

Д.М. Сергеев<sup>1,2</sup>, С.К. Кущанов<sup>1</sup><sup>1</sup>Военный институт Сил воздушной обороны им. Т.Я. Бегельдинова, Актобе, Казахстан;<sup>2</sup>Актюбинский региональный государственный университет им. К. Жубанова, Казахстан  
(E-mail: serdau@rambler.ru)

## О резонансном туннелировании квазичастиц через наноконтакт «алюминий – оксид алюминия – алюминий» при низких температурах

В рамках теории функционала электронной плотности с применением метода неравновесных гриновских функций и в приближении локальной плотности исследованы квантово-транспортные характеристики наноразмерного контакта «алюминий – оксид алюминия – алюминий» (Al – Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – Al). Компьютерное моделирование квантово-транспортных характеристик реализовано в программе Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab. Рассчитаны вольтамперные,  $dI/dV$ -характеристики, спектр пропускания и спектральный ток рассматриваемого наноконтакта. На основании компьютерного моделирования показано, что с увеличением величины напряжения смещения происходит сдвиг максимума функции пропускания со стороны положительной энергии в сторону отрицательной. По форме спектра пропускания наноконтакта можно предположить, что основным механизмом электронного транспорта в подобных структурах является резонансное туннелирование квазичастиц. Выявлено, что на вольтамперной характеристике наноструктуры проявляются особенности при напряжениях  $\pm 0,54$ ; 0,2; 0,08 В, обусловленные резонансным туннелированием квазичастиц. Вольтамперная характеристика имеет заметный участок с отрицательным дифференциальным сопротивлением. Особенности электронного транспорта, наблюдаемые на вольтамперной характеристике, проявляются и на  $dI/dV$ -характеристике наноконтакта. Обнаружено, что дифференциальная проводимость имеет два основных максимума со значением  $\sim 26$  нСм при напряжениях смещения  $\pm 0,45$  В, присущих туннельным переходам. Установлено, что спектральный ток увеличивается при резком уменьшении значения дифференциальной проводимости и, наоборот, убывает при резком возрастании ее значения, а его максимальное значение проявляется при напряжении смещения 0,45 В. Полученные результаты модельного исследования наноконтакта «Al – Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – Al» могут быть полезными для расчетов новых перспективных электронных приборов криогенной нанoeлектроники.

*Ключевые слова:* наноконтакт, квантовый транспорт, вольтамперная характеристика, дифференциальная проводимость, функция (спектр) пропускания, резонансное туннелирование.

### Введение

В последнее время интенсивно исследуются электрофизические свойства металлических наноконтактов [1, 2]. Это связано с тем, что в них проявляются квантово-размерные эффекты (квантование проводимости [3], квантовые флуктуации проводимости [4], эффект Кондо [5] и т.п.), представляющие интерес в разработке перспективных элементов микро- и нанoeлектроники.

Именно квантово-размерные эффекты определяют особенности квантового транспорта квазичастиц в наноразмерных контактах, и такие объекты представляют интерес для создания новых миниатюрных электронных компонентов нанoeлектроники [6].

Изучение квантово-транспортных свойств наноконтактов основывается на данных, получаемых из анализа вольтамперных характеристик (ВАХ) и спектров дифференциальной проводимости контактов. Исследуя эти характеристики, можно получить информацию о типе электронного транспорта, спектре электрон-фононного взаимодействия, температуре, до которой нагревается область наноконтактов и др. В настоящее время активно проводятся вычисления различных микро- и наноструктур из первых принципов (*ab initio*). Например, в работе [7], используя метод Gibbs-Duhem и путем репараметризации потенциальной модели взаимодействия определено значение температуры плавления алюминиевого материала из первых принципов. Причем эти результаты хорошо согласуются с экспериментом, а в работе [8] в рамках теории функционала плотности с применением метода сопоставления силы (*force-matching method*) построен новый алюминиевый потенциал с улучшенной энергией дефекта упаковки. В настоящее время продолжается исследование свойств алюминиевых микро- и наноструктур с применением различных компьютерных программ [9, 10].

В данной работе модельно исследованы транспортные характеристики наноконтакта, состоящего из чередующих слоев алюминия и его оксида, т.е. сэндвич-структура типа «алюминий – оксид алюминия – алюминий» при низких температурах ( $\sim 1$  К).

Описание объекта и методов исследования

Геометрия исследуемого наноконтакта «алюминий – оксид алюминия – алюминий» (Al – Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – Al) приведена на рисунке 1а–в. Длина алюминиевых электродов по оси С составляет ~5,732 Å, а длина слоя оксида алюминия ~8,78 Å. Размер контактирующей (центральной) области составляет ~33,24 Å.

