Физика низких температур, 1995, т. 21, № 8, с. 851–855 УДК 538.9

Размерный эффект в сопротивлении микроконтакта, содержащего точечные дефекты

Ю. А. Колесниченко, А. Н. Омельянчук, И. Г. Тулузов

Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины, Украина, 310164, г. Харьков, пр. Ленина, 47
E-mail: kolesnichenko@ilt.kharkov.ua

Статья поступила в редакцию 15 марта 1995 г.

Теоретически исследовано влияние точечных дефектов на проводимость баллистических микроконтактов. Показано, что размерная зависимость сопротивления $R(d)$ определяется соотношением между диаметром контакта d и характерным расстоянием r_0 между примесями. При $d \lesssim r_0$ величина $R(d)$ чувствительна к пространственному расположению рассеивателей в приконтактной области. Проведено численное моделирование проводимости контакта для случайных реализаций распределения примесей.

Теоретично досліджено вплив точкових дефектів на провідність балістичних мікроконтактів. Показано, що розмірна залежність опору $R(d)$ визначається співвідношенням між діаметром контакту d та характерним відстанням r_0 між домішками. При $d \lesssim r_0$ величина $R(d)$ чутлива до просторового розташування розсіювателів у приконтактній області. Проведено чисельне моделювання провідності контакту для випадкових реалізацій розподілу домішків.

Электрические контакты, получаемые сведением двух частей механически разломленного тонкого монокристаллического проводника (технология «break-junction» [1]), могут иметь размер сравнимый с атомным. Плавное изменение степени сжатия позволяет изменять площадь соприкосновения электродов и исследовать зависимость сопротивления микроконтакта R от его размеров. Очевидно, что в проводимости очень малых точечных контактов должны проявляться эффекты, связанные с влиянием единичных дефектов, сосредоточенных в приконтактной области.

Недавно в работе [2] с использованием методики break-junction наблюдался размерный эффект в сопротивлении микроконтактов, содержащих магнитные примеси. Оказалось, что форма и положение по шкале температур кондовских аномалий проводимости существенно зависят от диаметра сужения. Этот эффект авторы [2] связывают с изменением константы J спинового взаимодействия электронов в области пространственной неоднородности.

В настоящей работе мы покажем, что возможной причиной отклонения от предсказываемой формулой Шарвина [3,4] размерной зависимости сопротивления чистого контакта $R_0 \sim d^{-2}$ может быть наличие единичных точечных дефектов, находящихся на расстоянии от сужения, сравнимом с его диаметром d. Ниже мы ограничимся квазиклассическим приближением, считая, что размер контакта d значительно превышает дебройлевскую длину волны электрона, и можно не учитывать эффекты, связанные с размерным квантованием энергии, а также дифракцией электронных волн.

В этом случае ток через контакт может быть выражен через проинтегрированную по энергетической переменной $\xi = \varepsilon_{\mathrm{p}} - \varepsilon_F$ (ε_F — энергия Ферми) функцию Грина—Келдыша $g^K_{\mathrm{p}}(\mathrm{r}, \varepsilon)$ [5]

$$I = -\frac{\pi}{2} eN(0) \int_S d^2\vec{\rho} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \langle v_z g^K_{\mathrm{p}}(\vec{\rho}, \varepsilon)\rangle . \quad (1)$$

В формуле (1) интегрирование по $d^2\vec{\rho}$ проводится в пределах площади отверстия контакта S; v_z — параллельная оси контакта компонента скорости электрона $\mathrm{v} = \partial\varepsilon_{\mathrm{p}}/\partial\mathrm{p}$. Угловыми скобками обозначено усреднение по направлениям импульса p на поверхности Ферми $\varepsilon_{\mathrm{p}} = \varepsilon_F$, плотность состояний на которой равна $N(0)$.

