1996 ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА Том 38, № 4
1996 SOLID STATE PHYSICS Vol. 38, N 4

ТУННЕЛЬНАЯ ПРОВОДИМОСТЬ ЧАСТИЧНО-ДИЭЛЕКТРИЗОВАННЫХ МЕТАЛЛОВ С ВОЛНАМИ ЗАРЯДОВОЙ ИЛИ СПИНОВОЙ ПЛОТНОСТИ

© *А.И.Войтенко, А.М.Габович*

Институт физики Академии наук Украины,
252650 Киев, Украина
(Поступила в Редакцию 16 марта 1995 г.
В окончательной редакции 19 сентября 1995 г.)

Рассчитаны вольт-амперные характеристики симметричных и несимметричных туннельных переходов, содержащих металлы с волнами зарядовой или спиновой плотности и диэлектрической щелью Σ на части поверхности Ферми. Для симметричных переходов имеются корневые сингулярности при $eV = \pm\Sigma$ и скачки при $eV = \pm 2\Sigma$. Для несимметричных переходов вольт-амперные характеристики зависят от знака Σ и являются асимметричными. Полученные результаты хорошо согласуются с туннельными и микроконтактными данными для слоистых дихалькогенидов, $NbSe_3$ и URu_2Si_2.

Туннельные исследования сверхпроводников служат мощным инструментом для выявления щелевого характера электронного спектра, а также деталей электрон-фононного спаривания в соответствующих веществах [1]. В то же время хорошо известно, что существуют нормальные металлы, в которых происходят переходы в состояния с волнами зарядовой (ВЗП) или спиновой (ВСП) плотности, с сохранением металлического характера проводимости при температурах T ниже температуры $T_d = T_s$ (для структурных превращений) или $T_d = T_N$ (для антиферромагнитных переходов) [2,3]. ВЗП и ВСП сопровождаются возникновением диэлектрической щели Σ на конгруэнтных участках поверхности Ферми (ПФ). Таким образом, было бы очень интересно исследовать вольт-амперные характеристики (ВАХ) $J(V)$ таких металлов и сравнить их с ВАХ сверхпроводников. Недавно такие эксперименты были проведены не только обычным методом туннельной спектроскопии, но также и с помощью микроконтактной спектроскопии и сканирующей туннельной микроскопии. Были исследованы слоистые дихалькогениды [4], $NbSe_3$ [5–7] и соединение с тяжелыми фермионами URu_2Si_2 [8,9]. Экспериментальные ВАХ этих соединений существенно отличаются от их сверхпроводящих аналогов и будут обсуждаться в отдельной работе. Здесь же необходимо упомянуть только об удивительной асимметрии проводимостей $G(V) = dJ/dV$ для большинства несимметричных переходов, о частичном заполнении щелевой области энергий и о часто встречающейся замене ожидаемых индуцируемых щелью логарифмических сингулярностей менее выраженными особенностями.

В данной работе представлена теория ВАХ в переходах, содержащих частично диэлектризованные металлы, основанная на модели [10], которая была первоначально разработана и успешно применена для сверхпроводника с диэлектризованными участками ПФ [11]. В приближении молекулярного поля соответствующий гамильтониан имеет вид

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{MF}}, \tag{1}$$

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \sum_{r=1}^{3} \sum_{\mathbf{p}\alpha} \xi_r(\mathbf{p}) a^+_{r\mathbf{p}\alpha} a_{r\mathbf{p}\alpha}. \tag{2}$$

Индекс суммирования r в (2) соответствует различным участкам ПФ. В частности, для конгруэнтных участков 1 и 2 (nesting) электронный спектр вырожден

$$\xi_1(\mathbf{p}) = -\xi_2(\mathbf{p} + \mathbf{Q}), \tag{3}$$

где $\mathbf{Q}$ — волновой вектор ВЗП или ВСП ($\hbar = 1$). На остальной части ПФ ($r = 3$) спектр невырожден и описывается функцией $\xi_3(\mathbf{p})$. Операторы $a^+_{r\mathbf{p}\alpha}$ и $a_{r\mathbf{p}\alpha}$ суть операторы рождения и уничтожения квазичастицы с квазиимпульсом $\mathbf{p}$ и проекцией спина α с r-го участка ПФ. Член $\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{MF}}$ различен для случаев ВЗП и ВСП

