

PACS: 73.40.-c, 74.70.Dd

УДК: 538.9

Аналіз мікроконтактних спектрів сполуки KFe_2As_2 у тепловому режимі

Н.В. Гамаюнова, О.Є. Квітницька, М.Л. Бобров, Ю.Г. Найдюк

Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б.І.Веркіна НАН України,
61103 Харків, пр. Леніна 47, Україна
gamatayunova.ilt@gmail.com

Проведено аналіз мікроконтактних (МК) спектрів точкових контактів на основі залізопніктидної сполуки KFe_2As_2 , згідно з теорією теплового режиму. Отримано значення питомого електроопору, числа Лоренца, довжини вільного пробігу електронів в контактах. Показано, що більшість МК спектрів може бути описана на основі даної теорії та дискутуються причини такої поведінки.

Ключові слова: залізопніктидні надпровідники, мікроконтактна спектроскопія, тепловий режим

Проведен анализ микроконтактных (МК) спектров точечных контактов на основе железопнитидного соединения KFe_2As_2 согласно теории теплового режима. Получены значения удельного электросопротивления, числа Лоренца, длины свободного пробега электронов в контактах. Показано, что большинство МК спектров может быть описано на основе данной теории и обсуждаются причины такого поведения.

Ключевые слова: железопнитидные сверхпроводники, микроконтактная спектроскопия, тепловой режим

The point-contact (PC) spectra of the iron-based compound KFe_2As_2 were analyzed according to the thermal regime theory. We have obtained the values of the residual resistivity, the Lorentz number, and the electron mean free path in the contacts. It was shown that the most PC spectra can be described by this theory. The reasons for this behavior are discussed.

Keywords: iron-based superconductors, point-contact spectroscopy, thermal regime

Дослідження надпровідників на основі заліза [1] є наразі одним з головних напрямів у надпровідниковому матеріалознавстві. Серед представників залізовмісних надпровідників KFe_2As_2 посідає особливе місце. Це кінцева сполука 122 - класу твердих розчинів $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$, які мають найвищу критичну температуру $T_c = 38$ К при $x = 0,4$. Високотемпературна надпровідність системи $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$ виникає при хімічному заміщенні йонів Ba йонами K , тому для даної системи можна вважати KFe_2As_2 «батьківською» сполукою, так само як і $BaFe_2As_2$. Однак $BaFe_2As_2$ не переходить у надпровідний стан та проявляє дальний антиферомагнітний порядок, в той час як KFe_2As_2 є надпровідником, хоча із відносно низькою критичною температурою $T_c = 3,8$ К. Вивчення електронних, магнітних та структурних властивостей вихідних сполук 122 - класу є ключовим для визначення механізму надпровідності цих матеріалів, що розвивається при їх допуванні. Численні дослідження таких сполук спрямовані на подальший прогрес у синтезі перспективних для практичного

застосування матеріалів із необхідними надпровідними властивостями та сформували один із пріоритетних напрямів фізики твердого тіла [1].

У зв'язку з цим є актуальними дослідження сполуки KFe_2As_2 за допомогою метода мікроконтактної спектроскопії, який є унікальним інструментом для одержання спектрів елементарних збуджень у провідниках за допомогою точкових контактів [2]. Мікроконтакт, або точковий контакт, представляє собою електричний контакт малих розмірів (від кількох нанометрів до мікронів), утворений двома масивними електродами, що стикаються на малій площині. У випадку балістичних або дифузійних мікроконтактів, коли довжина вільного пробігу електронів значно більша за діаметр контакту, реалізується спектроскопічний режим, а саме друга похідна вольт-амперних характеристик (ВАХ) містить пряму інформацію про функцію електрон-фононної взаємодії, а також про інші бозонні колективні взаємодії у нормальному стані.

