

**Аспирант 1 года обучения Кузнецова Александра Юрьевна
лаборатории электрических явлений**

Научный руководитель – д.ф.-м.н. Титов Александр Натанович

Специальность 1.3.8 – физика конденсированного состояния

Тема работы – Взаимосвязь кристаллической и электронной структуры интеркалатных соединений на основе дихалькогенидов титана

Задача текущего года

- Отработать методику синтеза системы $Zr_xTi_{1-x}S_2$;
- Выполнить электрохимическую инжекцию лития в твердые растворы и ZrS_2 .

Результаты, полученные в текущем году

Получены ампульным методом образцы $Zr_xTi_{1-x}S_2$ ($x=0.1; 0.2; 0.3$). Исследована микроструктура, получившихся образцов (порошок, монокристаллы). Проведены исследования электрохимической инжекции лития в твердых растворов и ZrS_2 .

**Аспирант 1 года обучения Кузнецова Александра Юрьевна
лаборатории электрических явлений**

Апробация работы

Статьи

1) Electronic Structure of $V_xTi_{1-x}Se_2$ Solid Solutions with the (V,Ti)Se₂ Structural Fragments / A.S.Shkvarin, A.I.Merentsov, M.S.Postnikov, Yu.M.Yarmoshenko, E.G.Shkvarina, E.A.Suslov, A.Yu.Kuznetsova, I.Piš, S.Nappini, F.Bondino, P.Moras, P.M.Sheverdyeva, E.Betz-Guttner, A.N.Titov// Journal of Physical Chemistry C. — 2022. — V. 126. — P. 7076—7085.

**Аспирант 1 года обучения Кузнецова Александра Юрьевна
лаборатории электрических явлений**

Апробация работы

Тезисы докладов на международных конференциях

1. Изучение электронной структуры соединений Ti_xTiSe_2 / Кузнецова А.Ю., Суслов Е.А, Титов А.Н. // XIV Плесская международная научная конференция «Современные проблемы теоретической и прикладной электрохимии», 3 – 7 июля 2023 г., Плес, Ивановская обл., Россия (заочное участие);
2. Электрические свойства твердого раствора $Zr_xTi_{1-x}S_2$ / Кузнецова А.Ю., Суслов Е.А, Титов А.Н. // XV симпозиум с международным участием «ТЕРМОДИНАМИКА И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ», 3 – 7 июля 2023 г., Новосибирск, Россия.

**Аспирант 1 года обучения Кузнецова Александра Юрьевна
лаборатории электрических явлений**

Тезисы докладов на российских конференциях

1. Изучение электронной структуры и критических точек в системе Ti_xTiSe_2 / А.Ю.Кузнецова, Е.А.Суслов, А.Н.Титов // XXII Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС-22) памяти М.И. Куркина, Екатеринбург, 24 ноября – 1 декабря, 2022: Тез. докл., г. Екатеринбург, ИФМ УрО РАН.- 131 с.
2. Влияние интеркаляции кобальта на эффективную массу электрона при электрохимическом титровании $Na-Co_nTiSe_2$ / А.О.Онищенко, А.Ю.Кузнецова, Е.А.Суслов, М.С.Постников, А.Н.Титов // XXII Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (СПФКС-22) памяти М.И. Куркина, Екатеринбург, 24 ноября – 1 декабря, 2022: Тез. докл., г. Екатеринбург, ИФМ УрО РАН.- 139 с.
3. Влияние потенциала ионизации переходного металла в слоистых дихалькогенидах переходных металлов на диффузионную подвижность интеркаланта / А.Н.Титов, Е.А.Суслов, А.Ю.Кузнецова, М.С.Постников, А.А.Титов // Всероссийская конференция «Химия твердого тела и функциональные материалы – 2022» и XIV Симпозиум «Термодинамика и материаловедение», Екатеринбург, 10-13 октября, 2022: Матер.конф.- Екатеринбург:ИХТТ УрО РАН.Изд-во «ДжиЛайм» ООО .- 334 с.
4. Изучение и сравнение электронных структур интеркалатных систем Fe_xTiSe_2 и Ti_xTiSe_2 / А.Ю.Кузнецова, Е.А.Суслов, А.Н.Титов // ВНКСФ-27, Екатеринбург, 3 – 6 апреля, 2023: Тез. докл., г. Екатеринбург, ИЭФ УрО РАН, НИИ физики ЮФУ.- 43 с. (заочное участие).

**Аспирант 1 года обучения Кузнецова Александра Юрьевна
лаборатории электрических явлений**

Экзамены

Экзамен по философии

Сдан – «Хорошо»

Экзамен по иностранному языку

Июнь 2024

Экзамен по специальности 1.3.8

-

Участие в грантах

Проект РФФИ 22-13-00361 «Новое поколение мультиферроиков на основе дихалькогенидов со структурой делафоссита»

Проект РФФИ 20-03-00275 «Принципы конструирования материалов со спиновой поляризацией состояний на уровне Ферми за счет внутриатомных взаимодействий»

