1). (Мы рассматриваем плоскую геометрию задачи, в которой движение электрона происходит вдоль оси z перпендикулярно границе раздела (ГР)). Особенности реальных сил изображения проявляются в ряде экспериментов, в частности, по туннелированию в гетероструктурах n-GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$/n-GaAs [3] и разломных контактах (break junctions) [4].

© А. И. Войтенко, А. М. Габович, В. М. Розенбаум, 1996

Известно [5], что динамические эффекты приводят к устранению расходимости на ГР энергии классических сил изображения (e — элементарный заряд)

$$W^{\mathrm{cl}}(z) = -e^2/4z\,. \qquad (2)$$

Тем не менее, как станет ясно из дальнейшего изложения, чрезвычайно важен также учет пространственной дисперсии диэлектрической проницаемости, особенно для малых межэлектродных расстояний.

В теории туннелирования при наличии двух ГР в сэндвиче динамические силы изображения были впервые рассмотрены Йонсоном [6], а затем и в других работах [7,8]. В этих расчетах энергия $W(z)$ отождествляется с обменно-корреляционным электрон-плазмонным потенциалом.

Ранее [9–11] нами было предложено для трехслойной задачи воспользоваться классическим электродинамическим методом Хайнрикса [5] и, считая динамические поправки малыми, пренебречь диссипацией и провести разложение полученных общих выражений по малым частотам ω. На основе полученных результатов удалось объяснить [9,11] наблюдаемые в сильных полях отклонения тока автоэлектронной эмиссии от закона Фаулера—Нордгейма [12]. В настоящей работе в рамках того же метода рассчитаны динамические силы изображения в трехслойных системах, причем особое внимание уделяется случаю достаточно малых межэлектродных промежутков.

Работа построена следующим образом. В разд. 1 приведены основные этапы вывода общих выражений $W(z)$ для энергии динамических сил изображения. В разд. 2 получены аналитические формулы для тонких сэндвичей. В разд. 3 представлены численные результаты для $W(z)$. Раздел 4 посвящен вычислению низкотемпературных туннельных токов с учетом $W(z)$ и сопоставлению с экспериментом.

1. Вывод выражений для динамических сил изображения в трехслойной системе

Рассматриваемая система схематически показана на рис. 1. Она состоит из трехслойного сэндвича и движущегося по закону $z_0(t)$ вдоль оси z заряда e в его сердцевине. Пространственная дисперсия диэлектрической проницаемости $\varepsilon_i(\mathbf{k}, \omega)$ учитывается только в обкладках ($i = 1, 3$), а временная — во всех трех средах. Это заведомо подходит для моделирования разломных контактов [4], туннелирования через диэлектрик в гетероструктурах [3] и МДП-структурах [13].

Задача заключается в вычислении потенциальной энергии сил изображения $W[z_0(t)]$, т.е. энергии взаимодействия заряда с индуцированным им же

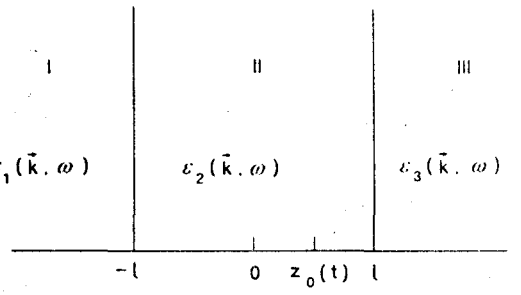

Рис. 1. Заряд, движущийся по закону $z_0(t)$ в трехслойной системе с диэлектрическими проницаемостями $\varepsilon_i(\mathbf{k}, \omega)$.

самим поляризационным потенциалом $V_{\mathrm{ind}}[x = y = 0, z_0(t), t]$, связанным с появлением на обеих ГР в точках $\vec{\rho} = (x, y, \pm l)$ поверхностных плотностей зарядов $\sigma_{\pm l}(\vec{\rho}, t)$:

$$W[z_0(t)] = \frac{1}{2} e V_{\mathrm{ind}}\,[x = y = 0, z_0(t), t]\,. \qquad (3)$$

Дальнейшие вычисления основаны на методе, предложенном в [5] для зарядов, движущихся с нерелятивистскими скоростями $v \ll c$, что позволяет пренебречь запаздыванием электромагнитного поля. Границы раздела считаются бесконечно тонкими с бесконечно высокими барьерами для частиц каждой из сред, так что «провисание» электронной плотности за пределы положительного «желе» отсутствует. Обкладки в этих приближениях являются однородными, и векторы индукции в них $\mathbf{D}_{1,3}(\mathbf{r}, t)$ удовлетворяют уравнению Пуассона

$$\operatorname{div} \mathbf{D}_{1,3}(\mathbf{r}, t) = 4\pi n^{\mathrm{ext}}_{1,3}(\mathbf{r}, t)\,, \qquad (4)$$

где $\mathbf{r} = (x, y, z)$ — трехмерный радиус-вектор. Внешними источниками заряда являются упомянутые выше бесконечно тонкие заряженные слои

$$n^{\mathrm{ext}}_{1,3}(\mathbf{r}, t) = \sigma_{\mp l}(\vec{\rho}, t)\delta(z \pm l)\,. \qquad (5)$$

Уравнение (4) следует дополнить соотношениями, связывающими векторы $\mathbf{D}_i$ и соответствующие электростатические поля $\mathbf{E}_i$ и потенциалы V_i:

$$\mathbf{D}_{1,3}(\mathbf{r}, t) =$$

$$= \int_{-\infty}^{t} dt' \int d\mathbf{r}'\, \varepsilon_{1,3}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t')\mathbf{E}_{1,3}(\mathbf{r}', t')\,, \qquad (6)$$

$$\mathbf{E}_{1,3}(\mathbf{r}, t) = -\operatorname{grad} V_{1,3}(\mathbf{r}, t)\,. \qquad (7)$$

После фурье-преобразования вида

$$f(\mathbf{k}, \omega) =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dz \int d\vec{\rho} \exp\left[i(\omega t - \mathbf{k}_{\parallel}\vec{\rho} - k_z z)\right] f(\mathbf{r}, t) \quad (8)$$

величины $V_{1,3}(z, \mathbf{k}_{\parallel}, \omega)$ легко выражаются через $\sigma_{\mp l}(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega)$, где $\mathbf{k}_{\parallel}$ и k_z — компоненты вектора $\mathbf{k}$ вдоль и перпендикулярно ГР. Здесь явно выделена координата z, вдоль которой происходит движение электрона.

Электростатический потенциал $V_2(z, \mathbf{k}_{\parallel}, \omega)$ в среде 2 находится из системы уравнений (4), (6), (7), в которых индекс $i = 1, 3$ заменен на $i = 2$. Отсутствие пространственной дисперсии в этой среде ($\varepsilon_2(\mathbf{r}, t) = \varepsilon_2(t)\delta(\mathbf{r})$) упрощает дальнейшие преобразования. В сердцевине сэндвича внешним источником для $\mathbf{D}_2$ и V_2 является движущийся заряд:

$$n_2^{\text{ext}}(z, \mathbf{k}_{\parallel}, \omega) = e \int_{-\infty}^{\infty} dt\, \delta\left[z - z_0(t)\right] \exp i\omega t, \quad (9)$$

$$|z_0| < l.$$

Общее решение неоднородного дифференциального уравнения для $V_2(z, \mathbf{k}_{\parallel}, \omega)$ ищется как сумма общего решения $V_{2h}(z, \mathbf{k}_{\parallel}, \omega)$ соответствующего однородного уравнения и частного решения $V_{2i}(z, \mathbf{k}_{\parallel}, \omega)$ неоднородного уравнения. Искомое решение содержит две неизвестные функции от $\mathbf{k}_{\parallel}$ и ω в дополнение к уже введенным величинам $\sigma_{\pm l}(\mathbf{k}_{\parallel}, \omega)$. Эти величины находятся из условий сшивки для потенциалов и нормальных компонент векторов $\mathbf{D}_i$ на ГР.

