

УДК 535.3

ДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЕНТАОКСИДА ВАНАДИЯ ИНТЕРКАЛИРОВАННОГО ЛИТИЕМ

Савин А.В. (Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук)

Научный руководитель – к. ф.-м.н. Рогинский Е.М.

(Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук)

Аннотация В рамках теории функционала плотности выполнен расчёт фононного и рамановского спектра дельта фазы пентаоксида ванадия интеркалированного литием. Анализ атомных смещений в раман активных колебательных модах позволил установить корреляцию спектральных особенностей с локальной структурой.

Введение. В сфере развития возобновляемой энергетики самым проблемным является вопрос эффективного накопления энергии и использования её по мере необходимости. Однако проблема выбора оптимального материала для катода до сих пор остаётся нерешенной. Наиболее широко в промышленном производстве таких аккумуляторов в качестве катодного материала используют слоистые кристаллы Li_xMO_2 (здесь М – атом переходного металла), например катод из LiFePO_4 обеспечивает ёмкость 165 mA h/g.

Основная часть. Альтернативой может служить наиболее термодинамически устойчивый оксид ванадия V_2O_5 , который имеет слоистую кристаллическую структуру, что определяет его привлекательность в качестве катодного материала.

Структура интеркалированного атомами лития синтезированного химически с помощью окислительно-восстановительной реакции иодида лития и пентоксида ванадия была определена экспериментально с помощью рентгеноструктурного анализа. Структура LiV_2O_5 сохраняет свою слоистую природу (как и в $\alpha\text{-V}_2\text{O}_5$), однако соседние слои сдвинуты по отношению друг к другу в направлении $[010]$ на половину параметра решётки ($b/2$). В следствии чего был сделан вывод о центросимметричности этой дельта фазы $\delta\text{-LiV}_2\text{O}_5$ с базоцентрированной пространственной группой Cmcm с элементарной ячейкой удвоенной в направлении перпендикулярном к слою $[001]$. Известно, что при нагревании LiV_2O_5 испытывает ряд фазовых переходов, кристаллизуясь в конечном итоге в гамму фазу, динамические свойства которой хорошо изучены экспериментально и теоретически. Однако, дельта фаза, в настоящее время, практически не изучена. В данной работе в рамках теории функционала плотности выполнен расчёт динамических свойств дельта фазы.

Выводы. Фононный спектр экспериментально предсказанной структуры показал наличие динамических неустойчивостей. Искажение структур вдоль неустойчивостей позволило предсказать 4 фазы. Для каждой такой фазы был рассчитан колебательный спектр, что позволило из всех фаз выделить одну с пространственной группой Pnmm как наиболее устойчивую. Для этой фазы был рассчитан рамановский спектр, который показал хорошее согласие теории и эксперимента. Так же была рассчитана электронная структура и плотности парциальных электронных состояний, которые позволили сделать вывод о наличии в структуре двух различных валентных состояний атомов ванадия (V^{4+} и V^{5+}).

Савин А.В. (автор)

Подпись

Рогинский Е.М. (научный руководитель)

Подпись