



## TITANIUM OXIDE AND ITS FEATURES MANIFESTED BY POWDER X-RAY DIFFRACTOMETRY

Sh.T. Khozhiev,

Candidate of Physics and Mathematics, Senior Researcher ,  
Institute of Bioorganic Chemistry named after Acad. O.S. Sodykov AN RUz,

Kosimov I. O.

Leading Engineer Institute of Bioorganic Chemistry  
Named after Acad. O.S. Sodykov AN  
RUz, isroilkosimov @ list.ru

Gaibnazarov B. B.

Institute of Bioorganic Chemistry of the Academy of  
Sciences of the Republic of Uzbekistan, Tashkent

Bohodirzhonova A. B.

Tashkent State Technical University, Tashkent, Universitetskaya st.

### Abstract

Nanosized titanium dioxide, being a wide-gap semiconductor, has a high potential for use in electronics and electro-optics due to transparency in the visible region of the spectrum and a high refractive index [1-3]. Various peaks in the X-ray phase analysis (XRD) spectrum of titanium oxide TiO<sub>2</sub> samples were experimentally detected. The Miller indices and lattice parameters were determined on the basis of XRD data for titanium oxide TiO<sub>2</sub> samples obtained for samples with different powder preparation modes. The obtained experimental data are in good agreement with the data obtained by other methods.

**Keywords:** titanium dioxide, powder, wide-gap semiconductor, Miller's indices, microstructure.

### Аннотация

Роль, место измерительных приборов и комплексной автоматизации в обеспечении безопасности производственных процессов, является актуальной проблемой современной науки. В этом плане хорошо себя рекомендовал метод рентгеноструктурный анализ [1]. Наноразмерный диоксид титана, являясь широкозонным полупроводником, имеет высокий потенциал применения в



электронике и в электрооптике за счет прозрачности в видимой области спектра и высокого коэффициента преломления [1-3]. Экспериментально обнаружены различные пики в спектре рентгенофазового анализа (XRD) образцов оксида титана  $TiO_2$ . На основе данных (XRD) образцов оксида титана  $TiO_2$ , полученных для образцов с различными режимами получения порошка определены индексы Миллера и параметры решетки. Полученные экспериментальные данные хорошо согласуются с данными полученными другими методами.

**Ключевые слова:** диоксид титана, порошок, широкозонный полупроводник, индексы Миллера, микроструктура.

## Введение

В настоящей работе порошковый рентгенофазовый метод анализа использовали для изучения структуры, состава, свойств сырьевых материалов и продуктов оксида титана  $TiO_2$ . С его помощью исследовали минералогический и фазовый составы [4]. В последние годы объектами пристального внимания исследователей являются сенсорные, адсорбционные, оптические, электрические и каталитические свойства  $TiO_2$  [1-5]. Наноразмерный диоксид титана, являясь широкозонным полупроводником, имеет высокий потенциал применения в электронике и в электрооптике за счет прозрачности в видимой области спектра и высокого коэффициента преломления [2-5]. Основным недостатком  $TiO_2$  для оптики и фотокатализа является его активность под действием только ближнего ультрафиолетового (УФ) излучения, которое составляет лишь 5-8% от всего солнечного спектра, достигающего поверхности Земли.

## Методы и принципы исследования

Порошковая рентгеновская дифракция — метод исследования структурных характеристик материала при помощи дифракции рентгеновских лучей (рентгеноструктурный анализ) на порошке или поликристаллическом образце исследуемого материала. Также называется методом порошка. Результатом исследования является зависимость интенсивности рассеянного излучения от угла рассеяния. Соответствующий прибор называют порошковым дифрактометром. Преимуществом метода является то, что дебаеграмма для каждого вещества уникальна и позволяет определить вещество даже тогда, когда его структура не известна. Рентгенофазовый метод анализа использовали для изучения структуры, состава,



свойств сырьевых материалов и продуктов обжига. С его помощью исследовали минералогический и фазовый составы [5]. Монохроматический пучок рентгеновского излучения направляется на образец исследуемого материала, растертого в порошок. На фотоплёнке, свернутой цилиндром вокруг образца, изображение (дебаеграмма) получается в виде колец. Расстояние между линиями одного и того же кольца на дебаеграмме позволяет найти брэгговские углы отражения. Затем, по формуле Брэгга – Вульфа  $2d \sin\theta = n\lambda$  можно получить отношение  $d/n$  расстояния между отражающими плоскостями к порядку отражения.

