

Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect în anul 2025

Cifra proiectului 25.80012.5007.84SE
 Denumirea Proiectului Elaborarea și studiul proprietăților structurilor 2D DMT pentru supercondensatoare

Scopul proiectului este elaborarea tehnologiei de fabricare și cercetarea proprietăților materialelor nanostructurate hibride destinate producerii electrozilor pentru supercondensatoare – dispozitive deosebit de actuale în tehnologiile eficiente de generare și stocare a energiei. În rândul celor mai de perspectivă materiale potrivite pentru fabricarea electrozilor cu eficacitate înaltă se numără dihalcogenurile metalelor de tranziție (DMT). Atractivitatea DMT este determinată de aria mare a suprafeții active cu proprietăți reglabile, de concentrația înaltă ale siturilor de coordonare, de stările variabile de oxidare, precum și de comportamentul electrochimic atât Faradaic, cât și non-Faradaic.

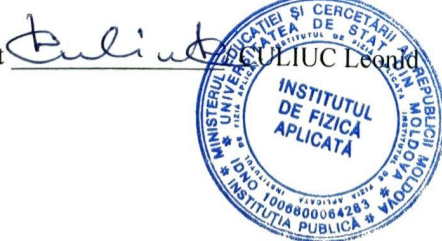
În anul curent, prin metoda transportului chimic din fază de vapori, au fost efectuate lucrări de sinteză și creștere ale cristalelor de DMT cu trei compoziții: TiS_2 , MoS_2 și WS_2 . Pe parcursul obținerii acestor trei materiale, luând în considerare diagramele de fază respective, au fost optimizate regimurile tehnologice – modalitățile de pregătire a șarjei inițiale, temperaturile de sinteză și creștere a monocristalelor, vitezele de încălzire și răcire a fiolelor, durata perioadei de creștere și concentrația agentului de transport I_2 . Au fost stabilite valorile optime ale temperaturilor de creștere a cristalelor: pentru TiS_2 – 1030°C și 1000°C ; MoS_2 – 1080°C și 1050°C ; WS_2 – 1060°C și 1040°C .

Urmare a lucrărilor tehnologice efectuate au fost obținute câte circa 20 g de monocristale de fiecare material – TiS_2 , MoS_2 și WS_2 , aria medie a cristalelor lamelare fiind de aproximativ $\sim 20 \text{ mm}^2$. Rezultatele caracterizărilor prin metodele XRD, SEM și EDS au confirmat faza metalică 1T pentru monocristalele de TiS_2 , ceea ce a fost atestat și de faptul că acest material nu posedă proprietăți luminescente. Cercetărilor similare au fost supuse și monocristalele de MoS_2 și WS_2 , spectrele de luminescență excitonică ale cărora au demonstrat prezența fazei 2H – celei mai stabile pentru aceste materiale semiconductoare. Cristalele obținute de MoS_2 și WS_2 vor fi utilizate pe parcursul următoarelor etape de lucru pentru obținerea fulgilor (*flakes*) ultrasubțiri, care corespund fazei polimorfe metalice 1T. În acest scop au fost pregătite pentru utilizare două tehnologii, care vor permite efectuarea conversiei fazei 2H în faza 1T:

- a) exfolierea folosind intercalarea atomilor de litiu prin n-butil lithium;
- b) sinteza nanofoliilor prin exfolierea electrochimică în soluții cu electrozi bipolari.

Rezultatele obținute pe parcursul semestrului doi a anului curent, au asigurat baza pentru realizarea cu succes a următorului stadiu a proiectului în anul 2026.

Conducătorul de proiect



Data: 04.12.2025

LȘ

Summary of the activities and of the results obtained in the project in 2025

Project Number 25.80012.5007.84SE

Title Development and study of properties of 2D TMD structures for supercapacitors

The aim of the project is to develop the manufacturing technology and investigate the properties of hybrid nanostructured materials intended for the production of electrodes for supercapacitors – devices that are particularly relevant for efficient energy storage and conversion technologies.

Among the most promising materials suitable for the fabrication of high-performance electrodes are transition metal dichalcogenides (TMDs). Their attractiveness is determined by their large active surface area with tunable properties, the high concentration of coordination sites, variable oxidation states, as well as the possibility of both Faradaic and non-Faradaic electrochemical behavior.

During this year, TMD crystals with three compositions – TiS_2 , MoS_2 and WS_2 – were synthesized and grown by the chemical vapor transport (CVT) method. Taking into account the corresponding phase diagrams, the technological regimes were optimized: methods for preparing the initial charge, the synthesis and growth temperatures of single crystals, the heating and cooling rates of the ampoules, the growth duration, and the concentration of the I_2 transport agent. The optimal crystal growth temperatures were established as follows: for TiS_2 – 1030°C and 1000°C ; for MoS_2 – 1080°C and 1050°C ; for WS_2 – 1060°C and 1040°C .

As a result of the technological work, about 20 g of single crystals of each material – TiS_2 , MoS_2 and WS_2 – were obtained, with an average crystal area of approximately 20 mm^2 . XRD, SEM and EDS characterizations confirmed the 1T metallic phase for TiS_2 single crystals, which is also supported by the absence of luminescent properties in this material. Similar investigations were carried out on MoS_2 and WS_2 single crystals, whose excitonic photoluminescence spectra demonstrated the presence of the 2H phase – the most stable phase for these semiconductor materials.

The obtained MoS_2 and WS_2 crystals will be used in the next stage of the project to obtain ultrathin flakes corresponding to the 1T metallic polymorphic phase. For this purpose, two technologies have been prepared that will enable the conversion of the 2H phase into the 1T phase:

- a) exfoliation via lithium intercalation using n-butyllithium;
- b) synthesis of nanofolds by electrochemical exfoliation in solutions with bipolar electrodes.

The results obtained during the second semester of the current year provide a solid basis for the successful implementation of the next stage of the project in 2026.

Project Director

Date: 04.12.2025

LS