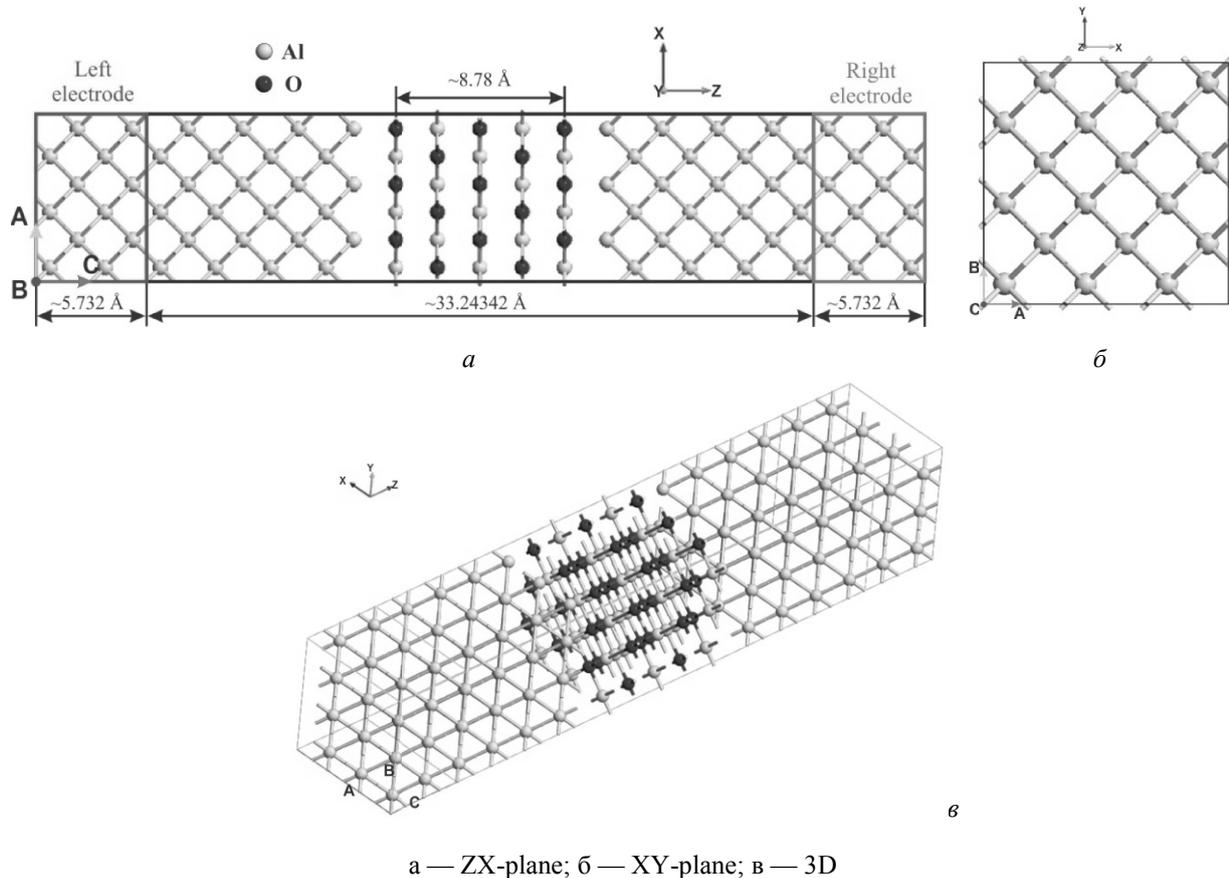


Рисунок 1. Геометрия наноконтакта Al – Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – Al

Компьютерное моделирование наноконтакта производилось в рамках теории функционала плотности (DFT — Density Functional Theory), с применением метода неравновесных гриновских функций (NEGF — Non-Equilibrium Green's Functions) и аппроксимации локальной плотности (LDA — local-density approximation) [11]. Известно, что в некоторых случаях решение уравнения Шредингера для многоэлектронных систем можно заменить нахождение плотности электронов системы из решения уравнения Кона-Шема с правильным выбором потенциала  $U_{eff}(r)$ . Поэтому реализация методов DFT сводится к решению одноэлектронного уравнения Кона-Шема. Подробное описание данного метода см. в работах [11–13]. Основные параметры вычислительного ресурса: 8-ядерный процессор Intel(R) Core(TM) i7-4790 CPU@3,6 GHz, ОЗУ 8 Гб, тип системы — 64-разрядная операционная система Windows 8.1.

Моделирование квантово-транспортных характеристик наноконтакта с помощью программы Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab осуществлялось на основе приведенных ниже уравнений (1–10) [13].

Для расчета квантово-транспортных характеристик наноконтакта Al – Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – Al составляется матрица плотности состояний левого и правого алюминиевых электродов:

$$D = D^L + D^R, \tag{1}$$

где  $D^L$ ,  $D^R$  — матрица плотности левого и правого электродов соответственно.

$$D^L = \int \rho^L(\varepsilon) f\left(\frac{\varepsilon - \mu_L}{k_B T_L}\right) d\varepsilon, \quad (2)$$

где  $\varepsilon$  — энергия;  $\rho^L(\varepsilon)$  — спектральная матрица;  $f(\varepsilon)$  — фермиевская функция распределения квазичастиц по энергиям;  $k_B$  — постоянная Больцмана;  $\mu_L$  — электрохимический потенциал;  $T_L$  — текущая температура левого электрода.

Матрица плотности для правого электрода  $D^R$  находится аналогичным способом. Спектральная матрица определяется с применением запаздывающей  $G(\varepsilon)$ , опережающей  $G^\dagger(\varepsilon)$  гриновских функций и матрицы уширения  $\Gamma^L(\varepsilon)$ :

$$\rho^L(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi} G(\varepsilon) \Gamma^L(\varepsilon) G^\dagger(\varepsilon). \quad (3)$$

Матрица уширения левого электрода описывается следующим уравнением:

$$\Gamma^L(\varepsilon) = \frac{1}{i} \left( \sum^L - (\sum^L)^\dagger \right). \quad (4)$$

Здесь  $i$  — мнимая единица;  $\sum^L$  — собственная энергия левого электрода. Аналогичное уравнение существует для матрицы плотности правого электрода. Запаздывающая функция Грина представлена в виде

$$G(\varepsilon) = \frac{1}{(\varepsilon + i\delta_+)S - H}, \quad (5)$$

или

$$G(\varepsilon) = \left[ (\varepsilon + i\delta_+)S - H - \sum^L(\varepsilon) - \sum^R(\varepsilon) \right]^{-1}, \quad (6)$$

где  $\delta_+$  — бесконечно малое положительное число;  $S$  — матрица интегралов перекрытия;  $H$  — гамильтонова матрица.

