

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА РЕНТГЕНОВСКИЙ ФОТОЭЛЕКТРОННЫЙ СПЕКТР ВАЛЕНТНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ СПЛАВА Fe – Ni ИНВАРНОГО СОСТАВА

А.И.Захаров

В работе [1] при исследовании рассеяния рентгеновских лучей от образца Fe – Ni сплава инварного состава было обнаружено, что при повышении температуры от 78 до 500 К атомный фактор уменьшался примерно на 1,4%. В связи с этим представляло интерес проследить энергетические изменения в валентной полосе инвара при повышении температуры.

На фотоэлектронном спектрометре HP-5950A были исследованы спектры валентных электронов в сплаве Fe – Ni, содержащем 35,8 ат.% Ni. Концентрация примесей в сплаве не превышала 0,1 вес.%. Исследования проведены при температуре 122, 300, 450, 500 и 580 К. Температура Кюри этого сплава 520 К [2].

Перед съемкой спектров образцы подвергались механической очистке в атмосфере газообразного азота повышенной чистоты и травлению ионами аргона в камере приготовления образцов. Давление аргона в камере составляло $5 \cdot 10^{-5}$ тор. Ускоряющее напряжение ионной пушки – 500 в, время чистки – 10 мин. Степень очистки образцов от окислов и слоя углеводородов контролировалась по $O1s$ – линии кислорода и $C1s$ – углерода. В результате очистки при исследовании поверхности образца не были зарегистрированы сколько-нибудь заметные пики в районе энергий связи $O1s$ – и $C1s$ – электронов. Вакуум в рабочей камере при температуре образца 300 К был не хуже $2 \cdot 10^{-9}$ тор.

На рис. 1 представлены спектры валентных электронов инвара. При изменении температуры происходит некоторое изменение положения максимума и формы валентной полосы. Эти изменения показаны на рис. 2. При нагреве образца с 122 до 580 К происходит сдвиг пика в сторону уменьшения сил связи примерно на 0,36 эв. Индекс асимметрии¹⁾ спектра также изменялся с повышением температуры. При на-

¹⁾ Индекс асимметрии определялся как отношение длинноволновой части к коротковолновой на половине интенсивности в максимуме спектра.

греве образца от 122 до 580 К индекс асимметрии уменьшился соответственно с 0,43 до 0,32.

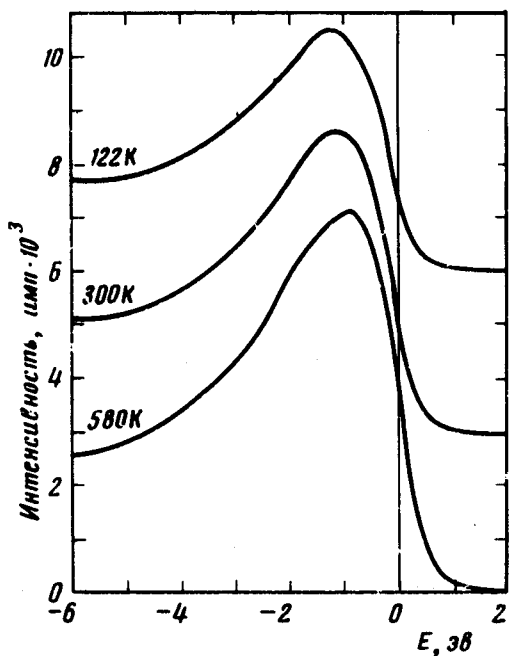


Рис. 1. Рентгеновские фотоэлектронные спектры валентных электронов при температуре: 1 – 122, 2 – 300, 3 – 580 К

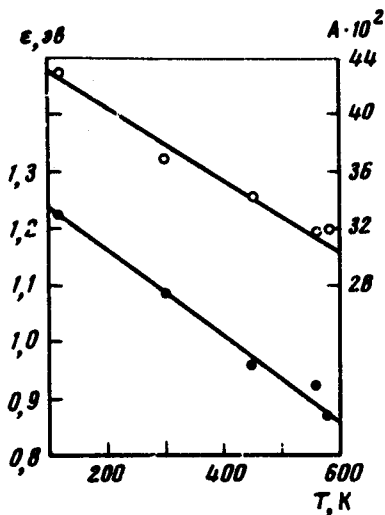


Рис. 2. Температурная зависимость положения максимума и индекса асимметрии фотоэлектронного спектра валентных электронов инвара

В фотоэлектронном спектрометре положение уровня Ферми металлических образцов из-за электрического контакта совпадает с уровнем Ферми спектрометра. В связи с этим изменение положения уровня Ферми в $3d$ -полосе образца наблюдается по смещению спектра относительно уровня Ферми спектрометра. Сдвиг уровня Ферми образца вправо будет сопровождаться смещением максимума спектра влево. Следовательно, наблюдаемое в наших экспериментах при повышении температуры смещение максимума спектра в сторону уровня Ферми спектрометра можно связать со сдвигом уровня Ферми в $3d$ -полосе образца ближе к дну полосы [3]. Этот сдвиг сопровождается сужением длинно-

волновой части спектра, что обуславливает наблюдаемое снижение индекса асимметрии. Как известно [4] часть $3d$ -полосы, после заполнения ее пятью электронами на атом, вплоть до уровня Ферми является антисвязывающей частью. Электроны, имеющие это энергетическое состояние, занимают более локализованное пространство, чем даже в изолированном атоме. Эти электроны находятся в малоустойчивом состоянии и при повышении температуры по неизвестной причине, возможно в результате интерференции их на $4s$ -электронах, они способны переходить в коллективизированное состояние. Этот процесс при исследовании рассеяния рентгеновских лучей сопровождается снижением атомного фактора [1]. Таким образом, эффекты, обнаруженные нами в работе [1], и в данном исследовании отображают одно и то же явление в пространственном и энергетическом представлениях. В результате сужения антисвязывающей части $3d$ -полосы происходит усиление межатомного сцепления. Следовательно, с ростом температуры в инваре одновременно имеют место два процесса: с одной стороны – увеличение амплитуды колебаний атомов, с другой – рост межатомных сил связи за счет сужения антисвязывающей части $3d$ -полосы. В результате этих двух противоположных процессов происходит в определенных пределах нейтрализация ангармонических составляющих тепловых колебаний атомов, что определяет аномальный ход температурной зависимости многих макроскопических свойств. В частности, преобладание второго процесса может привести к тому, что температурный коэффициент расширения будет отрицательным, как это имеет место в инварах при температуре ниже 60 К [5]. С учетом этих представлений хорошо объясняются и другие известные аномалии свойств инварных сплавов, в том числе рост упругих постоянных при повышении температуры.

Институт черной металлургии
им. И.П.Бардина

Поступила в редакцию
8 июня 1976 г.

Литература

- [1] А.И.Захаров. ФММ, 41, 445, 1976.
- [2] А.З.Меньшиков, Е.Е.Юрчиков. Изв. АН СССР, сер. физ., 36, 1463, 1972.
- [3] А.И.Захаров, Ю.А.Матвеев, Т.М.Зимкина. Изв. АН СССР, сер. физ., 40, 362, 1976.
- [4] Ж.Фридель. Переходные металлы. Электронная структура $3d$ -зоны. Сб. Физика металлов, I. Электроны, под ред. Дж.Займана. М., изд. Мир, 1972, стр. 373.
- [5] А.И.Захаров, Л.Н.Фелотов. ФММ, 23, 759, 1967.