На противагу вказаним спектральним режимам у точковому kontaktі, особливо при дослідженії сполук

з високим питомим опором, може реалізуватись тепловий режим протікання струму [3, 4], коли непружна довжина пробігу електронів стає меншою від розміру контакту. У результаті температура в області контакту збільшується із прикладеною напругою [3, 4]. При цьому нелінійності ВАХ визначаються розігрівом при контактній області.

Дана робота присвячена дослідженню похідних ВАХ точкових контактів на основі монокристалів KFe_2As_2 , і, в першу чергу, з'ясуванню режиму протікання струму в них.

Монокристали KFe_2As_2 із поперечними розмірами $1 \times 0,5 \text{ mm}^2$ та завтовшки $\sim 0,1 \text{ mm}$ були вирощені за допомогою флюксового методу в Інституті дослідження твердих тіл і матеріалів (Дрезден) [5]. Температурна залежність питомого електроопору сполуки KFe_2As_2 має типовий металевий характер із низьким залишковим опором (рис. 1). Перехід в надпровідний стан у цій сполуці спостерігається трохи

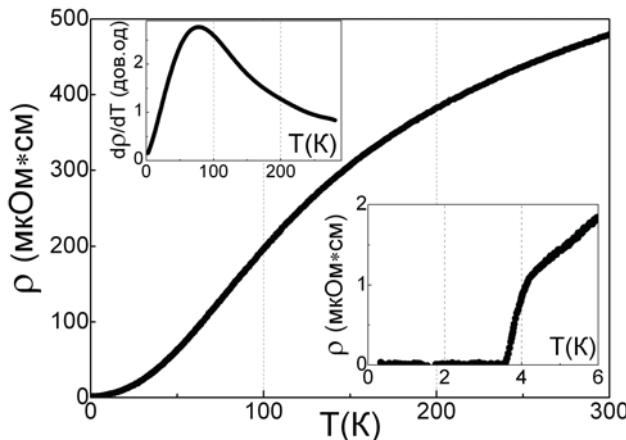


Рис. 1. Температурна залежність електроопору ρ_{ab} в площині (100) для одного із зразків монокристалів KFe_2As_2 . Ліва вставка: похідна питомого опору. Права вставка: ρ_{ab} в області надпровідного переходу.

нижче 4К (рис. 1, вставка праворуч).

Точкові контакти KFe_2As_2 –Cu та KFe_2As_2 –Ag були створені способом «голка-площина» [2] шляхом дотику до поверхні відколу кристала KFe_2As_2 тонкої загостrenoї голки із міді (Cu) або срібла (Ag) за допомогою двокоординатного механізму переміщень, що дозволяє змінювати зусилля притиску електродів і сканувати поверхню зразка.

Диференційний опір $dV/dI(V)$ та друга похідна ВАХ $d^2V/dI^2(V)$ були записані шляхом розгортки постійного струму I , на який накладається малий змінний струм i , використовуючи стандартну методику детектування гармонік модулюючого сигналу, що пропорційні похідним ВАХ, задопомогою синхронного підсилювача. Мікроконтакти створювалися безпосередньо в кріостаті з рідким гелієм при температурі 4,2 К, тобто

вище за температуру надпровідного переходу в KFe_2As_2 ($T_c = 3,8 \text{ K}$).

Вимірювані мікроконтактні спектри $d^2V/dI^2(V)$ точкових контактів KFe_2As_2 –Cu та KFe_2As_2 –Ag можна розподілити на два типи. Для першої нечисленної групи спектрів характерний виражений максимум при 20 мВ. У цьому випадку проходження електронів через мікрозвуження, ймовірно, здійснюється у балістичному або дифузійному режимах. Для переважної більшості мікроконтактних спектрів сполуки KFe_2As_2 спостерігається широкий максимум, положення якого варіється від 30 мВ до 60 мВ та напівширина сягає $40 \div 60 \text{ мВ}$ (рис. 2). Передбачається, що ця група контактів відноситься до теплового режиму протікання струму. Форма їх d^2V/dI^2 -спектрів подібна похідній електроопору $d\rho/dT$ на вставці ліворуч на рис. 1. При цьому збільшення диференційного опору $\Delta R/R$ становить до 300%, що також характерно для теплового режиму. Для підтвердження цього припущення були проведені розрахунки ВАХ та їх перших похідних dV/dI згідно з теорією теплового режиму [3, 4] для

