

ОСОБЕННОСТИ ТУННЕЛИРОВАНИЯ В КОНТАКТАХ МАЛОЙ ПЛОЩАДИ

*А. И. Хачатуров**

*Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина
Национальной академии наук Украины
83114, Донецк, Украина*

Поступила в редакцию 27 декабря 2002 г.

Рассмотрена возможность проявления квантования поперечной составляющей волнового вектора электрона в туннельных контактах малых поперечных размеров. Показано, что если энергия Ферми одного из электродов туннельного контакта невелика (порядка 1 эВ), а один из его поперечных размеров мал (порядка нескольких сотен ангстрем), то квантование поперечной составляющей волнового вектора туннелирующих электронов становится вполне заметным на общем фоне зависимости дифференциальной туннельной проводимости от напряжения. Отмечено, что возможность проявления стоячих волн в туннельных контактах должна учитываться при проведении исследований спектроскопических квазичастичных возбуждений, основанных на анализе зависимости второй производной d^2I/dV^2 от напряжения V .

PACS: 73.40.Gk, 73.40.Rw

1. ВВЕДЕНИЕ

Эффекты размерного квантования в тонких металлических пленках исследовались методом электронного туннелирования достаточно подробно [1–9]. Однако во всех этих работах, как теоретических, так и экспериментальных, рассматривалась традиционная конфигурация туннельного контакта, при которой двумерные зоны тонкопленочного электрода располагались параллельно плоскости туннельного барьера. Отметим, что такое расположение не является единственно возможным. При исследовании высокотемпературных сверхпроводников и магниторезистивных материалов широко используются туннельные контакты с малыми поперечными размерами — прижимные контакты, один из электродов которых — тонкое острие; контакты, образованные путем разлома тонкой пленки на гибкой подложке (break junction); контакты, у которых тонкопленочный электрод примыкает торцевой частью к противоположному массивному электроду. Во всех этих случаях при соответствующих условиях можно ожидать квантования одной из поперечных составляющих

волнового вектора, при этом спектр туннелирующих электронов может представлять собой набор двумерных зон, расположенных перпендикулярно плоскости туннельного перехода. Отметим, что квантование поперечной составляющей волнового вектора электрона может происходить и в самом изолирующем слое. Действительно, поперечная составляющая волнового вектора электрона, в отличие от его перпендикулярной составляющей, внутри барьера остается действительной (при зеркальном туннелировании она сохраняет свое значение во всех трех компонентах туннельного контакта), и если в направлении туннелирования волновая функция электрона экспоненциально затухает, то в направлениях, параллельных плоскости барьера, она по-прежнему имеет волновой вид. Поэтому при малых поперечных размерах туннельного перехода можно ожидать появления стоячих волн внутри барьера. В настоящей работе мы покажем, что в таких контактах при удачном сочетании барьерных параметров и электронных характеристик электродов квантование спектра туннелирующих электронов должно находить свое отражение в дифференциальной туннельной проводимости $\sigma(V) = dI/dV$.