Для расчета вольтамперной характеристики и дифференциальной проводимости сначала в рамках DFT определяется функция пропускания барьера наноконтакта. Расчет зависимости функции пропускания барьера от энергии производится на основе уравнения (с учетом рассеяния)

$$T(\varepsilon) = \sum_k t_k^\dagger t_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k), \quad (7)$$

или

$$T(\varepsilon) = \text{tr}[\Gamma^L A^R] = \text{tr}[\Gamma^R A^L] = \text{tr}[\Gamma^L G \Gamma^R G^\dagger] = \text{tr}[\Gamma^R G \Gamma^L G^\dagger], \quad (8)$$

где  $t_k$  — амплитуда пропускания;  $\delta(\varepsilon)$  — дельта функция;  $A$  — спектральная функция.

Согласно модели Ландауэра электрическая проводимость определяется функцией пропускания [14, 15]. Учитывая подход «проводимость — это пропускание», ВАХ наноконтакта рассчитывается с учетом спектра пропускания на основе уравнения [13, 16]

$$I(V_L, V_R, T_L, T_R) = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} T(\varepsilon) \left[ f\left(\frac{\varepsilon - \mu_R}{k_B T_R}\right) - f\left(\frac{\varepsilon - \mu_L}{k_B T_L}\right) \right] d\varepsilon, \quad (9)$$

где  $T_R, T_L$  — текущие температуры правого и левого электрода;  $\mu_R, \mu_L$  — химические потенциалы правого и левого электрода.

Дифференциальная проводимость наноконтакта определяется с помощью уравнения

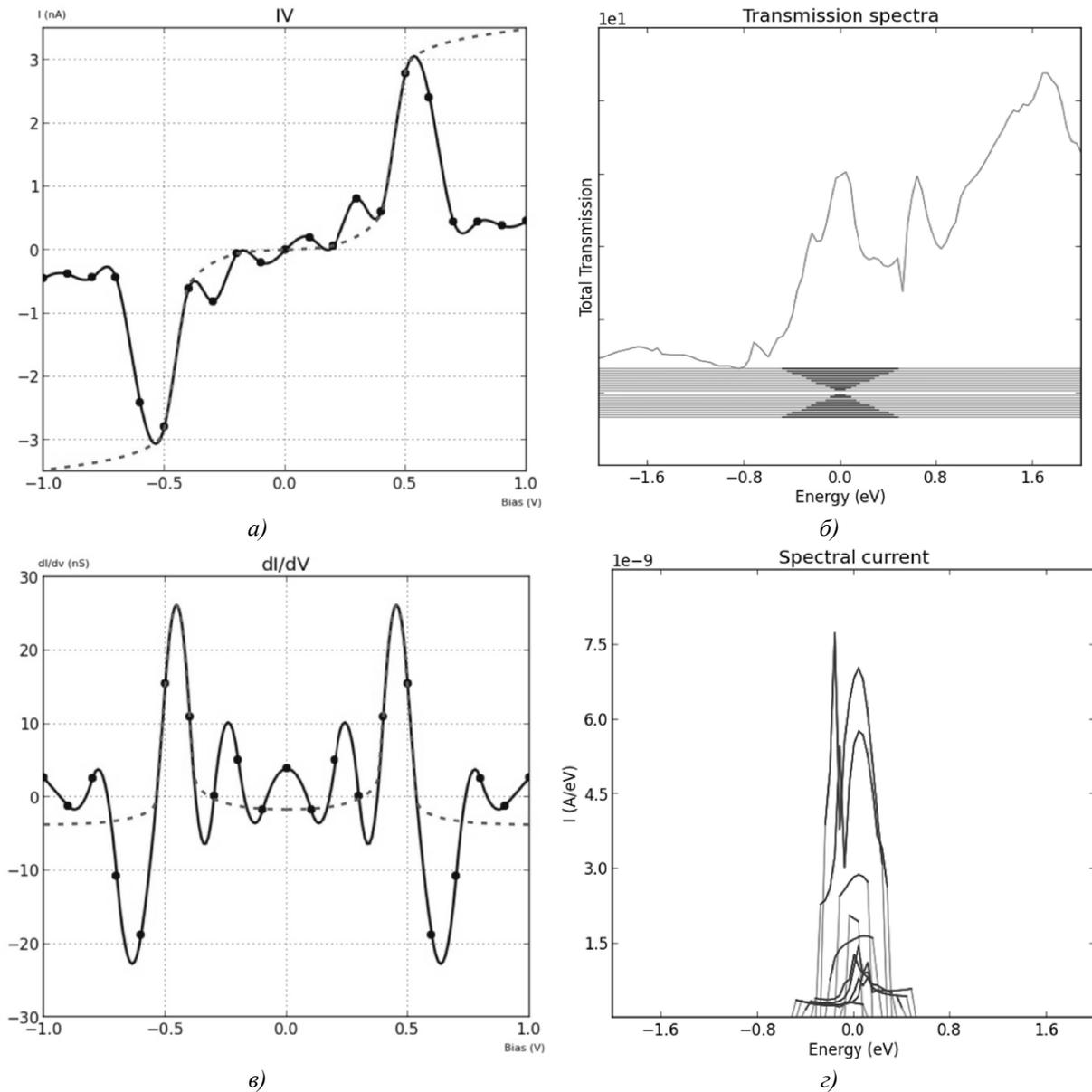
$$\sigma(V_L, V_R, T_L, T_R, \alpha_L, \alpha_R) = \lim_{\delta V \rightarrow 0} \frac{I(V_L + \alpha_L \delta V, V_R - \alpha_L \delta V, T_L, T_R)}{\delta V}, \quad (10)$$

