

ФТОРИДО-ФОСФАТЫ ЩЕЛОЧНЫХ И ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ – ПЕРСПЕКТИВНЫЕ КАТОДНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ МЕТАЛЛ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ

Антипов Е.В.

*Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова,
email: evgeny.antipoiv@gmail.com*

Источником около 90% используемой в настоящее время энергии является ископаемое топливо, что имеет очень серьезные последствия: быстрое истощение природных ресурсов и существенный экологический ущерб. Поэтому актуальной задачей является развитие возобновляемых источников энергии и эффективных накопителей энергии, что позволит существенно уменьшить потребление природных ресурсов в будущем. Характеристики аккумулятора в значительной степени определяются свойствами катодного материала. Фторидо-фосфаты переходных металлов A_xMPO_4F ($A = Li, Na, K; M = V, Fe, Co$) имеют ряд преимуществ по сравнению с существующими катодными материалами: значительное увеличение рабочих напряжений из-за индуктивного эффекта и более быстрый транспорт катионов щелочных металлов.

Отличительной структурной особенностью этих материалов является наличие атомов кислорода, связанных с фосфором и щелочными катионами, но не включенных в координацию переходных металлов. Эти атомы кислорода могут определять механизм изменения структуры во время циклирования и вызывать нежелательное разупорядочение катионов. Различная активность катионов щелочных металлов, окруженных разным числом таких атомов кислорода, объясняет разницу между механизмами деинтеркаляции щелочных катионов из структуры Na_2FePO_4F в Na- или Li-ионных ячейках.

Недавно мы предложили новую серию катодных материалов на основе $AVPO_4F$ ($A = Li, Na, K, Rb$), кристаллизующихся в структуре типа $KTiOPO_4$ (КТР). Электрохимические характеристики материалов и транспортные свойства разных щелочных катионов сильно различаются. Коэффициенты диффузии этих катионов, определенные с помощью РИТТ, были самыми низкими для Li^+ ($10^{-12} - 10^{-14} \text{ см}^2/\text{с}$) и самыми высокими для K^+ ($10^{-11} - 10^{-12} \text{ см}^2/\text{с}$).

В докладе будут обсуждены свойства и перспективы использования различных фторидо-фосфатов щелочных и переходных металлов в металл-ионных аккумуляторах.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 17-73-30006).