

Проявление зонной структуры полуметалла в туннельной проводимости контактов металл–изолятор–полуметалл

А. И. Хачатуров

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

И. Хатта, В. М. Свистунов

Nanoelectronics Laboratory Graduate School of Engineering, Hokkaido University, Sapporo 060-8628, Japan

Статья поступила в редакцию 2 марта 2000 г., после переработки 17 апреля 2000 г.

Найден вклад от электронной зоны полуметалла в дифференциальную проводимость туннельного контакта металл–изолятор–полуметалл. Установлено, что его величина существенно зависит от барьерных параметров. По своей форме он представляет собой выпуклость, максимум которой в общем случае не соответствует, как это предполагалось ранее, ни краям зоны, ни ее седловой точке. Показано, что зонная структура хорошо разрешается во второй производной от тока по напряжению d^2I/dV^2 .

Знайдено внесок від електронної зони напівметалу в диференційну провідність тунельного контакту метал–ізолятор–напівметал. Виявлено, що його величина суттєво залежить від бар'єрних параметрів. По своїй формі він удає з себе опуклість, максимум якої в загальному випадку не відновідає, як це було припущено раніше, ані краям зони, ані її седловій точці. Показано, що зонна структура добре розв'язується в другій похідній від струму по напрузі d^2I/dV^2 .

PACS: 73.40.Gk, 71.20.Mq

Еще в шестидесятые годы было экспериментально твердо установлено, что зонная структура полупроводников и полуметаллов находит свое отражение в туннельных характеристиках [1–3]. Впоследствии были предприняты усилия, направленные на то, чтобы, основываясь на этих экспериментах, разработать метод исследования зонной структуры твердых тел [3–6]. В случае успеха он позволил бы изучать не только зоны, непосредственно примыкающие к уровню Ферми, как в случае использования эффектов де Гааза – ван Альфена, Шубникова – де Гааза и циклотронного резонанса, но и получать информацию о зонах, находящихся от него на значительных расстояниях. Однако результаты, представленные различными группами, имели расхождения, далеко выходящие за рамки экспериментальных ошибок. Указанные обстоятельства не позволили выработать надежные правила, устанавливающие связь между особенностями туннельных характе-

ристик и особыми точками зонной структуры. В результате интенсивность работ в этом направлении существенно снизилась, и сейчас попытки использовать туннельный эффект для исследования зонной структуры новых материалов, таких как, например, металлооксидные соединения, практически не предпринимаются. Во многом это связано и с отсутствием соответствующей теории, позволяющей рассчитывать вклад отдельной зоны в общий туннельный ток [7].

В настоящей работе предлагается модельный подход к рассмотрению электронного туннелирования в контактах металл–изолятор–полуметалл. Предполагается, что металлический электрод – обычный ферми-металл с квадратичным законом дисперсии, в то время как противоположный электрод – гипотетический многозонный полуметалл с кубической кристаллической решеткой. Для описания изолирующего слоя используется трапециевидальная модель, согласно которой при

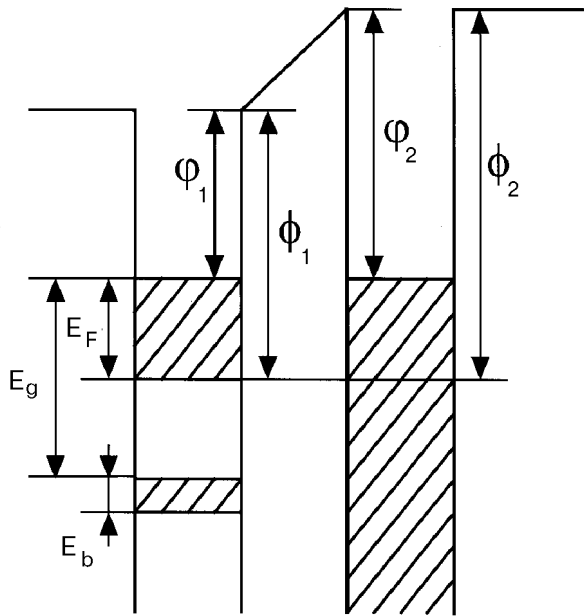


Рис. 1. Энергетическая диаграмма туннельного контакта металл-изолятор-двухзонный полуметалл.