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{CDW}} = -\sum_{r=1}^{2} \sum_{\mathbf{p}\alpha} \left(\Sigma a^+_{r\mathbf{p}\alpha} a_{r,\mathbf{p}+\mathbf{Q},\alpha} + \mathrm{H.c.}\right), \tag{4}$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{SDW}} = -2\sum_{r=1}^{2} \sum_{\mathbf{p}\alpha} \left(\alpha\Sigma a^+_{r\mathbf{p}\alpha} a_{r,\mathbf{p}+\mathbf{Q},\alpha} + \mathrm{H.c.}\right). \tag{5}$$

Возникновение параметра порядка Σ есть результат экситонной или пайерлсовской неустойчивости электронного спектра (3). В нашем случае Σ — действительная величина и может быть как положительной, так и отрицательной. Мы рассмотрим два особых случая туннелирования с участием ВЗП- (или ВСП-) металлов: 1) через симметричный (s) переход между двумя тождественными, частично диэлектризованными электродами; 2) через несимметричный (ns) переход между ВЗП- (или ВСП-) металлом и обычным металлом. В соответствии с экспериментом для большинства ВЗП- и ВСП-соединений будем предполагать пиннинг волн, например на дефектах или вследствие несоизмеримости ВЗП (ВСП) с исходной кристаллической решеткой. Таким образом, эффекты скольжения волн и когерентные высокочастотные явления [2] исключаются из рассмотрения. Мы используем стандартную теорию [12] в предположении равенства всех туннельных матричных элементов $T_{\mathbf{pq}}$, связывающих различные части ПФ.

В симметричном случае получаем

$$J_{\mathrm{s}}(V) = \frac{1}{2\pi^3 e R_{\mathrm{s}} (1+\nu)^2} \mathrm{Re}\Big\{ \iint\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega d\omega' (\omega - \omega' - eV + i\delta)^{-1} \times$$

$$\times \mathrm{Im}\left[G_{\mathrm{d}}(\omega) G_{\mathrm{d}}(\omega') + \nu^2 G_{\mathrm{nd}}(\omega) G_{\mathrm{nd}}(\omega') + 2\nu G_{\mathrm{d}}(\omega) G_{\mathrm{nd}}(\omega') + G_{is}(\omega) G_{is}(\omega')\right]\Big\}. \tag{6}$$

Здесь $\nu = N_{\mathrm{nd}}(0)/N_{\mathrm{d}}(0)$ — параметр, характеризующий степень «диэлектризации» ПФ, $N_{\mathrm{nd}}(0)$ и $N_{\mathrm{d}}(0)$ — плотности электронных состояний на недиэлектризованной (nd) и диэлектризованной (d) частях ПФ, а R_{s} — сопротивление туннельного перехода в недиэлектризованном состоянии

$$R_{\mathrm{s}}^{-1} = 4\pi e^2 N^2(0) \left\langle |T_{pq}|^2 \right\rangle_{\mathrm{FS}}, \quad N(0) \equiv N_{\mathrm{nd}}(0) + N_{\mathrm{d}}(0). \tag{7}$$

Различные функции Грина, входящие в (6), — это проинтегрированные по энергиям временны́е функции Грина $G(\mathbf{p},\omega)$, связанные дисперсионными соотношениями с запаздывающими функциями $G^R(\omega)$. В свою очередь последние являются аналитическим продолжением температурных функций Грина $G(\omega_n)$ на действительную ось переменной $i\omega_n = i(2n+1)\pi T$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ [12]. Для металла с частичной диэлектризацией вырожденного электронного спектра [10] величины $G(\mathbf{p},\omega_n)$ до интегрирования по энергиям имеют вид [11]

$$G_{\mathrm{nd}}(\mathbf{p},\omega_n) = -\frac{i\omega_n + \xi_3(\mathbf{p})}{\omega_n^2 + \xi_3^2(\mathbf{p})}, \tag{8}$$

$$G_{\mathrm{d}}(\mathbf{p},\omega_n) = -\frac{i\omega_n + \xi_1(\mathbf{p})}{\omega_n^2 + \xi_1^2(\mathbf{p}) + \Sigma^2}, \tag{9}$$

$$G_{is}(\mathbf{p},\omega_n) = -\frac{\Sigma}{\omega_n^2 + \xi_1^2(\mathbf{p}) + \Sigma^2}. \tag{10}$$

