

Научная статья

УДК 541.136

DOI: <https://doi.org/10.18721/JEST.31308>



П.А. Новиков  , Г.В. Цветкова, А.А. Попович

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия

 novikov_pa@spbstu.ru

ИЗУЧЕНИЕ ЭВОЛЮЦИИ СТРУКТУРЫ КАТОДНОГО МАТЕРИАЛА $\text{LiNi}_{0,8}\text{Co}_{0,1}\text{Mn}_{0,1}\text{O}_2$ В УСЛОВИЯХ ЦИКЛИРОВАНИЯ С ПЕРЕЗАРЯДОМ С ПРИМЕНЕНИЕМ *IN-SITU* ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ

Аннотация. В данной статье представлен детальный анализ катодного материала $\text{LiNi}_{0,8}\text{Co}_{0,1}\text{Mn}_{0,1}\text{O}_2$ (NCM811) с использованием непрерывной *in-situ* рентгеновской дифрактометрии во время циклирования ячейки в диапазоне напряжений от 2,7 В до 4,8 В, что вело к ее перезаряду. Исследовались изменения кристаллической структуры материала в процессе заряда и разряда. Показано снижение емкости, вызванное деградацией, а также выявлена зависимость параметров элементарной ячейки материала от применяемого в ходе циклирования напряжения. Проведен анализ причин необратимых структурных изменений катодного материала, возникающих при интеркаляции и деинтеркаляции ионов лития. Полученные результаты открывают возможности разработки эффективных методов снижения факторов деградации за счет понимания механизмов разрушения материала.

Ключевые слова: литий-ионные аккумуляторы, катодные материалы, дифракция рентгеновских лучей, структурная деградация материала.

Благодарности: Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках программы стратегического академического лидерства «Приоритет 2030» (Соглашение № 075-15-2025-210 от 04.04.2025).

Для цитирования:

Новиков П.А., Цветкова Г.В., Попович А.А. Изучение эволюции структуры катодного материала $\text{LiNi}_{0,8}\text{Co}_{0,1}\text{Mn}_{0,1}\text{O}_2$ в условиях циклирования с перезарядом с применением *in-situ* дифракции рентгеновских лучей // Глобальная энергия. 2025. Т. 31, № 3. С. 107–116. DOI: <https://doi.org/10.18721/JEST.31308>



P.A. Novikov ✉, G.V. Tsvetkova, A.A. Popovich

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

✉ novikov_pa@spbstu.ru

STUDY OF EVOLUTION OF THE STRUCTURE OF THE CATHODE MATERIAL $\text{LiNi}_{0.8}\text{Co}_{0.1}\text{Mn}_{0.1}\text{O}_2$ UNDER CONDITIONS OF CYCLING WITH RECHARGING USING *IN-SITU* X-RAY DIFFRACTION

Abstract. This article presents a detailed analysis of the cathode material $\text{LiNi}_{0.8}\text{Co}_{0.1}\text{Mn}_{0.1}\text{O}_2$ (NCM811) using continuous *in-situ* X-ray diffractometry during cell cycling in the voltage range from 2.7 V to 4.8 V, which led to its recharge. The changes in the crystal structure of the material during charging and discharging are investigated. The decrease in capacitance caused by degradation is shown, and the dependence of the parameters of the unit cell of the material on the voltage applied during cycling is revealed. The analysis of the causes of irreversible structural changes in the cathode material that occur during intercalation and deintercalation of lithium ions is carried out. The results obtained open up the possibility of developing effective methods to reduce degradation factors by understanding the mechanisms of material destruction.

Keywords: lithium-ion batteries, cathode materials, X-ray diffraction, structural degradation of the material.

Acknowledgements: The research was financially supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation within the framework of the strategic academic leadership program “Priority 2030” (Agreement No. 075-15-2025-210 dated 04.04.2025).