подаче напряжения V форма потенциального барьера изменяется по закону (рис. 1)

$$\varphi(z, V) = \varphi_1 + (\varphi_2 - eV - \varphi_1) z/d, \quad (1)$$

где φ_1 и φ_2 — высоты барьера; d — толщина барьера; z — координата, перпендикулярная плоскости туннельного перехода. В ВКБ-приближении прозрачность такого барьера может быть определена по формуле [8]

$$P = \exp\left(-2 \int_0^d |k_z^*(z)| dz\right), \quad (2)$$

где k_z^* — компонента волнового вектора, перпендикулярная плоскости барьера в изоляторе. Полагаем, что туннелирование имеет упругий и зеркальный характер, т.е. сохраняется полная энергия $E = E_z + E_{\parallel}$ туннелирующего электрона и параллельная составляющая его квазиимпульса k_{\parallel} . «Параллельная» E_{\parallel} и «нормальная» E_z составляющие кинетической энергии при этих условиях в общем случае не сохраняются.

Формула для туннельного тока при $T = 0$ К имеет вид [9]

$$J(V) = \frac{2e}{h} \int dE \iint P(E_z, V) dk_x dk_y, \quad (3)$$

где интегрирование проводится по площади перекрытия проекций поверхностей постоянных энергий электродов на плоскость перехода. Поскольку в настоящей работе нас, в первую очередь, интересуют зонные эффекты полуметалла, будем считать, что его проекция постоянной энергии полностью находится внутри проекции металлического электрода.

В этом случае для нахождения туннельного тока достаточно лишь знание «поперечной» плотности состояния полуметалла $N(E_{\parallel})$:

$$J(V) = \frac{2e}{h} \int dE \int P(E - E_{\parallel}, V) N(E_{\parallel}) dE_{\parallel}. \quad (4)$$

В приближении сильной связи закон дисперсии n -й зоны определяется соотношением

$$E_n(k) = E_n - 2A_n [\cos(ak_x) + \cos(ak_y) + \cos(ak_z)], \quad (5)$$

где a — постоянная решетки. Ширина такой зоны $E_b = 12A$, расстояние от дна зоны до седловой точки $E_s = 4A$. Плотность электронных состояний рассчитывалась по следующей схеме: определялась площадь S , охватываемая кривой постоянной энергии $E_{\parallel}(k_x, k_y) = 4A - 2A[\cos(ak_x) + \cos(ak_y)]$, умножалась на 2 (учет спинового вырождения) и дифференцировалась по E_{\parallel} :

$$N(E_{\parallel}) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{dS}{dE_{\parallel}}. \quad (6)$$

Как уже отмечалось, в общем случае параллельная составляющая энергии не сохраняется, и связь между ее значением в полуметалле E_{\parallel} и в изоляторе E_{\parallel}^* может быть довольно сложной. Мы, однако, для простоты будем полагать, что зависимость $E_{\parallel}^*(k_{\parallel}^*)$ определяется уравнением (5) и, следовательно, $E_{\parallel}^* = \alpha E_{\parallel}$, что справедливо, если изолирующий слой представляет собой кубический кристалл с той же постоянной решетки a , но иным A^* , таким, что $\alpha = A^*/A$. Этот подход мы оправдываем тем, что нас, в первую очередь, интересует проявление зонных эффектов исследуемого полуметалла, а не изолирующего слоя. Полагая, что в изоляторе в z -направлении справедливо приближение эффективной массы, записываем подынтегральное выражение в (2) в виде

$$|k_z^*(z)| = \sqrt{(\varphi(z) - E_z^*)} = \sqrt{2m^*\{\varphi(z) - E + \alpha E_{\parallel}\}},$$

после интегрирования получаем

$$P(V, E - E_{\parallel}) = \exp \left\{ \frac{-A_d}{\phi_2 - eV - \phi_1} \sqrt{(\phi_2 - eV - \phi_1 - E + \alpha E_{\parallel}^*)^3} - \sqrt{(\phi_2 - \phi_1 - E + \alpha E_{\parallel}^*)^3} \right\}, \quad (7)$$

$A_d = 4\sqrt{2m^*d}/3\hbar$, m^* – эффективная масса электрона в зоне проводимости изолятора, а ϕ_1 и ϕ_2 – высоты барьера, отсчитываемые от дна зоны.

