

Institut Fizyki UMCS  
Zakład Fizyki Teoretycznej  
Kierownik: prof. dr Stanisław Szpikowski

Maksymilian PIŁAT, Karol Izydor WYSOKIŃSKI  
Ryszard TARANKO

### Tunelowanie elektronów w złączach metal—izolator—metal

Тунелирование электронов в системе М—И—М

The Electron Tunneling in MIM Junction

#### WSTĘP

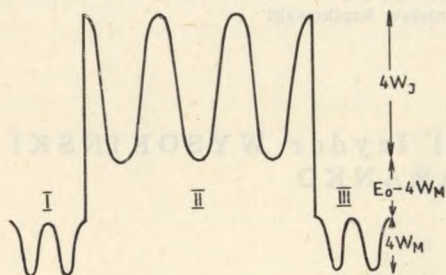
W większości prac dotyczących problemu tunelowania w złączach metal—izolator—metal, metal opisywano modelem Sommerfelda, natomiast izolator traktowano jako prostokątną barierę potencjalną. Zgodność wyników doświadczalnych z teorią bazującą na powyższym modelu używano wprowadzając parametry, takie jak „grubość efektywna” warstwy izolatora oraz „masa efektywna” tunelujących elektronów. Podejście takie nie dawało możliwości dokładnego zrozumienia zjawiska tunelowania.

S. L. Kurtin i współprac. [1] zaproponowali, aby przy interpretacji wyników doświadczalnych posłużyć się współczynnikiem transmisji elektronów przez warstwę izolatora, obliczonym przy pomocy metody Zenera [4]. W pracy [2] obliczono numerycznie współczynnik przenikalności  $D$  dla złącza, w którym izolator był opisany potencjałem Kroniga-Penneya. Prostem, ale bardziej realnym modelem potencjału jest potencjał kształtu  $\cos x - \cos y - \cos z$ .

Celem tej pracy jest znalezienie współczynnika  $D$  dla złącza o takim kształcie potencjału, zarówno w metalu, jak i w izolatorze, i porównanie go ze współczynnikiem Zenera obliczonym dla tego samego modelu złącza.

## MODEL

Przyjmujemy potencjał krystaliczny postaci (ryc. 1).



Ryc. 1. Model potencjału krystalicznego złącza użyty w pracy

$$V(x) = V_M(x) [\Theta(-x) + \Theta(x-x_1)] + V_I(x) \Theta(x-x_1) \Theta(x) \quad (1)$$

gdzie

$$V_M(x) = 2W_M \left( 1 + \cos \frac{2\pi}{a_M} x \right) - E_0$$

$$V_I(x) = 2W_I \left( 1 + \cos \frac{2\pi}{a_I} x \right)$$

$a_M, a_I$  — stałe sieci metalu ( $M$ ) i izolatora ( $I$ ),  $4W_M, 4W_I$  — amplitudy wahań potencjału (1) w odpowiednich obszarach,  $\Theta(x)$  — funkcja schodkowa, znikająca dla  $x < 0$ .

## WSPÓLCZYNNIK TUNELOWANIA

Współczynnik tunelowania  $D$  obliczamy jako stosunek prądów: przechodzącego przez izolator  $j_{tr}$  do padającego  $j_{pad}$ . Operator prądu jest zdefiniowany następująco:

$$j = j\psi = Re \left[ \psi^* \frac{\hbar}{im} \frac{d\psi}{dz} \right] \quad (2)$$

gdzie  $\psi$  jest funkcją spełniającą jednowymiarowe równanie Schrödingera oraz warunki brzegowe: a) funkcja  $\psi$  i jej pochodne są ciągłe w punktach nieciągłości potencjału, b) w obszarze III  $\psi$  reprezentuje falę biegnącą od bariery. Równanie Schrödingera w obszarach I, II, III przyjmuje postać równania Mathieu:

$$\frac{d^2\psi(z_i)}{dz_i^2} + [\lambda_i - 2q_i \cos 2z_i] \psi(z_i) = 0 \quad (3)$$

gdzie:  $i=1,2$  odpowiednio dla metalu  $M$  — obszar I, III oraz izolatora I — obszar II.

