

Аспирант 2 года обучения Федоров Дмитрий Сергеевич
лаборатории диффузии

Научный руководитель – к.ф.-м.н. Бузлуков Антон Леонидович

Специальность 1.3.8 – Физика конденсированного состояния

Тема работы – Катионный транспорт в сложнооксидных соединениях

Задача текущего года

Исследовать особенности структуры, катионного транспорта и проводимости в различных системах со структурами типа: NASICON и шеелит, а также твёрдых растворов на их основе с помощью метода ЯМР.

Результаты, полученные в текущем году

1. Произведены оценки для величин частоты ионных скачков и энергии активации для образцов с различными структурами и стехиометрическими составами.
2. Показано, что в соединение $\text{Na}_4\text{Zr}(\text{MoO}_4)_4$ при температуре $T=550$ К присутствуют быстрые локализованные межканальные перескоки большого количества ионов натрия.
3. Установлено, что механизм диффузии натрия в $\text{Na}_5\text{M}(\text{MoO}_4)_4$ и его твёрдых растворах определяется двумя видом прыжков: через эквивалентные позиции в спиральных каналах и двухпозиционным обменом «two-site exchange»

Аспирант 2 года обучения Федоров Дмитрий Сергеевич
лаборатории диффузии

Апробация работы

Статьи

- 1) А.Л. Бузлуков, Д.С. Федоров, А.В. Сердцев, И.Ю. Котова, А.П. Тютюнник, Д.В. Корона, Я.В. Бакланова, В.В. Оглобличев, Н.М. Кожевникова, Т.А. Денисова, Н.И. Медведева. Ионная подвижность в тройных молибдатах и вольфраматах натрия со структурой NASICON // ЖЭТФ. - 2022. - том 161, вып.1. - С. 1-12.
- 2) Я.В. Бакланова, А.Л. Бузлуков, Д.С. Федоров, Т.А. Денисова, А.П. Тютюнник, А.А. Савина, Е.Г. Хайкина, И.Ю. Арапова. Подвижность ионов натрия в тройном молибдате $\text{Na}_{25}\text{Cs}_8\text{Sc}_5(\text{MoO}_4)_{24}$ // ЖНХ. - 2022. - том 67, №6. - С. 698-705.
- 3) D.S. Fedorov, A.L. Buzlukov, Y.V. Baklanova, D.V. Suetin, A.P. Tyutyunnik, D.V. Korona, L.G. Maksimova, V.V. Ogloblichev, T.A. Denisova, and N.I. Medvedeva. Sodium diffusion in scheelite-type $\text{Na}_2\text{Zr}(\text{MoO}_4)_3$ and $\text{Na}_4\text{Zr}(\text{MoO}_4)_4$ // Ceramics International. – 2022. – T. Volume 48, № Issue 21. – С. 32338-32347.

**Аспирант 2 года обучения Федоров Дмитрий Сергеевич
лаборатории диффузии**

Апробация работы

Тезисы докладов на международных конференциях

1) Fedorov D. S., Buzlukov A. L., Denisova T. A., Kotova I. Y. ^{23}Na NMR IN COMPLEX SODIUM TUNGSTATES WITH A NASICON-TYPE STRUCTURE // VIII International Youth Scientific Conference, Physics. Technology. Innovations. PTI – 2021. Ekaterinburg, Russia. 2021. Book of abstracts. pp. 765-767.

2) Buzlukov A.L., Fedorov D.S., Serdtsev A.V., Kotova I.Yu., Tyutyunnik A.P., Korona D.V., Baklanova Ya.V., Ogloblichev V.V., Kozhevnikova N.M., Denisova T.A., Medvedeva N.I. Ionic mobility in triple molybdates and tungstates with a NASICON-type structure // 7th International Conference of Young Scientists, Topical Problems of Modern Electrochemistry and Electrochemical Materials Science. Moscow, Russia. 2022. Book of abstracts. pp. 24-25.

