

Научная статья  
УДК 543.442.2+546.26  
doi: 10.17223/24135542/38/5

## **Углеродные материалы для электрохимических накопителей энергии. Исследования структуры методом рентгенофазового анализа**

**Елена Владимировна Кузьмина<sup>1</sup>, Эльвира Равилевна Гайфуллина<sup>2</sup>,  
Надежда Васильевна Шакирова<sup>3</sup>, Альфия Равилевна Юсупова<sup>4</sup>,  
Булат Салаватович Ахметшин<sup>5</sup>, Владимир Сергеевич Колосницын<sup>6</sup>**

<sup>1, 2, 3, 4, 6</sup> Уфимский Институт химии Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук, Уфа, Россия  
<sup>2</sup> Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы, Уфа, Россия

<sup>5</sup> Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

<sup>1</sup> kuzmina@anrb.ru

<sup>2</sup> e.gaifullina02@mail.ru

<sup>3</sup> shakirova.elchem@gmail.com

<sup>4</sup> alfia\_yusupova@mail.ru

<sup>5</sup> akhbulat@mail.ru

<sup>6</sup> kolos@anrb.ru

**Аннотация.** Рассматриваются рентгенограммы углеродных материалов, перспективных для использования в качестве компонентов электродов электрохимических накопителей энергии, таких как суперконденсаторы, литий-ионные и постлитий-ионные аккумуляторы: графитов, графенов, углеродных нановолокон, нанотрубок и саж. На основании рентгенограмм рассчитаны следующие характеристики углеродов: межплоскостное расстояние, размеры кристаллитов, количество ароматических слоев и атомов углерода в кристаллатах, содержание аморфной фазы и кристаллографическая плотность.

В изученных графитах доля аморфной фазы варьирует в диапазоне 0,5–10%, межплоскостное расстояние составляет 3,35 Å. Доля аморфной фазы в углеродных нановолокнах составляет 10–15%, а межплоскостное расстояние – 3,40 Å. Для изученных углеродных нанотрубок межплоскостное расстояние составило 3,45–3,48 Å, а доля аморфной фазы 40–60%. Межплоскостное расстояние в сажах варьирует в диапазоне 3,5–3,7 Å, а доля аморфной фазы достигает 70%.

В структуре всех изученных углеродных материалов присутствуют высоко кристаллические и низко кристаллические фазы, а также аморфная фаза. На рентгенограммах нановолокон, нанотрубок и саж наблюдаются смещение и уширение полос (002) по сравнению с графитом. Такое смещение свидетельствует об увеличении дефектности кристаллической решетки.

Расчетная кристаллографическая плотность изученных образцов аллотропных форм углеродов составляет для графитов 2,28 г/см<sup>3</sup>, углеродных нановолокон – 2,22 г/см<sup>3</sup>, углеродных нанотрубок – 2,19–2,20 г/см<sup>3</sup>, саж – 1,96–2,20 г/см<sup>3</sup>.

Таким образом, на основании выполненных исследований можно заключить, что наименьшее количество аморфной фазы наблюдается у графитов, а наибольшее – у сажи. Графиты обладают наименьшим межплоскостным расстоянием, а сажи – наибольшим.

**Ключевые слова:** рентгенофазовый анализ, графит, нанотрубки, нановолокна, сажи

**Благодарности:** Работа выполнена в рамках Государственного задания по теме НИР УФИХ УФИЦ РАН № 124032600061-3 «Углеродные материалы и углерод-полимерные композиты как активные компоненты положительных и отрицательных электродов перспективных накопителей энергии. Синтез, строение, свойства».

**Для цитирования:** Кузьмина Е.В., Гайфуллина Э.Р., Шакирова Н.В., Юсупова А.Р., Ахметшин Б.С., Колосицын В.С. Углеродные материалы для электрохимических накопителей энергии. Исследования структуры методом рентгенофазового анализа // Вестник Томского государственного университета. Химия. 2025. № 38. С. 57–69. doi: 10.17223/24135542/38/5

Original article

doi: 10.17223/24135542/38/5

## **Carbon materials for electrochemical energy storage devices. Studies of structure by x-ray diffraction**

**Elena V. Kuzmina<sup>1</sup>, Elvina R. Gaifullina<sup>2</sup>, Nadezhda V. Shakirova<sup>3</sup>,  
Alfia R. Yusupova<sup>4</sup>, Bulat S. Akhmetshin<sup>5</sup>, Vladimir S. Kolosnitsyn<sup>6</sup>**

*<sup>1, 2, 3, 4, 6</sup> Ufa Institute of Chemistry, Ufa Federal Research Center  
of the Russian Academy of Sciences, Ufa, Russian Federation*

*<sup>2</sup> Bashkir State Pedagogical University named after M. Akmulla, Ufa, Russian Federation*

*<sup>5</sup> Ufa University of Science and Technology, Ufa, Russian Federation*

*<sup>1</sup> kuzmina@anrb.ru*

*<sup>2</sup> e.gaifullina02@mail.ru*

*<sup>3</sup> shakirova.elchem@gmail.com*

*<sup>4</sup> alfia\_yusupova@mail.ru*

*<sup>5</sup> akhbulat@mail.ru*

*<sup>6</sup> kolos@anrb.ru*

**Abstract.** In this paper it is discussed X-ray diffraction patterns of carbon materials that are promising for use as components of electrodes in electrochemical energy storage devices such as supercapacitors, lithium-ion and post- lithium-ion batteries: graphites, graphenes, carbon nanofibers, nanotubes and carbon blacks. Based on the X-ray diffraction patterns, the following characteristics of carbons were calculated: interplanar distance, crystallite sizes, the number of aromatic layers and carbon atoms in crystallites, the content of the amorphous phase and the crystallographic density.