*E-mail: khach@sts.dipt.donetsk.ua

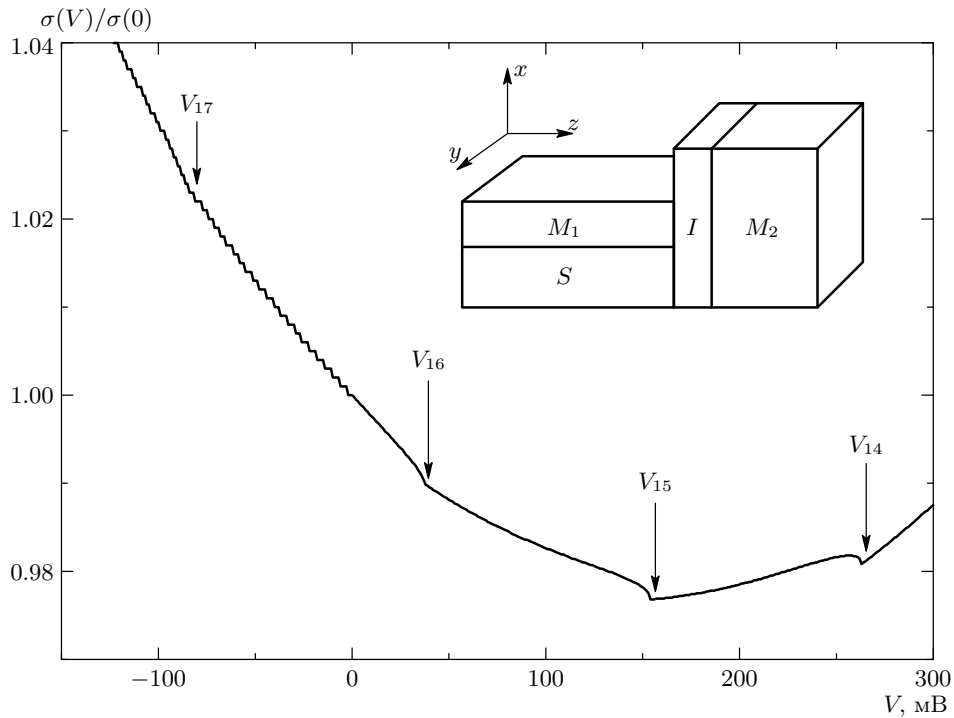


Рис. 1. Дифференциальная проводимость туннельного контакта при условии квантования поперечной составляющей волнового вектора в одном из электродов. Энергии Ферми электродов равны $E_{F_1} = 1$ эВ и $E_{F_2} = 1.3$ эВ. Толщина размерно-квантованного электрода $L = 100$ Å. Параметры прямоугольного потенциального барьера: высота $\varphi_1 = \varphi_2 = 4$ мэВ, толщина $d = 10$ Å. На вставке показана схема исследуемого контакта: M_1 — тонкопленочный размерно-квантованный электрод; M_2 — обычный металлический электрод; I — изолирующий слой; S — подложка

2. ФОРМУЛИРОВКА МОДЕЛИ

Для определенности рассмотрим туннельный контакт, образованный тонкой металлической пленкой, примыкающей торцевой частью к массивному металлическому электроду (см. вставку на рис. 1). Контакты такой конфигурации использовались, например, в работе [10]. Расчет туннельного тока проводим по схеме, аналогичной применявшейся в работе [7]. Будем исходить из тех же предположений о природе туннельного барьера и характере прохождения туннельного тока, а именно, считаем, что потенциальный барьер имеет трапециевидную форму

$$\phi(z, V) = \phi_1 + (\phi_2 - eV - \phi_1)z/d$$

и при туннелировании сохраняется полная энергия E электрона и проекция $k_{||}$ его волнового вектора на плоскость барьера. Иными словами, мы полагаем, что туннелирование является упругим и имеет зеркальный характер. Будем считать, что как пленочный, так и массивный электрод изготовлены из

обычных ферми-металлов с квадратичным законом дисперсии, а для определения прозрачности барьера можно использовать приближение ВКБ (см., например, формулу (4) в [7]). Для простоты полагаем, что эффективная масса равна массе свободного электрона во всех трех компонентах туннельного контакта. Сначала рассмотрим случай, когда энергия Ферми начального электрода меньше энергии Ферми конечного, $E_{F_1} < E_{F_2}$. Для начала будем считать тонкопленочный электрод однородным по толщине L . При $T = 0$ число N заполненных двумерных зон квазинепрерывного спектра этого электрода равно целой части от $\sqrt{E_F/W}$, где $W = (\pi\hbar)^2/2mL^2$ — энергия, соответствующая первому разрешенному значению $k_{x_1} = \pi/2L$ поперечной компоненты волнового вектора. На рис. 2 изображена одна из таких подзон. Подадим напряжение смещения $eV < E_{F_1} - E_n$ на рассматриваемую туннельную структуру. При этом электроны начального электрода, расположенные в полукольце, которое образуют линии пересечения поверхностей постоянной энергии $E_{F_1} = \text{const}$ и $E_{F_1} - eV = \text{const}$ с плоскостью $E_x = E_n = \text{const}$, дви-