3) Fedorov D.S., Buzlukov A.L., Baklanova Y.V., Tyutyunnik A.P., Korona D.V., Maksimova L.G., Denisova T.A., Medvedeva N.I., Spiridonova T.S., Zolotova E.S. Sodium diffusion in scheelite-type $\text{Na}_5\text{M}(\text{MoO}_4)_4$ ($M=\text{Bi}, \text{La}, \text{Y}$) // 20th International School-Conference, Magnetic resonance and its applications (Spinus). Saint-Petersburg, Russia. 2023. Book of proceedings. pp. 72-74.

**Аспирант 2 года обучения Федоров Дмитрий Сергеевич
лаборатории диффузии**

Тезисы докладов на российских конференциях

1)Т.А. Денисова, А.Л. Бузлуков, Д.С. Федоров, Н.И. Медведева, А.В. Сердцев, И.Ю. Котова, Д.В. Корона ЯМР и ионная подвижность в молибдатах и вольфраматах натрия со структурой NASICON // Всероссийская конференция «Химия твёрдого тела и функциональные материалы – 2022». Екатеринбург, Россия. 2022. Сборник трудов. с. 108

2)Д.С. Федоров, А.Л. Бузлуков, Я.В. Бакланова, Д.В. Суетин, А.П. Тютюнник, Д.В. Корона, Л.Г. Максимова, В.В. Оглобличев, Т.А. Денисова, Н.И. Медведева Диффузия ионов натрия в шеелитоподобных молибдатах $\text{Na}_2\text{Zr}(\text{MoO}_4)_3$ and $\text{Na}_4\text{Zr}(\text{MoO}_4)_4$ // Всероссийская конференция «Химия твёрдого тела и функциональные материалы – 2022». Екатеринбург, Россия. 2022. Сборник трудов. с. 370-371

Аспирант 2 года обучения Федоров Дмитрий Сергеевич
лаборатории диффузии

Экзамены

Экзамен по философии

Сдан – «Отлично»

Экзамен по иностранному языку

Сдан – «Отлично»

Экзамен по специальности 1.3.8

-

Участие в грантах

Проект РФФ 18-12-00395 — завершён

Степень участия – исполнитель

Проект ИФМ № м 3-22

Степень участия – руководитель

Выступления на конференциях

Сделано докладов — 4

устных – 2

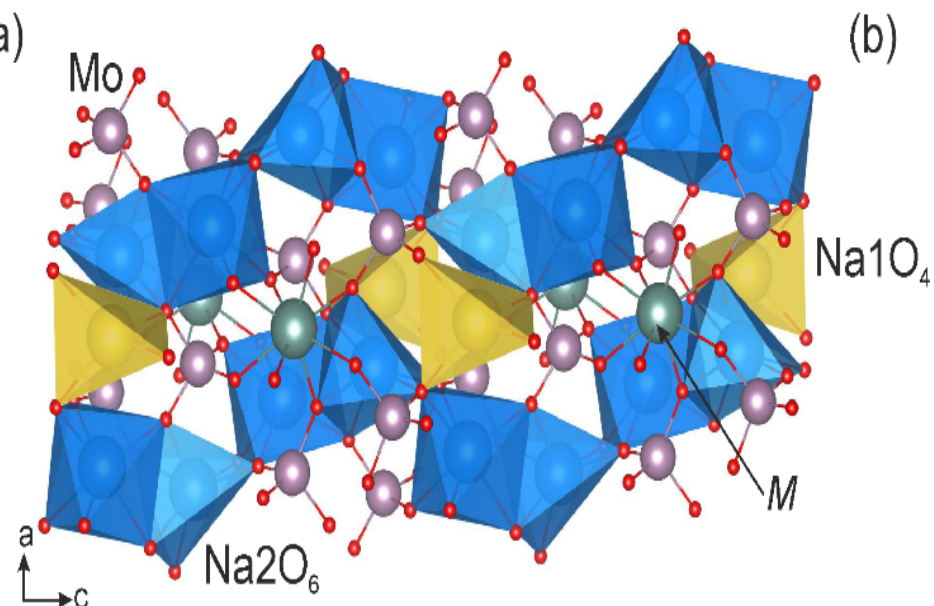
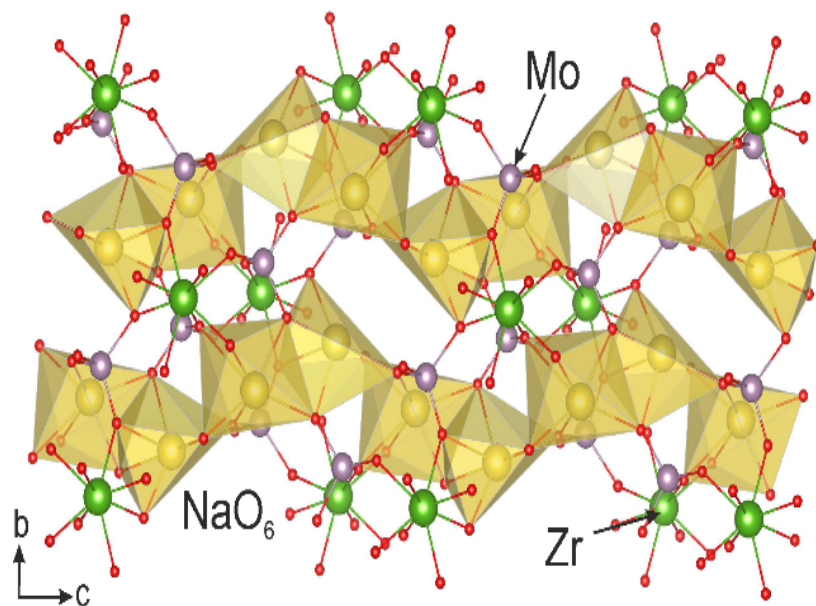
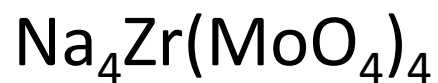
стендовых – 2

