

PACS: 73.40.Gk, 73.40.Rw

А.И. Хачатуров

ОСОБЕННОСТИ ТУННЕЛИРОВАНИЯ В ПРОВОДНИКИ С МАЛЫМИ ЭНЕРГИЯМИ ФЕРМИ ПОД ДАВЛЕНИЕМ

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины
ул. Р. Люксембург, 72, г. Донецк, 83114, Украина
E-mail: khach@sts.dipt.donetsk.ua

Статья поступила в редакцию 16 июня 2004 года

Показано, что гидростатические давления порядка нескольких килобар могут сыграть ключевую роль в понимании природы нулевых аномальных пиков проводимости, наблюдаемых иногда в туннельных исследованиях металлооксидных соединений, а также ответить на вопрос – действительно ли асимметрия в туннельных характеристиках металлооксидов обусловлена разницей фермиевских энергий электродов туннельного контакта?

Несмотря на то, что электронное туннелирование уже давно из объекта исследования превратилось в метод исследования твердых тел, постоянно расширяющееся поле изучаемых этим методом материалов приводит к необходимости время от времени пересматривать его основные принципы. Так, в работах [1,2] было показано, что для туннельного контакта, электроды которого обладают малыми энергиями Ферми, форма зависимости дифференциальной туннельной проводимости от напряжения смещения $\sigma(V) = dI/dV$ в промежуточной области напряжений (порядка нескольких сотен милливольт) способна отражать их электронные свойства. Данное утверждение противоречит хорошо известному положению [3,4], согласно которому при туннелировании в обычные металлы, находящиеся в нормальном состоянии, эта кривая определяется лишь параметрами потенциального барьера. Собственно говоря, именно по этой причине она и получила название «барьерная характеристика». В [1,2] были предсказаны два основных эффекта в поведении $\sigma(V)$: для электродов с малыми, но равными фермиевскими энергиями ($E_{F_1} = E_{F_2}$), – аномальный максимум проводимости в нуле напряжений, а для электродов с разными энергиями ($E_{F_1} \neq E_{F_2}$) – сдвиг минимума проводимости $\sigma(V)$ относительно нуля напряжений на некоторую конечную величину V_{shift} . Так как сам потенциальный барьер при этом выбирался прямоугольным, то асимметрия в расчетных кривых могла быть обусловлена лишь

асимметрией зонной структуры электродов, что опровергает известный вывод Харисона [5], согласно которому эффекты зонной структуры не должны проявляться в характеристиках нормальных металлов.

Металлооксидные сверхпроводники и магниторезистивные материалы обладают небольшими энергиями Ферми, и с данной точки зрения эксперименты на этих веществах, в принципе, могли бы подтвердить или опровергнуть выводы, сделанные в [1,2]. К сожалению, туннельные эксперименты на металлооксидных сверхпроводниках характеризуются плохой воспроизводимостью экспериментальных результатов. По этой причине литературные данные по туннельным исследованиям металлооксидных соединений во многом противоречивы. Отметим, что среди них были и такие, в которых дифференциальное туннельное сопротивление проявляло нулевую особенность типа «пик проводимости» (см., напр., [6,7]). Согласно общепризнанной точке зрения проблема воспроизводимости туннельных характеристик связана с технологическими трудностями создания высококачественных туннельных контактов на металлооксидных материалах. В настоящей работе мы покажем, что неопределенность формы туннельных характеристик является внутренне присущим свойством металлооксидных соединений. Кроме того, проведенные численные расчеты дают основание утверждать, что гидростатическое давление (порядка 10 килобар) – это уникальный параметр, применение которого способно дать однозначный ответ на вопрос: действительно ли максимум проводимости в области нулевых напряжений, а также асимметрия в кривой дифференциальной проводимости, наблюдаемые иногда в туннельных экспериментах на металлооксидных материалах [6,7], отражают зонную структуру исследуемых электродов?