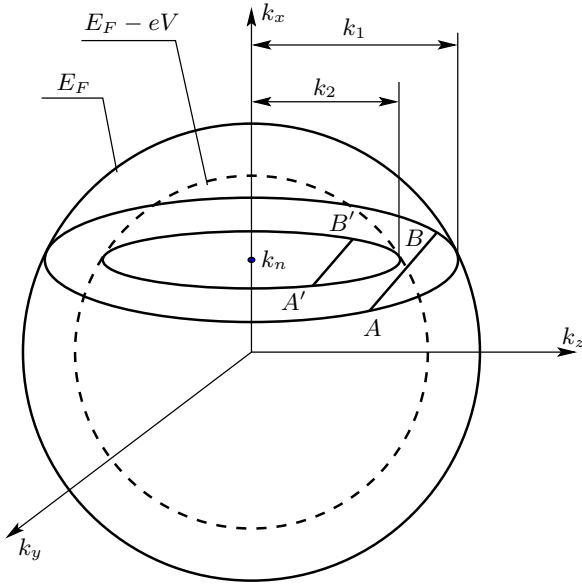


Рис. 2. Обратное пространство тонкопленочного размерно-квантованного электрода в случае $E_{F1} < E_{F2}$. При квантовании поперечной составляющей k_z волнового вектора двумерные подзоны располагаются перпендикулярно плоскости туннельного перехода

жущиеся к барьеру $k_z > 0$, имеют возможность туннелировать в противоположный электрод (рис. 2). Величину их вклада в туннельный ток можно рассматривать как разность токовых вкладов от полукруга радиуса

$$k_1 = \sqrt{2m(E_{F1} - E_n)}/\hbar$$

и полукруга радиуса

$$k_2 = \sqrt{2m(E_{F1} - E_n - eV)}/\hbar.$$

В отличие от [7], в рассматриваемом случае электроны, принадлежащие одной подзоне, обладают разными групповыми скоростями и разными вероятностями туннелирования $P(E_z, V)$. Эти величины одинаковы у частиц, расположенных на хордах AB и $A'B'$ (рис. 2). Вклад в туннельный ток от электронов, лежащих на хорде AB , можно найти, умножив их число на групповую скорость, вероятность туннелирования $P(E_z, V)$ и заряд электрона:

$$J_{AB} = \frac{ek_z P(E_z, V)}{\pi m} \sqrt{2m(E_{F1} - E_n - E_z)}.$$

Интегрируя по k_z и переходя от интегралов по импульсам к интегралам по энергиям E_z , находим туннельный ток, вносимый n -й подзоной:

$$J_n(V) = K \left[\int_0^{E_{F1} - E_n} P(E_z, V) \sqrt{E_{F1} - E_n - E_z} dE_z - \int_0^{E_{F1} - eV - E_n} P(E_z, V) \sqrt{E_{F1} - E_n - E_z - eV} dE_z \right], \quad (1)$$

$eV < E_{F1} - E_n,$

где $K = e\sqrt{2m}/(\pi\hbar)^2$. При $eV \geq E_{F1} - E_n$ все электроны n -й подзоны имеют возможность принять участие в туннелировании и поэтому

$$J_n(V) = K \int_0^{E_{F1} - E_n} P(E_z, V) \times \sqrt{E_{F1} - E_n - E_z} dE_z, \quad eV > E_{F1} - E_n. \quad (2)$$

Дифференцируя $J(V)$ по V , находим аналитические выражения для вклада $\sigma_n(V)$, вносимого в туннельную проводимость $\sigma(V)$ n -й подзоной в случае $eV < E_{F1} - E_n$:

$$\sigma_n(V) = K [A_n(V) - B_n(V) + C_n(V) + D_n(V)], \quad (3)$$

где

$$A_n(V) = \int_0^{E_{F1} - E_n} \frac{\partial P}{\partial V} \sqrt{E_{F1} - E_n - E_z} dE_z,$$

$$B_n(V) = \int_0^{E_{F1} - E_n - eV} \frac{\partial P}{\partial V} \sqrt{E_{F1} - E_n - E_z - eV} dE_z,$$

