

NAMANGAN DAVLAT
UNIVERSITETI
ILMIY AXBOROTNOMASI, [2026-9]
ISSN:2181-1458
ISSN:2181-0427



01.00.00-FIZIKA-MATEMATIKA
journal.namdu.uz
PHYSICS AND MATHEMATICS

МОРФОЛОГИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ОБЪЁМНЫХ ДЕФЕКТОВ И МЕЖСЛОЙНЫХ НАРУШЕНИЙ В ФОТОАНОДАХ НА ОСНОВЕ TiO_2

Абдулазизов Бахром Тошмирза угли

Наманганский государственный университет, профессор

Шарипбаев Собитхон Собир угли

Наманганский государственный технический университет

ORCID: 0009-0009-2269-7711

E-mail: Sharipbayev1999@mail.ru

Эргашов Абдурасул Кодиржонович

Наманганский государственный технический университет

ORCID: 0000-0002-6141-0017

E-mail: e.abdurasul@nstu.uz

Турсунбоев Рахимжон Ибодулло угли

Школа № 28, Касансайский район

ORCID: 0009-0005-2393-8362

E-mail: tursunboyevrahimjon215@gmail.com

Аннотация: В работе выполнен вторичный морфологический анализ предоставленных авторами томографических материалов по однослойным и двухслойным фотоанодам TiO_2 . Рассмотрены локальные пустоты, включения и нарушения непрерывности межфазных границ. Предложена схема описания объектов, объединяющая их положение относительно слоя, характер томографического контраста, геометрические размеры и условия обнаружения. Для условного сочетания ранее приведённых ориентировочных размеров пустот — 110 мкм по диаметру и 30 мкм по глубине — получено отношение около 0,27. Для включения с указанными размерами $72 \times 345 \times 400$ мкм получены отношения габаритов 5,56 и 1,16. Эти величины характеризуют соотношения исходных размеров и не заменяют трёхмерную сегментацию. Разграничены микрометровые структурные неоднородности и функциональная нанопористость фотоанода. Показана необходимость учитывать механическое надрезание при интерпретации наблюдаемого расслоения. Результат анализа представлен системой морфологической классификации и границами допустимой интерпретации исходных данных; новые экспериментальные измерения не проводились. Предложены параметры для последующей количественной оценки формы и связности дефектов при наличии исходных реконструкций и сведений о пространственном разрешении.

Ключевые слова: TiO_2 ; фотоанод; рентгеновская томография; морфология; объёмные дефекты; включения; межфазная граница; расслоение; вторичный анализ

TiO_2 ASOSIDAGI FOTOANODLARDA HAJMIY NUQSONLAR VA QATLAMLARARO BUZILISHLARNING MORFOLOGIK TAHLILI

Annotatsiya: Ushbu ishda mualliflar tomonidan taqdim etilgan bir va ikki qatlamli TiO_2 fotoanodlarning tomografik materiallari asosida ikkilamchi morfologik tahlil amalga oshirildi. Lokal bo' shliqlar, qo' shilmalar va fazalararo chegaralar uzluksizligining buzilishlari ko' rib chiqildi. Obyektlarni tavsiflash uchun ularning qatlamga nisbatan joylashuvi, tomografik kontrast xususiyati, geometrik o' lchamlari va aniqlanish sharoitlarini birlashtiruvchi tavsiflash sxemasi taklif etildi. Avval keltirilgan bo' shliqning shartli o' lchamlari — diametri 110 mkm va chuqurligi 30 mkm — uchun taxminan 0,27 ga teng nisbat olindi. $72 \times 345 \times 400$ mkm o' lchamli qo' shilma uchun gabaritlar nisbatlari 5,56 va 1,16 ni tashkil etdi. Ushbu qiymatlar boshlang' ich o' lchamlarning o' zaro nisbatlarini tavsiflaydi va uch o' lchamli segmentatsiyani almashtirmaydi. Mikrometr miqyosidagi strukturaviy notekisliklar bilan fotoanodning funksional nanog' ovakliligi o' zaro farqlab ko' rsatildi. Kuzatilgan qatlam ajralishini talqin qilishda mexanik nadrezning ta'sirini hisobga olish zarurligi ko' rsatildi. Tahlil natijalari morfologik tasnif tizimi va dastlabki ma'lumotlarni talqin qilishning ruxsat etilgan chegaralari ko' rinishida taqdim etildi; yangi eksperimental o' lchovlar bajarilmadi. Dastlabki rekonstruksiya va fazoviy aniqlik haqidagi ma'lumotlar mavjud bo' lganda, nuqsonlarning shakli va bog' langanligini keyinchalik miqdoriy baholash uchun parametrlar taklif etildi.