Функция (10) соответствует электрон-дырочному спариванию квазичастиц [13]. Выражение для тока $J_s(V)$ содержит громоздкие интегралы, аналогичные полученным в [12], и будет приведено в более полном варианте статьи. Существенно, однако, что $J_s(V)$ не зависит от знака Σ. При $T = 0$ получается следующая простая формула:

$$J_{\mathrm{s}}(V) = \frac{1}{eR_{\mathrm{s}}(1+\nu)^2}\Big\{\nu^2 eV + 2\nu\Theta(eV-\Sigma_0)\sqrt{(eV)^2-\Sigma_0^2} +$$

$$+\,\Theta(eV-2\Sigma_0)\Big[(eV+2\Sigma_0)\mathbf{E}(\mu) - 4\Sigma_0\mathbf{K}(\mu)\Big]\Big\}. \tag{11}$$

Здесь $\mu = (eV-2\Sigma_0)/(eV+2\Sigma_0)$, $\Theta(x)$ — функция Хевисайда, $\mathbf{K}(\mu)$ и $\mathbf{E}(\mu)$ — полные эллиптические интегралы первого и второго рода соответственно, а $\Sigma_0 = |\Sigma(T=0)|$. Анализ показывает, что $J_s(V)$ и проводимость $G_s(V) = dJ_s/dV$ в окрестности энергетической щели $|\Sigma(T)|$ существенно отличаются от известных результатов [1] для сверхпроводников, а именно имеются корневая, сглаживающаяся при повышении T особенность $G_s(V)$ при $eV = \pm\Sigma_0$ и скачок $\Delta G_s = \pi\,\mathrm{th}(\Sigma/2T)/2R_{\mathrm{s}}(1+\nu)^2$ при $eV = \pm 2\Sigma_0$. В то же время особенность при $V = 0$ и конечных T [12] в исследуемом случае сохраняется

$$G_{\mathrm{s}}(V \to 0) \approx \frac{|\Sigma|}{2TR_{\mathrm{s}}(1+\nu)^2 \mathrm{ch}^2\left(\frac{\Sigma}{2T}\right)} \ln\left[\frac{\min(T,|\Sigma|)}{eV}\right]. \tag{12}$$

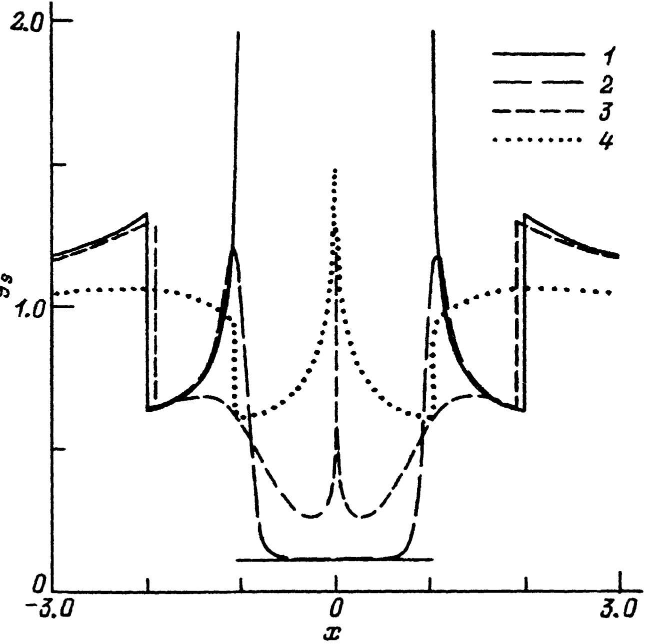

Рис. 1. Зависимость безразмерной проводимости g_s симметричного туннельного перехода от безразмерного смещения x для $\nu = 0.5$ и различных значений приведенной температуры $t = T/T_d$.
t: *1* — 0, *2* — 0.1, *3* — 0.5, *4* — 0.9.