Руководитель – Титов А.Н., доктор физико-математических наук

Степень участия – исполнитель

Выступления на конференциях

Сделано докладов

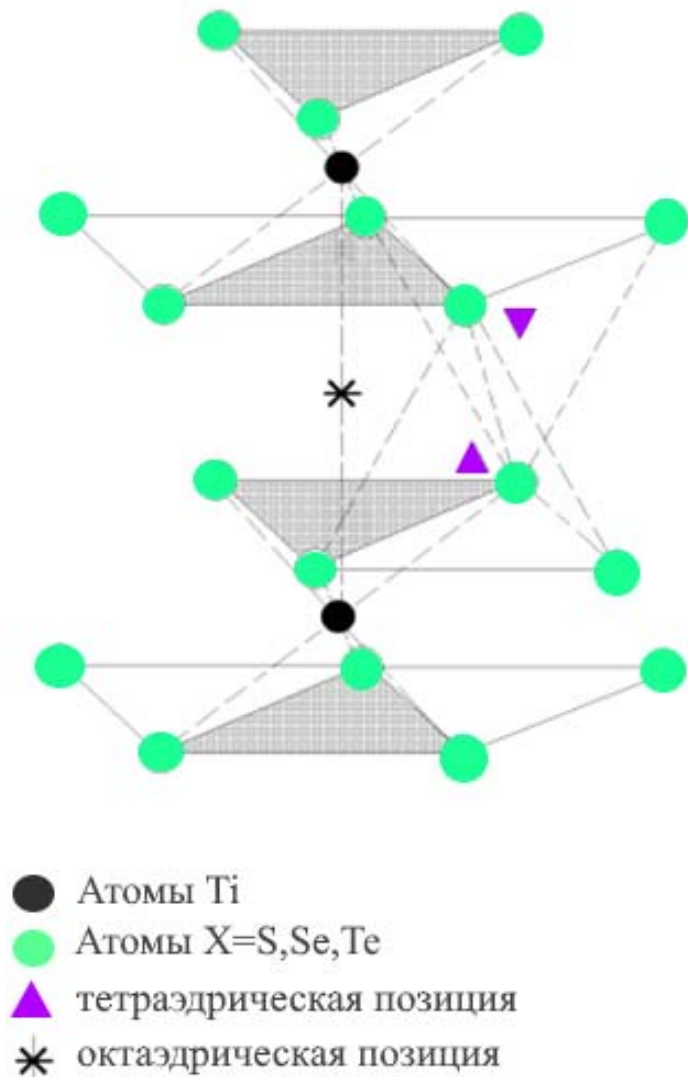
устных – 2

стендовых – 0

**Аспирант 1 года обучения Кузнецова Александра Юрьевна
лаборатории электрических явлений**

Таблица показателей

| Показатель | Баллы | Кол-во | Сумма |
|--|-------|--------|-------|
| публикации в изданиях ВАК (вышедшие из печати) | 20 | 1 | 20 |
| публикации в изданиях ВАК (принятые в печать) | 5 | 0 | 0 |
| свидетельство о программах для ЭВМ, зарегистрированных в установленном порядке | 20 | 0 | 0 |
| патент | 20 | 0 | 0 |
| соавторство в монографии | 5 | 0 | 0 |
| оформленное ноу-хау | 5 | 0 | 0 |
| публикации в других изданиях (не тезисы) | 2 | 0 | 0 |
| тезисы доклада на международной конференции | 5 | 2 | 10 |
| тезисы доклада на российской конференции | 3 | 4 | 12 |
| участие в конференции с устным докладом | 2 | 2 | 4 |
| участие в конференции со стендовым докладом | 1 | 0 | 0 |
| сданный на «отлично» кандидатский экзамен | 20 | 0 | 0 |
| сданный на «хорошо» кандидатский экзамен | 15 | 1 | 15 |
| сданный на «удовлетворительно» кандидатский экзамен | 10 | 0 | 0 |
| участие в грантах в качестве: исполнителя | 5 | 2 | 10 |
| участие в грантах в качестве: руководителя | 10 | 0 | 0 |
| Общая сумма | | | 71 |

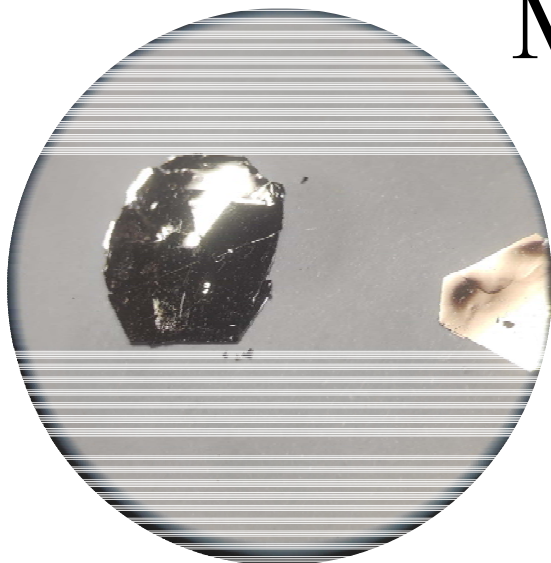


Структура слоистых дихалькогенидов титана

Почему мы этим занялись?

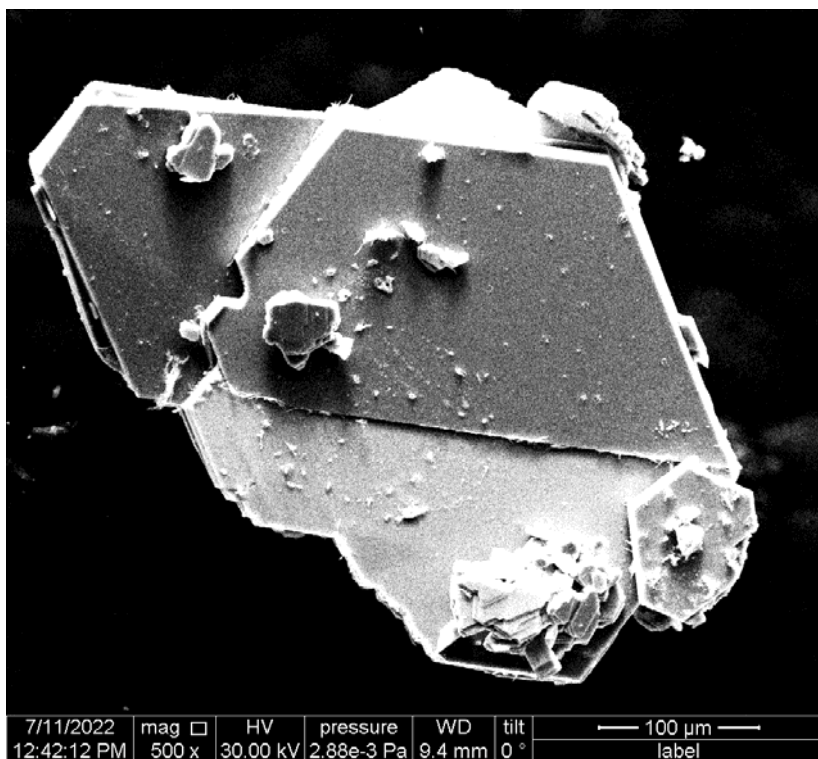
1. Путем варьирования соотношение между титаном и цирконием должно понизить энергию активации;
2. В изоструктурной материале $Zr_xTi_{1-x}Se_2$ было найдено формирование монослоев $ZrSe_2$ и $TiSe_2$.

