

# $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$ , $\text{Fe}_{80}\text{Si}_6\text{B}_{14}$ 金属玻璃中近邻 原子间的相互作用\*

王文采 陈 玉

(北京大学物理系)

1986 年 9 月 18 日收到

## 提 要

用转靶 X 射线源及弯晶 EXAFS 谱仪测定了  $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$  及  $\text{Fe}_{80}\text{Si}_6\text{B}_{14}$  金属玻璃中铁的 X 射线  $K$  吸收谱。由 EXAFS 谱确定了两种金属玻璃的近邻结构参量。此外,通过测定 XANES 谱并与纯铁及其有关的化合物  $\text{Fe}_2\text{B}$ ,  $\text{FeB}$  中铁的 XANES 比较发现:吸收边能量、“白线”结构等均出现一些变化,表明两种金属玻璃的近邻原子 Fe-B, Fe-Si 以及 Fe-Fe 之间的相互作用比铁与硼所形成的稳定化合物中要强,这对于决定金属玻璃的短程序结构具有重要的作用。

## 一、引 言

$\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$  和  $\text{Fe}_{80}\text{Si}_6\text{B}_{14}$  是两种研究得较多的金属玻璃。利用不同散射方法的配合,对  $\alpha\text{-Fe}_{80}\text{B}_{20}$  的部分径向分布函数曾进行过测定<sup>[1]</sup>,从而对它的短程序结构有了较为深入的了解。关于过渡金属-类金属所形成的金属玻璃的结构也提出过不同的结构模型,Gaskell<sup>[2]</sup>的三棱柱模型表明,在此类金属玻璃中类金属原子的最近邻配位具有一定的特性。因此,深入研究这类材料中原子间的相互作用无疑是很重要的。

采用研究非晶态材料短程序结构较为有力的 EXAFS 谱方法<sup>[3]</sup>,本文利用弯晶 EXAFS 谱仪测定了  $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$  和  $\text{Fe}_{80}\text{Si}_6\text{B}_{14}$  两种金属玻璃中铁的 EXAFS 谱,同时,还测定了这两种材料及其有关的纯铁、 $\text{FeB}$ ,  $\text{Fe}_2\text{B}$  和  $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$  中铁的 XANES 谱(X-ray absorption near edge structure)。我们不仅确定了两种金属玻璃的近邻结构参数,而且,将 EXAFS 与 XANES 谱结合起来讨论了材料中近邻原子间的相互作用问题。

## 二、实验方法及主要的实验条件

X 射线源为 RU-200 型 12kW 转靶 X 射线发生器,由铜靶产生的连续谱。

Rigaku 弯晶 EXAFS 谱仪的罗兰(Rowland)聚焦圆半径为 320mm。本实验所用的单色器晶体为  $\text{Si}(220)$ ,探测器为闪烁计数管。射线强度的测定采取连续阶梯扫描方

\* 中国科学院科学基金资助的课题。

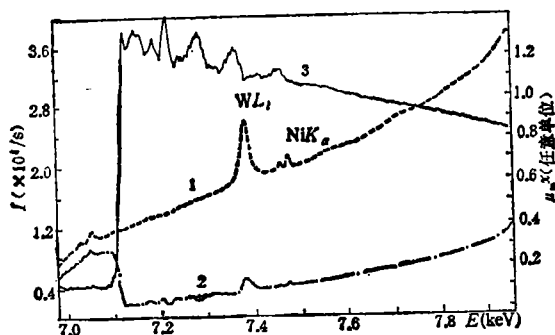


图 1

式,每点定时测量。吸收曲线用透射法测定。本装置对入射线的强度  $I_0$  及经试样吸收后的透射强度  $I$  采用在每个定点试样摆出或摆入光路的方式分别测定和记录。实验表明,这种方式可以有效地消除连续谱上一些发射线的干扰。图 1 示出了纯铁  $K$  吸收谱的测量结果。曲线 1, 2, 3 分别表示  $I_0$ ,  $I$  以及  $\mu_m x = \ln(I_0/I)$ 。由图 1 可见,  $I_0$  中的  $WL_1$ ,  $NiK_\alpha$  发射线,对测定吸收曲线  $\mu_m x$  上的精细结构都没有产生影响。