где  $\alpha_L, \alpha_R$  — константы связи, при этом выполняется условие  $\alpha_L + \alpha_R = 1$ .

### Описание и анализ результатов

На рисунке 2 представлены результаты компьютерного моделирования основных квантово-транспортных характеристик наноконтакта «алюминий – оксид алюминия – алюминий» при напряжении смещения  $V_{bias} = 1$  В и температуре 1 К. Расчет транспортных характеристик наноконтакта производился в течение 6 дней 4 ч 29 мин 14 с (534554 с).

Как видно, ВАХ наноконтакта напоминает вольтамперную зависимость двухтерминального переключающего устройства по постоянному току (рис. 2, пунктирная линия), однако в отличие от них на ВАХ рассматриваемой структуры не наблюдается нулевой ток в интервале напряжений  $\approx -0,24 \div 0,24$  В, а переключение ВАХ с OFF режима в ON режим происходит в интервале напряжений  $\approx -0,38 \div -0,24$  В (при отрицательном напряжении смещения) и  $\approx 0,24 \div 0,38$  В (при положительном напряжении смещения). Максимальное значение тока составляет  $\approx 3$  нА и  $\approx -3$  нА при напряжении смещения  $\approx 0,55$  В и  $\approx -0,55$  В соответственно. При значениях напряжения выше  $0,55$  В величина тока резко убывает до значения  $0,74$  В. Отметим, что в двухтерминальном переключающем устройстве в интервале напряжений  $-0,24 \div 0,24$  В наблюдается обнуление тока.