In the studied graphites, the proportion of the amorphous phase varies in the range of 0.5-10%, the interplanar distance is 3.35 Å. The proportion of the amorphous phase in carbon nanofibers is 10-15%, and the interplanar distance is 3.40 Å. For the studied carbon nanotubes, the interplanar distance was 3.45-3.48 Å, and the proportion of the amorphous phase was 40-60%. The interplanar distance in carbon blacks varies in the range of 3.5-3.7 Å, and the proportion of the amorphous phase reaches 70%.

The structure of all the studied carbon materials contains highly crystalline and low crystalline phases, as well as an amorphous phase. In the X-ray patterns of nanofibers, nanotubes and carbon blacks, a shift and broadening of the (002) bands is observed compared to graphite. This shift indicates an increase in the defectiveness of the crystal lattice.

The calculated crystallographic density of the studied samples of allotropic forms of carbon is 2.28 g/cm<sup>3</sup> for graphites, 2.22 g/cm<sup>3</sup> for carbon nanofibers, 2.19–2.20 g/cm<sup>3</sup> for carbon nanotubes, and 1.96–2.20 g/cm<sup>3</sup> for carbon black.

Thus, based on the conducted studies, it can be concluded that the smallest amount of amorphous phase is observed in graphites, and the largest - in carbon blacks. Graphites have the smallest interplanar distance, and carbon blacks - the largest.

**Keywords:** X-ray phase analysis, graphite, nanotubes, nanofibers, carbon black

**Acknowledgments:** The work was carried out within the framework of the State Assignment on the research topic of the Ufa Federal Research Center of the RAS No. 124032600061-3 “Carbon materials and carbon-polymer composites as active components of positive and negative electrodes of promising energy storage devices. Synthesis, structure, properties.”

**For citation:** Kuzmina, E.V., Gaifullina, E.R., Shakirova, N.V., Yusupova, A.R., Akhmetshin, B.S., Kolosnitsyn, V.S. Carbon materials for electrochemical energy storage devices. Studies of structure by x-ray diffraction. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Chimia – Tomsk State University Journal of Chemistry*, 2025, 38, 57–69. doi: 10.17223/24135542/38/5

## **Введение**

В современных устройствах накопления электроэнергии – литий-ионных аккумуляторах и суперконденсаторах – широко применяются углеродные материалы в различных аллотропных формах. В литий-ионных аккумуляторов углеродные материалы используются в составе как положительных, так отрицательных электродов. В положительных электродах углероды чаще всего применяются в качестве токопроводящих добавок, поскольку активные материалы (литированные оксиды или фосфаты переходных металлов) обладают очень низкой электропроводностью. Например, электронная проводимость  $\text{Li}_{1-x}\text{Ni}_{1-y-z}\text{Mn}_z\text{Co}_y\text{O}_2$  составляет  $10^{-7} \text{ Ом}^{-1}\text{см}^{-1}$ , а  $\text{LiFePO}_4$  – ниже  $10^{-9} \text{ Ом}^{-1}\text{см}^{-1}$  [1–4].

В отрицательных электродах литий-ионных аккумуляторов роль углеродных материалов более широка: они используются и как активные материалы, и как токопроводящие добавки. В качестве активных компонентов отрицательных электродов литий-ионных аккумуляторов применяют углеродные материалы, способные обратимо интеркалировать катион лития, – графиты, графены и разупорядоченные углероды типа коксов [2, 5–8]. В качестве токопроводящих добавок чаще всего применяют различные сажи, нанотрубки и нановолокна [8]. В электродах суперконденсаторов, как правило, используют углеродные материалы с высокоразвитой поверхностью, такие как сажи и нанотрубки [9, 10]. Таким образом, строение углеродных материалов определяет области их применения. Наноструктурированные

углеродные материалы – углеродная сажа, углеродные волокна, многостенные углеродные нанотрубки – одни из наиболее перспективных материалов.

В представленной работе суммированы результаты исследования строенияnanoструктурированных углеродных материалов методами рентгенофазового анализа.

## Методы

В работе использовали следующие углеродные материалы. Графиты и графен: Timrex® SLP50 (TIMCAL Graphite & Carbon), синтетический графит (Dianshi, Китай), графит натуральный (NG 10, Корея), УФ-МС1 (Россия) и многослойный графен GLNP-0350 (GraphenLab). Углеродные волокна и нанотрубки: Nano fiber ENF 100AA-GFE (carbon nanofibers, Electrovac AG), Pyrograf ППТМ (carbon fiber HT grade, highly graphitic carbon nanofiber, Pyrograf Products, Inc.), MWCNT Graphistrength® U100 (Arkema), MWCNT Graphistrength® C100 (Arkema), MWCNT BAYTUBES® C70P (Bayer AG), MWCNT LUCANTM CP1001M (LG Chem.), углеродные нанотрубки (ТАУНИТ – МД). Углеродные сажи: Ketjenblack® EC-600JD (Akzo Nobel Polymer Chemicals LLC), PRINTEX® XE2 (Degussa AG), Monarch® 1300 (Cabot Corp.), Monarch® 1400 (Cabot Corp.), сажа П-803М, Super PTM Li (TIMCAL Graphite & Carbon).