弯晶聚焦的作用,将大大提高分光单色化射线的强度。与同一射线源下采用平晶单色器分光相比,单色射线的强度可提高  $10-10^2$  倍。但是,由于探测器及其相应的电子线路线性的限制,本装置所测定的射线强度必须低于  $4 \times 10^4$  photon/s。这样才能消除连续谱上叠加的发射线的影响,获得无畸变的吸收精细结构谱。

实验所用的非晶样品为液相急冷法制备的约 10mm 宽,  $40 \mu\text{m}$  厚的非晶薄带。其 X 射线散射图样为宽的弥散峰形。因为透射法测定 EXAFS 时,为获得好的信噪比,该材料的最佳试样厚度应小于  $10 \mu\text{m}$ ,故原始条带用 900# 水砂纸加水仔细磨制减薄至大约  $10 \mu\text{m}$ ,得到待测试样。

其它试样: 纯铁为约  $6 \mu\text{m}$  厚的箔,  $\text{FeB}$  和  $\text{Fe}_2\text{B}$  是由电弧炉在氩气保护下熔炼的母合金,经 X 射线衍射检定,研磨成细粉均匀涂在薄的透明胶带膜上,多层叠起制得。 $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$  试样则是由研磨的细粉与硝化纤维的乙酸戊酯溶液制成的均匀胶体液,倒在玻璃平板上,待有机溶剂挥发后,获得所需的薄膜。

测定 EXAFS 谱所用的实验条件为: 铜靶, 20kV, 40mA。入射狭缝  $1^\circ$ , 接收狭缝  $0.5 \times 10\text{mm}$ 。射线强度记录利用脉冲高度分析器消除二次谐波的影响。扫描步距最小为  $\Delta E = 2\text{eV}$ , 每点测量时间 10s。由  $\text{CuK}_\alpha$  线宽的测定值  $\Delta E = 8.2\text{eV}$ , 得到 8keV 处的分辨率  $\Delta E/E \approx 1/1000$ 。因而,测定 Fe 的 EXAFS 谱的分辨率将优于此值。

为测定出高质量的 XANES 谱,需要尽可能高的分辨率。为此,一方面我们选用宽度小的接收狭缝,但导致接收的射线强度降低很多;另一方面,则更为精细地调节单色器中约翰逊弯晶的位置,以尽量达到最佳聚焦条件。选用人射狭缝为  $1^\circ$ , 接收狭缝为  $0.05 \times 10\text{mm}$  时,由  $\text{CuK}_\alpha$  线宽测量值  $\Delta E = 5.2\text{eV}$ , 得到 8keV 处的分辨率  $\Delta E/E \approx 6.5/10,000$ 。测定 XANES 谱的其它实验条件为: 铜靶, 20kV, 150mA。射线强度测量亦利用脉高分析器消除谐波的影响。扫描步距最小值  $\Delta E = 0.25\text{eV}$ , 每点测量时间为

40s.

### 三、数据处理及主要实验结果

#### 1. EXAFS 谱

实验测定的  $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$  和  $\text{Fe}_{80}\text{Si}_6\text{B}_{14}$  金属玻璃中铁的  $K$  吸收谱, 如图 2 所示。

由测量的吸收曲线扣除本底及单原子的吸收, 按通常的数据处理步骤求得 EXAFS 谱  $\chi(K)$ <sup>[4]</sup>。将  $\chi(K)$  进行傅里叶变换得到径向结构函数 RSF。图 3 即为  $\alpha\text{-Fe}_{80}\text{B}_{20}$  中铁作为中心原子的径向结构函数。通过图 3 上虚线所示的窗函数取出 RSF 第一峰对应的结构信息之后, 再作傅里叶逆变换, 即得到图 4 实线给出的振荡函数, 它表示  $\alpha\text{-Fe}_{80}\text{B}_{20}$  中铁的第一配位层原子所形成的 EXAFS 函数  $\chi_1(K)$  及理论拟合曲线(点线)。

最近邻结构参量是由  $\chi_1(K)$  采用曲线拟合法确定的<sup>[5]</sup>。即代入 Teo 和 Lee 计算的背散射振幅和散射相移的理论值<sup>[6]</sup>, 根据  $\chi(K)$  的理论公式<sup>[4]</sup>, 计算出  $\chi_1(K)$  的理论值, 将  $\chi_1(K)$  的理论计算值与实验获得的曲线作非线性最小二乘拟合, 从而求得第一配位层的结构参量。所有的数据处理都是利用我们编制的程序, 在 IMS-8000 微型计算机上完成的。

