

Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în subprogram în anul 2024

MATERIALE FUNCȚIONALE 2D ȘI 3D OXICALCOGENICE, METALE ȘI POLIMERI CU PROPRIETĂȚI AVANSATE MAGNETICE, FOTOELECTRICE, OPTICE ȘI BIOACTIVE PENTRU APLICAȚII ÎN SPINTRONICĂ, OPTOELECTRONICĂ ȘI BIOMEDICINĂ (denumirea subprogramului)

Codul subprogramului **011201**

Raportul rezumă realizările cheie ale proiectului de cercetare colaborativ axat pe materiale avansate, incluzând magneți topologici, perovskite halogenate 2D, fenomene de crossover de spin și alte materiale inovatoare pentru aplicații în spintronică, dispozitive cuantice, optoelectronică și nanotehnologii. Rezultatele interdisciplinare integrează știința materialelor, fizica stării condensate și chimia cuantică, avansând atât înțelegerea fundamentală, cât și aplicațiile tehnologice.

Mostre policristaline și monocristaline de înaltă calitate din Fe_3Sn și Fe_3Sn_2 , având structuri kagome, au fost sintetizate utilizând metode de transport chimic. Studiile magnetice au relevat un comportament feromagnetic anisotrop, cu anizotropie planară în Fe_3Sn și tranziții de reorientare a spinului în Fe_3Sn_2 . Analizele proprietăților electrice și galvanomagnetice au confirmat conductivitatea metalică și efectele Hall anormale anisotrope, legate de cuplarea spin-orbită.

Filme de iodură de plumb metilamoniu (MAPbI_3) au fost sintetizate printr-o metodă bazată pe soluții. Caracterizarea a evidențiat filme netede, uniforme, cu proprietăți luminescente, spectrul emisiei fiind centrat la 780 nm. A fost evidențiat potențialul pentru sinteza de noi heterostructuri de tip van der Waals pentru optoelectronică.

Studiile teoretice, inclusiv computaționale, asupra complexelor de Fe(II) au demonstrat prezența tranzițiilor de spin cuplate cu protoni, evidențiind rolul deprotonării ligandului în ajustarea comportamentului spinului. Un model propus pentru tranzițiile valență-tautomere în clustere Fe-ligand-Co a elucidat interacțiunile dintre crossoverul de spin, transferul de electroni și fenomenele cooperative.

Investigațiile experimentale ale filmelor subțiri $\text{Cu}_2\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{GeS}_4$ au relevat ajustări compoziționale ale acestor soluții solide de tip kesterit. Rețelele de difracție pe bază de azopolimeri și nano-structuri multistrat din sticle calcogenice au prezentat profiluri *nanoscale* precise. Complexele de europiu au demonstrat o luminescență puternică, cu aplicații potențiale în optoelectronică și medicină. Compozitele elaborate inovatoare pe bază de ZnO și ceramicile de hidroxiapatită au manifestat proprietăți structurale, termice și mecanice îmbunătățite. A fost demonstrat că deformarea plastică severă amplifică rezistența mecanică a aliajelor Zr-Nb prin transformarea microstructurilor. Modelul cinetic elaborat a oferit perspective asupra descrierii sinergiei antioxidantilor în peroxidarea lipidelor.

Rezultatele obținute în cadrul acestui proiect au fost reflectate în 42 publicații științifice, dintre care 28 reviste cu factor de impact cotate în bazele de date WoS și Scopus, au fost prezentate în circa 40 de rapoarte la conferințe internaționale și au condus la publicarea a 3 brevete de invenții, ceea ce reprezintă o contribuție semnificativă la știința și tehnologia materialelor avansate.

Summary of Activity and Results Obtained in Subprogram in 2024

2D AND 3D OXYCHALCOGENEIC FUNCTIONAL MATERIALS, METALS AND POLYMERS WITH ADVANCED MAGNETIC, PHOTOELECTRIC, OPTICAL AND BIOACTIVE PROPERTIES FOR APPLICATIONS IN SPINTRONICS, OPTOELECTRONICS AND BIOMEDICINE

(Subprogram Name)

Subprogram Code **011201**

The report summarizes the key achievements of the collaborative research project focused on advanced materials, including topological magnets, 2D halogenated perovskites, spin crossover phenomena and other innovative materials for applications in spintronics, quantum devices, optoelectronics and nanotechnologies. The interdisciplinary results integrate materials science, condensed state physics and quantum chemistry, advancing both fundamental understanding and technological applications.

High-quality polycrystalline and single-crystalline samples of Fe_3Sn and Fe_3Sn_2 , with kagome structures, were synthesized using chemical transport methods. Magnetic studies revealed anisotropic ferromagnetic behavior, with planar anisotropy in Fe_3Sn and spin reorientation transitions in Fe_3Sn_2 . Analyses of electrical and galvanomagnetic properties confirmed metallic conductivity and anisotropic anomalous Hall effects, related to spin-orbit coupling.

Methylammonium lead iodide (MAPbI_3) films were synthesized by a solution-based method. Characterization revealed smooth, uniform films with luminescent properties, the emission spectrum being centered at 780 nm. The potential for the synthesis of new van der Waals-type heterostructures for optoelectronics was highlighted.

Theoretical, including computational, studies on Fe(II) complexes demonstrated the presence of proton-coupled spin transitions, highlighting the role of ligand deprotonation in tuning the spin behavior. A proposed model for valence-tautomeric transitions in Fe-ligand-Co clusters elucidated the interactions between spin crossover, electron transfer and cooperative phenomena.

Experimental investigations of $\text{Cu}_2\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{GeS}_4$ thin films revealed compositional tuning of these kesterite-type solid solutions. Diffraction gratings based on azopolymers and multilayer nanostructures of chalcogen glasses presented precise nanoscale profiles. Europium complexes demonstrated strong luminescence, with potential applications in optoelectronics and medicine. The developed innovative composites based on ZnO and hydroxyapatite ceramics exhibited improved structural, thermal and mechanical properties. It was demonstrated that severe plastic deformation enhances the mechanical strength of Zr-Nb alloys by transforming the microstructures. The developed kinetic model provided insights into the description of the synergy of antioxidants in lipid peroxidation.

The results obtained within this project were reflected in 42 scientific publications, of which 28 journals with impact factor listed in the WoS and Scopus databases, were presented in about 40 reports at international conferences and led to the publication of 3 patents, which represents a significant contribution to the science and technology of advanced materials.