Структурную идентификацию углеродов проводили на рентгеновском дифрактометре TD-20 (Китай). Используемое излучение: CuK $\alpha$  (длина волны 1,5405 Å). Рентгенограммы регистрировали для порошков, размещенных в алюминиевой кювете. Измерения проводили в диапазоне 2Θ от 20 до 100°. Шаг сканирования 0,0286°. Скорость сканирования 0,3°/мин.

Расстояние между соседними ароматическими слоями в пачке  $d_m$  рассчитывали по формуле Вольфа–Брэгга

$$d_m = \frac{\lambda}{2 \sin \Theta}, \quad (1)$$

где  $\lambda$  – длина волны рентгеновского излучения и  $\Theta$  – угол, соответствующий максимуму полосы  $m$ .

Средний диаметр кристаллитов (ароматического слоя)  $L_a$  рассчитывали по формулам (длина кристаллита по оси  $a$  2Н-гексагонального графита)

$$L_a = \frac{L_{100}}{\cos \Theta} = \frac{0,89\lambda}{0,866\beta_{100} \cdot \cos \Theta} \text{ или } L_a = \frac{L_{110}}{\cos \Theta} = \frac{0,89\lambda}{0,5\beta_{110} \cdot \cos \Theta}, \quad (2)$$

где  $\beta_{100}$  – полная ширина 100-полосы на полувысоте ее максимума,  $\Theta$  – угол, соответствующий максимуму 100-полосы, или где  $\beta_{110}$  – полная ширина 110-полосы на полувысоте ее максимума,  $\Theta$  – угол, соответствующий максимуму 110-полосы.

Средняя толщина кристаллитов (высота пачки ароматических слоев) рассчитывалась по формуле (длина кристаллита по оси  $c$  2Н-гексагонального графита) [11, 12]

$$L_c = \frac{0,89\lambda}{\beta_{002} \cdot \cos \Theta}, \quad (3)$$

где  $\beta_{002}$  – полная ширина 002-полосы на полувысоте ее максимума.

Количество ароматических слоев в кристаллите рассчитывали по уравнению [11, 12]

$$N = \frac{L_c + d_{002}}{d_{002}} \quad (4)$$

Среднее количество атомов углерода на ароматические ламели (кристаллитах) [11]

$$n = 0,32 N^2. \quad (5)$$

Кристаллографическую плотность рассчитывали по уравнению [13]

$$\rho = \frac{0,762}{d_{002}}. \quad (6)$$

Значение рассчитанной таким образом плотности кристаллического вещества характеризует идеализированную кристаллическую решетку с реальными параметрами.

Для расчета структурных параметров ( $d_{001}$ ,  $L_c$ ,  $\rho$ ,  $N$ ) графитов были использованы как рефлекс (002), так и рефлексы более дальних порядков – (004) и (006).

Доли кристаллической фазы (кристаллических углеродных нанокластеров) и аморфной фазы (аморфных углеродных нанокластеров) рассчитывали с использованием следующих уравнений [14, 15]:

$$P_{\text{крист}} = \frac{I_{\text{крист}} \cdot 100\%}{I_{\text{общее}}} \quad (7)$$

$$P_{\text{аморф}} = \frac{I_{\text{аморф}} \cdot 100\%}{I_{\text{общее}}}, \quad (8)$$

где  $P_{\text{крист}}$  – доля кристаллических углеродных фракций, %;  $P_{\text{аморф}}$  – доля аморфных углеродных фракций, %;  $I_{\text{крист}}$  – высота пика, соответствующая доле кристаллической фазы;  $I_{\text{аморф}}$  – высота пика, соответствующая доле аморфной фазы;  $I_{\text{общее}}$  – общая высота пика. Примеры оценки  $I_{\text{крист}}$  и  $I_{\text{аморф}}$  представлены на рис. 1.

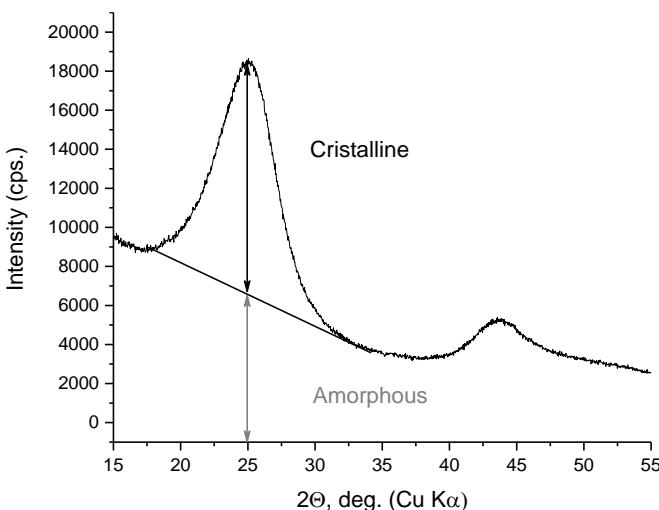


Рис. 1. Пример расчета доли кристаллической и аморфной фаз в углеродах

## Результаты и обсуждение

Обзорные рентгенограммы углеродных материалов различной природы представлены на рис. 2–4. В табл. 1–3 суммированы результаты обработки и индицирования рентгенограмм изученных углеродов.