Рассмотрим простейший случай, когда исследуемый полуметалл наряду с зоной проводимости имеет полностью заполненную электронную зону, не пересекающуюся с ней по энергии (см. рис. 1). Полагаем, что уровень Ферми расположен так, что поверхность Ферми не касается границ зоны Бриллюэна, т.е. $E_F < 4A_1$. При необходимости предложенная схема легко обобщается на любое количество произвольно расположенных зон. Пусть на исследуемый контакт подано напряжение смещения V , сдвигающее уровень Ферми полуметалла вверх относительно уровня Ферми противоположного металлического электрода. Вклад в туннельный ток от зоны проводимости в этом случае может быть найден по формуле

$$J_1(V) = \frac{2e}{h} \int_{E_F - eV}^{E_F} dE \int_0^E P(E_{\parallel}, V) dE_{\parallel}, \quad eV < E_F,$$

$$J_1(V) = \frac{2e}{h} \int_0^{E_F} dE \int_0^E P(E_{\parallel}, V) dE_{\parallel}, \quad eV > E_F. \quad (8)$$

Все энергии в этой формуле отсчитываются от дна зоны проводимости (в дальнейшем все энергии будут отсчитываться от дна той зоны, вклад от которой в данный момент определяется) таким образом, что высоты туннельного барьера для зоны проводимости равны $\phi_1 = \phi_1 + E_F$, $\phi_2 = \phi_2 + E_F$ (для полностью заполненной зоны высоты барьеров равны $\phi_1 = \phi_1 + E_g + E_b$ и $\phi_2 = \phi_2 + E_g + E_b$, где E_g – расстояние от уровня Ферми до верхнего края зоны). Дифференцируя, находим аналитическое выражение для вклада в туннельную проводимость от фермиевской зоны:

$$\sigma_1(V) = \frac{2e}{h} \left[\int_{E_F - eV}^{E_F} dE \int_0^E N(E_{\parallel}) P'(E - \alpha_1 E_{\parallel}, V) dE_{\parallel} + \int_0^{E_F - eV} N(E_{\parallel}) P(E_F - eV - \alpha_1 E_{\parallel}, V) dE_{\parallel} \right], \quad eV < E_F,$$

$$\sigma_1(V) = \frac{2e}{h} \left[\int_0^{E_F} dE \int_0^E N(E_{\parallel}) P'(E - \alpha_1 E_{\parallel}) dE_{\parallel} \right], \quad eV > E_F, \quad (9)$$

где $\alpha_1 = A^*/A_1$, а производная от проницаемости туннельного барьера по напряжению $P'(E - kE_{\parallel}^*, V)$ может быть рассчитана аналитически:

$$P'(E_z^*, V) = \frac{eA_d}{2} \frac{(\phi_2 - 3\phi_1 - eV + 2E_z^*)(\phi_2 - eV + E_z^*)^{1/2} + 2(\phi_1 - E_z^*)^{3/2}}{(\phi_2 - eV - \phi_1)^2} P(E_z^*, V). \quad (10)$$

Вклад в туннельный ток от электронной зоны, лежащей ниже уровня Ферми на расстоянии E_g , равен

$$J_2(V) = 0, \quad eV < E_g,$$

$$\begin{aligned}
J_2(V) &= \frac{2e}{h} \left(\int_{3E_s+E_g-eV}^{3E_s} dE \int_{E-E_s}^{2E_s} P(E - \alpha_2 E_{\parallel}, V) N(E_{\parallel}) dE_{\parallel} \right), \quad E_g < eV < E_s + E_g, \\
J_2(V) &= \frac{2e}{h} \left(\int_{2E_s}^{3E_s} dE \int_{E-E_s}^{2E_s} P(E - \alpha_2 E_{\parallel}, V) N(E_{\parallel}) dE_{\parallel} + \int_{3E_s+E_g-eV}^{2E_s} dE \int_{E-E_s}^E P(E - \alpha_2 E_{\parallel}, V) N(E_{\parallel}) dE_{\parallel} \right), \\
&\quad E_s + E_g < eV < 2E_s + E_g, \\
J_2(V) &= \frac{2e}{h} \left(\int_{2E_s}^{3E_s} dE \int_{E-E_s}^{2E_s} P(E - \alpha_2 E_{\parallel}, V) N(E_{\parallel}) dE_{\parallel} + \int_{E_s}^{2E_s} dE \int_{E-E_s}^E P(E - \alpha_2 E_{\parallel}) N(E_{\parallel}) dE_{\parallel} + \right. \\
&\quad \left. + \int_{3E_s+E_g-eV}^{E_s} dE \int_0^E P(E - \alpha_2 E_{\parallel}, V) N(E_{\parallel}) dE_{\parallel} \right), \quad 2E_s + E_g < eV < 3E_s + E_g, \\
J_2(V) &= \frac{2e}{h} \left(\int_{2E_s}^{3E_s} dE \int_{E-E_s}^{2E_s} P(E - \alpha_2 E_{\parallel}, V) N(E_{\parallel}) dE_{\parallel} + \int_{E_s}^{2E_s} dE \int_{E-E_s}^E P(E - \alpha_2 E_{\parallel}) N(E_{\parallel}) dE_{\parallel} + \right. \\
&\quad \left. + \int_0^{E_s} dE \int_0^E P(E - \alpha_2 E_{\parallel}, V) N(E_{\parallel}) dE_{\parallel} \right), \quad 3E_s + E_g < eV, \tag{11}
\end{aligned}$$

где $\alpha_2 = A^*/A_2$.