Citation:

Novikov P.A., Tsvetkova G.V., Popovich A.A., Study of evolution of the structure of the cathode material $\text{LiNi}_{0.8}\text{Co}_{0.1}\text{Mn}_{0.1}\text{O}_2$ under conditions of cycling with recharging using *in-situ* X-ray diffraction, *Global Energy*, 31 (03) (2025) 107–116, DOI: <https://doi.org/10.18721/JEST.31308>

Введение. Широкое использование электронных устройств во множестве сфер жизни современного человека приводит к гигантскому спросу на портативные устройства хранения энергии с высокими удельными характеристиками, но при этом не приносящие большого вреда окружающей среде. Такими устройствами на сегодняшний день являются литий-ионные аккумуляторы (ЛИА) [1]. Обладая такими ключевыми характеристиками, как высокая плотность энергии, низкая скорость саморазряда, большая вариативность токовых нагрузок и отсутствие эффекта памяти, ЛИА активно используются в портативных электронных устройствах и в электротранспорте [2]. Несмотря на впечатляющие отличительные свойства данной аккумуляторной системы, циклический ресурс ее ограничен из-за необратимой деградации электродных материалов в ходе эксплуатации. Изучение процессов деградации и борьбы с ней, а также разработка новых функциональных электродных материалов представляют интерес для многих научных групп, работающих в области химических источников тока [3–6].

В нынешних реалиях наиболее часто используемые катодные материалы в ЛИА – это слоистые тройные литированные оксиды переходных металлов $\text{LiNi}_x\text{Co}_y\text{Mn}_z\text{O}_2$ ($x + y + z = 1$) [7]. В зависимости от стехиометрического соотношения переходных металлов можно регулировать свойства аккумулятора: так, например, при увеличении количества марганца в структуре

увеличивается ресурс жизни ЛИА, при увеличении никеля растет плотность энергии, а при увеличении концентрации кобальта улучшается электронная проводимость материала [8–10]. Таким образом, в погоне за высокими удельными емкостными характеристиками материал NCM811 с высоким содержанием никеля является наиболее популярным для использования в качестве катодного материала, но его относительно короткий циклический ресурс сильно ограничивает его применение.

Основные характеристики, отвечающие за электрохимическое поведение материала, такие как удельная емкость, электронная и ионная проводимости, циклический ресурс, определяются кристаллической структурой данного материала. В ходе работы аккумулятора катодный материал подвергается ряду структурных изменений, связанных с интеркаляцией/деинтеркаляцией лития. Необратимые структурные изменения приводят к деградации материала и, как следствие, к ухудшению его электрохимических характеристик.

Целью данной работы является исследование структурных трансформаций в катодном материале типа NCM811 в ходе циклирования ЛИА для определения ключевых факторов, ведущих к разрушению кристаллической структуры, и влияния данного процесса на электрохимические свойства катодного материала.

Материалы и методы

Исследуемый электрод был приготовлен методом намазки на алюминиевую фольгу суспензии, состоящей из 80 мас.% NCM811, 10% токопроводящей добавки из сажи и 10% связующего PVDF, растворенной в N-метилпирролидоне. Все компоненты для сборки испытательного макета и ячейки *in-situ* были подвергнуты обработке в этаноле в ультразвуковой ванне в течение трех минут, а затем высушены в вакуумном шкафу при 80°C в течение 12 часов.

Ячейка *in-situ* была собрана в перчаточном боксе в атмосфере аргона, содержание воды не превышало 10 ppm, содержание кислорода составляло не более 500 ppm. Литиевая фольга толщиной 0,6 мм и диаметром 16 мм использовалась как противоэлектрод в испытательном макете. В качестве электролита использовался раствор 1 M LiPF₆ в смеси растворителей в соотношении 1:1:1 диэтил карбоната, диметил карбоната и этилен карбоната. В роли сепаратора был использован материал Celgard 2400 с толщиной 25 мкм.

Исследование емкостных характеристик проводилось с использованием системы тестирования батарей BTS NEWARE CT-3008-5V10mA (Neware, Китай). Кристаллическая структура катодного материала была изучена с помощью дифрактометра Bruker (Германия) в режиме непрерывной съемки в диапазоне углов от 15° до 70° с шагом в 0,02° и временем выдержки 0,7 секунды на каждом шаге. Структурные параметры были вычислены по Ритвельду с использованием программного обеспечения TOPAS5.