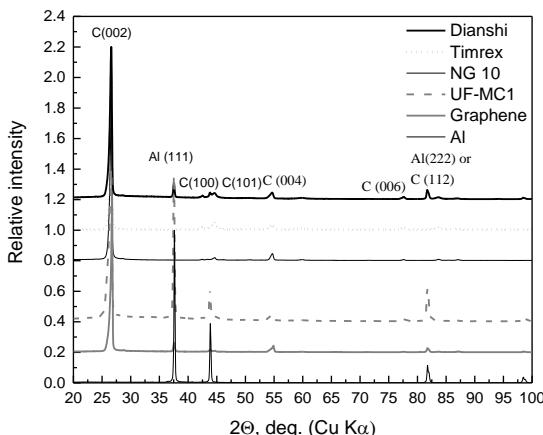


Рис. 2. Рентгенограммы графитов различных производителей, графена и алюминиевой кюветы. В легенде указаны образцы, в скобках указаны марки графитов.  
РФА зарегистрированы на алюминиевой кювете

Рентгенограммы графитов представлены на рис. 2. На рентгенограммах графитов и графена наблюдаются характерные узкие четкие пики, обусловленные кристаллической структурой. Рефлексы (002) ( $2\Theta = 26,6^\circ$ ), (004) ( $2\Theta = 54,7^\circ$ ) и (006) ( $2\Theta = 87,1^\circ$ ) значительно отличаются своей интенсивностью и являются отражениями полиареновых слоев. Рефлексы (004) и (006) характеризуют более дальний порядок, а рефлексы (100) ( $2\Theta = 44,2^\circ$ ) и (101) ( $2\Theta = 44,6^\circ$ ) отражают продольный размер структурных элементов. Рефлексы на рентгенограммах обладают слабо выраженной асимметричностью, что указывает на наличие фаз с различными степенью упорядоченности и структурными характеристиками.

Рассчитанная по уравнению (7) общая доля кристаллической фазы в изученных графитах варьирует в диапазоне 96–99%, за исключением УФ-МС1, для которого доля кристаллической фазы 82,1%. (см. табл. 1). Межплоскостное расстояние, рассчитанное по рефлексу (002), для всех изученных графитов составляет 3,35 Å.

Размеры кристаллитов близки:  $L_c$  изменяется в диапазоне 360–900 Å, а  $L_a$  – в диапазоне 270–520 Å. Количество ароматических слоев изменяется от 1 000 до 2 000. Количество атомов углерода в кристаллитах составляет  $(4\text{--}5)\cdot10^5$ .

Рассчитанная кристаллографическая плотность составила 2,28 г/см<sup>3</sup>.

На рентгенограммах углеродных нанотрубок и нановолокон (см. рис. 3) подобно графиту наблюдаются рефлексы (002) (см. рис. 2).

Таблица 1

## Характеристики рентгенограмм графитов

№	$2\Theta, ^\circ$	$h k l$	$d, \text{\AA}$	$\rho, \text{г}/\text{см}^3$	$P_{\text{крист}}, \%$	$P_{\text{аморф}}, \%$	$I/I_{\text{max}}, \%$	$\beta, ^\circ$
Графит синтетический (Timrex® SLP50)								
1	26,639	002	3,346	2,277	99,6	0,4	100,0	0,373
2	42,547	100	2,125				2,7	0,373
3	54,720	004	1,677				3,9	60,011
Графит синтетический (Dianshi, Китай)								
1	26,606	002	3,350	2,275	97,9	2,1	100,0	0,448
2	42,536	100	2,125				2,7	0,516
3	54,653	004	1,679				4,6	0,736
Графит натуральный (NG 10, Корея)								
1,	26,61	002	3,35	2,275	99,4	0,6	100,0	0,43
2,	44,63	100	2,03				2,0	0,73
3,	54,72	004	1,68				4,6	0,56
4,	87,13	006	1,12				0,7	0,52
Многослойный графен (Graphene Lab, Россия)								
1,	26,777	002	3,329	2,289	99,6	0,4	100,0	0,266
2,	42,566	100	2,124				0,5	0,280
3,	54,909	004	1,672				4,0	0,499
Графит (УФ-МС1, Россия)								
1,	26,44	002	3,371	2,260	82,1	17,9	100,0	0,699
2,	43,81	100	2,066				22,0	0,315
3,	54,45	004	1,685				3,9	0,948

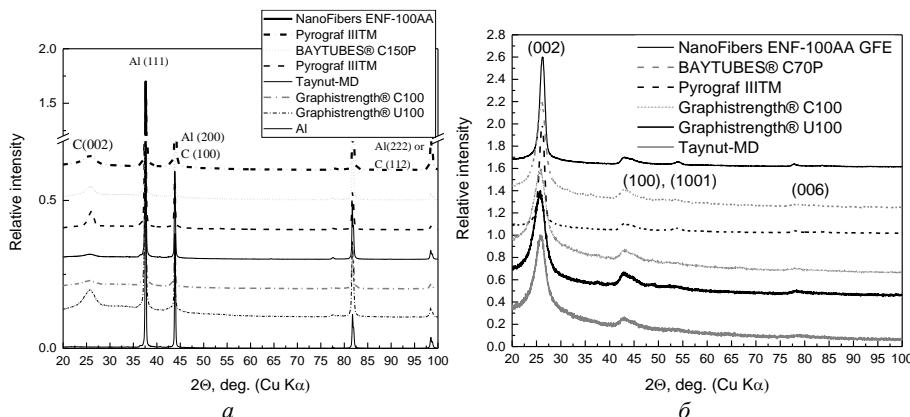


Рис. 3. Рентгенограммы углеродных нанотрубок и нановолокон, зарегистрированные на алюминиевой кювете

