

05; 11

© 1993

## ТОНКАЯ СТРУКТУРА СПЕКТРОВ ПОЛНОГО ТОКА МОНОКРИСТАЛЛОВ НИКЕЛЯ И МЕДИ

С.А. Комолов, О.Ф. Панченко,  
Л.К. Панченко, В.М. Шаталов

Низкоэнергетическая электронная спектроскопия полного тока, отличающаяся отсутствием разрушающего воздействия на исследуемый образец, является эффективным методом изучения приповерхностных явлений [1, 2]. При исследовании спектров полного тока (СПТ) монокристаллов  $Ni$  и  $Cu$  пучок медленных электронов ( $E_p \leq 100$  эВ) направлен по нормали к исследуемой поверхности. СПТ является производной по  $E_p$  от полного тока  $I$  в цепи образца и измеряется как функция  $E_p$ . Физическая природа тонкой структуры СПТ определяется механизмами взаимодействия электронов с поверхностью твердого тела и в низкоэнергетическом диапазоне в основном обусловлена энергетической зависимостью упругого отражения [3]. В предлагаемой работе при интерпретации СПТ граней  $Ni(100)$ ,  $Ni(110)$  и  $Cu(111)$  учитывается влияние энергетической зависимости плотности незаполненных электронных состояний, в которые попадают электроны при входе в твердое тело.

Принципиальная схема измерения СПТ в сверхвысоковакуумных условиях подробно описана в [4]. Измеряемый ток в цепи образца  $I = I_p - I_s$ , где  $I_p$  — поток первичных электронов с энергией  $E_p$ ,  $I_s$  — ток уходящих из образца электронов, как упруго-, так и неупругоотраженных. К последним относятся неупругоотраженные первичные электроны, высоковозбужденные электроны твердого тела, Оже-электроны и истинно вторичные электроны, появление которых существенно зависит от величины  $E_p$ . При низких  $E_p$  (до 5–8 эВ) преобладает упругое отражение [3], которое становится сравнимым с неупругой компонентой при  $E_p \leq 20$  эВ. В области энергий до 100 эВ доля упругого отражения составляет несколько процентов и преобладает электрон-электронное рассеяние с возбуждением межзонных переходов.

На рис. 1–3, кривая 2, представлены полученные СПТ  $dI(E, \vec{\Omega})/dE$  граней  $Ni(100)$ ,  $Ni(110)$  и  $Cu(111)$  соответственно. Спектры имеют тонкую структуру, существенно зависящую от ориентации монокристаллов. На рисунках не показан первичный максимум, появляющийся при энергии, при которой электроны начинают попадать на образец.

Для теоретической интерпретации полученных СПТ рассматривалось рассеяние электронов с заданным импульсом на кристалле

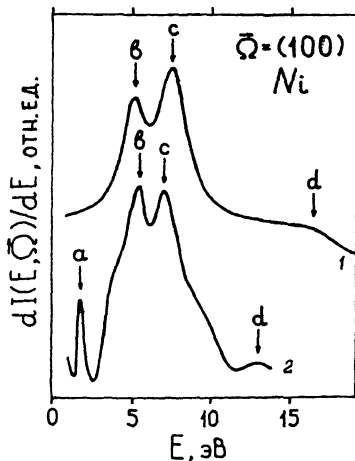


Рис. 1. СПТ грани (100) монокристалла  $Ni$ : а – теория, б – эксперимент. Кривые разнесены по оси ординат произвольным образом. Энергия  $E$  отсчитывается от уровня вакуума.

в приближении, когда вероятность рассеяния пропорциональна числу конечных состояний на данном уровне энергии  $E$  с заданным направлением квазиимпульса  $\vec{\Omega}$ . При этом ток через образец имеет вид [5]:

$$I(E, \vec{\Omega}) \sim \frac{1}{V} \sum_{n\vec{k}} [1 - f_F(E_{n\vec{k}})] \left| \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E_{n\vec{k}} \right| \delta(E - E_{n\vec{k}}) \delta(\vec{\Omega} - \vec{\Omega}_{n\vec{k}}), \quad (1)$$

