

КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКИЙ ДИЗАЙН НОВЫХ ЭЛЕКТРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ МЕТАЛЛ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ

Федотов С. С.^{1, @}

¹ Сколковский институт науки и технологий (Сколтех)

@ s.fedotov@skoltech.ru

Материалы положительного и отрицательного электродов определяют основные энергетические параметры и ресурс металл-ионного аккумулятора (МИА). Фосфаты с общей формулой A_xMPO_4Y ($x = 0-2$; А – щелочной, М – 3d металл, Y – O, F) представляют собой перспективный класс электродных материалов для нового поколения МИА [1-4], характеризующийся широким разнообразием структурных типов в зависимости от природы элементов и способа синтеза.

В докладе будут рассмотрены примеры создания – кристаллохимического дизайна – новых перспективных электродных материалов для МИА с общей формулой $AMPO_4Y$ (A = Li, Na, K, NH_4 , □; M = Ti, V, Cr, Fe, Y = O, F, □; □ - вакансия), демонстрирующих уникальные электрохимические и другие функциональные свойства. В частности, $NaVPO_4F$ показывает наибольшую энергоемкость и наивысшие коэффициенты диффузии ионов натрия среди всех натрийсодержащих оксоанионных материалов [3].

Особое внимание в докладе будет уделено взаимосвязи химический состав – кристаллическая структура – электрохимические свойства в электродных материалах, а также нетривиальным для «химии материалов аккумулятора» методам и стратегиям неорганического синтеза, позволяющим получать ранее не известные полиморфные модификации.

Работа поддержана Российским Научным Фондом (№ 23-73-10125).

[1] Fedotov S. S. *et al.* 2020 Nat. Commun. **11**, 1484.

[2] Samarin A. Sh. *et al.* 2020 J. Power Sources **480**, 228840

[3] Fedotov S. S. *et al.* 2022 Nat. Commun. **11**, 1484.

[4] Abakumov A. M. *et al.* 2020 Nat. Commun. **11**, 4976.