

Моделирование спектров $1/f$ -шума в эпитаксиальных пленках $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$

© А.А. Берзин, А.В. Бобыль*, А.И. Дедоборец**, А.И. Морозов, Р.А. Сурис*

Московский государственный институт радиотехники, электроники и автоматики,
117454 Москва, Россия

* Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

** Государственный агроуниверситет,
320027 Днепрпетровск, Украина

E-mail: boby1@theory.ioffe.rssi.ru

(Поступила в Редакцию 15 сентября 1998 г.)

Методом Монте-Карло проведено математическое моделирование спектров $1/f$ -шума нормальной фазы эпитаксиальных пленок $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$. Сделано предположение, что основными источниками шума являются переходы атомов кислорода в вакантные позиции CuO -плоскости. Показано, что режим отжига и величина деформации, возникающей за счет несоответствия постоянных решетки пленки и подложки, являются основными факторами, определяющими доменную и дефектную структуру пленки, и, следовательно, спектр $1/f$ -шума.

Интенсивность и спектр низкочастотного шума (с частотной зависимостью, близкой к $1/f$) эпитаксиальных пленок $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ являются важными физическими параметрами, определяющими возможность их применения в различных устройствах высокотемпературной сверхпроводниковой электроники, например, болометрах [1]. Известно, что безразмерный параметр Хоуге [2], который обычно используется в качестве критерия интенсивности шума, в этих пленках на много порядков превышает соответствующие значения для пленок простых металлов [3,4]. Основные причины этого — большая концентрация источников шума, так называемых дефектов-флуктуаторов (ДФ) [5], и большое относительное изменение сечения рассеяния свободных носителей на этих дефектах. В простых металлах таким ДФ является пара близко расположенных точечных дефектов решетки, изменяющая свое сечение рассеяния при переходе одного из дефектов пары в новое положение [3,4,6]. Концентрация таких пар в металле невелика. В соединениях $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ такими ДФ являются атомы кислорода CuO -плоскости. Переход атома кислорода из цепочечной позиции O1 в ближайшую вакантную позицию O5 приводит к возникновению пары дефектов вакансии–собственный междоузельный атом. При этом сечение рассеяния изменяется от нуля (отсутствие пары дефектов) до некоего значения σ_0 (ее наличие). Очевидно, что относительное изменение сечения в этом случае является максимальным $\Delta\sigma/\sigma_0 = 1$ [7].

В данной работе методом Монте-Карло было проведено математическое моделирование распределения атомов кислорода в CuO -плоскости и рассчитаны соответствующие спектры энергий активации для переходов O1-O5 . Было исследовано влияние различных режимов отжига и наличия одноосной деформации CuO -плоскости на эти спектры. Проведена классификация особенностей структуры спектральных распреде-

лений ДФ и их микроприроды, т.е. установлены типы соответствующих переходов атомов кислорода и конфигурации ближайшего окружения. Проанализирована зависимость интенсивности шума и его спектра от структурного качества эпитаксиальных пленок $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$.

1. Описание модели

Распределение атомов кислорода по двум подрешеткам CuO -плоскости рассчитывалось по стандартной схеме Метрополиса методом Монте-Карло в рамках так называемой модели ANNN [8–11], учитывающей взаимодействие ближайших атомов кислорода (рис. 1). Величины потенциальных энергий притягивающего V_2 и отталкивающих V_1 и V_3 взаимодействий взяты из работы [12] $V_2 = -0.304$, $V_1 = 0.364$ и $V_3 = 0.04$ eV. Были использованы периодические граничные условия. Несовпадение параметров решетки пленки и подложки приводит к появлению внутренних напряжений. Как показано в [7], эпитаксиальная $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ пленка состоит из малоугловых блоков, размеры которых порядка толщины пленки $0.1-0.2 \mu\text{m}$. Поскольку моделирование проводилось на квадрате 44×44 кислородных узлов, то размеры области моделирования много меньше размеров этих блоков и, следовательно, деформацию можно считать однородной. При отсутствии сдвиговых компонент величина деформации u_{ij} CuO -плоскости связана с упругими напряжениями σ_{ik} следующими соотношениями:

$$\begin{cases} u_{xx} = c_{xxxx}\sigma_{xx} + c_{xyxy}\sigma_{yy} + c_{xxtz}\sigma_{zz}, \\ u_{yy} = c_{yyxx}\sigma_{xx} + c_{yyyy}\sigma_{yy} + c_{yyzz}\sigma_{zz}, \end{cases} \quad (1)$$

где c_{ijkl} — упругие податливости кристаллической решетки $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$, оси системы координат параллельны кристаллографическим осям.

