

내각 준위 X-선 광전자분광법을 이용한 Fe_{1-x}Zr_x 전자구조 연구

포항공과대학교 권세균*, 민병일, 권순주
가톨릭대학교 강정수

Electronic structures of Fe_{1-x}Zr_x using core level X-ray photoemission spectroscopy

POSTECH Se Kyun Kwon*, Byung Il Min, Soonju Kwon
Catholic Univ. Jeongsoo Kang

1. 서론

비정질 Fe_{1-x}Zr_x 합금은 Fe가 적은 영역에서 초전도 기저상태를 갖는 반면, $x \leq 0.6$ 인 영역에서는 자기정렬 및 Invar 현상과 유사한 열팽창 등의 물리적 특성을 갖는다. X-선 광전자분광법에 의한 내각전자의 에너지띠 분석은 페르미 에너지준위(ϵ_F) 근처에서의 전자구조를 간접적으로 알 수 있게 한다. 우리는 본 논문에서 X-선을 이용하여 비정질 Fe_{1-x}Zr_x ($x=0.09, 0.54, 0.67$) 합금과 순수한 Fe, Zr 금속의 내각전자 에너지띠를 연구하였다.

2. 실험방법 및 분석

광전자분광을 위한 X-선 발생원으로는 $h\nu=1253.6$ eV의 Mg K α 를 사용하였다. ϵ_F 는 결합에너지가 368.3 eV인 Ag 3d_{5/2}를 이용하여 보정하였으며 실험 전체의 에너지 분해능은 1.03 eV이다. 시료는 3.5 keV Ar ion으로 sputtered-cleaning하였고 기저진공은 2×10^{-10} Torr였다.

내각전자 에너지띠의 분석에는 Doniach-Šunjić 선모양을 이용하였다[1]. 내각전자 에너지띠의 일반적인 모양은 큰 결합에너지 쪽으로의 긴 꼬리와 Lorentzian으로 특징지어진다. Doniach-Šunjić 선모양은 이런 특성을 반영하고 있는데 비대칭 상수 α 는 ϵ_F 근처에서의 전자-구멍 쌍의 저에너지 여기의 정도를 나타내고 Lorentzian의 FWHM(γ)는 내각전자의 생존시간을 나타내고 있다.

3. 실험결과 및 고찰

$\text{Fe}_{1-x}\text{Zr}_x$ 합금에 있는 Fe $2p_{3/2}$ 의 에너지띠 분석결과는 표1에 주어져 있다. 여기서 Fe 함량의 증가에 따른 γ 의 증가는 Fe 가전자의 갯수가 Zr 가전자의 갯수보다 많다는 것을 생각하면 이해될 수 있다. 즉, Auger 전자에 의한 내각구멍의 점유가 쉬워지는 것이다. 비대칭 상수 α 의 증가는 ϵ_F 에서의 상태함수가 커지는 것을 나타내는 것으로 다른 방법들에 의한 연구결과들과 일치하고 있다[2-5]

Zr $3d_{5/2}$ 의 fitting 결과는 $x=0.54, 0.67$ 이 유사하며 하나의 선으로 잘 맞는 반면 $x=0.09$ 일 때는 하나의 선으로 fitting이 불가능하고 결합에너지가 179.44 eV와 178.67 eV인 두 개의 선으로 fitting이 가능하였다. 이것은 $x=0.54, 0.67$ 에서와는 달리 $x=0.09$ 에서의 Zr은 국소적인 환경이 다른 두가지의 상태가 $\text{Fe}_{0.91}\text{Zr}_{0.09}$ 내에 존재하고 있음을 시사하는 것이다.

x	BE (eV)	2γ (eV)	α
0	706.60	0.49	0.33
0.09	706.60	0.48	0.32
0.54	706.63	0.41	0.29
0.67	706.63	0.37	0.27

표 1. $\text{Fe}_{1-x}\text{Zr}_x$ 합금에서의 Fe $2p_{3/2}$ 에너지선 fitting 결과

4. 결론

X-선 광전자분광법을 이용하여 비정질 $\text{Fe}_{1-x}\text{Zr}_x$ 합금의 내각전자 에너지띠를 연구하였다. Fe 함량의 증가에 따라 ϵ_F 에서의 상태함수가 증가하는 것을 알 수 있었으며, 특히 $x=0.09$ 일 때는 국소적인 환경이 다른 Zr의 두가지 상태가 있음을 확인하였다.

참고 문헌

- [1] Doniach, M. Šunjić, J. Phys. C. Solid State Phys. **3**, 285 (1970).
- [2] A Cossy-Favre, H.-G. Boyen, P.Oelhafen, I. Turek, and, J. Hafner, J. Noncryst. Solid **156**, 246 (1993).
- [3] N. Neddermeyer and Th. Paul, Phys. Rev B **23** **36**, 4148 (1987).
- [4] J. Kübler and K.H. Bennemann, Phys Rev B **23**, 5176 (1981).
- [5] V.L. Moruzzi, P. Oelhafen, A.R. Williams, R. Lapka, H.-J. Güntherodt, and J. Kübler, Phys. Rev B **27**, 2049 (1983).