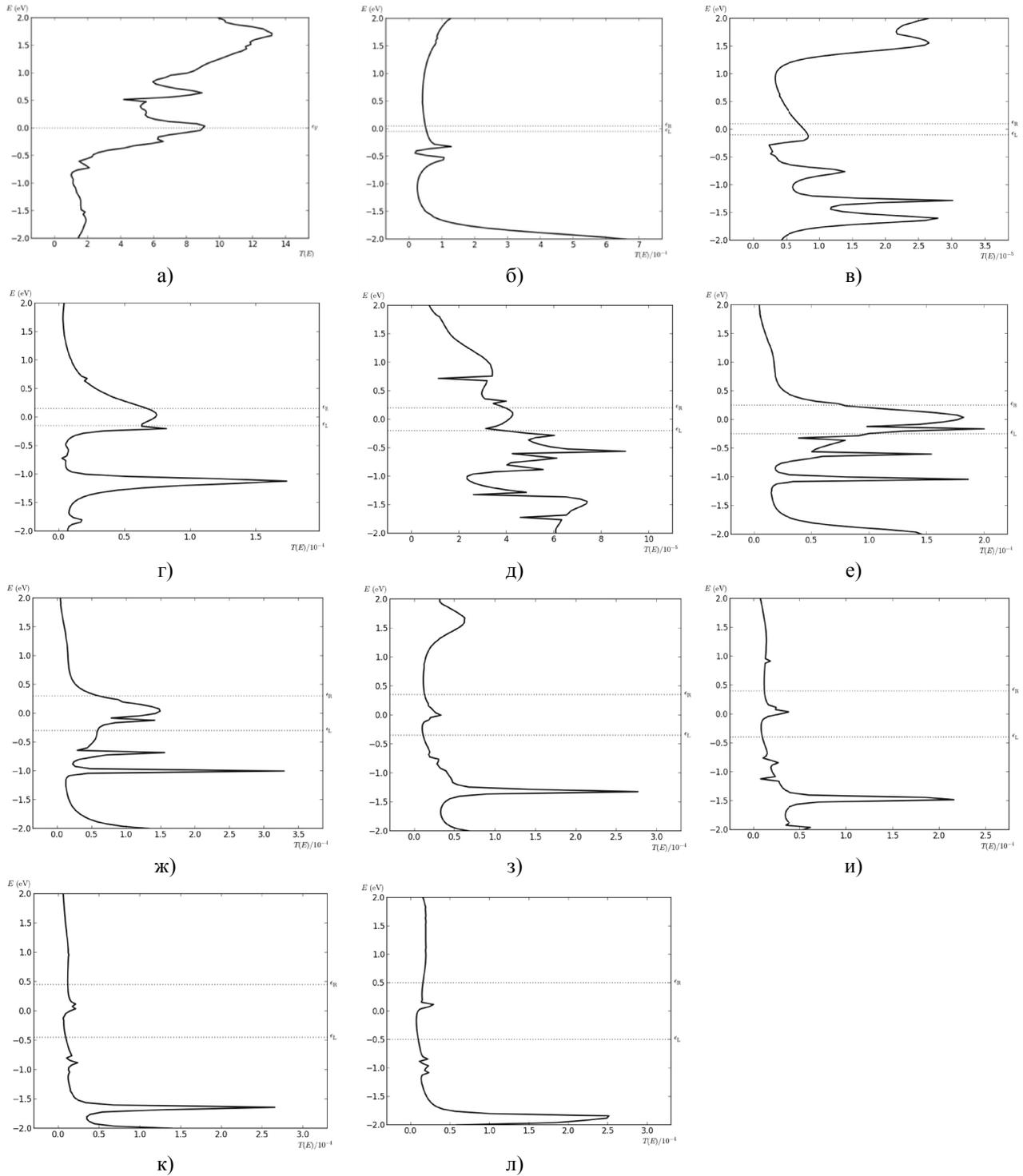


*a* — ВАХ; *б* — спектр прозрачности; *в* — дифференциальная проводимость; *г* — спектральный ток (пунктирной линией показаны ВАХ и  $dI/dV$ -спектр двухтерминального переключающего устройства)

Рисунок 2. Характеристики наноконтакта Al – Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – Al при напряжении смещения 1 В

Спектр пропускания барьера при нулевом напряжении смещения приведен на рисунке 2б. Максимумы спектра пропускания наблюдаются при положительной энергии  $\approx 1,72$  эВ и при положительной энергии  $\approx 1,8$  эВ, а минимумы — при  $\approx -1,6$  эВ и  $\approx 0,9$  эВ.

Известно, что транспортные характеристики определяются спектром пропускания (см. уравнение (9)), поэтому рассмотрим поведение функции пропускания при различных значениях напряжения. Эволюция функции (спектра) пропускания наноконтакта Al – Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – Al с увеличением напряжения смещения 0 В, 0,1 В, 0,2 В, ... 1 В представлена на рисунке 3а–л. Рассмотрим изменение функции пропускания с увеличением напряжения смещения  $V_{bias}$ .



$a — 0 \text{ В}; б — 0,1 \text{ В}; в — 0,2 \text{ В}; г — 0,3 \text{ В}; д — 0,4 \text{ В}; е — 0,5 \text{ В};$   
 $ж — 0,6 \text{ В}; з — 0,7 \text{ В}; и — 0,8 \text{ В}; к — 0,9 \text{ В}; л — 1 \text{ В}$

Рисунок 3. Эволюция функции прохождения наноконтакта Al – Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – Al с увеличением напряжения смещения

При  $V_{bias} = 0,1$  В на спектре наблюдаются три максимума:  $12,84 \cdot 10^{-5}$ ,  $10,657 \cdot 10^{-5}$ ,  $66,1 \cdot 10^{-5}$  при отрицательных значениях энергии  $-0,32$  эВ,  $-0,52$  эВ,  $-2,0$  эВ соответственно. Минимальное значение спектра проявляется при  $-0,4$  эВ и составляет  $2,14 \cdot 10^{-5}$  (рис. 3б). Величина протекаемого тока через структуру при  $V_{bias} = 0,1$  В составляет  $\approx 0,199782$  нА.

Максимумы спектра пропускания при  $V_{bias} = 0,2$  В проявляются при энергиях  $-1,28$  эВ со значением  $3 \cdot 10^{-5}$  и при  $-1,6$  эВ —  $2,78 \cdot 10^{-5}$ , а минимальное значение спектра составляет  $2,335 \cdot 10^{-6}$  при энергии  $-0,28$  эВ (рис. 3в). Величина тока при  $V_{bias} = 0,2$  В составляет  $\approx 0,006$  нА.

При  $V_{bias} = 0,3$  В максимальное значение спектра пропускания составляет  $173,14 \cdot 10^{-6}$  при энергии  $-1,12$  эВ, а минимальное —  $2,3 \cdot 10^{-6}$  при  $-0,72$  эВ (рис. 3г), при этом ток, протекающий через структуру, равен  $0,81275$  нА.

Экстремумы функции пропускания при  $V_{bias} = 0,4$  В наблюдаются в следующих значениях энергии:  $T_{max}(-0,56) \approx 9 \cdot 10^{-5}$ ,  $T_{min1}(2) \approx 7,4 \cdot 10^{-6}$  и  $T_{min2}(0,72) \approx 1,12 \cdot 10^{-5}$  (рис. 3д). Ток равен  $0,61$  нА.

При  $V_{bias} = 0,5$  В на спектре пропускания появляются несколько пиков. Например, при энергиях  $0,04$  эВ,  $-0,6$  эВ,  $-0,16$  эВ наблюдаются пики спектра со значениями  $18,19 \cdot 10^{-5}$ ,  $15,4 \cdot 10^{-5}$ ,  $20 \cdot 10^{-5}$  соответственно. Минимумы спектра проявляются при энергиях  $2$  эВ,  $-0,32$  эВ,  $-0,84$  эВ,  $-1,04$  эВ,  $-1,2$  эВ. При этом функции пропускания принимают значения  $4,2 \cdot 10^{-6}$ ;  $3,88 \cdot 10^{-5}$ ;  $1,79 \cdot 10^{-5}$ ;  $18,6 \cdot 10^{-5}$ ;  $1,5 \cdot 10^{-5}$  соответственно (рис. 3ж). Такая же ситуация возникает и при  $V_{bias} = 0,6$  В (рис. 3з). При  $V_{bias} = 0,5$  В через контакт протекает ток  $2,79$  нА, а при  $V_{bias} = 0,6$  В —  $\sim 2,41$  нА.