Найденная таким образом функция $V_{2h}(z, \mathbf{k}_{\parallel}, \omega)$ и представляет собой фурье-компоненту индуцированного потенциала V_{ind}, входящего в (3). Проведя обратное фурье-преобразование, в результате получаем

$$W[z_0(t)] = -\frac{e^2}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\exp(-i\omega t)}{\varepsilon_2(\omega)} \int_0^{\infty} dk_{\parallel} \frac{\exp(-2k_{\parallel}l)}{1 - \alpha_1(k_{\parallel}, \omega)\alpha_3(k_{\parallel}, \omega)\exp(-4k_{\parallel}l)} \times$$

$$\times \int_{-\infty}^{\infty} dt' \exp i\omega t' \left\{\alpha_3(k_{\parallel}, \omega) \exp\left\{k_{\parallel}[z_0(t) + z_0(t')]\right\} + \right.$$

$$\left. + \alpha_1(k_{\parallel}, \omega) \exp\left\{-k_{\parallel}[z_0(t) + z_0(t')]\right\} - 2\alpha_1(k_{\parallel}, \omega)\alpha_3(k_{\parallel}, \omega) \operatorname{ch}\left\{k_{\parallel}[z_0(t) - z_0(t')]\right\} \exp(-2k_{\parallel}l)\right\}. \quad (10)$$

Здесь

$$\alpha_i(k_{\parallel}, \omega) = \frac{\varepsilon_{si}(k_{\parallel}, \omega) - \varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_{si}(k_{\parallel}, \omega) + \varepsilon_2(\omega)}; \quad i = 1, 3, \quad (11)$$

а $\varepsilon_{si}(k_{\parallel}, \omega)$ — так называемые поверхностные диэлектрические проницаемости

$$\varepsilon_{si}(k_{\parallel}, \omega) = \left\{\frac{k_{\parallel}}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_z}{\mathbf{k}^2 \varepsilon_i(\mathbf{k}, \omega)}\right\}^{-1}; \quad i = 1, 3. \quad (12)$$

Интегрирование в (12) производится по поперечной компоненте k_z волнового вектора $\mathbf{k}$.

Инерционность отклика сред на поле движущегося с нерелятивистской скоростью заряда (т.е. зависимость $W(t)$ от состояний системы в предшествующие моменты времени $t' < t$) обеспечивается в (10) наличием частотной зависимости факторов $\alpha_i(k_{\parallel}, \omega)$. Действительно, выражение (10) можно представить как сумму интегралов по $k_{\parallel}$ с подынтегральными выражениями вида

$$\Phi_j(k_{\parallel}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt'\, \Phi_j(t, t') \int_{-\infty}^{\infty} d\omega\, e^{i\omega(t-t')} \chi_j(\omega). \quad (13)$$

Функции $\Phi_j(k_{\parallel}, t)$ зависят от $k_{\parallel}$ параметрически через $\Phi_j(t, t')$ и $\chi_j(\omega)$. Если $\chi_j(\omega) = \text{const}$, то интеграл по ω равен $2\pi\delta(t - t')$ и $\Phi_j(k_{\parallel}, t)$ зависит только от состояния системы в тот же момент времени. Будем предполагать, что динамические (неадиабатические) поправки к статическим силам изображения малы. В этом случае справедливо разложение

$$\chi_j(\omega) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\omega^n}{n!} \left(\frac{d^n \chi_j}{d\omega^n}\right)_{\omega=0}. \quad (14)$$

Из (13) и (14), учитывая свойства производных от δ-функции Дирака и ограниченность величин $\Phi_j(t, t')$, получаем

$$\Phi_j(k_\parallel, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^n}{n!} \left(\frac{d^n \chi_j}{d\omega^n}\right)_{\omega=0} \left[\frac{d^n \Phi_j(t, t')}{dt'^n}\right]_{t=t'} . \quad (15)$$

Мы ограничимся случаем вещественных, недиссипативных ε_i $(i = 1, 2, 3)$, которые являются четными функциями ω. В этом случае и в (15) сохраняются только четные по n слагаемые, и потенциальная энергия сил изображения является вещественной величиной. Для наших целей достаточно ограничиться только первой динамической поправкой с $n = 2$.

2. Силы изображения в тонких слоях

Предположим, что и временной дисперсией в среде 2 можно пренебречь (например, в вакууме или нелегированном диэлектрике с большой шириной запрещенной зоны). Тогда из (10) с использованием (14) и (15) получаем потенциальную энергию сил изображения в сердцевине сэндвича (чтобы не загромождать запись, мы будем писать здесь и ниже $z(t)$ вместо $z_0(t)$):

$$W[z(t)] = W_{st}[z(t)] + \Delta W[z(t)] . \quad (16)$$

Здесь $W_{st}[z(t)]$ — статическое слагаемое, соответствующее мгновенному отклику поляризации обкладок на поле заряда, движущегося между ними:

$$W_{st}[z(t)] = -\frac{e^2}{2\varepsilon_2} \int_0^\infty dk_\parallel \frac{\exp(-2k_\parallel l)}{1 - \alpha_1(k_\parallel, 0)\alpha_3(k_\parallel, 0)\exp(-4k_\parallel l)} \times$$

$$\times \left[\alpha_3(k_\parallel, 0)\exp\{2k_\parallel z(t)\} + \alpha_1(k_\parallel, 0)\exp\{-2k_\parallel z(t)\} - 2\alpha_1(k_\parallel, 0)\alpha_3(k_\parallel, 0)\exp(-2k_\parallel l)\right] . \quad (17)$$

Динамическая поправка $\Delta W[z(t)]$, связанная с запаздыванием поляризационного смещения зарядов в обкладках, равна

$$\Delta W[z(t)] = \frac{e^2}{4\varepsilon_2} \int_0^\infty dk_\parallel \frac{\exp(-2k_\parallel l)}{[1 - \alpha_1(k_\parallel, 0)\alpha_3(k_\parallel, 0)\exp(-4k_\parallel l)]^2} \left\{k_\parallel(\ddot{z} + k_\parallel \dot{z}^2)\exp(2k_\parallel z) \times \right.$$

$$\times \left[\alpha_3''(k_\parallel, 0) + \alpha_1''(k_\parallel, 0)\alpha_3^2(k_\parallel, 0)\exp(-4k_\parallel l)\right] - k_\parallel(\ddot{z} - k_\parallel \dot{z}^2)\exp(-2k_\parallel z)\left[\alpha_1''(k_\parallel, 0) + \alpha_3''(k_\parallel, 0)\alpha_1^2(k_\parallel, 0) \times \right.$$

$$\left. \left. \times \exp(-4k_\parallel l)\right] - 2k_\parallel^2 \dot{z}^2 \exp(-2k_\parallel l)\left[\alpha_1'(k_\parallel, 0)\alpha_3(k_\parallel, 0) + \alpha_3'(k_\parallel, 0)\alpha_1(k_\parallel, 0)\right]\right\} , \quad (18)$$

где точка обозначает производную по времени, а штрих — производную по частоте.

Чтобы явно учесть пространственную и временную дисперсии диэлектрических проницаемостей обкладок, воспользуемся простейшей гидродинамической моделью плазмоподобной среды [14]:

$$\varepsilon_j(\mathbf{k}, \omega) = \varepsilon_j^L \left(1 - \frac{\omega_{pj}^2 \kappa_j^2}{\omega^2 \kappa_j^2 - \omega_{pj}^2 k^2}\right) ; \; j = 1, 3 , \quad (19)$$

где ε_j^L — решеточные константы; ω_{pj} — плазменные частоты; κ_j — обратные длины экранирования свободными носителями тока. С учетом (19) из (11), (12) получаем

$$\alpha_j(k_\parallel, 0) = \frac{\varepsilon_j^L(k_\parallel^2 + \kappa_j^2)^{1/2} - k_\parallel \varepsilon_2}{\varepsilon_j^L(k_\parallel^2 + \kappa_j^2)^{1/2} + k_\parallel \varepsilon_2} , \quad (20)$$

$$\alpha_j'(k_\parallel, 0) = \frac{2\varepsilon_2 \varepsilon_j^L[2(k_\parallel^2 + \kappa_j^2)^{3/2} - 3k_\parallel \kappa_j^2 - 2k_\parallel^3]}{\omega_{pj}^2(k_\parallel^2 + \kappa_j^2)^{1/2}[\varepsilon_j^L(k_\parallel^2 + \kappa_j^2)^{1/2} + k_\parallel \varepsilon_2]^2} . \quad (21)$$

Имея в виду конкретные приложения, в дальнейшем мы ограничимся рассмотрением симметричных сэндвичей. Для простоты положим $\varepsilon^L = \varepsilon_2 = 1$, а $\kappa_1 = \kappa_3 = \kappa$ отождествим с обратным радиусом Томаса—Ферми.

