

# Yb<sub>2.75</sub>C<sub>60</sub> 同步辐射光电子能谱<sup>\*</sup>

何少龙<sup>1)</sup> 李宏年<sup>1)†</sup> 王晓雄<sup>1)</sup> 李海洋<sup>1)</sup> I. Kurash<sup>2)</sup> 钱海杰<sup>2)</sup>  
苏润<sup>2)</sup> M. I. Abbas<sup>2)</sup> 钟俊<sup>2)</sup> 洪才浩<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup> 浙江大学物理系 杭州 310027)

<sup>2)</sup> 中国科学院高能物理研究所同步辐射实验室 北京 100039)

(2004 年 7 月 5 日收到)

在超高真空系统中制备了 Yb<sub>2.75</sub>C<sub>60</sub> 薄膜,对样品进行了同步辐射光电子能谱研究.在费米能级以下约 5 eV 范围内的谱数据由 Yb<sub>2.75</sub>C<sub>60</sub> 价带(C<sub>60</sub> 分子轨道 LUMO, HOMO 和 HOMO-1 导出的能带)和芯态(Yb 4f<sub>7/2</sub>, 4f<sub>5/2</sub>)能级构成.用紫外能区不同能量的入射光子,用 C 2p 和 Yb 4f 光电离截面随光子能量的不同变化规律,通过定量拟合,得到了对谱线有贡献的上述各个组分的峰位、峰宽和强度.结果表明,光子能量高于约 30.0 eV 时,芯态 4f 的贡献使得实验结果远远偏离价带的本征态密度分布.因此,研究 Yb<sub>2.75</sub>C<sub>60</sub> 价态时,应使用能量低于 30.0 eV 的光子.对实验和拟合结果分析,发现了类似纯 C<sub>60</sub> 的光电离截面振荡现象.振荡幅度相对于纯 C<sub>60</sub> 较小,反映了化合物中 C<sub>60</sub> 分子的化学环境对光电离截面振荡现象起着不可忽略的作用.

关键词: Yb<sub>2.75</sub>C<sub>60</sub>, 同步辐射光电子能谱, 光电离截面振荡

PACC: 7360T, 7120F

## 1. 引 言

由于在相对较高的温度发生超导转变,碱金属和碱土金属掺杂的 C<sub>60</sub> 固体在过去十多年里吸引了广泛的关注.超导转变也在稀土掺杂 C<sub>60</sub> 固体(以下称稀土富勒烯)中被发现<sup>[1,2]</sup>.更具吸引力的是,巨磁阻和铁磁也于最近在稀土富勒烯中被发现<sup>[3-5]</sup>.光电子能谱(PES)技术对于促进该领域的发展有着重要意义. Ohno 等人<sup>[6]</sup>最早用 x 射线光电子能谱(XPS)发现稀土元素 Yb 可与 C<sub>60</sub> 形成稳定化合物. Xia 等人<sup>[7]</sup>用紫外光电子能谱(UPS)初步研究了 Yb/C<sub>60</sub> 界面电子态. Yoshikawa 等人<sup>[8]</sup>最早用 UPS 探索了 Eu/C<sub>60</sub> 体系存在铁磁转变的可能性.我们最近将 UPS 应用于 C<sub>60</sub>/Sm 界面电子态研究,得到了 C<sub>60</sub> 价带电子态衍变的详细过程<sup>[9]</sup>.

对于 Yb 掺杂的 C<sub>60</sub>, Yb<sub>2.75</sub>C<sub>60</sub> 是迄今为止化学组分已被 x 射线衍射(XRD)确定的唯一一种相(其他相可能存在,但化学组分还未确定或未被同行认可),并被部分研究者认为是超导相<sup>[1,10]</sup>.它也是

PES 研究中唯一报道的已有准确在位表征(XPS 方法)的稀土富勒烯<sup>[6,11,12]</sup>.文献[11]报道了 Yb<sub>2.75</sub>C<sub>60</sub> 的常规光源 UPS 结果,得到了费米能级附近的电子态密度分布.我们在研究工作中发现,由于稀土 4f 芯态电子结合能靠近费米能级,而且具有较大的光电离截面,准确提取 Yb<sub>2.75</sub>C<sub>60</sub> 价带电子态密度分布有一定困难.文献[11]提出同步辐射光电子能谱(SR-PES)技术可望解决这一困难.本文在文献[11]基础上,采用 SR-PES 技术,定量分析 Yb 4f 电子对实验谱线的贡献,从而得到精确的价带电子态密度分布.研究过程中还发现 C<sub>60</sub> 最高占据态分子轨道(HOMO)和 HOMO-1 导出的能带的光电离截面仍存在振荡现象.振荡的周期与纯 C<sub>60</sub> 固体一样,但振幅明显减弱.