При напряжениях смещения  $0,7 \div 1$  В спектр пропускания имеет одно максимальное значение:  $27,65 \cdot 10^{-5}$ ;  $21,55 \cdot 10^{-5}$ ;  $26,52 \cdot 10^{-5}$ ;  $25,1 \cdot 10^{-5}$  при энергиях  $-1,32$  эВ,  $1,48$  эВ,  $1,64$  эВ,  $-1,84$  эВ соответственно. Как видно, пик спектра  $\sim 21 \div 28$  с увеличением модуля отрицательной энергии смещается в сторону энергии  $\sim -2$  эВ (рис. 3з-л). При таком раскладе ( $V_{bias} = 0,7 \div 1$  В) величина тока, протекающего через структуру, составляет  $\sim 0,442$  нА,  $0,441$  нА,  $0,38218$  нА,  $0,4548$  нА соответственно.

С увеличением напряжения смещения наблюдается сдвиг максимума функции пропускания с положительной энергии в сторону отрицательной. Из эволюции спектра прохождения видно, что в рассматриваемой структуре возникает резонансное туннелирование квазичастиц. Это обусловлено низкой размерностью центральной области наноконтакта, т.е. размером оксидного барьера  $8,78$  Å (рис. 1). Именно этот интересный квантовый эффект (резонансное туннелирование) определяет электронный транспорт наноконтакта.

Дифференциальная проводимость наноконтакта имеет два основных максимума (присущие туннельным переходам) при напряжениях  $\sim -0,45$  В и  $\sim 0,45$  В, ее максимальное значение составляет  $\sim 26$  нСм (рис. 2в). В интервале напряжений  $-0,3 \text{ В} \div 0,3$  В  $dI/dV$ -спектр осциллирует с максимумами при значениях  $V_{bias} \approx -0,23$  В;  $0$ ;  $0,23$  В. При  $\sim \pm 0,23$  В величина дифференциальной проводимости равна  $10$  нСм. При нулевом напряжении смещения значение проводимости составляет  $3,75$  нСм. Минимальные значения  $dI/dV$ -спектра контакта проявляются при  $\sim \pm 0,63$  В со значением  $-22,5$  нСм.

Спектральный ток увеличивается при резком уменьшении значения дифференциальной проводимости и, наоборот, убывает при резком возрастании ее значения. Максимальное значение спектрального тока проявляется при напряжении  $0,45$  В. При напряжениях  $0,5$  В и  $0,6$  В максимумы спектрального тока проявляются в виде двух пиков со значениями  $7,6 \cdot 10^{-9}$  А/эВ и  $7,12 \cdot 10^{-9}$  А/эВ,  $5,4 \cdot 10^{-9}$  А/эВ и  $5,7 \cdot 10^{-9}$  А/эВ соответственно (рис. 2г).

Особенности ВАХ рассматриваемого наноконтакта с максимумами при  $\pm 0,54$  В,  $0,2$  В,  $0,08$  В объясняются резонансным туннелированием квазичастиц (рис. 2а). Как видно, электрический ток, проходящий сквозь наноструктуру, резко возрастает, достигая максимума при  $V = 2\Delta / e \approx \pm 0,54$  В (здесь  $\Delta$  — разность между разрешенными в квантово-размерной области энергетическими уровнями). При превышении напряжением указанной величины туннельный ток, протекающий сквозь наноструктуру, уменьшается. Из спектра пропускания заметно, что величина тока, проходящего через нанокontakt, существенно увеличивается при  $V_{bias} \approx 0,5 \div 0,6$  В, и при этих значениях напряжения на спектре появляются несколько равнозначных максимумов и минимумов, обусловленных резонансным туннелированием.

## Выводы

Таким образом, в данной работе в рамках теории функционала плотности модельно исследованы основные транспортные характеристики (ВАХ, спектры пропускания контакта при различных значениях напряжения смещения, дифференциальная проводимость и спектральный ток) наноконтакта «алюминий – оксид алюминия – алюминий». Показано, что ВАХ такой структуры имеет особенность резкого возрастания туннельного тока — до  $\sim 3$  нА при напряжении 0,54 В, обусловленную резонансным туннелированием квазичастиц. Приведена эволюция спектра пропускания наноконтакта с увеличением напряжения смещения (от 0 до 1 В). При этом поведение спектра пропускания с несколькими максимумами является доказательством эффекта резонансного туннелирования в рассматриваемых структурах. ВАХ таких наноструктур при низких температурах имеет значительный участок с отрицательным дифференциальным сопротивлением, что позволяет предположить возможность создания в перспективе на их основе новых элементов криогенной электроники.

