

В.Н. Шевчук¹, В.М. Белюх¹ Д.І. Попович², Ю.М. Усатенко¹
**Вплив d-іонів на спектри дифузного відбивання
нанопорошків TiO₂**

¹Львівський національний університет імені Івана Франка, вул. Драгоманова, 50, м. Львів, 79005, Україна
e-mail: shevchuk@electronics.wups.lviv.ua

²Інститут прикладних проблем механіки і математики імені Ярослава Підстригача НАН України,
вул. Наукова, 3б, м.Львів, 79060, Україна

Спектри дифузного відбивання (ДВ) нанопорошків TiO₂ (переважаюча фаза – рутил), V₂O₅, та нанокомпозити TiO₂/Cr₂O₃, TiO₂/MnO₂, TiO₂/V₂O₅ досліджені у спектральному діапазоні 400-750 нм при кімнатній температурі. d-іони контролювались методом електронного парамагнітного резонансу.

Результати вимірювань ДВ проаналізовані в рамках теорії Кубелки-Мунка. У легovanому TiO₂ спостерігався зсув краю інтенсивного оптичного поглинання, поява смуг додаткового поглинання у домішквовій області та просвітлення у нанокомпозиті TiO₂/MnO₂ в ділянці спектру 400-460 нм. Різними методами оцінено ширину забороненої зони нанопорошків TiO₂, V₂O₅ та композитів на їх основі.

Ключові слова: нанопорошок, диоксид титану, пентаоксид ванадію, d-іон, дифузне відбивання.

Стаття поступила до редакції 01.06.2010; прийнята до друку 15.12.2010.

Вступ

Порошок диоксиду титану (TiO₂), завдяки своїм фізико-хімічним властивостям, має широке технічне застосування у сучасних галузях електронної техніки та новітніх технологій [1-3]. Нанотрубки на основі TiO₂ можуть бути використані також як каталізатор для знищення ракових клітин [4]. Цілеспрямоване формування необхідних для використання фізико-хімічних властивостей нанокристалічного TiO₂, зокрема модифікація його оптичних характеристик технологічним шляхом – одна з найактуальніших задач. На оптичні характеристики TiO₂ впливають: відхилення від стехіометрії та пов'язане з цим власнодефектне розпорядкування, стан поверхні, яка у нанопорошку є значною, адсорбційні процеси, введення у процесі синтезу як металів (перехідних [5 - 7] та рідкісноземельних [8 - 9]), так і неметалічних іонів [10] тощо. Однак, фізичні процеси при утворенні нанокомпозиту та супроводжуюче дефектоутворення у нанокристалічному TiO₂, незважаючи на наявні дослідження [5 - 10] у поєднанні з технологією отримання, вивчені недостатньо. Дослідження нанорозмірних ефектів знаходяться на стадії накопичення експериментальних даних.

Входження перехідних іонів суттєво впливає як на край оптичного поглинання, так і викликає певні особливості у домішквовій області оптичних спектрів композиту на основі нано-TiO₂. Такі зміни важливі

для цілеспрямованого формування властивостей нанопорошку двоокису титану відповідно до практичних потреб.

В даній роботі проведено дослідження спектрів дифузного відбивання нанокристалічного TiO₂, номінально чистого та з домішками перехідних металів Cr, Mn, або V а також нанокристалічного V₂O₅. Контроль перехідних іонів у парамагнітному стані здійснювався методом електронного парамагнітного резонансу (ЕПР).

I. Методика досліджень

Вимірювання проведені при кімнатній температурі на повітрі. Спектри дифузного відбивання (ДВ) отримані за двопрменевою методикою з використанням інтегруючої сфери на базі спектрофотометра СФ-10 в діапазоні довжин хвиль $\lambda = 400 - 750$ нм. В рамках спектроскопії ДВ, застосовуваної до нанопорошків, залежність коефіцієнта ДВ $R(\lambda)$ в моделі Кубелки-Мунка [11, 12] трансформували у функцію:

$$F(R) = (1-R)^2 / 2R = k/s, \quad (1)$$

де k та s – коефіцієнти поглинання та розсіяння світла дисперсної системи, відповідно, які вважаємо однаковими для прямого та зворотнього потоків світла. Як слідує з (1), форма кривої спектральної залежності функції $F(R)$ у припущенні оптично товстого шару і слабкої залежності $s(\lambda)$ близька до

спектру оптичного поглинання зразка.