Аспирант 2 года обучения Федоров Дмитрий Сергеевич
лаборатории диффузии

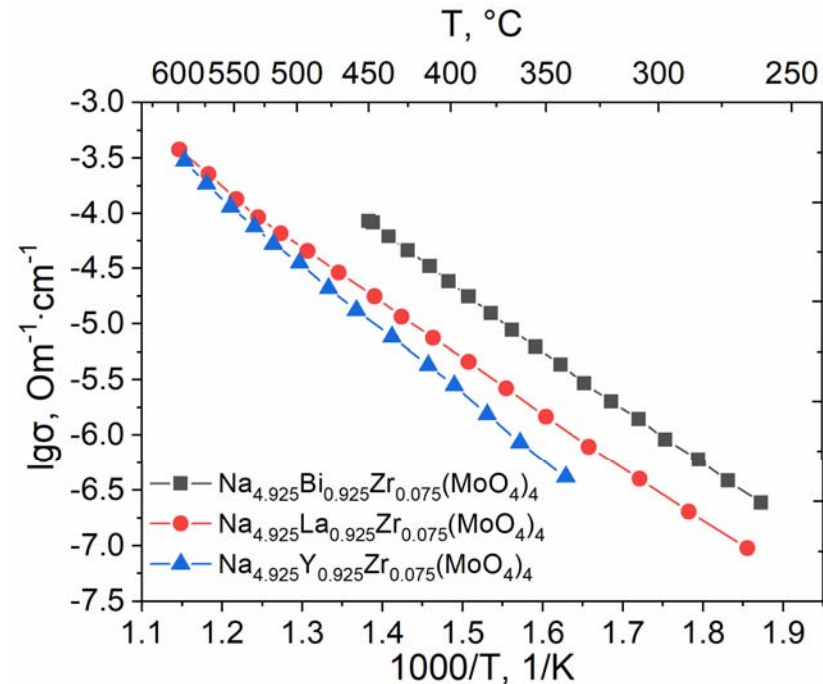
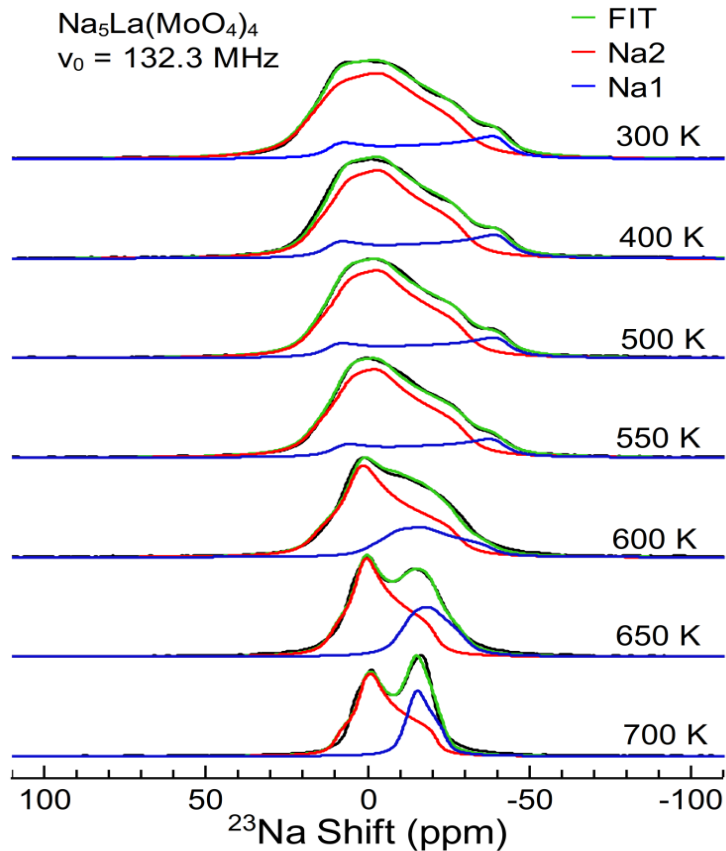
Таблица показателей