Kalit soʻzlar: TiO_2 ; fotoanod; rentgen tomografiyasi; morfologiya; hajmiy nuqsonlar; qoʻ shilmalar; fazalararo chegara; qatlam ajralishi; ikkilamchi tahlil.

MORPHOLOGICAL ANALYSIS OF VOLUMETRIC DEFECTS AND INTERLAYER DISCONTINUITIES IN TiO_2 -BASED PHOTOANODES

Abstract: This study presents a secondary morphological analysis of tomographic materials provided by the authors for single-layer and bilayer TiO_2 photoanodes. Local voids, inclusions, and discontinuities at interfacial boundaries were examined. A descriptive framework was proposed that combines the position of the objects relative to the layer, the nature of the tomographic contrast, geometric dimensions, and detection conditions. For a representative combination of previously reported void dimensions, namely a diameter of $110\ \mu\text{m}$ and a depth of $30\ \mu\text{m}$, an aspect ratio of approximately 0.27 was obtained. For an inclusion with dimensions of $72 \times 345 \times 400\ \mu\text{m}$, the corresponding dimensional ratios were 5.56 and 1.16. These values describe the relationships between the original dimensions and do not replace three-dimensional segmentation. Micrometer-scale structural heterogeneities were distinguished from the functional nanoporous structure of the photoanode. The need to account for mechanical notching when interpreting the observed delamination was demonstrated. The results are presented as a system of morphological classification and as limits on the admissible interpretation of the source data; no new experimental measurements were performed. Parameters are proposed for subsequent quantitative assessment of defect shape and connectivity when the original reconstructions and information on spatial resolution are available.

Keywords: TiO_2 ; photoanode; X-ray tomography; morphology; volumetric defects; inclusions; interfacial boundary; delamination; secondary analysis.

Введение

Морфология фотоанода включает пространственное расположение материала, геометрию внутренних полостей и состояние границ между функциональными слоями. При исследовании TiO_2 необходимо разделять особенности строения на разных масштабах: отдельные частицы и межчастичные промежутки, локальные микрометровые неоднородности, а также конфигурацию покрытия в пределах всей подложки. Описание только внешнего вида поверхности не определяет внутреннюю связность материала. Поэтому анализ сечений и объёмных реконструкций представляет самостоятельную задачу структурной диагностики. Общие принципы объёмной характеристики и ограничения количественного анализа рассмотрены в работах [3, 4].

В предоставленном томографическом материале [1] рассмотрены однослойные и двухслойные покрытия TiO_2 и приведены примеры пустот, включений и локального отделения покрытия от основания. В дополнительной работе [2] обсуждаются методы адгезионной диагностики. Совместное рассмотрение этих материалов позволяет уточнить, какие признаки характеризуют геометрию нарушения, а какие требуют самостоятельных механических испытаний. Различие особенно существенно для участков, визуализированных после надрезания: их состояние зависит одновременно от исходной структуры и приложенного воздействия.

Цель настоящей работы — систематизировать морфологические признаки неоднородностей фотоанода и определить набор параметров для их корректного описания. Самостоятельный вклад заключается в классификационной схеме, разграничении плоских и объёмных характеристик и проверке интерпретируемости ранее приведённых размеров. Исследование является вторичным анализом авторских материалов.