Ширину забороненої зони E_g для досліджених зразків, як і у працях [13, 14], визначали двома способами: за спектрами ДВ та за спектральною залежністю функції $F(R)$. Беручи до уваги застереження авторів [13, 14], можемо стверджувати, що у першому випадку отримуємо оцінку верхньої межі значення E_g , а відповідно в другому – нижньої.

Зразки для досліджень були отримані золь-гель методом. Введення модифікуючих домішок проводили шляхом імпульсного лазерного випромінювання мішені матеріалу [15]. Застосована методика дозволяє виготовляти композитний порошок із середньгеометричним діаметром зерна 5-10 нм і питомою поверхнею 80 - 190 м²/г.

У даній роботі досліджені нанопорошки TiO₂ (переважаюча фаза – рутил), нанокompозити TiO₂/Cr₂O₃, TiO₂/MnO₂, TiO₂/V₂O₅ та V₂O₅. Присутність d-іонів у нанокompозитах контролювалась методом ЕПР, радіоспектретр метр X-діапазону типу PE-1306. Вміст модифікуючого складника у TiO₂ становив 3 ваг.%. Нанокompозит TiO₂/V₂O₅ досліджено також з вмістом 10 ваг.% V₂O₅. Площа питомої поверхні досліджених зразків становила близько 150 м²/г. Дослідження у випадку нанопорошку V₂O₅ розміри зерен були різними. Для виявлення розмірного ефекту на спектри ДВ V₂O₅ вимірювання проведені на порошках з розмірами зерен $\langle d \rangle = 80 \div 100$ нм та на суміші з широким набором розмірів об'єктів ДВ. Фракції нанопорошків з визначеним розміром зерна отримували заснованим на законі Стокса седиментаційним методом [16] осадження порошку у дистильованій воді. Після осадження порошку протягом розрахункового часу проводили відбір проби з наступним висушуванням.

II. Результати експерименту та їх обговорення

При кімнатній температурі у нанокompозитах TiO₂/Cr₂O₃, TiO₂/MnO₂, TiO₂/V₂O₅ зафіксовані сигнали ЕПР, які за попереднім аналізом можуть бути зіставлені з центрами Cr⁵⁺, Mn⁴⁺, V⁴⁺ відповідно. У чистому V₂O₅ також спостерігався сигнал ЕПР, форма та спектральне положення якого близькі до таких у нанокompозиті TiO₂/V₂O₅.

Спектри ДВ нанопорошків TiO₂, TiO₂/Cr₂O₃, TiO₂/MnO₂, TiO₂/V₂O₅, V₂O₅ показані на рис. 1. Відбивна здатність у домішкочивій області спектру чистого TiO₂, як бачимо, найбільша у порівнянні з іншими зразками. Введення d-іонів (Cr, Mn, V) викликає зміни у спектрі ДВ нанокompозиту по відношенню до чистого TiO₂. При цьому в домішкочивій області 440-700 нм формуються широкі неелементарні смуги відбивання/поглинання (рис. 1, 2). З цього огляду особливо ілюстративний нанокompозит TiO₂/V₂O₅. Зростання процентного вмісту ванадію у ньому приводить (рис. 3) до