Методика синтеза



Синтез матриц TiS_2 и ZrS_2

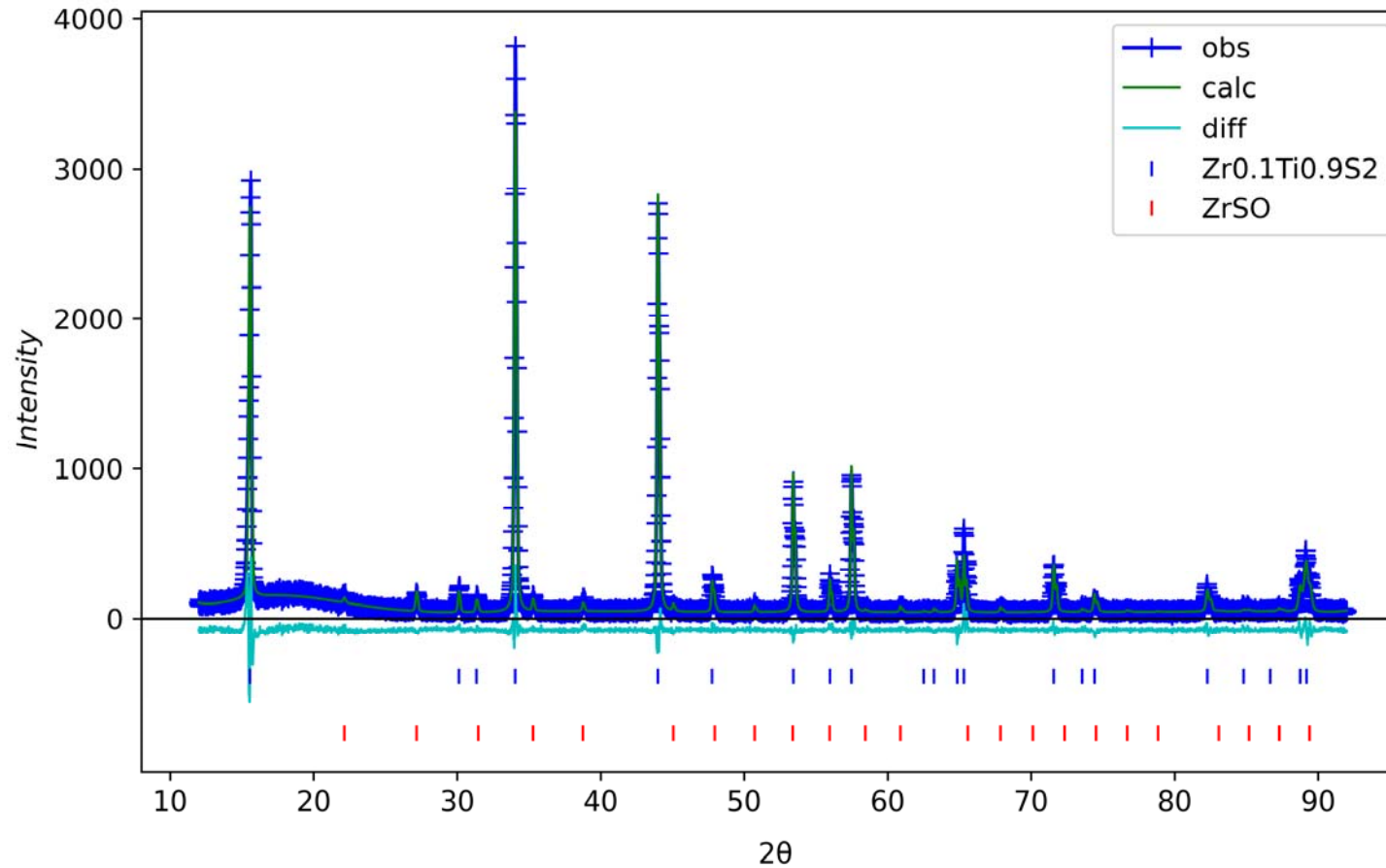
- Ампульный синтез, в кварцевых ампулах, 10^{-5} Торр;
- Температура синтеза 900°C
- Время синтеза: TiS_2 – неделя, ZrS_2 – 4 часа



Синтез матриц $\text{Zr}_x\text{Ti}_{1-x}\text{S}_2$ ($x=0,1; 0,2; 0,3$)