Материалы и методы анализа

Основным источником служила предоставленная рукопись о трёхмерном томографическом исследовании TiO_2 [1]. Согласно её описанию, реконструкции получены методом микрофокусной рентгеновской компьютерной томографии. Для настоящей работы использованы текстовые сведения о размерах неоднородностей и доступные иллюстрации. Исходные объёмы, полные серии сечений, маски сегментации, параметры реконструкции и размер вокселя не предоставлены. Поэтому повторная сегментация, оценка числа объектов и независимая проверка их абсолютных размеров не выполнялись.

Объекты распределены по трём группам: локальные пустоты, включения или области изменённого контраста и нарушения межфазной непрерывности. Для каждой группы отдельно учитывались положение относительно покрытия, обозначение размеров в источнике, доступность трёхмерного подтверждения и условия получения изображения. Термин «включение» используется в соответствии с исходным описанием; химический состав такого объекта по представленным данным не установлен. При различении фаз следует учитывать, что томографический контраст сам по себе не является химическим анализом.

Расчётная часть ограничена безразмерными отношениями ранее приведённых размеров. Для пустоты использовано отношение глубины h к диаметру d : $k = h/d$. Для включения рассмотрены отношения максимального габарита к минимальному и промежуточному: $R_1 = l_{\text{max}}/l_{\text{min}}$ и $R_2 = l_{\text{max}}/l_{\text{mid}}$. Они вычисляются непосредственно

из исходных чисел. Ориентация указанных габаритов относительно подложки не установлена, поэтому обозначения «толщина», «длина вдоль слоя» и «высота над слоем» им не присваивались.

Измерительная неопределённость исходных размеров неизвестна. Полученные отношения округлены и трактуются как описательные оценки, а не как статистически подтверждённые характеристики совокупности дефектов. Не определялись объёмная доля пустот, удельная поверхность, плотность включений и доля нарушенного контакта. Для этих показателей необходимы известный объём наблюдения, согласованная сегментация и информация о пределах обнаружения.

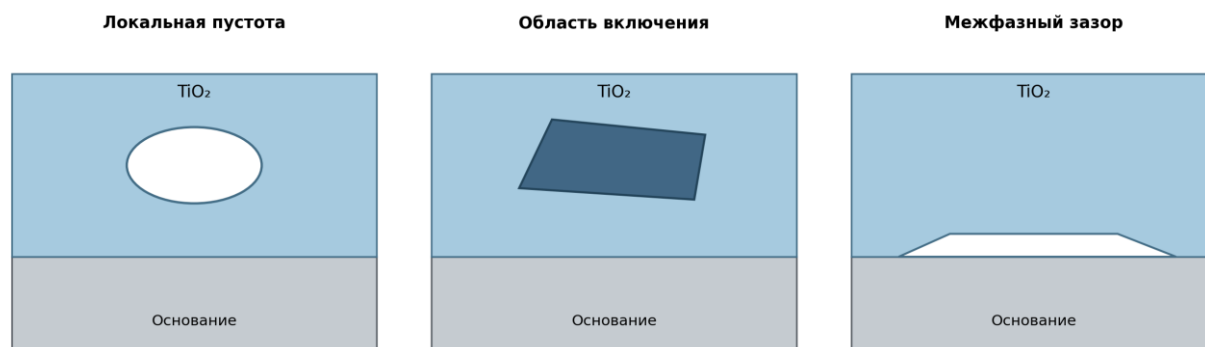


Рисунок 1. Иллюстративная схема морфологических неоднородностей.

Морфология локальных пустот

В исходной рукописи указаны пустоты глубиной около 30 мкм и диаметром до 110 мкм [1]. Для условного сочетания этих ориентировочных размеров отношение k составляет $30/110 \approx 0,27$. Таким образом, приведённый поперечный размер превышает глубину приблизительно в 3,7 раза. Это расчётный ориентир: принадлежность обеих величин одному и тому же объекту в исходном описании однозначно не установлена. Оно не доказывает, что объект имеет форму цилиндра, сферического сегмента или эллипсоида, поскольку полный контур и способ определения диаметра неизвестны.