В технике Келдыша [5] наряду с g^K_{p} фигурируют запаздывающая g^R_{p} и опережающая g^A_{p} функции Грина. Матрица

$$\hat{g}_{\mathrm{p}} = \begin{pmatrix} g^A_{\mathrm{p}} & g^K_{\mathrm{p}} \\ 0 & g^R_{\mathrm{p}} \end{pmatrix}, \quad (2)$$

удовлетворяющая условию нормировки $\hat{g}^2_{\mathrm{p}} = \hat{1}$, для несверхпроводящего металла является решением уравнения [6,7]

© Ю. А. Колесниченко, А. Н. Омельянчук, И. Г. Тулузов, 1995

$$iv\nabla\hat{g}_p = \left[\hat{t}, \hat{g}_p^{(0)}\right], \qquad (3)$$

в котором $\hat{g}_p^{(0)}$ — матрица функций Грина для чистого микроконтакта. Матрица рассеяния, имеющая аналогичную (2) структуру, должна быть найдена из уравнения Липпмана—Швингера

$$\hat{t} = \hat{V} - i\pi N(0)\hat{V}\langle\hat{g}_p^{(0)}\rangle\hat{t}, \qquad (4)$$

где $\hat{V} = \hat{V}(\mathbf{r})$ — рассеивающий потенциал.

Как следует из уравнения (3) и условия нормировки, в нормальном металле функции $g_p^{R,A}$ равны своим равновесным значениям $g_p^R = -g_p^A = 1$. Уравнение для g_p^K с учетом соотношения (4) можно записать в виде

$$v\nabla\hat{g}_p^K = 2\,\mathrm{Im}\,t^A\left\{\langle g_p^{(0)K}\rangle - g_p^{(0)K}\right\}. \qquad (5)$$

Граничное условие

$$g_p^K(\mathbf{r}, \varepsilon) = G_0\left(\varepsilon - \frac{1}{2}eU\,\mathrm{sgn}\,z\right) \quad \text{при} \quad |z| \to \infty \qquad (6)$$

обеспечивает восстановление равновесия в электронной системе в берегах контакта. В равенстве (6) $G_0(\varepsilon) = 2\,\mathrm{th}\,(\varepsilon/2T)$ — равновесная функция Грина (T — температура); U — напряжение, приложенное к микроконтакту. В отсутствие рассеяния ($\hat{t} = 0$) решением уравнения (5), удовлетворяющим условию (6), является функция

$$g_p^{(0)K}(\mathbf{r}, \varepsilon) = \alpha_p(\mathbf{r})G_0\left(\varepsilon + \frac{1}{2}eU\right) + \left(1 - \alpha_p(\mathbf{r})\right)G_0\left(\varepsilon - \frac{1}{2}eU\right), \qquad (7)$$

где $\alpha_p(\mathbf{r})$ имеет смысл вероятности прихода электрона в точку $\mathbf{r}$ со скоростью $\mathbf{v}$ из $-\infty$:

$$\alpha_p(\mathbf{r}) = \begin{cases}\theta(-z) + \mathrm{sgn}\,z\,, & \mathbf{v} \in \Omega(\mathbf{r})\,,\\ \theta(-z)\,, & \mathbf{v} \notin \Omega(\mathbf{r})\,,\end{cases} \qquad (8)$$

$\Omega(\mathbf{r})$ — телесный угол, под которым из точки $\mathbf{r}$ видно отверстие контакта (рис. 1):

$$\Omega(\mathbf{r}) = \int_S \frac{ds(\mathbf{r} - \vec{\rho})}{|\mathbf{r} - \vec{\rho}|^3}. \qquad (9)$$

Лежащий в плоскости отверстия радиус-вектор $\vec{\rho}$ направлен из центра контакта ($\mathbf{r} = 0$) к элементу площади ds.

Дальнейшие вычисления зависят от характеристик рассеивателей. В случае, когда имеется всего один дефект, взаимодействие электрона с которым описывается оператором $\hat{V}(\mathbf{r}) = \hat{V}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$, задача о вычислении микроконтактного тока может быть решена точно. Из уравнения (4) следует, что в модели δ-функционного рассеивающего потенциала правая часть соотношения (6) определяет скачок функции Келдыша δg_p в точке $\mathbf{r}_i$. Введем время τ движения электрона по траектории и проинтегрируем уравнение (5) вдоль характеристики $\mathbf{r}(\tau) = \vec{\rho} - \mathbf{v}\tau$, начинающейся в береге контакта ($\tau\,\mathrm{sgn}\,z = \infty$) и заканчивающейся на отверстии ($\tau = 0$). В результате для указанного скачка получаем