Результаты и обсуждение

На рис. 1а представлена рентгенограмма исходного материала – тройного литированного оксида переходных металлов $\text{LiNi}_{0,8}\text{Co}_{0,1}\text{Mn}_{0,1}\text{O}_2$. Все пики индексируются фазой $\alpha\text{-NaFeO}_2$, относящейся к пространственной группе R3m. Параметры элементарной ячейки a и c , определенные методом Ритвельда, составили 2,873 Å и 14,203 Å соответственно, $c/a = 4,95$. Явное разделение пиков (006/102) и (108/110) характеризует слоистую структуру материала [11, 12]. Структурный параметр I (003/104), отношение интенсивностей пиков 003 и 104, составил 2,29, что говорит о низкой степени катионного смещения в материале и, как следствие, об упорядоченности структуры катодного материала. Дифрактограмма катодного материала до циклирования в собранной ячейке *in-situ* продемонстрирована на рис. 1б. Параметры элементарной ячейки: $a = 2,871$ Å, $c = 14,199$ Å. Явление незначительного изменения параметров кристаллической решетки в сборке *in-situ* уже было рассмотрено другими группами ученых [13].

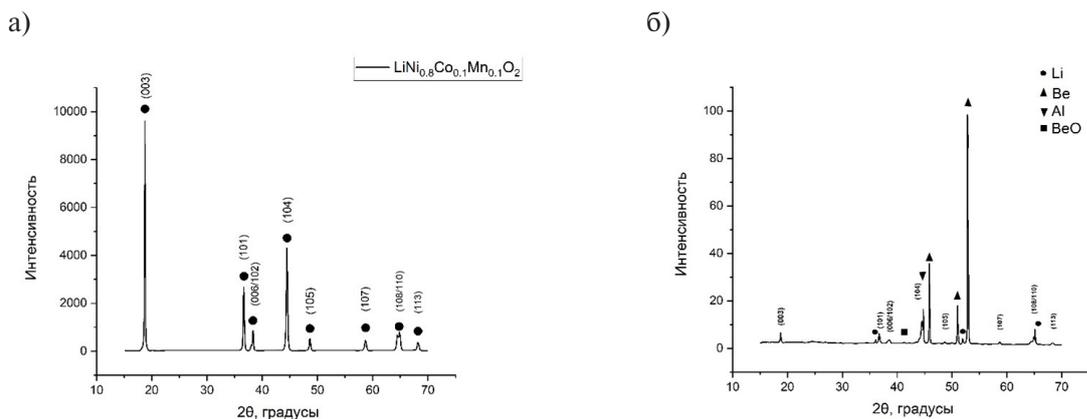


Рис. 1. Рентгенограмма исходного порошка тройного литированного оксида (а), рентгенограмма исходного порошка в собранной ячейке *in-situ* (б)

Fig. 1. X-ray of the initial powder of lithium oxide (a), X-ray of the initial powder in the assembled cell *in-situ* (b)

Заметное снижение интенсивности пика (003) по отношению к остальным пикам может быть связано с углом рентгеновского излучения, зависящим от глубины проникновения.

Рис. 2а демонстрирует рентгенограммы испытательного макета во время циклирования. Немонотонное смещение пика (003) в ходе заряда демонстрирует нелинейное изменение параметра элементарной ячейки c (рис. 2б). Параметр a , наоборот, непрерывно снижается, так же, как и пик (110), постоянно сдвигается вправо (рис. 2в).

На рис. 3 показаны изменение параметров a и c ячейки с NCM811 и зависимость потенциала от количества ионов лития, остающихся в решетке катодного материала после пятого цикла. В течение одного цикла можно определить пять стадий структурных изменений. На первой стадии, до значения напряжения 4,05 В, начинается процесс заряда, в ходе которого ионы лития интеркалируют в структуру катодного материала. Таким образом, силы электростатического отталкивания слоев кислорода растут, что, в свою очередь, приводит к увеличению параметра c . Параметр a уменьшается, так как компенсация заряда происходит при окислении переходных металлов.

На второй стадии при диапазоне напряжений от 4,05 до 4,4 В медленный рост параметра c заменяется его быстрым падением. Объяснением этого процесса может быть замещение атомов лития в кристаллической решетке атомами Ni^{2+} из-за близких радиусов ионов ($\text{Li}^+ = 0,76 \text{ \AA}$, $\text{Ni}^{2+} = 0,69 \text{ \AA}$) [14]. Помимо этого структура катодного материала также начнет выделение ионов O^{2-} , из-за чего отталкивание кислородных слоев уменьшается [15].