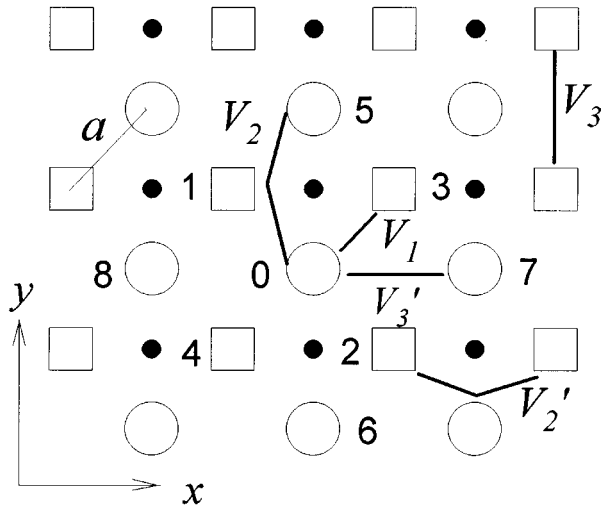


Рис. 1. Притягивающее V_2 и отталкивающие V_1 и V_3 взаимодействия соседних атомов кислорода CuO-плоскости. Большие светлые кружки и квадраты — заполненная кислородом и пустая подрешетки, темные кружки — атомы меди. Нумерация узлов решетки соответствует индексам соответствующих расстояний в уравнении (3–4).

Будем считать исходную фазу тетрагональной, что справедливо в области высоких температур, где преобладает хаотическое распределение атомов кислорода по подрешеткам, а также в случае, когда орторомбические искажения, вызванные упругими напряжениями, намного превосходят таковые в отсутствие напряжений. При этом $c_{xxx} = c_{yyy}$, а $c_{xxz} = c_{yyz}$. В случае $\sigma_{xx} - \sigma_{yy} \neq 0$ возникает различие в постоянных решетки вдоль осей x и y (рис. 1), т.е. орторомбическое искажение, приводящее к монодоменизации кристаллических образцов [13]. Введем величину P , равную

$$P = u_{xx} - u_{yy} = (c_{xxx} - c_{xyy})(\sigma_{xx} - \sigma_{yy}). \quad (2)$$

При моделировании будем задавать только величину P , считая, что симметричная деформация, для которой $u_{xx} = u_{yy}$, уже учтена в исходных значениях потенциалов взаимодействия. В этом случае при наличии деформации вдоль оси x расстояния между узлами кислородной решетки можно выразить через величину P следующим образом:

$$r_{01} = \frac{a}{2} \sqrt{(1+P)^2 + 1}, \quad r_{07} = \sqrt{2} a (1+P), \quad (3)$$

где a — расстояние между ближайшими узлами кислородной решетки, индексы соответствуют нумерации узлов на рис. 1. Расстояние r_{05} не зависит от P . Оценим изменение потенциалов взаимодействия между атомами кислорода в результате деформации. Для этого используем следующие аналитические зависимости отталкивающих потенциалов V_1 и V_3 от расстояния r между

атомами кислорода:

$$V_{1,3} \sim r^{-1} \exp(-r/\lambda), \quad (4)$$

где λ — радиус экранирования, далее считаем его равным 1.6 \AA [14]. Относительно притягивающего потенциала V_2 полагаем, что он состоит из суммы двух членов: притягивающего отрицательного, слабо зависящего от расстояния и обусловленного ковалентным взаимодействием через орбитали атома меди, расположенного между ними, и положительного отталкивающего, описываемого формулой (4). На основании уравнений (3,4) и приведенных численных значений соответствующих параметров можно получить следующие соотношения для относительных деформационных изменений потенциалов:

$$\delta \ln V_1 = -2.7P, \quad \delta \ln V_2 = 0, \quad \delta \ln V_2' = -0.45P$$

$$\text{и } \delta \ln V_3 = 0, \quad \delta \ln V_3' = -3.4P, \quad (5)$$

которые использовались непосредственно в компьютерных расчетах.

Таким образом, деформационные изменения $\delta V_2'$ имеют тот же знак, что и δV_1 , и $\delta V_3'$: энергия увеличивается при уменьшении расстояний между атомами. Как показали результаты модельных отжига, это условие является обязательным для получения правильной ориентации кислородных цепочек относительно оси деформации. Именно в этом случае ориентация была такой же, как в монодоменных образцах, получаемых экспериментально при приложении одноосного давления к кристаллам $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ [13]: кислородные цепочки располагались перпендикулярно оси сжатия.

Модельный отжиг начинался с высокой температуры T_0 , при которой хаотическое распределение атомов кислорода задавалось с помощью генератора случайных чисел, и заканчивался при низкой температуре t_0 . При этом текущая температура определялась соотношением

$$T = T_0 \exp(-gn) + t_0, \quad (6)$$

где g — скорость отжига, n — количество шагов в расчете методом Монте-Карло.

Спектр энергий активации для дефектов-флуктуаторов определялся путем подсчета количества барьеров с заданной энергией E_b перехода атома кислорода в соседний пустой узел квадратной решетки. Величина E_b рассчитывалась в приближении гармонического потенциала для ямы кислородного узла [15]

$$E_b = V_0 + (V_f - V_i)/2 + (V_f - V_i)^2/16V_0, \quad (7)$$

где V_i и V_f — суммарные энергии взаимодействия атома кислорода с окружением в исходном узле и после прыжка соответственно, V_0 — высота барьера для изолированного атома, у которого все соседние узлы пусты как до прыжка, так и после. В работе [11] была получена следующая оценка: $V_0 \sim 0.3 \text{ eV}$.

