

PACS: 73.40.Gk, 73.40.Rw

Т.А. Хачатурова, М.А. Белоголовский, А.И. Хачатуров

ВЛИЯНИЕ ВАЛЕНТНОЙ ЗОНЫ ИЗОЛЯТОРА  
НА БАРЬЕРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТУННЕЛЬНЫХ КОНТАКТОВ  
ПОЛУМЕТАЛЛ–ИЗОЛЯТОР–МЕТАЛЛ

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

Статья поступила в редакцию 15 октября 2007 года

*Показано, что использование двухзонного приближения для электронной структуры изолирующего слоя позволяет объяснить аномальную W-образную форму барьерных характеристик туннельных контактов полуметалл–изолятор–металл. Предложены и обсуждаются туннельные эксперименты при высоких давлениях, которые позволят однозначно ответить на вопрос о соответствии особенностей туннельного спектра деталям зонной структуры полупроводниковых электродов.*

### Введение

Поведение зависимости дифференциальной проводимости  $\sigma(V) = dI/dV$  туннельного контакта проводник–изолятор–проводник от напряжения смещения  $V$ , поданного на туннельный переход, детально исследовалось в целом ряде теоретических и экспериментальных работ [1–3]. Было установлено, что в широком диапазоне напряжений  $V$  измеренные зависимости проводимости от напряжения могут быть грубо описаны формулой  $\sigma(V) \approx \sigma_0 + \alpha V + \beta V^2$ , коэффициенты  $\alpha$  и  $\beta$  которой определяются лишь параметрами барьера. Такое параболическое поведение туннельной проводимости  $\sigma(V)$  считается идеальным, и с этой точки зрения экспериментальные W-образные кривые, наблюдаемые в туннельных структурах полуметалл–изолятор–металл, носят явно аномальный характер. Для его объяснения были выдвинуты различные гипотезы, из которых наиболее широкое распространение получило предположение, согласно которому обсуждаемая особенность отражает детальную структуру электронного спектра полупроводникового электрода. Действительно, в полупроводниковых материалах, таких как Bi и Sn, на основе которых и изготавливались полупроводниковые электроды исследованных туннельных переходов, вблизи уровня Ферми имеются зоны, содержащие небольшие группы носителей заряда. Поэтому вполне естественно связать немонотонное поведение одной из вет-

вей туннельного спектра с особыми точками указанных зон, поставив в соответствие положение пиков и минимумов туннельной проводимости с краями, а пологих участков – с соответствующими седловыми точками указанных зон. Если бы удалось доказать (как это пытались сделать авторы работ [4,5]) справедливость такого подхода, то открылись бы самые широкие перспективы для изучения зонной структуры полупроводников методом электронного туннелирования. Для достижения поставленной цели были предприняты значительные усилия, особое место среди которых отводилось туннельным экспериментам, выполненным при высоких (вплоть до 36 kbar) давлениях.

В настоящей работе мы анализируем причины, в силу которых поставленная цель не была достигнута, и предлагаем новый эксперимент в условиях высоких гидростатических сжатий, который, по нашему мнению, позволит внести ясность в вопрос о связи особенностей туннельных спектров полупроводниковых электродов туннельных гетероструктур с их электронной зонной структурой.

### Теоретическая модель

Одно из основных препятствий на пути к зонным исследованиям полуметаллов методом электронного туннелирования состоит в том, что вплоть до настоящего времени не удавалось численно воспроизвести *W*-образное поведение барьерных характеристик изучаемых туннельных гетероструктур исходя из зонной структуры полуметаллических электродов. Как было показано в [6], в однозонной модели характерное для полуметаллов малое значение энергии Ферми не влияет на характер поведения их барьерных характеристик, а лишь вносит определенную асимметрию в расчетные кривые. Та-

кой вывод справедлив и при наличии дополнительных зон, и при использовании, как это было сделано в [7], нетривиального закона дисперсии полуметаллических материалов.

В настоящей работе мы выполнили расчет барьерной характеристики туннельного контакта полуметалл–изолятор–металл на основе более реалистичской зонной структуры изолирующего слоя, в которой перпендикулярная  $k_z$  и параллельная  $k_{||}$  барьеру составляющие волнового вектора электрона связаны с его полной энергией  $E$  соотношением [1]:

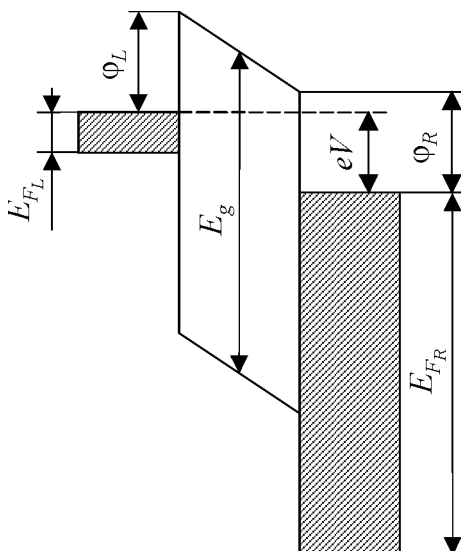


Рис. 1. Диаграмма потенциального барьера туннельного контакта полуметалл–изолятор–металл

$$k_z^2 = \frac{2m_i}{\hbar^2} \frac{(E - E_c)(E - E_v)}{E_g} - k_{||}^2. \quad (1)$$

