

Санкт–Петербургский государственный университет

*РЫБИНСКИХ Анастасия Сергеевна*

Выпускная квалификационная работа

*Моделирование прохождения электроном  
потенциального барьера*

Уровень образования: бакалавриат

Направление 27.03.03 «Системный анализ и управление»

Основная образовательная программа СВ.5164.2020 «Прикладные компьютерные  
технологии»

Научный руководитель:

доцент, кафедра моделирования

электромеханических и компьютерных систем,

к.ф. - м.н. Антонов Андрей Юрьевич

Рецензент:

доцент, теории систем управления

электрофизической аппаратурой,

к.ф. - м.н. Едаменко Николай Семёнович

Санкт-Петербург

2024 г.

# Оглавление

<b>Оглавление</b>	<b>2</b>
<b>1. Математическая модель потенциального барьера</b>	<b>4</b>
1.1. Граница между проводником и внешней средой . . . . .	4
1.2. Треугольный барьер . . . . .	4
1.3. Барьер сил изображения . . . . .	5
<b>2. Методы вычисления прозрачности</b>	<b>7</b>
2.1. Определение коэффициента прохождения . . . . .	7
2.2. Метод Вентцеля — Крамерса — Бриллюэна . . . . .	7
2.3. Численные методы. Условия сопряжения . . . . .	9
2.4. Векторные вычисления . . . . .	10
2.5. Другие методы . . . . .	11
2.6. Результаты . . . . .	11
<b>3. Моделирование спектров</b>	<b>13</b>
3.1. Внутренние распределения . . . . .	13
3.2. Внешние распределения . . . . .	14
3.3. Переход к статистическому смыслу . . . . .	15
<b>4. Заключение</b>	<b>18</b>
<b>Приложения</b>	<b>21</b>
П.1. Объявление констант и параметров задачи . . . . .	21
П.2. Инициализация векторов и модели барьеров . . . . .	22
П.3. Инициализация и вывод прозрачности барьера . . . . .	23
П.4. Моделирование распределений . . . . .	24
П.5. Инициализация плотности эмиссионного тока и розыгрыш случайных значений энергий . . . . .	26
П.6. Инициализация уравнения Шрёдингера и численное вычисление прозрачности . . . . .	29
П.7. Численный подход к вычислению распределений . . . . .	31

# Введение

В настоящее время изучение квантовых явлений и их применение в различных областях науки и техники являются одними из самых актуальных и перспективных направлений. Одним из важных явлений квантовой механики, которое имеет фундаментальное значение для понимания поведения частиц на микроскопическом уровне, является прохождение электрона через потенциальный барьер. Данный процесс играет ключевую роль в таких явлениях как полевая электронная эмиссия, эффект Джозефсона, альфа-распад и при переносе заряда в разнообразных многослойных твердотельных структурах.

Полевой электронной эмиссией (ПЭЭ) называют процесс испускания электронов под действием сильного электрического поля. Данный механизм не требует предварительного возбуждения частиц, как это происходит в случае фотоэффекта или термоэмиссии [6].

Источники электронов, работающие на принципах ПЭЭ, давно стали прекрасным инструментом изучения как состояния поверхности катода в полевом микроскопе [8], так и анода в сканирующем туннельном микроскопе [10].

Квантовый барьер представляет собой область пространства, где потенциальная энергия становится больше полной энергии частицы, создавая препятствие для ее движения. С точки зрения современной теории, электрон проявляет как корпускулярные, так и волновые свойства. В макроскопическом масштабе, например, в ускорителях заряженных частиц, можно рассматривать заряд как частицу, подчиняющуюся законам движения в форме Ньютона–Эйнштейна. В микроскопическом подходе движение частицы уже следует связать с плотностью потока вероятности, которая может быть определена из решения уравнения Шрёдингера [9]. Это означает, что даже если электрон имеет недостаточную энергию для преодоления барьера, существует в общем случае ненулевая вероятность того, что он всё же проникнет сквозь него.

Изучение туннельного явления не только позволяет лучше понять природу квантовых систем, но и имеет важное практическое значение для различных областей, таких как электроника, оптика, материаловедение и нанотехнологии [4, 8].

Целью настоящей работы является изучение процесса прохождения электрона через потенциальный барьер.

Для достижения цели были поставлены следующие задачи:

- изучить модели потенциальных барьеров;
- провести анализ методов вычисления вероятности прохождения барьера;
- рассмотреть процесс формирования потока частиц на барьер;
- осуществить моделирование вылета частицы со случайным значением энергии.

# 1. Математическая модель потенциального барьера

## 1.1. Граница между проводником и внешней средой

Рассмотрим плоскую границу раздела между металлом и вакуумом.

Электроны в проводниках могут перемещаться между атомами. Тогда тело можно представить как некий остов с расположенными в узлах кристаллической решётки ионами и электронный газ, заполняющий объём тела. Такая устойчивая конфигурация носит название металлической связи. Движение электронов проявляется в явлении электропроводности, когда даже небольшая разница потенциалов между концами электрической цепи вызывает появление электрического тока.

Однако, все электроны не могут покинуть пределы тела без внешнего воздействия, так как ионный остов развалится под действием сил кулоновского отталкивания. Отсюда следует вывод, что на границе твердого тела существует силовое поле, которое препятствует выходу частиц за его пределы. Назовём такой рост потенциальной энергии потенциальной стенкой (или порогом). Электроны могут преодолеть данный порог, чтобы выйти из вещества, и для этого им необходимо сообщить определённую энергию. При  $T = 0$  носители заряда в металле распределены по энергиям от минимальной величины, которую примем равной 0, до значения, называемого энергией Ферми  $\mathcal{E}_F$  (см. напр. [23]). При таких условиях минимальная энергия, необходимая для элементарного эмиссионного акта, называется работой выхода  $\Phi$  [11] — рис. 1.

Существует другой путь получения эмиттировавших электронов — путём полевой эмиссии.

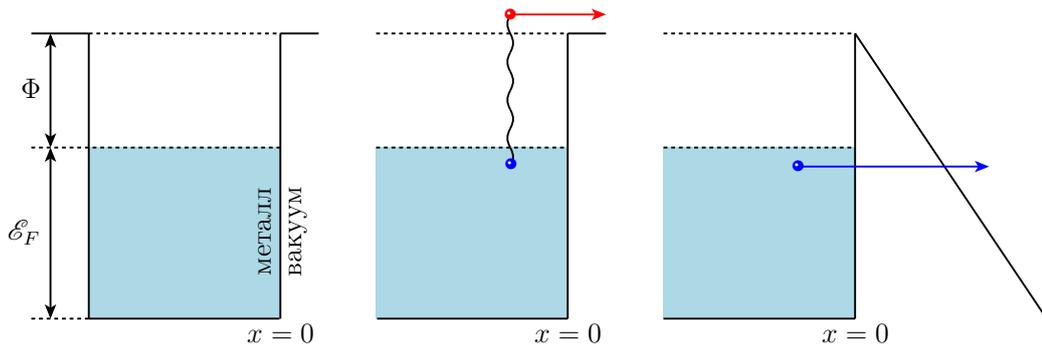


Рис. 1. Потенциальный ящик, порог и барьер.

## 1.2. Треугольный барьер

В отсутствие магнитного поля напряжённость электрического поля  $\mathbf{E}$ , как вектор, может быть выражена через электростатический потенциал  $\varphi$  по формуле  $\mathbf{E} = -\text{grad } \varphi$ . Так как в пределах малых окрестностей поле  $\mathbf{E}$  всегда можно считать однородным, то, при выборе оси  $Ox$  вдоль направления поля и определении константы из того, что потенциальная энергия претерпевает скачок на рассматриваемой границе, получаем следующую зависимость для потенциальной энергии:

$$U(x) = U_0 - eEx,$$

где  $U_0 = \mathcal{E}_F + \Phi$ ,  $e$  — элементарный заряд.

После прохождения барьера будем считать частицу свободной. Тогда функция  $U(x)$  принимает следующий вид:

$$U(x) = \begin{cases} U_0 - eEx, & \text{если } x \in [a, b], \\ 0, & \text{если } x \notin [a, b], \end{cases} \quad (1)$$

где  $a = 0$ , а  $b$  находится из условия  $U(b) = 0$ , т.е.  $b = \frac{U_0}{eE}$ . Выражение (1) будем называть треугольным потенциальным барьером. Именно оно было взято за основу при построении теории ПЭЭ Фаулером и Нордгеймом [14].