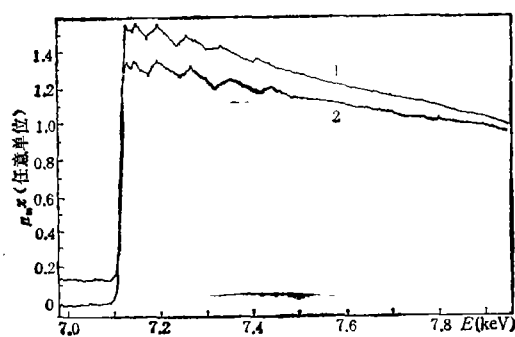


图 2

1 为  $\alpha\text{-Fe}_{80}\text{Si}_6\text{B}_{14}$ ; 2 为  $\alpha\text{-Fe}_{80}\text{B}_{20}$

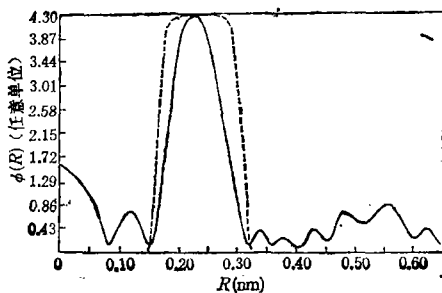


图 3

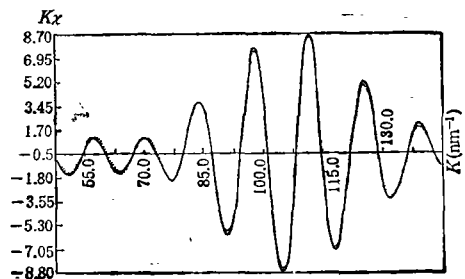


图 4

在相同的实验条件下,我们还测定了纯铁及  $\text{Fe}_2\text{B}$  中铁的 EXAFS 谱,并通过上述的数据处理求出了它们第一配位层的结构参量。应当指出,配位数是需要根据实验测定的 EXAFS 振幅加以确定的。但因受许多实验条件的影响,如仪器的分辨率、谐波、试样厚度等<sup>[7]</sup>,将导致测定的振幅偏小,因此,必须对实验测定的 EXAFS 振幅进行有关的修正,才能求得较准确的配位数。本工作采用纯铁作为“准标样”的方法,对造成测定振幅偏小的因素加以修正。我们认为,在测定各材料中铁的 EXAFS 谱时,只要保持实验条件不变,则引起它们各自 EXAFS 振幅衰减的因子即应相同。这样,根据纯铁的已知配位数及其测定的 EXAFS 振幅,可以求出本实验条件下的 EXAFS 振幅衰减因子  $D$ 。

对纯铁及  $\text{Fe}_2\text{B}$  的  $\chi_1(K)$  进行曲线拟合时,我们采用铁原子的第一配位层包含间距很小的双球层模型,才求得了好的拟合结果。其原因在于:对纯铁和  $\text{Fe}_2\text{B}$ , 求得的铁作为中心原子的 RSF 第一峰,峰形是非对称的。根据它们的晶体结构及已知的结构数据,计算出中心原子铁与其近邻铁原子各配位层的原子之间的平均原子间距,已列于表 1 (带\*者)。不难看出,  $\alpha\text{-Fe}$  中第 1, 2 两配位层,由于它们的球层半径十分接近,在 RSF 上无法分辨,因此,造成 RSF 第一峰的非对称峰形。  $\text{Fe}_2\text{B}$  中前四个配位层的情况也是这样。而且,  $\text{Fe}_2\text{B}$  中 1 与 2 以及 3 与 4 两配位层的间距差  $\Delta R$  更已小到计算误差范围之内。据此,在对  $\alpha\text{-Fe}$  及  $\text{Fe}_2\text{B}$  的  $\chi_1(K)$  作曲线拟合时,我们均采用了间距很小的双配位层进行拟合。拟合求得的近邻距与标准值非常接近。此外,根据  $\alpha\text{-Fe}$  的最近邻配位数求得在本实验条件下的 EXAFS 振幅衰减因子  $D$  为 3.887, 由此求得  $\text{Fe}_2\text{B}$  中铁的近邻配位数亦与标准值符合得很好(表 1)。说明采用“准标样法”对实验测定的 EXAFS 振幅进行修正的方法是合适的。