$$C_n(V) = \int_0^{E_{F1} - E_n - eV} e \frac{\partial P}{\partial E_z} \sqrt{E_{F1} - E_n - E_z - eV} dE_z,$$

$$D_n(V) = eP(0, V) \sqrt{E_{F1} - E_n - eV}.$$

Для $eV > E_{F1} - E_n$ имеем

$$\sigma_n(V) = K A_n(V). \quad (4)$$

Частная производная $\partial P/\partial E_z$ в выражениях для C_n появилась в результате интегрирования по частям, которое проводилось с целью избавления от несобственного интеграла. Большинство энергетических величин — E_{F1} , E_z , E_n , а также ϕ_1 и ϕ_2 — в наших расчетах отсчитывается от дна зоны проводимости начального электрода. Исключение составляют фермиевская энергия E_{F2} , которая отсчитывается от дна зоны проводимости конечного электрода,

и разность потенциалов eV . Отметим, что значения ϕ_1 и ϕ_2 связаны с обычно используемыми высотами барьера, измеряемыми от уровня Ферми, соотношениями $\varphi_1 = \phi_1 - E_{F_1}$ и $\varphi_2 = \phi_2 - E_{F_1}$.

Полная дифференциальная проводимость находится суммированием по всем двумерным подзонам:

$$\sigma(V) = 2 \sum_{n=1}^N \sigma_n(V).$$

Если фермиевская энергия начального электрода превышает соответствующую энергию противоположного, то ситуация несколько усложняется. Дело в том, что в этом случае не все электроны, лежащие в энергетическом интервале от E_{F_1} до $E_{F_1} - eV$, могут удовлетворить условиям зеркального туннелирования, т. е. не все они способны одновременно сохранить при туннелировании величину полной энергии E и параллельного импульса k_{\parallel} . По этой причине зоны, у которых $E_n > E_{F_2}$, при $eV < E_n - E_{F_2}$ не вносят вкладов в туннельный ток. Туннелирование из этих зон оказывается возможным лишь при $eV > E_n - E_{F_2}$. При этом туннелирующие электроны располагаются на заштрихованном сегменте круга радиуса k_1 , образованном секущей

$$k_z = k_{min} = \sqrt{2m(E_{F_1} - E_{F_2} - eV)} / \hbar$$

(рис. 3а). Вклады в туннельный ток от этих зон равны

$$\begin{aligned} J_n(V) &= 0, \quad eV < E_n - E_{F_2}, \\ J_n(V) &= \\ &= K \int_{E_{F_1} - E_{F_2} - eV}^{E_{F_1} - E_n} P(E_z, V) \sqrt{E_{F_1} - E_n - E_z} dE_z, \end{aligned} \quad (5)$$

$$E_n - E_{F_2} < eV < E_{F_1} - E_{F_2}.$$

Соответствующие выражения для дифференциальной проводимости имеют вид

$$\begin{aligned} \sigma_n(V) &= 0, \quad eV < E_n - E_{F_2}, \\ \sigma_n(V) &= K [A_{1n}(V) + D_{1n}(V)], \end{aligned} \quad (6)$$

$$E_n - E_{F_2} < eV < E_{F_1} - E_{F_2},$$

где

$$A_{1n}(V) = \int_{E_{F_1} - E_{F_2} - eV}^{E_{F_1} - E_n} \frac{\partial P}{\partial V} \sqrt{E_{F_1} - E_n - E_z} dE_z,$$

$$D_{1n}(V) = eP(E_{F_1} - E_{F_2} - eV, V) \sqrt{E_{F_2} + eV - E_n}.$$

При $eV \geq E_{F_1} - E_{F_2}$ выражения для туннельного тока и дифференциальной проводимости этих зон совпадают соответственно с выражениями (2) и (4).