При дальнейшей обработке реконструкций необходимо различать закрытую внутреннюю полость, углубление, выходящее на внешнюю поверхность, и пустоту, соединённую с межфазным зазором. В отдельном сечении такие объекты могут выглядеть сходно. Присвоение категории «закрывающая пора» требует прослеживания границы объекта в трёх измерениях. Аналогично, наблюдаемая на изображении тёмная область должна быть проверена по соседним сечениям, чтобы исключить ошибочную интерпретацию края покрытия или артефакта реконструкции.

Описанные микрометровые пустоты необходимо отделять от нанопористой структуры, связанной с межчастичными промежутками фотоанода. Численное значение общей пористости нельзя получить из размеров одной крупной полости. Также отсутствие видимых пустот в доступной иллюстрации не означает отсутствия пор меньшего масштаба. Без данных о разрешении допустимо обсуждать только объекты, представленные в исходных материалах; полнота их обнаружения остаётся неопределённой.

Включения и анизотропия указанных габаритов

Для включения в исходном материале приведены размеры около $72 \times 345 \times 400$ мкм [1]. Соответствующие отношения составляют $R_1 = 400/72 \approx 5,56$ и $R_2 = 400/345 \approx 1,16$. Два больших размера близки между собой и заметно превышают третий. Это указывает на выраженное различие указанных габаритов, однако не определяет форму поверхности объекта. В частности, термины «пластинчатое включение» или «дискообразный агломерат» требуют подтверждения полной реконструкцией.

Дополнительной проверки требует положение объекта по отношению к границам покрытия. Минимальный указанный габарит нельзя автоматически считать размером, направленным по нормали к подложке. Объект может выступать над поверхностью, пересекать несколько слоёв либо иметь наклонную ориентацию. Поэтому утверждение о полном погружении включения в конкретный слой требует сопоставления координат его границы с обеими поверхностями этого слоя.

Морфологическая классификация должна также отделять постороннее включение от локального уплотнения или агломерата исходного материала. Для установления состава необходим независимый метод, например элементный микроанализ соответствующей области. По имеющимся данным нельзя заключить, что объект является загрязнением определённого химического состава или электрически активным центром. Произведение трёх габаритов не принимается за фактический объём включения, поскольку степень заполнения ограничивающего параллелепипеда неизвестна.