## Список литературы

- 1 Requist R. Metallic, magnetic and molecular nanocontacts / R. Requist, P.P. Baruselli, A. Smogunov, M. Fabrizio, S. Modesti, E. Tosatti // *Nature Nanotechnology*. — 2016. — Vol. 11. — P. 499–508.
- 2 Fernandez M.A. Dynamic bonding of metallic nanocontacts: Insights from experiments and atomistic simulations / M.A. Fernandez, C. Sabater, W. Dednam, J.J. Palacios, M.R. Calvo, C. Untiedt, et al. // *Phys. Rev. B*. — 2016. — Vol. 93. — P. 085437.
- 3 Дремов В.В. Квантование проводимости металлических наноконтактов при комнатной температуре / В.В. Дремов, С.Ю. Шаповал // *Письма в ЖЭТФ*. — 1995. — Т. 61, Вып. 4. — С. 321–324.
- 4 Klein H. Conductance fluctuations in gold point contacts: an atomistic picture / H. Klein, T. Leoni, R. Zoubkoff, P. Dumas, A. Saul // *Nanotechnology*. — 2012. — Vol. 23. — P. 235707.
- 5 Calvo M.R. The Kondo effect in ferromagnetic atomic contacts / M.R. Calvo, J. Fernandez-Rossier, J. Palacios, D. Jacob, D. Natelson, C. Untiedt // *Nature*. — 2009. — Vol. 458. — P. 1150–1153.
- 6 Paul W. Indentation-formed nanocontacts: an atomic-scale perspective / W. Paul, D. Oliver, P. Grutter // *Phys. Chem. Chem. Phys.* — 2014. — Vol. 16. — P. 8201–8222.
- 7 Sturgeon J.B. Adjusting the melting point of a model system via Gibbs-Duhem integration: Application to a model of aluminum / J.B. Sturgeon, B.B. Laird // *Phys. Rev. B*. — 2000. — Vol. 62, No. 22. — P. 14720–14727.
- 8 Liu X.-Y. Aluminium interatomic potential from density functional theory calculations with improved stacking fault energy / X.-Y. Liu, F. Ercolessi, J.B. Adams // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* — 2004. — Vol. 12. — P. 665–670.
- 9 Mendeleev M.I. Analysis of semi-empirical interatomic potentials appropriate for simulation of crystalline and liquid Al and Cu / M.I. Mendeleev, M.J. Kramer, C.A. Becker, M. Asta // *Philosophical Magazine*. — 2008. — Vol. 88, No. 12. — P. 1723–1750.
- 10 Winey J.M. A thermodynamic approach to determine accurate potentials for molecular dynamics simulations: thermoelastic response of aluminum / J.M. Winey, A. Kubota, Y.M. Gupta // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* — 2009. — Vol. 17. — P. 055004.
- 11 Brandbyge M. Density-functional method for nonequilibrium electron transport / M. Brandbyge, J.-L. Mozos, P. Ordejon, J. Taylor, K. Stokbro // *Phys. Rev. B*. — 2002. — Vol. 65. — P. 165401.
- 12 Kryachko E.S. Density functional theory: Foundations reviewed / E.S. Kryachko, E.V. Ludena // *Physics Rep.* — 2014. — Vol. 544. — P. 123–239.
- 13 Atomistix ToolKit. Manual Version 2015.1. — QuantumWise A/S, 2015. — 840 p.
- 14 Landauer R. Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices / R. Landauer // *Philosophical Magazine*. — 1970. — Vol. 21. — P. 863–867.
- 15 Datta S. Quantum Transport: Atom to Transistor / S. Datta. — Cambridge: Univ. Press, 2005. — 404 p.
- 16 Клавсюк А.Л. Формирование и свойства металлических атомных контактов / А.Л. Клавсюк, А.М. Салецкий // *УФН*. — 2015. — Т. 185. — С. 1009–1030.

Д.М. Сергеев, С.К. Кушанов

### Төмен температурада «алюминий – алюминий оксиді – алюминий» нанотүйіспесі арқылы квазибөлшектердің резонанстық туннелденуі туралы

Мақалада функционалдық электрондық тығыздық теориясы аясында тепе-теңсіз Грин функциялары әдісі мен локалды тығыздықтық жуықтауды қолдану арқылы «алюминий – алюминий оксиді – алюминий» (Al – Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – Al) наноөлшемді түйіспесінің кванттық транспорттық сипаттамалары зерттелді. Кванттық транспорттық сипаттамаларды компьютерлік модельдеу Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab бағдарламасында жүзеге асырылды. Аталмыш нанотүйіспенің вольтамперлік  $dI/dV$ -сипаттамалары, өткізу спектрі және спектралдық ток мәндері есептелді. Компьютерлік

модельдеу негізінде ығысу кернеуінің шамасы өсуімен өткізу функциясы максимумының оң энергия жағынан теріс энергия жағына ауысатындығы көрсетілді. Нанотүйіспенің өткізу спектрінің түрі бойынша мұндай құрылымдарда электрондық транспорттың негізгі тетігі квазибөлшектердің резонанстық туннельденуі болып табылатындығын шамалауға болады. Кернеудің  $\pm 0,54$  В, 0,2 В, 0,08 В мәндерінде наноқұрылымның вольтамперлік сипаттамасында квазибөлшектердің резонанстық туннельденуімен түсіндірілетін ерекшеліктер байқалатындығы анықталды. Қарастырылып отырған нанотүйіспенің вольтамперлік сипаттамасының елеулі бөлігі теріс дифференциалдық кедергіге ие. Вольтамперлік сипаттамада байқалатын электрондық транспорт ерекшеліктері  $dI/dV$ -сипаттамасында көрініс табады. Ығысу кернеуі  $\pm 0,45$  В болғанда дифференциалдық өткізгіштік мәні  $\sim 26$  нСм болатын туннельдік өтпелдерге тән екі негізгі максимумға ие болатындығы байқалды. Дифференциалдық өткізгіштік мәні күрт азайғанда спектралдық ток өсетіндігі және, керісінше, күрт көбейгенде азаятындығы, ал оның максималды мәні ығысу кернеуі 0,45 В тең болғанда байқалатындығы көрсетілді. «Al – Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – Al» нанотүйіспесін модельді зерттеу нәтижелері наноэлектрониканың жаңа электрондық аспаптарын есептеуде пайдалы болуы мүмкін.