Зоны, удовлетворяющие условию $E_n < E_{F_2}$, вносят вклад в туннельный ток, начиная с нулевых напряжений. В этом случае электроны, принимающие участие в туннельном процессе, располагаются в кольцевом сегменте (рис. 3б)

$$\begin{aligned} J_n(V) &= \\ &= K \left[\int_{E_{F_1} - E_{F_2} - eV}^{E_{F_1} - E_n} P(E_z, V) \sqrt{E_{F_1} - E_n - E_z} dE_z - \right. \\ &\quad \left. - \int_{E_{F_1} - E_{F_2} - eV}^{E_{F_1} - eV - E_n} P(E_z, V) \sqrt{E_{F_1} - E_n - E_z - eV} dE_z \right], \end{aligned}$$

$$eV < E_{F_1} - E_{F_2}. \quad (7)$$

Дифференцируя (7) по напряжению V , получаем

$$\begin{aligned} \sigma_n(V) &= \\ &= K [A_{1n}(V) - B_{1n}(V) + C_{1n}(V) + D_{1n}(V)], \end{aligned} \quad (8)$$

$$eV < E_{F_1} - E_{F_2},$$

где

$$B_{1n}(V) = \int_{E_{F_1} - E_{F_2} - eV}^{E_{F_1} - E_n - eV} \frac{\partial P}{\partial V} \sqrt{E_{F_1} - E_n - E_z - eV} dE_z,$$

$$\begin{aligned} C_{1n}(V) &= \\ &= \int_{E_{F_1} - E_{F_2} - eV}^{E_{F_1} - E_n - eV} e \frac{\partial P}{\partial E_z} \sqrt{E_{F_1} - E_n - E_z - eV} dE_z. \end{aligned}$$

При напряжении $eV > E_{F_1} - E_{F_2}$ выражение для туннельного тока для этих зон совпадает с (1), а при $eV > E_{F_1} - E_n$ — с (2). Соответственно, вычисление дифференциальной туннельной проводимости при $eV > E_{F_1} - E_{F_2}$ проводится по формуле (3), а при $eV > E_{F_1} - E_n$ — по формуле (4).

3. ОБСУЖДЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

Наши расчеты показывают, что для обычных металлов с энергией Ферми порядка нескольких электронвольт особенности, связанные с наличием стоячих волн в тонкопленочном электроде, в дифференциальной туннельной проводимости не проявляются. Однако для электродов с энергией Ферми порядка одного электронвольта они становятся вполне