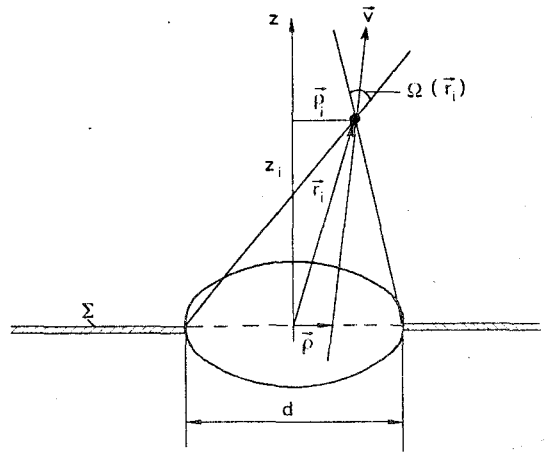

Рис. 1. Модель микроконтакта. Из точки $\mathbf{r}_i = (\vec{\rho}_i, z_i)$, в которой расположен точечный дефект, отверстие в диэлектрической перегородке Σ видно под телесным углом $\Omega(\mathbf{r}_i)$.

$$\delta g_p(\mathbf{r}_i, \varepsilon) = \frac{2}{v_z}\,\mathrm{Im}\,t^A\left\{\langle g_p^{(0)K}(\mathbf{r}_i, \varepsilon)\rangle - g_p^{(0)K}(\mathbf{r}_i, \varepsilon)\right\}\times \qquad (10)$$

$$\times\,\delta\left(\vec{\rho} - \vec{\rho}_i - \mathbf{v}_\perp\tau_i\right)\theta(\tau_i),$$

где $\mathbf{v}_\perp$ — перпендикулярная оси контакта составляющая скорости; $\mathbf{r}_i = (\vec{\rho}_i, z_i)$; $\tau_i = -z_i/v_z$ — «момент» столкновения с дефектом. Подставив в формулу (1) функции $g_p^{(0)K}$ в явном виде (7), приходим к следующему выражению для δg_p:

$$\delta g_p(\mathbf{r}_i, \varepsilon) = \frac{2}{|v_z|}\,\mathrm{Im}\,t^A\,\frac{\Omega(\mathbf{r}_i)}{4\pi}\left[G_0\left(\varepsilon + \frac{1}{2}eU\right) - G_0\left(\varepsilon - \frac{1}{2}eU\right)\right]\delta\left(\vec{\rho} - \vec{\rho}_i - \mathbf{v}_\perp\tau_i\right)\theta(\tau_i). \qquad (11)$$

Таким образом, функция Келдыша в плоскости отверстия контакта равна

$$g_p^K(\vec{\rho}, \varepsilon) = \begin{cases}G_0\left(\varepsilon + \frac{1}{2}eU\,\mathrm{sgn}\,z\right), & \tau_i < 0\,;\\ G_0\left(\varepsilon - \frac{1}{2}eU\,\mathrm{sgn}\,z\right) + \delta g_p\,, & \tau_i > 0\,.\end{cases} \qquad (12)$$

Подставляя g_p^K (12) с учетом соотношения (11) в выражение для электрического тока, находим

$$I = \frac{V}{R_0} - \frac{\pi}{2R_0 S}\left[\frac{\Omega(\mathbf{r}_i)}{2\pi}\right]^2 \times$$

$$\times \int \frac{d\varepsilon}{2\pi}\,\sigma(\varepsilon, \mathbf{r}_i)\left[G_0\left(\varepsilon + \frac{1}{2}eU\right) - G_0\left(\varepsilon - \frac{1}{2}eU\right)\right], \tag{13}$$

где $R_0^{-1} = 2e^2N(0)S\langle v_z\theta(v_z)\rangle$; R_0 — сопротивление идеально чистого микроконтакта (формула Шарвина [3,4]);

$$\sigma(\varepsilon, \mathbf{r}_i) = \frac{\operatorname{Im} t^A(\varepsilon, \mathbf{r}_i)}{2\langle v_z\theta(v_z)\rangle} \tag{14}$$

— эффективное сечение рассеяния электрона на точечном дефекте.

Формула (13) описывает зависимость сопротивления микроконтакта от его размера, которая существенно определяется положением дефекта в приконтактной области.