### 1.3. Барьер сил изображения

Позднее Нордгейм принял во внимание силу действующую со стороны металла на вылетевший электрон, на которую указывал Шоттки [22], добавив поляризационный член в уравнение для потенциальной энергии [20]. Теперь функция  $U(x)$  приняла вид:

$$U(x) = U_0 - eEx - Q/x,$$

где  $Q = \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0}$ ,  $\epsilon_0$  — электрическая постоянная. Такое поведение потенциальной энергии на границе раздела определим как барьер сил изображения. Для исключения особенности в точке  $x = 0$  можно записать:

$$U(x) = \begin{cases} U_0 - eEx - Q/x, & \text{если } x \in [a, b], \\ 0, & \text{если } x \notin [a, b]. \end{cases} \quad (2)$$

Здесь  $a = \frac{U_0 - \sqrt{U_0^2 - 4eEQ}}{2eE}$  удовлетворяет уравнению  $U(a) = 0$ . После прохождения барьера электрон опять считается свободной частицей, т.е.  $U(x) = 0$  при  $x > b$ , где  $b$  также находится из условия  $U(b) = 0$ . Получаем  $b = \frac{U_0 + \sqrt{U_0^2 - 4eEQ}}{2eE}$ . Можно отметить, что если положить  $Q = 0$ , то значения  $a$  и  $b$  станут соответствовать модели треугольного барьера.

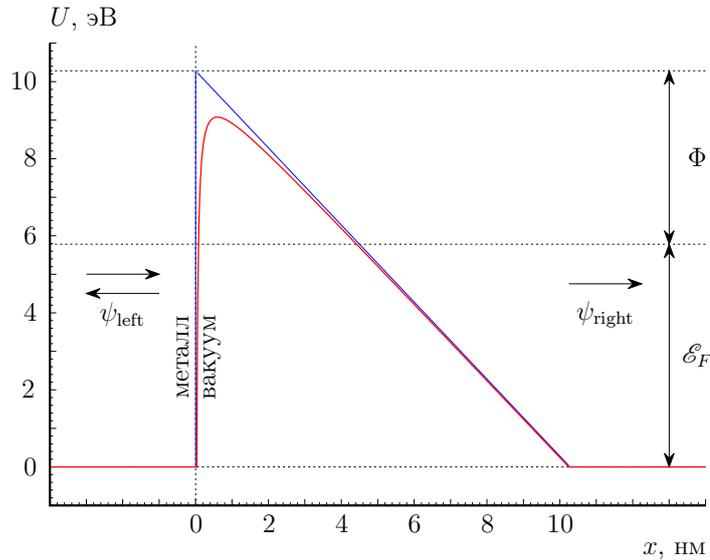


Рис. 2. Модели потенциальных барьеров.

В литературе имеются и другие математические модели поведения потенциальной энергии в прикатодной области (см. напр. [12, 13]). Однако во всех случаях главными факторами, формирующими профиль барьера, оказываются  $E$ ,  $\Phi$ ,  $\epsilon_F$  и поправка на

взаимодействие с поверхностью. В этой связи мы ограничимся рассмотрением только моделей (1) и (2). На рис. 2 представлены треугольный потенциальный барьер и барьер сил изображения для значений  $\mathcal{E}_F = 5.78$  эВ (соответствует вольфраму с одним свободным электроном, поставляемым в зону проводимости),  $\Phi = 4.50$  эВ (некоторое усреднённое значение для вольфрама, примерно соответствующее грани с индексами Миллера 111),  $E = 1.00 \cdot 10^9$  В/м.

## 2. Методы вычисления прозрачности

При прохождении электроном потенциального барьера, важным понятием является прозрачность барьера (коэффициент прохождения), которая определяется как вероятность того, что электрон с определённой энергией сможет преодолеть барьер. Рассмотрим подробнее некоторые варианты вычисления этой вероятности.

### 2.1. Определение коэффициента прохождения

Как известно, процесс прохождения электрона через потенциальный барьер в квантовой механике определяется его волновой функцией, поиск которой происходит через решение уравнения Шрёдингера [9].

Учитывая выделенное направление вдоль оси  $Ox$  можно решать одномерное уравнение, разделив полную энергию  $\mathcal{E}$  на слагаемые, связанные с соответствующими компонентами импульса:  $\mathcal{E} = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m}$ . Будем использовать обозначение  $\mathcal{W} = \frac{p_x^2}{2m}$ . Запишем уравнение Шрёдингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = \mathcal{W}\psi, \quad (3)$$

где  $\hbar$  — постоянная Дирака,  $m$  — масса частицы. Отражённая и падающая волны при  $U(x) = 0$  (внутри потенциального ящика) описываются функцией

$$\psi_{\text{left}} = A_{\text{in}} \exp[ikx] + A_{\text{ref}} \exp[-ikx], \quad k = \frac{p_x}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m\mathcal{W}}. \quad (4)$$

Если мы будем рассматривать движение справа от потенциального барьера, то получим аналогичную ситуацию:

$$\psi_{\text{right}} = A_{\text{tr}} \exp[ikx]. \quad (5)$$

Поскольку потенциальная энергия далее не изменяется, отражённая волна  $\psi_{\text{right}}(x)$  в  $\psi$  отсутствует. Волны  $\psi_{\text{left}}$  и  $\psi_{\text{right}}$  схематично показаны на рис. 2.

Коэффициент прозрачности потенциального барьера определяется как отношение плотностей потоков прошедшей и падающей волн [9]:

$$j_{\text{in}} = \frac{\hbar}{m} |A_{\text{in}}|^2 k, \quad j_{\text{tr}} = \frac{\hbar}{m} |A_{\text{tr}}|^2 k, \quad D(\mathcal{W}) = \frac{j_{\text{tr}}}{j_{\text{in}}} = \left| \frac{A_{\text{tr}}}{A_{\text{in}}} \right|^2 = \frac{1}{|A_{\text{in}}|^2}. \quad (6)$$

Так как данная величина зависит от отношения амплитуд, то можем положить  $A_{\text{tr}} = 1$ . Если же использовать коэффициент отражения выраженный через параметры внутри тела, то получим:

$$j_{\text{in}} = \frac{\hbar}{m} |A_{\text{in}}|^2 k, \quad j_{\text{ref}} = \frac{\hbar}{m} |A_{\text{ref}}|^2 k, \quad R(\mathcal{W}) = \frac{j_{\text{ref}}}{j_{\text{in}}} = \left| \frac{A_{\text{ref}}}{A_{\text{in}}} \right|^2,$$

$$D(\mathcal{W}) = 1 - R(\mathcal{W}) = 1 - \left| \frac{A_{\text{ref}}}{A_{\text{in}}} \right|^2.$$

### 2.2. Метод Вентцеля — Крамерса — Бриллюэна

В квазиклассическом приближении, также известном как метод ВКБ (Вентцеля — Крамерса — Бриллюэна), волновая функция получается с использованием разложения по степеням  $\hbar$  [9]. Использование такого подхода применимо при медленно меняющейся потенциальной энергии и вдали от классических точек поворота, определяемых

условием  $U(x) = \mathcal{W}$ . Однако, метод хорошо себя зарекомендовал и за пределами своих ограничений [15].

Согласно методу ВКБ, коэффициент прохождения потенциального барьера имеет вид

$$D(\mathcal{W}) = \exp \left[ -\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{U(x) - \mathcal{W}} dx \right]. \quad (7)$$

Пределы интегрирования  $x_i$  должны быть установлены из условия  $U(x_i) = \mathcal{W}$ . Для треугольного барьера

$$x_1 = 0, \quad x_2 = \frac{A}{eE},$$

где дополнительно введено обозначение

$$A = \mathcal{E}_F + \Phi - \mathcal{W}.$$

При этом не рассматриваются энергии  $\mathcal{W}$ , превышающие высоту барьера  $U_m = U_0$ , т. е. выражение (7) используется для  $\mathcal{W} \in [0, U_m]$ . В случае, когда  $\mathcal{W} > U_m$ , полагается, что  $D(\mathcal{W}) = 1$ . Интегрирование (7) внутри  $[0, U_m]$  проводится элементарно. Получается выражение:

$$D(\mathcal{W}) = \exp \left[ -\frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar eE} A^{\frac{3}{2}} \right].$$

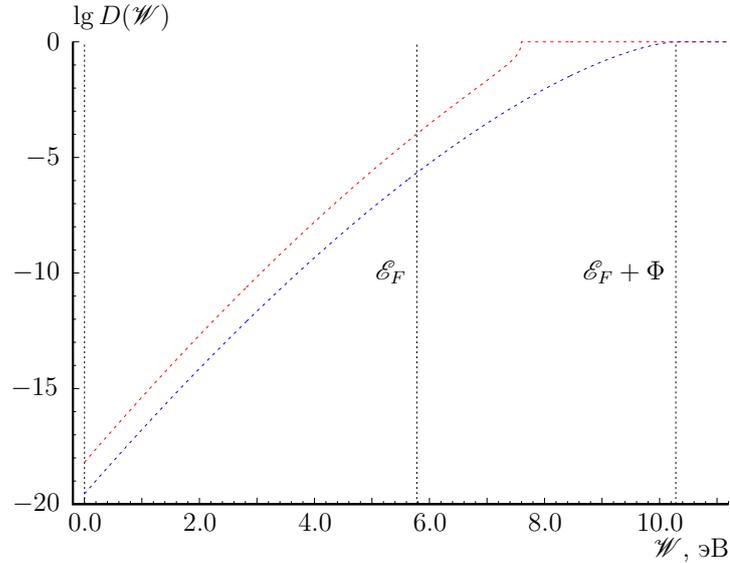


Рис. 3. Коэффициент прохождения, метод ВКБ.

