**Влияние допирования магнием на механические свойства Ni-обогащенного катодного материала для литий-ионных аккумуляторов**

***Клычевских Ю.А., Моисеев И.А., Савина А.А., Абакумов А.М.***

*Студент, 2 курс магистратуры*

*Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия*

*E-mail: Yuliya.Klychevskikh@skoltech.ru*

Катодные материалы на основе Ni-обогащенных слоистых оксидов лития и переходных металлов LiNixCoyMnzO2 (NMCxyz, x ≥ 0.6, x + y + z = 1) являются перспективными катодными материалами литий-ионных аккумуляторов следующего поколения, которые могут применяться в электромобилях благодаря высокой удельной ёмкости (> 200 мАч/г), высокому среднему разрядному напряжению (~ 3.8 В) и относительно низкой стоимости [1]. Повышение содержания никеля в NMC, с одной стороны, позволяет повысить удельную емкость, но, с другой стороны, приводит к анизотропному изменению объема элементарной ячейки при заряде/разряде, приводящему к формированию микротрещин, что, в свою очередь, влечет за собой структурную деградацию материала. Одним из путей решения данной проблемы является допирование катионной подрешетки NMC. Например, было показано, что допирование магнием (< 5 моль. %) позволяет улучшить циклическую и термическую стабильность катодного материала на основе NMC [2]. Тем не менее, не проводились исследования, посвященные влиянию данного допанта на механическое свойства NMC материалов.

Целью данной работы явилось изучение влияния магния на механические свойства типичного Ni-обогащенного NMC (NMC811). Для достижения поставленной цели были подготовлены спеченные таблетки допированного магнием (SC811 + 5% Mg) и недопированного (SC811) NMC811 материалов. Методом дифракции обратно рассеянных электронов (EBSD) были определены кристаллографические ориентации интересующих зерен, из которых затем ионным пучком были вырезаны микроколонны, подвергнутые сжатию наноиндентором. Из полученных кривых сжатия были определены модули Юнга и пределы текучести для конкретных материалов (Таблица 1). Данная методика позволила определить активируемые системы скольжения и критические приведенные напряжения сдвига (КПНС).

Таблица 1. Механические характеристики SC811 и SC811 + 5% Mg

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | SC811 | | | SC811 + 5% Mg | |
| Активированные системы скольжения | | | | |
| Призматическая | Пирамидальная 1-го порядка | Пирамидальная 2-го порядка | Пирамидальная 1-го порядка | Пирамидальная 2-го порядка |
| Модуль Юнга, ГПа | 105.03 ± 10.89 | | | 121.88 ± 3.83 | |
| Предел текучести, ГПа | 5.28 ± 0.59 | 6.22 | 5.85 ± 0.29 | 5.39 | 4.98 ± 1.33 |
| КПНС, ГПа | 1.84 ± 0.44 | 2.83 | 2.49 ± 0.15 | 2.61 | 2.07 ± 0.65 |

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-73-30003, https://rscf.ru/project/23-73-30003/*

**Литература**

1. Sun H. H. et al. Beyond Doping and Coating: Prospective Strategies for Stable High-Capacity Layered Ni-Rich Cathodes // ACS Energy Letters*.* Vol. 5. № 4ю P. 1136–1146. DOI: <https://doi.org/10.1021/acsenergylett.0c00191>.

2. Gomez‐Martin A. et al. Magnesium Substitution in Ni‐Rich NMC Layered Cathodes for High‐Energy Lithium Ion Batteries // Advanced Energy Materials. 2022. Vol. 12. №. 8. P. 2103045. DOI: <https://doi.org/10.1002/aenm.202103045>.