

# ПОРЯДОК И БЕСПОРЯДОК В СТРУКТУРАХ КАТОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ ЛИТИЙ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ

Абакумов А.М.<sup>@</sup>

*Сколковский институт науки и технологий*

<sup>@</sup> a.abakumov@skoltech.ru

Растущие потребности в увеличении удельной энергии, долговечности и снижении стоимости электрохимических накопителей энергии стимулировали активный поиск новых материалов положительного электрода (анода). Рациональный дизайн катодных материалов требует понимания сложных взаимосвязей между их кристаллической и электронной структурой, а также их эволюции в ходе обратимой (де)интеркаляции катионов щелочных металлов. Так как для электродов интеркаляционного типа особенно важно наличие путей миграции катионов с низкими энергетическими барьерами, пространственное распределение, концентрация и атомная структура точечных и/или протяженных дефектов, которые могут блокировать ионный транспорт, имеют огромное влияние на емкость и скорость работы металл-ионных аккумуляторов. Понимание структуры и роли таких дефектов невозможно без их детальной характеристики на локальном уровне с использованием современных методов просвечивающей электронной микроскопии. Полианионные катодные материалы демонстрируют чрезвычайно сложный состав и структуру дефектов, приводящих к обмену катионов щелочных и переходных металлов в результате синтеза или образующихся при электрохимическом циклировании. Антиструктурные катионные дефекты и гетеровалентные анионные дефекты оказывают существенное влияние на электрохимическую емкость катодов на основе  $\text{LiFePO}_4$  [1]. Катионный беспорядок в слоистых оксидах  $\text{A}_{1+x}\text{M}_{1-x}\text{O}_2$  играет ключевую роль в падении и гистерезисе рабочего напряжения. Будет продемонстрирована характеристика этого беспорядка на различных пространственных масштабах с использованием комбинации дифракционных и электронномикроскопических методов как в исходных материалах, так и в материалах с разным уровнем заряда [2, 3]. На примере определения структуры межзеренных границ в обогащенных литием слоистых оксидах будет показано применение сканирующей просвечивающей электронной микроскопии с коррекцией аберраций и картирования элементного состава с атомным разрешением [4]. Количественное

определение катионных антиструктурных дефектов на наноуровне будет продемонстрировано для катодов  $\text{Li}(\text{Ni},\text{Mn},\text{Co})\text{O}_2$  с высоким содержанием никеля [5]. Работа выполнена при поддержке РФФ, проект № 23-73-30003.

[1] 2019, Chem. Mater. **31**. 5035

[2] Yin W. et al., 2020, Nat. Comm. **11**. 1252

[3] Sathiya M. et al., 2015, Nat. Mater. **14**. 230.

[4] Abakumov A.M. et al., 2021, ACS Appl. Energy Mater. **4**. 6777

[5] Orlova E.D. et al., 2021, Symmetry. **13**. 1628.