

РЕНТГЕНОСТРУКТУРНІ ДОСЛІДЖЕННЯ МІШАНИХ ОКСИДІВ $\text{TiO}_2/\text{MnO}_x$

Кшнякін В.С., доцент

Сумський державний педагогічний університет ім. А.С.Макаренка

Діоксид титану має ряд цікавих оптичних властивостей в ультрафіолетовому діапазоні, що дозволяє застосовувати його у фотокаталізі, сонячних елементах, сенсорах і для фотонних кристалів. З метою покращення фотоактивності та розширення робочого діапазону цього матеріалу у видиму ділянку спектру застосовують допування TiO_2 різними елементами [1]. Інтерес викликають мішані оксиди $\text{TiO}_2/\text{MnO}_x$ на основі оксидів марганцю різного складу, властивості яких залежать від методики синтезу та їх хімічного складу.

В роботі представлено результати рентгеноструктурних досліджень вперше синтезованих титано-марганцевих мішаних оксидів (ТМО) з різним вмістом Mn ($8 \div 16$ % ат.). Зразки ТМО були синтезовані хімічним осадженням гідроксиду марганцю на полікристалічні частинки чистого TiO_2 (рутилу чи анатазу) з подальшою термічною обробкою зразків при температурах – 300, 850, 900 та 1000 °С. Для порівняння було синтезовано та досліджено чисті зразки рутилу та анатазу, а також анатазу та рутилу, модифікованих іонами Mn^{2+} .

Рентгенограми одержували на дифрактометрі ДРОН-2 в $\text{Cu}_{K\alpha}$ випромінюванні в однакових для всіх зразків умовах. Кількісний фазовий аналіз проводили з урахуванням сумарної інтенсивності всіх дифракційних ліній. Крім того, було досліджено розміри блоків когерентного розсіювання в синтезованих речовинах. Для цього певні лінії першого та другого порядків від зразків та еталону одержували в дискретному режимі. При визначенні фізичного уширення користувалися наближенням Коші, а розміри блоків мозаїки розраховували за формулою Шеррера [2]. Результати досліджень приведені в таблиці 1 [3].

Як свідчать дані XRD аналізу, зразок An/Mn (синтезований на основі анатазу та термічно оброблений при 300 °С протягом 8 годин) складається лише з однієї фази – анатазу, тоді як зразок R/Mn ,

отриманий шляхом прожарювання An/Mn при 900°C протягом 2 годин, поруч з рутилом, містить також до 10 % остаточного анатазу.

Таблиця 1 – TiO_2 з іонів Mn^{2+} до анатазу та рутилу

Зразок	T, °C	Вміст Mn % ат.	Фазовий склад, % ваг.	Розмір блоків, нм (D_{hkl})	
Чистий TiO ₂					
An	300	0	Анатаз	100	13,3 (101)
R	300	0	Рутил	100	20,8 (110)
адсорбція Mn ²⁺ на TiO ₂					
An/Mn	300	1,0	Анатаз	100	15,4 (101)
R/Mn	900	1,0	Анатаз	10,2	70,8 (101)
			Рутил	89,8	40,3 (110)
осадження гідроксиду Mn на анатазі					
ТМО-1	850	13,4	Анатаз	54,6	42,2 (101)
			Рутил	35,6	51,7 (110)
			Mn ₂ O ₃	9,7	44,8 (222)
осадження гідроксиду Mn на рутилі					
ТМО-2	900	15,6	Рутил	85,7	120,8 (110)
			Mn ₂ O ₃	12,1	36,0 (222)
			MnTiO ₃	2,2	32,6 (104)
ТМО-3	1000	13,4	Рутил	86,0	62,6 (110)
			MnTiO ₃	14,0	39,9 (104)

На відміну від чистого анатазу, який після прожарювання при 850°C протягом 2 годин повністю перетворюється на рутил, зразок ТМО-1 після термообробки при 850°C містить до 54,6 % анатазу. Ці факти свідчать про значний вплив іонів Mn на пригнічення фазового перетворення анатазу у рутил.

1. A. Fujishima, X. Zhang, D.A. Tryk, Surf. Sci. Rep. **63**, 515 (2008).
2. Я.С. Уманский, Ю.А. Скаков и др., Кристаллография, рентгенография и электр. микроскопия. (М.: Металлургия: 1982).
3. Л. Кернажицкий, В. Шимановская, Т. Гаврилко, Г. Пучковская, В. Наумов, Т. Халявка, В. Кшнякин, В. Черняк, Я. Баран, Ж. нано-електрон. физ. **2**, 35 (2010).