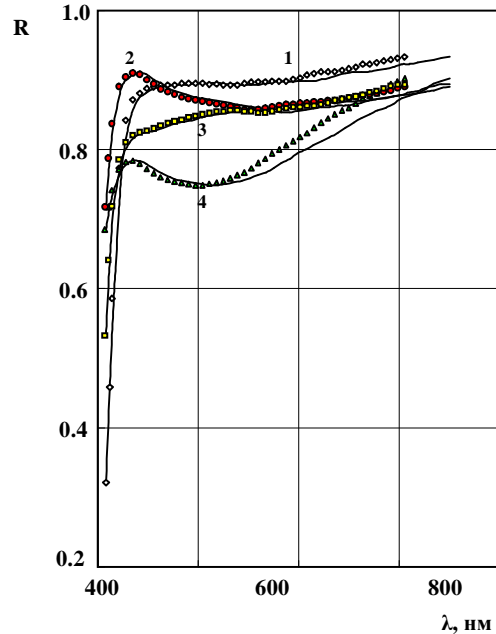


Рис. 1. Спектри ДВ нанопорошків TiO₂ та нанокompозитів на його основі при 295 К. Крива 1 – TiO₂; 2 – TiO₂/MnO₂; 3 – TiO₂/Cr₂O₃; 4 – TiO₂/V₂O₅.

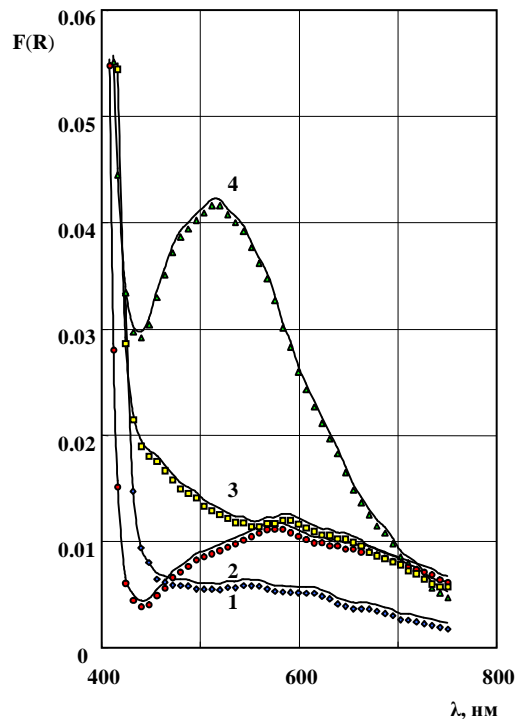


Рис. 2. Спектральні залежності функції Кубелки-Мунка для нанопорошків TiO₂ та нанокompозитів на його основі. Крива 1 – TiO₂; 2 – TiO₂/MnO₂; 3 – TiO₂/Cr₂O₃; 4 – TiO₂/V₂O₅.

зменшення відбивної здатності, розмиттю краю поглинання вихідної сполуки та перехід до спектру стовідсоткового п'ятиокису ванадію, який має меншу ширину забороненої зони порівняно з двоокисом титану. У табл. 1 зведено експериментальні дані по

