

ФОРМАЛІЗАЦІЯ ПРОЦЕСУ ОКСИДУВАННЯ СПЛАВІВ ТИТАНУ**Корогодська А.М., Сахненко М.Д., Степанова І.І., Маркова Н.Б.,****Галак О.В., Конотопська Т.Б.***Національний технічний університет**«Харківський політехнічний інститут», м. Харків*

На теперішній час водень є визнаним трендом альтернативної енергетики, а серед технологій його генерації значний потенціал має фотокаталіз завдяки використанню сучасних та доступних матеріалів можна здійснювати як його виробництво, так і деструкцію органічних токсикантів. Найбільш затребуваним фотокаталітичним матеріалом як для розкладання забруднювачів, так і виробництва водню, є діоксид титану (TiO_2), головним чином у фазі анатазу. Підвищення фотокаталітичної активності передбачає формування розвиненої поверхні та зменшення ширини забороненої зони матеріалу завдяки поверхневому модифікуванню. Створення матеріалів з наведеними властивостями можливо із застосуванням плазмо-електролітного оксидування (ПЕО) сплавів титану у розчинах, які містять сполуки d-елементів, зокрема цинку. Відомо, що титанати цинку є ефективними фотокаталітичними матеріалами, але їх синтез складний та вартісний, тоді як ПЕО є найменш вартісним та найефективнішим методом. Обґрунтувати можливість синтезу титанатів цинку у процесі ПЕО можна методами фізичної хімії багатокомпонентних оксидних систем, зокрема шляхом визначення субсолідусної будови псевдотернарного перерізу $\text{Ti-TiO}_2\text{-ZnO}$.

Геометро-топологічний аналіз дозволяє формалізувати процес оксидування сплавів титану за присутності оксиду цинку. При появі у метал-оксидній системі кисню відбувається насичення титану з утворенням твердих розчинів від Ti_6O до TiO включно. За умов ПЕО (температура понад 2000°C) у псевдосистемі співіснують оксиди TiO та ZnO . При подальшому збільшенні кількості кисню як перша термодинамічно стійка сполука починає утворюватися Zn_2TiO_4 при незмінній кількості TiO . Послідовне перетворення титанатів цинку від Zn_2TiO_4 до ZnTiO_3 відповідає термодинамічному ланцюжку, характерному для подвійного перерізу $\text{TiO}_2\text{-ZnO}$. Після синтезу перовскітоподібного ZnTiO_3 оксидування титану продовжується до утворення TiO_2 . Наведені геометро-топологічні закономірності підтверджені електронно-мікроскопічними дослідженнями структурно-фазових особливостей синтезованих гетерооксидних покривів з визначенням локального елементного складу. Отримані за результатами мікрозондового аналізу співвідношення ліній спектру характерні для титану з покриттям складу $\text{ZnTiO}_3\text{-Ti}_3\text{O}_5\text{-TiO}_2$, насиченого киснем, що узгоджується з розрахунками атомного складу покриття. Електронно-мікроскопічні дослідження фіксують зародкоутворення псевдокубічних наноструктурних пірамід росту. При цьому шари іонів Zn^{2+} атомарного розміру вбудовуються у кубічну ґратку TiO_3^{2-} , утворюючи змішаний кристал з адсорбційним шаром, чим і пояснюється підвищена фотокаталітична активність допованих покривів.