В ходе третьей стадии параметр a остается неизменным, таким образом, компенсация заряда происходит уже не за счет окисления переходных металлов, а только за счет высвобождения лития и кислорода. Параметр c продолжает уменьшаться по тому же механизму, что и во второй стадии.

Четвертая стадия начинается при процессе разряда. Параметр a постепенно увеличивается на протяжении всего процесса заряда из-за уменьшения содержания переходных металлов. Параметр c увеличивается с момента стабилизации структуры ионами лития, которые занимают вакантные места переходных металлов. Этот процесс вызывает возникновение физических дефектов в кристаллической решетке материала. Падение напряжения при начале разряда объясняется процессами поляризации, связанными с расширением элементарной ячейки.

На пятой стадии вакансии никеля заполнены, из-за чего литий встраивается только в литиевые слои, таким образом, электростатическое высвобождение слоев кислорода уменьшается, как и параметр c [16].

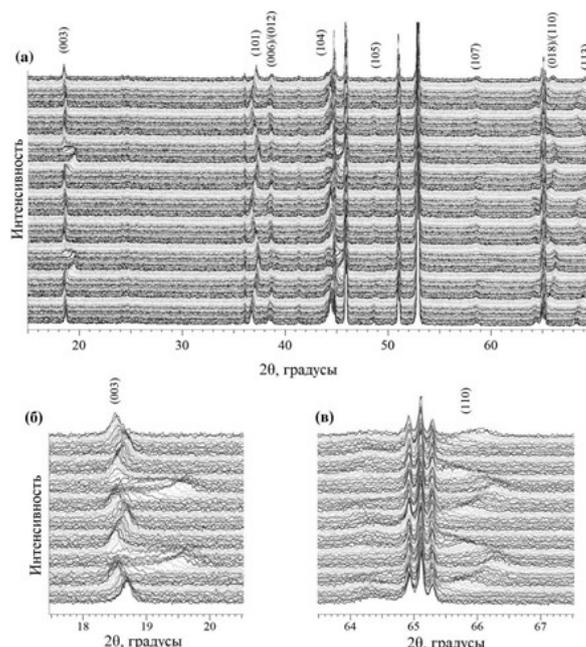


Рис. 2. Рентгенограмма 1 и 2 цикла заряда-разряда в диапазонах градусов:
а) от 15 до 69°; б) от 15 до 25°; в) от 63 до 68°

Fig. 2. X-ray 1 and 2 of charge-discharge cycles in the range of degrees:
a) from 15 to 69°; b) from 15 to 25°; c) from 63 to 68°

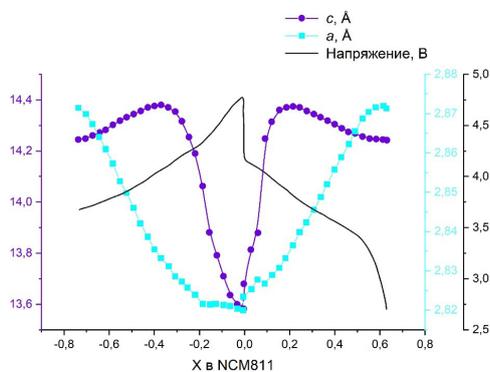


Рис. 3. Соответствие потенциала заряда/разряда параметрам элементарной ячейки
Fig. 3. Correspondence of the charge/discharge potential to the unit cell parameters

На рис. 4 отображены объемные изменения элементарной ячейки $\text{LiNi}_{0,8}\text{Co}_{0,1}\text{Mn}_{0,1}\text{O}_2$ и изменения отношения параметров c/a в зависимости от потенциала заряда. Стремительное сжатие кристаллической решетки и заметное уменьшение отношения c/a из-за высвобождения кислорода при заряде свыше 4,2 В ведут к механическому напряжению в элементарной ячейке, которое может привести к разрушению структуры катода.

На рис. 5 отображены результаты рентгенофазового анализа испытуемого макета в состоянии разряда после нескольких циклов. Образование фазы оксида лития (Li_2O) объясняется реакцией металлического лития с кислородом, выделяемым в ходе процесса заряда. Смещение пика (003) влево и пика (110) вправо демонстрирует частичную деинтеркаляцию лития из структуры литированного оксида.