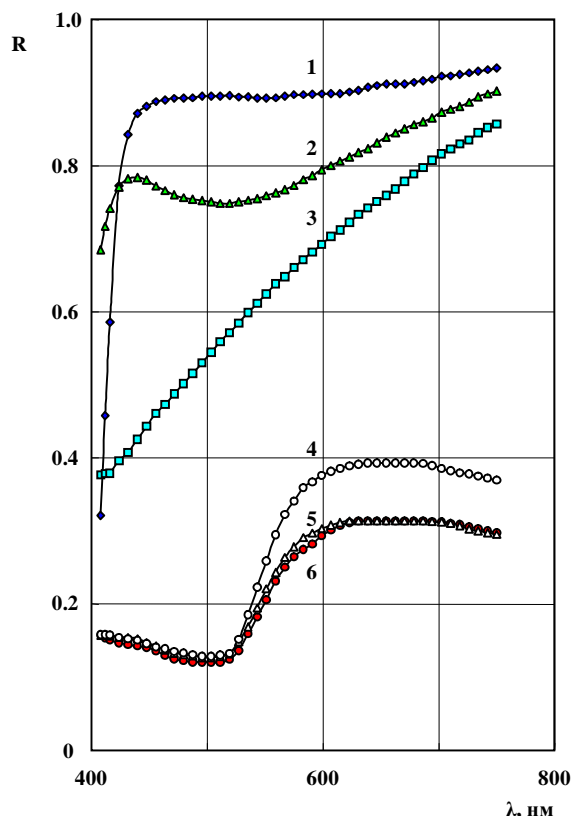


Рис. 3. Спектри ДВ нанопорошків TiO₂/xV₂O₅ при 295 К. Крива 1 – x = 0; 2 – x = 3 ваг.%; 3 – x = 10 ваг.%. Криві 4 – 6 відповідають V₂O₅ з різним розміром зерна: 5 – < d > = 100 нм; 6 – 80 нм; 4 – суміш фракцій з різними значеннями < d >.

визначенню ширини забороненої зони досліджених композитів і нелегованого TiO₂, а для порівняння вказано також значення E_g, взяті з відповідних публікацій.

В області власного поглинання легованого TiO₂ спостерігаємо зсув кривої R(λ) в короткохвильову область – ефект Бурштейна–Мосса. У цьому випадку слід припустити збільшення концентрації носіїв заряду, заповнення енергетичних рівнів біля дна зони провідності та достатньо великі часи локалізації [18]. У наноматеріалах свій внесок у зсув краю може також давати значний поверхневий заряд. При великих концентраціях домішки внаслідок появи

квазінеперервного набору локальних рівнів біля краю величина E_g зменшується. Тобто зміни E_g визначатимуться компромісом вказаних чинників. Ефект короткохвильового зсуву краю інтенсивного поглинання є добре спостережуваний у нанокompозиті TiO₂/MnO₂ і для зазначеної концентрації домішки становить (за даними табл. 1) близько 0,1 еВ. У прикорайовій ділянці спектру 400 – 450 нм спостерігаємо (рис. 1) збільшення значень R(λ) для нанопорошку TiO₂/MnO₂ у порівнянні з TiO₂. На спектрі поглинання (рис. 2) це відповідає просвітленню зразка у вказаній спектральній ділянці.

Введення 3 ваг.% інших d-металів (Cr, V), як показали дослідження, викликає додаткове поглинання, а зсув краю при цьому – незначний. Подібні закономірності у спектрах ДВ отримані авторами в [5, 6, 7] по дослідженню TiO₂/Cr₂O₃, TiO₂/MnO₂, TiO₂/V₂O₅ відповідно, для нанопорошків, отриманих відмінними від застосованого нами способами.

Зміни положення краю зона-зонних переходів можуть зумовлюватися також розмірним ефектом за рахунок значної питомої поверхні нанопорошку та механічними напруженнями, властивими нанодисперсним системам. В експериментах питома поверхня для зразків була однаковою, тому внесок розмірного ефекту у зсув краю припускаємо близьким для кожного зразка. Іонні радіуси титану та досліджених d-іонів (важливо при заміщенні у гратці) відрізняються незначно [19]: для Ti⁴⁺ його величина становить 0.0605, V⁵⁺ – 0.0540, Cr³⁺ – 0.0615, Mn⁴⁺ – 0.0540. Основні відмінності, очевидно, в особливостях зовнішніх електронних оболонок катіонів, їхньому валентному стані, активності зовнішніх електронів а також можливій наявності у певному співвідношенні d-іонів різної валентності у нанопорошках, про що частково свідчать результати досліджень ЕПР. З іншої сторони ширина забороненої зони у нанокompозитах чутлива до енергетики електронно-діркових переходів та розмірів зерен у кожному складнику зокрема (див., напр., працю [20]), що у свою чергу дає можливість формувати системи з прогнозованою енергетикою електронно-діркових переходів.

Для нанокompозиту TiO₂/V₂O₅ при детальному розгляді широкої смуги додаткового поглинання 435 - 700 нм (рис. 2) можна виділити елементарні

Таблиця 1

Значення ширини забороненої зони E_g нанопорошків TiO₂ та нанокompозитів на його основі при 295 К, отримані за спектрами ДВ (E_{g1}), за спектральною залежністю F(R) (E_{g2}) та подані за публікаціями різних авторів (E_{g3}).

