

研究简报

非晶态稀土合金 Tb-Co 的电子结构

林 彰 达

(中国科学院物理研究所)

A. S. Andreenko

(Department of Physics, Moscow University)

1986 年 7 月 17 日收到

提 要

用 X 射线光电子能谱研究了非晶态稀土合金 Tb_xCo_{1-x} 的电子结构。比较晶态和非晶态: 他们的导带、4f 带以及芯态谱没有明显差别。说明 Tb-Co 之间电荷的转移对两种状态没有什么区别, 因而两种状态下磁性的差别不能解释为电荷转移量的不同。

一、引 言

近年来很多人对稀土元素-过渡金属的非晶态合金的物理性质进行研究, 但是对它们的电子结构的研究还不多。然而对非晶态合金电子结构的研究非常重要, 因为电子结构直接决定材料的磁性、电性和其它一些性质。一些作者把稀土合金材料中晶态与非晶态磁性(如居里温度和 3d 金属离子的磁矩等)的差别解释为它们电子结构的不同^[1,2], 这种解释有待于直接测量电子结构的实验来证实。

二、实 验

非晶态 Tb-Co 合金薄膜是用离子溅射方法得到, 溅射是在光谱纯的氩气中进行。靶是镶嵌在用液氮冷却的铝的衬底上。化学分析给出合金的成分为: $Tb_{0.1}Co_{0.9}$, $Tb_{0.5}Co_{0.5}$ 及 $Tb_{0.7}Co_{0.3}$ 。用火焰光谱法测气态的掺杂物, 得出: 在我们的合金中实际上完全不出现碳, 氧的含量也不超过 0.01%。X 射线分析和电子衍射都表明, 在室温下所研究的合金是非晶态的。薄膜的厚度为 6.3—7.4 μm 。X 射线光电子能谱(以下简称 XPS 谱)测量在 300—900K 温度范围内、在 ESCA-LAB-5 设备上进行。X 射线源由镁靶产生。仪器的能量分辨率优于 0.8eV。清洁表面的获得是靠氩离子轰击和随后的热处理。如此循环多次, 直至获得清洁表面。

三、结果与讨论

图 1 给出晶态和非晶态 $Tb_{0.7}Co_{0.3}$ 的 $Co2p_{3/2,1/2}$ 的 XPS 谱。从图 1 中可以看出, 无论

从峰的形状还是从峰的位置, 这些谱线都是相同的(强度的微小差异只与测试条件有关). Tb 的 $3d_{5/2}$ 峰也有类似情况. 如果非晶态与晶态 Tb-Co 合金中 Tb 与 Co 之间有电荷重新分布(即有电子的交换), 那么价电子的重新分布势必影响对芯态电子的屏蔽作用, 从而使芯态能级的电子发射峰发生移动, 或者峰形发生变化. 但是从图 1 结果看, 在仪器分辨率的范围内, 没有可察觉的位移和峰形改变. 这说明, 在晶化过程中 Tb 与 Co 之间电荷没有重新分布.

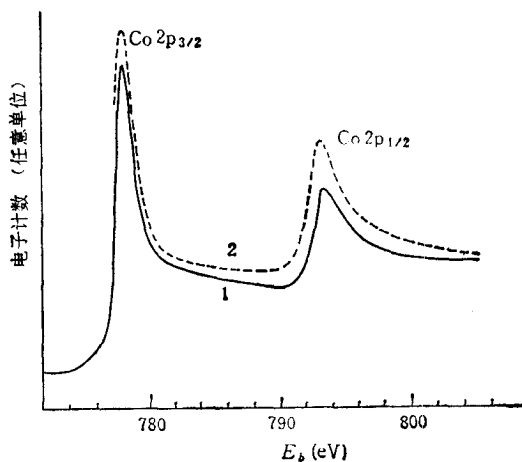


图 1

1——晶态; 2——非晶态

为了说明这一点, 我们还可以看价带谱. 图 2 给出不同温度下非晶态 $Tb_{0.7}Co_{0.3}$ 的价带谱. 不同温度下的差热分析和电子衍射测量表明: 该合金的晶化温度在 800K 左右, 但是在 650K 就已经开始部分晶化, 因此图 2 中的曲线 2 相应于部

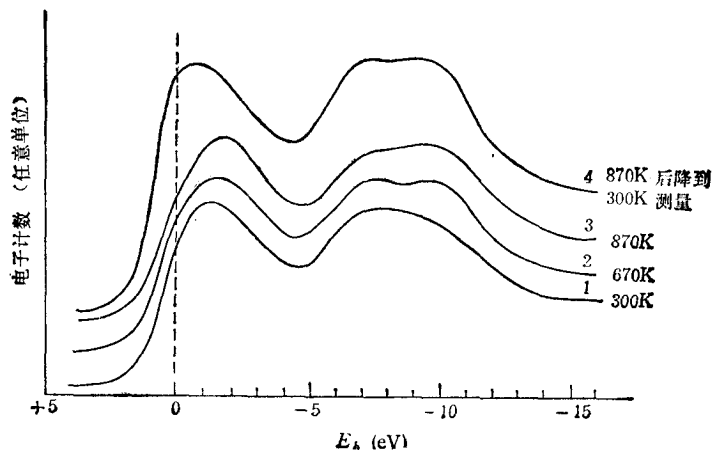


图 2

分晶化的合金, 而曲线 3 和 4 则是相应于全部晶化的合金. 我们的结果表明: 在非晶态合金和由于升温而晶化的合金中, 在这两种状态下, 它们的导带和 $4f$ 带的电子发射谱的峰形和位置的变化都是极微小的(见图 2 中的曲线 1 和 4), 相应于 Tb $4f$ 能带的峰在加热后加宽了, 但是峰的位置没有移动.