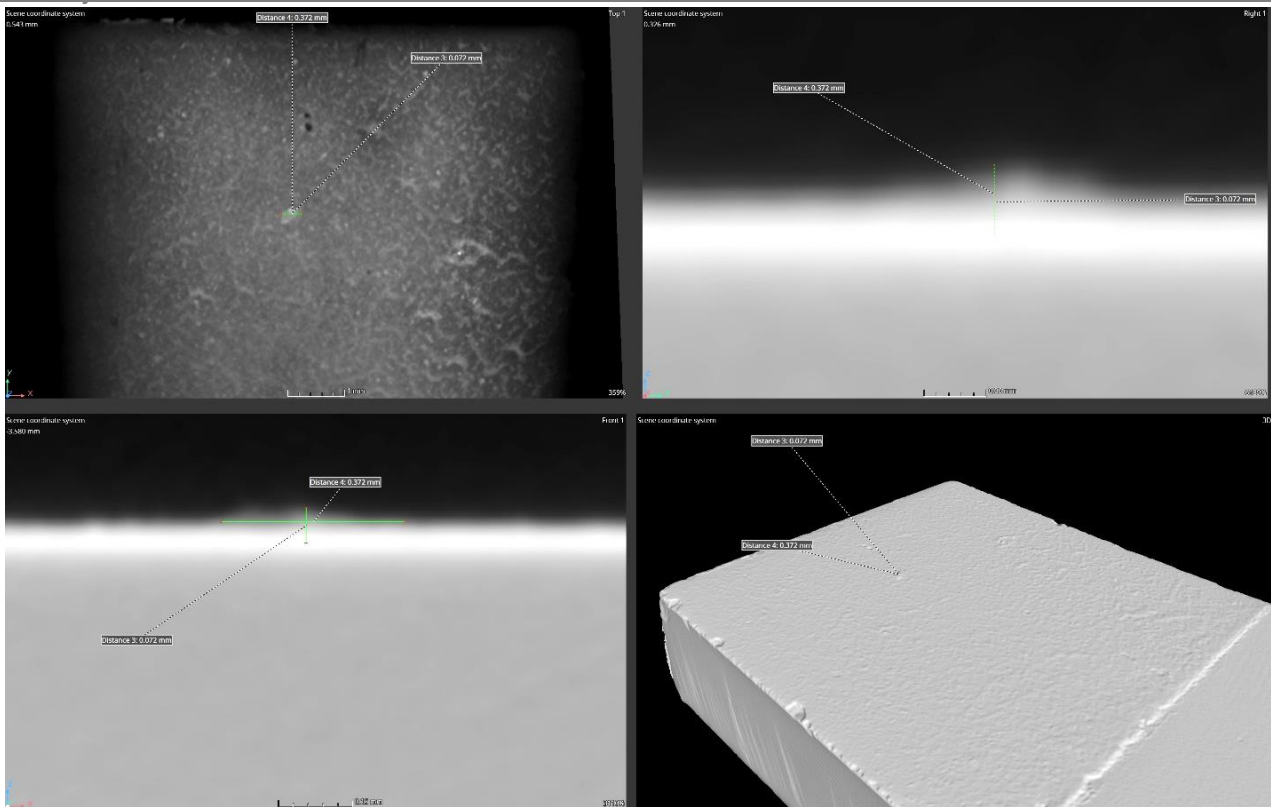


Рисунок 2. Пример исходных сечений и объёмного представления локальной неоднородности [1]. Обозначения измерений сохранены. Иллюстрация не используется для независимого восстановления полного объёма объекта.

Таблица 1. Исходные размеры и их геометрическое сопоставление

Объект	Размеры по [1]	Расчётное отношение	Смысл оценки
Пустота	d до ≈110 мкм; h ≈30 мкм	$30/110 \approx 0,27$	Условное сочетание размеров; соответствие одному объекту не установлено
Включение	$72 \times 345 \times 400$ мкм	$400/72 \approx 5,56$; $400/345 \approx 1,16$	Соотношение габаритов, без определения точной формы
Межфазное разделение	Визуализация после надрезания	Нерассчитывалось	Описание состояния после воздействия

Межфазные нарушения и условия наблюдения расслоения

В исходном описании визуализация отделения TiO₂ от основания связана с контролируемым механическим надрезанием [1]. Следовательно, наблюдаемая геометрия относится к состоянию образца после воздействия. Она позволяет локализовать участок разделения, но не устанавливает наличие такого же зазора до надрезания. Для различения первоначального нарушения и повреждения, вызванного испытанием, необходимы сопоставимые изображения одного участка до и после воздействия.

При описании двухслойного фотоанода следует различать границу TiO₂/TiO₂ и контакт покрытия с проводящим основанием. Видимая линия между слоями сама по себе не является доказательством расслоения: она может отражать различие контраста или особенности нанесения. Морфологическим признаком нарушения контакта служит пространственно прослеживаемый промежуток между разделёнными поверхностями при достаточном разрешении. Для каждого такого участка необходимо указывать, какая именно граница нарушена.

Как следует из методического обсуждения адгезионных испытаний [2], механическое поведение определяется условиями нагружения и способом регистрации разрушения. Наличие зазора на томограмме не даёт численного значения адгезионной прочности. Аналогично, по площади отделённой области без сведений о

нагрузке нельзя вычислить энергию разрушения. Настоящий анализ ограничен морфологическими признаками и не ранжирует однослойные и двухслойные образцы по механической надёжности.