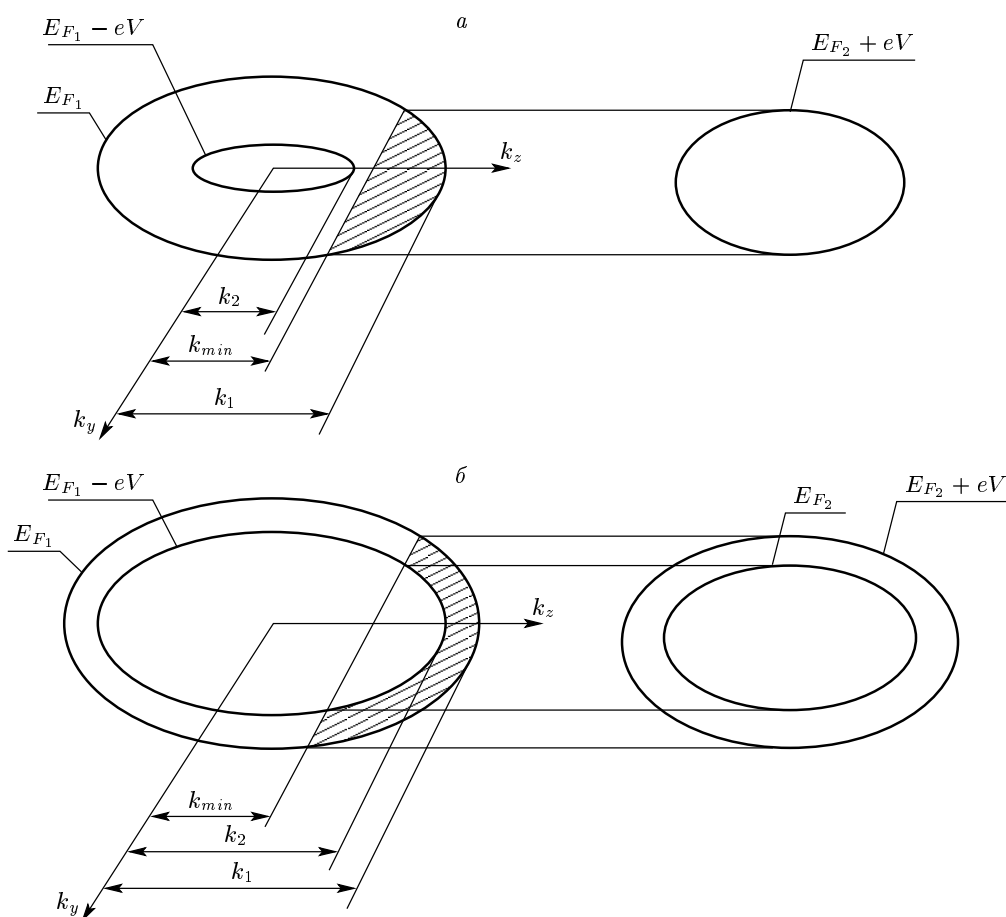


Рис. 3. Обратное пространство тонкопленочного размерно-квантованного электрода в случае $E_{F_1} > E_{F_2}$: *a* — при $E_n > E_{F_2}$ электроны n -й подзоны получают возможность принять участие в туннельном процессе, начиная лишь с напряжений $eV \geq E_{F_2} - E_n$; все они расположены в заштрихованном сегменте; *б* — при $E_n < E_{F_2}$ туннелирование возможно с нулевых напряжений; туннелирующие электроны расположены в заштрихованной части кольца

заметными. Так, на рис. 1 представлены результаты расчета дифференциальной проводимости туннельного контакта с толщиной размерно-квантованного электрода $L = 100 \text{ \AA}$ и энергиями Ферми электродов $E_{F_1} = 1 \text{ эВ}$ и $E_{F_2} = 1.3 \text{ эВ}$. Параметры потенциального барьера полагались равными $d = 10 \text{ \AA}$ и $\varphi_1 = \varphi_2 = 4 \text{ эВ}$. Положительные напряжения на рис. 1 соответствуют туннелированию из электрода с меньшей энергией Ферми в электрод с большей энергией Ферми. При этом, начиная с нулевых напряжений, все двумерные зоны принимают участие в туннелировании. Однако если при $eV \leq E_{F_1} - E_n$ туннельный ток от n -й подзоны растет за счет увеличения как прозрачности барьера, так и числа электронов, способных принять участие в туннельном процессе, то при $eV > E_{F_1} - E_n$ последний фактор исчезает. Зона оказывается раскрытой полностью,

и рост туннельного тока замедляется, что и находит свое отражение в туннельной проводимости на рис. 1 при напряжениях $V_n = (E_{F_1} - E_n)/e$. Отрицательная полярность соответствует случаю, когда энергия Ферми E_{F_1} начального электрода больше соответствующей энергии E_{F_2} конечного электрода. При этом часть зон, для которых $E_{F_1} < E_n < E_{F_2}$, при начальных напряжениях не принимает участия в туннелировании. Вступление в игру этих зон отражается в области отрицательных напряжений при $V_n = (E_{F_1} - E_n)/e$ в виде изломов кривой $\sigma(V)$ на рис. 1.

На рис. 4 представлена зависимость от напряжения V второй производной туннельного тока $d^2 I/dV^2$, полученная путем численного дифференцирования кривой дифференциальной туннельной проводимости. Из этого рисунка видно, что наличие