Для барьера сил изображения:

$$x_1 = \frac{A - \sqrt{A^2 - 4eEQ}}{2eE}, \quad x_2 = \frac{A + \sqrt{A^2 - 4eEQ}}{2eE}.$$

Теперь надо найти максимум потенциальной энергии исходя из условия  $U'(x) = 0$ :

$$-eE + \frac{Q}{x_m^2} = 0, \quad x_m = \frac{Q}{eE}, \quad U_m = U(x_m) = \mathcal{E}_F + \Phi - 2\sqrt{eEQ}.$$

Интеграл в (7) можно вычислить численным образом или через полные нормальные эллиптические интегралы Лежандра 1-го и 2-го рода [16, 20]:

$$\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{A - eEx - \frac{Q}{x}} dx =$$

$$= \frac{\sqrt{2}}{3eE} A \sqrt{A + \sqrt{A^2 - 4eEQ}} \left[ E(y) - \frac{4eEQ}{A(A + \sqrt{A^2 - 4eEQ})} K(y) \right],$$

$$y = \frac{2\sqrt{A^2 - 4eEQ}}{A + \sqrt{A^2 - 4eEQ}},$$

$$E(y) = \int_0^1 \frac{\sqrt{1 - y^2 t^2}}{\sqrt{1 - t^2}} dt, \quad K(y) = \int_0^1 \frac{dt}{\sqrt{1 - y^2 t^2} \sqrt{1 - t^2}}.$$

Необходимо отметить, что работа [20] содержит опечатки при сведении интеграла из 7 к интегралам Лежандра, что не сказалось на окончательном результате, который заслужил мировое признание в данной области. Также определение интегралов Лежандра может немного отличаться (см. [1]), что стоит учитывать при использовании встроенных в языки программирования библиотек.

Зависимости коэффициента прохождения, вычисленные квазиклассическим методом, представлены на рис. 3 в логарифмической шкале. Синяя линия отвечает треугольному барьеру, красная линия — барьеру сил изображения. Можно обратить внимание на существенное количественное различие, объясняемое тем фактом, что барьер, учитывающий взаимодействие с поверхностью, не только ниже для туннельного электрона, но и уже. При этом качественная зависимость от энергии имеет схожий характер.

### 2.3. Численные методы. Условия сопряжения

Численные подходы не связаны ограничениями, свойственными методу ВКБ.

Поскольку волновую функцию считаем известной в области  $x > b$ , поставим задачу Коши с начальными условиями в точке  $b$  для уравнения Шрёдингера, используя условия сопряжения. Из вида уравнения (3) легко понять, что волновая функция должна быть непрерывной и иметь непрерывную производную (даже если потенциальная энергия терпит разрыв, как в случае треугольного барьера). Тогда:

$$\begin{cases} \psi_{\text{left}}(0) = \psi(0), \\ \psi'_{\text{left}}(0) = \psi'(0), \\ \psi(b) = \psi_{\text{right}}(b), \\ \psi'(b) = \psi'_{\text{right}}(b). \end{cases} \quad (8)$$

Первая пара уравнений служит для определения амплитуд при падающей и отражённой волнах. Вторая пара уравнений позволяет поставить начальные условия в области  $[0, b]$ . В данном случае удобно задавать первые условия в точке  $x = 0$ , а не  $x = a$ , так как это упрощает последующие вычисления.

## 2.4. Векторные вычисления

Можно определить коэффициент прозрачности сразу для нескольких значений энергий  $\mathscr{W} = \mathscr{W}_l$ ,  $l = 1, 2, \dots, n$ . Такие вычисления называются векторными:

$$(\eta_{1+2(l-1)}, \eta_{2+2(l-1)})^T = (\psi_l, \psi'_l).$$

Преобразованное уравнение Шрёдингера будет иметь вид системы с матрицей, блочного типа. Рассмотрим один блок:

$$\begin{cases} \eta'_{1+2(l-1)} = \eta_{2+2(l-1)}, \\ \eta'_{2+2(l-1)} = \frac{2m}{\hbar^2} (U(x) - \mathscr{W}_l) \eta_{1+2(l-1)}. \end{cases}$$

Начальные условия будут иметь следующий вид:

$$\begin{cases} \eta_{1+2(l-1)}(b) = \exp[ik_l b], \\ \eta_{2+2(l-1)}(b) = ik_l \exp[ik_l b]; \end{cases}$$

где  $k_l = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m\mathscr{W}_l}$ .

Также для упрощения вычислений можно перейти к вещественному представлению с помощью разделения волновой функции на мнимую и вещественную часть. Получаем:

$$(\eta_{1+4(l-1)}, \eta_{2+4(l-1)}, \eta_{3+4(l-1)}, \eta_{4+4(l-1)})^T = (\operatorname{Re} \psi_l, \operatorname{Re} \psi'_l, \operatorname{Im} \psi_l, \operatorname{Im} \psi'_l).$$

Рассмотрим систему из представления уравнения Шрёдингера, которая соответствует одному блоку:

$$\begin{cases} \eta'_{1+4(l-1)} = \eta_{2+4(l-1)}, \\ \eta'_{2+4(l-1)} = \frac{2m}{\hbar^2} (U(x) - \mathscr{W}_l) \eta_{1+4(l-1)}, \\ \eta'_{3+4(l-1)} = \eta_{4+4(l-1)}, \\ \eta'_{4+4(l-1)} = \frac{2m}{\hbar^2} (U(x) - \mathscr{W}_l) \eta_{3+4(l-1)}. \end{cases} \quad (9)$$

Начальные условия из второй пары (8) примут следующий вид:

$$\begin{aligned} \eta_{1+4(l-1)}(b) &= \cos k_l b, \\ \eta_{2+4(l-1)}(b) &= -k_l \sin k_l b, \\ \eta_{3+4(l-1)}(b) &= \sin k_l b, \\ \eta_{4+4(l-1)}(b) &= k_l \cos k_l b. \end{aligned} \quad (10)$$

В итоге имеем задачу Коши (9)–(10), которую можно решать любым подходящим для этого способом. Ввиду того, что задача не является жёсткой [18], можно использовать любые явные одношаговые методы типа Рунге–Кутты [17]. Обозначив  $(\eta_1, \eta_2, \eta_3, \eta_4) = (\eta_1(0), \eta_2(0), \eta_3(0), \eta_4(0))$ , решая первую пару (8), для скалярного подхода получаем:

$$\begin{aligned} |A_{\text{in}}|^2 &= \frac{1}{4} \left[ \left( \eta_1 + \frac{\eta_4}{k} \right)^2 + \left( \eta_3 - \frac{\eta_2}{k} \right)^2 \right], \\ |A_{\text{ref}}|^2 &= \frac{1}{4} \left[ \left( \eta_1 - \frac{\eta_4}{k} \right)^2 + \left( \eta_3 + \frac{\eta_2}{k} \right)^2 \right]. \end{aligned}$$

Теперь мы можем использовать определение (6) для вычисления коэффициента электроном с энергией  $\mathscr{W}_l$  потенциального барьера любой формы.

## 2.5. Другие методы

Естественно, кроме одношаговых методов к решению задачи о прохождении электроном потенциального барьера можно привлечь многошаговые алгоритмы или экстраполяционные схемы [17]. Последние позволяют в ходе вычислений менять не только шаг интегрирования уравнения, но и порядок точности. Однако, это выглядит нецелесообразным ввиду того, что наша задача не проявляет каких-либо жёстких свойств, и от решения не приходится ждать появления вычислительных артефактов.

Стоит также упомянуть распространённый матричный подход к решению подобного рода задач. Потенциальный барьер на границе источника электронов можно представить в виде кусочно-постоянной функции, как это делается в методе прямоугольников для вычисления определённого интеграла. Тогда на каждом подынтервале решение уравнения Шрёдингера будет представлять собой комбинацию экспонент с вещественным или мнимым показателем, обобщая известную задачу о прохождении прямоугольного барьера. Дальнейшее развитие данного подхода приводит к аналогу метода трапеций, а волновая функция уже аппроксимируется функциями Эйри [19]. Не выглядит невозможным и вариант наследованный от формулы Симпсона, поскольку тогда тоже можно получить решение исследуемого уравнения в терминах гипергеометрических функций.

Можно встретить среди методов решения уравнения (3) с условиями сопряжения (8) и метод пристрелки, когда известной полагается функция  $\psi_{\text{right}}$ . В этом случае амплитуды при волнах подбираются таким образом, чтобы удовлетворить (8). Поскольку в нашем случае удастся поставить задачу Коши непосредственно, использование метода пристрелки выглядит необоснованным и будет отнимать лишние вычислительные ресурсы.