## 2. 实 验

样品制备和光电子能谱测量在北京同步辐射实验室光电子能谱站进行.超高真空系统的本底真空度约为  $2 \times 10^{-8}$  Pa. 能量为 18.0—45.0 eV 的光子引

\* 国家自然科学基金(批准号:10074053 和 10374080)及北京正负电子对撞机同步辐射实验室资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: phylihn@public.zju.edu.cn

自 4B9B 束线. 谱仪总分辨率为  $0.15\text{--}0.3\text{ eV}$ , 与入射的光子能量有关(能量越低,分辨率越高). 入射光线与样品法线的夹角约为  $55^\circ$ , 用角分辨半球能量分析器探测法向出射的光电子. 结合能由  $\text{Ag}(111)$  单晶的费米边标定.

实验所用衬底为  $\text{Ag}(111)$  单晶. 经数次氩离子轰击及退火后, XPS (光子能量为  $650.0\text{ eV}$ ) 几乎观测不到衬底的  $\text{C} 1s$  和  $\text{O} 1s$  的信号, 低能电子衍射 (LEED) 可观测到衬底明锐的  $(1 \times 1)$  斑点. 因此, 衬底清洁有序. 实验所用  $\text{C}_{60}$  为气相生长<sup>[13]</sup>的  $\text{C}_{60}$  单晶小颗粒.  $\text{Yb}$  从北京有色金属研究总院购买, 纯度为  $99.99\%$ . 分别装有  $\text{C}_{60}$  和  $\text{Yb}$  的两个 Ta 舟相距衬底表面约  $11\text{ cm}$ . 蒸发源在使用前均经过长时间除气.

首先在  $\text{Ag}(111)$  衬底上沉积厚度约为  $20\text{ nm}$  的  $\text{C}_{60}$  薄膜(厚度用石英晶振片测量).  $\text{Yb}$  的掺杂过程一步一步进行. 每次掺杂后都用 XPS 监测组分. 在暴露于  $\text{Yb}$  蒸气的过程中, 样品温度保持在  $400 \pm 5\text{ K}$ , 以使  $\text{Yb}$  易于向  $\text{C}_{60}$  薄膜内扩散. 控制装有  $\text{Yb}$  的 Ta 舟的电流(电流的具体数值是多次试验的结果, 在本实验中电流为  $9.0\text{ A}$ ), 以及蒸发时间(每次蒸发时间为  $15$  或  $20\text{ min}$ ) 在经过约  $10$  次的沉积、扩散、XPS 测量周期后, 观测到  $\text{C} 1s$  芯态峰位向低结合能方向位移达到  $0.5\text{ eV}$ , 表明已经制得相均匀的  $\text{Yb}_{2.75}\text{C}_{60}$  薄膜样品<sup>[6, 12]</sup>. 然后, 使用不同能量的紫外光进行 SR-PES 测量, 研究样品价带的电子态密度分布.

### 3. 实验结果与讨论

在不同能量光子入射的条件下得到的  $\text{Yb}_{2.75}\text{C}_{60}$  的 UPS 结果如图 1 所示. 实验共采用 6 种不同光子能量, 分别标在图中对应的谱线旁. 从图 1 可以看出, 光子能量为  $21.0\text{ eV}$  的谱图与采用常规光源 ( $\text{He I } 21.2\text{ eV}$ ) 所得结果<sup>[11]</sup> 非常接近. 图 1 中用不同光子能量得到的谱线都显示  $\text{Yb}_{2.75}\text{C}_{60}$  具有半导体电子特性(即费米能级处没有电子分布), 进一步验证了文献<sup>[11]</sup> 的结果. 引人注意的是, 图 1 中谱形随光子能量变化很大. 我们重复测量了图中的谱线, 通过改变光子能量都能得到与图 1 相同的结果. 因此, 排除了样品本身变化(比如氧化)导致峰形变化的可能性. 这是我们预期的实验结果, 即光子能量不同,  $\text{C} 2p$  电子( $\text{C}_{60}$  价带是  $\text{C} 2p$  属性)与  $\text{Yb} 4f$  电子光电离截面的相对大小也不一样<sup>[14]</sup>, 从而导致实验谱线峰形的变化. 本文的主要目的就是定量确定  $\text{Yb}_{2.75}\text{C}_{60}$