2. Моделирование режимов отжига

Модельный отжиг проводился для значения кислородной нестехиометрии $\delta = 0.05$, при которой имеет место максимум критической температуры T_c [16], на квадрате размером 44×44 узлов. Стартовая температура варьировалась в пределах $T_0 = 0.5 - 0.05$ eV, скорость отжига составляла $g = 10^{-8} - 5 \cdot 10^{-7}$, а деформация — $P = 0.0 - 0.05$. Максимальное значение P соответствовало характерным деформациям пленки, наносимой на обычно используемые подложки [7], $\sim 1 - 10\%$, и оказалось вполне достаточным для выявления влияния деформации на доменную и дефектную структуры пленок. По температурной зависимости суммарной энергии взаимодействия атомов кислорода (рис. 2) возникающие ситуации можно сгруппировать следующим образом.

2.1. Область высоких T_0 (> 0.22 eV). На рис. 2 (область (1)) показаны только две кривые процесса охлаждения из этой группы, для $T_0 = 0.45$ eV. Кривые для меньших значений T_0 начинались с быстро спадающего участка, а при более низких температурах совпадали с приведенными на рис. 2 кривыми. Это указывало на квазистатический характер процессов охлаждения, протекающих при равновесных фазовых флуктуациях и зависящих только от величины текущей температуры. В этом случае температурную зависимость величины флуктуаций можно использовать для определения температуры структурного фазового перехода. При заданной температуре силу флуктуаций можно оценить по величине среднеквадратичного отклонения $\langle E \rangle$ суммарной энергии взаимодействия E_j , получаемой непосредственно в результате текущих компьютерных расчетов, от ее среднего значения E_{av} , получаемого в результате сглаживания. Соответствующие температурные зависимости приведены на рис. 2. Видно, что наличие сжимающей деформации приводит к смещению кривых и температуры перехода в область высоких T , что обусловлено увеличением средней энергии взаимодействия между ближайшими соседями. При этом на соответствующем распределении атомов кислорода (рис. 3, *a*) наблюдаются микродомены только одной ориентации, т. е. процесс обусловленный деформацией монодоменизации начинается на самых ранних этапах охлаждения. Для $P = 0.0$ характерным является более медленный процесс спонтанной монодоменизации через промежуточные полидоменные распределения достаточно больших областей (рис. 3, *b*) и постепенное расширение одной из областей. Конечным результатом равновесного охлаждения является достижение минимальной энергии взаимодействия и минимальной концентрации точечных дефектов (см. рис. 3, *c* и 4, *b*). Следует заметить, что результаты моделирования завершающих этапов равновесного охлаждения сильно зависят от параметров взаимодействия между ближайшими соседями и изменяются при учете дальнего упругого взаимодействия [9].

2.2. Область промежуточных T_0 ($0.11 < T_0 < 0.22$ eV). В этой области при $P = 0$

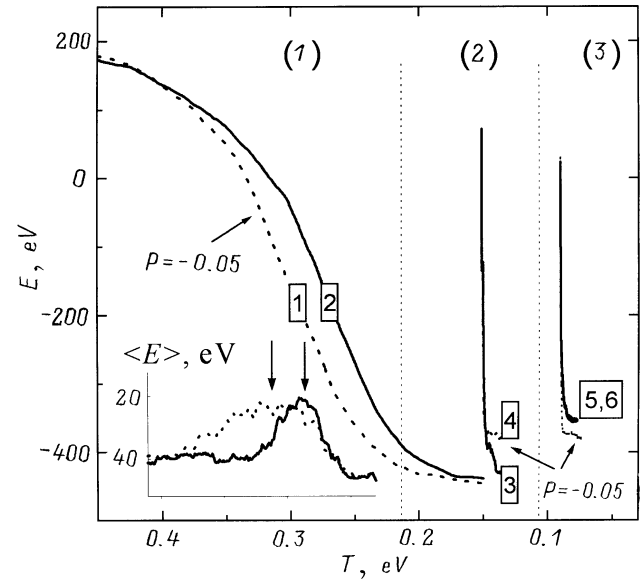


Рис. 2. Зависимость суммарной энергии взаимодействия атомов кислорода CuO -плоскости от температуры при различных начальных температурах отжига: (1) — область равновесного поведения, (2) и (3) — области квазиизотермического режима релаксации, приводящего к наличию метастабильных точечных дефектов ($P \neq 0$) или двойников ($P = 0$). Сплошные и штриховые кривые соответствуют значениям деформации $P = 0.0$ и -0.05 . Скорости отжига $g = 5 \cdot 10^{-8}$; цифры в прямоугольниках указывают характерные точки (см. рис. 3). На вставке показано значение дисперсии энергии системы, стрелками указаны температуры тетра-орто-перехода.

температурная зависимость суммарной энергии, хотя и не совпадает с соответствующей кривой области (1) на рис. 2, однако на завершающих этапах релаксации асимптотически приближается к ней. Этому способствует, видимо, наличие микродоменов на промежуточных этапах релаксации и их последующая постепенная аннигиляция. Площадь, охваченная подвижными доменными границами, оказывается свободной от избыточной энергии. В результате, как и в случае высоких T_0 , происходит релаксация через промежуточные полидоменные распределения (несколько более медленная по сравнению с релаксацией в области (1) на рис. 2) и постепенное расширение одного из доменов. При этом также достигается минимальная энергия и аналогичное распределение дефектов, показанное на рис. 3, *c*. При $P \neq 0$ энергия не успевает достичь равновесной величины, что обусловлено образованием метастабильных точечных дефектов: вакансий в местах разрыва цепочек кислорода и пространственно разнесенных от них лишних атомов кислорода между цепочками (рис. 3, *d*). Плотность распределения атомов по плоскости зависит от первоначальной случайной реализации их распределения. Расчетная суммарная избыточная энергии метастабильных дефектов составляет величину $\sim 30 - 80$ eV.

