Письма в ЖЭТФ, том 65, вып.1, стр.50 - 55 © 1997г. 10 января

ХАРАКТЕР ОТРАЖЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ НА ГРАНИЦЕ НОРМАЛЬНЫЙ МЕТАЛЛ – ПАЙЕРЛСОВСКИЙ ПОЛУПРОВОДНИК

С.Н.Артеменко[1], *С.В.Ремизов*

Институт радиотехники и электроники РАН

103907 Москва, Россия

Поступила в редакцию 11 ноября 1996 г.

После переработки 25 ноября 1996 г.

Теоретически исследуется отражение электронов, падающих из нормального металла на границу с квазиодномерным проводником с волной зарядовой плотности (ВЗП). Показано, что отражение имеет не андреевский, а брэгговский характер, что связано с тем, что ВЗП фактически является электронным кристаллом, а ее волновой вектор является вектором обратной решетки электронного кристалла. Отношение интенсивностей обычного и брэгговского отражения зависит от фазы ВЗП.

PACS: 72.15.Nj, 73.20.Mf

Как хорошо известно (см., например, [1]), в квазиодномерных проводниках ниже температуры пайерлсовского перехода образуется электронный кристалл – волна зарядовой или спиновой плотности, с движением которой под действием электрического поля связан коллективный механизм проводимости. Ниже мы для определенности будем рассматривать волну зарядовой плотности (ВЗП), но полученные результаты применимы и к случаю волны спиновой плотности.

Имеется формальная аналогия между пайерлсовскими полупроводниками (ПП) и сверхпроводниками, так как в обоих случаях конденсированное состояние описывается параметром порядка $\Delta = |\Delta| \exp i\varphi$, амплитуда которого определяет энергетическую щель в спектре одночастичных возбуждений, а производная фазы (в сверхпроводнике по координате, а в пайерлсовском полупроводнике по времени) пропорциональна вкладу сконденсированных электронов в плотность электрического тока. ВЗП можно наглядно представить себе как конденсат, состоящий из связанных пар электронов и дырок, импульсы которых отличаются на величину волнового вектора ВЗП. По аналогии со сверхпроводниками, в которых конденсат образован парами электронов с противоположными импульсами и на границе с нормальным металлом наблюдается андреевское отражение [2], следует ожидать, что и отражение электронов с энергией, близкой к энергии Ферми от границы нормальный металл – ПП ($N - P$), имеет необычный характер. В теоретических работах Касаткина и Пашицкого [3, 4] был сделан вывод, что электрон, падающий на ПП из нормального металла, при отражении движется по той же траектории, по которой он падал на ПП, то есть отражение похоже на андреевское, но, в отличие от сверхпроводника, не изменяется знак заряда падающей квазичастицы. В недавней работе Синченко и др. [5] были обнаружены особенности в сопротивлении контакта ПП с нормальным металлом, которые интерпретировались как проявление предсказанного в работах [3, 4] отражения, похожего на андреевское. На наш взгляд, отражение, при котором отраженная частица движется по той

[1]e-mail: Art@mail.cplire.ru

же траектории, не может появиться на контакте металла с ПП, поскольку квазичастица в ПП является суперпозицией двух электронов с импульсами, отличающимися на волновой вектор ВЗП, а не с противоположными импульсами. Мы покажем, что компонента импульса, параллельная границе раздела, может либо сохраняться (обычное отражение), либо изменяться на величину, равную компоненте волнового вектора ВЗП, параллельной границе раздела (брэгговское отражение от электронного кристалла).

Нас будет интересовать отражение электронов с энергиями порядка $k_B T$ или Δ вблизи энергии Ферми, поскольку такие электроны будут определять проводимость в структурах, содержащих ПП.