где  $E_{n\vec{k}}$  – закон дисперсии электронов,  $\vec{\Omega}_{n\vec{k}}$  – единичный вектор вдоль направления  $\nabla_{\vec{k}} E_{n\vec{k}}$ ,  $f_F(E_{n\vec{k}})$  – равновесная функция заполнения Ферми-Дирака, которая при  $E > E_F + e\varphi$  равна 0,  $e\varphi$  – работа выхода,  $V$  – объем кристалла. Переходя от суммирования по  $\vec{k}$  к интегрированию по поверхности постоянной энергии  $E_{n\vec{k}} = E$ , получаем

$$I(E, \vec{\Omega}) \sim \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int dE' N(E', \vec{\Omega}) \frac{1}{\pi} \frac{\hbar \Gamma(E')/2}{(E - E')^2 + \hbar^2 \Gamma^2(E')/4}, \quad (2)$$

где  $N(E, \vec{\Omega})$  – число зон вдоль направления  $\vec{\Omega}$ , для которых выполняется равенство  $E = E_{n\vec{k}}$ . Здесь учтена конечная ширина  $\hbar \Gamma(E) = \hbar \Gamma(E)$  электронных уровней путем замены  $\delta$ -функции

Элемент	Направление	Работа	Энергетическое положение, эВ				
			<i>max</i>				
			<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	<i>d</i>	<i>e</i>
<i>Ni</i>	(100)	Эксперимент	1.8	5.5	7.0	13.0	-
		Теория	-	5.0	7.4	16.0	-
	(110)	Эксперимент	-	1.7	6.4	11.8	-
		Теория	-	2.4	6.1	11.3	-
<i>Cu</i>	(111)	Эксперимент	2.7	6.1	14.4	20.4	26.0
		Теория	-	-	15.6	20.4	32.8

по энергии в (1) на соответствующий лоренциан. При этом время жизни возбужденного состояния  $\tau(E)$  вблизи Ферми-поверхности определялось из [6]:

$$\hbar/\tau(E) = \pi^2 3^{1/2} E_{pl} \left( \frac{E}{E_F} - 1 \right)^2 / 128, \quad (3)$$

где  $E_F$  - уровень Ферми (8.6 эВ и 9.2 эВ для *Ni* и *Cu* соответственно),  $E_{pl}$  - параметр экранирования, зависящий от концентрации  $s$ - и  $d$ -электронов в электронной оболочке атома. Расчет из общей теории металлов дает для *Ni*:  $E_{pl} \approx 5.6$  эВ, для *Cu*:  $E_{pl} \approx 4$  эВ.

Выражение (2) справедливо, когда  $\vec{\Omega}$  совпадает с осью симметрии кристалла (как в нашем случае). Для построения ступенчатой функции  $N(E, \vec{\Omega})$  мы воспользовались графиками зонной структуры  $E_{n\vec{k}}$  *Ni* и *Cu*, полученных [7] методом релятивистских линейных *muffin-tin* орбиталей (РЛМО). Результаты расчета СПТ представлены на рис. 1-3, кривая 1 (для граней *Ni*(100), *Ni*(110) и *Cu*(111) соответственно). В таблице приведены положения характерных максимумов экспериментальных и теоретических СПТ *Ni* и *Cu*. Эти особенности на рис. 1-3 обозначены буквами  $a, b, c, \dots$  по возрастанию их энергии. Различия в положении особенностей на теоретических и экспериментальных кривых связаны, с одной стороны, с приближенным характером зонных расчетов для высоколежащих уровней. С другой стороны, имеются экспериментальные погрешности, связанные с формированием коллимированного пучка электронов в области низких энергий, осуществлением полного сбора вторичных электронов и др. Так, энергетическое положение и интенсивность максимумов в СПТ *Ni*(111) и *Cu*(111) [4, 8] сильно зависят

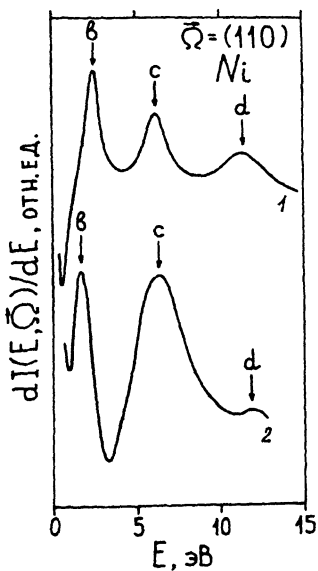


Рис. 2. То же, что и рис. 1 для грани  $Ni(110)$ .