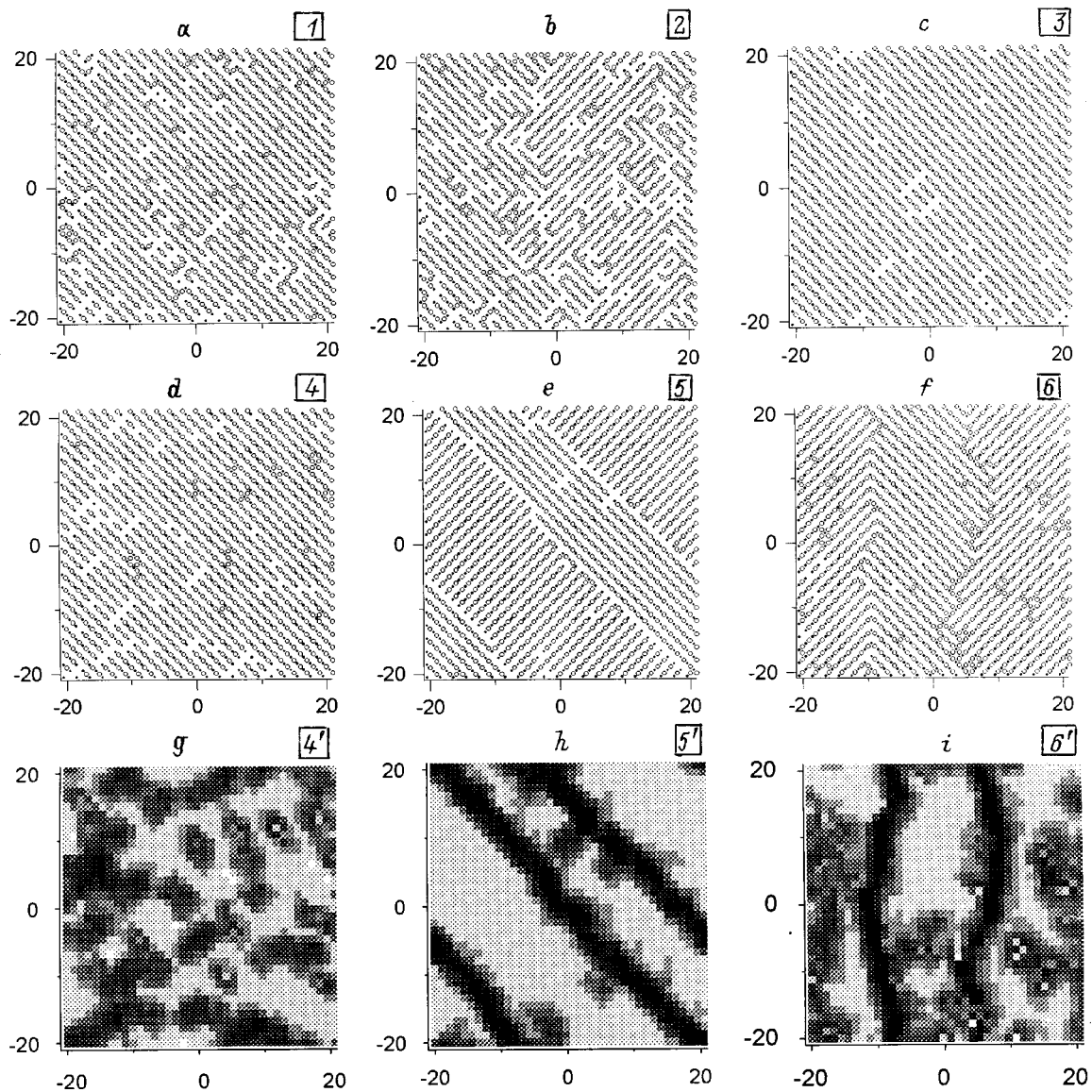


Рис. 3. Пространственное распределение атомов кислорода ($a-f$) в точках 1–6 (обозначенных цифрами в прямоугольниках, см. также рис. 2) и энергии барьеров активации (g, i) переходов атомов кислорода на ближайшие вакантные узлы решетки в точках 4–6. На каждом из семи уровней шкалы серых оттенков приращение энергии составляет $\Delta E_b = 0.15$ eV, начиная от нижнего (темного) уровня $E_b = 0.5$ eV.

2.3. Область низких T_0 (< 0.11 eV). Именно эта область температур соответствует температурам процедур роста и отжига реальных пленок $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$. При $P \neq 0$ ситуация качественно не отличается от таковой в области (2). Однако при $P = 0$ процесс спонтанной монодоменизации не успевает завершиться, возникают полидоменные распределения и соответствующие метастабильные дефекты в виде доменных границ. В зависимости от величины δ наблюдаются два типа доменных границ. На рис. 3, e и 3, f показаны распределения атомов кислорода для значений $\delta = 0.05$ и -0.05 соответственно. На рис. 3, e границы доменов перпендикулярны кислородным цепочкам в доменах одного

типа и параллельны цепочкам в доменах другого типа (90° -границы). На рис. 3, f границы доменов направлены под углом 45° к цепочкам (45° -границы). С доменными границами связана избыточная энергия и на них локализованы дефекты-флуктуаторы, имеющие минимальную величину энергии активации (рис. 3, h и i). Расчетная суммарная избыточная энергия составляет величину $\sim 60-160$ eV.