№п /п	зразок	E _{g1} , eV	E _{g2} , eV	E _{g3} , eV
1	TiO ₂	3.13	2.97	3.2 [8]; >3.0 [10]; 3.1 [15]; 2.96-2.97 [17]
2	TiO ₂ /MnO ₂	3.23	3.03	-
3	TiO ₂ /Cr ₂ O ₃	3.18	3.02	-
4	TiO ₂ /V ₂ O ₅	3.19	3.02	-

локальні максимуми, спектральне положення яких

Таблиця 2

Максимуми поглинання у спектрах $F(R)$ нанопорошків TiO_2 чистого та з добавкою 3 ваг.% легуючих компонент d–металів (відповідно до рис. 2).

№п/п	зразок	обл. додатк. погл., нм	локальні смуги, нм
1	TiO_2	-	551, 615, 670, 718
2	TiO_2/MnO_2	(400-460)* 460-750	- 520, 590, 650
3	TiO_2/Cr_2O_3	440-750	456, 585, 646
4	TiO_2/V_2O_5	440-750	485, 515, 567, 630

(*) – область просвітлення.

Таблиця 3

Числова оцінка ширини забороненої зони E_g нанопорошків V_2O_5 при 295 К. участком кривої ДВ. Значення E_{g1} – за спектром $R(\lambda)$, E_{g0} – за початком прямолінійної ділянки залежності $\ln F=f(E)$, E_{g3} – за літературними даними

№п/п	<d>, нм	E_{g1} , eV	E_{g0} , eV	E_{g3} , eV
1	суміш фракцій	2.10	2.19	-
2	100	2.08	2.20	-
3	80	2.10	2.19	-
4	літерат. дані	-	-	2.05 [7]; 2.2 [23]; ~2.3(exp.) та ≥ 3.0 (calc.) [24] – монокристал.

занесено у табл. 2. Смуга додаткового поглинання 440-750 нм для нанопорошку TiO_2/MnO_2 містить три розмиті локальні максимуми (див. табл. 2). У випадку TiO_2/Cr_2O_3 при вказаному значенні вмісту легуючої домішки спостерігаємо майже безструктурне наростання поглинання у прикраєвій ділянці спектру з формуванням неінтенсивних смуг в домішковій області. Встановлення природи локальних смуг у домішковій області спектрів ДВ легованого TiO_2 потребує додаткових досліджень.

При збільшенні добавки ванадію (рис. 3) спостерігаємо розмиття смуг мінімуму та максимуму відбивання, аномальне затягування різкого зменшення значень $R(\lambda)$ у прикраєвій ділянці спектру та перехід кривої ДВ у спектр для чистого V_2O_5 . Цілком закономірно, що точка ($\lambda \sim 520$ нм) початку різкого наростання значень $R(\lambda)$ (рис. 3, криві 4 - 6) відповідає мінімуму на кривій $R(\lambda)$, що відповідає $TiO_2/(3\% V_2O_5)$.

Як показали експерименти, спектри ДВ (рис. 3, криві 4 - 6) залежать від розміру зерна. Для виділених фракцій в області $\lambda > 550$ нм спостерігаємо зміну значень $R(\lambda)$ нанопорошку V_2O_5 порівняно з сумішшою фракцій, при $\lambda < 550$ нм функція $R(\lambda)$ зніюється мало. Відмінність $\langle d \rangle$ для досліджених фракцій порошку V_2O_5 не відбивається на кривій $R(\lambda)$ в ділянці 620 – 710 нм. У всіх випадках V_2O_5 спостерігаємо у цій ділянці спектру постійні значення $R(\lambda)$.

