

Е. Я. КОМАРОВ, И. Б. БОРОВСКИЙ

СПЕКТРЫ ПОРОГОВЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ГРУППЫ ЛАНТАНОИДОВ

(Представлено академиком Г. В. Курдюмовым 17 IV 1975)

Для нормальных элементов, $3d$ -, $5d$ - и $5f$ -переходных металлов структура спектров пороговых потенциалов (с.п.п.) — зависимость производной интегральной интенсивности I_i непрерывного I_n и характеристического I_x рентгеновского излучения от энергии падающих электронов dI/dE — определяется плотностью состояний $N(E)$ за поверхностью Ферми. Согласно модели, используемой в работах ^(1, 2) dI/dE пропорциональна производственной по энергии от самосвертки $N(E)$ за поверхностью ферми, а при некоторых упрощающих предположениях модельное представление в ⁽²⁾ приводит к тому, что характерные параметры с.п.п. — положение экстремумов структуры и ширины линий — удается связать с соответствующими рассчитанными кривыми $N(E)$.

Экспериментально полученные N_{IV} , N_{V} -с.п.п. для редкоземельных элементов группы лантаноидов в металлическом состоянии по энергетической протяженности структуры оказались не сопоставимыми с зонными расчетами $N(E)$ за поверхностью ферми.

В работах ^(3, 4) опубликованы $N_{IV, V}$ -с.п.п. La, Pr, Sm, Gd и Er. На установке, описанной в ⁽⁵⁾, нами получены с.п.п. Gd, Tb, Dy и Ho. Вакуум в рабочей камере во время снятия спектров поддерживался около 10^{-7} мм рт. ст. Образцы предварительно прогревали в вакууме электронным пучком, однако на поверхности образцов оставалось некоторое количество кислорода и углерода, которые давали линии в с.п.п.

Как видно из рис. 1—4, $N_{IV, V}$ -с.п.п. исследуемых редкоземельных элементов представляют собой ярко выраженную протяженную структуру, занимающую энергетический интервал 25—35 эв. Начало этой структуры отличается на несколько электрон-вольт от значений энергий связи, приводимых, например, в ⁽⁶⁾ (энергии связи из ⁽⁶⁾ обозначены на рис. 1—4 короткими вертикальными линиями). Рентгеновские спектры поглощения редкоземельных элементов группы лантаноидов, снятые в районе порогов возбуждения $N_{IV, V}$ -оболочек в общих чертах повторяют эту картину ⁽⁷⁻⁹⁾, хотя их форма и протяженность существенно отличаются от с.п.п.

В спектрах поглощения протяженная структура объясняется обменным конфигурационным взаимодействием волновых функций внутренних $4d$ - незаполненных $4f$ -оболочек редкоземельных элементов при образовании вакансий в $4d$ -оболочке.

Существенное различие между рентгеновскими спектрами поглощения и с.п.п. заключается в том, что в первом случае появления вакансии в $4d$ -оболочке происходит за счет возбуждения фотонами, а во втором за счет возбуждения атомов мишени пучком электронов с энергией, близкой к пороговой. Это приводит к изменению правил отбора при возбуждении ⁽¹⁰⁾, изменению возбужденных конфигураций атомов по сравнению с фотонным возбуждением (из-за наличия дополнительного электрона в пределах атома) и, следовательно, к различному расщеплению возбужденных уровней и вероятностей перехода на них электронов. Вполне возможно,

