**Ni-обогащённые слоистые оксиды, модифицированные высокозарядными ионами**

***Ситникова Л.А., Должикова Е.А., Савина А.А., Абакумов А.М.***

*Студент, 2 курс аспирантура*

*1 Сколковский институт науки и технологий, CEST, Москва, Россия*

*E-mail: Lyutsia.Sitnikova@skoltech.ru*

Обогащенные никелем слоистые оксиды переходных металлов LiNixMnyCozO2 (x + y + z = 1, x ≥ 0,8, Ni-обогащенные NMC) привлекают значительное внимание исследователей и промышленных компаний для применения их в качестве катодных материалов для литий-ионных аккумуляторов (ЛИА) нового поколения благодаря высокой плотности энергии и электрохимической емкости. Несмотря на эти преимущества, высокая деградация емкости при длительных циклах заряда-разряда и низкая термическая стабильность препятствуют широкому практическому применению Ni-обогащенных NMC. Эти недостатки обусловлены процессами, протекающими на интерфейсе между активным катодным материалом и электролитом, а также структурными трансформациями и высвобождением кислорода при повышенных значениях напряжения. В качестве стратегии повышения электрохимической и структурной стабильности Ni-обогащенных NMC в последнее время применяется модификация высокозарядными ионами (Ta5+, Ti4+, W6+ и т.д.). Однако механизмы, посредством которых такие ионы способствуют повышению указанных характеристик, остаются недостаточно изученными и требуют дальнейшего исследования.

Целью настоящей работы являлось исследование влияния модификации Ni-обогащённых слоистых оксидов высокозарядными ионами на их физико-химические, микроструктурные и электрохимические характеристики. Для этого была получена серия образцов катодных материалов Li[(Ni)1-x(Me(5,6)+)x]O2 (Ме = Nb5+, Mo6+) с различным содержанием высокозарядных ионов металлов (x = 0.05-0.1) с помощью твердофазного синтеза с последующим высокотемпературным отжигом в токе кислорода. Согласно данным порошковой рентгеновской дифракции, все полученные образцы представляют собой слоистые оксиды (пр. гр. R*-3m*), где количество антиструктурных дефектов снижается с уменьшение количества вводимого выскозарядного иона. На основе данных сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) установлено, что введение небольшого количества Nb5+ или Mo6+ приводит к изменению морфологии первичных частиц от прямоугольных кристаллитов до удлинённых пластин, наследуемых от гидроксидного прекурсора. С помощью методов просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) найдены отдельные «Me(5,6)+-обогащенные» и «Ni-обогащенные» области. Области, обогащенные Me(5,6)+, демонстрируют неравномерное распределение высокозарядных ионов внутри первичных частиц катодного материала в виде протяженных включений, при этом демонстрируют высокую дефектность кристаллической структуры. Напротив, Ni-обогащённые области отличаются хорошо сохранившейся слоистой структурой. Гальваностатические испытания показали, что образцы с наименьшим содержанием модифицирующей добавки демонстрируют повышенную стабильность после длительного циклирования. Кроме того, на профиле дифференциальной емкости (dQ/dV) для этих образцов наблюдаются более плавные пики, соответствующие фазовому переходу H2–H3, что указывает на улучшенную структурную стабильность при длительном циклировании.

*Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (проект 23-73-30003)*