

05.4; 10; 11; 12

© 1992

О ВОЗМОЖНОСТИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ  
КИСЛОРОДА В  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$  ПО СПЕКТРАМ  
ПОЛНОГО ТОКА

С.А. Комолов, М.А. Шалаев

В многокомпонентных соединениях наблюдается определенная зависимость между энергетической структурой плотности электронных состояний в окрестности уровня Ферми и содержанием отдельных компонент соединения. Эта зависимость прослеживается как при экспериментальных исследованиях [1], так и в теоретических расчетах [2]. Достаточно сильно она проявляется в ВТСП соединении  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$  при изменении  $x$  от 0 до 1. Кроме того, от содержания кислорода существенно зависят сверхпроводящие свойства данного соединения [3].

Для исследования энергетической структуры плотности электронных состояний многокомпонентных соединений широко применяются методы электронной спектроскопии [4], использующие в качестве зонда пучки электронов и фотонов с энергиями и интенсивностями, порой достаточными для стимулированной десорбции компонент соединения, что приводит к неконтролируемому изменению состава исследуемого соединения. В связи с этим особенно привлекательным становится метод низкоэнергетичной электронной спектроскопии полного тока (СП), в котором в качестве зонда применяется низкоэнергетичный (10–20 эВ) электронный пучок малой интенсивности ( $10^{-7}$ – $10^{-9}$  А) [5].

Недавние исследования [6–8] показали, что спектроскопию полного тока можно использовать для диагностики содержания кислорода в приповерхностной области ВТСП-соединений в условиях сверхвысокого вакуума. Основой такой диагностики служат изменения в электронной структуре ВТСП-соединений при уходе лабильного кислорода. Динамика этих изменений проявляется в динамике изменений спектров полного тока образца, прогреваемого при различных температурах в условиях высокого вакуума. Образцами в этих работах служили как керамика, так и пленки ВТСП-соединения  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ . Спектр полного тока данного соединения представлен на рис. 1 (кривая 1). Энергетическое положение основных особенностей указано на рис. 1. Кривые 2–4 являются спектрами полного тока, измеренными после последовательных прогревов в течение 15-ти минут при возрастающих температурах, указанных на рисунке. Видно, что рост температуры прогрева сопровождается усилением особенности С спектра полного тока. Авторы работ [6, 7] на основе сугубо качественного анализа предположили, что на-

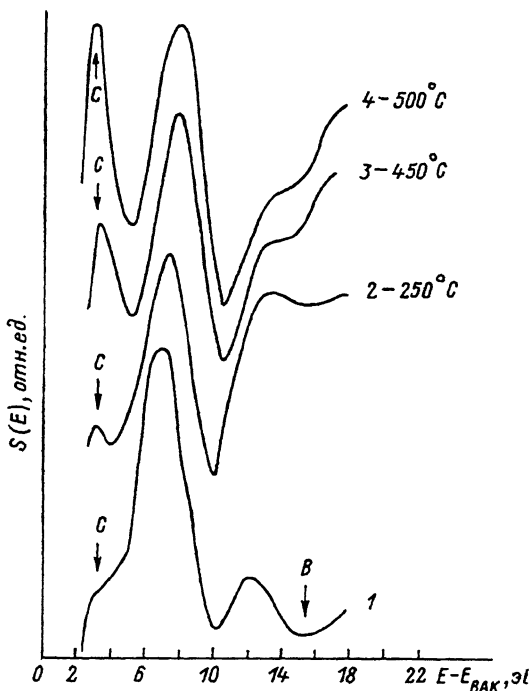


Рис. 1. Спектры полного тока, измеренные после последовательных 15-ти минутных прогревов при возрастающих температурах, указанных на рисунке.

блюдаемая динамика спектров полного тока обусловлена главным образом ростом максимума плотности незаполненных состояний, локализованного на 1,5 эВ над уровнем Ферми.

Целью данной работы является подкрепление предложенной модели прямым расчетом спектра полного тока. Основой расчета служат аналитические соотношения, полученные в работе [9] и устанавливающие следующую связь между спектром полного тока и плотностями заполненных и незаполненных состояний:

$$S(E) = \text{const} \cdot \int_0^E N_c(\xi) \int_0^{E-\xi} \frac{dN_v(-S)}{dS} N_c(E-\xi-S) dS d\xi, \quad (1)$$

где  $N_v(-S)$  - плотность заполненных состояний,  $N_c(\xi)$  - плотность незаполненных состояний,  $E$  - энергия падающих на образец электронов.

Используемая в расчетах плотность электронных состояний показана на рис. 2. На этом же рисунке показана измеренная с

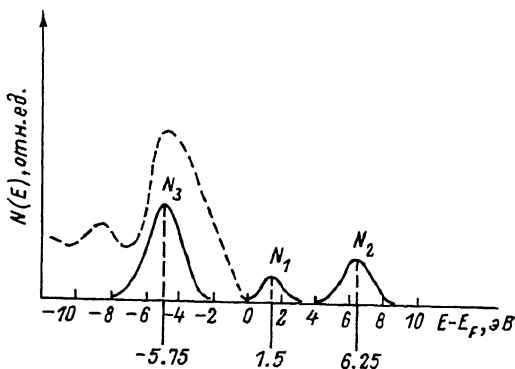


Рис. 2. Схематическое изображение плотности электронных состояний, используемой в расчете по формуле (1); пунктир - фотоэлектронный спектр соединения  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$  [10].