Таким образом, варьирование параметров модельного отжига (стартовой температуры, скорости охлаждения и деформации) позволяет воспроизвести условия технологических процессов роста и отжига эпитаксиальных пленок $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$. При этом оказывается, что

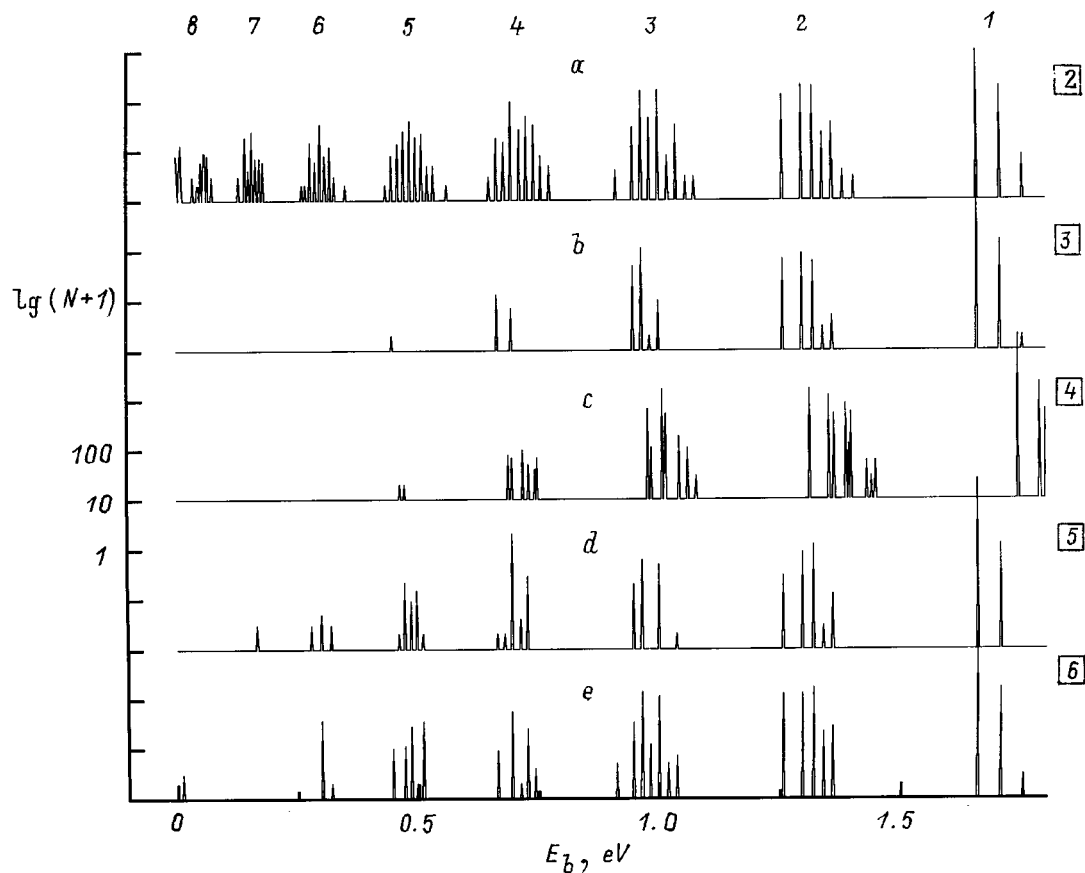


Рис. 4. Спектральное распределение атомов кислорода по величинам энергий барьера перехода атома на ближайший вакантный узел; нумерация распределений в прямоугольниках соответствует точкам, отмеченным на рис. 2. Пронумерованы также группы дефектов-флуктуаторов (см. далее).

наиболее близкими к реальным являются распределения кислорода, возникающие при низкотемпературной квазиизотермической быстрой релаксации системы атомов кислорода CuO -плоскости. В частности, типичными являются полидоменные распределения в виде полос с чередующейся ориентацией (см. рис. 3, *e* и *f*). Этот факт представляет особый интерес поскольку ранее такого рода распределения получались только при учете дальнедействующих составляющих межкислородного взаимодействия [9]. Исследование этих распределений может привести к выявлению микромеханизмов движения доменных границ.