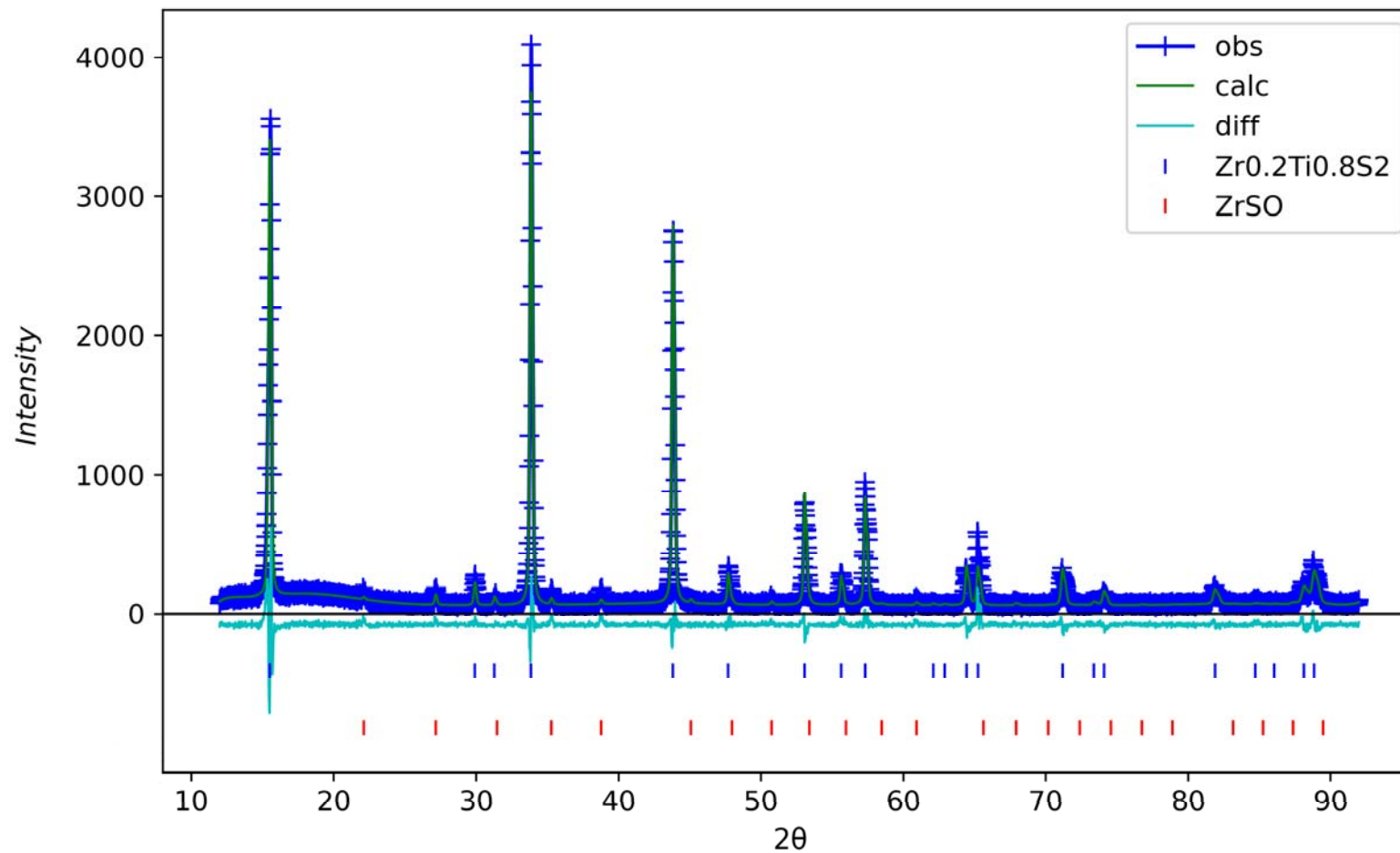
- Образцы $\text{Zr}_{0.1}\text{Ti}_{0.9}\text{S}_2$ и $\text{Zr}_{0.2}\text{Ti}_{0.8}\text{S}_2$:
 - ❖ 1 спекание: 900°C , 3 суток
 - ❖ 2 спекание: 800°C , 12 часов
 - ❖ 3 спекание: 1000°C , 12 часов
- Образцы $\text{Zr}_{0.3}\text{Ti}_{0.7}\text{S}_2$:
 - ❖ 1 спекание: 800°C , 2 суток
 - ❖ 2 спекание: 800°C , 12, 24, 36 часов
 - ❖ 3 спекание: 1000°C , 12 часов, 48 часов

Результаты РФА



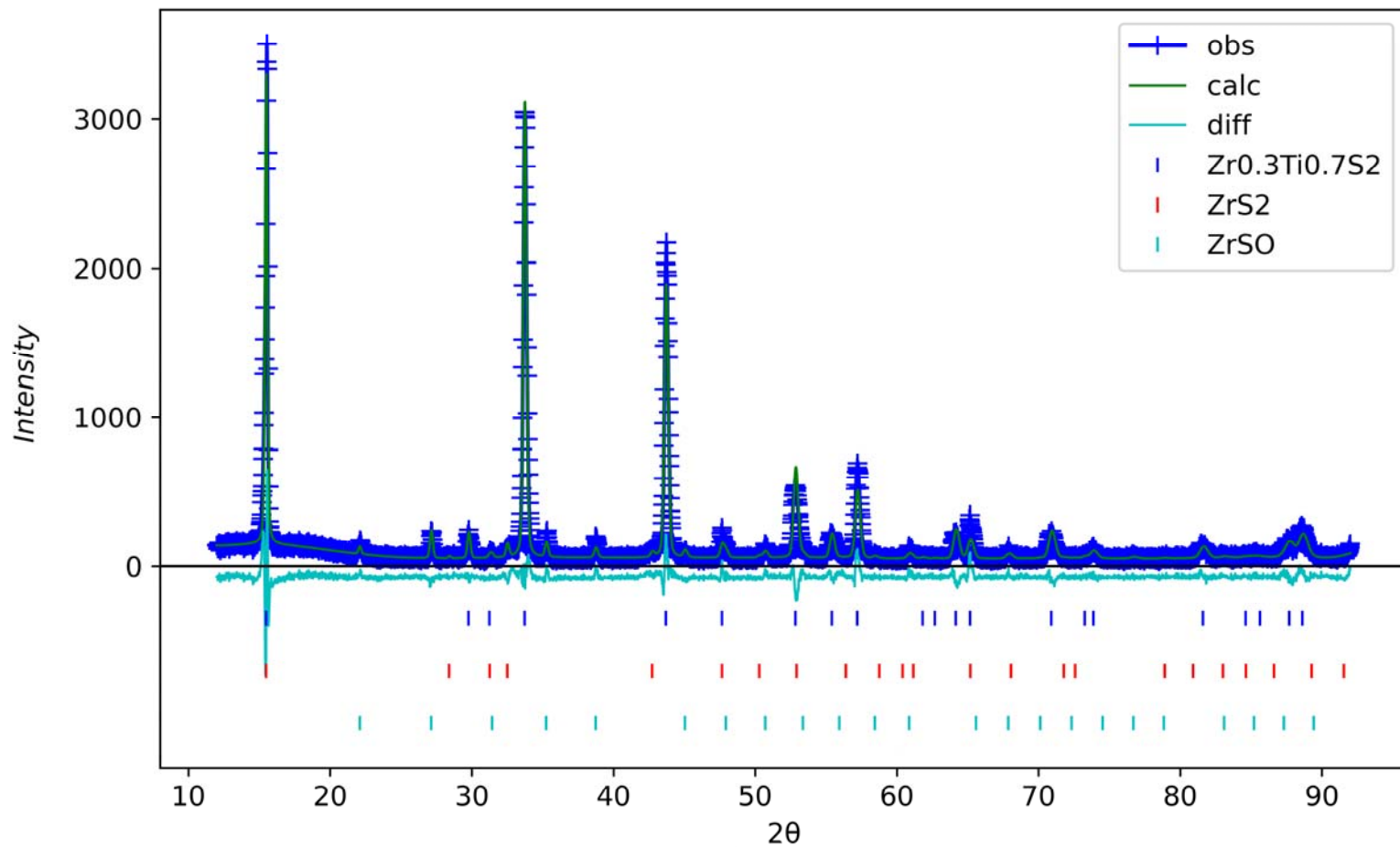
Дифрактограмма образца $Zr_{0.1}Ti_{0.9}S_2$