Выражение (17) при сделанных предположениях существенно упрощается:

$$W_{st}(z) = -e^2 \times$$

$$\times \int_0^\infty dk_\parallel \frac{\alpha(k_\parallel, 0)\, e^{-2k_\parallel l}[\mathrm{ch}\,(2k_\parallel z) - \alpha(k_\parallel, 0)\, e^{-2k_\parallel l}]}{1 - \alpha^2(k_\parallel, 0)\, e^{-4k_\parallel l}}, \tag{22}$$

$$\alpha(k_\parallel, 0) = \frac{(k_\parallel^2 + \kappa^2)^{1/2} - k_\parallel}{(k_\parallel^2 + \kappa^2)^{1/2} + k_\parallel} . \tag{23}$$

Если ввести расстояния $r_\pm = l \pm z$, отсчитываемые от левой (правой) ГР, то в пределе $l \to \infty$ из (22) с учетом (23) следует выражение

$$W_{st}(r_\pm) = -\frac{e^2}{2} \int_0^\infty dk_\parallel \alpha(k_\parallel, 0)\, e^{-2k_\parallel r_\pm}, \quad r_\pm > 0 . \tag{24}$$

Если в (22) перейти от реального металла с конечным радиусом экранировки $\kappa^{-1} \neq 0$ к классическому металлу, в который поле не проникает, то получается хорошо известное классическое выражение $W_{st}^{cl}(z)$, учитывающее интерференцию вкладов от обоих электродов [2]. К сожалению, до сих пор в экспериментальных работах при сопоставлении с теорией используется аппроксимация Симмонса [15] $W_{st}^{Sim}(z) = -0{,}575 \ln 2\, e^2 l/(l^2 - z^2)$, которая неправильно описывает предельные ситуации $z \to 0, \pm l$, поскольку является тривиальной суперпозицией вкладов обеих обкладок в потенциальную энергию сил изображения. Вместо этого мы предлагаем не менее простую аппроксимацию, удовлетворяющую необходимым предельным требованиям:

$$W_{st}^{appr}(z) = -\frac{e^2}{2l}\left(\ln 2 + \frac{z^2}{l^2 - z^2}\right) . \tag{25}$$

Эта зависимость, а также зависимости $W_{st}^{cl}(z)$ и $W_{st}^{Sim}(z)$ приведены на рис. 2. Поскольку при вычислении туннельного тока энергия сил изображения входит в показатель экспоненты, становится очевидной целесообразность использования практически точной аппроксимации (25).

Учет пространственной дисперсии (экранировки кулоновского поля) приводит к модификации $W_{st}^{cl}(z)$. Асимптотика при $\kappa l \to \infty$ (толстый внутренний слой) может быть получена разложением знаменателя формулы (22) в ряд, представляющий из себя геометрическую прогрессию, интегрированием по частям и последующим суммированием ряда:

$$W_{st}(0) \approx -\frac{e^2 \ln 2}{2l}\left(1 - \frac{1}{\kappa l}\right),$$

$$W_{st}(\pm l) \approx -\frac{e^2\kappa}{3}\left[1 + \frac{3\zeta(3)}{16\kappa^3 l^3}\right], \quad (\kappa l \to \infty) \tag{26}$$

где $\zeta(3) \approx 1{,}202$ — частное значение дзета-функции Римана. Величина $-e^2\kappa/3$ представляет собой первый член разложения формулы (24) по малым $r_\pm$:

$$W_{st}(r_\pm) \approx -\frac{e^2\kappa}{3}\left[1 - \frac{9}{16}\kappa r_\pm + \frac{3}{4}\kappa r_\pm \ln(\gamma \kappa r_\pm)\right], \quad \kappa r_\pm \ll 1 , \tag{27}$$

где $\gamma = 1{,}7810....$ — постоянная Эйлера.

Следует обратить внимание на то, что зависимость $W_{st}(z)$ или $W_{st}(r_\pm)$ содержит параметр κ. Таким образом, энергии сил изображения различны для различных реальных металлов, в отличие от универсальной расходящейся на ГР зависимости классической теории ($\kappa \to \infty$).

Значительно более интересным представляется вычисление $W_{st}(z)$ в тонком внутреннем слое ($\kappa l \to 0$). Расчеты показывают, что ассимптотика $W_{st}(z)$ при малых $\delta = \kappa l$ равна

$$W_{st}(\xi) = -\frac{1}{2} e^2 \kappa \left\{1 + \delta\left[\ln(2\gamma\delta) - 1 + \frac{1}{2}(1+\xi) \times \right.\right.$$

$$\left.\left. \times \ln(1+\xi) + \frac{1}{2}(1-\xi)\ln(1-\xi)\right] + O(\delta^2)\right\}, \quad \delta \ll 1 , \tag{28}$$

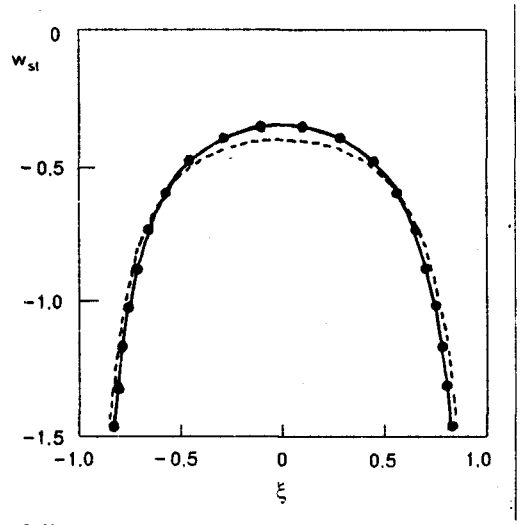

Рис. 2. Координатные зависимости нормированных энергий статических сил изображения $w_{st}(\xi = z/l) = W_{st}(z)/e^2\kappa$ в симметричном сэндвиче: классическое выражение (●), приближение Симмонса (− − −) и приближение (25), полученное в данной работе (———); $\kappa l = 1$.

где $\xi = z/l$. Характерной особенностью данной формулы является то, что для малых межэлектродных расстояний энергия сил изображения почти не зависит от ξ, в отличие от классического случая. При $\delta \to 0$ значения функции $W_{st}(\xi)$ стремятся к величине $-e^2\kappa/2$, которая в точности совпадает с внутренней электростатической потенциальной энергией в модели Томаса—Ферми. Это — усредненная по кристаллу энергия, отсчитанная от уровня вакуума.