3. Структура спектрального распределения дефектов-флуктуаторов

Для интерпретации особенностей структуры спектральных распределений ДФ, приведенных на рис. 4, т.е. установления их микроприроды, воспользуемся случаем наиболее хаотического распределения атомов (рис. 3, *b*), в котором реализовано максимальное количество раз-

личных вариантов возможного ближайшего окружения атома кислорода. Один из фрагментов распределения — 2 — показан на рис. 5. Видно, что один и тот же атом может входить в различные группы в зависимости от 4 вариантов перехода в соседний узел и соответствующих значений V_f , которые, согласно (7), дают различные величины барьеров E_b . Ясно, что наиболее вероятными будут переходы с меньшими барьерами и из 4 величин необходимо оставлять только минимальные значения. Это обстоятельство, в частности, учитывалось при построении пространственных распределений величины энергии барьера на рис. 3. При анализе изображенных на рис. 5 ситуаций, а также данных таблицы, где приведены величины соответствующих энергий взаимодействия, принципиально важным является малая величина отталкивающего взаимодействия V_3 , а также незначительное отличие модулей взаимодействий V_1 и V_2 . Во-первых, это позволяет пренебречь взаимодействиями типа V_3 и упростить классификацию, значительно сократив количество вариантов ближайшего окружения. Во-вторых, из таблицы видно, что существует следующая закономерность. Максимальную величину барьера

Типы переходов атомов кислорода (микромодель дефекта-флуктуатора) и энергии взаимодействия

№ группы ДФ	E_m, eV	V_i	V_f	$\Delta V = V_f - V_i$	Примеры переходов атомов (пространственные координаты $[x, y]$ начального и конечного состояний атома соответствуют рис. 5)
1	1.65	$2V_2$	$3V_1$	$3V_1 - V_2$	$[-4, 1] \rightarrow [-3, 1]$
2	1.30	$2V_2$	$2V_1$	$2V_1 - 2V_2$	$[-4, -4] \rightarrow [-4, 3]$
3	0.95	$2V_2 + V_1$	$3V_1$	$2V_1 - 2V_2$	$[-5, 2] \rightarrow [-5, 1]$
		V_2	$2V_1$	$2V_1 - V_2$	$[-1, -1] \rightarrow [-1, -2]$
4	0.67	$2V_2$	$2V_1 + V_2$	$2V_1 - V_2$	$[0, 2] \rightarrow [-1, 2]$
		$2V_2 + V_1$	$2V_1 + V_2$	$V_1 - V_2$	$[3, -3] \rightarrow [3, -4]$
5	0.48	$2V_2 + V_1$	$2V_1$	$V_1 - V_2$	$[-5, 0] \rightarrow [-4, 0]$
		≈ 0	V_1	V_1	$[-4, -2] \rightarrow [-3, -2]$
6	0.30	$2V_2 + 2V_1$	$2V_1 + V_2$	$-V_2$	$[4, -4] \rightarrow [3, -4]$
		≈ 0	≈ 0	≈ 0	$[-2, -2] \rightarrow [-2, -3]$
7	0.15	$2V_1 + V_2$	$2V_1 + V_2$	≈ 0	$[-2, 4] \rightarrow [-2, 5]$
		$2V_1$	$2V_1 + V_2$	$-V_1$	$[-6, 0] \rightarrow [-6, -1]$
8	< 0.1	$3V_1 + V_2$	$3V_1 + 2V_2$	V_2	$[-6, -5] \rightarrow [-7, -5]$
		$V_1 + V_2$	V_2	$-V_1$	$[-5, 0] \rightarrow [-5, -1]$
		$2V_1$	V_2	$V_2 - 2V_1$	$[4, -3] \rightarrow [5, -3]$

Примечание. Наличие знака "≈" означает, что при построении таблицы использовано приближение $V_3 = 0$. E_m — энергия барьера, усредненная по группе ДФ.

имеют атомы регулярной ортоэдрической фазы (атомы группы 1), которая состоит из пяти примерно одинаковых порций. Появление различных комбинаций нерегулярных атомов, варианты которых показаны на рис. 5 и приведены в таблице, способно дискретно уменьшать количество порций, что и объясняет наличие самой структуры, точнее первых пяти групп ДФ. Энергия группы 6 равна высоте барьера для изолированного атома V_0 и характеризует тип перехода, при котором

выполняется условие $(V_f - V_i) \approx 0$. Для групп 7 и 8 характерным является наличие неравенства $(V_b - V_i) < 0$; соответствующие примеры переходов приведены в таблице. Для более детального описания структуры групп с малой энергией барьера уже необходимо учитывать вклад во взаимодействие потенциалов V_3 . Однако в этом нет особой необходимости, поскольку определяющим фактором формирования спектра ДФ в области малых энергий являются межблочные границы, наличие которых характерно для пленок $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ [7] и которые не учитывались в данной работе.

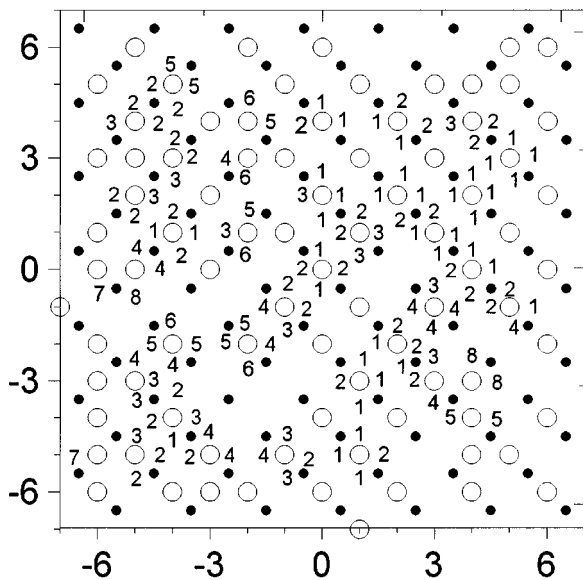


Рис. 5. Увеличенный фрагмент распределения атомов кислорода, приведенного на рис. 3, б. Цифры расположены на направлениях переходов атомов кислорода в соседний пустой узел и соответствуют номерам групп ДФ, приведенным на рис. 4 и в таблице.

