

## НОВА ПОЛІМОРФНА МОДИФІКАЦІЯ МОНОСУЛЬФІДУ ТИТАНУ

*Севрюков Д.В., Сабов М.Ю., Сідей В.І., Переш Є.Ю., Соломон А.М.*

Ужгородський національний університет  
sevryukov\_dmitri@mail.ru

При вивченні особливостей фазоутворення в системі Ti–S, нами була виявлена неописана в літературі модифікація моноссульфіду титану [1]. Більш детальні дослідження показали, що ця модифікація стабільна лише до 1223 К. Вище цієї температури відбувається незворотне поліморфне перетворення з утворенням описаної в літературі ніколарсенідної модифікації моноссульфіду титану. Вірогідні структурні типи одержаного моноссульфіду титану були змодельовані програмою Powder Cell. Найбільш імовірним структурним типом виявився структурний тип  $CdI_2$  з половинною заповнюваністю позицій атомами Сульфуру. Структурні параметри були уточнені повнопрофільним методом Рітвельда, згідно яких нова модифікація TiS кристалізується у тригональній сингонії, пр.гр. P-3m1,  $a=3.6658(2)$ ,  $c=5.8323(5)$  Å,  $Z=1$ .

З метою вивчення термічної стабільності TiS на повітрі нами проведено термогравіметричний аналіз зразка. Термогравіметричні дослідження проводилися у платинових тиглях на повітрі за допомогою дериватографа системи Ф.Паулік, І. Паулік та Л.Ердеї. Швидкість нагріву і охолодження становила  $5^\circ/\text{хв}$ .

Дериватограма засвідчила багатоступінчатість процесу окиснення моноссульфіду титану в атмосфері повітря. Крива ТГ показує як втрату, так і приріст маси при окисненні.

Аналіз одержаної дериватограми показує, що в температурному інтервалі 413–508 К є висока імовірність часткового утворення TiOS, що може бути пов'язано з особливістю кристалічної структури TiS, тобто з наявністю дефектів в аніонній підгратці. Співставлення дифрактограми кінцевого продукту окиснення на повітрі і розрахованої на основі літературних даних для моноклінної модифікації TiO (прост. гр. C 2/m,  $a=5,855(3)$ ,  $b=4,142(2)$ ,  $c=9,340(5)$ ,  $\beta=107,5(0)$ ) підтверджує утворення даної модифікації оксиду титану (II). Часткове проходження процесів пояснюється динамічністю зйомки.



1. Сабов М.Ю., Переш Є.Ю., Севрюков Д.В. Особливості фазоутворення в системі Ti–S// Наук. вісник УжНУ. Серія хімія.– 2002.– вип.7.– с.19-21.