Перейдем теперь к динамическим поправкам ΔW, определяемым формулой (18). В тех же предположениях симметричности перехода и равенства единице всех диэлектрических констант, что и при получении (22), из (18) следует:

$$\Delta W(z) = \frac{e^2}{2}\int_0^\infty dk_\parallel \frac{k_\parallel \alpha''(k_\parallel, 0)\exp(-2k_\parallel l)}{[1-\alpha^2(k_\parallel,0)\exp(-4k_\parallel l)]^2}\left\{\ddot{z}(t)\left[1+\alpha^2(k_\parallel,0)\exp(-4k_\parallel l)\right]\operatorname{sh}(2k_\parallel z) + \right.$$

$$\left. + k_\parallel \dot{z}^2(t)\left[\left(1+\alpha^2(k_\parallel,0)\exp(-4k_\parallel l)\right)\operatorname{ch}(2k_\parallel z) - 2\alpha(k_\parallel,0)\exp(-2k_\parallel l)\right]\right\}, \tag{29}$$

где $\alpha(k_\parallel, 0)$ определяется выражением (23), а $\alpha''(k_\parallel, 0)$ может быть легко получено из (21). Для определенности дальнейшие расчеты будем проводить для электронов, эмиттируемых из левой ГР. Перейдя к пределу $\kappa l \to \infty$ и проделав замену переменной $z = r_+ - l$, получаем выражение для одной ГР [11]:

$$\Delta W(r_+) = \frac{e^2}{2\omega_p^2}\int_0^\infty dk_\parallel \frac{k_\parallel \exp(-2k_\parallel r_+)}{[k_\parallel + (k_\parallel^2+\kappa^2)^{1/2}]^2}\left[k_\parallel \dot{r}_+^2 - \ddot{r}_+\right]\left[2\left(k_\parallel^2+\kappa^2\right) - 2k_\parallel\left(k_\parallel^2+\kappa^2\right)^{1/2} - \frac{k_\parallel\kappa^2}{(k_\parallel^2+\kappa^2)^{1/2}}\right]. \tag{30}$$

При малых r_+ из (30) легко получается асимптотика

$$\Delta W(r_+) = \frac{e^2\kappa^2}{8\omega_p^2}\left\{\frac{1}{2}\kappa\dot{r}_+^2\left[\frac{176}{105} + 3\kappa r_+\left(\ln(\gamma\kappa r_+) - \frac{1}{8}\right)\right] - \ddot{r}_+\left[\frac{5}{6} - \frac{176}{105}\kappa r_+ - \frac{3}{2}(\kappa r_+)^2\left(\ln(\gamma\kappa r_+) - \frac{83}{72}\right)\right]\right\}, \tag{31}$$

$$\kappa r_+ \ll 1.$$

Отметим, что возможность получения в явном виде поправки ΔW при малых r_+ связана с наличием пространственной дисперсии $\varepsilon(\mathrm{k}, \omega)$.

В случае тонкого внутреннего слоя выражение (29) имеет следующую асимптотику при малых δ:

$$\Delta W(\xi) \approx \frac{e^2\kappa^2}{4\omega_p^2} \times$$

$$\times\left\{\frac{2}{3}\kappa\dot{z}^2 + \delta\left[\frac{7}{3^5}\xi\ddot{z} + \frac{3}{2}\kappa\dot{z}^2\left(\ln(\gamma\delta) + \frac{1}{4}\right)\right]\right\}, \quad \delta \ll 1. \tag{32}$$

Важным частным случаем является равноускоренное движение электрона из левого электрода внутрь сэндвича под действием приложенного электростатического поля F:

$$r_+(t) = z(t) + l = \frac{eFt^2}{2}. \tag{33}$$

Тогда

$$\dot{z}^2(t) = \dot{r}_+^2(t) = \frac{2eF}{m}r_+ = \frac{2eF}{m}(z+l),$$
$$\ddot{z}(t) = \ddot{r}_+(t) = eF/m. \tag{34}$$

где m — электронная масса. С использованием (33) и (34) формула (32) сводится к очень простому виду:

$$\Delta W(\xi) = \frac{e^3F\kappa^2\delta}{12m\omega_p^2}(4 + 11\xi). \tag{35}$$

Как видим, вклад от неадиабатичности отклика в энергию сил изображения мал в меру малой толщины внутреннего слоя. Еще одной интересной особенностью является знакопеременность добавки $\Delta W(\xi)$. Она меняется с отрицательной на положительную при $\xi_c = -4/11$, т.е. профиль $\Delta W(\xi)$ — асимметричен относительно плоскости $z = 0$. Та-

кая асимметрия свойственна отнюдь не всем законам движения. Например, если рассматривать движение с постоянной скоростью $v_c = \dot{z}$ [5], то из (29) легко видеть, что динамическая поправка ΔW симметрична и положительна при всех ξ, а значит, уменьшает действие статических сил изображения.

В заключение раздела следует упомянуть, что в [8] при рассмотрении динамики также был получен несимметричный пространственный профиль энергии сил изображения в изначально симметричном туннельном сэндвиче, но авторы не учитывали влияния электрического поля, так что асимметрия в [8] связана, по всей вероятности, с наличием мнимой части $W(z)$, отсутствующей у нас по причинам, изложенным в конце разд. 1.

3. Численные расчеты энергии сил изображения

На рис. 3 показаны зависимости нормированной величины $w_{st} = W_{st}/e^2\kappa$ от $\xi = z/l$, вычисленные при малых δ для статических сил изображения по асимптотической формуле (28) и путем численного интегрирования по формуле (22). Как видим, асимптотическая формула дает прекрасные результаты для малых расстояний между электродами.

Отметим, что для вырожденных полупроводников и для полуметаллов даже малые значения $\delta \approx 0{,}1$ соответствуют реалистическим l, сравнимым с характерными масштабами наноэлектроники. Так, для Bi оценки приводят к $\kappa \approx \kappa_{TF} \approx$

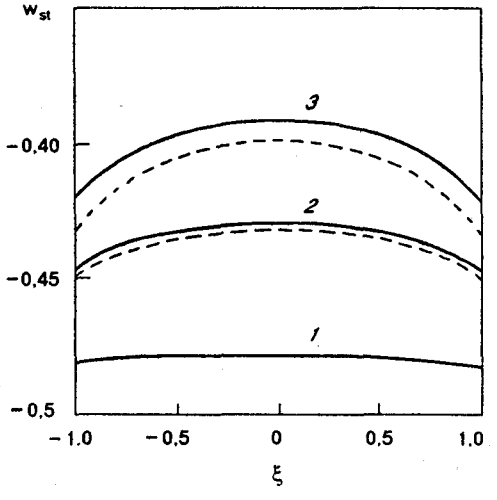

Рис. 3. То же, что и на рис. 2, но с учетом пространственной дисперсии диэлектрической проницаемости обкладок: численные расчеты по формуле (22) (———) и расчеты по приближенной формуле (28) для малых $\delta = \kappa l$ (– – –); δ = 0,01 (*1*); 0,05 (*2*) и 0,1 (*3*).

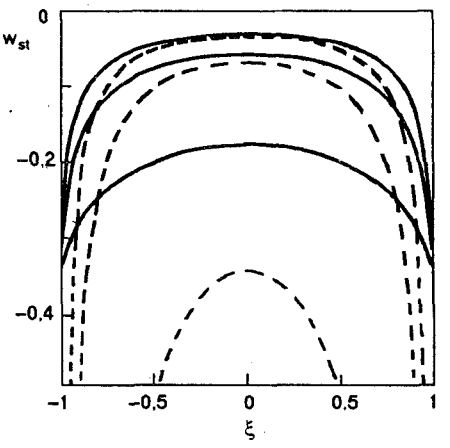

Рис. 4. То же, что и на рис. 2, с учетом пространственной дисперсии $\varepsilon(\mathbf{k}, \omega)$ (———) и классическое выражение (– – –); δ = 1, 5, 10 (снизу вверх).

$\approx 8{,}1 \cdot 10^5$ см$^{-1}$, а для Sb к $\kappa \approx 1{,}66 \cdot 10^6$ см$^{-1}$, т.е. $2l \approx 24$ и 14 Å соответственно. Для экспериментов же [3] параметр $\kappa \approx \kappa_{TF} \approx 1{,}4 \cdot 10^6$ см$^{-1}$. Таким образом, существует большая область межэлектродных расстояний, когда формула (28) является справедливой.