Эта модель, известная в литературе как двухзонная модель Франца–Кейна (рис. 1), учитывает тот факт, что изолирующий барьер в твердотельных туннельных контактах представляет собой не потенциальную ступеньку, а запрещенную полосу энергии, верхним краем которой служит дно зоны проводимости изолятора  $E_c$ , а нижним – потолок валентной зоны  $E_v$ . Присутствующая в формуле (1) величина  $E_g = E_c - E_v$  – это ширина запрещенной зоны диэлектрика.

Для расчета туннельного тока используем формулу [1]:

$$I(V) = K \int_0^\infty dE [f_L(E) - f_R(E)] \int_0^{(m/m_i)E} dE_{\parallel} P(E, E_{\parallel}, V), \quad (2)$$

здесь  $K = 4\pi m_i e / h^3$ ;  $E_{\parallel}$  – компонента электронной энергии, параллельная плоскости туннельного барьера;  $m$  и  $m_i$  – эффективные массы электрона соответственно в электродах и изоляторе;  $f_L(E)$  и  $f_R(E)$  – функции распределения Ферми–Дирака соответственно левого и правого электродов,  $P(E, E_{\parallel}, V)$  – прозрачность барьера. Расчет прозрачности барьера выполним в рамках полуклассического приближения

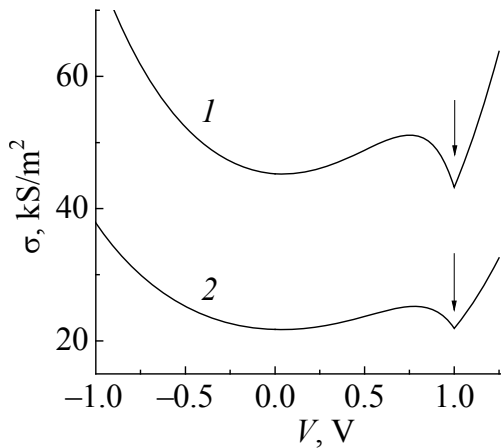
$$P(E, E_{\parallel}, V) = \exp \left\{ -2 \int_{z_1}^{z_2} dz \left[ -k_z^2(E, E_{\parallel}, V, z) \right]^{1/2} \right\}, \quad (3)$$

где  $z_1$  и  $z_2$  – классические точки поворота. При этом полагаем, что поперечная составляющая волнового вектора  $k_{\parallel}$  связана с соответствующей компонентой энергии  $E_{\parallel}$  обычной параболической зависимостью

$$k_{\parallel}^2 = \frac{2m_i}{\hbar^2} E_{\parallel}. \quad (4)$$

### Обсуждение полученных результатов

Результаты наших расчетов представлены на рис. 2. Как видим, зависимость дифференциальной туннельной проводимости от напряжения смещения на переходе  $\sigma(V)$  имеет два минимума: первый – в нуле напряжений, а положение второго в точности соответствует значению фермиевской энергии полуметаллического электрода  $eV = E_{FL}$ . Известно, что в тех случаях, когда уровень Ферми исследуемой системы расположен вблизи дна зоны проводимости либо потолка валентной зоны изолятора, результаты двух приближений – стандартного однозонного и рассматриваемого нами двухзонного должны совпадать. Иными словами, при уменьшении или увеличении высоты барьера  $\phi$   $W$ -образная зависимость  $\sigma(V)$  должна смениться на параболу. Предельный переход к однозонному приближению можно проделать, устремляя к бесконечности ширину запрещенной зоны  $E_g$ . Интересно отметить, что в этом случае такое превращение происходит за счет полного исчезновения первого минимума и размытия второго. При таком переходе



**Рис. 2.** Зависимости дифференциальной проводимости  $\sigma(V)$  туннельного контакта полуметалл–изолятор–металл в двухзонном приближении, рассчитанные для случая, когда уровень Ферми расположен вблизи середины запрещенной зоны диэлектрика. Кривая 1 соответствует толщине барьера  $d = 15 \text{ \AA}$ , а кривая 2 –  $d = 14.5 \text{ \AA}$ . Высота барьера и ширина запрещенной зоны в обоих случаях полагались равными соответственно  $\phi = \phi_L = \phi_R = 3 \text{ eV}$  и  $E_g = 8 \text{ eV}$ . Особенности, указанные стрелками, соответствуют  $eV = E_{FL}$

единственное отличие туннельной проводимости полуметаллических электродов от соответствующей зависимости для обычных металлических контактов заключается в следующем. Даже для симметричного прямоугольного барьера кривая  $\sigma(V)$  оказывается слегка асимметричной относительно нуля напряжений, что находится в полном соответствии с результатами, полученными ранее в [6].