$$\lambda_i = \frac{2ma_i^2}{\hbar^2\Pi^2} [E + E_0^i - 2W_i]$$

$$E_0^1 = E_0; \quad E_0^2 = 0$$

$$q_i = \frac{4ma_i^2}{\hbar^2\Pi^2} W_i$$

$$Z_M = \frac{\Pi}{a_M} x; \quad Z_i = \frac{\Pi}{a_I} (x - x_1)$$

Rozwiązanie tego równania przedstawiamy w postaci [3]

$$\psi(z) = Ae^{i\beta z} \sum_{r=-\infty}^{+\infty} c_{2r+k} e^{i(2r+k)z} + Be^{-i\beta z} \sum_{r=-\infty}^{+\infty} c_{2r+k} e^{-i(2r+k)z} \quad (4)$$

W ostatnim wzorze  $k=0$  lub  $1$ , zależnie od parzystości odpowiedniego obszaru rozwiązań równania Mathieu [3]. Stałe  $\beta$ ,  $C_{2r+k}$  są funkcjami energii  $E$  i parametrów  $a_i$ ,  $W_i$ . W obszarze rozwiązań niestabilnych (przerwy energetyczne w kryształach) należy w rozwiązaniu (3) zastąpić  $\beta$  przez  $i\mu$  gdzie  $\mu$  jest rzeczywiste, dodatnie. Współczynniki  $C_{2r+k}$  staną się oczywiście liczbami zespolonymi. Po wstawieniu funkcji (4) do równania Mathieu (3) znajdujemy związki rekurencyjne pozwalające wyznaczyć parametry  $\beta$ ,  $\mu$  oraz współczynniki  $C_{2r+k}$ .

W przypadku tunelowania elektronów przez pasmo dozwolone izolatora otrzymujemy na współczynnik  $D$  wyrażenie:

$$D(E) = \left[ \cos^2 \varphi + \frac{1}{4} \left( p_1 + \frac{1}{p_1} \right)^2 \sin^2 \varphi \right]^{-1} \quad (5)$$

$$p_1 = \frac{a_I}{a_M} \frac{\sum (2r+k+\beta) C_{2r+k} \sum b_{2r+k}}{\sum C_{2r+k} \sum (2r+k+\beta) b_{2r+k}}$$

$$\varphi = \beta \frac{\Pi}{a_I} \chi_1$$

natomiast w przypadku tunelowania przez obszar zabroniony izolatora

$$D(E) = \left| i \cosh \varphi + \frac{1}{2} \left( p - \frac{1}{p} \right) \sinh \varphi \right|^{-2} \quad (6)$$

$$p = \frac{a_I}{a_M} \frac{\sum (2r+k+\beta) C_{2r+k} \sum a_{2r+k}}{\sum C_{2r+k} \sum (2ri+ki+\mu) a_{2r+k}}$$

$$\varphi = \mu \frac{\Pi}{a_I} X_1$$

W powyższych wzorach  $b_{2r+k}$ ,  $a_{2r+k}$  oznaczają współczynniki rozwinięcia funkcji Mathieu w obszarach energetycznie dozwolonych i niedozwolonych w izolatorze, natomiast  $c_{2r+k}$  współczynniki rozwinięcia w metalu.

#### METODA ZENERA OBLICZANIA $D$

Stosowane obecnie metody przybliżone obliczania współczynnika  $D$  są metodami WKB modyfikowanymi w ten sposób, że wektor falowy  $k = \sqrt{2m(E - V(x))/\hbar}$  jest zastępowany wektorem falowym  $k(E)$  wyznaczonym z rozwiązania równania Schrödingera dla izolatora. Zależność  $E(k)$  w obszarach dozwolonych energetycznie jest wyznaczana w standardowy sposób (struktura pasmowa). W pasmach zabronionych dopuszcza się rozwiązania o wektorze falowym zespolonym, a część urojona wektora  $Imk(E)$  interpretujemy jako współczynnik tłumienia [2].