本工作获得的  $\alpha\text{-Fe}_{80}\text{B}_{20}$  RSF 的第一峰,如图 3 所示,亦是而非对称的。对此,我们采用了与 De Crescenzi 等人<sup>[8]</sup>不同的原子分布模型,即该峰对应于间距很小的铁原子双配位层进行拟合,取得了相当好的拟合结果(图 4)。少量 Si 原子替代 B 形成的  $\alpha\text{-Fe}_{80}\text{Si}_6\text{B}_{14}$  与  $\alpha\text{-Fe}_{80}\text{B}_{20}$  相比, Fe-Fe 近邻原子的结构参数基本上不变。

根据曲线拟合法确定的各材料中铁原子的近邻结构参量的结果,列于表 1。

表 1  $\alpha\text{-Fe}_{80}\text{B}_{20}$  等材料中铁原子的近邻结构参量

参数 \ 材料	$\alpha\text{-Fe}$	$\text{Fe}_2\text{B}$	$\alpha\text{-Fe}_{80}\text{B}_{20}$	$\alpha\text{-Fe}_{80}\text{Si}_6\text{B}_{14}$
$R_1$ (nm)	0.2446 0.24824*	0.2424 0.24085*, 0.24346*	0.2382	0.2387
$R_2$ (nm)	0.2825 0.28685*	0.2701 0.26853*, 0.27193*	0.2684	0.2664
$N_1$ (个)	/ 8*	2.8 1*, 2*	7.91	7.64
$N_2$ (个)	/ 6*	7.6 4*, 4*	3.6	3.7

$R$  为近邻距;  $N$  为配位数; 带\*者为标准值。

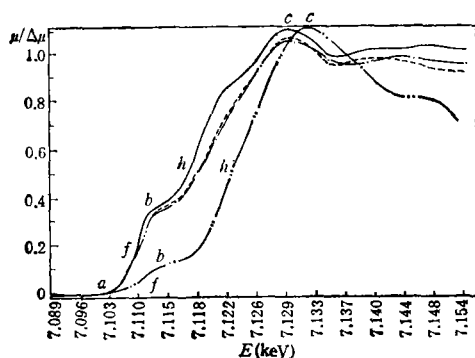


图 5  $\alpha\text{-Fe}$ (—),  $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ (---),  $\text{FeB}$ (-·-·-) 和  $\text{Fe}_2\text{B}$ (····) 中铁的 XANES 谱

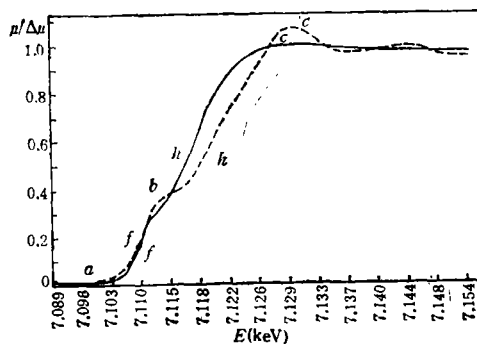


图 6  $\text{Fe}_2\text{B}$ (-·-·-),  $\alpha\text{-Fe}_{80}\text{B}_{20}$ (—) 和  $\alpha\text{-Fe}_{80}\text{Si}_6\text{B}_{14}$ (····) 中铁的 XANES 谱 (两种金属玻璃的谱几乎重叠, 无法区分)

## 2. XANES 谱

图 5 和图 6 是纯铁、金属玻璃等材料中铁的 XANES 谱。它们是由实验测定的  $\mu_{mx}$  扣除背底  $\mu_{ix}$  后, 求得  $\mu x = \mu_{mx} - \mu_{ix}$ , 再经归一化处理  $\mu x / \Delta \mu x$  获得的结果。其中  $\Delta \mu x$  为背底吸收  $\mu_{ix}$  和单原子吸收  $\mu_{ox}$  两条曲线与实验测定的吸收曲线  $\mu_{mx}$  在吸收边处两个交点之间  $\mu_{mx}$  的差值。因此, 由各曲线可以比较不同材料中铁的 K 吸收“白线”及 c 点吸收的强弱。由图可见, 在金属玻璃中, 吸收“白线”及 c 点的吸收均比  $\text{Fe}_2\text{B}$  的更弱。