*Клт сөздер:* нанотүйіспе, кванттық транспорт, вольтамперлік сипаттама, дифференциалдық өткізгіштік, өткізу функциясы (спектрі), резонанстық туннельдену.

D.M. Sergeev, S.K. Kutshanov

## About resonance tunneling of quasiparticles through nanocontact «aluminum – aluminium oxide – aluminum» at low temperatures

Within the framework of the density functional theory using the method of non-equilibrium Green's function in the local density approximation investigated quantum transport properties nanoscale contact «aluminum – aluminum oxide – aluminum» (Al – Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – Al). Computer modeling of quantum transport characteristics is implemented in the program Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab. Calculated current-voltage,  $dI/dV$ -characteristics, transmission spectrum and the spectral current reporting nanocontact. On the basis of computer simulation, it is shown that as the magnitude of the bias voltage increases, the maximum of the transmission function shifts from the positive energy side to the negative one. From the shape of the transmission spectrum of a nanocontact, it can be assumed that the main mechanism of electron transport in such structures is the resonance tunneling of quasiparticles. In the current-voltage characteristic features of nanostructures observed at voltages of  $\pm 0,54$  V, 0,2 V, 0,08 V due to the resonant tunneling of quasiparticles. The current-voltage characteristic has a significant portion of the negative differential resistance. Features of electronic transport, observed on the current-voltage characteristic, also appear on the  $dI/dV$ -characteristic of the nanocontact. It is found that the differential conductivity has two main peaks with a value of  $\sim 26$  nS at a bias voltage of  $\pm 0,45$  V inherent in tunnel junctions. It is established that the spectral current increases with a sharp decrease in the value of the differential conductivity, and vice versa, decreases with a sharp increase in its value, and its maximum value is manifested at a bias voltage of 0,45 V. The obtained results of a model study of a nanocontact «Al – Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – Al» can be useful for the calculation of new advanced electronic devices of cryogenic nanoelectronics.

*Keywords:* nanocontact, quantum transport, current-voltage characteristic, differential conductivity, transmission function (spectrum), resonance tunneling.

## References

- 1 Requist, R., Baruselli, P.P., Smogunov, A., Fabrizio, M., Modesti, S., & Tosatti E. (2016). Metallic, magnetic and molecular nanocontact. *Nature Nanotechnology*, 11, 499–508.
- 2 Fernandez, M.A., Sabater, C., Dednam, W., Palacios, J.J., Calvo, M.R., & Untiedt C. et al. (2016). Dynamic bonding of metallic nanocontacts: Insights from experiments and atomistic simulations. *Phys. Rev. B.*, 93, 085437.
- 3 Dremov, V.V., & Shapoval, S.Yu. (1995). Kvantovanie provodimosti metallicheskikh nanokontaktov pri komnatnoi temperature [Quantization of the conductance of metal nanocontacts at room temperature]. *Pis'ma v ZhETF — Letters in the JETP*, 61, 321–324 [in Russian].
- 4 Klein, H., Leoni, T., Zoubkoff, R., Dumas, P., & Saul, A. (2012). Conductance fluctuations in gold point contacts: an atomistic picture. *Nanotechnology*, 23, 235707.
- 5 Calvo, M.R., Fernandez-Rossier, J., Palacios, J., Jacob, D., Natelson, D., & Untiedt, C. (2009). The Kondo effect in ferromagnetic atomic contacts. *Nature*, 458, 1150–1153.
- 6 Paul, W., Oliver, D., & Grutter, P. (2014). Indentation-formed nanocontacts: an atomic-scale perspective. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 16, 8201–8222.
- 7 Sturgeon, J.B., & Laird, B.B. (2000). Adjusting the melting point of a model system via Gibbs-Duhem integration: Application to a model of aluminum. *Phys. Rev. B.*, 62, 14720–14727.

- 8 Liu, X.-Y., Ercolessi, F., & Adams, J.B. (2004). Aluminium interatomic potential from density functional theory calculations with improved stacking fault energy. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, *12*, 665–670.
- 9 Mendelev, M.I., Kramer, M.J., Becker, C.A., & Asta, M. (2008). Analysis of semi-empirical interatomic potentials appropriate for simulation of crystalline and liquid Al and Cu. *Philosophical Magazine*, *88*, 1723–1750.
- 10 Winey, J.M., Kubota, A., & Gupta, Y.M. (2009). A thermodynamic approach to determine accurate potentials for molecular dynamics simulations: thermoelastic response of aluminum. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, *17*, 055004.
- 11 Brandbyge, M., Mozos, J.-L., Ordejon, P., Taylor, J., & Stokbro, K. (2002). Density-functional method for nonequilibrium electron transport. *Phys. Rev. B.*, *65*, 165401.
- 12 Kryachko, E.S., & Ludena, E.V. (2014). Density functional theory: Foundations reviewed. *Physics Rep.*, *544*, 123–239.
- 13 *Atomistix ToolKit. Manual Version 2015.1* (2015). QuantumWise A/S.
- 14 Landauer, R. (1970). *Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices. Philosophical Magazine*, *21*, 863–867.
- 15 Datta, S. (2005). *Quantum Transport: Atom to Transistor*, Cambridge: Univ. Press.
- 16 Klavsyuk, A.L., & Saletsky, A.M. (2015). Formirovanie i svoistva metallicheskih atomnykh kontaktov [Formation and properties of metallic atomic contacts]. *Uspekhi fizicheskikh nauk — Successes of physical sciences*, *58*, 933–951.