Рис. 4 ілюструє спосіб визначення значень E_g (табл. 3) нанопорошків V_2O_5 . Як бачимо спектральна залежність функції $F(R)$ у напівлогарифмічних координатах в області зона-зонних переходів має прямолінійну ділянку. Це узгоджується із загальним висновком [21], що при даній температурі Т динаміка оптичних електронних збуджень підлягає

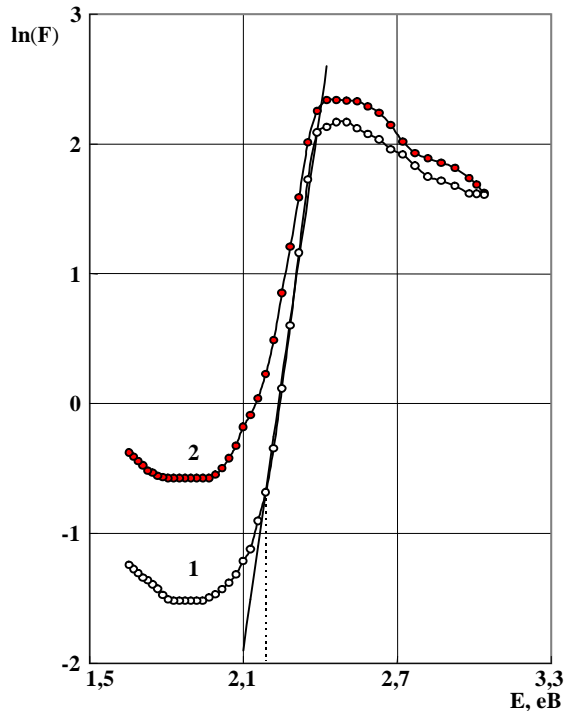


Рис. 4. Спектральна залежність функції Кубелки-Мунка для нанопорошків V_2O_5 у напівлогарифмічних координатах. Крива 1 відповідає V_2O_5 з широким набором значень $\langle d \rangle$, 2 – $\langle d \rangle = 100$ нм. Продемонстровано спосіб оцінки ширини забороненої зони (E_{g0}) за проекцією точки початку експоненційної ділянки кривої $\ln F(R) = f(E)$ на вісь енергій.

оптичних електронних збуджень підлягає

експоненційному співвідношенню (правилу Урбаха)

$$k = k_0 \exp[-\sigma(\hbar\omega - \hbar\omega_0)/k_B T], \quad (2)$$

де $\hbar\omega = E$ – енергія фотонів, k_0 , $\hbar\omega_0$ – сталі, k_B – стала Больцмана, σ – параметр, загалом залежний від T і енергії фононів, які беруть участь у формуванні краю поглинання. Отримані згідно методики [22] та за експоненційним участком (табл. 3) значення E_g можемо, як і для TiO₂, вважати оцінками знизу та зверху відповідно.

Висновки

Отже, результати проведених досліджень стверджують, що введення d-іонів у нанопорошок TiO₂ суттєво впливає на його оптичні характеристики, зокрема на спектри ДВ. Відбивну здатність та ширину забороненої зони отриманого нанокompозиту при такому легуванні, як показують експериментальні дані, можна змінювати і спостерігати при цьому довгохвильовий (у великих кількостях V₂O₅) та короткохвильовий (≤ 3 ваг.% MnO₂) зсуви інтенсивного поглинання оптичного

випромінювання. Оцінка значень ширини забороненої зони нанопорошків дає дещо відмінні результати у залежності від способу обробки даних, моделі електронних переходів, які формують край. Тому, з огляду також на чутливість E_g до технології зразків, навіть для одного і того самого хімічного складу нанопорошку дані різних авторів не будуть тотожними.

Шевчук В.Н. - кандидат фіз.-мат. наук, старший науковий співробітник кафедри фізики напівпровідників, факультету електроніки ЛНУ ім. І.Франка, зав. лабораторією окисних кристалів;

Белюх В.М. - науковий співробітник кафедри фізики напівпровідників, факультету електроніки ЛНУ ім. І.Франка;

Попович Д.І. - кандидат фіз.-мат. наук, старший науковий співробітник ІППММ НАН України ім. Я.Підстригача;

Усатенко Ю.М. – молодший науковий співробітник науково-технічного центру низькотемпературних досліджень ЛНУ ім. І.Франка. .

