

ОСОБЕННОСТИ СТРОЕНИЯ ВАЛЕНТНОЙ ЗОНЫ НЕКОТОРЫХ ТИТАНСОДЕРЖАЩИХ ОКСИДНЫХ ВЕЩЕСТВ

Бондаренко Т.Н., Илькив Б.И.

Институт проблем материаловедения НАН Украины, ул. Крижановского, 3, Киев, 03680, Украина; e-mail: rs@ipms.kiev.ua

Эта работа является продолжением наших исследований [1,2] ряда кислороднооктаэдрических сегнетоэлектриков и близким к ним веществ.

Целью данной работы было изучение электронного строения соединений состава $Ln_2Ti_2O_7$ ($Ln = Sm-Lu$) методом рентгеновской эмиссионной спектроскопии. Эти вещества имеют структуру типа пирохлора, содержащую октаэдры, образованные атомами кислорода. Пирохлорные оксиды обладают хорошими диэлектрическими свойствами и могут использоваться в качестве компонентов функциональных керамик.

Рентгеновские эмиссионные $OK\alpha$ -спектры были получены в девяти оксидных соединениях (рис. 1), а $TiK\beta_5\beta''$ - спектр (полоса) получен в $Sm_2Ti_2O_7$ (рис.2).

$OK\alpha$ - спектры характеризуют Or (генетически $O2p$)- электронно-энергетическое распределение в валентной зоне (ВЗ).

$OK\alpha$ - спектры были получены на рентгеновском спектрометре САРФ. $TiK\beta_5\beta''$ - спектр – на спектрографе ДРС-2. В обоих случаях использовался флуоресцентный метод.

Из рис.1 видно, что ширина по основанию для всех $OK\alpha$ -полос составляет примерно 6-7 эВ. Со стороны больших энергий у них имеется яркий максимум, а со стороны меньших энергий имеется заметное плечо. Изменение атомного номера лантаноида вызывает в основном изменение тонкой структуры $OK\alpha$ -полос. Следовательно, форма и протяженность распределения $O 2p$ -электронов в ВЗ $Ln_2Ti_2O_7$ ($Ln = Sm-Lu$) сохраняют свои главные особенности.

Рис.3 четко показывает, что $TiK\beta_5\beta''$ -спектр (полоса) состоит из двух подполос. У $TiK\beta_5$ -полосы есть два высокоэнергетических максимума (D и E). $TiK\beta''$ - полоса имеет три максимума (A, B и C). Ширина $TiK\beta_5$ и $TiK\beta''$ -спектра составляет, соответственно, примерно 10 эВ и 8 эВ. Полная ширина $TiK\beta_5\beta''$ -спектра равна приблизительно 23-25 эВ. Таким образом, ширина распределения p - электронов титана в ВЗ $Sm_2Ti_2O_7$ составляет примерно 23-25 эВ. Это распределение имеет две подполосы: у потолка и у дна ВЗ. В верхней части ВЗ

находится интенсивный максимум распределения p -электронов титана. В ее нижней части расположен более слабый максимум этого распределения.

Наше исследование других титансодержащих кислородно-октаэдрических вещества [1] позволяет предсказать: основные особенности строения ВЗ $Sm_2Ti_2O_7$ будут в целом присущи остальным соединениям $Ln_2Ti_2O_7$.

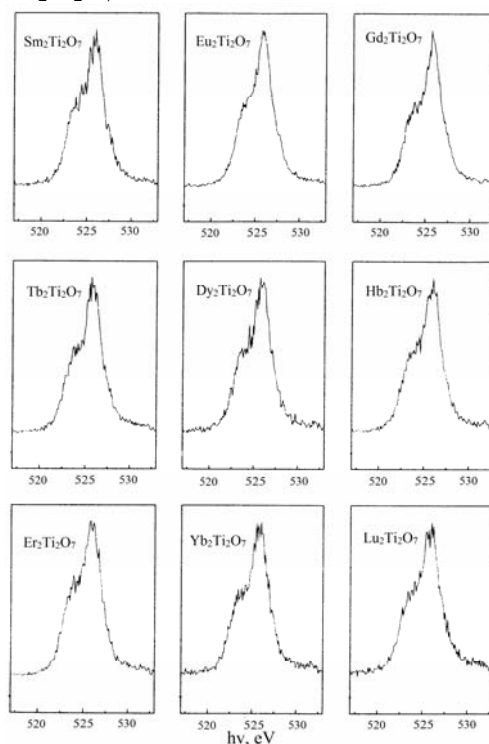


Рис.1 $OK\alpha$ -спектр в веществах $Ln_2Ti_2O_7$

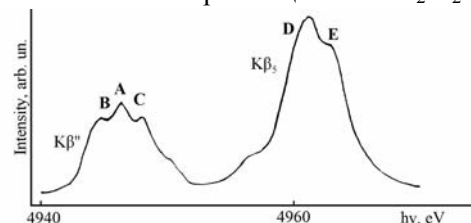


Рис.2 $TiK\beta_5\beta''$ - эмиссионная полоса в $Sm_2Ti_2O_7$

[1] T.N. Bondarenko, Ju.A. Teterin, A.S. Baev. Doklady AN SSSR, **279**, 109 (1984).

[2] T.N. Bondarenko, Ju.A. Teterin, A.S. Baev. Izvestija AN SSSR, ser,fiz **49**, 1550 (1985).