

ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ ФОТОЭЛЕКТРОННЫЙ СПЕКТР ТОНКОЙ ПЛЕНКИ MgB_2

О. И. Дубровский

Воронежский государственный университет

В рамках метода линеаризованных присоединенных плоских волн вычислен фотоэмиссионный спектр тонкопленочного сверхпроводника MgB_2 . Обнаружено, что основные структурные особенности спектра определяются p -состояниями атомов бора. На основе полученных результатов проведена корректная интерпретация экспериментальных спектров.

ВВЕДЕНИЕ

Открытие сверхпроводимости при 39 К в MgB_2 явилось значительным шагом вперед в развитии представлений о сверхпроводимости, т.к. критическая температура в этом соединении практически вдвое превосходит рекордные величины «классических» бинарных сверхпроводников. Относительная простота структуры, химическая стабильность, устойчивость к внешним воздействиям, сравнительная дешевизна и доступность, — все это делает данный материал весьма привлекательным с практической точки зрения.

С точки зрения определения перспектив технологических применений и для поиска схожих материалов с возможно большим значением T_c безусловно необходимым условием является знание электронной структуры этого материала. Одним из самых эффективных экспериментальных методов исследования электронной структуры является фотоэлектронная спектроскопия (ФЭС), однако, подобных экспериментов для MgB_2 выполнено мало, и их результаты [1, 2] плохо согласуются как между собой, так и с имеющимися в литературе расчетами. Причин здесь, на наш взгляд, несколько. Это и трудность приготовления хороших образцов для фотоэлектронной спектроскопии, т.к. эта методика является поверхностно-чувствительной, а поверхность образцов MgB_2 по составу может сильно отличаться от объема, к тому же быть нестабильной. Кроме того, авторы экспериментальных работ сравнивают свои результаты непосредственно с кривыми плотностей электронных состояний, что не совсем корректно, т.к. при этом не учитываются различия в сечениях фотоионизации для атомов разного сорта и состояний различной симметрии. И,

наконец, высокая поверхностная чувствительность ФЭС спектроскопии приводит к необходимости учета влияния поверхности в теоретических вычислениях, поэтому сравнивать экспериментальные спектры с результатами расчетов объемных кристаллов, как это делается авторами подобных работ, также не вполне корректно.

Поэтому мы провели расчет зонной структуры и плотностей электронных состояний (ПЭС) тонкой пленки MgB_2 , что позволило явно учесть влияние поверхности. Более того, на основе результатов расчета мы вычислили непосредственно спектр фотоэлектронной эмиссии, что сделало возможным проведение прямого сравнения с соответствующим экспериментом.

МЕТОД И ДЕТАЛИ РАСЧЕТА

Исследуемая пленка состояла из 13 атомных слоев. Энергетические зоны в пленке рассчитывались в рамках приближения функционала локальной плотности с использованием пленочного скалярно-релятивистского метода линеаризованных присоединенных плоских волн (ЛППВ) [3]. При этом использовался базис из 3040 ЛППВ. В разложении базисной функции по сферическим гармоникам учитывались члены с $l_{max} = 7$. Затем на основе полученной зонной структуры с помощью комбинированного метода треугольников интегрирования по двумерной зоне Бриллюэна [4] были вычислены полные и локальные парциальные ПЭС. При расчете фотоэлектронного спектра использовался метод [5], основанный на учете только однократного рассеяния в конечном состоянии [6]. Энергия возбуждающих фотонов ($h\nu$) была выбрана равной 95 эВ (мягкое рентгеновское излучение), в соответствии с экспериментальным значением [1, 2]. Вычисленный спектр был

подвергнут свертке с функцией Лоренца с линейно зависящей от энергии полушириной [7] для учета конечности времени жизни фотодырки. Кроме того, чтобы учесть также энергетическое разрешение спектрометра, спектр был размыт дисперсионной кривой Гаусса с полушириной 0,1 эВ, в соответствии с данными [2].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Как показали результаты расчетов локальных парциальных ПЭС, в валентной зоне пленки преобладают p -состояния атомов бора. Этот факт, наряду с большим по сравнению с атомами магния процентным содержанием атомов В в элементарной ячейке при приблизительно одинаковых значениях сечений фотоионизации, приводит к тому, что почти все особенности фотоэлектронного спектра должны отражать структуру именно $B2p$ -состояний.