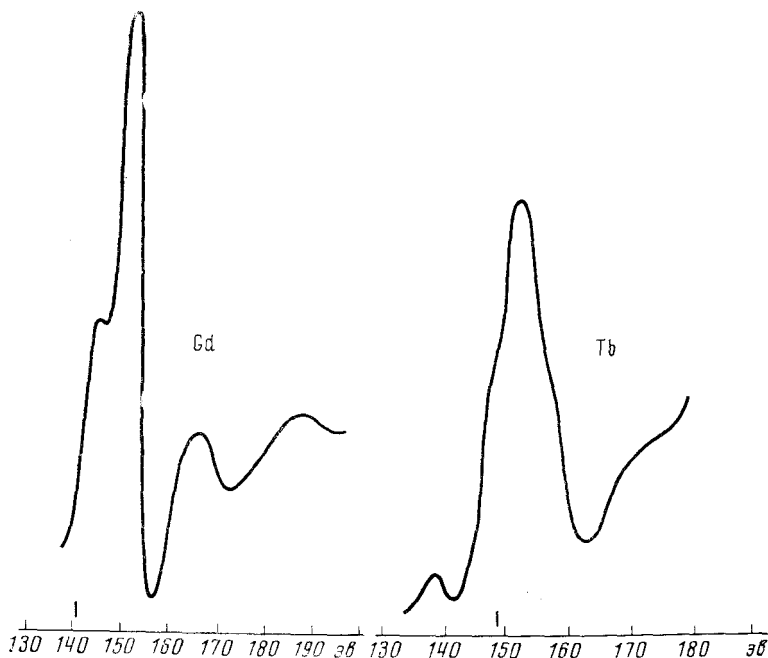


Рис. 1. N_{IV} , ν -с.п.п. гадолиния

Рис. 2. N_{IV} , ν -с.п.п. тербия

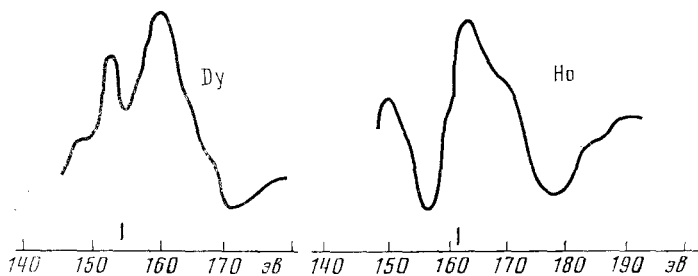


Рис. 3. N_{IV} , ν -с.п.п. диспро-
зия

Рис. 4. N_{IV} , ν -с.п.п. гольмия

что существует вероятность перехода одного электрона на внутреннюю $4f$ -оболочку, а второго за уровень Ферми. Перечисленные обстоятельства приводят к значительному расширению с.п.п. по сравнению со спектрами поглощения и к различной форме этих спектров. Точный расчет формы с.п.п. редкоземельных элементов потребует, очевидно, не менее трудоемких вычислений с использованием ЭВМ, чем были проведены при расчете формы рентгеновских спектров поглощения (¹¹).

Институт физики твердого тела
Академии наук СССР
Черноголовка Московской обл.

Поступило
25 III 1975

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ R. L. Park, J. E. Houston, Phys. Rev., v. B6, 1073 (1972). ² P. O. Nilsson, J. Kanski, Surface Sci., v. 37, 700 (1973). ³ M. S. Murthy, P. A. Redhead, J. Vacuum Sci. and Technol., v. 11, 837 (1974). ⁴ J. Kanski, An Experimental Investigation of Appearance Potential Technique, Göteborg, 1974. ⁵ И. Б. Боровский, Е. Я. Комаров, Изв. АН СССР, сер. физ., т. 38, 478 (1974). ⁶ К. Зигбан, К. Нордлинг и др., Электронная спектроскопия, под ред. И. Б. Боровского, М., 1971. ⁷ Т. М. Зимкина, В. А. Фомичев и др., ФТТ, т. 9, 1447 (1967). ⁸ В. А. Фомичев, Т. М. Зимкина и др., ФТТ, т. 9, 1490 (1967). ⁹ Т. М. Зимкина, В. А. Фомичев и др., Изв. АН СССР, сер. физ., т. 31, 874 (1967). ¹⁰ G. E. Laramore, Phys. Rev. Letters, v. 27, 1050 (1971). ¹¹ J. Sugar, Phys. Rev., v. B, 5, 1785 (1972).