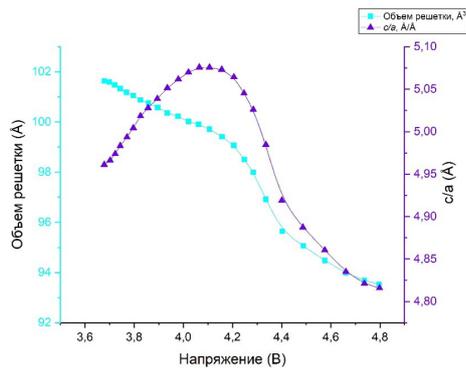


Рис. 4. Изменение объема элементарной ячейки и отношения параметров c/a в ходе заряда
 Fig. 4. Changes in the volume of the unit cell and the ratio of the c/a parameters during charging

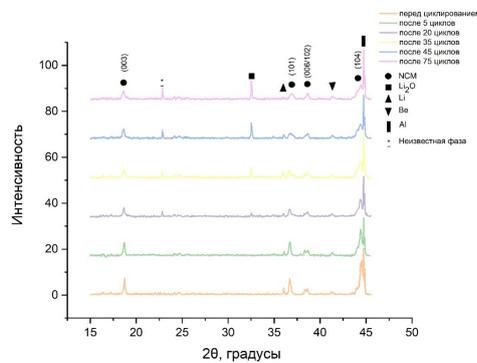


Рис. 5. Дифрактограммы ячейки *in-situ* на разных циклах
 Fig. 5. *In-situ* cell diffractograms in different cycles

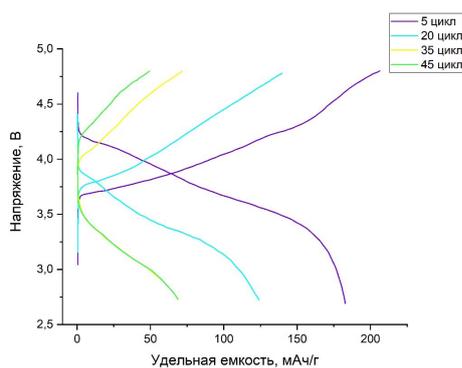


Рис. 6. Зарядно-разрядные кривые материала $\text{LiNi}_{0.8}\text{Co}_{0.1}\text{Mn}_{0.1}\text{O}_2$ в ячейке *in-situ* на разных циклах
 Fig. 6. Charge-discharge curves of $\text{LiNi}_{0.8}\text{Co}_{0.1}\text{Mn}_{0.1}\text{O}_2$ material in an *in-situ* cell in different cycles

На рис. 6 продемонстрированы значения емкости, которые заметно падают в ходе циклирования под влиянием факторов деградации. К десятому циклу удержание удельной разрядной емкости составило 80% (начальная разрядная емкость составила 211 мАч/г, на десятом цикле – 168 мАч/г).

Заклучение

В данной статье представлено изучение эволюции кристаллической структуры катодного материала $\text{LiNi}_{0,8}\text{Co}_{0,1}\text{Mn}_{0,1}\text{O}_2$ в ходе циклирования в условиях перезаряда до напряжения в 4,8 В. Было обнаружено, что при значениях потенциала около 4,05 В – в связи с сильным эффектом отталкивания слоев кислорода – параметр с увеличивается, а затем сразу же уменьшается, что вызвано явлением высвобождения кислорода из структуры и диффузией ионов никеля в литиевые слои. При разряде происходит обратный процесс: параметр с сначала увеличивается, затем снижается – в связи с внедрением ионов лития в вакантные места первоначально в слоях никеля, а затем уже в слоях лития. При напряжении в 4,4 В параметр а уменьшается – в связи с окислением переходных металлов, а затем его значения становятся стабильными, так как дальнейшая компенсация заряда происходит за счет интеркаляции кислорода. С момента начала разряда до достижения напряжения 2,7 В параметр а постоянно увеличивается.

Происходящее во время заряда высвобождение кислорода приводит к структурной деградации материала и, как следствие, к снижению емкостных показателей в ходе циклических испытаний. Кроме того, кислород окисляет диффузный литий и, вероятно, может также реагировать с электролитом и анодным материалом. При значении напряжения 4,2 В происходит быстрое сжатие ячейки, что приводит к механическим напряжениям в материале, а это, в свою очередь, вызывает искажение решетки в структуре и затрудняет диффузию ионов лития.