的价带和  $4f$  芯态对实验谱线的贡献. 在图 1 的结合能范围内, 价带包括由  $\text{C}_{60}$  最低未占据态分子轨道 (LUMO) HOMO 和 HOMO-1 导出的能带; 芯态为  $\text{Yb} 4f_{7/2}$  和  $4f_{5/2}$ . 按结合能从低到高的顺序, 它们分别是 LUMO  $4f_{7/2}$ , HOMO  $4f_{5/2}$  和 HOMO-1<sup>[6, 12]</sup>.

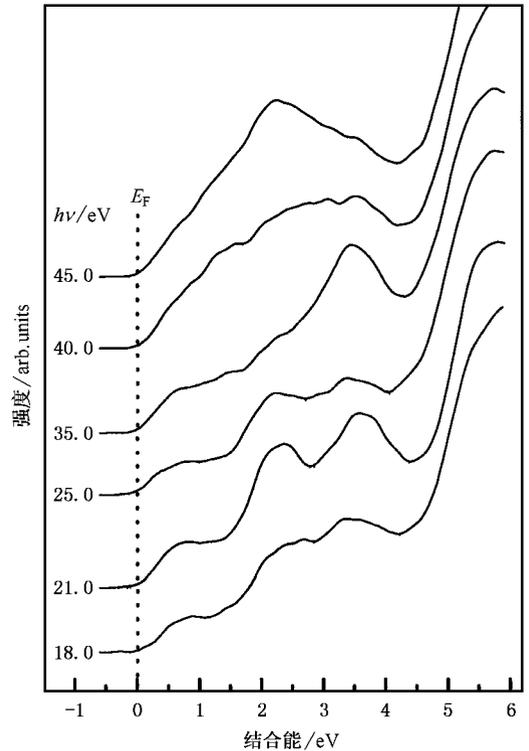


图 1  $\text{Yb}_{2.75}\text{C}_{60}$  薄膜的变光子能量 SR-PES 图

在对图 1 中谱线进行详细分析之前, 首先扣除 HOMO-2 的贡献. HOMO-2 即图 1 中结合能约大于  $5.0\text{ eV}$  的部分, 这一能区的实验数据也包括一些二次电子背底. 扣除的方法是用指数函数或高斯函数外推<sup>[15]</sup>, 图 2 中以入射光子能量为  $21.0\text{ eV}$  的谱线为例说明之, 更详细的说明见文献<sup>[15]</sup>.

除 LUMO 外, 其他组分用 Gauss 型曲线进行拟合.  $\text{C}_{60}$  的 LUMO 能带具有强关联性质, 对于  $\text{Yb}_{2.75}\text{C}_{60}$ , LUMO 与  $\text{Yb} 6s$  态可能还存在一定的共价作用<sup>[10]</sup>, 这些是使得 LUMO 峰形显著偏离 Gauss 型曲线的原因. 我们将由实验曲线减去其他分量(通过拟合得到)后直接得到 LUMO 的谱峰.

图 3 以入射光子能量为  $21.0$  和  $35.0\text{ eV}$  两条谱线(已扣除 HOMO-2 和二次电子背底)为例, 说明用最小二乘法拟合各分量的过程. 如上所述, LUMO 峰不能用 Gauss 型曲线表示, 因此拟合过程只对结合能大于  $\text{Yb} 4f_{7/2}$  峰位的部分进行. 拟合过程所用的可