Рассмотрим сначала отражение электронов на границе раздела между нормальным металлом и ПП, электронная структура которых отличается друг от друга только наличием ВЗП в ПП, расположенном при $x > 0$. Такая модель позволит нам исследовать отражение от ВЗП в чистом виде, так как будет отсутствовать отражение от границы раздела, связанное с различием энергетической структуры кристаллов и не имеющее отношения к ВЗП. То, что ВЗП образовалась только в части кристалла, может быть связано, например, с тем, что при $x < 0$ обращается в нуль постоянная электрон-фононного взаимодействия.

Для вычисления электронных волновых функций в ПП часто удобно использовать уравнения приближения самосогласованного поля типа уравнений Боголюбова – де Жена для сверхпроводников, как это было сделано, например, в [3]. При этом элементами спинорных волновых функций служат огибающие $u(\mathbf{r})$ и $v(\mathbf{r})$ – амплитуды, определяющие вклад в полные волновые функции от состояний, относящихся к противоположным листам поверхности Ферми, сдвинутым на волновой вектор ВЗП $\mathbf{Q}$. При вычислении волновых функций в неоднородной системе с помощью сшивки на границе раздела надо сшивать полные волновые функции

$$\psi = u e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}/2} + v e^{-i\mathbf{Q}\mathbf{r}/2}, \tag{1}$$

которые являются решением уравнения Шредингера с потенциалом ВЗП, заданным при $x > 0$ как $2|\Delta|\cos(\mathbf{Q}\mathbf{r} + \varphi)$. Сшивка огибающих u и v на границе раздела в случае ВЗП, вообще говоря, дает неправильный результат.

Пусть проводящие цепочки направлены вдоль оси x, а электронный спектр квазиодномерного проводника в нормальном состоянии имеет вид $E_N = p_x^2/2m + E_\perp(\mathbf{p}_\perp)$, где $|E_\perp| \ll E_F$, $E_F = p_{xF}^2/2m$ – энергия Ферми. Для определенности мы рассмотрим случай, когда волновой вектор ВЗП имеет компоненты $\mathbf{Q} = (2k_F, Q_y, 0)$. Тогда в пайерлсовском состоянии спектр имеет вид $E_P = \eta \pm \sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}$, где $\xi = [E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k} - \mathbf{Q})]/2$, $\eta = [E(\mathbf{k}) + E(\mathbf{k} - \mathbf{Q})]/2$, а связь между u и v в (1) определяется соотношением $u = -\Delta v/(\xi + \sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2})$. Если энергия, отсчитанная от энергии Ферми $|\epsilon| = |E - E_F|$, меньше $|\Delta|$, то с точностью до поправок порядка Δ/E_F в состоянии с ВЗП $|u| = |v|$. Из вида (1) следует, что в результате сшивки решений при $x = 0$ получится, что амплитуды u и v, которые в нормальном металле соответствуют амплитудам падающей и отраженной волн, с той же точностью совпадут по абсолютной величине. Следовательно, если волновой вектор ВЗП имеет компоненту Q_y, параллельную границе раздела, то соответствующая компонента импульса электрона при отражении изменится на Q_y.

Вычислим теперь с помощью сшивки волновых функций коэффициент отражения, пренебрегая координатной зависимостью энергетической щели вблизи границы раздела вследствие эффекта близости. Предположим, для простоты, что при образовании ВЗП происходит удвоение периода в направлении, перпендикулярном проводящим цепочкам, то есть $2Q_y$ соответствует вектору обратной решетки. При $x < 0$ волновую функцию будем искать в виде

$$\psi = \left[e^{ik_x x} + Ae^{-ik_x x} + Be^{-ik_x x + iQ_y y}\right] e^{i(k_y y + k_z z)}, \tag{2}$$

где первое слагаемое описывает падающую волну, второе – обычное отражение, третье – брэгговское. При $x > 0$ волновая функция должна быть линейной комбинацией функций вида (1), описывающих состояния, имеющие вдоль оси y компоненты импульса k_y и $k_y + Q_y$ и ту же энергию, что и состояние (2). Строго говоря, приравнивать волновые функции в виде рассмотренных выше комбинаций плоских волн можно только в том случае, если электронная структура в N и P областях одинакова и блоховские периодические множители при $x > 0$ и $x < 0$ совпадают. Тем не менее, для того, чтобы на качественном уровне понять, к чему приводит отличие электронных спектров в N и P областях, мы обсудим результат сшивки и для случая разных электронных спектров по обеим сторонам границы раздела.