4. Интерпретация шумовых измерений

Приведенные на рис. 4 спектральные распределения ДФ могут быть использованы в шумовых исследованиях путем их сопоставления с плотностью распределения ДФ по энергии $F(E)$, которую можно рассчитать непосредственно из результатов соответствующих шумовых измерений. Для этого необходимо воспользоваться соотношением

$$F(E) = \frac{f}{kT} \frac{S_V(E)}{V^2} = \frac{1}{kTN_e} \alpha(E), \quad (8)$$

где V и $S_V(E)$ — величина напряжения на образце и его шум соответственно; N_e — число свободных носителей в образце; $E = kT \ln(2\pi f\tau_d)$ — энергия барьера, которую может преодолеть атом за счет тепловой энергии за время ожидания $1/f$ при температуре образца T , шум которого измеряется на частоте f ; τ_d^{-1} — дебаевская частота ($\approx 10^{-13} \text{ s}^{-1}$). На рис. 6 показаны спектры ДФ, рассчитанные с использованием соотношения (8) и результатов работ [7,11] по измерениям шумов пленок

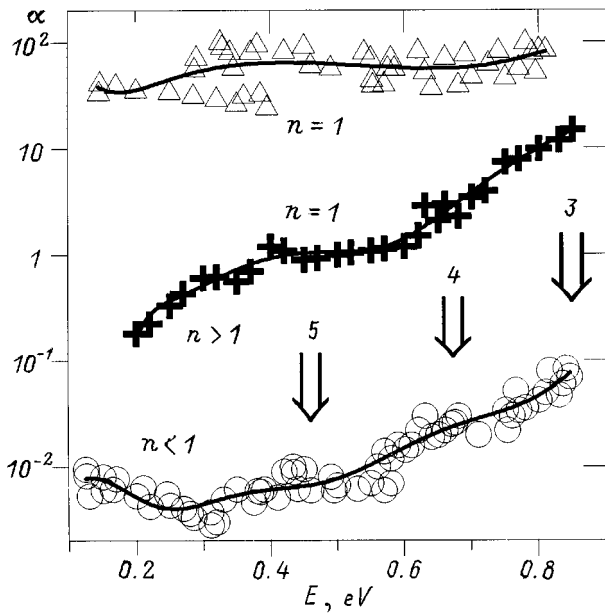


Рис. 6. Спектральные распределения дефектов-флуктуаторов пленок $YBa_2Cu_3O_7$ на ZrO_2/Si (треугольники), $NdGaO_3$ (кресты) и $BaSrTiO_3/MgO$ (кружки) подложках. Сплошные кривые получены полиномиальным сглаживанием экспериментальных результатов. Отмечены участки кривых, где зависимости величины шума от частоты аппроксимируются соответствующими кривыми $S_V \propto 1/f^n$. Стрелки и цифры указывают на положение соответствующих групп дефектов-флуктуаторов, пронумерованных на рис. 4.

$YBa_2Cu_3O_7$ на различных подложках и приведенные в виде безразмерной функции $\alpha(E)$. Анализ этих кривых и сопоставление с результатами модельных расчетов можно провести следующим образом.

1) Наибольшую величину $\alpha(E)$ имеют пленки на Si -подложках, которые, несмотря на наличие ZrO_2 подслоя, имеют по результатам рентгено-структурных измерений невысокое качество, в частности, большую величину флуктуаций внутренних микронапряжений $\langle \epsilon \rangle = \{ \langle (\delta c/c)^2 \rangle \}^{1/2} > 6 \cdot 10^{-3}$, где c — параметр решетки вдоль c -оси) и малый радиус малоугловых блоков ($\bar{r} \approx 0.04 \mu m$), из которых эта пленка состоит. Как следует из [7], для таких значений $\langle \epsilon \rangle$ дисперсия энергий ДФ одного и того же сорта в изучаемом образце может достигать величины $0.3-0.4$ eV. Как видно из рис. 4, этого достаточно для перекрытия различных групп ДФ и формирования плавного спектрального распределения, что и наблюдается в эксперименте. Пологий ход зависимости $\alpha(E)$ для этих пленок, во-первых, соответствует значительному интервалу $1/f$ -зависимости ($1/f^n$, $n = 1$) интенсивности шума от частоты (из (8) видно, что если $S_V(E) \sim 1/f$, то $\alpha(E) = const$), во-вторых, распределение ДФ по группам в них характерно для наиболее хаотичного распределения, приведенного на рис. 3, *b*, и соответствующего спектра на рис. 4, *a*. При этом роль низкоэнергетических обла-

стей вблизи двойниковых границ может играть значительная часть образца, расположенная вблизи границ блоков.