Отметим, что уравнение (3) является уравнением вида  $y'' = f(x, y, y')$ . Существуют модификации численных методов, специально разработанные для прямого решения уравнений такого вида. Для методов типа Рунге–Кутты данные модификации носят название методы типа Рунге–Кутты–Нюстрёма. Можно преобразовать данное уравнение в нормальную форму Коши и применить стандартные методы Рунге–Кутты, но методы Нюстрёма, являются более предпочтительными в нашем случае, так как правая часть уравнения не зависит явным образом от первой производной  $y'$ . Этот подход позволяет более эффективно решать уравнения, подобные уравнению Шрёдингера, и избежать дополнительных шагов преобразования [5].

## 2.6. Результаты

Для вычисления коэффициента прохождения на языке Python в среде PyCharm была написана программа реализующая метод ВКБ и численный подход с использованием явных методов типа Рунге–Кутты для потенциальных барьеров (1) и (2). На рис. 4 представлены зависимости функции  $D$  от энергии  $\mathcal{W}$ . Треугольники отвечают численному решению задачи Коши для уравнения Шрёдингера с моделью треугольного барьера, шарики — с моделью барьера сил изображения. Пунктиром изображены соответствующие величины, вычисленные методом ВКБ. Значения параметров:  $\mathcal{E}_F = 5.78$  эВ,  $\Phi = 4.50$  эВ,  $E = 5.00 \cdot 10^9$  В/м. Графики демонстрируют существенное количественное различие, что можно увидеть и для малых значений энергии после перехода к логарифмической шкале. Однако, известно, что после поправок, введённых Нордгеймом [20], качественное поведение дифференциальной вольт-амперной характеристики (зависимости плотности тока эмиссии от напряжённости  $E$ ) фактически не изменилось. В частности, и по этой причине метод измерения работы выхода  $\Phi$ , основанный на ПЭЭ,

заслужил репутацию как одного из точных [11].

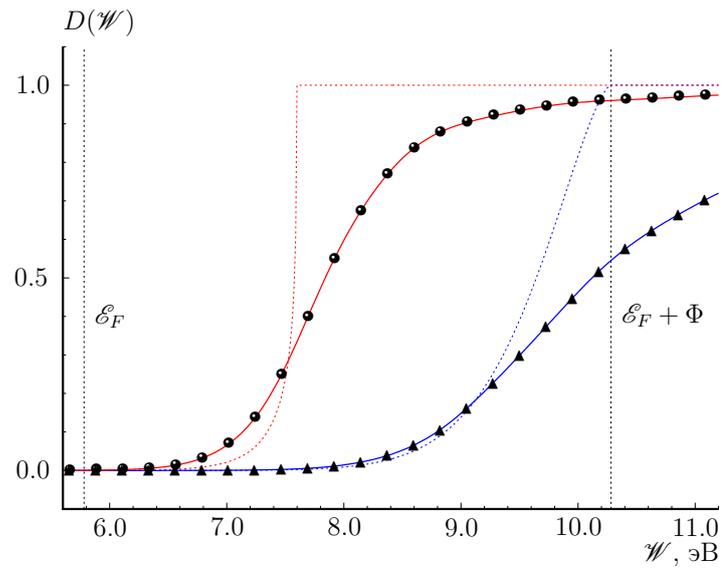


Рис. 4. Коэффициент прохождения.

### 3. Моделирование спектров

Мы уже говорили о том, что, благодаря принципу запрета Паули, электроны в проводниках при  $T = 0$  распределены по энергиям в интервале  $[0, \mathcal{E}_F]$ . При  $T > 0$  появляются носители заряда с энергией большей  $\mathcal{E}_F$ . Моделирование энергетических спектров электронов является важным аспектом изучения процессов эмиссии, в том числе и под действием сильных электрических полей [24].

#### 3.1. Внутренние распределения

Оригинальная теория полевой электронной эмиссии Фаулера–Нордгейма основывается на распределении плотности потока частиц по энергиям, связанных с нормальной составляющей импульса относительно поверхности (в наших обозначениях  $\mathcal{W}$ ). Методика экспериментального получения таких спектров нетривиальна. По этой причине в работе [25] предлагается к рассмотрению поток частиц, формируемый с указанием значений полной энергии  $\mathcal{E}$ . Сравнение этих двух спектров дает возможность оценить не только начальные скорости эмитированных частиц, но и их угловой разброс. Полученная информация имеет важное значение для моделирования движения частиц и формирования пространственного заряда в межэлектродном пространстве [3].

Рассмотрим в качестве физической модели плоскую металлическую поверхность полевого катода, с которой вылетают электроны. В декартовой системе координат ось  $x$  указывает в направлении внешней нормали к поверхности. Отсчет энергии ведется от энергии покоя электрона в металле, т. е. можем положить  $\mathcal{E} \in [0, +\infty)$ . Концентрация электронов в металле зависит от произведения плотности доступных энергетических уровней на вероятность того, что электрон займет определённое состояние, что определяется статистикой Ферми–Дирака:

$$n(\mathcal{E}) d\mathcal{E} = \frac{4\pi(2m)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \frac{\sqrt{\mathcal{E}} d\mathcal{E}}{1 + \exp\left[\frac{\mathcal{E} - \mathcal{E}_F}{k_B T}\right]},$$

где  $k_B$  — постоянная Больцмана. Число электронов, обладающих полными энергиями в диапазоне  $[\mathcal{E}, \mathcal{E} + d\mathcal{E}]$  и энергиями  $\mathcal{W}$ , соответствующими нормальной составляющей импульса в диапазоне  $[\mathcal{W}, \mathcal{W} + d\mathcal{W}]$ , которые падают на единицу площади катода изнутри за единицу времени, задается формулой:

$$N(\mathcal{E}) d\mathcal{W} d\mathcal{E} = \frac{4\pi m}{h^3} \frac{d\mathcal{W} d\mathcal{E}}{1 + \exp\left[\frac{\mathcal{E} - \mathcal{E}_F}{k_B T}\right]}. \quad (11)$$

Можно отметить отсутствие явной зависимости от  $\mathcal{W}$ , которая, тем не менее, продолжает оставаться частью  $\mathcal{E}$ .

Интегрирование выражения (11) по  $\mathcal{W}$  от 0 до  $\mathcal{E}$  позволяет получить распределение плотности потока по полным энергиям:

$$p_{\text{int}}(\mathcal{E}) d\mathcal{E} = \frac{4\pi m}{h^3} \frac{\mathcal{E} d\mathcal{E}}{1 + \exp\left[\frac{\mathcal{E} - \mathcal{E}_F}{k_B T}\right]}. \quad (12)$$

Аналогично, интегрирование (11) по  $\mathcal{E}$  от  $\mathcal{W}$  до  $+\infty$  позволяет получить распределение плотности потока по нормальным компонентам энергиям:

$$\nu_{\text{int}}(\mathcal{W}) d\mathcal{W} = \frac{4\pi m k_B T}{h^3} \ln\left(1 + \exp\left[-\frac{\mathcal{W} - \mathcal{E}_F}{k_B T}\right]\right) d\mathcal{W}. \quad (13)$$

Последнее выражение после упрощения для случая  $T = 0$  и было использовано в работе [14]. Плотности потоков (12) и (13) характеризуют статистические свойства электронов внутри катода. Помимо рассмотренных ранее параметров эмиссии, здесь появляется температура, которая, конечно, может меняться, как при соблюдении определённых режимов работы катода, так и вследствие выделения джоулева тепла при протекании по источнику тока, а также благодаря эффекту Ноттингема [21].

Внутренние энергетические распределения представлены на рис. 5 для температуры  $T = 300$  К. Прежде чем анализировать данный график, надо понимать, спектры получены после интегрирования выражения (11), где  $\mathcal{E}$  и  $\mathcal{W}$  являются зависимыми величинами.

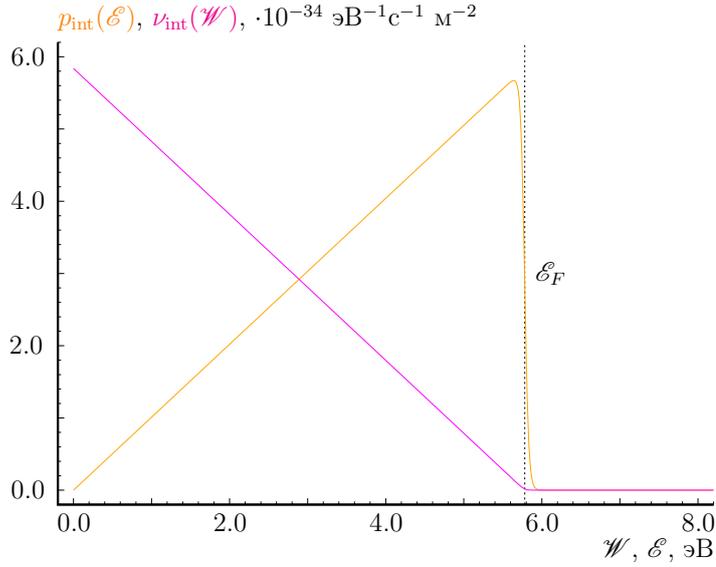


Рис. 5. Внутренние спектры.