Дифференцируя (11) по V , находим аналитические выражения для вклада от электронной зоны в туннельную проводимость, которые из-за их громоздкости здесь не приводятся. Полный туннельный ток и полная проводимость равны сумме вкладов от отдельных зон полуметалла: $J(V) = J_1(V) + J_2(V)$ и $\sigma(V) = \sigma_1(V) + \sigma_2(V)$. На рис. 2 приведены результаты расчета туннельной проводимости для туннельного контакта, полуметаллический электрод которого имел следующие параметры: энергия Ферми $E_F = 0,27$ эВ; $A_1 = 75$ мэВ; расстояние между уровнем Ферми и верхним краем электронной зоны $E_g = 0,4$ эВ; ширина электронной зоны $E_b = 12A_2 = 0,15$ эВ; постоянная кубической решетки $a = 2,5$ Å. Высоты потенциального барьера ϕ_1 и ϕ_2 полагались равными 1,2 эВ, а толщины изменялись: 8 Å (кривая 1); 12 Å (кривая 2); 14 Å (кривая 3); 16 Å (кривая 4); 20 Å (кривая 5). Вплоть до

$eV = E_F$ вклад в туннельную проводимость вносят лишь электроны зоны проводимости. Как и следовало ожидать, слагаемое $\sigma_1(V)$ убывает с напряжением, что является следствием малого значения E_F по сравнению с высотой туннельного барьера. Подобный результат для малой группы свободных носителей был получен в [10]. Таким образом, первый минимум на кривой туннельной проводимости соответствует значению энергии Ферми. Авторы работы [3] из сравнения туннельных спектров со спектрами оптического поглощения и пропускания сделали вывод, что максимум дифференциальной проводимости соответствует краю зоны. В работе [5] утверждалось, что максимум туннельной проводимости соответствует седловой точке, которая в нашем случае расположена при $eV_{\text{saddle}} = E_g + 8A_2$. Расчеты показывают, что электронная зона дает вклад в туннельную проводимость, максимум которого, вообще

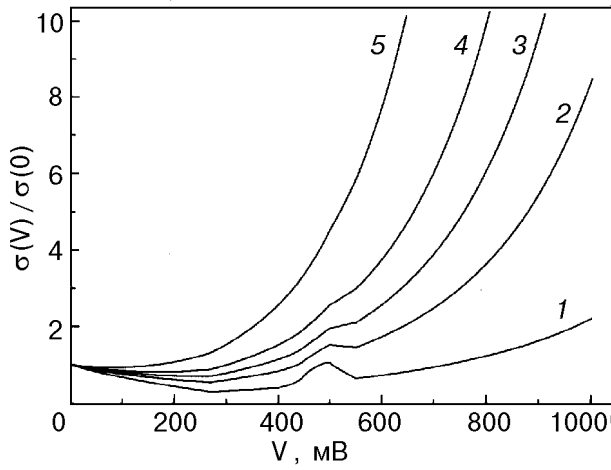


Рис. 2. Зависимости дифференциальной проводимости σ от напряжения V туннельного контакта металл–изолятор–двухзонный полуметалл, рассчитанные при различных толщинах изолирующего слоя d , Å: 8 (1); 12 (2); 14 (3); 16 (4); 20 (5). Высота прямоугольного потенциального барьера $\phi_1 = \phi_2 = 1,2$ эВ. Параметры гипотетического полуметалла полагались равными $a = 2,5$ Å, $A_1 = 75$ мэВ, $E_F = 0,27$ мэВ, $A_2 = 12,5$ мэВ, $E_g = 0,4$ мэВ.