Расчет зависимости дифференциальной туннельной проводимости от напряжения смещения на переходе $\sigma(V) = dI/dV$ проводим, используя аналитические выражения, которые были получены путем дифференцирования соответствующих формул для туннельного тока работы [2]. Если энергия Ферми начального электрода E_{F_1} меньше энергии E_{F_2} конечного, то

$$\sigma(V) = K \left\{ \int_{E_{F_1} - eV}^{E_{F_1}} (E_{F_1} - E_z) \frac{\partial P}{\partial V} dE_z + e \int_0^{E_{F_1} - eV} \left[P(E_z, V) + V \frac{\partial P}{\partial V} \right] dE_z \right\}. \quad (1)$$

В противном случае, когда $E_{F_1} > E_{F_2}$,

$$\sigma(V) = K \left\{ e \int_{(E_{F_1} - E_{F_2} - eV) \Theta(E_{F_1} - E_{F_2} - eV)}^{E_{F_1} - eV} \left(P(E_z, V) + V \frac{\partial P}{\partial V} \right) dE_z + \int_{E_{F_1} - eV}^{E_{F_1}} (E_{F_1} - E_z) \frac{\partial P}{\partial V} dE_z + e^2 V P(E_{F_1} - E_{F_2} - eV, V) \Theta(E_{F_1} - E_{F_2} - eV) \right\}, \quad (2)$$

где $K = 4\pi m e / h^3$ (m – эффективная масса электрона, которую для простоты считаем равной массе свободного электрона во всех трех составляющих

туннельного контакта), $P(E_z, V)$ – прозрачность туннельного барьера, $\Theta(E_{F_1} - E_{F_2} - eV)$ – ступенчатая функция Хевисайда. Результаты расчета, проведенного по этой формуле (в рамках ВКБ-приближения), представлены на рис. 1. Неизменными параметрами в расчетах были высота барьера $\varphi_1 = \varphi_2 = 4$ eV и фермиевские энергии электродов $E_{F_1} = E_{F_2} = 1$ eV, а переменной величиной – толщина d , которая пробегала значения от 10 до 15 Å. Анализируя поведение кривых 1–5 на рис. 1, приходим к выводу, что при туннелировании электронов в материалы с малыми фермиевскими энергиями форма кривой дифференциальной туннельной проводимости оказывается весьма чувствительной к толщине туннельного барьера. Если барьер достаточно широк ($d = 14$ Å, кривая 5, рис. 1), то кривая $\sigma(V)$ имеет традиционную параболическую форму с минимумом, расположенным в нуле напряжений. При уменьшении толщины барьера в зависимости $\sigma(V)$ начинает развиваться нулевая аномалия, в результате чего вместо минимума проводимости в нуле напряжений появляется ее пик ($d = 10$ Å, кривая 1, рис. 1). На наш взгляд, это обстоятельство способно отчасти объяснить то многообразие результатов, которое наблюдалось в туннельных экспериментах, проводимых на металлооксидных материалах.

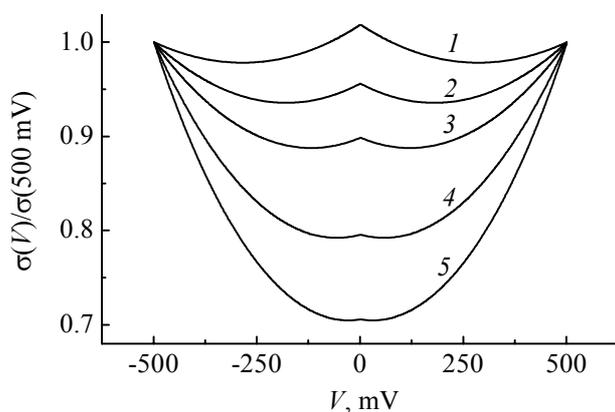


Рис. 1. Изменение формы зависимости дифференциальной туннельной проводимости от напряжения смещения при изменении толщины барьера d , Å: 1 – 10, 2 – 11, 3 – 12, 4 – 13, 5 – 14. Постоянные параметры $E_{F_1} = E_{F_2} = 1$ eV, $\varphi_1 = \varphi_2 = 4$ eV