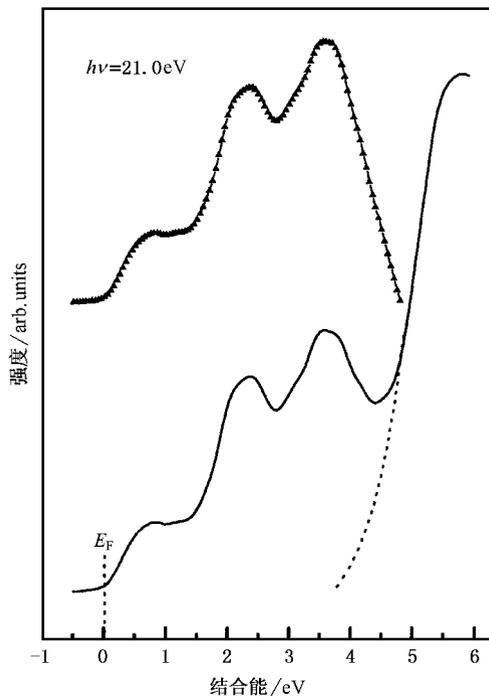


图2 SR-PES谱线扣除HOMO-2和二次电子背底示意图.实线为实验数据,虚线为指数型曲线,三角形连线为两者相减后得到的扣除HOMO-2和二次电子背底后的谱线

调参数包括各组分的峰位、半高宽和峰高.考虑到Yb  $4f_{7/2}$  和  $4f_{5/2}$  轨道上的电子数分别为8和6,在拟合过程中将它们峰高之比固定为4/3,并设两者的半高宽相同,以减少可调参数的数目.除此之外,又对各组分的峰位加了一些限制.原则上,同一组分的峰位在用不同光子能量测得的谱线中是相同的,只允许峰位有 $\pm 0.05$  eV以内的可调范围,以补偿实验误差.HOMO和HOMO-1的拟合初始值很容易从图1中下面三条谱线中读出.Yb 4f的初始值则参考纯Yb金属的UPS结果<sup>[11]</sup>,以及Yb<sub>2.75</sub>C<sub>60</sub>的XPS结果<sup>[6,12]</sup>.所以,严格地讲,峰位是实验值而不是可调参数.拟合得到的使拟合曲线与实验数据符合得最好的结合能数据对 $4f_{7/2}$ ,HOMO, $4f_{5/2}$ 和HOMO-1分别为1.40( $\pm 0.04$ ) 2.13( $\pm 0.02$ ) 2.65( $\pm 0.05$ )和3.4( $\pm 0.03$ ) eV.括号内的数据表示不同光子能量下峰位拟合结果之间的偏差,它们在实验误差范围内.严格意义上的可调参数是半高宽和峰高.半高宽的拟合初始值参考了金属Yb的数值<sup>[11]</sup>( $4f_{7/2}$ 和 $4f_{5/2}$ )和Rb<sub>3</sub>C<sub>60</sub>的结果<sup>[15]</sup>(HOMO和HOMO-1).最后的拟合结果显示,光子能量较高的谱线中各分量的半高宽略大于光子能量较低的谱线中的相应分量.以HOMO

为例,在光子能量为21.0、35.0和45.0 eV三条谱线中的半高宽分别为0.54、0.56和0.62 eV.这是因为谱仪的分辨率随入射光子能量的增大而变差(即谱线增宽).

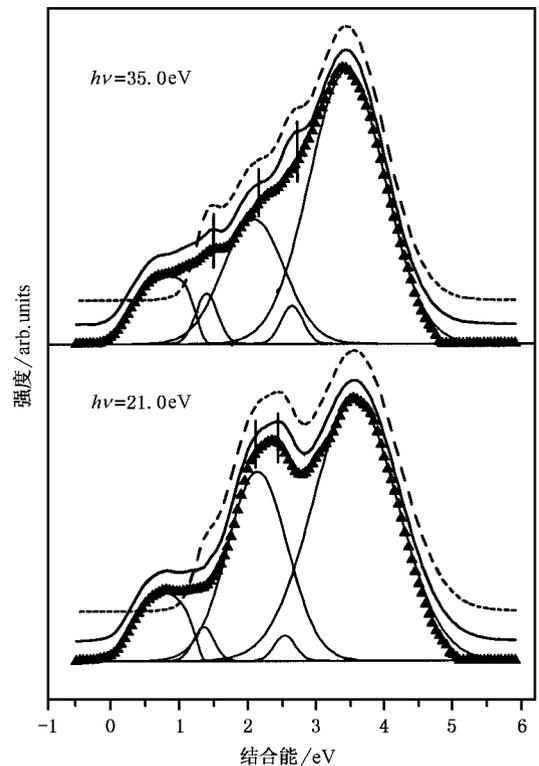


图3 谱线的峰形拟合(仅以光子能量为21.0和35.0 eV两条谱线为例).实线表示5个小峰在图中按峰位结合能从小到大依次为LUMO, Yb  $4f_{7/2}$ , HOMO, Yb  $4f_{5/2}$ 和HOMO-1.除LUMO外,其余4个峰的峰型均为高斯型曲线.这4个峰叠加成虚线所示曲线,用实验数据(三角形连线,已扣除HOMO-2和二次电子背底)减去虚线对应的曲线,即得到LUMO分量

