ИЗУЧЕНИЕ ЗАРЯДНОСТИ НА ИОНАХ ТИТАНА И КИСЛОРОДА В НЕКОТОРЫХ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКАХ И СХОДНЫХ С НИМИ ОБЪЕКТАХ

Бондаренко Т.Н, Илькив Б.И.,
Институт проблем материаловедения НАН Украины,
ул. Кржижановского, 3, Киев, 03068, Украина; e-mail: b_ilkiv@ukr.net

Объектами исследования были изоструктурные вещества состава $ATiO_3$ (A= Ca, Sr, Ba, Cd, Pb) и оксид TiO_2, используемый при их синтезе. $BaTiO_3$ и $PbTiO_3$ являются сегнетоэлектриками. $SrTiO_3$ – виртуальный сегнетоэлектрик. Сегнето-электрики широко используются в различных областях электро- и радиотехники. Поэтому изучение их электронной структуры и особенностей химической связи в этих веществах является актуальным.

В данной роботе методом рентгеноэлектронной спектроскопии были получены данные об энергии связи остовных уровней титана и кислорода в $ATiO_3$ и в TiO_2. Спектры были получены на спектрометре HP5950.

Измерения показывают, что увеличение атомного номера первого компонента в $ATiO_3$ достаточно слабо влияет на положение уровней титана и кислорода в этих веществах. В то же время положение этих уровней в оксиде TiO_2 отличается от такового в $ATiO_3$. Направление химического сдвига этих уровней свидетельствует, что связи Ti-O в $ATiO_3$ имеют более ковалентный характер, чем в TiO_2.

Методом рентгеновской спектроскопии нами определены также энергии максимумом Ti$L\alpha$- и O$K\alpha$-спектров во всех рассматриваемых веществах. Эти спектры характеризуют распределение в валентной зоне Tids- и Op-электронов. На рисунке приведены O$K\alpha$-спектры веществ, полученные на спектрометре РСМ-500.

Энергетическое положение максимумов Ti$L\alpha$- и O$K\alpha$-спектров слабо изменяется при изменении атомного номера первого компонента в $ATiO_3$. Направление и величина смещения спектров в $ATiO_3$ относительно спектров в TiO_2 указывает на некоторое увеличения степени ковалентности связи Ti-O в $ATiO_3$.

Результаты интерпретированы на основе анализа кристаллической структуры веществ.

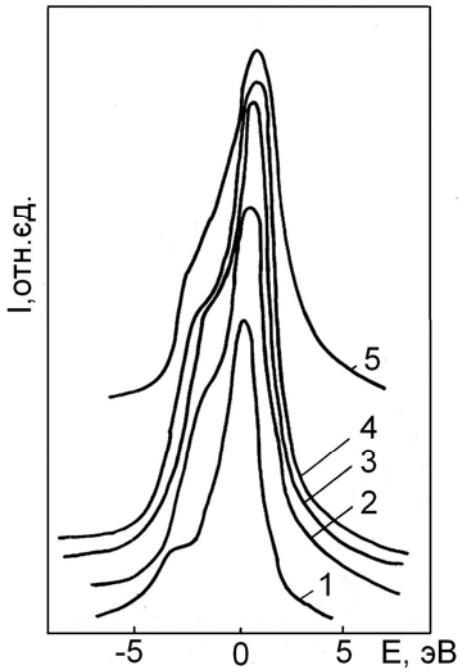

Рис. O$K\alpha$-спектры в веществах состава $ATiO_3$ и в TiO_2: 1- TiO_2, 2- $CaTiO_3$, 3- $BaTiO_3$, 4 - $SrTiO_3$, 5 - $PbTiO_3$. За ноль принята энергия максимума O$K\alpha$-спектра в TiO_2

Выводы:

1. Зарядность на ионах титана и кислорода в веществах состава $ATiO_3$ (A= Ca, Sr, Ba, Cd, Pb) мало изменяется при изменении A-компонента.

2. Степень ковалентности связи Ti-O в $ATiO_3$ больше, чем TiO_2.

Эти результаты подтверждаются данными исследования этих веществ методами рентгеновской и рентгеноэлектронной спектроскопии.