随着温度的升高, 费密能级附近的 XPS 谱线的峰下降并向低能端移动(图 2 中曲线 1, 2, 3), 这表明费密能级处的电子态密度下降. 但是, 当样品晶化后冷却到室温时测量 E_F 处的电子发射强度, 发现它与晶化前的一样(图 2 中的曲线 1 和 4). 这现象可解释为: 随着温度的上升, 费密能级附近电子分布展宽了, 但是晶化前后费密能级附近态密度却没有变化.

大多数稀土金属-Co 的非晶态合金的居里温度比相应晶态的要高^[1-3]。居里温度的

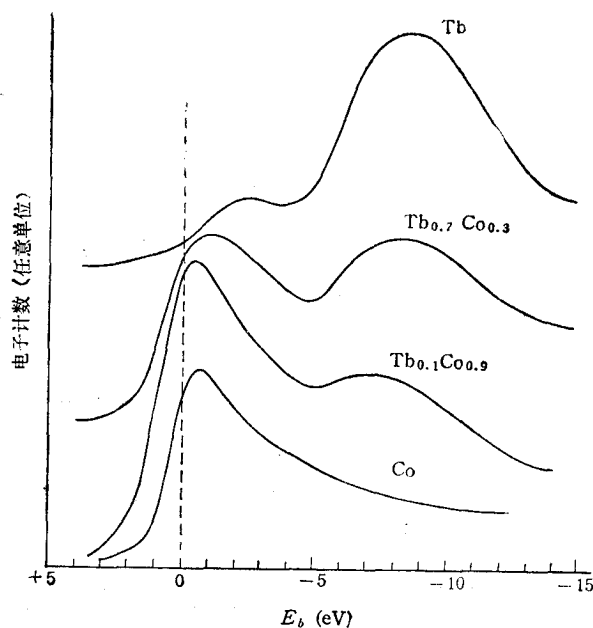


图 3

提高通常解释为：非晶态合金中电荷由稀土离子向 Co 离子的转移比晶态中的少。然而我们测得的芯态谱和价带谱说明：在非晶态和晶态这两种状态下，Tb-Co 之间的电荷分布没有发生什么重大的变化；在晶化过程中并没有电荷从 Tb 向 Co 转移。所以，Co 离子磁矩的变化以及居里点的变化不能用电荷的转移来解释，而应该另找原因。

为了进一步分析非晶态 Tb-Co 合金的价带谱，我们测了 Tb_{0.1}Co_{0.9} 和 Tb_{0.7}Co_{0.3} 的价带谱，并且为便于分析，又同时测了化学纯 Co 和 Tb 多晶的相应谱(图 3)。从谱上可以看出，多晶 Co 的谱在费密能级 E_F 附近有极大值，它相应于由 s 电子

和 d 电子构成的导带谱，并以 d 电子的贡献为主；多晶 Tb 的谱在 E_F 附近有不大的峰，但是在 E_F 以下 8.8eV 附近观察到由 4f 能级决定的大的特征峰。在 Tb_xCo_{1-x} 合金中，Tb 和 Co 的特征峰都出现，只是随着 Tb 含量的增加，相应于 Co 导带的峰减弱了，峰形有点展宽，且稍向低能端移动。另一方面，Tb 的 4f 带的强度随着 Tb 含量的增加而增加，峰位稍稍移向高能端。因此，从图 3 可以看出，Tb-Co 合金的价带谱明显地保留着原来金属 Tb 和金属 Co 的价带谱的特征(峰位和峰形都无大变化)。虽然谱的强度有变化，但是它近似地看成是这两种金属价带谱按其含量的多少的线性叠加。这种情况说明，Tb 和 Co 在形成合金时(包括晶态的和非晶态的)，金属 Tb 和 Co 的价电子只有弱的相互作用。它们的分布以及它们对原子核的屏蔽作用，都未发生明显变化(芯态能级不变，价带谱也没有明显变化)，正是由于相互作用不强，所以可以理解，在非晶态向晶态转变中 Tb-Co 之间不会有大量电子转移。

谢侃同志在 XPS 测量中给了我们很大帮助，在此谨致谢意。

参 考 文 献

- [1] L. J. Tao *et al.*, *Solid State Commun.*, **13**(1973), 1491.
- [2] P. Oelhafen *et al.*, *Solid State Commun.*, **39**(1979), 641.
- [3] A. E. Clark, *Handbook on the Phys. and Chem. of Rare-Earth*, N. Y., (1978), p. 231—258.

A STUDY OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF THE AMORPHOUS RARE EARTH ALLOY Tb-Co

LIN ZHANG-DA

(Institute of Physics, Academia Sinica)

A. S. ANDREENKO

(Department of Physics, Moscow University)

ABSTRACT

XPS was used to study the electronic structure of the amorphous rare earth alloy $\text{Tb}_x\text{Co}_{1-x}$. We found that there is no significant difference in the band structure of the alloy and the core level spectra of Co and Tb between the amorphous and crystalline states. This implies that the charge transfer between Tb and Co is the same in the two states. The difference in magnetic properties for these states thus can not be explained by the different amount of charge transfer in them.