Współczynnik Zenera [4] tunelowania międzypasmowego jest dany wzorem:

$$D(E) = \exp \left[ -2 \int_{x_1}^{x_2} Imk(E) dx \right] \quad (7)$$

gdzie  $L = x_2 - x_1$  jest długością drogi tunelowania. W naszym przypadku wartość  $k(E)$  w obszarze dozwolonych energii jest rzeczywista, zatem:

$$D(E) \equiv 1 \quad (8)$$

W obszarze zabronionym w izolatorze mamy:  $k(E) = i\mu\Pi/a_I$  oraz  $L = x_1$ . Korzystając z faktu, że  $k$  nie zależy od  $x$  znajdujemy ze wzoru (7)

$$D(E) = \exp \left[ -2 \mu \frac{\Pi}{a_I} X_1 \right] \quad (9)$$

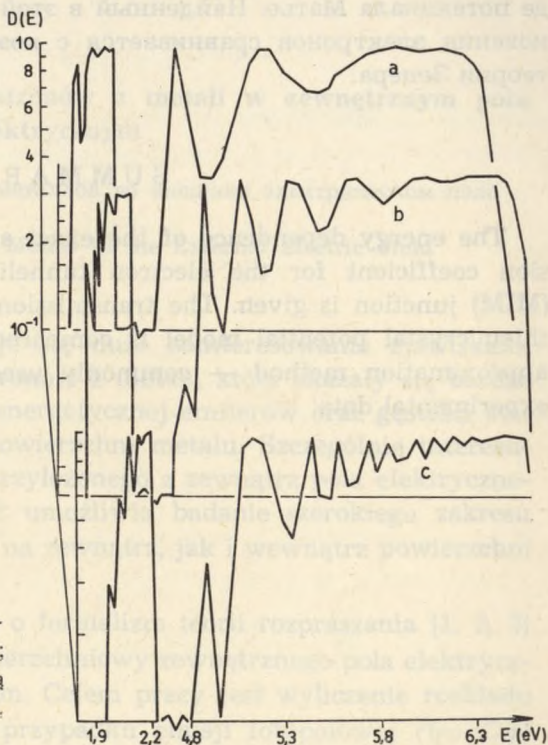
#### WYNIKI

W celu zbadania dokładności metody Zenera obliczono numerycznie współczynnik tunelowania dla przyjętego modelu w oparciu o dokładny wzór (5) oraz na podstawie przybliżonego (7). Obliczenia wykonano dla tunelowania elektronów przez pierwsze i drugie dozwolone pasmo izolatora.

Do obliczeń numerycznych przyjęto następujące parametry

$$a_M = 3 \text{ \AA}, a_I = 6 \text{ \AA}, W_M = 0.25 \text{ eV}, W_I = 1.36 \text{ eV}, E_0 = 2 \text{ eV}$$

Parametr  $\beta$  oraz współczynniki  $C_{2r+k}$  występujące we wzorze na  $D$  liczone były rachunkiem samouzgodnionym z dokładnością do  $10^{-4}$ . Rachunki przeprowadzono dla trzech różnych szerokości izolatora 24 Å, 48 Å, 198 Å. Zależność dokładnego współczynnika  $D$  od energii oraz jego zmiany z grubością warstwy przedstawia ryc. 2. W rozważanych obszarach energii (pasma dozwolone) współczynnik Zenera ma wartość  $D=1$ .



Ryc. 2. Wykres zależności współczynnika tunelowania od energii; poszczególne krzywe odpowiadają szerokościom izolatora: a — 24 Å, b — 48 Å, c — 198 Å

Widać wyraźne różnice między współczynnikiem obliczonym dokładnie, a współczynnikiem Zenera. Z tego powodu należy z dużą ostrożnością odnosić się do wyników uzyskanych metodami tunelowania z wykorzystaniem współczynnika Zenera.

#### PIŚMIENNICTWO

1. Kurtin S. L., McGill T. C.: Mead C.A. Phys. Rev. B **3**, 3368 (1971).
2. Leipold W. C., Feuchtwang T. E.: Phys. Rev. B **10**, 2195 (1974).

3. McLachlan N. W.: Theory and Application of Mathieu Functions. Clarendon Press, Oxford 1974.
4. Zener C.: Proc. R. Soc. A 145, 523 (1934).

### РЕЗЮМЕ

В настоящей работе дана энергетическая зависимость вероятности прохождения электронов через изолятор в системе металл—изолятор—металл (М—М—М). Кристаллический потенциал системы принят в виде потенциала Маттье. Найденный в этой работе коэффициент проникновения электронов сравнивается с коэффициентом вытекающим из теории Зенера.

### SUMMARY

The energy dependence of the exact analytically calculated transmission coefficient for the electron tunneling in metal—insulator—metal (MIM) junction is given. The transmission coefficient calculated for Mathieu crystal potential model is compared with that obtained from the approximation method — commonly used in the interpretation of the experimental data.