## ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ МОНОКРИСТАЛЛОВ $Tl_3PbBr_5$ И $TlPb_2Br_5$

Денисюк Н.М., Бекенев В.Л., Парасюк О.В. <sup>(1)</sup>, Данильчук С.П. <sup>(2)</sup>, Федорчук А.О. <sup>(3)</sup>, <u>Хижун О.Ю.</u>

Институт проблем материаловедения им И.Н. Францевича НАН Украины, ул. Кржижановского 3, Киев, 03680, Украина

(1)Факультет неорганической и физической химии, Восточноевропейский национальный университет, пр. Свободы 13, Луцк, 43025, Украина

(2) Физический факультет, Восточноевропейский национальный университет, пр. Свободы 13, Луцк, 43025, Украина

(3) Факультет неорганической и органической химии, Львовский национальный университет ветеринарной медицины и биотехнологий, ул. Пекарская 50, Львов, 79010, Украина

Соединения  $Tl_3PbBr_5$  и  $TlPb_2Br_5$  является одними из наиболее перспективных материалов для использования в безопасных для глаз твердотельных лазерах. Существование соединений  $Tl_3PbBr_5$  и  $TlPb_2Br_5$  было впервые обнаружено при изучении системы  $TlBr-PbBr_2$ . Соединение  $TlPb_2Br_5$  кристаллизуется в моноклинной структуре типа  $NH_4Pb_2Cl_5$  (пр.гр.  $P2_1/c$ , а = 9.304 Å, b= 8.336 Å и c = 13.004 Å), а  $Tl_3PbBr_5$  – в орторомбической структуре (пр.гр.  $P2_12_12_1$ , а = 15.397 Å, b = 9.061 Å и c = 8.537 Å).

В настоящей работе методом Бриджмена-Стокбаргера синтезированы высококачественные монокристаллы  $TlPb_2Br_5$  (рис. 1) и  $Tl_3PbBr_5$ . Их электронную структуру исследовали с помощью метода рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФС).



Рис. 1 Фотография монокристалла  $TlPb_2Br_5$ , используемого в  $P\Phi C$ -исследованиях

Спектры РФС, полученные для исходной и облученной ионами  $Ar^+$  поверхностей монокристалла  $TlPb_2Br_5$ , представлены на рис. 2. Видно, что все спектральные особенности для

чистой поверхности, за исключением O1s- и C1s-линий, относятся к составным элементам соединения  $TlPb_2Br_5$ .

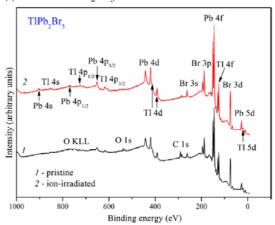


Рис. 2 Спектры РФС для исходной (1) и облученной ионами  ${\rm Ar}^+$  (2) поверхностей монокристалла  ${\rm TlPb}_2{\rm Br}_5$ 

РФС-данные свидетельствуют о том, что нет активного химического взаимодействия поверхности монокристаллов  $Tl_3PbBr_5$  и  $TlPb_2Br_5$  с кислородом. Данные результаты указывают на низкую гигроскопичность соединений  $Tl_3PbBr_5$  и  $TlPb_2Br_5$ . Нами выполнены также расчеты электронной структуры соединений  $Tl_3PbBr_5$  и  $TlPb_2Br_5$  по методу присоединенных плоских волн–полного потенциала. Результаты расчетов свидетельствуют о том, что  $Tl_3PbBr_5$  и  $TlPb_2Br_5$  — непрямозонные полупроводники с шириной запрещенной зоны 3,05 и 2,92 эВ, соответственно.