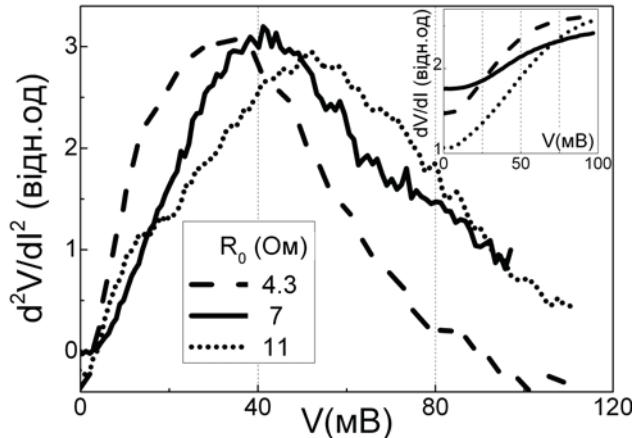


Рис. 2. Мікроконтактні спектри сполуки KFe_2As_2 у тепловому режимі протікання струму, вимірювані при $T = 4,2 \text{ K}$ для декількох контактів. На вставці – залежність диференційного опору від напруги для вказаних контактів.

порівняння з експериментальними залежностями.

Відповідно до теорії теплового режиму [3, 4] температура всередині контакту T_{PC} залежить від прикладеної до контакту напруги згідно формули:

$$T_{PC}^2 = T_0^2 + \frac{V^2}{4L_0}, \quad (1)$$

де T_0 – температура ванни, $L_0 = 2.45 \cdot 10^{-8} \text{ B}^2/\text{K}^2$ – число Лоренца.

При цьому ВАХ контакта визначається із формули:

$$I(V) = Vd \int_0^1 \frac{dx}{\rho(T_{PC}(1-x^2)^{1/2})}. \quad (2)$$

Згідно з формулою (2) були розраховані ВАХ та її перша похідна dV/dI . Для розрахунку використовувалися температурні залежності електроопору $\rho_{ab}(T)$ у площині (100), показана на рис. 1, та в деяких випадках $\rho_c(T)$ уздовж осі c [6] сполуки KFe_2As_2 . Для узгодження теоретичних кривих dV/dI з експериментальними за формою та за абсолютною величинами в розрахунках варіювалися наступні параметри: число Лоренца L , залишковий питомий опір досліджуваного зразка ρ_0 та діаметр точкового контакту d . На рис. 3 показано, що розрахована dV/dI крива, отримана за допомогою формули (2), достатньо добре описує експериментальну залежність. Параметри, використані при моделюванні мікроконтактних dV/dI спектрів сполуки KFe_2As_2 для ряду контактів у тепловому режимі, наведені в табл. 1.

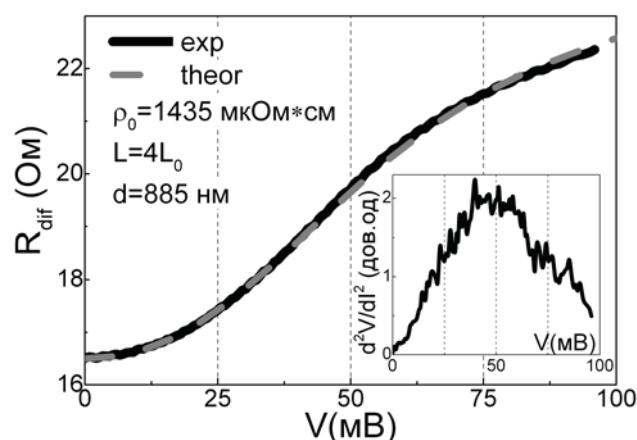


Рис. 3. Розрахована dV/dI крива (штрихова) у порівнянні з експериментальною кривою (суцільна) для мікроконтакта на основі KFe_2As_2 (№1 у табл. 1). В легенді на графіку вказані параметри, використані при розрахунках. На вставці: мікроконтактний спектр KFe_2As_2 для цього контакту.

