

УДК 535.3

ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВАНАДИЕВЫХ БРОНЗ

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 основного состояния эпсилон фазы пентаоксида ванадия интеркалированного литием. В электронной структуре обнаружена зона состоящая из электронов локализованных на d-орбиталях атомов ванадия обладающих сонаправленным спиновым состоянием.

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

Основная часть.

В результате *ab initio* расчетов оптимизации структурных параметров эпсилон фазы пентаоксида ванадия интеркалированного атомами лития показано, что структура $\epsilon\text{-LiV}_2\text{O}_5$ сохраняет свою слоистую природу (как и в $\alpha\text{-V}_2\text{O}_5$). Установлена пространственная группа $R\bar{m}n21$ которую можно представить как слегка искаженную структуру пентаоксида ванадия. Выполнен расчет динамических свойств, который подтвердил стабильность данной фазы по отношению к колебательным состояниям. В дальнейшем был выполнен расчет электронной структуры и построена парциальная плотность электронных состояний локализованных на каждом атоме в элементарной ячейке. Также было изучено пространственное распределение бадеровских зарядов эпсилон фазы, выполнены расчеты диэлектрических свойств и объяснены особенности в спектрах диэлектрических потерь.

Выводы. Интеркаляция атомами лития пентаоксида ванадия приводит к структурным изменениям кристаллической решетки. Расчет динамических свойств $\epsilon\text{-LiV}_2\text{O}_5$ продемонстрировал устойчивость структуры по отношению к колебательным состояниям. В зонной структуре эпсилон фазы обнаружено спиновое упорядочение, которое объяснено с помощью анализа пространственного распределения бадеровских зарядов. Показано, что в результате интеркаляции в структуре появляется симметрично неэквивалентная пара атомов ванадия с разной валентностью (V^{4+} и V^{5+}). В результате расчета диэлектрических свойств получена величина края поглощения в оптическом спектре, которая позволяет квалифицировать материал как узкозонный полупроводник.