图3中虚线表示拟合结果,它是 $4f_{7/2}$ ,HOMO, $4f_{5/2}$ 和HOMO-1各组分的高斯峰拟合结果(图中实线)之和.用实验数据(图中三角形连线,已扣除HOMO-2和二次电子背底)减去虚线,即得到LUMO分量.需要指出,LUMO和Yb  $4f_{7/2}$ 在UPS线中有重叠部分.如果两者重叠较多,则拟合过程将存在较大误差.然而,碱金属及碱土金属富勒烯的大量UPS结果已表明LUMO峰宽通常在1.3 eV左右,而Yb<sub>2.75</sub>C<sub>60</sub>的XPS结果表明Yb  $4f_{7/2}$ 结合能大于1.3 eV<sup>[6,12]</sup>,即重叠部分只发生在结合能低于 $4f_{7/2}$ 峰位的部分.本文是对谱线中结合能大于 $4f_{7/2}$ 峰位(约为1.4 eV)的部分进行拟合,LUMO和 $4f_{7/2}$ 的重叠对拟合精度几乎没有影响.在此基础上得到的LUMO也

较可靠.如果将所得 LUMO 再和虚线相加,就得到完整的拟合曲线(图中介于实验谱线和虚线之间的曲线).

图 3 中实验数据的某些精细结构(图中用竖线标出)也能被拟合出.较好的拟合结果使我们在下面能够有把握地讨论每一分量的强度(即谱峰面积,由峰高和半高宽决定).

图 4 给出各组分拟合曲线的面积相对于整个实验谱线(图 3 中三角形连线)面积的比值.从图 4 可以看出,光子能量在 25.0 eV 以下时, Yb 4f 的贡献在 2.5% 以下,因此 PES 测量主要反映了  $\text{Yb}_{2.75}\text{C}_{60}$  价带的特征.入射光子能量为 40.0 eV 时, 4f 的贡献增加了三倍左右.考虑到 Yb 4f 芯态的峰宽较窄,其峰高的增加更显著.由于  $4f_{7/2}$  和  $4f_{5/2}$  的位置刚好处于  $\text{Yb}_{2.75}\text{C}_{60}$  价电子分布峰值之间的凹陷部位,其强度随光子能量的变化将使实验测量到的谱线形状发生显著改变.至此,图 4 定量地解释了图 1 所示结果,价带、芯态的峰位和强度在图 4 中一目了然.以上对  $\text{Yb}_{2.75}\text{C}_{60}$  的分析还提示我们,将来用 SR-PES 研究其他镧系稀土富勒烯化合物时,入射光子能量也以控制在 30.0 eV 以下为宜.某些稀土元素(如 Sm)与 Yb 相比,其 4f 电子更靠近费米能级.