Розраховані для восьми типових «теплових» мікроконтактних спектрів сполуки KFe_2As_2 параметри L , ρ_0 та d склали: $L \approx 4L_0$, величина ρ_0 варіювалася від декількох сотень до тисяч $\text{мкОм}\cdot\text{см}$, величина d – у межах кількох мікронів при опору контактів у межах від 2 до 10 Ом (табл.1).

Для досліджуваних контактів оцінити довжину вільного пробігу електронів l можна, знаючи величину ρl та залишковий питомий опір в kontaktі ρ_0 . У моделі вільних електронів $\rho l \approx 1.3 \times 10^4 n^{-2/3}$ [2], де величина $n \approx 4.9 \times 10^{21} \text{ см}^{-3}$ взята із розрахунку кількості електронів на елементарну комірку [5]. Обчислення довжини вільного пробігу показали величини у межах від 0,3 нм до 2 нм, що мають порядок величини параметрів тетрагональної кристалічної гратки KFe_2As_2 : $a \approx 0,4 \text{ нм}$, $t \approx 1,4 \text{ нм}$ [5].

У результаті виникає питання щодо причини отриманих високих значень ρ_0 та d і малих значень l . Можна припустити, що на поверхні зразка KFe_2As_2

менша величина густини електронів, ніж у масиві. Це можливо внаслідок порушення стехіометричного складу сполуки із-за хімічно активного та летучого лужного металу К, тобто в результаті деградації поверхні. Якщо, наприклад, густина електронів опускається до значень, характерних для напівметалів або сильно легованих напівпровідників, тобто у 10^3 менше, ніж вищеприведена величина $n \approx 4.9 \times 10^{21} \text{ см}^{-3}$, то в результаті ρl збільшиться на два порядки і, відповідно, збільшиться l .

З іншого боку, збільшення ρl приведе, згідно з формулою Векслера [1] для опору точкового контакту (яка є фактично сумаю опору Максвелла R_M (перший член) і опору Шарвіна R_W (другий член)):

$$R_B = \frac{\rho}{d} + \frac{16\rho l}{\pi d^2} \quad (3)$$

до збільшення вкладу опору Шарвіна і зменшення опору Максвелла, що у свою чергу також зменшить ρ_0 .

Щодо низького значення довжини вільного пробігу електронів у кристалі, то можливою причиною цього може бути порушення кристалічної структури поверхні зразка при створенні притискних контактів для KFe_2As_2 методом голка - площа при низьких температурах та/або зазначена деградація поверхні.