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

- [1] **Dunn B., Kamath H., Tarascon J.-M.** Electrical energy storage for the grid: A battery of choices, *Science*, 344 (6058) (2011) 928–935. DOI: 10.1126/science.1212741
- [2] **Datt Bhatt M., O'Dwyer C.** Recent progress in theoretical and computational investigations of Li-ion battery materials and electrolytes, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 17 (7) (2015) 4799–4844. DOI: 10.1039/C4CP05552G
- [3] **Nitta N., Wu F., Lee J.T., Yushin G.** Li-ion battery materials: present and future, *Materials Today*, 18 (5) (2015) 252–264. DOI: 10.1016/j.mattod.2014.10.040
- [4] **Nilmoung S., Limphirat W., Maensiri S.** Electrochemical properties of ACNF/ $\text{Li}_2\text{FeSiO}_4$ composite nanostructures for energy storage devices, *SSRN*, (2021). DOI: 10.2139/ssrn.3972614
- [5] **Korobov D.D., Mitrofanov I.V., Pushnitsa K.A., Kim A.E., Koshtyal Yu.M., Pechen L.S., Popovich A.A., Maximov M.Yu.** Features of improved capacity at high discharge rate of K-doped Li-rich cathodes for LIBs, *Materials Today: Proceedings*, 30 (3) (2020) 778–783. DOI: 10.1016/j.matpr.2020.01.566
- [6] **Zang G., Zhang J., Xu S., Xing Y.** Techno-economic analysis of cathode material production using flame-assisted spray pyrolysis, *Energy*, 218 (2021) 119504. DOI: 10.1016/j.energy.2020.119504
- [7] **Dufo-López R., Carvalho M., Pasaoglu G.** The lithium-ion battery: State of the art and future perspectives, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 89 (2018) 292–308. DOI: 10.1016/j.rser.2018.03.002
- [8] **Huang W., Lin C., Zhang M., Li S., Chen Z., Zhao W., Zhu C., Zhao Q., Chen H., Pan F.** Revealing roles of Co and Ni in Mn-rich layered cathodes, *Advanced Energy Materials*, 11 (41) (2021) 2102646. DOI: 10.1002/aenm.202102646
- [9] **Lee H., Suh J.H., Chaudhary R., Mun J., Kim J.H.** Materials challenges in high-energy batteries enabling ultra-fast charging and non-flammable performance for electric vehicles, *Frontiers in Batteries and Electrochemistry*, 4, (2025) 1636618. DOI: 10.3389/fbael.2025.1636618
- [10] **Takegami D., Kawai K., Ferreira-Carvalho M., Rößler S., Liu C.-E., Kuo C.-Y., Chang C.-F., Minamida A., Miyazaki T., Okubo M., Tjeng L.H., Mizokawa T.** Valence study of $\text{Li}(\text{Ni}_{0,5}\text{Mn}_{0,5})_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_2$ and $\text{LiNi}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_2$: The role of charge transfer and charge disproportionation, *Physical Review Materials*, 8 (2024) 055401. DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.8.055401