На рис. 1 для $\nu = 0.5$ приведены зависимости безразмерной проводимости $g_s = G_s R_s$ от $x = eV/\Sigma_0$ при различных значениях $t = T/T_d$ в предположении о зависимости $\Sigma(T)$, соответствующей теории Бардина–Купера–Шриффера (БКШ) [1]. Вообще говоря, такая зависимость является следствием лишь простейших вариантов теории перехода металла в перестроенную фазу [2,3,13]. Но ввиду неясности экспериментальной ситуации и непринципиальности выбора какой-то конкретной зависимости $\Sigma(T)$ мы ограничимся здесь и далее кривой $\Sigma_{\mathrm{BCS}}(T)$. Видно, что имеется частичное заполнение щелевого провала даже при $T = 0$, а сама зависимость $g_s(x)$ носит сложный характер, существенно зависящий от t.

Для несимметричного перехода ВЗП- (ВСП-) металл/изолятор/обычный металл, где при $V > 0$ мы предполагаем, что потенциал обычного металла выше, туннельный ток определяется выражением

$$J_{\mathrm{ns}}(V) = \frac{1}{2\pi^3 e R_{\mathrm{ns}}(1+\nu)} \mathrm{Re}\left\{ \iint\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega d\omega' (\omega - \omega' - eV + i\delta)^{-1} \times \right.$$

$$\left. \times \, \mathrm{Im}\Big[G_{\mathrm{d}}(\omega) G_0(\omega') + \nu G_{\mathrm{nd}}(\omega) G_0(\omega') + G_{is}(\omega) G_0(\omega') \Big] \right\}, \qquad (13)$$

где $G_0(\omega)$ — функция Грина обычного металла. Сопротивление несимметричного туннельного перехода отличается от (7)

$$R_{\rm ns}^{-1} = 4\pi e^2 N(0) N_0(0) \left\langle |T_{\bf pq}|^2 \right\rangle_{\rm FS}, \tag{14}$$

где $N_0(0)$ — электронная плотность состояний на уровне Ферми обычного металла. В отличие от предыдущего случая ток $J_{ns}(V)$ и соответствующая проводимость $G_{ns}(V) = dJ_{ns}/dV$ не являются ни четными, ни нечетными функциями смещения. Кроме того, ВАХ зависят от знака Σ.

При $T = 0$ из (13) следуют простые аналитические формулы

$$J_{\rm ns}(V) = \frac{1}{eR_{\rm ns}(1+\nu)} \left\{ \nu eV \pm \Theta(|eV| - |\Sigma|) \times \right.$$

$$\left. \times \left[\sqrt{(eV)^2 - \Sigma^2} \pm \Sigma \ln \frac{|eV| + \sqrt{(eV)^2 - \Sigma^2}}{|\Sigma|} \right] \right\}, \tag{15}$$

$$G_{\rm ns}(V) = \frac{1}{R_{\rm ns}(1+\nu)} \left[\nu + \Theta(|eV| - |\Sigma|) \left(\frac{|eV| \pm \Sigma}{|eV| \mp \Sigma} \right)^{1/2} \right]. \tag{16}$$

Знаки в (15) и (16) совпадают со знаком V. Подчеркнем, что наличие диэлектрической щели в спектре квазичастиц приводит для несимметричного перехода к аномально большой поправке к закону Ома при

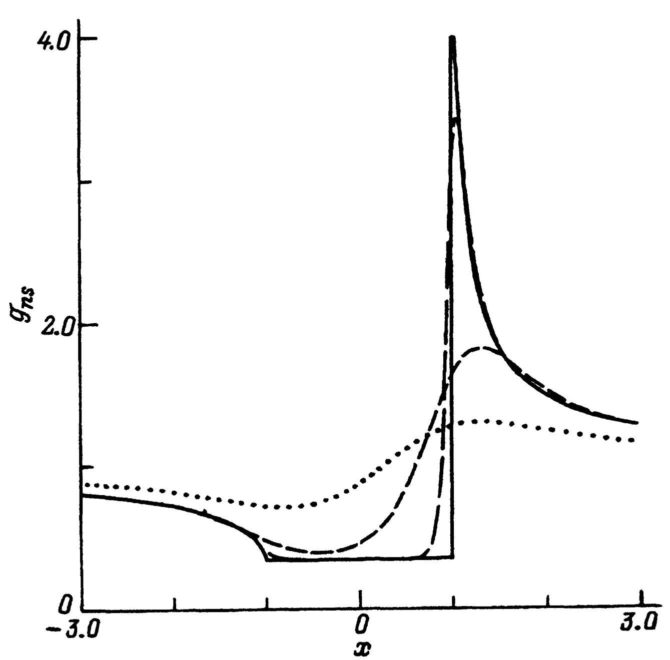

Рис. 2. То же, что на рис. 1, для проводимости $g_{\rm ns}$ несимметричного перехода.