Рефлекс (002) на рентгенограмме углеродных нановолокон находится при  $2\Theta = 26,2^\circ$ , что несколько отличается от положения рефлекса (002) графита  $2\Theta = 26,6^\circ$ . Смещение положения рефлекса (002) указывает на отличие в строении кристаллитов нанотрубок от гексагонального графита. Рассчитанное межплоскостное расстояние, соответствующее рефлексам (002), для

нановолокон составило 3,404 Å (см. табл. 2), что превышает соответствующее межплоскостное расстояние графитов 3,35 Å (см. табл. 1).

Важно отметить, что полоса (002) – более уширенная и несимметричная по сравнению с графитом. Таким образом, можно заключить, что в углеродных нановолокнах содержатся фазы со структурой графита и более дефектные кристаллические структуры [11, 12, 15]. Доля аморфной фазы составила 14–16% (см. табл. 2).

Положение рефлекса (002) на рентгенограмме нанотрубок более смещено по сравнению с рефлексом графитов и составляет  $2\Theta = 25,6\text{--}25,8^\circ$ . Наблюдаемые на рентгенограммах нанотрубок рефлексы (002) на ( $2\Theta = 25,6\text{--}25,8^\circ$ ), (004) ( $2\Theta = 54,7^\circ$ ) более деформированы по сравнению с рефлексами углеродных нановолокон (см. рис. 3), что указывает на большее количество различных дефектов и количество аморфной фазы. Также на большую дефектность нанотрубок по сравнению с графитом и нановолокнами указывают отсутствие рефлекса (006) и сильная деформация рефлекса (004). Рассчитанная доля аморфной фазы в нанотрубках составила порядка 50% (см. табл. 2).

Рассчитанная кристаллографическая плотность нановолокон и нанотрубок составляет порядка 2,2 г/см<sup>3</sup>.

Таблица 2

**Характеристики рентгенограмм углеродных нанотрубок и нановолокон**

№	$2\Theta, ^\circ$	$h k l$	$d, \text{\AA}$	$\rho, \text{г/см}^3$	$P_{\text{крyst}}, \%$	$P_{\text{аморф}}, \%$	$I/I_{\text{max}}, \%$	$\beta, ^\circ$
Углеродные нановолокна (NanoFibers ENF-100AA GFE)								
1	25,963	002	3,432	2,220	83,6	16,4	100,0	1,334
2	43,819	100	2,066				14,5	0,322
Углеродные нановолокна (Pyrograf III Carbon fiber)								
1	25,916	002	3,348	2,216	86,3	13,7	100,0	1,248
2	43,861	100	2,064				33,2	0,307
Углеродные нанотрубки (BAYTUBES C70P)								
1	25,791	002	3,454	2,206	51,9	48,1	13,4	2,089
2	43,833	100	2,065				100,0	0,313
Углеродные нанотрубки (ТАУНИТ – МД)								
1	25,582	002	3,482	2,188	46,3	53,7	2,8	2,701
2	43,859	100	2,064				100,0	0,263
Углеродные нанотрубки (GRAPHISTRENGTH C100)								
1	25,558	002	3,485	2,187	42,5	57,5	7,7	2,522
2	43,836	100	2,065				100,0	0,289
Углеродные нанотрубки (GRAPHISTRENGTH U100)								
1	25,659	002	3,472	2,195	53,9	46,1	32,5	2,954
2	43,821	100	2,066				100,0	0,328

На рис. 4 представлены рентгенограммы саж и нефтяного кокса. На рентгенограммах саж наблюдается наибольшее уширение рефлексов (002) для изученных углеродных материалов, что указывает на большую дефектность саж по сравнению с графитами, нановолокнами и нанотрубками. Уширение полосы (002) обусловлено наличием высокристаллической фазы и кристаллической фазы с дефектами [11, 12, 15].