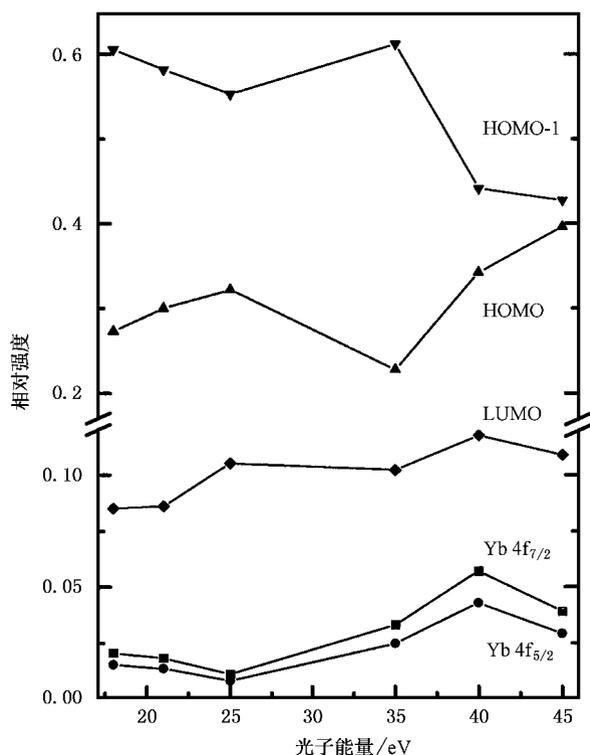


图 4 不同光子能量下拟合所得  $\text{Yb}_{2.75}\text{C}_{60}$  SR-PES 中各组分的相对强度(每一组分的面积除以谱线总面积)

图 4 中另一个重要的现象是观察到  $\text{Yb}_{2.75}\text{C}_{60}$  中 HOMO 和 HOMO-1 强度随入射光子能量的改变呈现有关联的周期性变化.当 HOMO 的强度极大时, HOMO-1 强度极小,即光电离截面振荡.在对纯  $\text{C}_{60}$  固体的 UPS 研究中, Benning 等人<sup>[16]</sup>最早发现纯  $\text{C}_{60}$  固体的 HOMO 和 HOMO-1 光电离截面振荡现象.后来 Liebsch 等人<sup>[17]</sup>发现  $\text{C}_{60}$  分子同样存在这一有趣现象. Xu 等人<sup>[18]</sup>最早用  $\text{C}_{60}$  分子光电发射过程中末态的球形驻波模型解释了光电离截面的周期性变化.随后, Hasegawa 等人<sup>[19]</sup>基于  $\text{C}_{60}$  分子上 60 个 C 原子各自发射的光电子之间的干涉,也较好地解释了 HOMO 和 HOMO-1 光电离截面振荡的周期性变化.然而,对于振荡的幅度,文献 18 和 19 都未能得到满意的结果.这说明振荡的振幅可能不仅与  $\text{C}_{60}$  分子的几何构型有关,还与其他某些因素有关.为了与文献中纯  $\text{C}_{60}$  情形对比,图 5 中给出 HOMO 和 HOMO-1 的强度比.从图 5 看出,  $\text{Yb}_{2.75}\text{C}_{60}$  中 HOMO 和 HOMO-1 的振荡周期与纯  $\text{C}_{60}$  的结果基本相同,但是振幅明显小于后者.类似的现象最近在 Ag(111) 表面的单层  $\text{C}_{60}$  上也

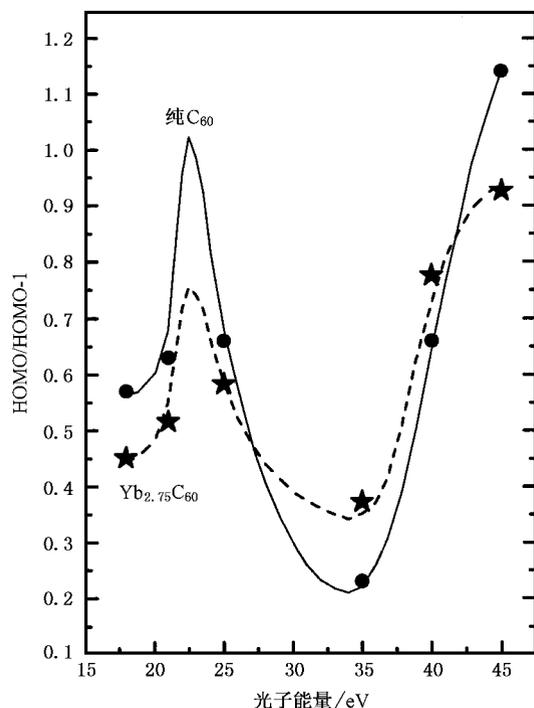


图 5  $\text{Yb}_{2.75}\text{C}_{60}$  薄膜 SR-UPS 中 HOMO/HOMO-1 的强度比随入射光子能量增加的变化趋势.作为对比,纯  $\text{C}_{60}$  中的结果(数据取自文献 19])用实线示于图中,五角星为对应于本文所采用的 6 种不同光子能量的 HOMO/HOMO-1 强度比,用虚线相连,圆点和实线为纯  $\text{C}_{60}$  的数据(取自文献 19])