Вычисленный фотоэлектронный спектр валентной зоны пленки MgB_2 представлен на рис. 1. На том же рисунке показаны и соответствующие экспериментальные спектры из работ

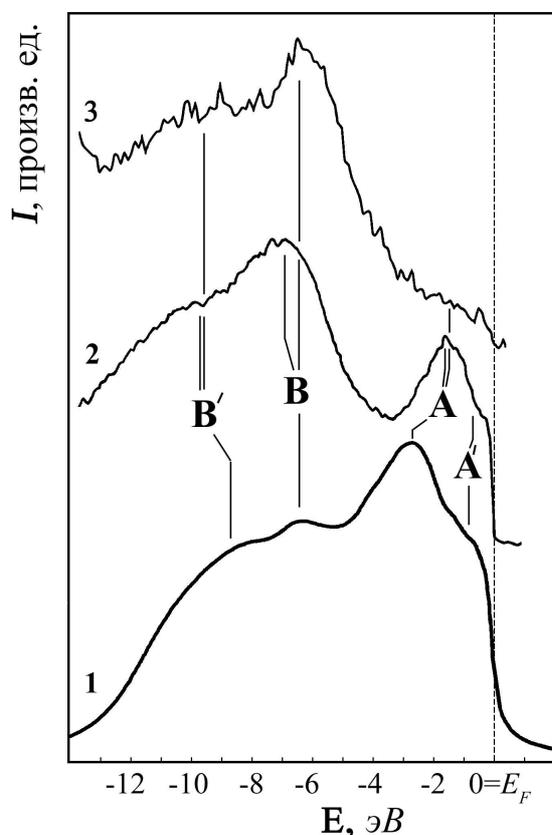


Рис. 1. Фотоэлектронный спектр MgB_2 при $h\nu = 95$ эВ. 1 — наш расчет, 2 — эксперимент [2], 3 — эксперимент [1]

[1, 2]. Как видно из рисунка, структура спектра достаточно сложна и имеет ряд особенностей, проявляющихся и в расчете, и в эксперименте. Энергетическое положение особенностей приведено в табл. 1.

Сопоставляя рассчитанный нами спектр с более поздним экспериментом [2], можно отметить следующее. Что касается количества и взаимного энергетического положения особенностей, то здесь наблюдается неплохое согласие, как видно из рис. 1 и табл. 1. Однако, по соотношению интенсивностей ситуация обратная. В настоящем расчете более интенсивным является высокоэнергетический максимум А, в эксперименте же — максимум В. На наш взгляд, это может быть обусловлено двумя причинами. Во-первых, в экспериментальном спектре присутствует не учитываемый в используемой нами модели фон неупруго рассеянных и вторичных электронов, интенсивность которого растет с удалением от уровня Ферми. Следует ожидать, что после вычитания этого фона относительная интенсивность экспериментального максимума В и плеча В' уменьшатся. Во-вторых, напомним, что фотоэмиссионная спектроскопия — поверхностно чувствительная экспериментальная методика. И относительная низкая интенсивность экспериментального максимума А, скорее всего, отражает недостаточную чистоту и отклонение от стехиометрического состава поверхности исследуемых в эксперименте образцов. Это предположение подтверждается тем, что в первых экспериментах [1] максимум А если и проявлялся, то только в виде слабого наплыва, и лишь в работе [2], где удалось с помощью сканирования выделить в образце микронные области относительно хорошей поверхности, соответствующий максимум был обнаружен. Причем оказалось, что с течением времени поверхность быстро деградировала, и максимум А исчезал [2]. Так что можно предположить, что и начальное состояние поверхности в этом экс-

Таблица 1

Энергетическое положение особенностей (в эВ, относительно уровня Ферми) в фотоэлектронном спектре пленки MgB_2

Параметр	Наш расчет	Эксперимент [1]	Эксперимент [2]
Максимум А	-2,7	-1,7	-1,8
Наплыв А'	-0,8	—	-0,6
Максимум В	-6,4	-6,4	-6,8
Плечо В'	-8,7	-9,6	-9,7

перименте отличалось от идеальной стехиометрии, которой обладала пленка, исследуемая нами теоретически. Тем не менее, отметим, что интерпретация эксперимента на основе вычисленного в нашей работе фотоэлектронного спектра, все же дает лучшие результаты, нежели предпринятая в самой работе [2] попытка такой интерпретации на основе вычисленных парциальных плотностей состояний объемного MgB_2 [8].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Vasquez R.P., Jung C. U., Park Min-Seok, Kim Heon-Jung, Kim J. Y., and Lee Sung-Ik.* // Phys. Rev. B. 2001. V. 64, 052510.
2. *Goldoni A., Larciprete R., Lizzit S., La Rosa S., Bianco A., and Bertolo M.* // Phys. Rev. B. 2002. V. 66, 132503.
3. *Krakauer H., Posternak M., Freeman A.J.* // Phys. Rev. B. 1979. V. 19. № 4. P. 1706 – 1719.
4. *Kurganskii S.I., Dubrovskii O.I., Domashevskaya E.P.* // Phys. stat. solidi (b). 1985. V. 129. № 1. P. 293 – 299.
5. *Лухачев Е.Р., Курганский С.И.* // Известия РАН. Сер. физ. 1997. Т. 39. № 3. С. 437—440.
6. *Redinger J., Marksteiner P., Weinberger P.* // Z. Phys. B. 1986. V. 63. P. 321—333.
7. *Marksteiner P., Massidda S., Yu J., Freeman A.J., Redinger J.* // Phys. Rev. B. 1988. V. 38. № 7. P. 5098-5101.
8. *Kim In Gee, Lee J.I., Min B.I., and Freeman A.J.* // Phys. Rev. B 2001. V. 64, 020508.