$|eV/\Sigma| \to \infty$, которую можно обнаружить экспериментально

$$J_{\rm ns}(V) \approx \frac{V}{R_{\rm ns}} \left(1 \pm \frac{\Sigma}{|eV|(1+\nu)} \ln \left| \frac{2eV}{\Sigma} \right| \right). \tag{17}$$

На рис. 2 показана зависимость $g_{\rm ns}(x) = G_{\rm ns} R_{\rm ns}$ при $\nu = 0.5$, $\Sigma > 0$ и различных значениях t. Как видно, ВАХ существенно асимметрична, причем для одной полярности имеется логарифмическая особенность, а для другой — излом. Как и для симметричного перехода, щель в спектре частично заполняется вследствие неполной диэлектризации электронного спектра. При $\Sigma < 0$ график $g_{\rm ns}(x)$ представляет собой зеркальное отображение кривых с рис. 2 относительно оси ординат. Поскольку энергия перестроенной электронной системы не зависит от знака Σ [11], то реализация ВАХ того или иного вида будет определяться случайными флуктуациями при замыкании цепи.

Предсказанные особенности ВАХ для симметричного перехода нуждаются в экспериментальной проверке. В то же время рассчитанные нами ВАХ для несимметричных туннельных переходов хорошо качественно объясняют результаты [4–9], полученые для ВЗП- и ВСП-металлов. Особенно хорошее согласие достигается для контактов, содержащих URu_2Si_2 [8,9]. Это соединение, как было указано ранее [14], переходит в ВСП-состояние с частичной диэлектризацией электронного спектра при $T < T_N \geqslant 17\,\mathrm{K}$ с $\nu \approx 1.5$ и описывается моделью [10], на которой базируется наше рассмотрение.

Список литературы

[1] Свистунов В.М., Белоголовский М.А. Туннельная спектроскопия квазичастичных возбуждений в металлах. Киев (1986). 148 с.
[2] Grüner G. Rev. Mod. Phys. **60**, *4*, 1129 (1988).
[3] Grüner G. Rev. Mod. Phys. **66**, *1*, 1 (1994).
[4] Wang C., Giambattista B., Slough C.G., Coleman R.V., Subramanian M.A. Phys. Rev. **B42**, *14*, 8890 (1990).
[5] Fournel A., Sorbier J.P., Konczykowski M., Monceau P. Phys. Rev. Lett. **57**, *17*, 2199 (1986).
[6] Dai Z., Slough C.G., Coleman R.V. Phys. Rev. **B45**, *16*, 9469 (1992).
[7] Ekino T., Akimitsu J. Physica **B194–196**, Pt.1, 1221 (1994).
[8] Nowack A., Naidyuk Yu.G., Chubov P.N., Yanson I.K., Menovsky A.Z. Phys. **B88**, *3*, 295 (1992).
[9] Escudero R., Morales F., Lejay P. Phys. Rev. **B49**, *21*, 15271 (1994).
[10] Bilbro G., McMillan W.L. Phys. Rev. **B14**, *5*, 1887 (1976).
[11] Gabovich A.M. High-T_c Superconductivity, Experiment and Theory / Ed. A.S. Davydov and V.M. Loktev. Springer. Berlin (1992). P. 161–169.
[12] Ларкин А.И., Овчинников Ю.Н. ЖЭТФ **51**, *5(11)*, 1535 (1966).
[13] Копаев Ю.В. Тр. ФИАН СССР **86**, 3 (1975).
[14] Maple M.B., Chen J.W., Dalichaouch Y., Kohara T., Rossel C., Torikachvill M.S., McElfresh M.W. Phys. Rev. Lett. **56**, *2*, 185 (1986).