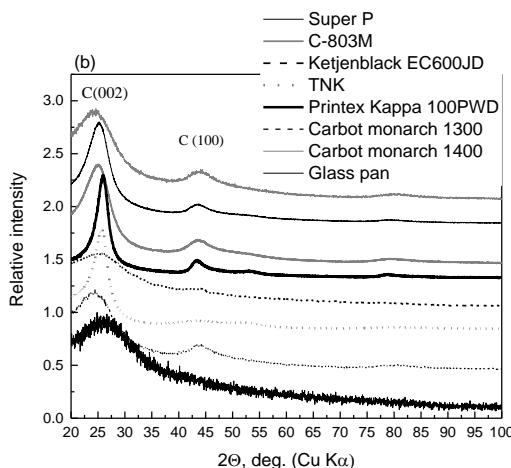


Рис. 4. Рентгенограммы саж и нефтяного кокса на стеклянной кювете

Таблица 3

**Характеристики рентгенограмм саж и нефтяного кокса**

№	2Θ, °	h k l	d, Å	ρ, г/см³	P <sub>крист.</sub> , %	P <sub>аморф.</sub> , %	I/I <sub>max</sub> , %	β, °
Термообработанный нефтяной кокс								
1	25,713	002	3,465	2,199	86,0	14,0	100,0	3,630
2	42,911	100	2,108				0,1	5,106
3	52,395	004	1,746				0,1	35,034
Сажа (Carbot Monarch 1400)								
1	24,088	002	3,695	2,062	41,0	59,0	100,0	9,039
2	43,825	100	2,066				43,5	0,289
Сажа (Carbot Monarch 1300)								
1	22,91361	002	3,881	1,963	53,5	46,5	100	12,67691
2	43,84417	100	2,065				24,64	7,26886
3	80,22128	006	1,197				5,01	7,91157
Сажа (Ketjenblack EC600JD)								
1	23,31744	002	3,815	1,997	45,9	54,1	100	11,30071
2	44,18303	100	2,05				10,75	4,14807
3	79,90863	006	1,2				2,36	4,91957
Сажа П-803М								
1	25,03	002	3,56	2,142	32,1	67,9	100,0	6,72
2	43,56	100	2,08				29,0	4,25
3	79,55	006	1,21				10,9	7,13
Сажа (Super PTM Li)								
1	25,20	002	3,53	2,156	62,3	37,7	100,0	4,31
2	43,74	100	2,07				22,7	4,09
3	79,46	006	1,21				7,8	10,70
Сажа (PRINTEX KAPPA 100 PWD)								
1	25,77	002	3,46	2,204	63,6	36,4	100,0	2,89
2	43,68	100	2,07				12,9	2,93
3	52,11	006	1,75				5,2	6,60

Рентгенограммы саж содержат сильно деформированные уширенные рефлексы (002) и (100). Положение рефлекса (002) на рентгенограмме саж ( $2\Theta = 23\text{--}24^\circ$ ) существенно отличается от положения рефлекса (002) графитов ( $2\Theta = 26,6^\circ$ ), нановолокон ( $2\Theta = 26,2^\circ$ ) и нанотрубок ( $2\Theta = 25,6\text{--}25,8^\circ$ ), что указывает на большее наличие дефектных кристаллических фаз. Рассчитанные межплоскостные расстояния, соответствующие необработанному рефлексу (002), варьируют в диапазоне 3,53–3,70 Å (см. табл. 3), а плотность саж – в диапазоне 1,96–2,17 г/см<sup>3</sup>. Среди изученных торговых марок углеродов наибольшим межплоскостным расстоянием обладает сажа марки Carbot Monarch 1300 – 3,881 Å. Доля аморфной фазы в сажах составляет более 50%. Размер кристаллитов варьирует в диапазоне 10–50 нм, а количество слоев – в диапазоне 50–100.

На рентгенограмме термообработанного нефтяного кокса наблюдается три дифракционных максимума при  $25,7^\circ$ ,  $42,9^\circ$ ,  $52,4^\circ$ , соответствующие межплоскостным расстояниям  $d_{002} = 3,462$  Å,  $d_{100} = 2,106$  Å,  $d_{004} = 1,745$  Å. Доля кристаллической фазы составляет порядка 77%. Размеры кристаллитов составляют 130 на 70 нм. Рассчитанная плотность составила 2,20 г/см<sup>3</sup>.

На рентгенограммах алюминиевой кюветы (см. рис. 3), используемой для анализа, наблюдаются рефлексы кристаллической структуры алюминия. Два основных дифракционных максимума при углах  $2\Theta = 37,6^\circ$ ,  $43,9^\circ$ , соответствующие межплоскостным расстояниям  $d_{111} = 2,389$  Å,  $d_{200} = 2,062$  Å.

## **Выводы**

В работе были проанализированы рентгенограммы различных форм углеродов: графитов, нановолокон, нанотрубок и саж.

Положения рефлексов на рентгенограммах нановолокон, нанотрубок и саж смешены по сравнению с рефлексами графитов, что отражает увеличение дефектности кристаллической решетки. Количество аморфной фазы от 0,5% до 70% увеличивается в ряду

графиты < нановолокна < нанотрубки < сажи.

В структуре углеродов наряду с аморфной фазой существуют фазы с разной степенью кристалличности, на что указывают уширение и деформация рефлексов на рентгенограммах.

## **Список источников**

1. Иванищев А.В., Иванищева И.А., Нам, С.Ч.; Мун, Д. Электроактивные композиты на основе интеркаляционных соединений лития и материалов с высокими проводящими свойствами: способы получения и электрохимические характеристики // Электрохимия. 2021. № 57 (7). С. 408–423. doi: 10.1134/S1023193521070053
2. Кулова Т.Л. Новые электродные материалы для литий-ионных аккумуляторов (обзор) // Электрохимия. 2013. № 49 (1). С. 3–28. doi: 10.1134/S1023193513010102
3. Wang C., Hong J. Ionic/electronic conducting characteristics of LiFePO<sub>4</sub> cathode materials // Electrochemical and Solid-State Letters. 2007. Vol. 10 (3). P. 65–69. doi: 10.1149/1.2409768