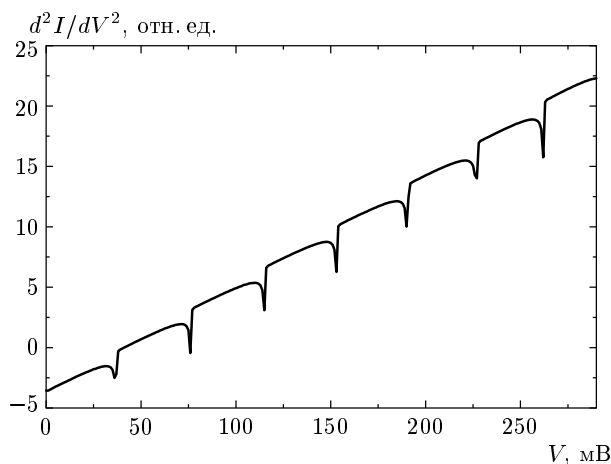


Рис. 4. Зависимость второй производной туннельного тока по напряжению, d^2I/dV^2 , от напряжения смещения на переходе, V , для «торцевого туннельного перехода», одним из электродов которого является однородная размерно-квантованная пленка толщиной $L = 250 \text{ \AA}$. Параметры барьера: $\varphi_1 = \varphi_2 = 4 \text{ мэВ}$, толщина $d = 10 \text{ \AA}$. Энергия Ферми начального электрода $E_{F_1} = 1 \text{ эВ}$, а конечного $E_{F_2} = 1.3 \text{ эВ}$

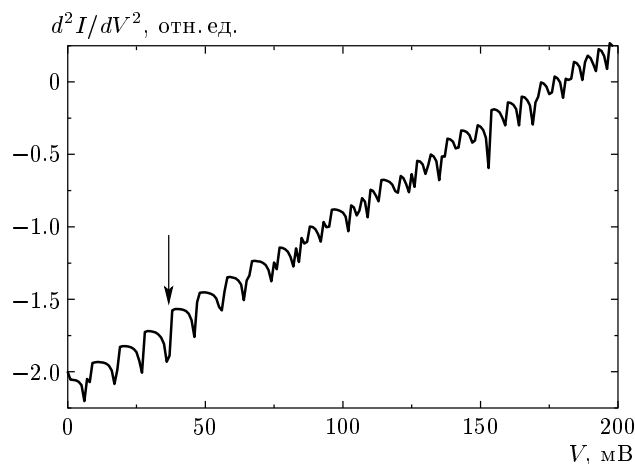


Рис. 5. Вторая производная исследуемого туннельного контакта с неоднородным по толщине размерно-квантованным электродом. Предполагается, что он состоит из десяти различных по толщине блоков толщиной L от 245 до 255 \AA , входящих с одинаковым весом. Постоянная решетки $a = 2.5 \text{ \AA}$. Значение $V_{res} = 37 \text{ мэВ}$ (указано стрелкой) удовлетворяет условию геометрического резонанса для $s/q = 2/5$. Остальные расчетные параметры совпадают с соответствующими величинами на рис. 1

размерного квантования в однородной пленке приводит к появлению отчетливой структуры почти периодически повторяющихся острых особенностей в зависимости d^2I/dV^2 от V , расположенных, вообще говоря, несимметрично относительно нуля напряжений. Для неоднородной пленки вклады от участков различной толщины, складываясь, приводят к сложному спектру в зависимости d^2I/dV^2 от V .

Одна из основных трудностей, с которой столкнулся метод электронного туннелирования при восстановлении спектров электрон-фононного взаимодействия высокотемпературных сверхпроводников, состоит в том, что зависимость от V второй производной d^2I/dV^2 , наряду с фоновыми особенностями, происхождение которых приписывается электрон-фононному взаимодействию, содержит структуру особенностей, простирающуюся далеко за пределы фононного спектра исследуемых материалов. Присутствие на экспериментальной кривой особенностей неизвестной природы существенно снижает доверие к достигнутым результатам, и поэтому для их объяснения привлекаются весьма необычные гипотезы. Так, в работе [11] было высказано предположение, что обсуждаемые особенности обусловлены многофононными процессами. Поскольку, как уже отмечалось, при исследовании высокотемпературных сверхпроводников используются туннель-

ные контакты малой площади, в которых возможно квантование поперечной составляющей волнового вектора, вполне естественно, на наш взгляд, предположить, что оно ответственно за появление высокоэнергетических особенностей на зависимости d^2I/dV^2 от V .