Выражения для коэффициента отражения R в общем случае имеют довольно громоздкий вид, поэтому мы ограничимся предельным случаем малой трехмерности спектра в проводнике с ВЗП и пренебрежем членами порядка $E_\perp/\epsilon$. Для случая одинаковой электронной структуры слева и справа от границы для отношения интенсивностей обычного и брэгговского отражений мы получим

$$|A/B|^2 = (|\Delta| \sin\varphi/E_F)^2. \tag{3}$$

Таким образом, в соответствии с отмеченным выше, $|A| \ll |B|$ и доминирует брэгговское отражение, при котором параллельная компонента импульса изменяется на Q_y. Отметим также, что отношение (3) зависит от фазы ВЗП. При $|\epsilon| < |\Delta|$ коэффициент отражения $R = 1$, а при $|\epsilon| > |\Delta|$ получим $R = |\Delta|^2/(|\epsilon| + \xi)^2$, где $\xi = \sqrt{\epsilon^2 - |\Delta|^2}$.

Рассмотрим теперь случай, когда в материалах слева и справа от границы раздела отличаются эффективные массы вдоль оси x. Тогда

$$|A/B|^2 = \frac{(m_1 - m_2)^2}{4m_1 m_2} \begin{cases} \sin^2(\varphi + \varphi_0) & \text{при } |\epsilon| < |\Delta| \\ (\epsilon/|\Delta|)^2 - \cos^2\varphi & \text{при } |\epsilon| > |\Delta|, \end{cases} \tag{4}$$

где $\varphi_0 = \operatorname{arctg} \xi/\epsilon$. При $m_1 = m_2$, когда ответ в формуле (4) обращается в нуль, слагаемые порядка единицы в отношении $|A/B|^2$ сокращаются, и поэтому надо учитывать малые слагаемые порядка $(|\Delta|/E_F)^2$, приводящие к формуле (3). Таким образом, при различном электронном спектре кристаллов по разные стороны от границы раздела дополнительно к брэгговскому рассеянию добавляется обычное отражение, при котором угол падения равен углу отражения, причем интенсивности обоих видов рассеяния одного порядка, а их отношение зависит от фазы ВЗП. Если предположить, что при $x < 0$ находится изотропный металл, то получится выражение, отличающееся от (4) тем, что эффективная масса m_1 в N-области заменена на $m_1/\cos\theta$, где θ – угол падения электрона. Разумеется, этот результат нельзя рассматривать как количественный, поскольку при сшивке волновых функций мы не учитывали периодические блоховские множители в волновых функциях. Учет реальной кристаллической структуры привел бы к появлению слагаемых в разложении волновой функции в ряд Фурье по координате, соответствующих изменению импульса на любой вектор обратной решетки как основного, так и электронного кристаллов, в результате чего появилось бы отражение и в других направлениях, отвечающих брэгговскому рассеянию.

Так как фаза ВЗП может изменяться при приложении к ПП электрического поля, направленного вдоль проводящих цепочек, зависимость характера отражения от фазы ВЗП может быть использована при экспериментальном исследовании $N-P$-контактов.