Исходя из данных рис. 1, мы делаем предположение о том, что многообразие туннельных кривых связано не с технологическими трудностями в изготовлении туннельных контактов, а является внутренне присущим свойством туннельных исследований металлооксидных соединений. Для того чтобы добиться воспроизводимости экспериментальных результатов необходим контроль параметров туннельного барьера, в частности его толщины.

На наш взгляд, давление является идеальным параметром для проверки сделанного в данной работе предположения. Дело в том, что хотя под давлением изменяются все расчетные параметры, основные изменения в зависимости $\sigma(V)$ оказываются связанными в первую очередь с уменьшением ширины барьера, что наглядно продемонстрировано на рис. 2. Здесь кривая 1 представляет собой дифференциальную проводимость симметричного тун-

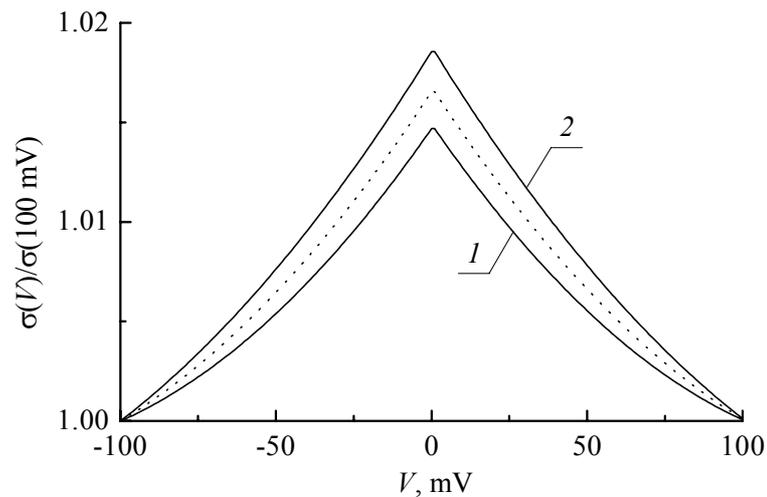


Рис. 2. Увеличение аномального пика дифференциальной проводимости $\sigma(V)$ симметричного туннельного контакта $E_{F_1} = E_{F_2}$, $\phi = \phi_1 = \phi_2$ в нуле напряжений под давлением: 1 – $P = 0$, $d = 10.5 \text{ \AA}$, $\phi_1 = \phi_2 = 4 \text{ eV}$; 2 – $P = 10 \text{ kbar}$, $d = 10 \text{ \AA}$, $\phi_1 = \phi_2 = 4.15 \text{ eV}$; штриховая линия – $P = 0$, $d = 10 \text{ \AA}$, $\phi_1 = \phi_2 = 3.85 \text{ eV}$. Фермиевские энергии обоих электродов во всех расчетных кривых полагались неизменными $E_{F_1} = E_{F_2} = 1 \text{ eV}$

нельного контакта $E_{F_1} = E_{F_2} = 1 \text{ eV}$, $\phi_1 = \phi_2 = 4 \text{ eV}$, рассчитанную для нулевого давления $P = 0$, при котором толщина контакта равна 10.5 \AA . Согласно работам [8,9] уменьшение толщины изолирующего слоя при давлении 10 kbar составляет порядка 3%, т.е. $\Delta d \approx -0.36 \text{ \AA}$, а высоты – $\Delta \phi \approx 16 \text{ meV}$. Сами же значения фермиевских энергий при этом можно считать неизменными. Кривые на рис. 2 убеждают нас в том, что в какую бы сторону ни изменялась высота барьера, вклад, связанный с уменьшением толщины d , является доминирующим. Так что, если наблюдаемый в некоторых случаях на металлооксидных соединениях нулевой пик проводимости действительно связан с эффектами их зонной структуры, то под давлением он должен приобретать дальнейшее развитие.