Показатель	Баллы	1 курс	2 курс	Сумма
публикации в изданиях ВАК (вышедшие из печати)	20	2	1	60
публикации в изданиях ВАК (принятые в печать)	5	0	0	0
свидетельство о программах для ЭВМ, зарегистрированных в установленном порядке	20	0	0	0
патент	20	0	0	0
соавторство в монографии	5	0	0	0
оформленное ноу-хау	5	0	0	0
публикации в других изданиях (не тезисы)	2	0	0	0
тезисы доклада на международной конференции	5	1	2	15
тезисы доклада на российской конференции	3	0	2	6
участие в конференции с устным докладом	2	1	1	4
участие в конференции со стендовым докладом	1	0	2	2
сданный на «отлично» кандидатский экзамен	20	1	1	40
сданный на «хорошо» кандидатский экзамен	15	0	0	0
сданный на «удовлетворительно» кандидатский экзамен	10	0	0	0
участие в грантах в качестве: исполнителя	5	1	0	5
участие в грантах в качестве: руководителя	10	0	1	10
Общая сумма		72	70	142

Актуальность исследований



Mechanism of sodium diffusion in $\text{Na}_{5-x}\text{M}_{1-x}\text{Zr}_x(\text{MoO}_4)_4$ ($M = \text{Y, La, Bi}; 0 \leq x \leq 0.1$)