Отметим еще одну интересную особенность отражения от контакта $N-P$, напоминающую свойства контакта нормального металла со сверхпроводником. Как хорошо известно, в тонком слое нормального металла толщиной d, граничащего со сверхпроводником, при энергиях $|\epsilon| < |\Delta|$ из-за андреевского отражения от сверхпроводника возникают связанные состояния с энергиями между уровнями порядка $\varepsilon_0 = \pi\hbar v_F/d$ (здесь $v_F = p_{xF}/m$). Аналогичное квантование возникнет и в нормальном металле, контактирующем с ПП, если толщина d нормального металла меньше длины свободного пробега. Простейший способ исследовать такое квантование – это вычислить плотность состояний с помощью квазиклассических уравнений для проинтегрированных по импульсу функций Грина, которые использовались при исследовании кинетических свойств ПП [6, 7]. Для наших целей достаточно решить уравнение для запаздывающей функции Грина в пренебрежении интегралом столкновений, когда это уравнение имеет совсем простой вид

$$i\hbar v\frac{d\hat{g}}{dx} + (\bar{\epsilon}\sigma_z + \hat{\Delta})\hat{g} - \hat{g}(\bar{\epsilon}\sigma_z + \hat{\Delta}) = 0, \qquad (5)$$

где функция Грина $\hat{g}$ является матрицей 2×2 по индексу, соответствующему противоположным листам поверхности Ферми, сдвинутым на волновой вектор ВЗП $\mathbf{Q}$, $\bar{\epsilon} = \epsilon - \eta(\mathbf{p}_\perp)$, $\hat{\Delta} = i|\Delta|(\sigma_y\cos\varphi + \sigma_x\sin\varphi)$, σ_α – матрицы Паули. Полагая опять, что $|\Delta|$ скачком обращается в ноль при $x < 0$, и считая, что нормальный металл занимает область $-d < x < 0$, решим уравнение (5) со следующим граничным условием: $\mathrm{Tr}\,\sigma_x g(0) = 0$ на границе нормального металла с вакуумом. Для функции $g = \mathrm{Tr}\,(\sigma_z\hat{g})$, действительная часть которой определяет плотность состояний, из уравнения (5) получим в нормальной области

$$g = (\xi + i\bar{\epsilon}t)/(\bar{\epsilon}t + i\xi), \qquad (6)$$

где $t = \mathrm{tg}\,(2\bar{\epsilon}d/\hbar v_F + \varphi)$, а ξ надо считать аналитической функцией ϵ в верхней полуплоскости. При этом недиагональные компоненты $\hat{g}$ не равны нулю и в нормальной области, где они осциллируют как $\exp(2i\bar{\epsilon}d/\hbar v_F)$, поскольку длина затухания для них равна длине свободного пробега и превышает толщину нормальной области. При строгом расчете мы должны были бы учесть изменяющее форму потенцильной ямы понижение энергетической щели в ПП на расстояниях порядка $\hbar v_F/|\Delta|$, появляющееся вследствие эффекта близости. Это понижение связано с возмущениями недиагональных компонент $\hat{g}$ в области ПП вблизи контакта, однако на качественные выводы изменение формы потенциальной ямы не влияет и мы его не учитываем.

Из (6) видно, что плотность состояний в нормальном металле является осциллирующей функцией фазы ВЗП, а также энергии и толщины нормальной области. При энергиях $|\epsilon| < |\Delta|$, при которых появляются связанные состояния, плотность состояний имеет вид

$$N(\epsilon) = \pi\langle(|\xi| + \tilde{\epsilon}t)\delta(\tilde{\epsilon}t - |\xi|)\rangle. \tag{7}$$

Здесь $\langle ... \rangle$ означает усреднение по $\mathbf{p}_{\perp}$. При энергиях, много меньших $|\Delta|$, формула (7) сводится к

$$N(\epsilon) = \varepsilon_0\langle\delta(\tilde{\epsilon} - (2n+1)\varepsilon_0)\rangle,$$

где n – натуральное число.