### 3.2. Внешние распределения

Теперь домножим функцию  $N(\mathcal{E})$  на коэффициент прохождения электроном потенциального барьера и снова проведем интегрирование:

$$p_{\text{ext}}(\mathcal{E}) d\mathcal{E} = N(\mathcal{E}) d\mathcal{E} \int_0^{\mathcal{E}} D(\mathcal{W}) d\mathcal{W}. \quad (14)$$

Таким образом, получили внешнюю плотность потока из интервала полных энергий. Второе распределение получаем, умножив функцию  $\nu_{\text{int}}$  на коэффициент прохождения потенциального барьера:

$$\nu_{\text{ext}}(\mathcal{W}) d\mathcal{W} = \frac{4\pi m k_B T}{h^3} D(\mathcal{W}) \ln \left( 1 + \exp \left[ -\frac{\mathcal{W} - \mathcal{E}_F}{k_B T} \right] \right) d\mathcal{E}_x. \quad (15)$$

Данное выражение носит название распределения электронов в выходящем потоке по  $\mathcal{W}$ .

При умножении выражения (14) или (15) на элементарный заряд и интегрировании по всевозможным значениям энергии можно получить плотность эмиссионного

тока  $j$  (плотность потока заряда):

$$j = e \iint_{\Omega} N(\mathcal{E}) D(\mathcal{W}) d\mathcal{W} d\mathcal{E} = e \int_0^{+\infty} p_{\text{ext}}(\mathcal{E}) d\mathcal{E} = e \int_0^{+\infty} \nu_{\text{ext}}(\mathcal{W}) d\mathcal{W}.$$

Область интегрирования  $\Omega = \{(\mathcal{W}, \mathcal{E}) : 0 \leq \mathcal{W} \leq \mathcal{E} < +\infty\}$ .

### 3.3. Переход к статистическому смыслу

Надо отдать себе отчёт в том, что элементарный эмиссионный акт представляет собой случайное событие. Тогда значения энергий  $\mathcal{E}^*$  и  $\mathcal{W}^*$ , с которыми электрон покинул пределы твёрдого тела представляют собой случайные величины (зависимые в общем случае). Можно с помощью плотности тока определить плотности распределений вероятностей. Если нас интересуют только значения  $\mathcal{E}^*$ , или только значения  $\mathcal{W}^*$ , то соответствующие плотности примут вид [7]:

$$\tilde{p}_{\text{ext}}(\mathcal{E}) = \frac{e}{j} p_{\text{ext}}(\mathcal{E}), \quad \tilde{\nu}_{\text{ext}}(\mathcal{W}) = \frac{e}{j} \nu_{\text{ext}}(\mathcal{W}) d\mathcal{W}.$$

Таким образом автоматически будут выполнены условия нормировки:

$$\int_0^{+\infty} \tilde{p}_{\text{ext}}(\mathcal{E}) d\mathcal{E} = \int_0^{+\infty} \tilde{\nu}_{\text{ext}}(\mathcal{W}) d\mathcal{W} = 1.$$

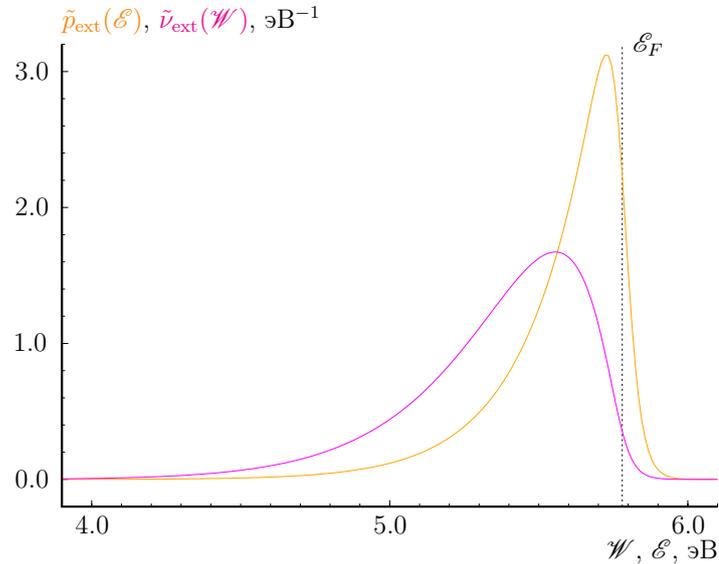


Рис. 6. Внешние распределения.

Внешние распределения представлены на рис. 6 для численного решения задачи о коэффициенте прохождения для барьера сил изображения. Приводить данные с методом ВКБ и треугольным барьером не имело смысла, поскольку после нормализации внешние энергетические спектры становятся практически неразличимыми при использованных параметрах.

Розыгрыш случайных значений энергии можно проводить, руководствуясь теоремой об обратной функции распределения и решая уравнения относительно верхнего предела интегралов [2]:

$$\int_0^{\mathcal{E}^*} \tilde{p}_{\text{ext}}(\mathcal{E}) d\mathcal{E} = \gamma_1, \quad \int_0^{\mathcal{W}^*} \tilde{v}_{\text{ext}}(\mathcal{W}) d\mathcal{W} = \gamma_2,$$

где  $\gamma_i$  — независимые реализации непрерывной случайной величины, имеющей равномерное распределение внутри интервала  $[0, 1)$ .

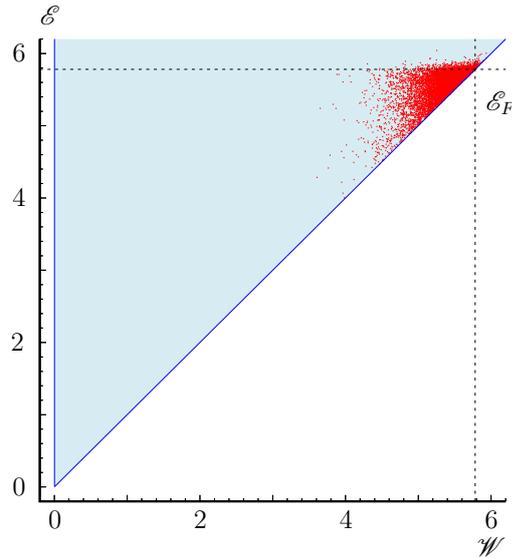


Рис. 7. Случайные значения энергий.

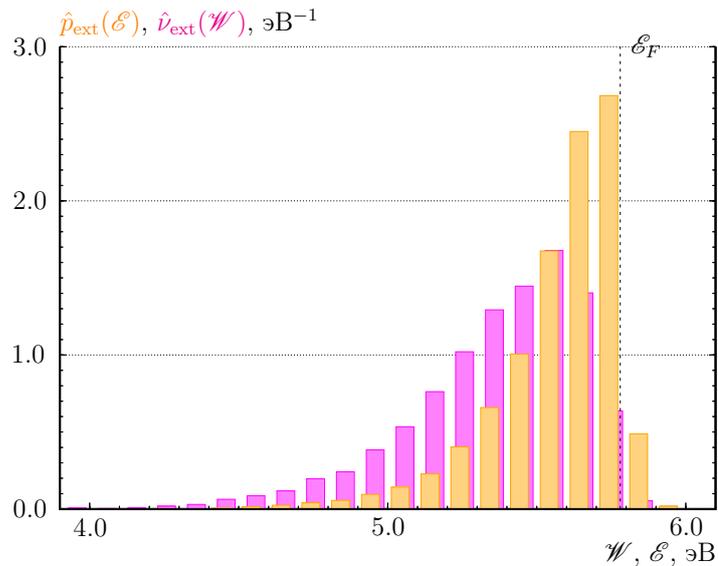


Рис. 8. Выборочные распределения.