4. Amin R., Chiang Y.M. Characterization of electronic and ionic transport in Li<sub>1-x</sub>Ni0.33Mn0.33 Co0.33O<sub>2</sub>(NMC333) and Li<sub>1-x</sub>Ni0.50Mn0.20Co0.30O<sub>2</sub>(NMC523) as a function of Li content // Journal of The Electrochemical Society. 2016. Vol. 163 (8). P. A1512–A1517. doi: 10.1149/2.0131608jes
5. Yang C.Z., Lou Y., Zhang J., Xie X., Xia B. Materials and working mechanisms of secondary batteries. Springer, 2023. 781 p. doi: 10.1007/978-981-19-5955-4
6. Чудинов Е.А., Ткачук С.А. Технологические основы производства литий-ионного аккумулятора // Электрохимическая энергетика. 2015. № 15 (2). С. 84–92. doi: 10.18500/1608-4039-2015-15-2-84-92,
7. Дубасова В.С., Михайлова В.А., Николенко А.Ф., Пономарева Т.А., Смирнова Т.Ю., Плещаков В.Ф. Емкостные характеристики углеродных анодных материалов на основе российского природного графита для литий-ионных аккумуляторов // Электрохимия. 2013. № 49 (2). С. 178–193. doi: 10.1134/S1023193513020067
8. Трепшина Ю.И., Крюков А.Ю., Десятов А.В. Влияние добавок УНТ на свойства графитовых и смесевых анодов литий-ионных аккумуляторов // Успехи в химии и химической технологии. 2023. Т. 37, № 12. С. 175–177.
9. Вольфович Ю.М. Суперконденсаторы, выпускаемые промышленными компаниями // Электрохимическая энергетика. 2024. № 24 (1). С. 3–27. doi: 10.18500/1608-4039-2024-24-1-3-27
10. Вольфович Ю.М. Электрохимические суперконденсаторы (обзор) // Электрохимия. 2021. № 57 (4). С. 197–238. doi: 10.1134/S1023193521040108
11. Lu L., Sahajwalla V., Kong C., Harris D. Quantitative X-ray diffraction analysis and its application to various coals // Carbon. 2001. Vol. 39 (12). P. 1821–1833. doi: 10.1016/S0008-6223(00)00318-3
12. Manoj B., Kunjomana A.G. Study of stacking structure of amorphous carbon by X-ray diffraction technique // International Journal of Electrochemical Science. 2012. Vol. 7 (4). P. 3127–3134. doi: 10.1016/S1452-3981(23)13940-X
13. Богданов С.П. Рентгеноструктурный анализ углеродных материалов. СПб. : СПбГТИ(ТУ), 2013, 26 с.
14. Lee S.M., Lee S.H., Roh J.S. Analysis of activation process of carbon black based on structural parameters obtained by XRD analysis // Crystals. 2021. Vol. 11 (2). P. 1–11. doi: 10.3390/crys11020153
15. Kang D.S., Lee S.M., Lee S.H., Roh J.S. X-ray diffraction analysis of the crystallinity of phenolic res-in-derived carbon as a function of the heating rate during the carbonization process // Carbon Letters. 2018. Vol. 27 (1). P. 108–111. doi: 10.5714/CL.2018.27.108

### **References**

1. Ivanishchev A.V.; Ivanishcheva I.A.; Nam S.-C.; Mun J. Electroactive composites based on lithium intercalation compounds and highly conductive materials: methods of synthesis and electrochemical characteristics. *Russ. J. Electrochemistry*. 2021, 57(7), 706–720. doi: 10.1134/S1023193521070053
2. Kulova T.L. New Electrode Materials for Lithium-Ion Batteries (Review). *Russ. J. Electrochemistry*. 2013, 49(1), 1–25. doi: 10.1134/S1023193513010102
3. Wang C.; Hong J. Ionic/electronic conducting characteristics of LiFePO<sub>4</sub> cathode materials. *Electrochemical and Solid-State Letters*. 2007, 10(3), 65–69. doi: 10.1149/1.2409768
4. Amin R.; Chiang Y.M. Characterization of electronic and ionic transport in Li<sub>1-x</sub>Ni<sub>0.33</sub>Mn<sub>0.33</sub> Co<sub>0.33</sub>O<sub>2</sub>(NMC<sub>333</sub>) and Li<sub>1-x</sub>Ni<sub>0.50</sub>Mn<sub>0.20</sub>Co<sub>0.3</sub>O<sub>2</sub>(NMC<sub>523</sub>) as a function of li content. *Journal of The Electrochemical Society*. 2016, 163 (8), A1512–A1517. doi: 10.1149/2.0131608jes
5. Yang C.Z.; Lou Y.; Zhang J.; Xie X.; Xia B. *Materials and working mechanisms of secondary batteries*. Springer, 2023, doi: 10.1007/978-981-19-5955-4
6. Чудинов Е.А.; Ткачук С.А. Технологические основы производства литий-ионного аккумулятора [Technological foundations of lithium-ion battery production]. *Electrochemical energy*. 2015. 15 (2), 84–92. doi: 10.18500/1608-4039-2015-15-2-84-92 (in Russian)