В простейшем случае изотропного рассеяния электронов на бесспиновой примеси ($\hat{V} = V\hat{1} =$ = const, $\hat{1}$ — единичная матрица) решение уравнения (4) может быть получено при произвольной величине потенциала взаимодействия V и имеет вид

$$\hat{t} = \frac{V\hat{1} - i\pi V^2\langle\hat{g}_p^{(0)}\rangle N(0)}{1 + [\pi N(0)V]^2}. \tag{15}$$

Используя формулы (13)–(15), для сопротивления микроконтакта $R = I/U$ получаем следующее выражение:

$$R^{-1} = R_0^{-1}\left\{1 - \frac{\sigma}{S}\left[\frac{\Omega(\mathbf{r}_i)}{2\pi}\right]^2\right\}, \tag{16}$$

в котором

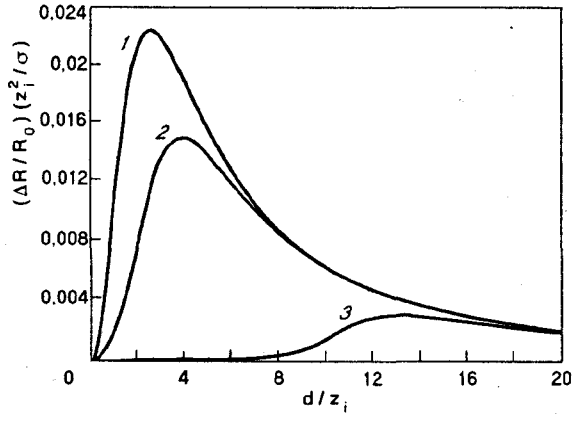

Рис. 2. Зависимость относительной добавки $\Delta R/R_0$ к баллистическому сопротивлению микроконтакта R_0 от его диаметра d для трех положений дефекта: $\rho_i/z_i = 0$ (*1*), 1 (*2*), 5 (*3*).

$$\sigma = \frac{\pi V^2 N(0)}{v_F\left[1 + (\pi N(0)V)^2\right]}.$$

На рис. 2 приведены кривые зависимости относительной добавки $\Delta R/R_0 = (R - R_0)/R_0$ к сопротивлению Шарвина R_0 от диаметра d для трех положений дефекта относительно центра отверстия.

Если находящийся в приконтактной области примесный атом имеет отличный от нуля спин s, то энергия взаимодействия электрона с таким атомом содержит слагаемое $\hat{V} = J\hat{\vec{\sigma}}\hat{s}$ ($\hat{\vec{\sigma}}$ — оператор спина электрона, J — константа обменного взаимодействия). Нахождение оператора $\hat{t}$ для процесса рассеяния с переворотом спина представляет собой весьма сложную задачу (проблему Кондо). При температурах выше температуры Кондо $T_K \sim$ $\sim \varepsilon_F e^{-1/NJ}$ для матрицы рассеяния может быть построен борновский ряд. В результате стандартных вычислений [8] во втором борновском приближении получаем

$$t^K = -\frac{i}{2}\Gamma(\mathbf{r}, \varepsilon)\langle g_p^{(0)K}\rangle; \tag{17}$$

$$t^{R,A} = \int \frac{d\varepsilon'}{2\pi}\,\frac{\Gamma(\mathbf{r}, \varepsilon')}{\varepsilon - \varepsilon' \pm i0},$$

где

$$\Gamma(\mathbf{r}, \varepsilon) = \pi N(0)J^2 s(s+1) \times$$

$$\times\left[1 - \frac{JN(0)}{2}\int d\varepsilon'\,\frac{\langle g_p^{(0)K}\rangle}{\varepsilon - \varepsilon'}\right].$$

Подставляя t^A (17) в формулу для тока (13), можно формально записать дифференциальное сопротивление микроконтакта $R = dI/dU$ в форме (16), обозначив буквой σ функцию напряжения и температуры:

$$\sigma(U, T) = \frac{\pi N(0)J^2 s(s+1)}{2v_F}\left[1 - \frac{JN(0)}{4e}\frac{d}{dU}F(eU)\right], \tag{18}$$