При значениях $l \geq 0{,}3\kappa^{-1}$ формула (28) перестает быть хорошим приближением. Но это отнюдь не означает, что точные (в рамках модели Томаса—Ферми) значения $W_{st}(\xi)$, соответствующие формуле (22), можно заменить на $W_{st}^{Sim}(z)$ или $W_{st}^{cl}(z)$. Это можно видеть из рис. 4, на котором приведены рассчитанные согласно (22) зависимости $W_{st}(\xi)$ в широком диапазоне δ. Действительно, для $\delta = 1$ значение энергии классических сил изображения в центре сэндвича в нашей нормировке приблизительно равно $-0{,}35$, а в приближении Симмонса $-0{,}40$. Для легированного GaAs с прослойкой $Al_xGa_{1-x}As$ [3] это соответствует толщинам $2l \approx 140$ Å. Именно при таких значениях $2l$ и наблюдались в [3] отклонения сил изображения от формулы Симмонса, что не удивительно, поскольку, согласно рис. 4, учет пространственной дисперсии в обкладках приводит к $w_{st}(0) \approx -0{,}18$, что отличается от точного классического значения в два раза!

Основными реперными точками при анализе сил изображения в симметричных трехслойных системах являются точки $z = 0$ и $\pm l$. Зависимость энергий сил изображения в этих точках от δ показана на рис. 5. Величина $w_{st}(\xi = \pm 1)$, равная $-0{,}5$ при $\delta = 0$, с ростом δ выходит на характерное значение $-1/3$ для поверхностной потенциальной энергии [5,11]. В то же время $w_{st}(\xi = 0)$ стремится к нуле-

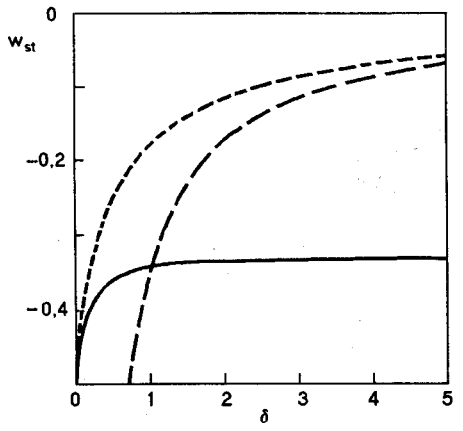

Рис. 5. Зависимость от δ энергий статических сил изображения в вакуумном промежутке: согласно классической теории, в центре промежутка (— — —); с учетом пространственной дисперсии $\varepsilon(k, \omega)$ на ГР (———) и в центре промежутка (– – –).

вому пределу для $\delta \to \infty$. Заметим, что вычисленные по формуле (22) значения $W_{st}(\xi = 0)$, в согласии с (26) и (28), при любых δ лежат выше классических.

Перейдем теперь к рассмотрению динамики сил изображения. Насколько хорошо линейное по ξ приближение (35) описывает функцию (29) при малых δ можно убедиться из рис. 6. При больших δ функция $\Delta W(\xi)$ перестает быть линейной и резко возрастает по модулю вблизи обеих ГР. Соответствующие кривые показаны на рис. 7. Возрастание ΔW у второй обкладки сэндвича свидетельствует о том, что именно при этих ξ возможно нарушение справедливости используемого нами разложения по параметру неадиабатичности.

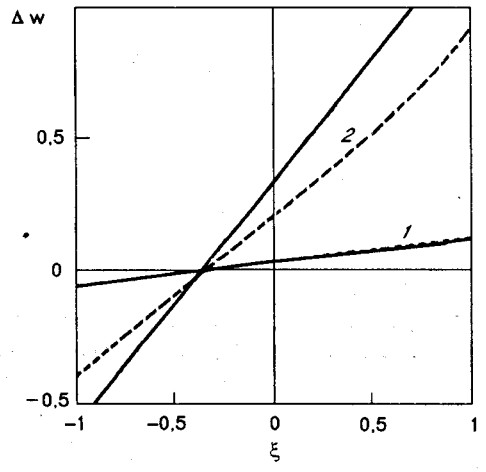

Рис. 6. Обезразмеренные значения динамической поправки $\Delta w(\xi) = \Delta W m \omega_p^2 / e^3 F \kappa^2$ к энергии статических сил изображения W_{st} при малых $\delta = 0{,}01$ (*1*) и 0,1 (*2*): численные расчеты по точной формуле (29) (———) и по приближенной формуле (35) (– – –).

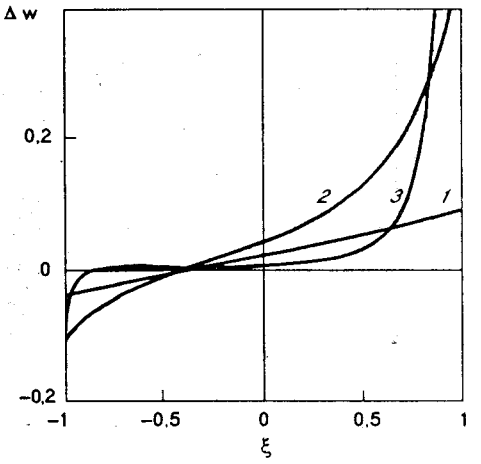

Рис. 7. То же, что и на рис. 6 с использованием (29), в широком диапазоне $\delta = 0{,}1$ (*1*), 1 (*2*) и 10 (*3*).

Для исследования полной величины энергии сил изображения в трехслойной системе $W(\xi) = W_{st}(\xi) + \Delta W(\xi)$ необходимо задаться конкретными значениями параметров κ и ω_p в обкладках, эффективной массой электрона во внутреннем слое и величиной приложенного поля F. В эксперименте обычно фиксируется разность потенциалов между обкладками V, так что сама величина $F = V/2l$ зависит от l. Будем измерять величину F в характерных для данной проблемы единицах $F_0 = 10^8$ В/см [1,3,9–12].

Расчеты показывают, что для хороших металлов динамическими поправками в M–I–M-структурах можно практически всегда пренебречь. Совершенно иная ситуация имеет место для вырожденных полупроводников и полуметаллов. В качестве примера нами были рассмотрены электроды из сурьмы, для которых величина κ указывалась выше, а $\omega_p \approx 4{,}15 \cdot 10^{14}$ с$^{-1}$. На рис. 8 показаны зависимости от ξ для разных δ и относительно малого отношения $F/F_0 = 0{,}05$ величин w_{st} и w. Видно, что поправки здесь весьма существенны, а результирующие кривые $W(\xi)/e^2\kappa$ заметно отличаются от симметричных универсальных зависимостей рис. 4. С ростом δ роль поправок возрастает. По-видимому, именно динамические свойства сил изображения приводят к неэкспоненциальности зависимости сопротивления от межэлектродного расстояния в разломных контактах из Sb [16]. Действительно, при относительно больших значениях динамической поправки $\Delta W \sim F$ отклонение функции $\Delta W(\xi)$ от ее линейной аппроксимации (35) для малых толщин δ с учетом линейности полевого вклада $-eF(\xi + 1)$ в энергию электрона может исказить первоначальную (в отсутствие ΔW) экспоненциальную зависимость тока от l.

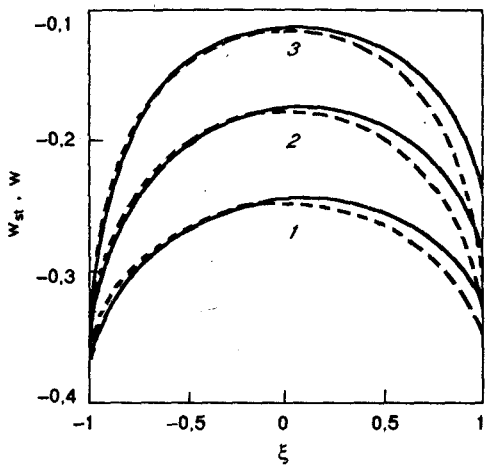

Рис. 8. Формы потенциальных барьеров для перехода Sb—вакуум—Sb: при учете статических сил изображения (– – –), при учете динамики сил изображения (——); $F/F_0 = 0{,}05$, $\delta = 0{,}5$ (*1*), 1 (*2*), 2 (*3*).