表 2 列出了测定的各材料中铁的 XANES 谱上各特征点: b (吸收“白线”), c (吸收边处吸收系数的第一个极大点), f ( $\mu_b/2$ ) 以及 h ( $\mu_c/2$ ) 之间所对应的能量差值。表 2 中并给出了纯铁的 XANES 实验室测定目前认为是最准确的结果<sup>[9]</sup>, 对  $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$  也列出了同步辐射源的测定结果<sup>[10]</sup>, 以资比较。

从图 6 还可以看出, 各 XANES 谱上 f 点相应的能量变化很小, 而 h 点相应的能量,

表 2 一些材料中铁的 XANES 谱上特征点的能量差

材料	能量差 (eV)	$\Delta E_{b-f}$	$\Delta E_{c-h}$	$\Delta E_{c-f}$
$\alpha\text{-Fe}$		7.7	11.8	19.5
				19.8 <sup>[9]</sup>
$\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$		1.08	7.0	17.8
		10.6 <sup>[10]</sup>		17.0 <sup>[10]</sup>
FeB		8.5	10.9	19.4
$\text{Fe}_2\text{B}$		9.0	10.0	19.0
$\alpha\text{-Fe}_{80}\text{B}_{20}$		7.4	11.2	18.6
$\alpha\text{-Fe}_{80}\text{Si}_6\text{B}_{14}$		7.4	11.2	18.6

在两种金属玻璃中与  $\text{Fe}_2\text{B}$  比较则向低能侧移动。

#### 四、结果讨论

关于过渡金属及其化合物的 XANES 研究都已指出,  $K$  吸收边的“白线”产生于电子由  $1s \rightarrow 3d$  能带未填充能态的跃迁, 而主边  $c$  点的强吸收则来源于电子由  $1s \rightarrow 4p$  带的偶极跃迁<sup>[11,12]</sup>。

众所周知,  $1s \rightarrow 3d$  的跃迁是偶极跃迁的选择定则所禁止的, 四极跃迁的跃迁几率极小, 不可能产生出吸收“白线”。通过一些实验研究及理论计算业已证明<sup>[11,12]</sup>: 过渡金属的  $K$  吸收“白线”是由于固体中近邻原子之间的相互作用, 造成  $3d$  与  $4p$  能带的交叠, 致使电子  $1s \rightarrow 3d$  的偶极跃迁具有了一定的几率而产生的。在过渡元素形成的一些化合物中, 过渡元素的  $K$  吸收“白线”与纯金属相比将发生一些变化, 也与近邻原子的相互作用有关。例如, “白线”处吸收系数减小, 可以有两种不同的起因。其一是过渡元素原子的最近邻为六配位的正八面体。因为这种结构单元具有反演中心对称性,  $1s \rightarrow 3d$  的偶极跃迁是不可能的, 因而“白线”将消失。但是, 像  $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$  一类的氧化物, 氧离子构成正八面体, 而  $\text{Fe}^{3+}$  离子占据  $2/3$  八面体间隙的位置, 构成畸变的八面体  $\text{FeO}_6$  单元。这种结构单元没有反演中心, 因而  $\text{Fe}$  的  $3d$  与  $\text{O}$  的  $2p$  混杂, 使  $1s \rightarrow 3d$  的偶极跃迁成为可能, 但比起纯金属的情况要弱得多。另一种情况则是由于过渡元素与近邻原子的相互作用增强, 通过能带交叠造成  $3d$  带的填充能态增多, 空能态减少, 从而造成向  $3d$  带的吸收跃迁减弱, 吸收“白线”处的吸收系数减小。