$Zr_{0.1}Ti_{0.9}S_2$ 97,6%
ZrSO 2,4%



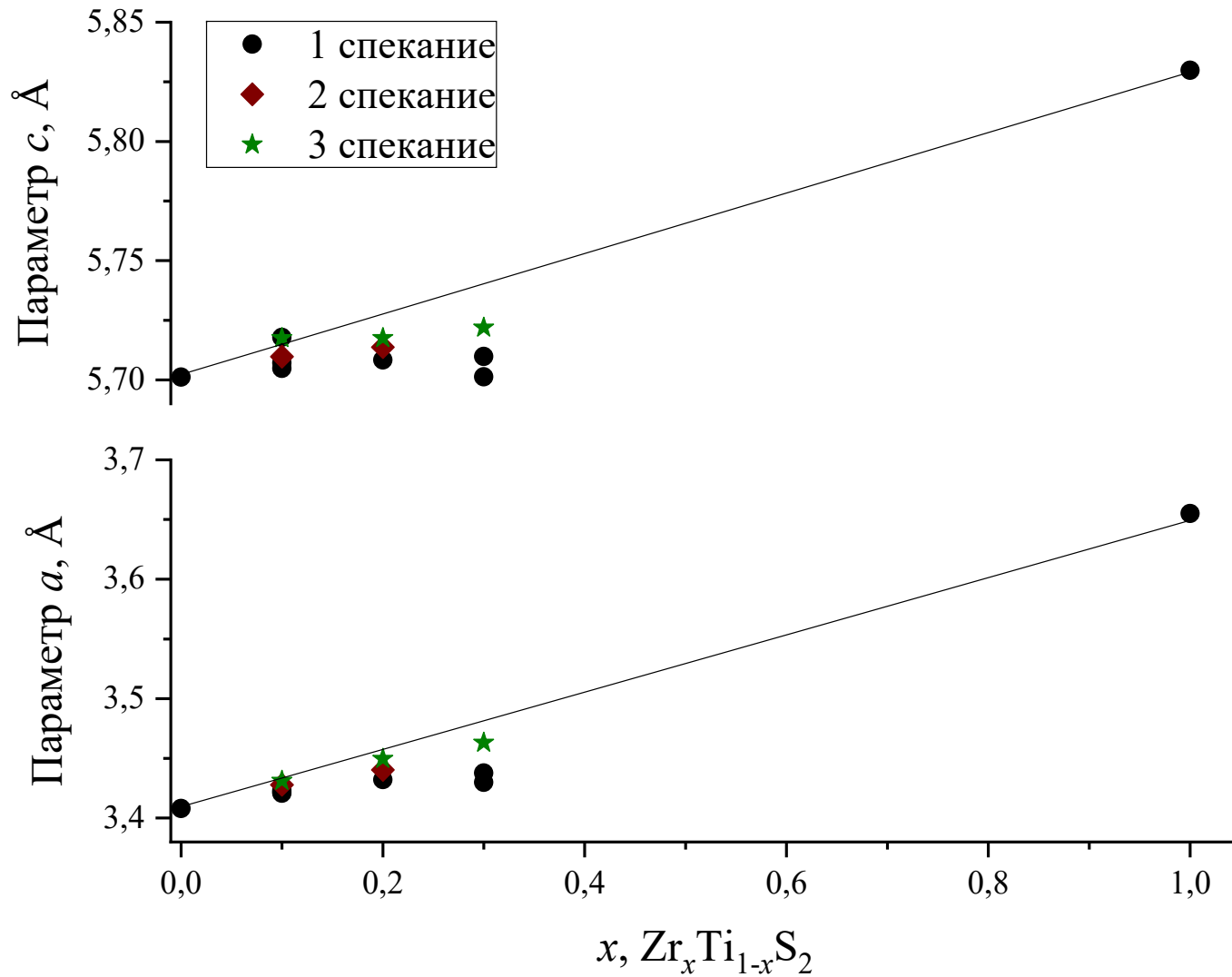
Дифрактограмма образца $Zr_{0.2}Ti_{0.8}S_2$