говоря, не совпадает ни с краями электронной зоны, ни с седловой точкой. Как видно на рис. 3, особые точки зонной структуры хорошо разрешаются на кривой d^2I/dV^2 , полученной путем численного дифференцирования зависимости $\sigma(V)$. Начало зоны и конец зоны проявляются в виде ступенчатых скачков вверх и вниз при напряжениях $eV = E_g$ и $eV = E_g + 12A_2$ соответственно. Кривая имеет резкий максимум при $eV = E_g + 4A_2$ и резкий минимум при $eV = E_g + 8A_2$, которые делят зону на три равные части. Как показано на

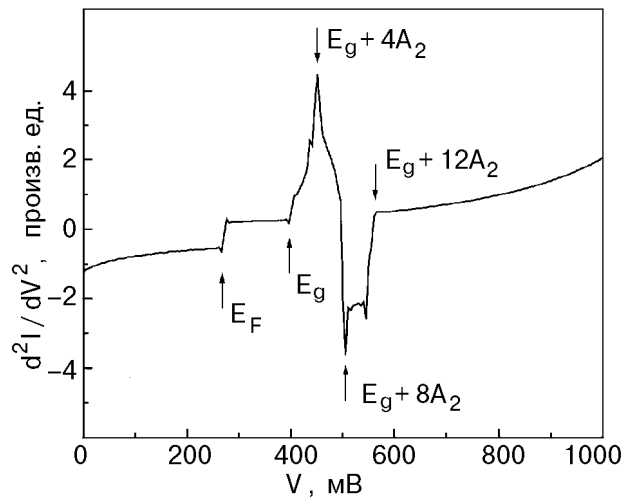


Рис. 3. Вторая производная от тока по напряжению d^2I/dV^2 , полученная численным дифференцированием кривой 1 на рис. 2.

рис. 2, характер проявления зонных особенностей полуметалла сильно зависит от свойств диэлектрического слоя. Так, изменение толщины диэлектрического слоя в два раза, вполне возможное в экспериментах, проводимых различными группами исследователей, приводит к почти полному исчезновению этих особенностей (рис. 2, кривые 1–5).

На наш взгляд, представленные результаты подтверждают, что электронное туннелирование вполне применимо при исследовании зонной структуры полуметаллов в случае неперекрывающихся зон. Основная трудность состоит в том, что наряду с искомыми неизвестными зонными параметрами задача содержит дополнительные параметры, существенно влияющие на измеряемые туннельные характеристики [7,11]. Изолирующий слой был и остается наименее изученным и плохо контролируемым элементом туннельного контакта, и неудивительно, что именно он является основным фактором, препятствующим исследованию зонной структуры. Представленная модель, по нашему мнению, дает надежду обойти эту трудность. Фактически открываются обоснованные возможности (экспериментальные) детально исследовать туннельные характеристики полуметаллов с последующей реконструкцией зонной структуры.

Авторы признательны проф. М. Ода за полезные обсуждения. Один из авторов (В.М.С.) благодарен проф. К. Мукаса за гостеприимство и Министерству образования, науки и культуры Японии за финансирование его пребывания в Университете Хоккайдо.

1. L. Esaki and P. J. Stiles, *Phys. Rev. Lett.* **4**, 902 (1965).
2. L. Esaki and P. J. Stiles, *Phys. Rev. Lett.* **16**, 574 (1966).
3. J. J. Hauser and L. R. Testardi, *Phys. Rev. Lett.* **20**, 12 (1968).
4. H. T. Chu, N. K. Eib, P. N. Henriksen et al., *Phys. Rev.* **B18**, 4546 (1979).
5. Yu. Sawatari and M. Arai, *J. Phys. Soc. Jpn.* **360**, 360 (1970).
6. М. А. Белоголовский, А. А. Галкин, В. М. Свистунов, *ЖЭТФ* **69**, 1795 (1975).
7. Ю. Ф. Комник, *Физика металлических пленок*, Атомиздат, Москва (1979).
8. W. A. Harrison, *Phys. Rev.* **123**, 85 (1961).
9. Р. Стрэттон, в кн.: *Туннельные явления в твердых телах*, Э. Бурштейн, С. Лундквист (ред.), Мир, Москва (1973).
10. А. И. Khachaturov, V. M. Svistunov, and M. A. Belogolovskii, *Czech. J. Phys.* **46**, Suppl. Part S2, 1031 (1996).
11. E. Hattta and K. Mukasa, *Solid State Commun.* **103**, 235 (1997).

Manifestation of semimetal band structure in
tunnel conductance of
metal–insulator–semimetal junctions

A. I. Khachaturov, E. Hatta, and V. M. Svistunov

A contribution of the electron band of a
semimetal to the differential conductance of a met-

al–insulator–semimetal tunnel junction is deter-
mined. This is a bump whose maximum in contrast
to previous assumptions corresponds to neither the
band edges nor the saddle point. Its magnitude is
found to depend essentially on the barrier param-
eters. The band structure is shown to manifest itself
distinctly in the second derivative of the tunneling
current with respect to the bias voltage d^2I/dV^2 .