2) Наименьшую величину $\alpha(E)$ и высокое структурное качество ($\langle \epsilon \rangle < 1 \cdot 10^{-3}$, $\bar{r} \approx 0.2 \mu m$) имеют пленки на MgO подложках с $BaSrTiO_3$ подслоем. Для этих значений $\langle \epsilon \rangle$ дисперсия энергий ДФ меньше предыдущего случая и равна $0.1-0.2$ eV, чем и обусловлено появление особенностей спектра, отмеченных на рис. 5 стрелками. Более крутой ход зависимости $\alpha(E)$ в интервале энергий $0.3-0.9$ eV указывает на то, что при этих энергиях области вблизи границ блоков уже не вносят существенного вклада в спектральное распределение ДФ (за счет большего \bar{r}). Действительно, наиболее близкой к этой ситуации является монокристаллическое распределение, приведенное на рис. 4, *c*, в котором имеется значительная концентрация метастабильных точечных дефектов. При этом величина приращения количества ДФ от пятой к третьей группе (\sim в 10 раз) хорошо совпадает с величиной приращения $\alpha(E)$ между соответствующими экспериментальными особенностями на рис. 5. Заметим, что для анализа спектров ДФ с малыми энергиями (< 0.3 eV) необходима специальная модель расчета, учитывающая возможность гетерирования атомов кислорода на границах малоугловых блоков [17].

В целом, изложенные расчеты позволяют сформулировать следующие выводы.

1) В результате модельного отжига обнаружено три режима, соответствующих трем областям начальной температуры отжига; а) квазиравновесный режим отжига; в) промежуточный режим, при котором система попадает в метастабильное состояние при наличии одноосной деформации; в) неравновесный режим, при котором система оказывается в метастабильном состоянии как при наличии, так и в отсутствие деформации. Именно режим в) соответствует реальной процедуре получения эпитаксиальных пленок $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$.

2) В отсутствие деформации отжиг с низкой начальной температурой приводит к возникновению полидоменных распределений. Ориентация доменных границ зависит от концентрации кислорода: при локальном недостатке кислорода ($\delta > 0$) возникают 90° двойниковые границы, а при его избытке ($\delta < 0$) — 45° границы.

3) На доменных границах локализованы дефекты-флуктуаторы, имеющие самую низкую энергию активации.

4) Для высококачественных эпитаксиальных пленок $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ основными источниками шума являются метастабильные точечные дефекты с энергиями барьеров $0.3-0.9$ eV и дефекты вблизи границ блоков с энергией барьеров < 0.3 eV.

Работа поддерживается Российской программой "Сверхпроводимость" (проект № 98031).

Список литературы

- [1] H. Neff, J. Laukemper, I.A. Khrebtov, A.D. Tkachenko, E. Steinbeiss, W. Michalke, M. Burnus, T. Heidenblut, T. Nefle, B. Schwierzi. *Appl. Phys. Lett.* **66**, 2421 (1995).
- [2] F.N. Hooge, T.G.M. Kleinpenning, L.K.J. Vandamme. *Rep. Prog. Phys.* **44**, 479 (1981).
- [3] J. Pelz, J. Clarke. *Phys. Rev.* **B36**, 4479 (1987).
- [4] Sh. Kogan. *Electronic noise and fluctuations in solids*. University press, Cambridge (1996). 354 p.
- [5] Y.M. Galperin, V.G. Karpov, V.I. Kozub. *Adv. Phys.* **338**, 669 (1989).
- [6] А.И. Морозов, А.С. Сигов. *ФТТ* **34**, 457 (1992).
- [7] A.V. Bobyl, M.E. Gaevski, S.F. Karmanenko, R.N. Kutt, R.A. Suris, I.A. Khrebtov, A.D. Tkachenko, A.I. Morosov. *J. Appl. Phys.* **82**, 1274 (1997).
- [8] D. Fontaine, L.T. Wille, S.C. Moss. *Phys. Rev.* **B36**, 5709 (1987).
- [9] A.G. Khachaturn, J.W. Morris, jr. *Phys. Rev. Lett.* **61**, 215 (1988).
- [10] M. Goldman, C.P. Burmester, L.T. Wille, R. Gronsky. *Phys. Rev.* **B50**, 1337 (1994).
- [11] A.V. Bobyl, R.A. Suris, A.I. Dedoborez, A.I. Morosov, I.A. Khrebtov, V.N. Leonov, V.G. Malyrov, I.I. Shaganov. In: "Noise in Physical System and 1/f Fluctuations" / Ed. by C. Claeys, E. Simoen. World Scientific, Singapore (1997). P. 397.
- [12] D.J. Liu, T.L. Einstein, P.A. Sterne, L.T. Wille. *Phys. Rev.* **B52**, 9784 (1995).
- [13] V.I. Voronkova, Th. Wolf. *Physica* **C218**, 175 (1993).
- [14] A.A. Aligia, J. Garcer, J.P. Abriata. *Physica* **C221**, 109 (1994).
- [15] A.M. Bowler, E.S. Hood. *J. Chem. Phys.* **94**, 5162 (1991).
- [16] A.V. Bobyl, M.E. Gaevskii, S.G. Konnikov, D.V. Shantzev, V.A. Solov'ev, R.A. Suris. *Scanning microscopy* **10**, 679 (1996).
- [17] Д.В. Куликов, Р.А. Сурис, Ю.В. Трушин. *ФТТ* **36**, 2975 (1994).