$Zr_{0.2}Ti_{0.8}S_2$ 98,7%
 $ZrSO$ 1,3%



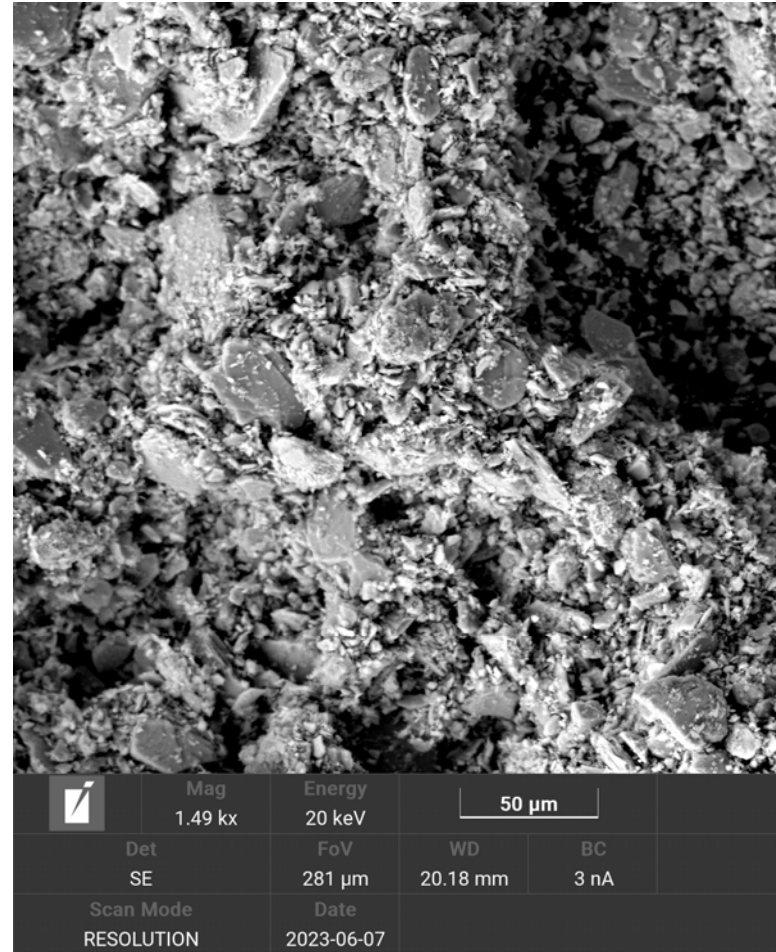
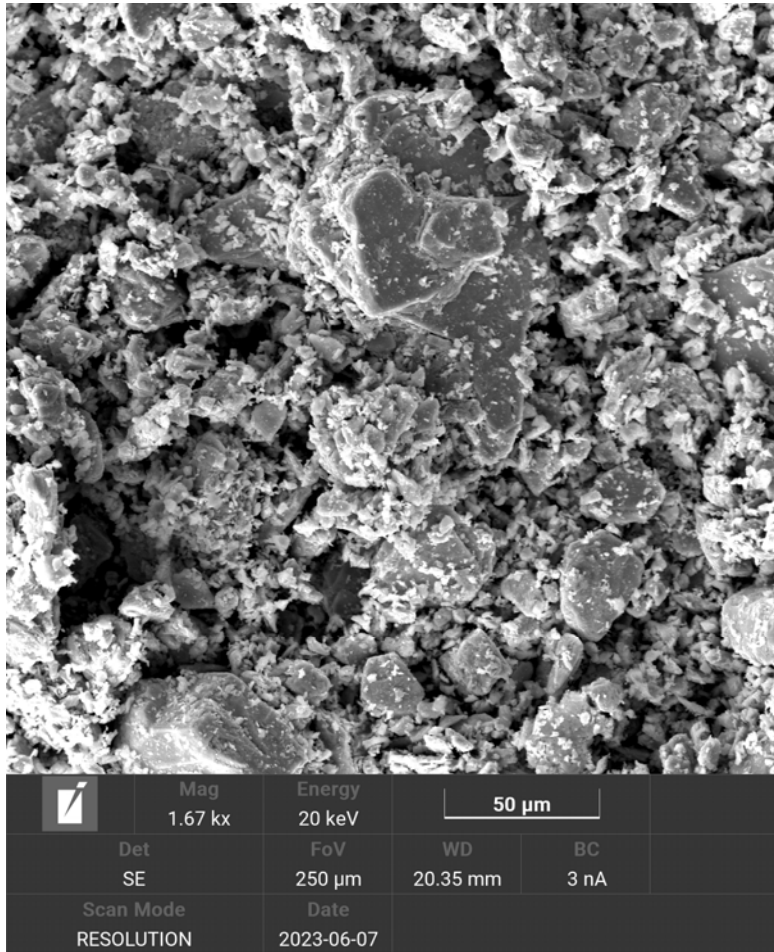
Дифрактограмма образца $Zr_{0.3}Ti_{0.7}S_2$