观察到<sup>[20]</sup>. 已经知道,  $C_{60}/Ag(111)$  界面存在较强的离子键, 以及  $C_{60}$  分子周围环境不对称, 而且也可能存在共价作用(我们最近的实验结果),  $Yb_{2.75}C_{60}$  中 Yb 和  $C_{60}$  也有离子和共价两种作用<sup>[10, 11]</sup>, 并且  $C_{60}$  分子周围环境也不对称<sup>[10]</sup>. 这说明,  $C_{60}$  分子周围的化学环境对 HOMO 和 HOMO-1 的光电离截面振荡有不可忽略的影响. 可能的机理是不对称环境和共价作用使  $C_{60}$  分子偏离球状构型, 从而引起振荡幅度变化. 至于为什么振荡周期几乎不变(或变化很小), 需要定量计算才能理解. 图 5 的初步结果还显示, 有必要采用更小的光子能量间隔, 以光电离截面振荡为主要研究目的, 对  $Yb_{2.75}C_{60}$  开展更细致的实验工作.

## 4. 结 论

定量确定了 Yb 4f 电子对  $Yb_{2.75}C_{60}$  光电子能谱

实验数据的贡献, 从而也得到了较精确的价带电子态密度分布. 光子能量小于 25.0 eV 时, 4f 芯态的贡献较小, 因而实验结果可近似地认为反映了  $Yb_{2.75}C_{60}$  价带电子态密度分布. 光子能量大于 35.0 eV 时, Yb 4f 的光电发射强度较大, 使得实验数据显著偏离  $Yb_{2.75}C_{60}$  价带的本征态密度分布. 在用 SR-PES 研究凝聚态物质(包括碱金属和碱土金属富勒烯)价带结构的工作中, 实验者往往使用大于 35.0 eV 的光子(以减小终态效应). 本文的结果表明, 对于稀土富勒烯, 须尽量选择能量在 30.0 eV 以下的光子, 以得到对价带结构的初步认识(精确的认识还需要类似本文的拟合工作). 在  $Yb_{2.75}C_{60}$  中, HOMO 和 HOMO-1 的光电离截面振荡周期与纯  $C_{60}$  相同, 但振荡幅度明显小于纯  $C_{60}$ . 这一实验结果对深入理解  $C_{60}$  及其化合物的光电离截面振荡现象有一定的参考意义.

- [ 1 ] Özdas E, Kortan A R, Kopylov N, Ramirez A P, Siegrist T, Rabe K M, Bair H E, Schuppler S and Citrin P H 1995 *Nature* **375** 12
- [ 2 ] Chen X H and Roth G 1995 *Phys. Rev. B* **52** 15534
- [ 3 ] Takenobu T, Chi D H, Margadonna S, Prassides K, Kubozono Y, Fitch A N, Kato K and Iwasa Y 2003 *J. Am. Chem. Soc.* **125** 1897
- [ 4 ] Margiolaki I, Margadonna S, Prassides K, Hansen T, Ishii K and Suematsu H 2002 *J. Am. Chem. Soc.* **124** 11288
- [ 5 ] Ishii K, Fujiwara A and Suematsu H 2002 *Phys. Rev. B* **65** 134431
- [ 6 ] Ohno T R, Kroll G H, Weaver J H, Chibante L P F and Smalley R E 1992 *Phys. Rev. B* **46** 10437
- [ 7 ] Xia B, Ruckman M W and Strongin M 1993 *Phys. Rev. B* **48** 14623
- [ 8 ] Yoshikawa H, Kuroshima S, Hirose I, Tanigaki K and Mizuki J 1995 *Chem. Phys. Lett.* **239** 103
- [ 9 ] Wang X X, Li H N, He S L, Ibrahim K, Qian H J, Su R, Zhong J, Hong C H and Abbas M I 2004 *J. Phys.: Condens. Matt.* **16** 4619
- [ 10 ] Citrin P H, Özdas E, Schuppler S, Kortan A R and Lyons K B 1997 *Phys. Rev. B* **56** 5213
- [ 11 ] Li H N, He S L, Zhang H J, Lü B, Bao S N, Li H Y, He P M and Xu Y B 2003 *Phys. Rev. B* **68** 165417
- [ 12 ] He S L, Li H N, Li H Y, Zhang H J, Lü B, He P M, Bao S N and Xu Y B 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 915 [in Chinese] 何少龙、李宏年、李海洋、张寒洁、吕 斌、何丕模、鲍世宁、徐亚伯 2004 *物理学报* **53** 915 ]
- [ 13 ] Li H N, Xu Y B, Zhang J H, He P M, Li H Y, Wu T Q and Bao S N 2001 *Prog. Natur. Sci.* **11** 427
- [ 14 ] Yeh J J and Lindau I 1985 *Atomic Subshell Photoionization Cross Section and Asymmetry Parameters:  $1 \leq Z \leq 103$*  (New York: Academic)
- [ 15 ] Li H N, Ibrahim K, Liu F Q and Xu Y B 2003 *Surf. Sci.* **540** L631
- [ 16 ] Benning P J, Poirier D M, Troullier N, Martins J L, Weaver J H, Haufler R E, Chibante L P F and Smalley R E 1991 *Phys. Rev. B* **44** 1962
- [ 17 ] Liebsch T, Plotzke O, Heiser F, Hergenahn U, Hemmers O, Wehlitz R, Viehhaus J, Langer B, Whitfield S B and Becker U 1995 *Phys. Rev. A* **52** 457
- [ 18 ] Xu Y B, Tan M Q and Becker U 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 3538
- [ 19 ] Hasegawa S, Miyamae T, Yakushi K, Inokuchi H, Seki K and Ueno N 1998 *Phys. Rev. B* **58** 4927
- [ 20 ] Ton-That C, Shard A G, Egger S, Dhanak V R, and Welland M E 2003 *Phys. Rev. B* **67** 155415