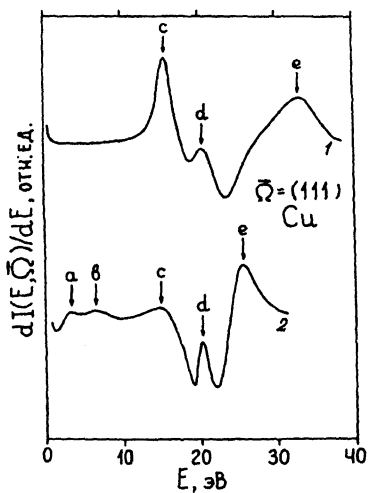


Рис. 3. То же, что и рис. 1 для грани  $Cu(111)$ .

от угла падения первичного пучка. Пик  $\alpha$  в СПТ  $Ni(100)$  (1 на рис. 1) и особенности  $\alpha$ ,  $\beta$  в СПТ  $(111)$  (2 на рис. 3). Можно объяснить как отклонением электронного пучка от нормали при некоторой погрешности в ориентации граней, так и высокой поверхностной чувствительностью СПТ, определяемой не только малой глубиной анализируемой области, но и сильной зависимостью от физико-химических поверхностных процессов [9, 10]. Так, низкоэнергетический максимум с  $E \approx 1.3$  эВ в СПТ  $Si(111)$  объясняется в [11, 12] наличием полосы поверхностных состояний вблизи края валентной зоны. При этом интенсивность максимума ослабляется при адсорбции кислорода, и он исчезает при температурах  $T > 200$  °С, что указывает на его связь с поверхностными состояниями.

Полученное соответствие между основными особенностями экспериментальных и теоретических СПТ  $Ni$  и  $Li$  свидетельствует о преобладающей роли эффектов зонной структуры в формировании спектра. При этом появляется возможность экспериментального изучения дисперсионных зависимостей и использования данных СПТ в качестве реперных точек для более совершенных зонных расчетов. Развиваемый метод позволяет отделить объемные эффекты в СПТ от поверхностных.

Работа выполнена в рамках конкурсного проекта фундаментальных исследований  $N$  2/418 „Слой“ при поддержке ГКНТ Украины.

#### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] T a m u r a E., F e d e r R., K r e w e r J. et al. // Sol. St. Comm. 1985. V. 55. N 6. P. 543-547.
- [2] S c h a f e r I., S c h l u t e r M., S k i - b o w s k i M. // Phys. Rev. B. 1987. V. 35. N 14. P. 7663-7670.
- [3] К о м о л о в С.А. Интегральная вторично-электронная спектроскопия поверхности. Л.: ЛГУ, 1986. 180 с.
- [4] С т р о к о в В.Н., Ш т а н ь к о А.В., К о м о - л о в С.А. // Вестн. ЛГУ. Сер. 4: Физика, химия. 1990. В. 1. № 4. С. 7-13.
- [5] Ш а г а л о в В.М., П а н ч е н к о О.Ф., П е р - л о в А.Я. и др. // Металлофизика. 1992. Т. 14. В. 1. С. 88-93.
- [6] П а й н с Д., Н о з ь е р Ф. Теория квантовых жидкостей. М.: Мир, 1967. 382 с.
- [7] N e m o s h k a l e n k o V.V., K r a s o v - s k i i A.E., A n t o n o v V.N. et al. // Phys. Stat. Sol. B. 1983. V. 120. N 1. P. 283-296.
- [8] К о м о л о в С.А., Ш т а н ь к о А.В., С т р о к о в В.Н. // Письма в ЖТФ. 1986. Т. 12. В. 18. С. 1138-1141.

- [9] Комолов С.А. // Радиотехника и электроника. 1979. Т. 24. В. 9. С. 1820-1826.
- [10] Комолов С.А., Алиджанов Э.К. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1982. Т. 46. В. 12. С. 2328-2332.
- [11] Комолов С.А. // ЖТФ. 1981. Т. 51. В. 9. С. 1909-1913.
- [12] Комолов С.А., Панченко О.Ф., Шатапов В.М. // ФТТ. 1992. Т. 34. В. 4. С. 1259-1262.

НИИ физики Санкт-Петербургского  
государственного университета,  
Санкт-Петербург

Поступило в Редакцию  
19 ноября 1992 г.

Донецкий физико-технический  
институт АН Украины,  
Донецк