- [11] **Yang C., Hao Y., Wang J., Zhang M., Song L., Qu J.** Research on the facile regeneration of degraded cathode materials from spent $\text{LiNi}_{0.5}\text{Co}_{0.2}\text{Mn}_{0.3}\text{O}_2$ lithium-ion batteries, *Frontiers in Chemistry*, 12 (2024) 1400758. DOI: 10.3389/fchem.2024.1400758
- [12] **Hu G., Qi X., Hu K., Lai X., Zhang X., Du K., Peng Z., Cao Y.** A facile cathode design with a $\text{LiNi}_{0.6}\text{Co}_{0.2}\text{Mn}_{0.2}\text{O}_2$ core and an AlF_3 -activated $\text{Li}_{1.2}\text{Ni}_{0.2}\text{Mn}_{0.6}\text{O}_2$ shell for Li-ion batteries, *Electrochimica Acta*, 265 (2018) 391–399. DOI: 10.1016/j.electacta.2018.01.176
- [13] **Hausbrand R., Cherkashinin G., Ehrenberg H., Gröting M., Albe K., Hess C., Jaegermann W.** Fundamental degradation mechanisms of layered oxide Li-ion battery cathode materials: Methodology, insights and novel approaches, *Materials Science and Engineering: B*, 192 (2015) 3–25. DOI: 10.1016/j.mseb.2014.11.014
- [14] **Abdel-Ghany A.E., El-Tawil R.S., Hashem A.M., Mauger A., Julien C.M.** Integrated lithium-rich $y\text{Li}_2\text{MnO}_3 \cdot (1-y)\text{LiNi}_{1/3}\text{Co}_{1/3}\text{Mn}_{1/3}\text{O}_2$ layered cathode nanomaterials for lithium-ion batteries, *International Journal of Molecular Sciences*, 26 (3) (2025) 1346. DOI: 10.3390/ijms26031346
- [15] **Liang C., Longo R.C., Kong F., Zhang C., Nie Y., Zheng Y., Kim J.-S., Jeon S., Choi S., Cho K.** Obstacles toward unity efficiency of $\text{LiNi}_{1-2x}\text{Co}_x\text{Mn}_x\text{O}_2$ ($x=0\sim 1/3$) (NCM) cathode materials: Insights from ab initio calculations, *Journal of Power Sources*, 340 (2017) 217–228. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2016.11.056
- [16] **Koga H., Croguennec L., Ménétrier M., Mannesiez P., Weill F., Delmas C.** Different oxygen redox participation for bulk and surface: A possible global explanation for the cycling mechanism of $\text{Li}_{1.20}\text{Mn}_{0.54}\text{Co}_{0.13}\text{Ni}_{0.13}\text{O}_2$, *Journal of Power Sources*, 236 (2013) 250–258. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2013.02.075

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

НОВИКОВ Павел Александрович – директор НОЦ «МТМ», Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, канд. техн. наук.
E-mail: novikov_pa@spbstu.ru

ЦВЕТКОВА Галина Викторовна – Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, канд. техн. наук.
E-mail: Tsvetkova_gv@mail.ru

ПОПОВИЧ Анатолий Анатольевич – директор ИММТ, Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, д-р техн. наук.
E-mail: popovicha@mail.ru
ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-5974-6654>

REFERENCES

- [1] **B. Dunn, H. Kamath, J.-M. Tarascon**, Electrical energy storage for the grid: A battery of choices, *Science*, 344 (6058) (2011) 928–935. DOI: 10.1126/science.1212741
- [2] **M. Datt Bhatt, C. O'Dwyer**, Recent progress in theoretical and computational investigations of Li-ion battery materials and electrolytes, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 17 (7) (2015) 4799–4844. DOI: 10.1039/C4CP05552G
- [3] **N. Nitta, F. Wu, J.T. Lee, G. Yushin**, Li-ion battery materials: present and future, *Materials Today*, 18 (5) (2015) 252–264. DOI: 10.1016/j.mattod.2014.10.040
- [4] **S. Nilmoung, W. Limphirat, S. Maensiri**, Electrochemical properties of ACNF/ $\text{Li}_2\text{FeSiO}_4$ composite nanostructures for energy storage devices, *SSRN*, (2021). DOI: 10.2139/ssrn.3972614

