

ОСОБЕННОСТИ СУЖЕНИЯ $TiL\alpha$ И $OK\alpha$ СПЕКТРОВ ЭМИССИИ ВСЛЕДСТВИЕ НАНОДИСПЕРГИРОВАНИЯ ПОРОШКОВ TiO_2 СО СТРУКТУРОЙ РУТИЛА И АНАТАЗА

Фоя А.А.¹, Зауличный Я.В.¹, Зарко В.И.²

¹Институт проблем материаловедения им. И.Н. Францевича НАН Украины

²Институт химии поверхности НАН Украины

Fax: 38 (044) 424-21-31, E-mail: foya@ipms.kiev.ua

Введение

Методом ультрамягкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии в одинаковых экспериментальных условиях исследованы $TiL\alpha$ и $OK\alpha$ – полосы эмиссии нанопорошков TiO_2 (со средними размерами наночастиц 10 и 107 нм) и крупных порошков со структурами рутила и анатаза.

Результаты и обсуждение

Обнаруженные, как и в [1-3], сужения $TiL\alpha$ и $OK\alpha$ полос увеличиваются при уменьшении наночастиц. При переходе в наносостояния в структуре $OK\alpha$ –полосы практически исчезают низкоэнергетические подполосы. Это происходит за счет смещения в низкоэнергетическую сторону $O2p$ -состояний после разрыва $Ti-O$ связей, что подтверждается ростом относительной пиковой интенсивности $OK\alpha$, нормированной на внутреннюю $TiLl$ – линию.

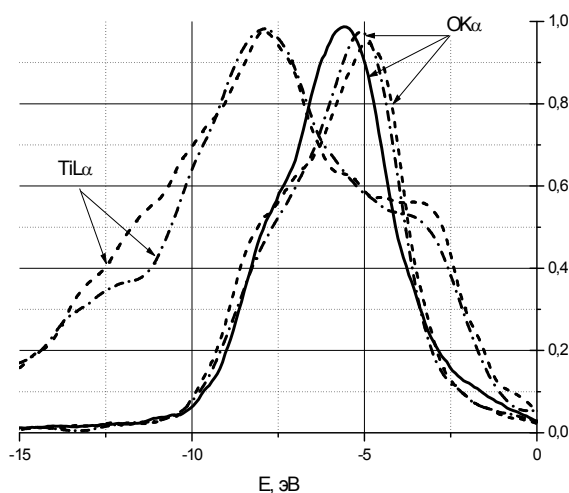


Рис. 1. Сопоставление в единой энергетической шкале $TiL\alpha$ и $OK\alpha$ – полос TiO_2 со структурой рутила: (---) – крупного, (- - -) – $d=107$ нм, (- . - .) – $d=10$ нм

Сужение $TiL\alpha$ -полос наблюдается в низкоэнергетической области спектра благодаря тому, что исчезает расщепление $Tisd$ –гибридных состояний, участвующих в ковалентной составляющей $Ti-O$ связей.

Выводы

Сужение происходит за счет локализации после разрыва $Ti-O$ связей $O2p$ -энергетических уровней O^{2-} анионов, заполненных электронами, задействованных в их ковалентной составляющей.

Отношение $n(OK\alpha)/n(TiL\alpha)=Q(Op)/Q(Tisd)$, где n – относительные сужения полос Q – парциальные плотности валентных электронов возле титана и кислорода.

Энергетические перераспределения $Tisd$ и Op -состояний при нанодиспергировании порошков рутила и анатаза близки по характеру благодаря похожему ближайшему окружению атомов Ti и O в этих фазах.

Работа выполнена при поддержке УНТЦ (грант №3101).

Литература

1. Жураковский Е.А., Зауличный Я.В. и др. Особенности электронного строения ультрадисперсных порошков кубического нитрида бора.// Порошковая металлургия, №1, С.72-76 (1991).
2. Зауличный Я.В. Рентгеноспектральное исследование электронной структуры и химической связи в ультрадисперсных порошках и полученных из них металлокристаллических материалах. I нитрид титана.// Порошковая металлургия, №9/10, С.75-84 (1999).
3. Зауличный Я.В. Особливості електронної структури метастабільних ультрадисперсних систем та одержаних з них матеріалів.// Фізика і хімія твердого тіла, т.3, №3, С.312-314 (2002).