где

$$F(eU) = \int_0^\infty d\varepsilon\,\varepsilon G_0(\varepsilon) \times$$

$$\times\int_0^\infty \frac{d\varepsilon'}{\varepsilon^2 - \varepsilon'^2}\left[G_0\left(\varepsilon' - eU\right) - G_0\left(\varepsilon' + eU\right)\right].$$

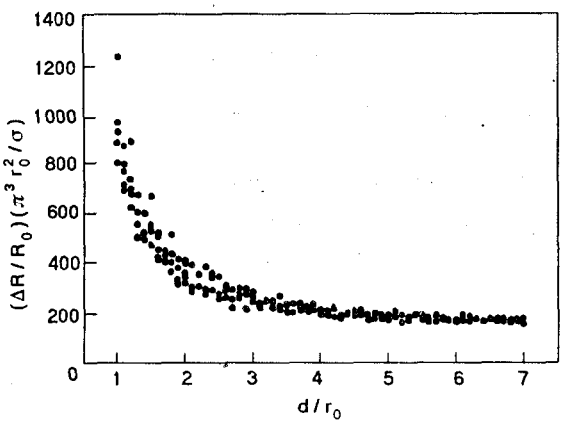

Рис. 3. Зависимость нормированной добавки к сопротивлению от отношения диаметра контакта d к характерному расстоянию между дефектами r_0 для различных случайных реализаций их распределения в приконтактной области.

Второе слагаемое в квадратных скобках выражения (18), зависящее от напряжения и температуры, описывает кондовскую аномалию на вольт-амперной характеристике контакта.

В случае любого числа дефектов $N > 1$, пренебрегая в квазиклассическом приближении корреляциями между отдельными актами рассеяния, оператор системы $\hat{t}$ можно представить в виде суммы $\hat{t}$-операторов рассеяния на изолированных дефектах. В этом приближении сопротивление микроконтакта, содержащего N дефектов, согласно выражению (13), имеет следующий вид:

$$R^{-1} = R_0^{-1}\left\{1 - \frac{\sigma}{S}\sum_{i=1}^{N}\left[\frac{\Omega(\mathbf{r}_i)}{2\pi}\right]^2\right\}. \qquad (19)$$

Если характерное расстояние между рассеивателями $r_0 \simeq n_i^{-1/3}$ (n_i — концентрация дефектов) намного превышает размер контакта $r_0 >> d$, то практически для всех телесных углов $\Omega(\mathbf{r}_i) \simeq S/r_i^2$. Выделяя в формуле (19) вклад в R дефектов, находящихся на расстояниях $r_i >> d$ от отверстия, для относительной добавки к сопротивлению имеем

$$\frac{\Delta R}{R_0} \simeq \frac{\sigma}{S}\sum_{r_i \lesssim d}\left[\frac{\Omega(\mathbf{r}_i)}{2\pi}\right]^2 + \frac{S}{l_i r}, \qquad (20)$$

где $l_i^{-1} = \sigma n_i$; $r \simeq r_0$. Первое слагаемое в формуле (20), пропорциональное d^{-2}, существенно для контактов малого диаметра и вместе с растущим пропорционально d^2 вторым слагаемым определяет минимум на размерной зависимости $(\Delta R/R_0)(d)$. Результаты численного расчета по формуле (19) (рис. 3) показывают, что упомянутый выше минимум функции $(\Delta R/R_0)(d)$ является весьма пологим, и существует область диаметров $d > r_0$, в которой относительная добавка к сопротивлению практически постоянна. Это обстоятельство следует принимать во внимание при анализе экспериментальных результатов работы [2], в которой в интервале d = 1–100 нм на микроконтактах из меди, содержащей 0,1 ат.% марганца, наблюдалась зависимость $(\Delta R/R_0) \sim d^{0,2}$ (при n_i = 0,1 ат.% $r_0 \simeq 1$ нм).

Отметим, что с увеличением числа N абсолютная величина $\Delta R/R_0$ все менее чувствительна к пространственному распределению дефектов. Сказанное иллюстрирует рис. 3, на котором приведены зависимости $\Delta R/R_0$ от d/r_0. Видно, что при фиксированном d с уменьшением расстояния между примесями r_0 разброс значений $\Delta R/R_0$, отвечающих различным случайным реализациям распределения рассеивателей, уменьшается.