Если фермиевские энергии электродов имеют различные значения и хотя бы одно из них мало по сравнению с высотой барьера, то кривая дифференциальной проводимости оказывается асимметричной [2]. Ее минимум сдвигнут относительно нуля напряжений на величину V_{shift} (см. кривая 1, рис. 3). Как показано на рис. 3 (кривая 2), давление, уменьшая толщину барьера, должно приводить к увеличению сдвига V_{shift} .

В экспериментах на металлооксидных соединениях минимум дифференциальной туннельной проводимости всегда имеет место в нуле напряжений. На наш взгляд, это можно объяснить, предположив, как это было сделано в [10], существование дополнительного, не связанного с упругим каналом механизма туннелирования, вызывающего симметричное уменьшение проводимости в окрестности нулевых смещений V . Наложение этого неупругого и рассматриваемого в данной статье упругого механизмов и приводит к так

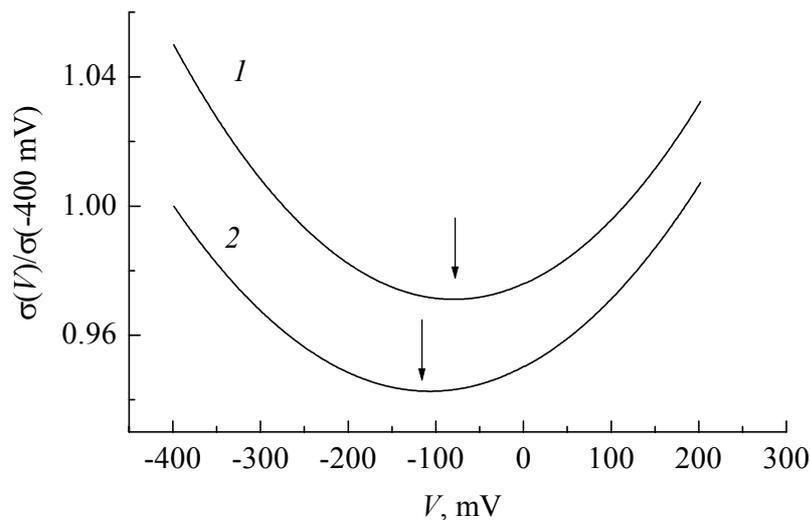


Рис. 3. Увеличение сдвига минимума дифференциальной туннельной проводимости, вызванного разностью фермиевских энергий электродов, под давлением: 1 – $P = 0$, $d = 10.5 \text{ \AA}$, $\varphi_1 = \varphi_2 = 4 \text{ eV}$; 2 – $P = 10 \text{ kbar}$, $d = 10 \text{ \AA}$, $\varphi_1 = \varphi_2 = 4.15 \text{ eV}$. Фермиевские энергии обоих электродов полагались неизменными $E_{F_1} = 1.2 \text{ eV}$ и $E_{F_2} = 1.6 \text{ eV}$. Кривые нормированы на значение проводимости в точке -400 mV и сдвинуты относительно друг друга для ясности по оси ординат на величину 0.05

называемому эффекту прямых линий, при котором суммарное изменение проводимости описывается формулой

$$\sigma(V) = \begin{cases} \sigma_0 + \alpha_1|V|, & V \geq 0, \\ \sigma_0 + \alpha_2|V|, & V \leq 0. \end{cases} \quad (3)$$

Причем при низком и толстом барьере, когда рассматриваемый в данной статье зонный, асимметричный эффект в упругом канале пренебрежимо мал, коэффициенты α_1 и α_2 равны друг другу, а при высоком и тонком – нет. Отметим, что и в этом случае давление позволяет провести экспериментальную проверку предложенной схемы. Если она справедлива, то под давлением наблюдаемая в некоторых случаях асимметрия в дифференциальной проводимости обязана лишь увеличиваться, т.е. разница $\alpha_1 - \alpha_2$ в условиях гидростатического сжатия должна расти.