- [5] D.D. Korobov, I.V. Mitrofanov, K.A. Pushnitsa, A.E. Kim, Yu.M. Koshtyal, L.S. Pechen, A.A. Popovich, M.Yu. Maximov, Features of improved capacity at high discharge rate of K-doped Li-rich cathodes for LIBs, *Materials Today: Proceedings*, 30 (3) (2020) 778–783. DOI: 10.1016/j.matpr.2020.01.566
- [6] G. Zang, J. Zhang, S. Xu, Y. Xing, Techno-economic analysis of cathode material production using flame-assisted spray pyrolysis, *Energy*, 218 (2021) 119504. DOI: 10.1016/j.energy.2020.119504
- [7] R. Dufo-López, M. Carvalho, G. Pasaoglu, The lithium-ion battery: State of the art and future perspectives, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 89 (2018) 292–308. DOI: 10.1016/j.rser.2018.03.002
- [8] W. Huang, C. Lin, M. Zhang, S. Li, Z. Chen, W. Zhao, C. Zhu, Q. Zhao, H. Chen, F. Pan, Revealing roles of Co and Ni in Mn-rich layered cathodes, *Advanced Energy Materials*, 11 (41) (2021) 2102646. DOI: 10.1002/aenm.202102646
- [9] H. Lee, J.H. Suh, R. Chaudhary, J. Mun, J.H. Kim, Materials challenges in high-energy batteries enabling ultra-fast charging and non-flammable performance for electric vehicles, *Frontiers in Batteries and Electrochemistry*, 4, (2025) 1636618. DOI: 10.3389/fbael.2025.1636618
- [10] D. Takegami, K. Kawai, M. Ferreira-Carvalho, S. Rößler, C.-E. Liu, C.-Y. Kuo, C.-F. Chang, A. Minamida, T. Miyazaki, M. Okubo, L.H. Tjeng, T. Mizokawa, Valence study of $\text{Li}(\text{Ni}_{0.5}\text{Mn}_{0.5})_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_2$ and $\text{LiNi}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}_2$: The role of charge transfer and charge disproportionation, *Physical Review Materials*, 8 (2024) 055401. DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.8.055401
- [11] C. Yang, Y. Hao, J. Wang, M. Zhang, L. Song, J. Qu, Research on the facile regeneration of degraded cathode materials from spent $\text{LiNi}_{0.5}\text{Co}_{0.2}\text{Mn}_{0.3}\text{O}_2$ lithium-ion batteries, *Frontiers in Chemistry*, 12 (2024) 1400758. DOI: 10.3389/fchem.2024.1400758
- [12] G. Hu, X. Qi, K. Hu, X. Lai, X. Zhang, K. Du, Z. Peng, Y. Cao, A facile cathode design with a $\text{LiNi}_{0.6}\text{Co}_{0.2}\text{Mn}_{0.2}\text{O}_2$ core and an AlF₃-activated $\text{Li}_{1.2}\text{Ni}_{0.2}\text{Mn}_{0.6}\text{O}_2$ shell for Li-ion batteries, *Electrochimica Acta*, 265 (2018) 391–399. DOI: 10.1016/j.electacta.2018.01.176
- [13] R. Hausbrand, G. Cherkashinin, H. Ehrenberg, M. Gröting, K. Albe, C. Hess, W. Jaegermann, Fundamental degradation mechanisms of layered oxide Li-ion battery cathode materials: Methodology, insights and novel approaches, *Materials Science and Engineering: B*, 192 (2015) 3–25. DOI: 10.1016/j.mseb.2014.11.014
- [14] A.E. Abdel-Ghany, R.S. El-Tawil, A.M. Hashem, A. Mauger, C.M. Julien, Integrated lithium-rich $y\text{Li}_2\text{MnO}_3 \cdot (1-y)\text{LiNi}_{1/3}\text{Co}_{1/3}\text{Mn}_{1/3}\text{O}_2$ layered cathode nanomaterials for lithium-ion batteries, *International Journal of Molecular Sciences*, 26 (3) (2025) 1346. DOI: 10.3390/ijms26031346
- [15] C. Liang, R.C. Longo, F. Kong, C. Zhang, Y. Nie, Y. Zheng, J.-S. Kim, S. Jeon, S. Choi, K. Cho, Obstacles toward unity efficiency of $\text{LiNi}_{1-2x}\text{Co}_x\text{Mn}_x\text{O}_2$ ($x=0\sim 1/3$) (NCM) cathode materials: Insights from ab initio calculations, *Journal of Power Sources*, 340 (2017) 217–228. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2016.11.056
- [16] H. Koga, L. Croguennec, M. Ménétrier, P. Mannesiez, F. Weill, C. Delmas, Different oxygen redox participation for bulk and surface: A possible global explanation for the cycling mechanism of $\text{Li}_{1.20}\text{Mn}_{0.54}\text{Co}_{0.13}\text{Ni}_{0.13}\text{O}_2$, *Journal of Power Sources*, 236 (2013) 250–258. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2013.02.075

INFORMATION ABOUT AUTHORS

Pavel A. NOVIKOV – *Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.*
E-mail: novikov_pa@spbstu.ru

Galina V. TSVETKOVA – *Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.*
E-mail: Tsvetkova_gv@mail.ru

Anatoliy A. POPOVICH – *Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.*

E-mail: popovicha@mail.ru

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-5974-6654>

Поступила: 22.07.2025; Одобрена: 21.08.2025; Принята: 29.08.2025.

Submitted: 22.07.2025; Approved: 21.08.2025; Accepted: 29.08.2025.