

Механоактивація та її вплив на розподіл валентних електронів та інтеркаляційні властивості сумішей $\text{SiO}_2/\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$

Яворський Ю.В., *аспірант*;

Ільків В.Я., *молодший науковий співробітник*

Національний технічний університет України

«Київський політехнічний інститут», м. Київ

Існує дуже багато різних методів синтезу і обробки наноматеріалів, які мають різноманітні властивості при однаковому масовому і атомному складі. Одним із таких, перспективних методів є механоактивація, яка дозволяє об'єднати відмінні властивості наноматеріалів. Для дослідження впливу механоактивації на розподіл електронів у валентній зоні було вибрано ряд нанооксидів перехідних металів серед яких були SiO_2 та $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$. Ці нанооксиди змішували із різним масовим співвідношенням (20/80, 50/50, 80/20) та механоактивували у вібраційному млині. Для дослідження електронної структури валентної зони, простих та механоактивованих сумішей, проводили рентгеноспектральні дослідження в ультрам'якій області довжини хвилі. Для дослідження впливу механоактивації на інтеркаляційні властивості було зняті розрядні криві з електрохімічної комірки з катодним матеріалом на основі суміші 0,8 SiO_2 / 0,2 $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, аноду із літію та електроліту LiPF_6 . При дослідженні були отримані такі результати: міжатомна взаємодія між поверхневими атомами крупніших наночастинок $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ і дрібніших SiO_2 відбувається внаслідок високих локальних тисків і температур при нашаруванні наночастинок діоксиду кремнію на частинки оксиду заліза.

Внаслідок механохімічної активації сумішей $\text{SiO}_2/\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ спостерігається перенос електронів від катіонів кремнію до аніонів кисню які належать як $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ так і SiO_2 .

Збільшення заселеності Ор-станів, в результаті механоактивації, в області поблизу стелі валентної зони приводить до збільшення зарядового стану кисню в тетраедричному оточенні кремнію. Це сприяє збільшенню ступеня інтеркаляції іонів літію в структурні канали катодного матеріалу, що приводить до збільшення зарядової ємності електрохімічної комірки.

Керівник: Зауличний Я. В., *професор*