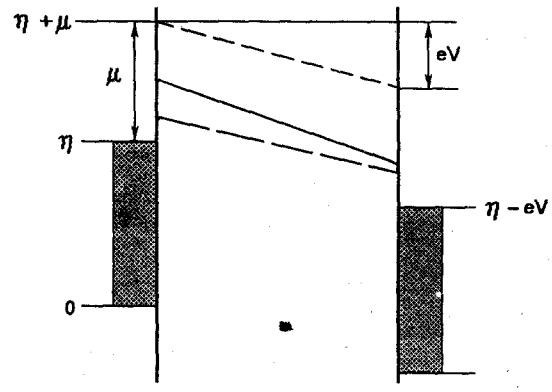

Рис. 9. Схематическая энергетическая диаграмма для тонкого симметричного перехода металл—вакуум—металл: в отсутствие сил изображения (– – –), при учете статических сил изображения (— — —), при учете динамики сил изображения (——). Обозначения в тексте.

4. Туннельный ток с учетом динамических сил изображения

Решение задачи о туннельных токах в трехслойных системах с изолирующей сердцевиной, представляющей собой энергетический барьер для электронов, может быть получено, вообще говоря, только в результате численного интегрирования [1,12]. Использование при этом квазиклассического приближения для зависящего от энергии коэффициента прохождения через барьер $D(E)$ позволяет точно получить лишь основную,экспоненциальную, зависимость от параметров барьера, т.е. приводит к ошибкам в предэкспоненциальном множителе [12]. В связи с вышеизложенным, с целью качественного анализа роли динамики сил изображения и особенностей экранировки веществом электродов кулоновского поля туннелирующих электронов в тонком барьере, в данном разделе мы рассмотрим только простейшие случаи, позволяющие провести аналитические расчеты до конца. Численные расчеты в более общей постановке будут проведены в отдельной работе.

В рамках кинетической теории плотность туннельного тока через симметричный M–I–M-переход может быть представлена в следующем виде [1,12]:

$$j = \frac{em}{2\pi^2\hbar^3}\int_0^{\eta} dE_z D(E_z) \times$$

$$\times \int_0^{\infty} dE_{\parallel}\left[f\left(E_z + E_{\parallel}\right) - f\left(E_z + E_{\parallel} + eV\right)\right]. \qquad (36)$$

Здесь $\hbar$ — постоянная Планка; $E_{\parallel}$ и E_z — энергии движения электрона вдоль и поперек электродов; η — энергия Ферми металла, отсчитанная от дна его зоны проводимости; $f(E)$ — функция распределения электронов по энергиям; $D(E_z)$ — коэффициент прохождения потенциального барьера, являющийся одинаковым для прямого по отношению к приложенному полю $F = V/2l$ (слева направо) и обратного потоков электронов. При этом поле F смещает вниз энергетические уровни правого электрода на величину eV, так что уровень его химического потенциала составляет $\eta - eV$ (см. рис. 9). Интегрирование по $E_{\parallel}$ легко проводится в пределе низких температур, т.е. для сильно вырожденных электронов, когда $f(E)$ стремится к функции Хэвисайда $\theta(\eta - E)$:

$$j = j_0(\eta) - j_0(\eta - eV), \qquad (37)$$

$$j_0(\eta) = \frac{em}{2\pi^2\hbar^3}\int_0^{\eta} dE_z D(E_z)(\eta - E_z).$$

При $eV > \eta$ обратный ток отсутствует, т.е. $j_0(\eta - eV) = 0$.

Используемое нами квазиклассическое приближение справедливо для больших барьеров с экспоненциально малыми коэффициентами прохождения

$$D(E_z) = \exp\left[-I(E_z)\right]. \qquad (38)$$

Это позволяет применить метод перевала, а именно, провести следующие разложения вблизи верхних пределов интегралов в (37):

$$I(E_z) = I(\eta) + \left(E_z - \eta\right)\left(\frac{\partial I}{\partial E_z}\right)_{E_z=\eta} \qquad (39)$$

и выполнить интегрирование по E_z:

$$j_0(\eta) = \frac{em}{2\pi^2\hbar^3}\left[\left(\frac{\partial I}{\partial E_z}\right)_{E_z=\eta}\right]^{-2} \exp\left[-I(\eta)\right] . \qquad (40)$$

В квазиклассическом приближении показатель экспоненты в (38) определяется координатной зависимостью скорости подбарьерного движения $v(z) = |\dot{z}|$:

$$I(E_z) = \frac{2m}{\hbar}\int_{z_1}^{z_2} v(z)\,dz\,, \quad \frac{1}{2}mv^2(z) = U(z) - E_z\,, \qquad (41)$$

где $U(z)$ — потенциальная энергия в туннельном переходе, а z_1 и z_2 — соответствующие точки поворота, в которых $v(z) = 0$. При учете малых динамических поправок (29) к статическим силам изображения (22) потенциальная энергия $U(z)$ может быть записана следующим образом:

$$U(z) = \eta + \mu - eF(z + l) +$$

$$+ W_{st}(z) + \frac{1}{2}mv^2\rho_1(z) + m\dot{v}z\rho_2(z)\,. \qquad (42)$$

Здесь μ — работа выхода, а $W_{st}(z)$, $\rho_1(z)$ и $\rho_2(z)$, согласно (22), (29), — четные функции z в случае идентичных обкладок. Тот факт, что для электрона с поперечной энергией E_z коэффициенты прохождения динамического барьера (42) в прямом и обратном направлениях полагаются одинаковыми, обусловлен одинаковой формой барьера для прямого и обратного движений. Действительно, для обратного движения величины z и $\dot{v}$ не меняются, а v заменяется на $-v$, что не влияет на значения $U(z)$. Величину v^2 можно сразу найти из уравнений (41) и (42):

$$\frac{1}{2}mv^2 \approx$$

$$\approx \frac{\eta + \mu - eF(z + l) + W_{st}(z) + m\dot{v}z\rho_2(z) - E_z}{1 - \rho_1(z)}\,, \qquad (43)$$

а $\dot{v}$ определить путем дифференцирования уравнения (43) по времени при учете малости динамических поправок:

$$m\dot{v} \approx -eF\,. \qquad (44)$$

Подставляя (41)–(44) в (40), для $E_z = \eta$ и $\eta - eV$ получаем

$$I(\eta) = \frac{2}{\hbar}(2m)^{1/2} \times$$

$$\times \int_{z_1}^{z_2} dz \left[\frac{\mu - eF(z + l) + W_{st}(z) - eFz\rho_2(z)}{1 - \rho_1(z)}\right]^{1/2}\,, \qquad (45)$$

$$I(\eta - eV) = \frac{2}{\hbar}(2m)^{1/2} \times$$

$$\times \int_{\tilde{z}_1}^{\tilde{z}_2} dz \left[\frac{\mu + eF(-z + l) + W_{st}(z) - eFz\rho_2(z)}{1 - \rho_1(z)}\right]^{1/2}\,. \qquad (46)$$

Обратим внимание на то, что при замене переменной интегрирования z в (46) на $-z$ с учетом четности функций $W_{st}(z)$, $\rho_1(z)$ и $\rho_2(z)$ подынтегральная функция в (46) сводится к подынтегральной функции из (45), в которой F заменяется на $-F$.

В зависимости от вида функции $U(z)$ точки поворота могут зависеть или не зависеть от F; в последнем случае они совпадают с координатами ГР. Если точки поворота в (45) зависят от поля ($z_{1,2} = z_{1,2}(F)$), то точки поворота в интеграле (46) будут зависеть от F следующим образом: $\tilde{z}_{1,2}(F) = -z_{2,1}(-F)$. Если же точки поворота совпадают с координатами ГР ($z_{1,2} = \pm l$), то преобразование интеграла (46) не меняет пределы интегрирования. В обоих случаях, обозначая $I(\eta)$ через $I(F)$, получаем $I(\eta - eV) = I(-F)$. Таким образом доказано, что для симметричного M–I–M-перехода малые динамические поправки при $eV < \eta$ оставляют туннельный ток нечетной функцией приложенного поля:

$$j = j_0(F) - j_0(-F)\,, \qquad (47)$$

как это было и в их отсутствие [12].