Рентгеновский анализ: позволяет решать следующие задачи:

Определение качественного состава образца, полуколичественное определение компонентов образца, определение кристаллической структуры вещества. А также прецизионное определение параметров элементарной ячейки, определение расположения атомов в элементарной ячейке (полнопрофильный анализ — метод Ритвельда), определение размера кристаллитов (области когерентного рассеяния) поликристаллического образца. Исследование текстуры в поликристаллических материалах. Кроме того, исследование фазового состава вещества и изучение диаграмм состояния, оценка размера кристалликов в образце, точное определение констант решетки, коэффициента теплового расширения, анализ минералов. На рис.1. приведена прибор - **порошковый дифрактометр**.



Рис.1. Порошковая рентгеновская дифрактометрия. XRD-6100.

### Основные результаты и их обсуждение.

Рентгенофазовый анализ состава частиц порошкового титана показал, что в исходном материале присутствует не только преобладающая гексагональная  $\alpha$ -



фаза металлического титана в виде твердого раствора кислорода, азота и, м.б углерода в  $\alpha$ -титане (эта фаза упоминается в дальнейшем как макрофаза), а также нестехиометрические фазы внедрения  $TiXz$ ,  $TiXmYn$ , где  $\{X,Y\} = \{O, C, N\}$ . Последние присутствуют в порошковом материале в незначительных количествах в виде микро- и, возможно, в нанофаз, и терминологически обозначены далее как микро- и нанофазы. Относительные объемные доли  $V_i$  и составы этих фаз, обладающих широкой областью гомогенности [3-5], меняются в частицах с изменением температуры испытаний. На рис.2-3 представлены спектральные зависимости  $TiO_2$  полученная методом порошкового дифрактометра. Кроме того, приведены индексы Миллера, а также межплоскостное расстояние  $d_{hkl}$  для данного образца.

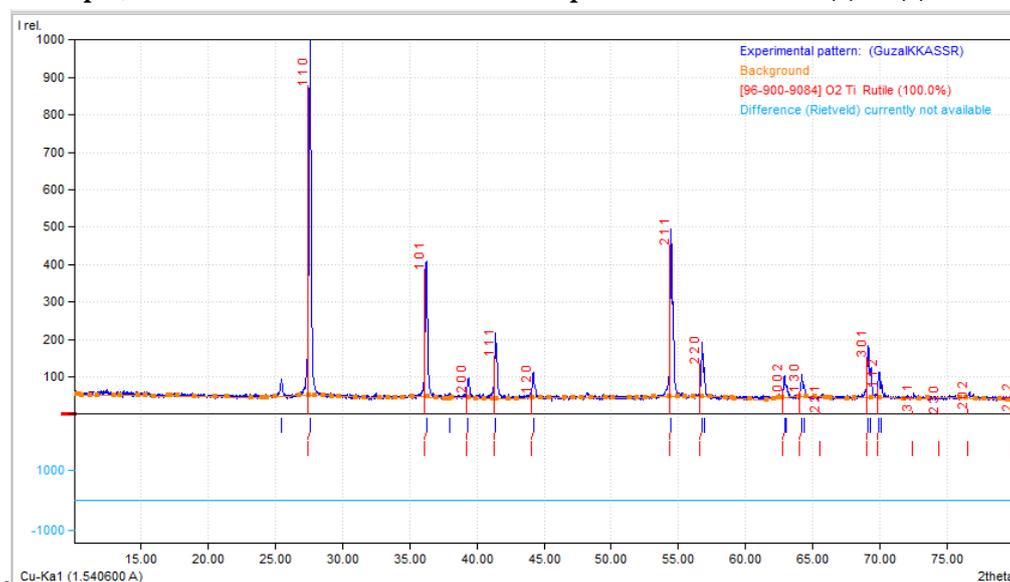


Рис.2. Спектральная зависимость  $TiO_2$  полученная методом порошкового дифрактометра . Приведены индексы Миллера.