Если же $d >> r_0$, эффект влияния положения дефектов на сопротивление микроконтакта отсутствует. Указанное неравенство позволяет перейти в формуле (19) от суммирования по координатам $\mathbf{r}_i$ к интегрированию по всему пространству. В результате (для контакта в форме круглого отверстия) получаем

$$\Delta R/R_0 = (16/3\pi) n_i \sigma d. \qquad (21)$$

Выражение (21) совпадает с полученным ранее [9] в борновском приближении результатом, если в последнем заменить борновское сечение рассеяния на полное сечение σ (16).

Таким образом, с увеличением концентрации примесей n_i, приводящим к изменению соотношения между характерным расстоянием между примесями $r_0 = n_i^{-1/3}$ и диаметром d, существенно меняется размерная зависимость сопротивления микроконтакта, хотя с точки зрения существующей классификации [10] контакт остается баллистическим, т.е. выполняется неравенство $d << l_i$:

$$\frac{\Delta R}{R_0} \sim \begin{cases} d/l_i, & r_0 << d; \\ \dfrac{d^2}{l_i r_0} + \dfrac{N_0 \sigma}{d^2}, & r_0 >> d, \end{cases} \qquad (22)$$

где N_0 — число дефектов в приконтактной области. Функциональная зависимость добавки к сопротивлению баллистического микроконтакта от диаметра d может служить критерием для определения величины r_0 и, следовательно, концентрации дефектов n_i в области микросужения. При малых концентрациях особую роль играют дефекты, находящиеся на расстояниях $r_i \lesssim d$ от отверстия

контакта. Влияние указанных дефектов на сопротивление определяется их пространственным распределением, приводя к разнообразным (случайным) зависимостям $R(d)$, и представляет собой своеобразный «классический мезоскопический эффект» [11]. В отличие от упругого рассеяния на обычных дефектах (σ = const), приводящего к изменению омического сопротивления контакта, рассеяние электронов на единичных магнитных примесях приводит к нелинейной по напряжению добавке к сопротивлению Шарвина. Последняя может быть выделена в эксперименте методом микроконтактной спектроскопии. При этом расположение примесей относительно контакта существенно влияет на интенсивность и положение (по шкале напряжений) кондовской аномалии на микроконтактном спектре.

Авторы благодарны И. К. Янсону и J. M. Riutenbeek за полезные обсуждения результатов работы.

Работа частично поддержана грантом Сороса U9V200 и N.W.O. проектом перспективного сотрудничества между Украиной и Нидерландами.

1. C. J. Muller, J. M. van Ruitenbeek, and L. J. de Jong, *Physic* **C191**, 485 (1992).
2. I. K. Yanson, V. V. Fisun, R. Hesper, A. V. Khotkevich J. M. Krans, J. A. Mydosh, J. M. van Ruitenbeek, *Phys. Re Lett.* **74**, 302 (1995).
3. Ю. В. Шарвин, *ЖЭТФ* **48**, 984 (1965).
4. И. О. Кулик, А. Н. Омельянчук, Р. И. Шехтер, *ФНТ* **3** 1543 (1977).
5. Л. В. Келдыш, *ЖЭТФ* **47**, 1515 (1964).
6. G. Eilenberger, *Z. Phys.* **214**, 195 (1968).
7. A. N. Omelyanchouk, R. de B. Ouboter, and C. J. Muller, *ФНТ* **20**, 510 (1994).
8. Ю. М. Иванченко, Г. А. Труш, *ЖЭТФ* **67**, 352 (1974).
9. А. Н. Омельянчук, И. Г. Тулузов, *ФНТ* **11**, 388 (1985).
10. И. О. Кулик, *ФНТ* **18**, 450 (1992).
11. Ю. М. Гальперин, В. И. Козуб, *ФНТ* **18**, 494 (1992).

Size effect in resistance of point-defect point-contacts

Yu. A. Kolesnichenko, A. N. Omelyanchouk, and I. G. Tuluzov

The effect of point defects on conductivity of ballistic point contacts is studied theoretically. It is shown that the size dependence of resistance, $R(d)$ is defined by the ratio between contact diameter d and impurity-impurity separation r_0. For $d \lesssim r_0$, the value of $R(d)$ is sensitive to spatial arrangement of scatterers in the near-contact region. Numerical simulation of point contact conductivity is made for a random distribution of impurities.