Таким образом, согласно (7), спектр электрона в N-слое состоит из полос шириной равной $E_{\perp}$ (ширина энергетической зоны электронов в перпендикулярном направлении определяемая зависимостью $\eta(\mathbf{p}_{\perp})$). Если спектр электронов сильно одномерный ($E_{\perp} < \varepsilon_0$), то полосы разрешенных энергий разделены областями запрещенных энергий, в противном случае они перекрываются и зависимость плотности состояний от энергии имеет ступенчатый вид. Оценка дает $\varepsilon_0 \approx 70$ К при $v_F = 3 \cdot 10^7$ см/с и $d = 0,1$ мкм. При достаточно низких температурах ($T < \varepsilon_0$, $E_{\perp}$) квантование энергии может быть обнаружено по измерениям проводимости нормальной области в плоскости контакта или по измерениям плотности состояний с помощью туннельного или точечного контактов к нормальной области. Приложение электрического поля в направлении цепочек изменяет фазу ВЗП, поэтому, согласно (7), поле должно влиять на плотность состояний. Для наблюдения квантования желательно, чтобы ширина контакта не превышала длину фазовой корреляции, так как вследствие примесного пиннинга фаза ВЗП зависит от координат.

Выше при анализе квантования предполагалось, что электронный спектр по обеим сторонам контакта одинаков, за исключением наличия ВЗП при $x > 0$. Оценку влияния различий электронного спектра можно провести, сшивая волновые функции так, как это было сделано при исследовании отражения. Оказывается, что в случае контакта двух различных квазиодномерных металлов с $|k^N_{xF} - k^P_{xF}| \ll |k^N_{xF} + k^P_{xF}|$, где k^N_{xF} – фермиевский волновой вектор в нормальной области, а k^P_{xF} – в ПП, условие квантования получится, если заменить в формуле (7) в аргументе тангенса $2\tilde{\epsilon}d/(\hbar v_F)$ на $\tilde{\epsilon}_N d/(\hbar v_F) + 2(k^N_{xF} - k^P_{xF})d$, где в $\tilde{\epsilon}_N$ входит зависимость энергии от $\mathbf{p}_{\perp}$ в нормальной области подобно тому, как в $\tilde{\epsilon}$ входит аналогичная зависимость для ПП. Таким образом, толщина N области входит в условие квантования не только в виде ε_0, но и в виде произведения $(k^N_{xF} - k^P_{xF})d$, что при больших различиях k_{xF} должно приводить к размыванию эффектов квантования даже за счет небольших вариаций толщины d.

Итак, мы получили, что при отражении электронов, падающих из нормального металла на границу раздела с ПП, компонента их волнового вектора, параллельная границе раздела, либо сохраняется, либо изменяется на величину, равную проекции волнового вектора ВЗП на плоскость контакта. Интенсивность различных видов отражения зависит от фазы ВЗП и, следовательно, может изменяться при приложении электрического поля. В частности, отражение электронов от области с пайерлсовской щелью при определенных условиях может привести к квантованию энергетического спектра электронов вблизи поверхности Ферми.

Мы благодарны В.А.Волкову за обсуждение работы, а также И.Г.Горловой и А.А.Синченко за обсуждение и ознакомление с экспериментальными данными до опубликования. Работа поддержана грантом 95-02-05392 Российского фонда фундаментальных исследований и грантом 1-018 МТП "Физика твердотельных наноструктур".

1. G.Grüner, *Density Waves in Solids*, Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1994.
2. А.Ф.Андреев, ЖЭТФ **46**, 1823 (1964).
3. А.Л.Касаткин, Э.А.Пашицкий, ФНТ **10**, 640 (1984).
4. А.Л.Касаткин, Э.А.Пашицкий, ФТТ **27**, 1448 (1985).
5. А.А.Синченко, Ю.И.Латышев, С.Г.Зыбцев и др., Письма в ЖЭТФ **64**, 259 (1996).
6. С.Н.Артеменко, А.Ф.Волков, ЖЭТФ **81**, 1872 (1981).
7. S.N.Artemenko and A.F.Volkov, *Charge Density Waves in Solids*, Eds. by L.Gor'kov and G.Grüner, Elsevier Science, Amsterdam, 1989, ch.9.