$Zr_{0.3}Ti_{0.7}S_2$ 94,6%
 ZrSO 4%
 ZrS₂ 1,4%

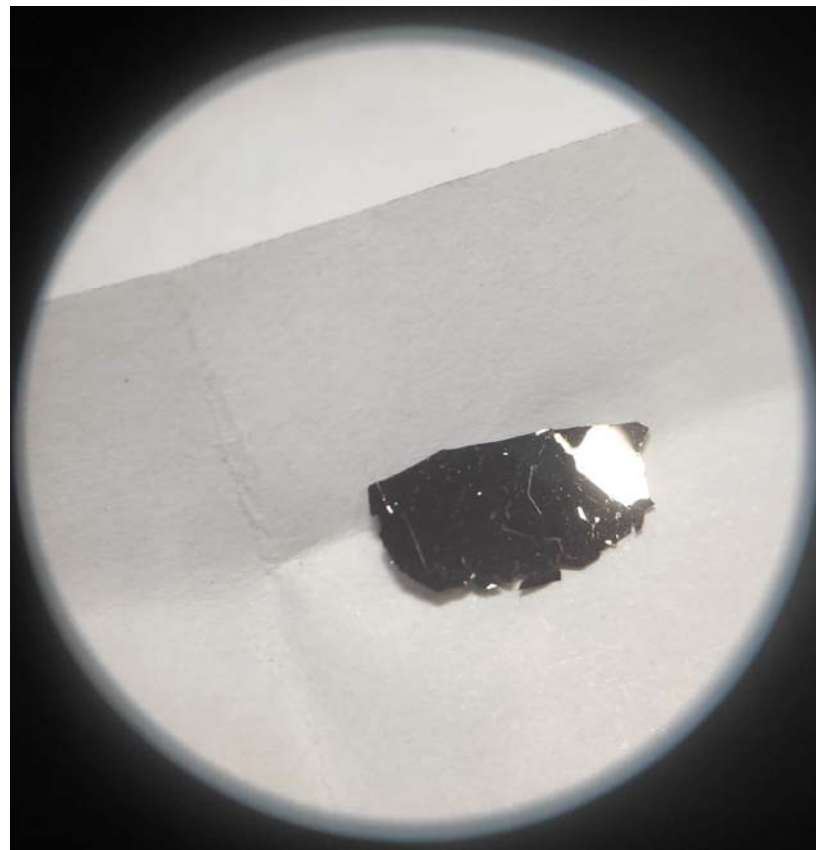


Зависимость параметра ячейки a , c от содержания циркония в $Zr_xTi_{1-x}S_2$

Микроструктура

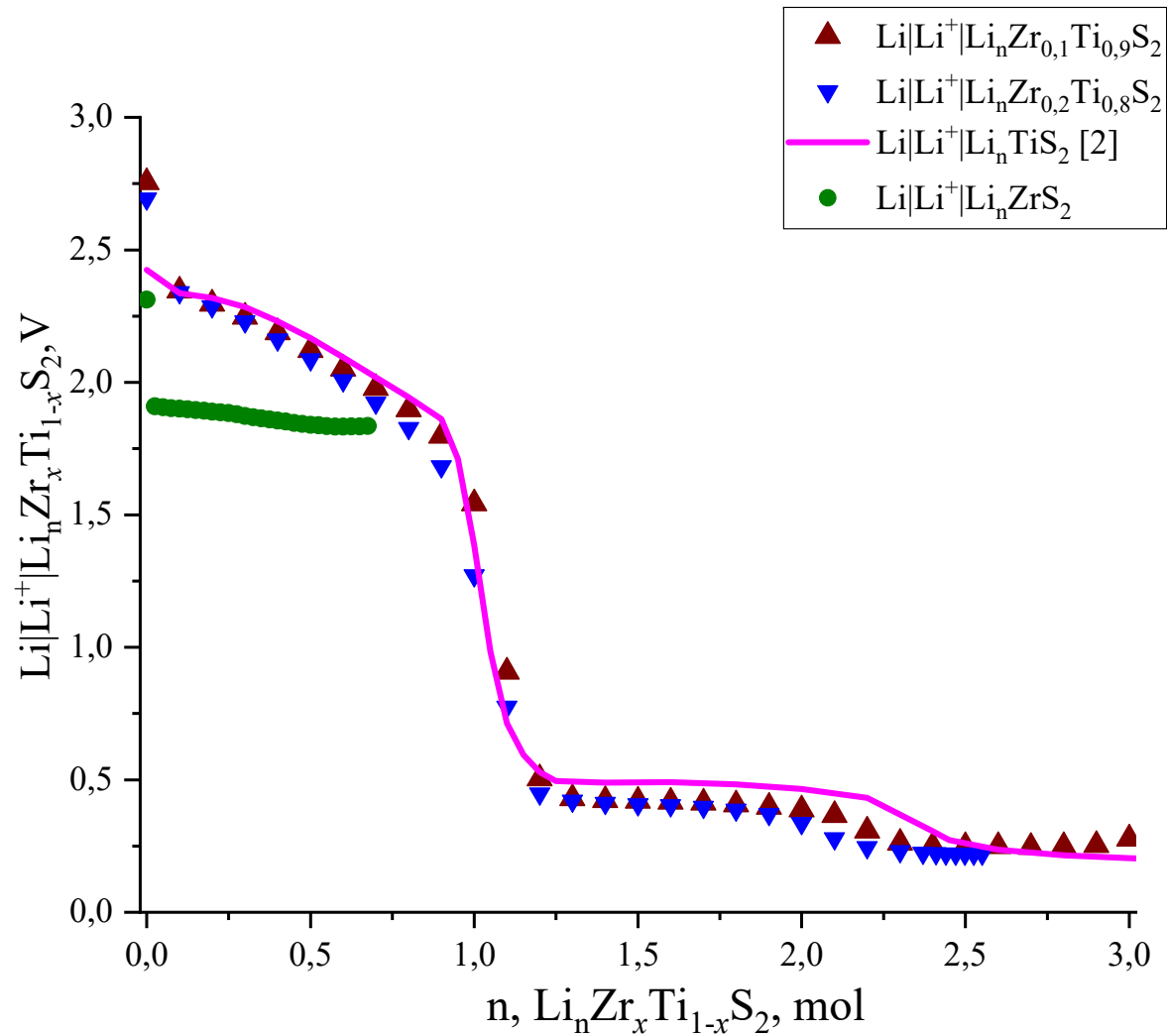


Микрофотография образца $Zr_{0.1}Ti_{0.9}S_2$ и $Zr_{0.2}Ti_{0.8}S_2$



Монокристаллы $\text{Zr}_{0.1}\text{Ti}_{0.9}\text{S}_2$

Электрохимическая инжекция

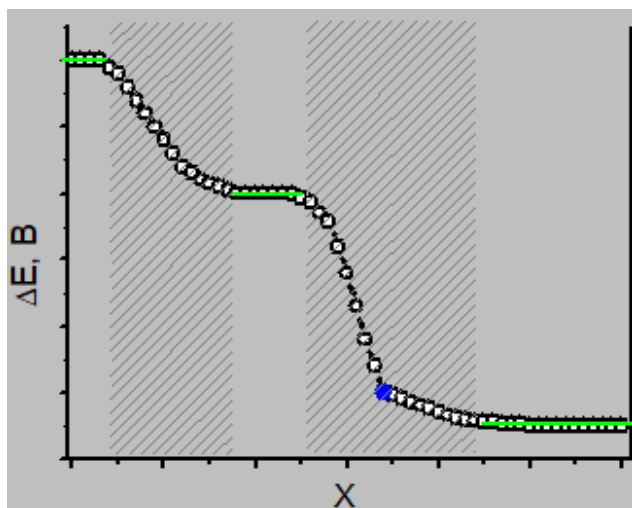


Кривая титрования $E \sim f(n)$

[2] Whittingham M. S. Electrical energy storage and intercalation chemistry // Science. – 1976. – Т. 192. – №. 4244. – С. 1126-1127.