Наши расчеты показывают, что если квантованный электрод не является однородным по толщине, а состоит из отдельных участков различной толщины, то зависимость d^2I/dV^2 от V имеет спектр, богатый особенностями во всей расчетной области напряжений. Общий вид этого спектра оказывается чувствительным к таким расчетным параметрам, как средняя толщина квантованной пленки, высота и толщина барьера. Тем не менее положение многих особенностей остается при этом неизменным, поскольку они отражают так называемые соразмерные уровни энергии. Более того, при удачном подборе расчетных параметров в зависимости d^2I/dV^2 от V можно смоделировать так называемый геометрический резонанс. Возможность такого резонанса связана с тем, что толщина неоднородного поликристаллического электрода может изменяться лишь дискретным образом: $L = Na$, где a — размер элементарной ячейки в направлении оси x . Поэтому суще-

ствуют состояния, энергии которых не зависят от толщины. Например, двумерные зоны, соответствующие состоянию с длиной волны $\lambda = 2a$, будут присутствовать в квазидвумерных спектрах всех кристаллитов независимо от их толщины. Для определения соразмерных состояний можно использовать соотношение

$$k_{res} = \frac{s}{q} \frac{\pi}{a},$$

где s/q — несократимая дробь (легко убедиться, что, например, при $s/q = 1/2$ длина волны $\lambda_{res} = 4a$ и, следовательно, соответствующие двумерные зоны будут присутствовать во всех кристаллитах с четным числом слоев) [9]. На рис. 5 в полном согласии с приведенными изображениями наблюдается резонансная структура при напряжениях

$$V_{res} = \frac{1}{e} \left(\frac{(\hbar k_{res})^2}{2m} - E_F \right),$$

соответствующая значению $s/q = 2/5$, $V_{res} = 37$ мВ.

Полагая величину L бесконечно большой и заменяя суммирование по n интегрированием по E_x , приходим к выражению для туннельного тока обычного контакта с некантованными металлическими обкладками:

$$J_m(V) = K_m \left(\int_0^{E_F} \frac{dE_x}{\sqrt{E_x}} \times \right. \\ \times \int_0^{E_F - E_x} P(E_z, V) \sqrt{E_F - E_x - E_z} dE_z - \int_0^{E_F - eV} \frac{dE_x}{\sqrt{E_x}} \times \\ \times \left. \int_0^{E_F - eV - E_x} P(E_z, V) \sqrt{E_F - E_x - E_z - eV} dE_z \right), \quad (9)$$

где $K_m = et/(\pi\hbar)^3$. Естественно, что расчеты, выполненные по этой формуле, полностью совпадают с результатами, полученными при использовании стандартных формул для туннельного тока и туннельной проводимости [9].

Автор благодарит В. М. Свистунова за всестороннюю поддержку.

ЛИТЕРАТУРА

1. В. Н. Луцкий, Д. Н. Корнеев, М. И. Елинсон, Письма в ЖЭТФ **4**, 267 (1966).
2. Г. А. Гогодзе, И. О. Кулик, ФТТ **7**, 432 (1965).
3. R. C. Jaklevic and J. Lambe, Phys. Rev. B **12**, 4146 (1975).
4. L. C. Davis, R. C. Jaklevic, and J. Lambe, Phys. Rev. B **12**, 798 (1975).
5. В. М. Свистунов, В. Ю. Таренков, Письма в ЖЭТФ **26**, 34 (1977).
6. А. А. Галкин, В. М. Свистунов, А. И. Дьяченко, В. Ю. Таренков, Письма в ЖЭТФ **21**, 259 (1975).
7. А. И. Хачатуров, ЖЭТФ **118**, 622 (2000).
8. Ю. Ф. Комник, *Физика металлических пленок*, Атомиздат, Москва (1979), с. 106.
9. Е. Л. Вольф, *Принципы электронной туннельной спектроскопии*, Наукова думка, Киев (1990), с. 247.
10. J. S. Tsai, I. Takeuchi, J. Fujita et al., Physica C **157**, 537 (1989).
11. R. Aoki, H. Murakami, T. Kita et al., Physica B **219&220**, 172 (1996).