Ab Initio calculations, energy barriers

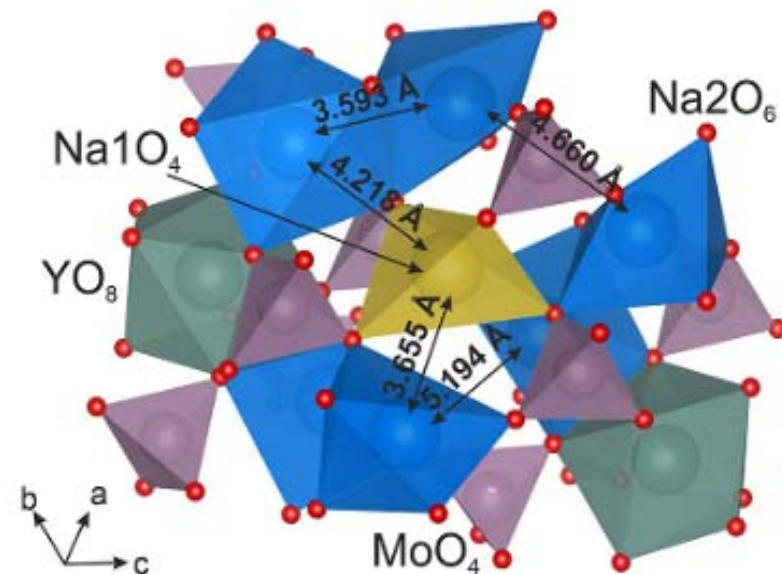
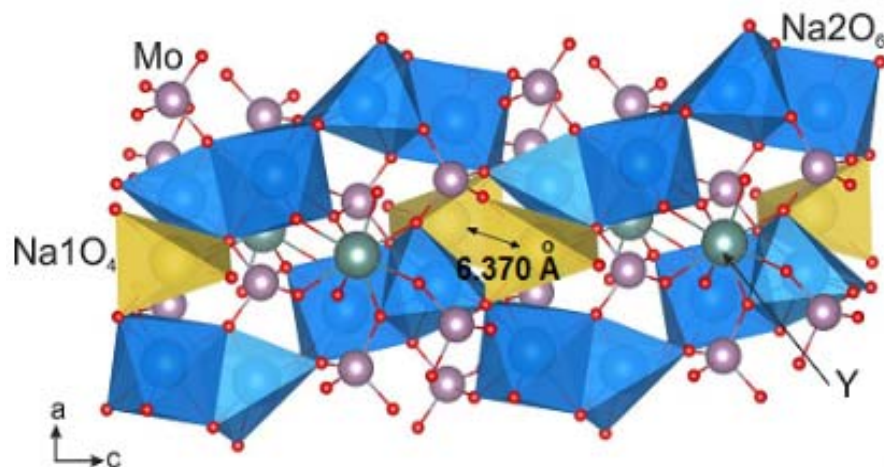
Na1-Na1	Na1-Na2	Na2-Na2
1.23 eV	1 eV	0.9 eV