- [1] A.G. Contos, A. Katsanaki, T. Maggos, V. Likodimos, A. Ghicov, D. Kim, J. Kunze, C. Vasilakos, P. Schmuki, P. Falaras. Photocatalytic degradation of gas pollutants on self-assembled titania nanotubes // *Chem. Phys. Letters*, **490** (1-2), pp. 58-62 (2010).
- [2] З.Р. Исмагилов, Л.Т. Цикоза, Н.В. Шикина, В.Ф. Зарытова, В.В. Зиновьев, С.Н. Загребельный. Синтез и стабилизация наноразмерного диоксида титана // *Успехи химии*, **78** (9), сс. 942-955 (2009).
- [3] А.Я. Барияк, Х.С. Бесага, Я.В. Бобицкий, Я.И. Вахула. Нанопотокатализаторы на основе титана (IV) оксиду: синтез та властивості (Огляд) // *Фізика і хімія твердого тіла*, **10** (3), сс. 515-523 (2009).
- [4] M. Kalbacova, J.M. Macak, F. Schmidt-Stein, C.T. Mierke, P. Schmuki. TiO₂ nanotubes: photocatalyst for cancer cell killing // *Phys. stat. sol. (RRL)*, **2** (4), pp. 194-196 (2008).
- [5] A. Trenczek-Zajac, M. Radecka, M. Jasinski, K.A. Michalow, M. Rekas, E. Kusior, K. Zakrewska, A. Heel, T. Graule, K. Kowalski. Influence of Cr on structural and optical properties of TiO₂:Cr nanopowders prepared by flame spray synthesis // *J. Power Sources*, **194** (1), pp. 104-111 (2009).
- [6] Li Shunjum, Ma Zichuan, Zhang. Jic, Liu Jinge. Photocatalytic activity of TiO₂ and ZnO in the presence of manganese dioxides // *Catal. Comm.*, **9** (6), pp. 1482-1486 (2008).
- [7] Liu Jianchua, Jang Rong, Li.Songmei. Synthesis and photocatalytic activity of TiO₂/V₂O₅ composite catalyst doped with rare earth ions // *J. Rare Earths*, **25** (2), pp. 173-178 (2007).
- [8] S. Pavasuprec, Y. Suzuki, S. Pivsa-Art, S. Yoshikawa. Preparation and characterization of mesoporous TiO₂-CeO₂ nanopowders respond to visible wavelength // *J. Sol. State Chem.*, **128**, pp. 128-134 (2005).
- [9] Fan Cai-mei, Tang Qi, Wang Yun-tiang, Hao Xiao-gang, Liang Zhen-hai, Sun Yan-ping. Effect of Er³⁺ dopant on microstructure and photocatalytic property of nano-TiO₂ // *Trans. Nonferrous Met. Soc. China*, **17**, pp. 716-720 (2007).
- [10] S.T. Hussain, K. Khan, R. Hussain. Size control synthesis of sulfur doped titanium dioxide (anatase) nanoparticles, its optical property and its photocatalytic reactivity for CO₂+H₂O conversion and phenol degradation // *J. Natural Gas Chem.*, **18** (4), pp. 1-9 (2009).
- [11] Г.Кортюм, В.Браун, Г.Герцог. Принципы и методы измерения в спектроскопии диффузного отражения // *УФН*, **85** (2), сс. 365-380 (1965).
- [12] В.М. Иванов, И.И. Ершова. Спектроскопия диффузного отражения иммобилизованных на силикагеле комплексов никеля с диметилглиоксимом и бензилдиоксимом // *Вестн. Моск. Ун-та. сер. 2. Химия*, **40** (1), сс. 22-26 (1999).
- [13] М.М. Михайлов. Влияние потока электронов на ширину запрещенной зоны рутила при 77 К // *Неорганич. материалы*, **40** (10), сс. 1203-1207 (2004).
- [14] М.М. Михайлов, А.С. Вережкин. Изменение ширины запрещенной зоны порошков диоксида циркония при перетирании // *Изв. вузов. Физика*, **47** (6), сс. 22-26 (2004).