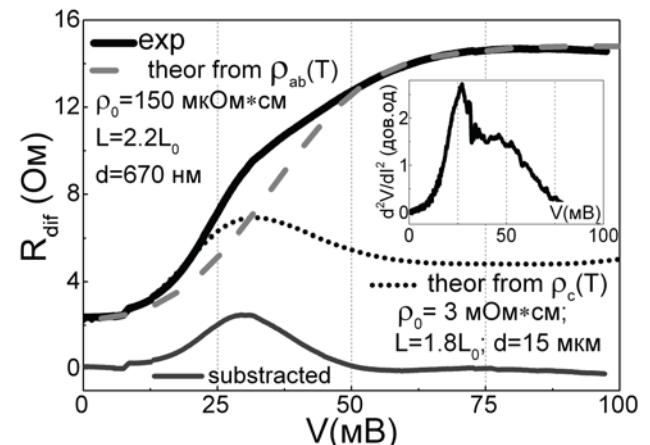


Рис. 4. Розрахована на основі $\rho_{ab}(T)$ залежності dV/dI крива (штрихова) в порівнянні з експериментальною кривою (суцільна) для мікроконтакта на основі KFe_2As_2 . Нижня крива – різниця між експериментальною і обчисленою на основі $\rho_{ab}(T)$ залежністю. Точкова крива – розрахунок на основі $\rho_c(T)$, який моделює різницеву (нижню) криву. В легенді на графіку вказані параметри, використані при розрахунках конкретних кривих. На вставці: мікроконтактний спектр KFe_2As_2 для цього контакту.

Для деяких контактів розрахована крива відхиляється від експериментальної, як показано на рис. 4. Припускається, що у цьому випадку орієнтація кристаліта в області контакту могла відхилятись від базисної площини, тобто мати складову вздовж осі

Таблиця 1.

Характерні параметри, використані при моделюванні мікроконтактних dV/dI спектрів сполуки KFe_2As_2 у тепловому режимі: опір контакту при нульовій напрузі R_0 , відносне збільшення опору контакту R/R_0 , приведене число Лоренца L/L_0 , залишковий питомий опір досліджуваного зразка ρ_0 , діаметр точкового контакту d та довжина вільного пробігу електронів l .

№	R_0 , Ом	R/R_0	ρ_0 , мкОм·см	L/L_0	d , нм	l , нм
1	16,5	1,4	1435	4	885	0,3
2	7	1,4	1340	4	1940	0,3
3	3	1,5	900	3,3	3000	0,5
4	11,2	1,6	840	4	740	0,5
5	11	2,5	450	4	380	1,0
6	8,5	2,9	350	4	420	1,3
7	6	3,5	275	4	460	1,6
8	3,5	4	220	4	650	2,0

с. У цьому випадку покращити підгонку допомагає врахування в розрахунках внеску від залежності $\rho_c(T)$ для сполуки KFe_2As_2 .

Таким чином, результати аналізу спектрів вказують на реалізацію переважно теплового неспектрального режиму в точкових контактах на основі сполуки KFe_2As_2 . Це потрібно брати до уваги при проведенні мікроконтактних вимірювань із метою відокремлення теплових ефектів та отримання спектральної інформації про квазічастінкові збудження для даної та подібних ізоструктурних сполук. Щодо проведеного визначення режиму протікання струму в таких контактах, все ще залишається питання побудови більш фізичної моделі, яка б спиралася не тільки на недосконалість контакту та/або деградацію поверхні.

Автори висловлюють подяку S. Aswartham та S. Wurmehl за надання зразків монокристалів KFe_2As_2 для досліджень.

1. A.A. Kordyuk, Low Temp. Phys 38, 888 (2012).
2. Yu.G. Naidyuk, I.K.Yanson, Point-Contact Spectroscopy. – NY: Springer, V.145 (2005).
3. B.I.Verkin, I.K.Yanson, I.O.Kulik, O.I.Shklyarevski, A.A.Lysykh, Yu.G.Naydyuk, Solid State Commun. 30, 215 (1979).
4. I.O. Kulik, Fiz. Nizk. Temp. 18, 450 (1992) [Sov. J. Low Temp. Phys 18, 302 (1992)].
5. M.Abdel-Hafiez, S.Aswartham, S.Wurmehl, V.Grinenko, C.Hess, S.-L.Drechsler, S. Johnston, A.U.B.Wolter, and B.Büchner, H.Rosner, and L.Boeri, Phys. Rev. B 85, 134533 (2012).
6. T.Terashima, M.Kimata, H.Satsukawa, A.Harada, K.Hazama, S.Uji, H.Harima, G.-F.Chen, J.-L.Luo, and N.-L. Wang, J. of the Physical Society of Japan 78, 063702 (2009).