Статья направлена в журнал

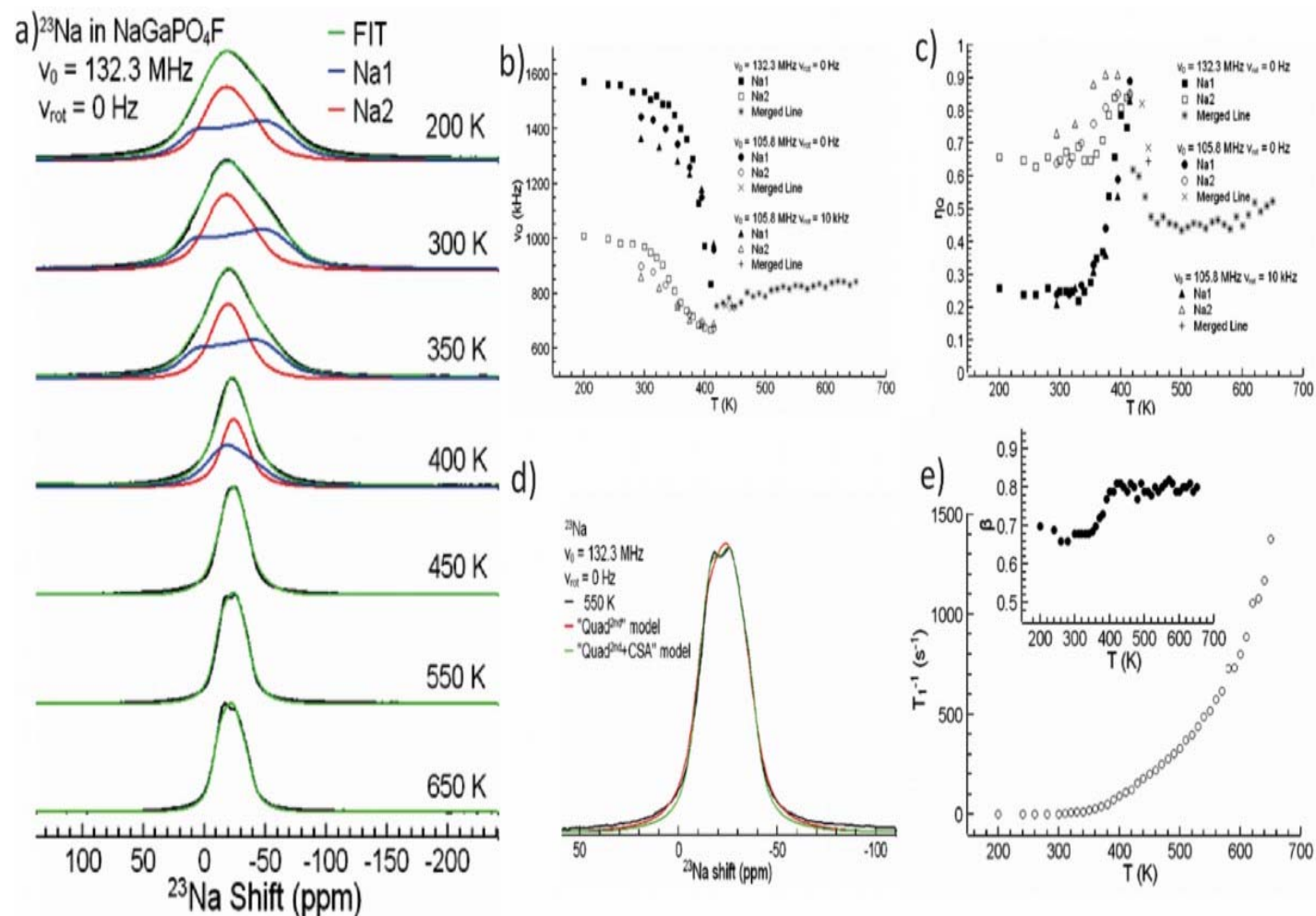
D.S. Fedorov, A.L. Buzlukov, Y.V. Baklanova, T.A. Denisova, D.V. Suetin, N.I. Medvedeva, L.G. Maksimova, D.V. Korona, T.S. Spiridonova, A.P. Tyutyunnik, I.Yu. Arapova, S.F. Solodovnikov

Mechanism of sodium diffusion in $\text{Na}_{5-x}\text{M}_{1-x}\text{Zr}_x(\text{MoO}_4)_4$ ($M = \text{Y, La, Bi}; 0 \leq x \leq 0.1$) revealed from ^{23}Na NMR, impedance spectroscopy and ab initio calculations // *Ceramics International*

1. Наибольшая ионная проводимость порядка $\sigma \sim 10^{-4}$ С/см при $T = 450$ °С обнаружена для $\text{Na}_{4.9}\text{Bi}_{0.9}\text{Zr}_{0.1}(\text{MoO}_4)_4$
2. Механизм диффузии натрия определяется прыжками между эквивалентными позициями $16f \leftrightarrow 16f$ и обменом между двумя позициями $16f \leftrightarrow 4a \leftrightarrow 16f$
3. Энергетический барьер для обоих путей достигает порядка 1 эВ, частота ионных прыжков — 10^3 - 10^4 с⁻¹ при $T \approx 650$ К for $\text{Na}_5\text{Y}(\text{MoO}_4)_4$, and at $T \approx 500$ К for $\text{Na}_{4.9}\text{Bi}_{0.9}\text{Zr}_{0.1}(\text{MoO}_4)_4$.



NaGaPO₄F as a solid electrolyte with high sodium diffusivity



Method	E _a , eV
DFT	0.22
BVSE	0.44
NMR	0.3-0.5

S.N. Marshenya, A.D. Dembitskiy, D.S. Fedorov, A.G. Scherbakov, I.A. Trussov, O. Emelianova, D.A. Aksyonov, A.L. Buzlukov, N.A. Zhuravlev, T.A. Denisova, N.I. Medvedeva, A.M. Abakumov, E.V. Antipov, S.S. Fedotov. NaGaPO₄F as a solid electrolyte with high sodium diffusivity //