Отметим, что при туннелировании в обычные металлы, где сдвиг кривой $\sigma(V)$ вызван не разницей фермиевских энергий, а обусловлен асимметрией потенциального барьера, гидростатическое давление приводило к диаметрально противоположному эффекту [8].

1. *A.I. Khachaturov, M.A. Belogolovskii, V.M. Svistunov*, Czech. J. Phys. **46**, S2, 1031 (1996).
2. *В.М. Свистунов, А.И. Хачатуров, М.А. Белоголовский, О.И. Черняк*, ФНТ **22**, 605 (1996).

3. *W.F. Brinkman, R.C. Dynes, J.M. Rowell*, J. Appl. Phys. **41**, 1915 (1970).
4. *Е.Л. Вольф*, Принципы электронной туннельной спектроскопии, Наукова думка, Киев (1990), с. 27.
5. *W.A. Harrison*, Phys. Rev. **123**, 85 (1961).
6. *Q. Huang, J.F. Zasadzinski, K.E. Gray, J.Z. Liu, H. Claus*, Phys. Rev. **B40**, 9336 (1989).
7. *J.F. Zasadzinski, N. Tralshawala, J. Timpf*, Physica **C162–164**, 1053 (1989).
8. *В.М. Свистунов, М.А. Белоголовский, О.И. Черняк*, УФН **151**, 31 (1987).
9. *А.И. Хачатуров*, ФТВД **10**, № 1, 12 (2000).
10. *J.R. Kirtley, S. Washburn, D.J. Scalapino*, Phys. Rev. **B45**, 336 (1992).

A.I. Khachaturov

FEATURES OF ELECTRON TUNNELING INTO LOW FERMI ENERGY CONDUCTORS UNDER PRESSURE

It is shown that the hydrostatic pressures of several kilobars enable to play a key role in elucidating the nature of zero bias conductance peak anomaly, that have been sometimes observed in tunneling characteristics of metal oxides. Moreover, the pressures can be helpful in answering the question whether the asymmetry in tunneling characteristics of metal oxides is due to the difference in Fermi energies of electrodes.

Fig. 1. Influence of the barrier thickness on the dependence of the differential tunnel conductance versus bias voltage d , Å: 1 – 10, 2 – 11, 3 – 12, 4 – 13, 5 – 14. The fixed parameters: $E_{F_1} = E_{F_2} = 1$ eV, $\varphi_1 = \varphi_2 = 4$ eV

Fig. 2. Increasing the zero bias conductance peak anomaly of a symmetrical tunnel junction $E_{F_1} = E_{F_2}$, $\varphi = \varphi_1 = \varphi_2$ under pressure: 1 – $P = 0$, $d = 10.5$ Å, $\varphi_1 = \varphi_2 = 4$ eV; 2 – $P = 10$ kbar, $d = 10$ Å, $\varphi_1 = \varphi_2 = 4.15$ eV; dots – $P = 0$, $d = 10$ Å, $\varphi_1 = \varphi_2 = 3.85$ eV. Fermi energies of both electrodes are the fixed parameters $E_{F_1} = E_{F_2} = 1$ eV

Fig. 3. Increasing the shift of the differential tunnel conductance minimum due to the difference in the electrode Fermi energies under pressure: 1 – $P = 0$, $d = 10.5$ Å, $\varphi_1 = \varphi_2 = 4$ eV; 2 – $P = 10$ kbar, $d = 10$ Å, $\varphi_1 = \varphi_2 = 4.15$ eV. The Fermi energies are the fixed parameters: $E_{F_1} = 1.2$ eV and $E_{F_2} = 1.6$ eV. The plots have had conductance normalized to 1 at -400 mV and then offset by 0.05 for clarity