7. Dubasova V.S.; Mikhailova V.A.; Nikolenko A.F.; Ponomareva T.A.; Smirnova T.Yu.; Pleshakov V.F. Capacity characteristics of carbon anodic materials based on Russian natural graphite for lithium-ion batteries. *Russ. J. Electrochemistry*. 2013, 49 (2), 161-175. doi: 10.1134/S1023193513020067
8. Treshkina Yu.I.; Kruykov A.Yu.; Desyatov A.V. Vliyanie dobavok UNT na svoystva grafitovykh i smeseykh anodov litiiy-ionnykh akkumulyatorov [The effect of CNT additives on the properties of graphite and mixed anodes of lithium-ion batteries]. *Advances in Chemistry and Chemical Technology*. 2023. XXXVII (12), 175-177 (in Russian)
9. Volkovich Y.M. Superkondensatory. vypuskayemye promyshlennymi kompaniyami [Supercapacitors produced by industrial companies]. *Electrochemical Energy*. 2024, 24 (1), 3-27. DOI: 10.18500/1608-4039-2024-24-1-3-27 (in Russian)
10. Volkovich Y.M. Electrochemical Supercapacitors (a Review). *Russ J Electrochem*. 2021, 57, 311–347. doi: 10.1134/S1023193521040108
11. Lu L.; Sahajwalla V.; Kong C.; Harris D. Quantitative X-ray diffraction analysis and its application to various coals. *Carbon*. 2001 39(12), 1821-1833. doi: 10.1016/S0008-6223(00)00318-3
12. Manoj B., Kunjomana A.G. Study of stacking structure of amorphous carbon by X-ray diffraction technique. *International Journal of Electrochemical Science*. 2012, 7(4), 3127-3134. doi: 10.1016/S1452-3981(23)13940-X
13. Bogdanov S.P. *Rentgenostrukturnyy analiz uglerodistykh materialov* [X-ray structural analysis of carbon materials]. St. Petersburg: SPbGTI, 2013, 26 p. (in Russian)
14. Lee S.M.; Lee S.H.; Roh J.S. Analysis of activation process of carbon black based on structural parameters obtained by XRD analysis. *Crystals*. 2021, 11 (2), 1-11. doi: 10.3390/crys11020153
15. Kang D.S.; Lee S.M.; Lee S.H.; Roh J.S. X-ray diffraction analysis of the crystallinity of phenolic resin-derived carbon as a function of the heating rate during the carbonization process. *Carbon Letters*. 2018, 27(1), 108-111. doi: 10.5714/CL.2018.27.108.

**Сведения об авторах:**

**Кузьмина Елена Владимировна** – кандидат химических наук, заведующая лабораторией, старший научный сотрудник Уфимского института химии Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук (Уфа, Россия). E-mail: kuzmina@anrb.ru

**Гайфуллина Эльвина Равилевна** – лаборант-исследователь Уфимского института химии Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук (Уфа, Россия); магистрант Башкирского государственного педагогического университета им. М. Акмуллы (Уфа, Россия). E-mail: e.gaifullina02@mail.ru

**Шакирова Надежда Васильевна** – кандидат химических наук, младший научный сотрудник Уфимского института химии Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук (Уфа, Россия). E-mail: shakirova.elchem@gmail.com

**Юсупова Альфия Равилевна** – кандидат химических наук, научный сотрудник Уфимского института химии Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук (Уфа, Россия). E-mail: alfia\_yusupova@mail.ru

**Ахметшин Булат Салаватович** – старший преподаватель кафедры физической химии и химической экологии Уфимского университета науки и технологий (Уфа, Россия). E-mail: akhbulat@mail.ru

**Колосицын Владимир Сергеевич** – доктор химических наук, главный научный сотрудник Уфимского института химии Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук (Уфа, Россия). E-mail: kolos@anrb.ru

**Вклад авторов: все авторы сделали эквивалентный вклад в подготовку публикации. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.**

*Information about the authors:*

**Kuzmina Elena V.** – PhD in Chemistry, Head of Laboratory, and Senior Researcher at the Ufa Institute of Chemistry, Ufa Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences (Ufa, Russian Federation). E-mail: kuzmina@anrb.ru

**Gaifullina Elvina R.** – Research Laboratory Assistant, Ufa Institute of Chemistry, Ufa Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences (Ufa, Russian Federation); Master's Student, M. Akmulla Bashkir State Pedagogical University (Ufa, Russian Federation). E-mail: e.gaifullina02@mail.ru

**Shakirova Nadezhda V.** – PhD in Chemistry, Junior Researcher at the Ufa Institute of Chemistry, Ufa Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences (Ufa, Russian Federation). E-mail: shakirova.elchem@gmail.com

**Yusupova Alfia R.** – PhD in Chemistry, Researcher at the Ufa Institute of Chemistry, Ufa Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences (Ufa, Russian Federation). E-mail: alfia\_yusupova@mail.ru

**Akhmetshin Bulat S.** – Senior Lecturer, Department of Physical Chemistry and Chemical Ecology, Ufa University of Science and Technology (Ufa, Russian Federation). E-mail: akhbulat@mail.ru

**Kolosnitsyn Vladimir S.** – Doctor of Chemistry, Chief Researcher at the Ufa Institute of Chemistry, Ufa Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences (Ufa, Russian Federation). E-mail: kolos@anrb.ru

*Contribution of the authors: the authors contributed equally to this article.*

*The authors declare no conflicts of interests.*

*Статья поступила в редакцию 16.01.2025; принята к публикации 29.09.2025*

*The article was submitted 16.01.2025; accepted for publication 29.09.2025*