- [15] Б.К. Котлярчук, І.Ф. Миронюк, Д.І. Попович, А.С. Середницький. Одержання нанопорошкових окисних матеріалів та дослідження їх люмінесцентних властивостей // *Фіз. хім. твердого тіла*, **7** (3), сс. 490-494 (2006).
- [16] М.М. Михайлов, В.А. Власов. О размерном эффекте оптических свойств порошков TiO_2 // *Изв. вузов. Физика*, **41** (12), сс. 52-58 (1998).
- [17] М.М. Михайлов. зависимость оптических свойств от удельной поверхности и размеров зерен порошков TiO_2 // *Журн. прикл. спектроскопии*, **73** (1), сс. 73-77 (2006).
- [18] Ю.И. Уханов. *Оптические свойства полупроводников*. Наука, М. 366 с. (1977).
- [19] Ю.Д. Третьяков, Х. Лепис. *Химия и технология твердофазных материалов*. Изд-во Моск. Ун-та, М. 256 с. (1985).
- [20] А.И. Крюков, С.Я. Кучмий, В.Д. Походенко. Энергетика электронных процессов в полупроводниковых фотокаталитических системах // *Теорет. и эксперим. Химия*, **36** (2), сс. 69-89 (2000).
- [21] М.В. Курик. Правило Урбаха в оптиці конденсованого стану // *Укр. фіз. журн.*, **39** (11-12), сс. 1058-1063 (1994).
- [22] Б.Ф. Біленький, Р.Я. Волощук, Ю.В. Данилюк. *Оптика напівпровідників: Методи дослідження*. Ч. 2. Ред.-вид. відділ Львів. ун-ту, Львів. 87 с. (1998).
- [23] О.П. Виноградов, А.И. Сидоров, В.А. Климов, Е.Б. Шадрин, А.В. Нащекин, С.Д. Ханин, В.Ю. Любимов. Особенности формирования микро- и нанокристаллов оксидов ванадия при газофазном методе синтеза // *Физ. тверд. тела*, **50** (7), сс. 1177-1183 (2008).
- [24] L. Fiermans, P. Clauws, W. Lambrecht, L. Vandenbroucke, J. Vennik. Single crystal V_2O_5 and lower oxides. A survey of their electronic, optical, structural, and surface properties // *Phys. stat. sol. (a)*, **59** (2), pp. 485-504 (1980).

V.N. Shevchuk¹, V.M. Belyukh¹, D.I. Popovych², Yu.N. Usatenko¹

Influence of D-Ions on Diffuse Reflectance Spectra of TiO_2 Nanopowders

¹Lviv Ivan Franko National University, 50 Dragomanov Str., Lviv, 79005, Ukraine

e-mail: shevchuk@electronics.wups.lviv.ua

²Yaroslav Pidstryhach Institute of Applied Problems of Mechanics and Mathematics NASU, 3b Naukova Str., Lviv 79060, Ukraine

Diffuse reflectance spectra (DR) of nanopowders TiO_2 (dominate phase is rutile), V_2O_5 , and nanocomposites $\text{TiO}_2/\text{Cr}_2\text{O}_3$, $\text{TiO}_2/\text{MnO}_2$, $\text{TiO}_2/\text{V}_2\text{O}_5$ in spectral region 400-750 nm at room temperature were investigated. The d-ions were controlled by electron paramagnetic resonance method.

The experimental data were analyzed in the frame of Kubelka-Munk theory. In doped TiO_2 the shift of intensive optical absorption edge, the appearance of addition absorption bands in extrinsic region, and fading in spectral area 400-460 nm for nanocomposite $\text{TiO}_2/\text{MnO}_2$ were registered. The band gap of TiO_2 , V_2O_5 , and nanocomposites based on these powders were evaluated by difference methods.