В случае, когда нас интересуют оба значения  $\mathcal{E}^*$  и  $\mathcal{W}^*$ , их нельзя разыгрывать независимо. С помощью того же нормировочного множителя  $(e/j)$  функция 11 после

умножения на коэффициент прохождения становится совместной плотность распределения необходимых значений энергии. Розыгрыш случайных реализаций необходимо проводить с использованием условных функций и плотностей распределения [2]. В работе [7] показано, что если  $\mathcal{W}^*$  определить из уравнения

$$\int_0^{\mathcal{W}^*} \tilde{\nu}_{\text{ext}}(\mathcal{W}) d\mathcal{W} = \gamma_1,$$

то  $\mathcal{E}^*$  получается аналитически:

$$\mathcal{E}^* = \mathcal{E}_F - k_B T \ln \left[ \left( 1 + \exp \left[ -\frac{\mathcal{W}^* - \mathcal{E}_F}{k_B T} \right] \right)^{\gamma_2} - 1 \right].$$

Случайные значения энергии представлены на рис. 7 для модели с треугольным барьером и квазиклассическим вычислением коэффициента его прохождения. Соответствующие гистограммы приведены на рис. 8. Видно, что данные статистического эксперимента, содержащего выборки объёма 10 000 элементов (значений  $\mathcal{E}^*$  и  $\mathcal{W}^*$ ) соответствуют внешним плотностям распределения частиц.

## 4. Заключение

В результате проделанной работы была рассмотрена задача о прохождении электроном потенциального барьера на границе проводника с вакуумом в ходе процесса полевой электронной эмиссии.

После литературного обзора среди возможных математических моделей барьера были выбраны две классические: треугольный и барьер сил изображения. Причина — существенное отличие в их форме, которое сказалось на количественных результатах.

Были рассмотрены варианты вычисления коэффициента прохождения электроном рассмотренных барьеров с помощью квазиклассического метода Вентцеля–Крамерса–Бриллюэна и посредством численного подхода к решению задачи Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений, к которой сводится основное уравнение нерелятивистской квантовой теории — уравнение Шрёдингера. Алгоритмы решения были реализованы на языке программирования Python в среде PyCharm с использованием встроенных библиотек, что потребовало их дополнительного изучения и анализа.

Дальнейшая разработка алгоритмов и их реализации касалась формирования плотностей потоков заряженных частиц внутри эмиссионного источника и снаружи. На основе данных энергетических спектров были проанализированы плотности распределения вероятностей получить в ходе одного эмиссионного акта случайные значения полной энергии электрона и частичной энергии, связанной с нормальной компонентой импульса. Установлено, что после такого перехода, представляющего собой нормализацию спектров, различие между используемыми моделями барьеров и способами вычисления коэффициента прохождения нет практически никакой разницы для использованных параметров, отвечающих комнатной температуре и вольфрамовому образцу катода.

Можно сделать вывод, что качественно верное описание теории полевой электронной эмиссии на основе метода ВКБ и простого треугольного барьера можно использовать как экспресс-подход для моделирования случайных значений энергии, с которыми отдельно взятая частица покидает поверхность эмиттера. Данные значения можно использовать при анализе траекторий в эмиссионной системе с полевым источником. Во всяком случае это касается тех вариантов, когда вкладом термически возбуждённых электронов в плотность эмиссионного тока можно пренебречь. Данный момент требует дальнейшего изучения, если заводить речь о перспективах дальнейших исследований.

Поставленные в начале исследования задачи можно считать выполненными, а цель работы достигнутой.

Полученные результаты и выводы могут быть полезны для дальнейшего развития теоретических моделей и практических приложений, связанных с прохождением электронов через потенциальные барьеры, и способствовать углубленному пониманию физических процессов в квантовой механике.

## Список литературы

1. Абрамовиц М., Стиган И. Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами. М.: Наука, 1979. 832 с.
2. Антонов А. Ю., Вараюнь М. И. Моделирование случайных величин с заданным законом распределения. Теоремы и алгоритмы. СПб: Лань, 2023. 196 с.
3. Антонов А. Ю., Демченко Н. С. Построение электронных траекторий в эмиссионной системе // Вестник СПбГУ, Сер. 10, Вып. 3, 2010, с. 3–12.
4. Бугаев А. С., Виноградова Е. М., Егоров Н. В., Шешин Е. П. Автоэлектронные катоды и пушки. Долгопрудный: Издательский Дом «Интеллект», 2017. 288 с.
5. Демченко Н. С. Исследование методов Ньюстрёма для решения уравнения Шрёдингера // Процессы управления и устойчивость: Труды 41-й международной научной конференции аспирантов и студентов / под ред. Н. В. Смирнова, Г. Ш. Тамасяна. СПб.: Издат. Дом С.-Петербур. гос. ун-та, 2010, с. 141–146.
6. Добрецов Л. Н., Гомоюнова М. В. Эмиссионная электроника. М.: Наука, 1966. 546 с.
7. Егоров Н. В., Антонов А. Ю., Демченко Н. С. Статистическое моделирование энергетических спектров электронов полевой эмиссии // Журнал технической физики, Т. 87, Вып. 2, 2017, с. 175–181.
8. Егоров Н. В., Шешин Е. П. Автоэлектронная эмиссия. Принципы и приборы. Долгопрудный: Издательский Дом «Интеллект», 2011. 704 с.
9. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. Т. 3. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. 4-е издание. М.: Наука, 1989. 776 с.
10. Миронов В. Л. Основы сканирующей зондовой микроскопии. Нижний Новгород: Российская академия наук, Институт физики микроструктур, 2004. 110 с.
11. Фоменко В. С. Эмиссионные свойства материалов. Справочник. Изд. 4-е, перераб. и дополн. Киев: Наукова Думка, 1981. 340 с.
12. Bardeen J. The Image and Wan der Waals Forces at a Metallic Surface // Physical Review, Vol. 58, 1940, pp. 727–726.
13. Cutler P. H., Gibbons J. J. Model for the Surface Potential Barrier and the Periodic Deviations in the Schottky Effect // Physical Review, Vol. 11, №2, 1958, pp. 394–402.
14. Fowler R. H., Nordheim L.W. Electron emission in intense electric fields // Proceedings of the Royal Society A, Vol. 119, №781, 1928, pp. 173–181.
15. Friedrich H., Trost J. Working with WKB waves far from the semiclassical limit // Physics Reports, Vol. 397, 2004, pp. 359–449.
16. Good R. H. Elliptic integrals, the forgotten functions // European Journal of Physics, Vol. 22, 2001, pp. 119–126.
17. Hairer E., Nørsett S. P., Wanner G. Solving ordinary differential equations I. Nonstiff problems. 2<sup>nd</sup> edition. Springer, 1992. 528 pp.
18. Hairer E., Wanner G. Solving ordinary differential equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems. 2<sup>nd</sup> edition. Springer, 1996. 628 pp.
19. Jensen K. L., Ganguly A. K. Numerical simulation of field emission and tunneling: A comparison of the Wigner function and transmission coefficient approaches // Journal of Applied Physics, Vol. 73, №9, 1993, pp. 4409–4427.
20. Nordheim L.W. The effect of the image force on the emission and reflexion of electrons by metals // Proceedings of the Royal Society A, Vol. 121, №788, 1928, pp. 626–639.
21. Paulini J., Klein T., Simon G. Thermo-field emission and the Nottingham effect // Journal of Physics D, Vol. 26, 1993, pp. 1310–1315.
22. Schottky W. Über kalte und warme Elektronenentladungen // Zeitschrift für Physik A, Vol. 14, №1, 1923, pp. 63–106.
23. Sodha M. S., Dubey P. K. Dependence of Fermi energy on size // Journal of Physics D,

Vol. 3, №2, 1970, pp. 139–144.

24. Tumareva T. A., Ivanov V. A., Kirsanova T. S. The investigation of the electron energy distribution and the structure of the thin films and microcrystals by field emission methods // Applied Surface Science, Vol. 87/88, 1995, pp. 18–23.
25. Young R. D. Theoretical Total-Energy Distribution of Field-Emitted Electrons // Physical Review, Vol. 113, №1, 1959, pp. 110–114.

# Приложения

## П.1. Объявление констант и параметров задачи

Листинг П.1. Объявление констант и параметров задачи.

```
1 import math
2 import numpy as np
3 import matplotlib.pyplot as plt
4 from scipy.integrate import solve_ivp
5 from scipy.integrate import quad
6
7 hp_1 = 6.62607015E-34 # Постоянная Планка
8 hp_2 = 1.054571817E-34
9 qe = 1.602176634E-19 # Элементарный заряд
10 me = 9.1093837015E-31 # Масса электрона
11 eps0 = 8.85418782E-12
12 kb = 1.380649E-23 # Постоянная Больцмана
13 Phi = 4.5 * qe # Работа выхода (эВ)
14 EF = 5.78 * qe # Энергия Ферми (эВ)
15 E = 5.0e9 # Напряжённость внешнего электрического поля (В/м)
16 T = 300 # абсолютная температура К
17 Q = qe ** 2 / (16.0 * math.pi * eps0)
18 A = EF + Phi
19 a_tri = 0
20 b_tri = A / (qe * E)
21 a_im = (A - math.sqrt(A ** 2 - 4 * qe * Q * E)) / (2 * qe * E)
22 b_im = (A + math.sqrt(A ** 2 - 4 * qe * Q * E)) / (2 * qe * E)
23 N_E = 1000
24 En_min = 0.0
25 En_max = A * 1.1
26 nu_ext_norm_num_tri = [0] * (N_E + 1) # Векторы плотности распределения по
   W
27 nu_ext_norm_num_im = [0] * (N_E + 1)
28 En = [0] * (N_E + 1) # Векторы энергий
29 Wn = [0] * (N_E + 1)
30 normA_num_tri = 1.0 # нормировочные константы
31 normA_num_im = 1.0
32 normB_num_tri = 1.0
33 normB_num_im = 1.0
```