由图 5 可以看到, 在  $\text{FeB}$  和  $\text{Fe}_2\text{B}$  中与  $\alpha\text{-Fe}$  相比,  $\text{Fe}$  的  $K$  吸收“白线”以及  $c$  点的吸收系数虽然变化不大, 但都有所降低。因为这两种化合物中铁原子的最近邻都不是畸变的八面体单元, 因此, “白线”处吸收系数的下降, 必将是化合物中铁的  $3d$  能带中空能态减少的反映。此与化合物中铁与周围配位原子之间的相互作用增强、不同能带间的交叠增大, 从而导致铁的  $3d$  带中已填充的能态增多密切相关。考察两种化合物中铁原子的近邻配位情况, 对此可以作出进一步的解释。例如,  $\text{Fe}_2\text{B}$  中,  $\text{Fe-Fe}$  原子之间的最近邻间距值比  $\alpha\text{-Fe}$  中要小(表 1),  $\text{Fe}$  与两个最近邻  $\text{B}$  原子的间距为  $0.190\text{nm}$ , 接近于它们的共价半径之和  $0.199\text{nm}$ 。这都将使  $\text{Fe}$  的  $3d$  与近邻  $\text{Fe}$  的  $4p$  以及  $\text{B}$  的  $2p$  能带之间的交叠增强。此外,  $c$  点吸收系数的减小, 相应于电子  $1s \rightarrow 4p$  带的跃迁减弱。也反映出由于  $\text{Fe-Fe}$  之间原子间距减小、相互作用增强, 致使  $\text{Fe}$  的  $4p$  带的填充增大、空能态减少。总之,  $\text{Fe}_2\text{B}$  及  $\text{FeB}$  中  $\text{Fe}$  的 XANES 与纯铁相比, 吸收“白线”处以及  $c$  点吸收系数的下降, 都是化合物中铁与近邻原子间相互作用增强的结果。

比较两种金属玻璃与  $\text{Fe}_2\text{B}$  中  $\text{Fe}$  的  $K$  吸收“白线”及  $c$  点的吸收系数, 可以看到更加明显的减小。而且, 对金属玻璃来说, 吸收“白线”附近吸收系数的变化亦较小, 使相应的“白线”结构更为平缓(图 4)。与上同理, 这些变化表明: 在两种金属玻璃中铁与近邻原子之间的相互作用进一步增强, 导致电子  $1s \rightarrow 3d$  以及  $1s \rightarrow 4p$  的吸收跃迁减弱, 因而相应的吸收系数下降。

联系到材料短程序结构的 EXAFS 研究, 再进一步分析一下上述的结果。如前所述,

两种金属玻璃与  $\text{Fe}_2\text{B}$  中铁原子的近邻结构都可以用其周围由间距很小的铁原子双配位层来表征,表明它们短程序结构的一定相似性。然而,它们的近邻结构参量又存在着相当的差异。根据表 1 的数据,金属玻璃与  $\text{Fe}_2\text{B}$  对比,第一配位层的双球层半径金属玻璃中均减小,但双配位球层各自对应的配位数,在金属玻璃中恰与  $\text{Fe}_2\text{B}$  中相反,半径稍小的球层相应的配位数大。这些结构差别正是金属玻璃中近邻铁原子之间相互作用增强的反映。另外,本实验虽未能确定金属玻璃中 Fe-B, Fe-Si 原子间的最近邻距及配位数,但根据散射法测定  $\alpha\text{-Fe}_{80}\text{B}_{20}$  的部分径向分布函数的研究结果:铁原子周围最近邻 2.2 个 B 原子的  $r_{\text{Fe-B}} = 0.213\text{nm}^{[1]}$ 。此亦小于铁与硼原子的原子半径之和  $0.224\text{nm}$ ,表明其间的相互作用亦较强。

测定 XANES 谱发现,两种金属玻璃与  $\text{Fe}_2\text{B}$  相比,吸收边的中点  $k$  向低能方向移动(图 6)。关于吸收边的移动是个十分复杂的问题,不过,这里所看到的移动,可能亦与近邻铁原子之间相互作用增强,使对应于电子  $1s \rightarrow 4p$  跃迁的  $c$  点吸收系数的下降有着密切的联系。此外,XANES 谱上能量高于  $c$  点的吸收系数起伏振荡的结构,与电子由  $1s \rightarrow$  较高能量  $np$  态的跃迁以及多重散射、形状共振等效应相关,分析更为复杂<sup>[13,14]</sup>。然而,这些效应对吸收近边精细结构的不同影响也可以反映出材料结构上的差异。如图 6 所示,金属玻璃的 XANES 上这些结构都很平缓。简言之,这反映出:虽然金属玻璃的结构具有短程序,但是,与晶体的情况不同,其中某类组元的每个原子周围近邻原子的排布是不完全相同的。另一方面,实验测定的吸收曲线则是对大量原子产生的效应统计平均的结果。因此,测定的吸收精细结构有些即变得平缓了。这也间接地显示出金属玻璃短程序结构的特点:近邻原子的排布并非严格一致,短程序只是由近邻原子间相互作用的特性所决定的一种分布的统计平均,这可以由某种小的结构单元来表征。