использованием фотоэлектронной спектроскопии плотность заполненных состояний (пунктир) [10]. Плотности состояний задавались в виде функций Гаусса. Энергетическое положение максимумов плотности состояний, указанное на рисунке, выбиралось на основании литературных данных по ФЭС и собственных данных по СХПЭЭ соединения  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ . Полуширина была одинаковой для всех максимумов и равнялась 2 эВ. Амплитуды максимумов № 3 и № 2 (см. рис. 2) оставались фиксированными. Расчеты спектров производились при различных амплитудах максимума плотности свободных состояний, лежащего на 1.5 эВ выше уровня Ферми. Результаты расчетов представлены на рис. 3.

Из представленных рисунков видно хорошее соответствие экспериментальных и расчетных кривых в смысле энергетического положения особенностей на спектрах. Совпадения кривых вплоть до равенства соотношения интенсивностей особенностей трудно было ожидать в связи с тем, что реальный спектр полного тока определяется как вероятностью перехода электрона во все нижележащие состояния (см. (1)), так и рядом других факторов, подробно описанных в монографии [9].

Помимо энергетического положения особенностей, общим для кривых, представленных на рисунках 1 и 3, является характер их изменений при увеличении отношения  $N_1/N_2$  (для расчетных кривых) и при увеличении температуры прогрева (для экспериментальных кривых). Последний факт, по нашему мнению, является серьезным аргументом в пользу модели, предложенной в работе [7].

В работах [6, 8] делалось предположение о том, что минимум В в экспериментальных спектрах полного тока имеет эмиссионный характер, т. е. определяется только ростом эмиссии электронов из образца. Однако проведенные расчеты, никак не учитывающие процесс эмиссии, показали присутствие данной особенности в расчет-

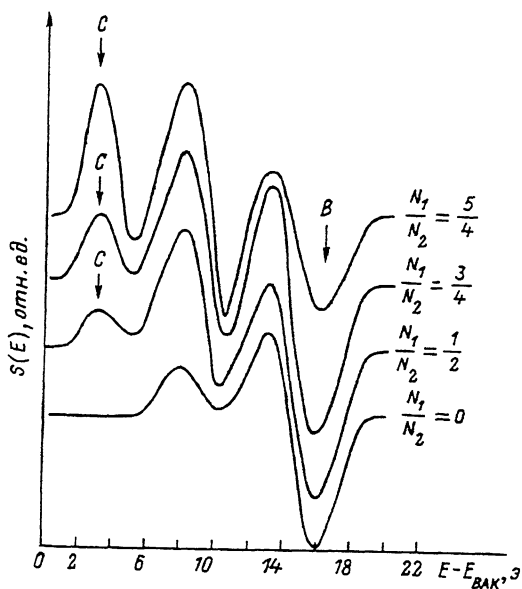


Рис. 3. Спектры полного тока, рассчитанные по формуле (1), при различных соотношениях интенсивностей пиков, указанных на рис. 3.

ных спектрах. Таким образом, данный минимум может быть объяснен не только как результат роста электронной эмиссии, но и как естественный результат свертки (1).

Таким образом, в настоящей работе с помощью прямого расчета показана корреляция между интенсивностью максимума  $C$  в спектре полного тока ВТСП-соединения  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$  и максимумом плотности незаполненных электронных состояний, лежащем на 1.5 эВ выше уровня Ферми, в его электронной структуре. Поскольку обсуждаемый эффект связан с изменением концентрации кислорода в приповерхностной области образцов  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ , то появляется принципиальная возможность создания метода определения содержания кислорода в указанной области данного соединения на основе калибровочной зависимости между  $X$  в формуле соединения и соотношением интенсивностей  $N_1/N_2$ .

Работа выполнена в рамках программы Научного Совета при Государственной Комиссии по проблеме „Высокотемпературной сверхпроводимости“.

#### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Неможкаленко В.В., Алешин В.Г. Электронная спектроскопия кристаллов. Киев, 1976.

- [2] Kirpatrick S., Velicky B., Grenlich H. // Phys. Rev. 1970. В 1. P. 3250.
- [3] Fujimori A., Takayama-Miromachi E., Ushida Y. // Sci. St. Com. 1987. V. 63. P. 857-860.
- [4] Вудраф Д., Делчар Т. Современные методы исследования поверхности. М., 1989.
- [5] Комолов С.А. Total current spectroscopy of surfaces. Gordon Breach: London, 1992.
- [6] Комолов С.А., Штанько А.В., Шалаев М.А. Тез. докл. Всесоюз. конф. „Поверхность-89”. Черногоровка, 1989. С. 42.
- [7] Комолов С.А., Штанько А.В., Шалаев М.А. Заводская лаборатория. 1990. № 8. С. 47-50.
- [8] Герасимова Н.Б., Комолов С.А., Лазнева Э.Ф., Федоров И.Н. // Сверхпроводимость Ф.Х.Т. 1992. (в печати).
- [9] Комолов С.А. // Поверхность. Физика, Химия. Механика. 1985. В. 5. С. 5-21.
- [10] Takahashi T., Maeda F., Arai H. // Phys. Rev. 1987. В 36. P. 3899-3902.
- [11] Wagner T.J., Gao Y., Weaver J.N. // Phys. Rev. 1987. В 36. P. 3899-3902.

Поступило в Редакцию  
2 июля 1992 г.