## П.2. Инициализация векторов и модели барьеров

Листинг П.2. Инициализация векторов и модели барьеров.

```
1 def my_init():
2     dE = (En_max - En_min) / N_E
3     global normA_num_tri, normA_num_im, normB_num_tri, normB_num_im
4     normA_num_tri = quad(nu_ext_num_tri, En_min, En_max)[0] # нормировочные
5     константы
6     normA_num_im = quad(nu_ext_num_im, En_min, En_max)[0]
7     normB_num_tri = quad(p_ext_num_tri, En_min, En_max)[0]
8     normB_num_im = quad(p_ext_num_im, En_min, En_max)[0]
9     print(str(normA_num_tri) + '\t' + str(normB_num_tri))
10    print(str(normA_num_im) + '\t' + str(normB_num_im))
11    for i in range(0, N_E):
12        En[i] = En_min + dE * i
13        Wn[i] = En_min + dE * i
14        nu_ext_norm_num_tri[i] = nu_ext_num_tri(Wn[i]) / normA_num_tri
15        nu_ext_norm_num_im[i] = nu_ext_num_im(Wn[i]) / normA_num_im
16
17    # Треугольный барьер
18    def U_tri(x):
19        if a_tri < x < b_tri:
20            U_tri = A - qe * E * x
21        else:
22            U_tri = 0
23    return U_tri
24
25
26    # Барьер сил изображения
27    def U_im(x):
28        if a_im < x < b_im:
29            U_im = A - qe * E * x - Q / x
30        else:
31            U_im = 0
32
33
34    # Печать значений треугольного барьера и барьера сил изображения
35    @cache
36    def print_U(Nx):
37        x1 = -(b_tri - a_tri) / 10 + a_tri
38        x2 = b_tri + (b_tri - a_tri) / 10
39        dx = (x2 - x1) / Nx
40        with open('U.dat', 'w') as file:
41            for i in range(0, Nx):
42                x = x1 + i * dx
43                file.write(str(x * 1E9) + '\t' + str(U_tri(x) / qe) + '\t' + str(U_im(x) /
44                    qe) + '\n')
```

### П.3. Инициализация и вывод прозрачности барьера

Листинг П.3. Инициализация и вывод прозрачности барьера.

```
1 # Прозрачность треугольного барьера
2 @cache
3 def D_WKB_tri(W):
4     if W < A:
5         D = np.exp((( -4 * np.sqrt(2 * me)) / (3 * hp_2 * qe * E)) * (A - W) **
6                    (3/2))
7     else:
8         D = 1
9
10    return D
11
12 # Прозрачность барьера сил изображения + переменная + интеграл через
13    эллиптические функции
14 @cache
15 def y(W):
16    return (( 2 * np.sqrt( ( A - W ) ** 2 - 4 * qe * E * Q ) ) /
17            ( A - W + np.sqrt( ( A - W ) ** 2 - 4 * qe * E * Q ) ))
18
19 @cache
20 def integral_im(W):
21    return (( A - W ) * np.sqrt( A - W + np.sqrt( ( A - W ) ** 2 - 4 * qe * E *
22            Q ) ) *
23            ( ellipse( y( W ) ** 2 ) - 4 * qe * E * Q * ellipk( y( W ) ** 2 ) /
24              ( ( A - W ) * ( ( A - W ) + np.sqrt( ( A - W ) ** 2 - 4 * qe * E * Q ) ) ) )
25            )
26
27 @cache
28 def D_WKB_im(W):
29    if W < A - 2 * math.sqrt(qe * E * Q):
30        D = np.exp( - 2 * np.sqrt(2 * me) / hp_2 * math.sqrt(2) / (3 * qe * E) *
31                integral_im(W) )
32    else:
33        D = 1
34    return D
35
36
37 # Печать коэффициента прохождения
38 @cache
39 def print_D_WKB():
40    with open('D_WKB.dat', 'w') as file:
41        for i in range(0, N_E):
42            file.write(str(Wn[i] / qe) + '\t' + str(D_WKB_tri(Wn[i])) + '\t' +
43                      str(D_WKB_im(Wn[i])) + '\n')
```

## П.4. Моделирование распределений

Листинг П.4. Моделирование распределений.

```
1  # Внутренний поток по энергиям W
2  @cache
3  def nu_int(W):
4  nu_int_temp = 0
5  if T < 1e-6:
6  if W < A:
7  nu_int_temp = (4 * math.pi * me / hp_1 ** 3) * (EF - W)
8  else:
9  nu_int_temp = np.exp((EF - W) / (kb * T))
10 if nu_int_temp < 1e-6:
11 nu_int_temp = nu_int_temp * 4 * math.pi * me * kb * T / (hp_1 ** 3)
12 else:
13 if nu_int_temp > 1e6:
14 nu_int_temp = (4 * math.pi * me / hp_1 ** 3) * (EF - W)
15 else:
16 nu_int_temp = 4 * math.pi * me * kb * T / (hp_1 ** 3) * np.log(1 +
17     nu_int_temp)
18
19 return nu_int_temp
20
21 # Печать внутреннего потока по энергиям W
22 def print_nu_int():
23 with open('nu_int.dat', 'w') as file:
24 for i in range(0, N_E):
25 file.write(str(Wn[i] / qe) + '\t' + str(nu_int(Wn[i])) + '\n')
26
27
28 # Внешний поток по энергиям W
29 @cache
30 def nu_ext_WKB_tri(W):
31 return nu_int(W) * D_WKB_tri(W)
32
33
34 @cache
35 def nu_ext_WKB_im(W):
36 return nu_int(W) * D_WKB_im(W)
37
38
39 # Печать внешнего потока по энергиям W
40 def print_nu_ext_WKB():
41 with open('nu_ext_WKB.dat', 'w') as file:
42 for i in range(0, N_E):
43 file.write(str(Wn[i] / qe) + '\t' +
44     str(nu_ext_WKB_tri(Wn[i])/normA_WKB_tri*qe) + '\t' +
45     str(nu_ext_WKB_im(Wn[i])/normA_WKB_im*qe) + '\n')
46
47
48 # Внутренний поток по энергиям E
49 @cache
50 def p_int(En):
51 p_int_temp = np.exp((En - EF) / (kb * T))
52 p_int_temp = (4 * math.pi * me / (hp_1 ** 3)) * (En / (1 + p_int_temp))
53
54 return p_int_temp
```

```

54
55 # Печать внутреннего потока по энергиям E
56 def print_p_int():
57     with open('p_int.dat', 'w') as file:
58         for i in range(0, N_E):
59             file.write(str(En[i] / qe) + '\t' + str(p_int(En[i])) + '\n')
60
61
62 # Внешний поток по энергиям E
63 @cache
64 def p_ext_WKB_tri(En):
65     result, error = quad(D_WKB_tri, 0, En)
66     if En <= En_min:
67         result = 0
68     else:
69         result = p_int(En) * result / En
70     return result
71
72
73 @cache
74 def p_ext_WKB_im(En):
75     result, error = quad(D_WKB_im, 0, En)
76     if En <= En_min:
77         result = 0
78     else:
79         result = p_int(En) * result / En
80     return result
81
82
83 # Печать внешнего потока по энергиям W
84 def print_p_ext_WKB():
85     with open('p_ext_WKB.dat', 'w') as file:
86         for i in range(0, N_E):
87             file.write(str(En[i] / qe) + '\t' +
88                 str(p_ext_WKB_tri(En[i])/normB_WKB_tri*qe) + '\t' +
89                 str(p_ext_WKB_im(En[i])/normB_WKB_im*qe) + '\n')