Спасибо за внимание!

- Метод ЭДС



Зависимость $E-f(x)$ для классических электрохимических ячеек.

Область гомогенности -

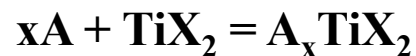
непрерывное уменьшение ΔE ;

Двухфазная область - плато, т.к.

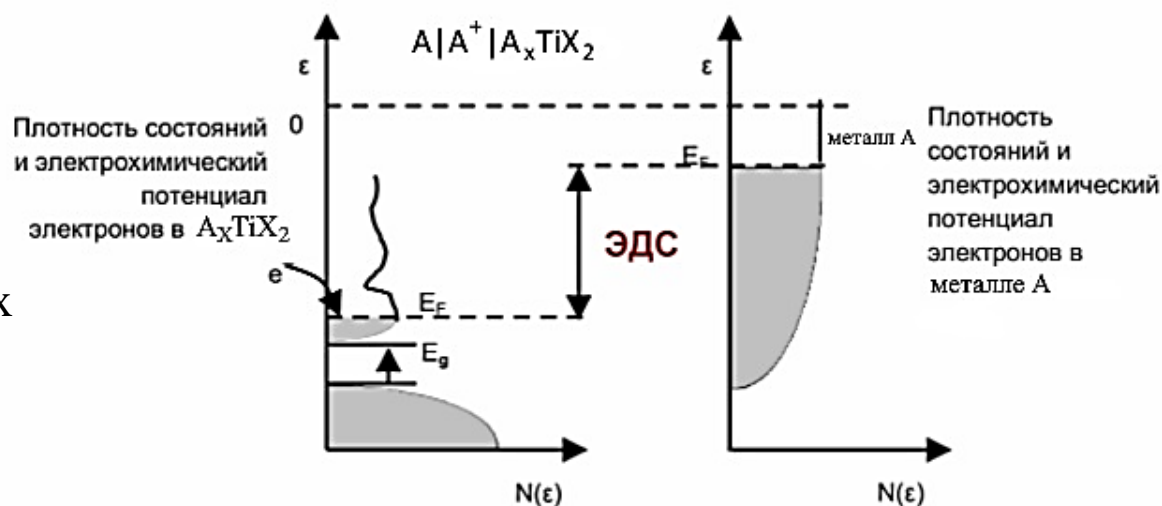
химический потенциал лития в равновесно сосуществующих фазах одинаков.

Фазовый переход второго рода -

изменение наклона кривой зависимости ΔE от состава катода



$$E(x) = - \frac{\mu_{\text{A}}^{\text{cathode}}(x) - \mu_{\text{A}}^{\text{anode}}}{zF}$$

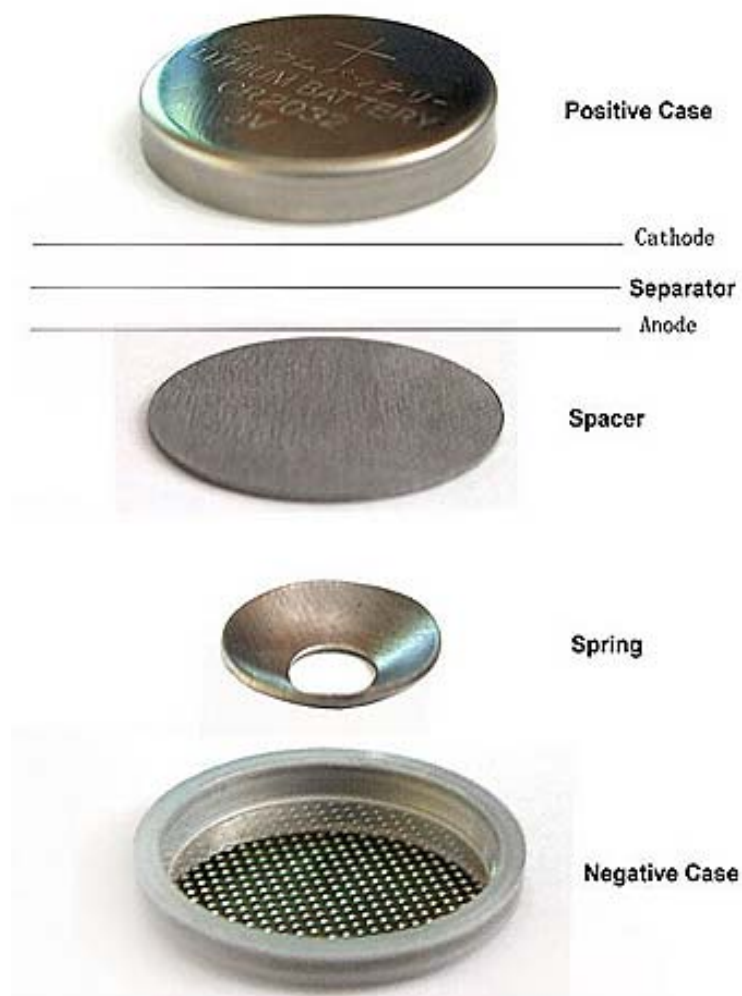


Схематическое изображение взаимосвязи между электронной структурой интеркалированного металлом дихалькогенида титана и ЭДС относительно A^0/A^+ .

[К.Вагнер «Термодинамика сплавов» М. Metallurgizdat 1957]

[В.Н. Чеботин, Физическая химия твердого тела. «Химия». М.: 1982.]

[J.Molemda // Solid State Ionics. 2005. V. 176 p. 1687-1694]



Электролит: 1 М раствор трифлата лития LiCF_3SO_3 в смеси 1:1 пропиленкарбоната и диэтилкарбоната. Все приготовления проводились в аргоновом боксе.

Схема ячейки типоразмера CR-2032