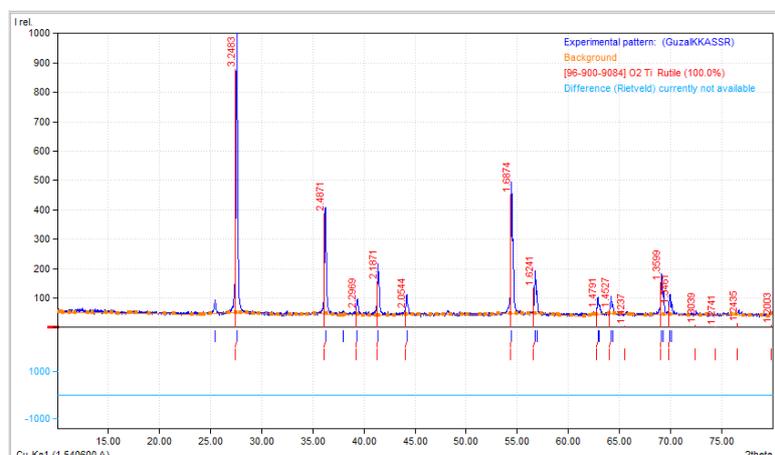


Рис.3. Спектральная зависимость  $TiO_2$  полученная методом порошкового дифрактометра. Приведены межплоскостное расстояние  $d_{hkl}$  для данного образца. Таблица 1. На таблице приведено процентная доля кристаллической и аморфной части данного образца.



Profile area	Counts	Amount
Total area	1774312	100,00%
Diffraction peaks	334750	18,87%
Background	143962	81,13%
Instrumental background	0	0,00%
Amorphouses	1439562	81,13%

**Degree of crystallinity (DOC) = 18,87%**

**Amorphous content (weight %) = 81,13%**

### **Заклучение**

Экспериментально обнаружены различные пики в спектре рентгенофазового анализа (XRD) образцов оксида титана TiO<sub>2</sub>. На основе данных (XRD) образцов оксида титана TiO<sub>2</sub>, полученных для образцов с различными режимами получения порошка определены индексы Миллера и параметры решетки. Полученные экспериментальные данные хорошо согласуются с данными полученными другими методами. А также определено процентная доля кристаллической и аморфной части данного образца, которая приведена на таб.1.

### **Список литературы / References**

1. Г.С.Жданов, А.С.Илюшин, С.В.Никитина //Дифракционный и резонансный структурный анализ. // Москва «Наука». 1980.
2. 2. Gnaser H., Huber B., Ziegler Ch. // Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology. 2004. V. 6. P. 505–535.
3. Шульга Ю.М., Матюшенко Д.В., Голышев А.А., Шахрай Д.В., Молодец А.М., Кабачков Е.Н., Куркин Е.Н., Домашнев И.А. // Письма в ЖТФ. 2010. Т. 36. Вып. 18. С. 26–31.
4. Хмельницкий, Р. А. Современные методы исследования агрономических объектов. — М. : Высшая школа, 1981. — С. 61.
5. Скоморохов А.А. Универсальный усилитель малых сигналов для исследования фотоэлектрических явлений в широкозонных материалах и структурах на их основе / А. А. Скоморохов, Л. В. Михнев, Е. А. Бондаренко, О. М. Чапура, С. М. Карачевцев, Е. Н. Фролов, И. В. Макаров // Вестник Северо-Кавказского федерального университета. 2016. № 1(52). С. 14-20.