Для доказательства того, что структура, наблюдаемая в зависимостях туннельной проводимости  $\sigma(V)$  контактов полуметалл–изолятор–металл, действительно отражает особенности зонной структуры полуметаллических электродов, авторы работы [8] предложили использовать высокие давления. Идея их эксперимента состоит в следующем. При температуре 77 К и давлении 37.5 kbar висмут претерпевает фазовое превращение из полуметаллической фазы Vi I в металлическую Vi III. Безусловно, подобный переход должен привести к соответствующим фундаментальным изменениям в туннельном спектре. К сожалению, реализовать туннельный эксперимент при указанных гидростатических сжатиях в работе [8] не удалось. Однако для доказательства справедливости дисперсионного соотношения (1) нет необходимости в столь высоких давлениях. Дело в том, что, как показывают наши расчеты, туннельный спектр, полученный в двухзонном приближении, крайне чувствителен к параметрам потенциального барьера. Так, уменьшение толщины барьера всего лишь на 0.5 Å (что согласно данным [9] достигается уже при давлении 20 kbar) должно приводить к более выразительным туннельным спектрам (см. рис. 2).

### Выводы

Двухзонная модель, которая основана на использовании дисперсионного соотношения (1) для описания затухания волнового вектора в изолирующем слое, детально исследовалась ранее в ряде теоретических и экспериментальных работ [1–3]. Основной вывод, к которому пришли их авторы, состоит в следующем – учет валентной зоны диэлектрической прослойки не приводит к каким-либо качественным изменениям в поведении туннельных кривых. В

настоящей работе мы впервые показали, что это утверждение справедливо лишь для обычных металлических электродов. В тех случаях, когда электродами являются полуметаллы с энергиями Ферми, малыми по сравнению с шириной запрещенной зоны изолирующего слоя  $E_g$ , форма туннельных характеристик может радикально отличаться от стандартной зависимости. В частности, расчетные зависимости  $\sigma(V)$  имеют  $W$ -образный вид и напоминают экспериментальные кривые, наблюдавшиеся ранее в экспериментах на туннельных контактах с полуметаллическими электродами Al-I-Bi и Al-I-Sn. Анализ экспериментальных кривых для гетероструктур с полуметаллами и полупроводниками позволяет надеяться на то, что метод электронного туннелирования может быть эффективно использован для исследования электронной зонной структуры этих материалов.

1. K.H. Gundlach, J. Appl. Phys. **44**, 5005 (1973).
2. H. Ekher, A. Hahn, J. Appl. Phys. **51**, 1686 (1980).
3. M. Brunner, H. Ekher, A. Hahn, J. Appl. Phys. **53**, 1596 (1982).
4. H.T. Chu, N.K. Eib, P.N. Henriksen, Phys. Rev. **B12**, 518 (1975).
5. H.T. Chu, N.K. Eib, P.N. Henriksen, S.M. Steel, Phys. Rev. **B18**, 4546 (1978).
6. А.И. Хачатуров, ФНТ **31**, 109 (2005).
7. A.I. Khachaturov, E. Hatta, V.M. Svistunov, J. Phys. Soc. Jpn. **131**, 131 (2003).
8. J.R. Vaisnys, D.B. McWhan, J.M. Rowell, J. Appl. Phys. **40**, 2623 (1969).
9. В.М. Свистунов, М.А. Белоголовский, О.И. Черняк, УФН **151**, 31 (1987).

T.A. Khachaturova, M.A. Belogolovskii, A.I. Khachaturov

## INFLUENCE OF INSULATOR VALENCE BAND ON BARRIER CHARACTERISTICS OF SEMIMETAL-INSULATOR-METAL TUNNEL JUNCTIONS

It is shown that a two-band approximation for the electronic structure of an insulating layer makes it possible to explain an anomalous  $W$ -like shape of barrier characteristics for semimetal-insulator-metal tunnel junctions. High-pressure tunneling experiments that may definitely answer the question concerning correspondence of tunnel spectrum features to details of the band structure of semiconducting electrodes are proposed and discussed.

**Fig. 1.** The energy band diagram for a semimetal-insulator-metal tunnel junction

**Fig. 2.** The differential tunnel conductance vs voltage bias  $\sigma(V)$  for a semimetal-insulator-metal tunnel junction for the two-band approximation calculated when the Fermi level is located near the middle of the forbidden insulator band at different barrier thicknesses: curve 1 -  $d = 15 \text{ \AA}$ , curve 2 -  $d = 14.5 \text{ \AA}$ . The barrier height  $\phi = \phi_L = \phi_R = 3 \text{ eV}$  and the magnitude of the forbidden band gap  $E_g = 8 \text{ eV}$  are constant parameters. Singularities shown by arrows correspond to  $eV = E_{F_L}$