

Исследование взаимодействия лития с однослойными углеродными нанотрубками методами рентгеновской спектроскопии

Лаптева Л. Л.

Институт неорганической химии им. А. В. Николаева СО РАН
Новосибирский государственный университет

Изучение взаимодействия лития с углеродными нанотрубками является актуальной задачей, так как их использование в литий-ионных аккумуляторах и суперконденсаторах может улучшить их электрохимические характеристики. Кроме того, легирование углеродных нанотрубок щелочными металлами делает их способными к хранению водорода. Важной задачей в этих областях является определение особенностей электронных взаимодействий между углеродом и литием.

Данная работа посвящена рентгеноспектральному исследованию электронного взаимодействия атомов лития с однослойными углеродными нанотрубками (SWCNT - Single-Walled Carbon Nanotubes).

Литирование SWCNT осуществлялось с помощью высоковакуумного термического напыления лития на поверхность образца. Рентгеноэлектронные и NEXAFS (Near Edge X-ray Absorption Fine Structure) спектры исходных и литированных SWCNT были сняты на Российско-Германском канале Берлинского центра синхротронного излучения (BESSYII). Литирование SWCNT приводит к сдвигу C 1s-линии в сторону больших энергий. NEXAFS исследование литированных SWCNT выявило понижение относительной интенсивности π^* -резонанса в спектре C K-края по сравнению со спектром исходных нанотрубок. Интерпретация экспериментальных фотоэлектронных спектров валентной зоны чистых и литированных SWCNT осуществлялась с помощью квантово-химических расчетов в рамках кластерной модели методом теории функционала плотности (функционал B3LYP). Также были определены структурные характеристики исходных SWCNT по спектрам комбинационного рассеяния света. В результате было установлено, что взаимодействие паров лития с SWCNT приводит к переносу электронной плотности с атомов лития на атомы углерода и к изменению электронного строения системы.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Федосеева Ю. В.