# Synchrotron radiation photoemission study of Yb<sub>2.75</sub>C<sub>60</sub><sup>\*</sup>

He Shao-Long<sup>1)</sup> Li Hong-Nian<sup>1)†</sup> Wang Xiao-Xiong<sup>1)</sup> Li Hai-Yang<sup>1)</sup> I. Kurash<sup>2)</sup>  
Qian Hai-Jie<sup>2)</sup> Su Run<sup>2)</sup> M. I. Abbas<sup>2)</sup> Zhong Jun<sup>2)</sup> Hong Cai-Hao<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup>( Department of Physics , Zhejiang University , Hangzhou 310027 , China )

<sup>2)</sup>( Laboratory of Synchrotron Radiation , Institute of High Energy Physics ,  
Chinese Academy of Sciences , Beijing 100039 , China )

( Received 5 July 2004 )

## Abstract

The Yb<sub>2.75</sub>C<sub>60</sub> thin film was prepared and studied by using the synchrotron radiation ultraviolet photoemission spectroscopy (PES) in an ultra-high-vacuum system. The spectral line obtained in the range between the Fermi level and ~ 5 eV binding energy consists of those lines from the valence band (the molecular orbital LUMO, HOMO and HOMO-1 derived energy bands of C<sub>60</sub>) and core levels (Yb 4f<sub>7/2</sub> and 4f<sub>5/2</sub>). Taking into account the variations of the photoionization cross sections of C 2p and Yb 4f with different photon energies, we have measured the photoemission spectra under the condition of varying photon energies, and carried out simulations to deduce the component contributions. The peak positions, widths and intensities for the components are obtained quantitatively. The results reveal that the photoemission of 4f electrons has a significant intensity with the photon energies larger than ~ 30.0 eV, and that the measured spectra depart drastically from the density of states of the valence band. To observe the valence band structure, one should carry out the PES measurements by using photons with energies less than 30.0 eV. The photoionization cross-section oscillation is also observed in Yb<sub>2.75</sub>C<sub>60</sub> with almost the same oscillation period as that for pure C<sub>60</sub>. However, the oscillation amplitude is obviously smaller than that for pure C<sub>60</sub>, which reveals that the chemical environment of C<sub>60</sub> in compounds has non-negligible effects on the photoionization cross-section oscillation phenomenon.

**Keywords** : Yb<sub>2.75</sub>C<sub>60</sub>, SR-PES, photoionization cross section oscillation

**PACC** : 7360T, 7120F

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10074053 and 10374080), and the Foundation of Beijing Synchrotron Radiation Facility, China.

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: phylhn@public.zju.edu.cn