Для тонких барьеров с $\kappa l << 1$ динамические поправки $\rho_1(z)$ и $\rho_2(z)$ не зависят от z и, согласно (32), могут быть представлены в следующем виде:

$$\rho_1 = \frac{1}{3}\rho_0\,, \quad \rho_1 = \frac{7}{12}\rho_0\,, \quad \rho_0 = \frac{e^2\kappa^3}{m\omega_p^2}\,. \qquad (48)$$

При этом $W_{st}(z)$ есть медленно меняющаяся функция z вблизи значения $-e^2\kappa/2$ (см. рис. 3). Поскольку наше рассмотрение включает малые поправки порядка ρ_0, то в том же приближении функцию $W_{st}(z)$ можно аппроксимировать усредненной величиной

$$\tilde{W}_{st} = \frac{1}{2l}\int_{-l}^{l} dz\, W_{st}(z) =$$

$$= -\frac{1}{2}e^2\kappa\left[1 + \delta\left(\ln(4\gamma\delta) - \frac{3}{2}\right)\right], \qquad (49)$$

в которой сохранена малая поправка порядка δ. Тогда целесообразно ввести эффективные значения работы выхода μ^* и электрического поля F^*:

$$\mu^* = \frac{\mu + \tilde{W}_{st} + eFl\rho_2}{1-\rho_1}, \quad F^* = \frac{1+\rho_2}{1-\rho_1}F, \qquad (50)$$

в результате чего подынтегральное выражение в (45) принимает простой вид, соответствующий туннелированию через треугольный (или трапецеидальный) барьер:

$$I(F) = \frac{2}{\hbar}(2m)^{1/2}\int_{z_1}^{z_2} dz\left[\mu^* - eF^*(z+l)\right]^{1/2}. \qquad (51)$$

При $2eF^*l > \mu^*$ после выполнения элементарного интегрирования по z в (51) мы приходим к классическому закону Фаулера—Нордгейма

$$j_0(F) = \frac{e^3F^{*2}}{(4\pi)^2\hbar\mu^*}\exp\left[-\frac{4(2m\mu^{*3})^{1/2}}{3\hbar eF^*}\right] \qquad (52)$$

с перенормированными значениями μ^* и F^*. При этом вкладом от обратного тока можно пренебречь, и $j = j_0(F)$. Из схемы, представленной на рис. 9, видно, что динамические поправки увеличивают высоту и ширину туннельного барьера, формируемого приложенным электрическим полем и статическими силами изображения. Это, естественно, должно приводить к соответствующему уменьшению туннельного тока. Действительно, из формул (48)–(50) при $\rho_0 << 1$ следует, что

$$\frac{\mu^{*3/2}}{F^*} \approx \frac{(\mu + \tilde{W}_{st})^{3/2}}{F} \times$$

$$\times\left\{1 + \frac{1}{2}\left[(3y-2)\rho_2 + \rho_1\right]\right\} > \frac{(\mu + \tilde{W}_{st})^{3/2}}{F}, \qquad (53)$$

где $y \equiv eFl/(\mu + \tilde{W}_{st})$, если удовлетворить неравенству

$$y > \frac{1}{3}\left(2 - \frac{\rho_1}{\rho_2}\right) = \frac{10}{21}. \qquad (54)$$

Но это неравенство заведомо выполняется в рассматриваемом случае $2eF^*l > \mu^*$, т.е. когда $y > 0{,}5$. Таким образом, показатель экспоненты в (52) становится больше, а туннельный ток — меньше. Обратим внимание на наличие полевой зависимости величин μ^* и y, которая приводит к отклонению от закона Фаулера—Нордгейма. А именно, по мере увеличения поля F происходит отклонение от линейной зависимости $\ln(j/F^2)$ от F^{-1} в сторону уменьшения туннельного тока. Такого же типа отклонения от закона Фаулера—Нордгейма для тока автоэлектронной эмиссии из металла в вакуум были объяснены в [9,11] динамическими поправками, учитывающими неравномерное движение туннелирующего электрона.

При $2eF^*l << \mu^*$ величина обратного тока $j_0(-F)$ в выражении (47) становится сравнимой с величиной прямого тока $j_0(F)$. Проводя разложение суммарного тока j по малому параметру y, который определен выше, приходим к следующему результату:

$$j = \frac{e^2(2m\mu_0^*)^{1/2}}{4\pi^2\hbar^3}F_0^*\times$$

$$\times\left[1 + \frac{4me^2l^2}{3\hbar^2\mu_0^*}F_0^{*2}\right]\exp\left[-\frac{4l(2m\mu_0^*)^{1/2}}{\hbar}\right]. \qquad (55)$$

Здесь новые перенормированные значения работы выхода μ_0^* и электрического поля F_0^* определяются выражениями (50), в которых следует положить $\rho_2 = 0$. Показатель экспоненты в (55) теперь зависит только от μ_0^*, и увеличение значений μ_0^* вследствие наличия динамической поправки приводит к уменьшению туннельного тока по сравнению с его статически перенормированным аналогом.

Следует отметить, что формулы (52) и (55) имеют смысл при малых значениях параметра ρ_0. Малость ρ_0 следует из основного приближения $\delta << 1$ для узкого межэлектродного промежутка. В другом пределе, $\delta >> 1$, вблизи левой ГР справедлива формула (31), из которой при учете (34) получаем иной, значительно меньший, параметр малости динамической поправки $\Delta W(-l)$ по сравнению с полевым членом $-eFl$: $\rho_0' = 5\rho_0/48\delta << \rho_0$. Таким образом, перенормировка действующего поля за счет динамики сил изображения является особенно сильной для барьеров малой толщины. Оценки показывают, что для хороших металлов параметр ρ_0, в отличие от ρ_0', не мал. Так, для вольфрама $\rho_0 \approx 0{,}84$. Но как раз для таких веществ область толщин, где $\delta << 1$, очень мала, и формулы (52), (55) фактически носят академический характер. С другой стороны, для полуметаллов типа Sb параметр $\rho_0 \approx 6\cdot 10^{-3}$, так что с этой стороны нет огра-

ничений на использование эффективных параметров μ^* и F^*.

Для гетероструктур GaAs / $Al_xGa_{1-x}As$/GaAs [3] оценки приводят к $\rho_0 \approx 1{,}6$. Это, казалось бы, говорит в пользу точки зрения авторов [3] о том, что в их экспериментах при малых временах туннелирования τ_{tun} динамические эффекты резко уменьшают влияние поляризационных сил на туннельный ток. Однако следует иметь в виду также и то указанное выше обстоятельство, что при малых толщинах внутреннего слоя ($Al_xGa_{1-x}As$) динамические поправки и влияние пространственной дисперсии на статические силы изображения одинаково важны.

Обсудим теперь статическую перенормировку параметра μ. Величина $W_{st}(z)$ в пределе малых δ равна $-e^2\kappa/2$, т.е. электростатическому вкладу во внутренний (кристаллический) потенциал U_{cryst}. Между величинами U_{cryst}, μ и η существует точное соотношение [17]: $|U_{cryst}| = \eta + \mu$, причем подразумевается учет как дискретности ионной решетки, так и многочастичных корреляций. Поэтому естественно, что в используемых нами приближениях модели желе и свободных электронов (в варианте Томаса—Ферми, учитывающем квантовую статистику) это равенство может и не выполняться. Однако, по крайней мере для хороших металлов, соотношения между измеренными значениями работы выхода μ и вычисленными по формуле (49) значениями $\widetilde{W}_{st}$ должны качественно верно описывать экспериментальную ситуацию. Например, для Na и W величины $e^2\kappa/2$ составляют 10,7 и 11,4 эВ соответственно, а работы выхода 2,3 и 4,5 эВ, так что $|\widetilde{W}_{st}| > \mu$. Из хода зависимости энергии сил изображения в центре сэндвича $W_{st}(0)$ от δ, приведенной на рис. 5, следует, что это соотношение будет сохраняться и в более актуальной для этих металлов области толщин $\delta \geq 1$. Таким образом, наши расчеты для металлов подтверждают результаты экспериментов [18] и выводы теоретических расчетов [19] об уменьшении вплоть до исчезновения эффективной работы выхода, найденной из зависимостей $d \ln j/dl$ для M_1–I–M_2-переходов.