Система параметров для последующего количественного описания

Для плоского сечения определяются площадь объекта A , периметр P , эквивалентный диаметр d_A и круглотность C :

$$d_A = 2\sqrt{\frac{A}{\pi}} \quad (1)$$

$$C = \frac{4\pi A}{P^2} \quad (2)$$

Круглотность характеризует компактность плоского контура. Она зависит от выбранного сечения и не является сферичностью объёмного объекта. Сопоставление соседних сечений требует одинаковой процедуры выделения границ.

Для сегментированного объёма определяются объём V и площадь поверхности S . Объёмно-эквивалентный диаметр d_V и сферичность Ψ выражаются следующим образом:

$$d_V = \left(\frac{6V}{\pi}\right)^{1/3} \quad (3)$$

$$\Psi = \frac{\pi^{1/3}(6V)^{2/3}}{S} \quad (4)$$

Для идеальной сферы $\Psi = 1$. Эти показатели здесь не вычисляются: приведённые габариты не заменяют V и S . Оценка поверхности чувствительна к разрешению, поэтому количественную обработку необходимо сопровождать проверкой устойчивости сегментации [3, 4].

Дополнительно следует регистрировать связность пустот, расстояние до ближайшей поверхности и принадлежность нарушенной границы. Для сопоставления разных образцов потребуются одинаковые правила выделения объектов и сопоставимые объёмы наблюдения. Возможные причины неоднородностей — захват воздуха, неодинаковое распределение пасты или изменение структуры при обработке — рассматриваются как проверяемые гипотезы. Установление конкретной причины требует контролируемого изменения технологического параметра и повторных наблюдений.

Предлагаемая схема объединяет четыре уровня описания: непосредственно наблюдаемый признак, приведённый в источнике размер, производную геометрическую оценку и физическую гипотезу. Такое разделение сохраняет информативность морфологического анализа и исключает подмену недостающих данных геометрическими предположениями. Его практическое назначение состоит в подготовке воспроизводимого протокола будущих измерений и в согласованном описании уже доступных томографических материалов.

Заключение

Вторичный анализ предоставленных материалов позволил выделить три группы структурных неоднородностей фотоанода TiO_2 : локальные пустоты, включения и нарушения межфазной непрерывности. Для каждой группы предложены признаки описания и определены необходимые условия количественной проверки. Результатом работы является интерпретационная система классификации; новые экспериментальные данные не заявляются.

Для условного сочетания приведённых размеров пустот рассчитано отношение глубины к диаметру около 0,27; для габаритов включения получены отношения около 5,56 и 1,16. Эти оценки описывают исходные размеры и не устанавливают фактический объём или точную форму объектов. Расслоение, визуализированное после надрезания, требует отдельного сопоставления с состоянием до воздействия.

Дальнейшее развитие анализа связано с обработкой исходных реконструкций, установлением пространственного разрешения и проверкой устойчивости сегментации. Эти данные позволят перейти от описания отдельных примеров к оценке распределения размеров, связности и пространственного положения дефектов. Механические и электрические последствия морфологических нарушений должны проверяться самостоятельными измерениями.

Foydalanilgan adabiyotlar

1. Mamatkarimov O. O., Sharibaev N. Yu., Abdukarimov A. A., Sharipbaev S. S., Ergashov A. Q. Three-dimensional X-ray tomographic analysis of single- and bilayer TiO_2 photoanodes for dye-sensitized solar cells. Авторская рукопись, предоставленная для анализа.

2. Sharipbayev S. S., Mamatkarimov O. O., Sharibayev N. Yu., Axmadjonova M. X. Ko'p qatlamli quyosh elementlarida TiO_2 fotoanod morfologiyasining adgezion xususiyatlari va mexanik ishonchliligi. Предоставленная авторская рукопись.

3. Maire E., Withers P. J. Quantitative X-ray tomography. International Materials Reviews. 2014;59(1):1–43. <https://doi.org/10.1179/1743280413Y.0000000023>

4. Withers P. J., Bouman C., Carmignato S. et al. X-ray computed tomography. Nature Reviews Methods Primers. 2021;1:18. <https://doi.org/10.1038/s43586-021-00015-4>