

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  $\text{Li}_x\text{MO}_2$  (здесь М – атом переходного металла), например катод из  $\text{LiFePO}_4$  обеспечивает ёмкость 165 mA h/g.

**Основная часть.** Альтернативой может служить наиболее термодинамически устойчивый оксид ванадия  $\text{V}_2\text{O}_5$ , 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  $\text{LiV}_2\text{O}_5$  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  $\text{Cmcm}$  с элементарной ячейкой удвоенной в направлении перпендикулярном к слою  $[001]$ . Известно, что при нагревании  $\text{LiV}_2\text{O}_5$  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  $\text{Pnmm}$  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 ( $\text{V}^{4+}$  и  $\text{V}^{5+}$ ).

Савин А.В. (автор)

Подпись

Рогинский Е.М. (научный руководитель)

Подпись