Однако «кажущаяся» (apparent, полученная из наклона $d \ln j/dl$) величина μ_0^*, согласно нашей формуле (50), не для всех веществ стремится к нулю при $l \to 0$, что не согласуется с выводами, сделанными в [19]. Расхождение точек зрения связано с проведенным нами учетом пространственной дисперсии диэлектрической проницаемости. При этом оказывается, что для полуметаллов эффективная работа выхода должна оставаться конечной и в пределе $l \to 0$. Так, для Sb величина $e^2\kappa/2$ составляет 0,19 эВ, что меньше работы выхода $\mu = 4$–$4{,}5$ эВ.

Для гетероструктур на основе GaAs [3] величина $e^2\kappa/2 \approx 0{,}16$ эВ и превышает работу выхода 0,008 эВ $\leq \mu \leq$ 0,09 эВ, т.е. туннелирование в этом случае должно смениться обычной проводимостью. Этот вывод не находится в противоречии с наблюдаемым в [3] туннельным эффектом, поскольку толщины слоя $Al_xGa_{1-x}As$ там составляли 100 Å $< 2l <$ 1 000 Å, а толщины, при которых уже справедливы формулы (49), (50), не превышают 140 Å. Отсюда, однако, следует, что для анализа экспериментов [3] необходимо рассчитывать токи с использованием точной формулы (22) для энергии статических сил изображения. Более того, в случае полупроводников $A_{III}B_V$ с их малой эффективной массой $m^* \approx 0{,}07m$ уже не справедливы квазиклассическая формула (38) и приближение (40), основанное на методе перевала. Действительно, последний справедлив, если модуль показателя экспоненты в формуле (55) намного больше единицы. Для оценки рассмотрим наиболее благоприятный для применимости метода перевала случай, когда $\mu_0^* \approx \mu$. Тогда для $\mu = \mu_{min} =$ $= 0{,}008$ эВ и $m = m^*$ получаем $2l >> 75$ Å. Эта оценка ставит под сомнение не только применимость формулы (55) к экспериментам [3], но и применимость содержащихся в [3] оценок, основанных на сохранении лишь лидирующей экспоненты. Поэтому, вообще говоря, необходимо провести анализ результатов [3], не только группируя их по значениям параметра $\omega_p\tau_{tun}$, но и отдельно по толщине барьеров, имея в виду опасность выхода за рамки приближения одной экспонентой полного выражения для тока.

Отметим, что при туннелировании через вакуум для веществ с работой выхода порядка нескольких эВ (т.е. металлов и полуметаллов), метод перевала пригоден вплоть до вакуумных промежутков атомных размеров, как, например, в работах [4,16].

5. Выводы

На основании проведенных в настоящей работе расчетов энергии динамических сил изображения и туннельных токов в трехслойных M–I–M- структурах можно сделать следующие выводы:

1. Учет пространственной дисперсии диэлектрической проницаемости вещества электродов существенно изменяет координатную зависимость энергии $W_{st}(z)$ статических сил изображения в диэлектрике, особенно при малых значениях толщины межэлектродного промежутка: $\delta = \kappa l << 1$, где κ^{-1} — длина экранирования в электродах.

2. Для малых δ динамическая добавка $\Delta W(z)$ к энергии сил изображения пропорциональна δ и является линейной функцией координаты z. Добавка $\Delta W(z)$ меняет знак при изменении z. С ростом δ зависимость $\Delta W(z)$ становится нелинейной и остается знакопеременной. Нелинейность $\Delta W(z)$ наряду с линейностью энергетического члена $eF(z + l)$ может исказить экспоненциальную зависимость плотности туннельного тока j от межэлектродного расстояния l, справедлизую в отсутствие $\Delta W(z)$.

3. Статические силы изображения понижают высоту туннельного барьера так, что в пределе $\delta \to 0$ эффективная работа выхода для хороших металлов уменьшается до нуля. В случае полуметаллов работа выхода остается конечной, в отличие от результата классической теории.

4. Динамические поправки $\Delta W(z)$ к энергии сил изображения при $\delta \to 0$ всегда уменьшают туннельный ток, несмотря на свою пространственную знакопеременность.

Один из авторов (А. Г.) благодарен J. M. Krans и И. К. Янсону за обсуждение их результатов для разломных контактов, стимулировавшее данное исследование. Работа была выполнена при поддержке INTAS, грант № 94–3862.

1. Г. Бете, А. Зоммерфельд, *Электронная теория металлов*, ОНТИ, Глав. ред. техн.-теор. лит., Ленинград (1938).
2. В. Смайт, *Электростатика и электродинамика*, Изд-во иностр. лит., Москва (1954).
3. P. Gueret, E. Marclay, and H. Meier, *Appl. Phys. Lett.* **53**, 1617 (1988); *Solid State Commun.* **68**, 977 (1988).
4. J. M. Krans, C. J. Muller, I. K. Yanson, Th. C. M. Govaert, R. Hesper, and J. M. van Ruitenbeek, *Phys. Rev.* **B48**, 14721 (1993).
5. J. Heinrichs, *Phys. Rev.* **B8**, 1346 (1973).
6. M. Jonson, *Solid State Commun.* **33**, 743 (1980).
7. B. N. J. Persson and A. Baratoff, *Phys. Rev.* **B38**, 9616 (1988).
8. B. G. R. Rudberg and M. Jonson, *Phys. Rev.* **B43**, 9358 (1991).
9. А. И. Войтенко, А. М. Габович, В. М. Розенбаум, *ЖЭТФ* **87**, 1064 (1984).
10. А. М. Габович, В. М. Розенбаум, *ФТТ* **27**, 761 (1985).
11. A. M. Gabovich, V. M. Rozenbaum, and A. I. Voitenko, *Surface Sci.* **186**, 523 (1987).
12. Е. Л. Вольф, *Принципы электронной туннельной спектроскопии*, Наукова думка, Киев (1990).
13. A. Hartstein, Z. A. Weinberg, and D. J. DiMaria, *Phys. Rev.* **B25**, 7174 (1982).
14. G. Barton, *Repts Prog. Phys.* **42**, 963 (1979).
15. J. G. Simmons, *J. Appl. Phys.* **34**, 2581 (1963).
16. J. M. Krans, I. K. Yanson, and J. M. van Ruitenbeek, in: *High-T_c Superconductivity and Tunneling Phenomena*, Abstracts of the 2-th Int. symp., DonFTI, Donetsk (1994), p. 18.
17. *Достижения электронной теории металлов*, П. Цише, Г. Леманн (ред.), Мир, Москва (1984), т. 2.
18. G. Binnig, N. Garcia, H. Rohrer, J. M. Soler, and F. Flores, *Phys. Rev.* **B30**, 4816 (1984).
19. J. M. Pitarke, P. M. Echenique, and F. Flores, *Surface Sci.* **217**, 267 (1989).

Dynamical image forces and tunneling in three-layer systems

A. I. Voitenko, A. M. Gabovich, and V. M. Rozenbaum

The dynamic image forces in symmetrical three-layer M—I—M structures are calculated to the first order of the perturbation theory in non-adiabaticity parameter with taking into account the spatial and temporal dispersions of the electrode dielectric functions. For a thin insulating interlayer $2l << \kappa^{-1}$ thick, where κ^{-1} is the electrode screening length, the co-ordinate dependence of image force energy $W(z)$ $(-l < z < l)$ is shown to be drastically different from the conventional classical expressions. Namely, the static contribution $W_{st}(z)$ is a slowly varying function of z and in the limit $\kappa l \to 0$ equals $-e^2\kappa/2$ (e is the electron charge). In the same limit the dynamic correction $\Delta W(z)$ to $W_{st}(z)$ is linear in z and has different signs near various electrodes. The above results made it possible to derive simple analytic bias dependences of tunnel currents. The formal expressions look like the quasi-classical ones for triangular (or trapezoidal) potential barriers but with non-trivial renormalization of the work function and electrostatic field. The applicability of the proposed theory to various experimental situations is discussed in detail.