## 五、小 结

1.  $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$  和  $\text{Fe}_{80}\text{Si}_6\text{B}_{14}$  两种金属玻璃的短程序结构非常类似。以铁作为中心原子的径向结构函数 RSF 的第一峰是非对称的。其对应的一种可能的结构是铁原子周围存在着间距很小的铁原子双配位层。

2. 与稳定的  $\text{FeB}$ ,  $\text{Fe}_2\text{B}$  两种化合物相比, $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$  和  $\text{Fe}_{80}\text{Si}_6\text{B}_{14}$  两种金属玻璃中近邻原子 Fe-Fe, Fe-B (甚或 Fe-Si) 之间的相互作用更强。原子排布由于没有长程周期性的限制,因而短程序结构将主要由近邻原子间相互作用的特性所决定。因此,多元金属玻璃中包含共价型的类金属元素时,短程序结构更可能是由原子键合特性决定的小结构单元,而不仅仅是包含过渡金属原子无规密堆所形成的结构单元。

作者感谢冶金工业部北京钢铁研究总院提供非晶条带以及李广瀛同志制备了  $\text{FeB}$  和  $\text{Fe}_2\text{B}$  试样。

## 参 考 文 献

- [1] E. Nold *et al.*, *Z. Naturforsch.*, **36a**(1981), 1032.
- [2] P. H. Gaskell, *J. Non-Cryst. Solids*, **32**(1979), 207.
- [3] G. S. Cargill, *J. Non-Cryst. Solids*, **61 & 62**(1984), 261.

- [ 4 ] E. A. Stern et al., *Phys. Rev.*, **B11**(1975), 4836.
- [ 5 ] P. M. Eisenberger et al., *Nature*, **274**(1978), 30.
- [ 6 ] B. K. Teo and P. A. Lee, *J. Am. Chem. Soc.*, **101**(1979), 2815.
- [ 7 ] B. Lengeler et al., *Phys. Rev* **A21**(1980), 4507.
- [ 8 ] M. De Crescenzi et al., *Solid State Commun.*, **37**(1981), 921.
- [ 9 ] W. W. Beaman et al., *Phys. Rev.*, **56**(1939), 392.
- [ 10 ] L. A. Grunes, *Phys. Rev.*, **B27**(1983), 2111.
- [ 11 ] R. G. Shulman et al., *Proc. Nat. Acad. Sci. U. S. A.*, **73**(1976), 1384.
- [ 12 ] V. W. Hu et al., *Proc. Nat. Acad. Sci. U. S. A.*, **74**(1977), 3821.
- [ 13 ] J. L. Dehmer et al., *J. Chem. Phys.*, **65**(1976), 5327.
- [ 14 ] P. J. Durham et al., *Solid State Commun.*, **38**(1981), 159.

## THE INTERACTION BETWEEN NEAR NEIGHBORING ATOMS IN METGLAS $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$ AND $\text{Fe}_{80}\text{Si}_6\text{B}_{14}$

WANG WEN-CAI CHEN YU

(Department of Physics, Peking University)

### ABSTRACT

The X-ray K absorption spectra of iron in metglas  $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$  and  $\text{Fe}_{80}\text{Si}_6\text{B}_{14}$  are measured, using the rotating anode X-ray generator and the EXAFS spectrometer with bend crystal. The structural parameters of near neighbor of these metglasses are determined by EXAFS. Besides, their XANES are also measured. While comparing the XANES of iron in metglasses with that in  $\alpha$ -Fe, FeB and  $\text{Fe}_2\text{B}$ , we discovered some changes on the energies of their absorption edge and the characters of "white line". These show that there is stronger interaction between near neighboring atoms Fe-B, Fe-Si and Fe-Fe in metglasses than that in the stable compounds of iron and boron. And this has an important effect on the shortrange order structure of these metglasses.