```

## П.5. Инициализация плотности эмиссионного тока и розыгрыш случайных значений энергий

Листинг П.5. Инициализация плотности эмиссионного тока и розыгрыш случайных значений энергий.

```
1  # Плотность эмиссионного тока
2  @cache
3  def j_nu_tri(W):
4      result, error = quad(nu_ext_WKB_tri, 0, En_max)
5      if W <= En_min:
6          result = 0
7      else:
8          result = qe * result
9      return result
10
11
12  @cache
13  def j_p_tri(W):
14      result, error = quad(p_ext_WKB_tri, 0, En_max)
15      if W <= En_min:
16          result = 0
17      else:
18          result = qe * result
19      return result
20
21
22  @cache
23  def j_p_im(W):
24      result, error = quad(p_ext_WKB_im, 0, En_max)
25      if W <= En_min:
26          result = 0
27      else:
28          result = qe * result
29      return result
30
31
32  @cache
33  def j_nu_im(W):
34      result, error = quad(nu_ext_WKB_im, 0, En_max)
35      if W <= En_min:
36          result = 0
37      else:
38          result = qe * result
39      return result
40
41
42  @cache
43  def nu_ext_volna_tri(W):
44      if j_nu_tri(W) <= En_min:
45          return 0
46      else:
47          return (qe / j_nu_tri(W)) * nu_ext_WKB_tri(W)
48
49
50  @cache
51  def nu_ext_volna_im(W):
52      if j_nu_im(W) <= En_min:
53          return 0
```

```

54 else:
55     return (qe / j_nu_im(W)) * nu_ext_WKB_im(W)
56
57
58 @cache
59 def p_ext_volna_tri(W):
60     if j_p_tri(W) <= En_min:
61         return 0
62     else:
63         # print("p_ext_volna_tri:", qe, j_p_tri(W), p_ext_WKB_tri(W))
64         return (qe / j_p_tri(W)) * p_ext_WKB_tri(W)
65
66
67 @cache
68 def p_ext_volna_im(W):
69     if j_p_im(W) <= En_min:
70         return 0
71     else:
72         return (qe / j_p_im(W)) * p_ext_WKB_im(W)
73
74
75 def rand_W_E(func_1, gamma):
76     h = (En_max - En_min) / N_E
77     i_1 = 1
78     W_1 = En_min
79     sum_1 = 0.5 * func_1(W_1) * h
80     while sum_1 < gamma[0]:
81         sum_1 += func_1(W_1 + i_1 * h) * h
82         i_1 += 1
83     W_z = W_1 + (i_1 - 1) * h
84     E_z2 = EF - kb * T * math.log((1 + math.exp((EF - W_z) / (kb * T)))) **
85         gamma[1] - 1)
86     return gamma, np.array([W_z, E_z2])
87
88 def print_W_E_tri():
89     with open('W_E_WKB_tri.dat', 'w') as file:
90         for i in range(10000):
91             g, vec = rand_W_E(nu_ext_volna_tri, gamma[i])
92             file.write(str(g[0]) + '\t' + str(g[1]) + '\t' + str(vec[0] / qe) + '\t' +
93                 str(vec[1] / qe) + '\n')
94
95 def print_W_E_im():
96     with open('W_E_WKB_im.dat', 'w') as file:
97         for i in range(10000):
98             g, vec = rand_W_E(nu_ext_volna_im, gamma[i])
99             file.write(str(g[0]) + '\t' + str(g[1]) + '\t' + str(vec[0] / qe) + '\t' +
100                 str(vec[1] / qe) + '\n')
101
102 def generate_gamma():
103     gamma = list()
104     for i in range(10000):
105         gamma.append([random.random(), random.random()])
106     return np.array(gamma)
107
108
109 my_init()
110 print_U(1000)
111 print_D_WKB()

```

```
112 print_nu_int()
113 print_nu_ext_WKB()
114 print_p_int()
115 print_p_ext_WKB()
116 gamma = generate_gamma()
117 print_W_E_tri()
118 print()
119 print_W_E_im()
```

## П.6. Инициализация уравнения Шрёдингера и численное вычисление прозрачности

Листинг П.6. Инициализация уравнения Шрёдингера и численное вычисление прозрачности.

```
1 def func(t, s, u_func, W):
2     # norm_t = (t - t_min) / (t_max - t_min)
3     # W = E_n_max * norm_t
4     U = u_func(t)
5     c = (U - W) * 2 * me / hp_2 ** 2
6     s0 = s[1]
7     s1 = c * s[0]
8     s2 = s[3]
9     s3 = c * s[2]
10
11     return [s0, s1, s2, s3]
12
13
14 def D_num_tri(W):
15     hi_1 = np.sqrt(2 * me * W) / hp_2
16     y0 = np.array([
17         math.cos(hi_1 * b_tri),
18         -hi_1 * math.sin(hi_1 * b_tri),
19         math.sin(hi_1 * b_tri),
20         hi_1 * math.cos(hi_1 * b_tri)
21     ])
22     t_eval = np.linspace(b_tri, 0, 2)
23     psi = solve_ivp(fun=func, t_span=[b_tri, 0], y0=y0, method='RK45',
24                     t_eval=t_eval, args=(U_tri, W), rtol=1.0e-8, atol=1.0e-8)
25     n1 = psi.y[0][1]
26     n2 = psi.y[1][1]
27     n3 = psi.y[2][1]
28     n4 = psi.y[3][1]
29
30     if hi_1 != 0:
31         A_in_sq = 1 / 4 * ((n1 + n4 / hi_1) ** 2 + (n3 - n2 / hi_1) ** 2)
32     else:
33         return 0
34
35
36 def D_num_im(W):
37     hi_1 = np.sqrt(2 * me * W) / hp_2
38
39     y0 = np.array([
40         math.cos(hi_1 * b_im),
41         -hi_1 * math.sin(hi_1 * b_im),
42         math.sin(hi_1 * b_im),
43         hi_1 * math.cos(hi_1 * b_im)
44     ])
45     t_eval = np.linspace(b_im, 0, 2)
46     psi = solve_ivp(fun=func, t_span=[b_im, 0], y0=y0, method='RK45',
47                     t_eval=t_eval, args=(U_im, W), rtol=1.0e-8, atol=1.0e-8)
48     n1 = psi.y[0][1]
49     n2 = psi.y[1][1]
50     n3 = psi.y[2][1]
51     n4 = psi.y[3][1]
52     if hi_1 != 0:
53         A_in_sq = 1 / 4 * ((n1 + n4 / hi_1) ** 2 + (n3 - n2 / hi_1) ** 2)
```

```
53 return 1 / A_in_sq
54 else:
55 return 0
56
57
58 def print_D_num():
59 with open('D_num.dat', 'w') as file:
60 for i in range(0, N_E):
61 file.write(str(Wn[i] / qe) + '\t' + str(D_num_tri(Wn[i])) + '\t' +
            str(D_num_im(Wn[i])) + '\n')
```

## П.7. Численный подход к вычислению распределений

Листинг П.7. Численный подход к вычислению распределений.

```
1  def nu_int_num(W):
2  nu_int_temp = 0
3  if T < 1e-6:
4  if W < A:
5  nu_int_temp = (4 * math.pi * me / hp_1 ** 3) * (EF - W)
6  else:
7  nu_int_temp = np.exp((EF - W) / (kb * T))
8  if nu_int_temp < 1e-6:
9  nu_int_temp = nu_int_temp * 4 * math.pi * me * kb * T / (hp_1 ** 3)
10 else:
11 if nu_int_temp > 1e6:
12 nu_int_temp = (4 * math.pi * me / hp_1 ** 3) * (EF - W)
13 else:
14 nu_int_temp = 4 * math.pi * me * kb * T / (hp_1 ** 3) * np.log(1 +
15     nu_int_temp)
16
17 return nu_int_temp
18
19 def nu_ext_num_tri(W):
20 return nu_int_num(W) * D_num_tri(W)
21
22
23 def nu_ext_num_im(W):
24 return nu_int_num(W) * D_num_im(W)
25
26
27 # Печать внешнего потока по энергиям W
28 def print_nu_ext_num():
29 with open('nu_ext_num.dat', 'w') as file:
30 for i in range(0, N_E):
31 file.write(str(Wn[i] / qe) + '\t' +
32     str(nu_ext_num_tri(Wn[i]) / normA_num_tri * qe) + '\t' +
33     str(nu_ext_num_im(Wn[i]) / normA_num_im * qe) + '\n')
34
35 # Внутренний поток по энергиям E
36 def p_int_num(W):
37 p_int_temp = np.exp((W - EF) / (kb * T))
38 p_int_temp = (4 * math.pi * me / (hp_1 ** 3)) * (W / (1 + p_int_temp))
39
40 return p_int_temp
41
42 # Внешний поток по энергиям E
43 def p_ext_num_tri(En):
44 result, error = quad(D_num_tri, 0, En)
45 if En <= En_min:
46 result = 0
47 else:
48 result = p_int_num(En) * result / En
49 return result
50
51
52 def p_ext_num_im(W):
53 result, error = quad(D_num_im, 0, W)
```

```

54 if W <= En_min:
55     result = 0
56 else:
57     result = p_int_num(W) * result / W
58 return result
59
60
61 # Печать внешнего потока по энергиям W
62 def print_p_ext_num():
63     with open('p_ext_num.dat', 'w') as file:
64         for i in range(0, N_E):
65             file.write(str(En[i] / qe) + '\t' +
66                        str(p_ext_num_tri(En[i])/normB_num_tri*qe) + '\t' +
67                        str(p_ext_num_im(En[i])/normB_num_im*qe) + '\n')
68
69 my_init()
70 print_D_num()
71 print_nu_ext_num()
72 print_p_ext_num()

```